



(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 201332980 A1

(43) 公開日：中華民國 102 (2013) 年 08 月 16 日

(21) 申請案號：102101217

(22) 申請日：中華民國 102 (2013) 年 01 月 11 日

(51) Int. Cl. : C07D 241/36 (2006.01)

C07F 15/00 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2012/01/12 歐洲專利局

12150969.9

(71) 申請人：巴地斯顏料化工廠 (德國) BASF SE (DE)

德國

(72) 發明人：穆勒 彼德 MURER, PETER (CH)；亞倫巴赫 史塔芬 ALLENBACH, STEPHAN (CH)；瓦根布拉斯特 傑哈德 WAGENBLAST, GERHARD (DE)；史攸德奈特 克里斯丁 SCHILDKNECHT, CHRISTIAN (DE)；連納茲 克理斯丁 LENNARTZ, CHRISTIAN (DE)

(74) 代理人：陳長文

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：15 項 圖式數：2 共 117 頁

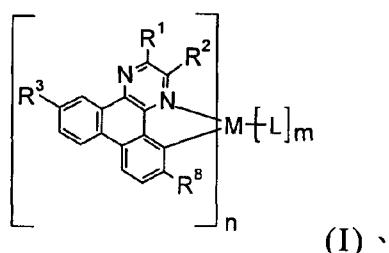
(54) 名稱

二苯并 [F , H] 噩噁啉之金屬錯合物

METAL COMPLEXES WITH DIBENZO [F,H] QUINOXALINES

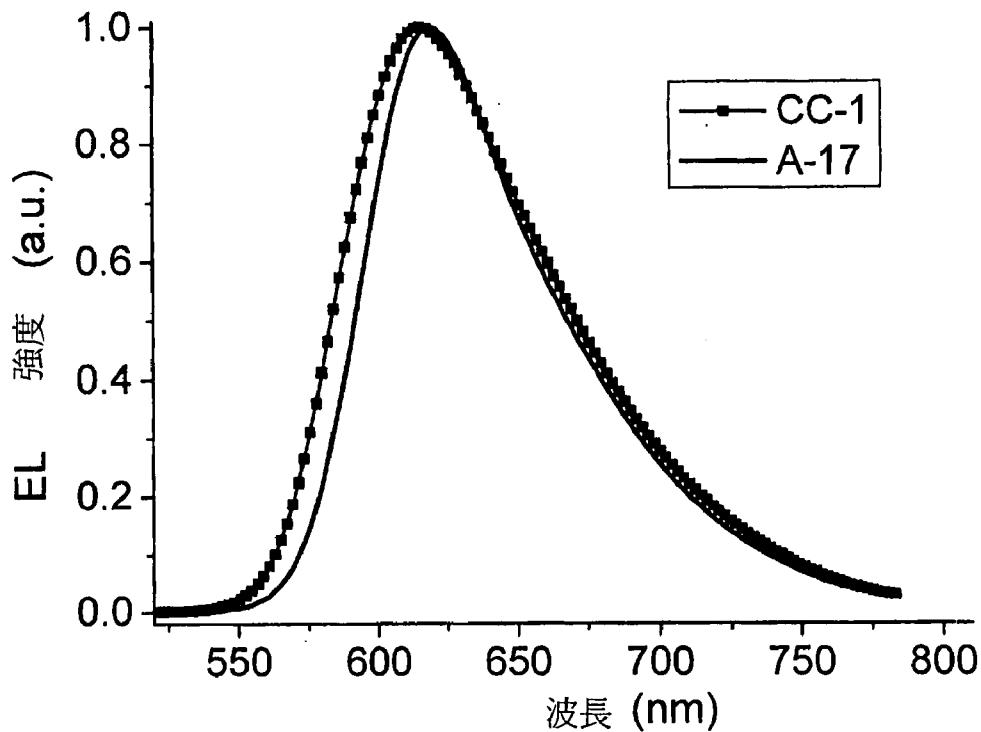
(57) 摘要

本發明係關於下式之電致發光金屬錯合物：



包括該等金屬錯合物之電子器件及其在電子器件、尤其有機發光二極體(OLED)中之用途。該等式(I)之金屬錯合物展示高發射效率、極佳可汽化性、熱穩定性、處理穩定性、高電荷載流子遷移率、低開啟電壓及發射顏色之高溫穩定性。

TW 201332980 A1





(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 201332980 A1

(43) 公開日：中華民國 102 (2013) 年 08 月 16 日

(21) 申請案號：102101217

(22) 申請日：中華民國 102 (2013) 年 01 月 11 日

(51) Int. Cl. : C07D 241/36 (2006.01)

C07F 15/00 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2012/01/12 歐洲專利局

12150969.9

(71) 申請人：巴地斯顏料化工廠 (德國) BASF SE (DE)

德國

(72) 發明人：穆勒 彼德 MURER, PETER (CH)；亞倫巴赫 史塔芬 ALLENBACH, STEPHAN (CH)；瓦根布拉斯特 傑哈德 WAGENBLAST, GERHARD (DE)；史攸德奈特 克里斯丁 SCHILDKNECHT, CHRISTIAN (DE)；連納茲 克理斯丁 LENNARTZ, CHRISTIAN (DE)

(74) 代理人：陳長文

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：15 項 圖式數：2 共 117 頁

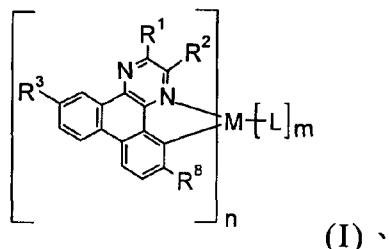
(54) 名稱

二苯并 [F , H] 噩噁啉之金屬錯合物

METAL COMPLEXES WITH DIBENZO [F,H] QUINOXALINES

(57) 摘要

本發明係關於下式之電致發光金屬錯合物：



包括該等金屬錯合物之電子器件及其在電子器件、尤其有機發光二極體(OLED)中之用途。該等式(I)之金屬錯合物展示高發射效率、極佳可汽化性、熱穩定性、處理穩定性、高電荷載流子遷移率、低開啟電壓及發射顏色之高溫穩定性。

201332980

發明摘要

※ 申請案號：102101217

※ 申請日：102.1.11

※ I P C 分類：C07D 241/36 (2006.01)

C07F 15/00 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

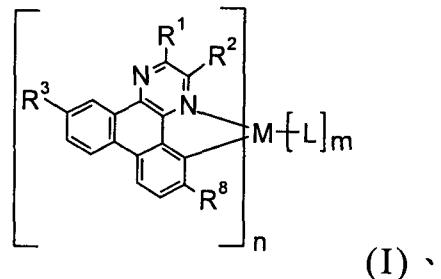
【發明名稱】

二苯并[F,H]喹噁啉之金屬錯合物

METAL COMPLEXES WITH DIBENZO [F,H] QUINOXALINES

【中文】

本發明係關於下式之電致發光金屬錯合物：

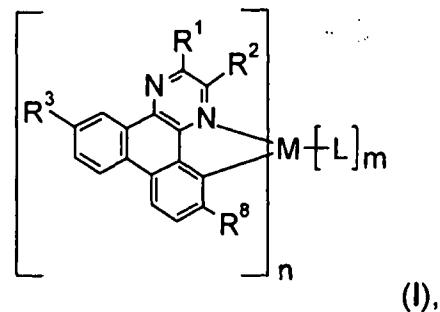


(I)、

包括該等金屬錯合物之電子器件及其在電子器件、尤其有機發光二極體(OLED)中之用途。該等式(I)之金屬錯合物展示高發射效率、極佳可汽化性、熱穩定性、處理穩定性、高電荷載流子遷移率、低開啓電壓及發射顏色之高溫穩定性。

【英文】

This invention relates to electroluminescent metal complexes of the formula



electronic devices comprising the metal complexes and their use in electronic devices, especially organic light emitting diodes (OLEDs). The metal complexes of formula (I) show high emission efficiency, excellent vaporizability, thermal stability, processing stability, high charge carrier mobilities, low turn-on voltage and high temperature stability of the emission color.

201332980

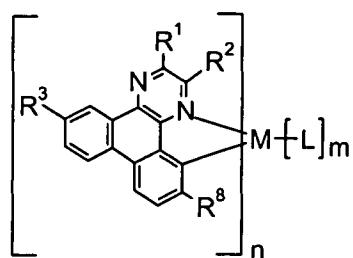
【代表圖】

【本案指定代表圖】：第（1）圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

(無元件符號說明)

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



(I)

發明專利說明書

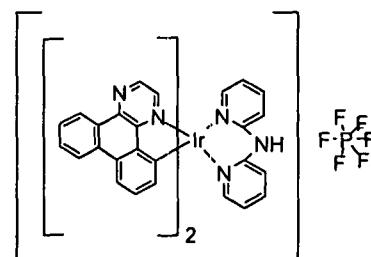
(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

【發明名稱】

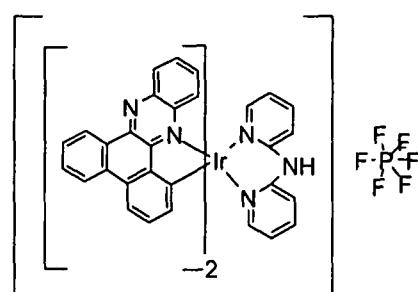
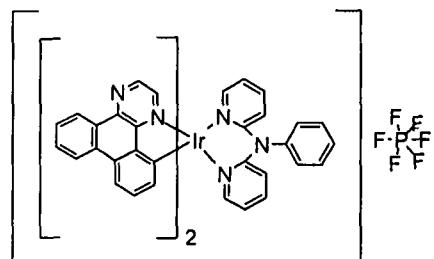
二苯并[F,H]喹噁啉之金屬錯合物

METAL COMPLEXES WITH DIBENZO [F,H] QUINOXALINES

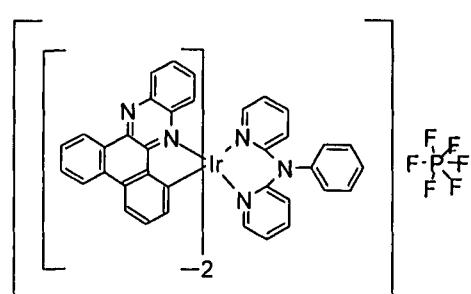
本發明係關於二苯并[f,h]喹噁啉之電致發光金屬錯合物、其製備製程、包括金屬錯合物之電子器件及其在電子器件、尤其有機發光二極體(OLED)中之用途。二苯并[f,h]喹噁啉之金屬錯合物展示高發射效率、極佳可汽化性、熱穩定性、處理穩定性、高電荷載流子遷移率、低開啓電壓及發射顏色之高溫穩定性。



JP2005298483 阐述鉻錯合物(例如，



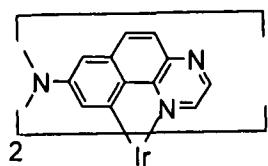
或



，其可用於發光元件且亦適用於有機電致發光元件材料、電化學發光(ECL)元件材料、發光感測器、光敏劑、顯示器等)、其製備方法及發光材料。

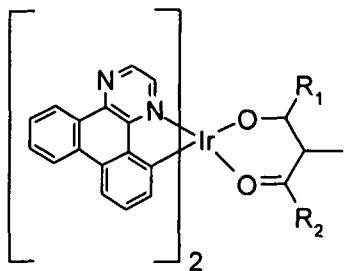
201332980

KR20060079625 係關於磷光發紅光銥錯合物(例如，

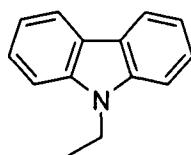


(acac)及包括其之有機電致發光器件。

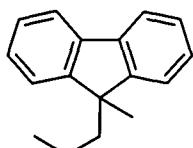
Z. Liu 等人，Adv. Funct. Mat. 2006, 16, 1441 阐述錯合物



(其中 R¹ 係第三丁基且 R² 係

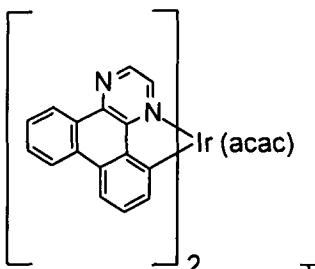


或 R¹ 係第

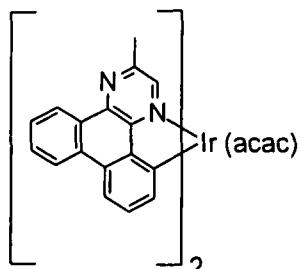


三丁基且 R² 係) 用於高效非摻雜有機發光二極體之用途。

J.-P. Duan 等人，Adv. Mat. 2003, 15, 224 阐述錯合物



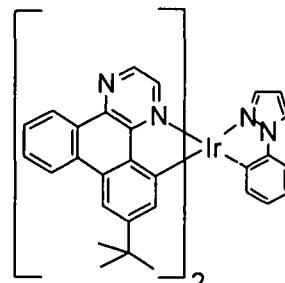
及



作為OLED中之橙色-紅色發射體

之用途。

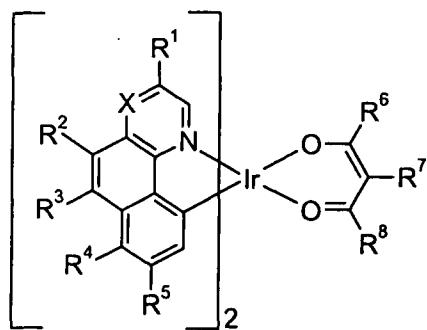
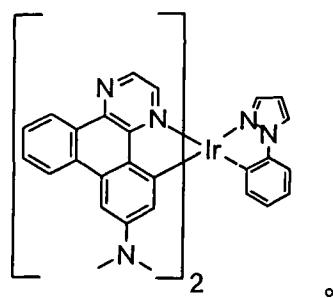
KR20060036670 係關於磷光銥錯合物及包括其之有機電致發光器



件。明確揭示下列磷光銥錯合物：

及

201332980

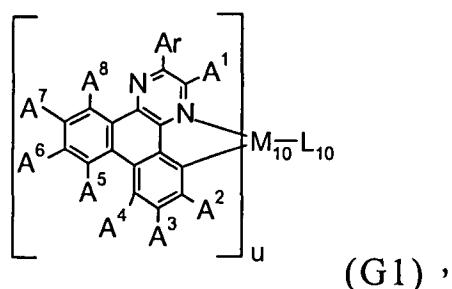


KR20060079625 係關於由式

(1)代表之

銻錯合物(其中R₁、R₂、R₃、R₆、R₇及R₈獨立地係H、鹵素原子、羧基、胺基、氟基、硝基、C₁-C₆烷基、C₆-C₁₈芳基、C₁-C₆烷氧基或含有諸如S或N等雜原子之C₄-C₆雜環，或R₂及R₃可稠合以形成芳族環；R₄及R₅獨立地係H、C₁-C₆烷基、C₁-C₆鹵代烷基、C₆-C₁₈芳基、C₄-C₁₂雜環、經烷基或芳基取代之胺基、C₁-C₆烷氧基、氟基或硝基；且X係CH或N (技術方案1))及含有式(1)之金屬錯合物之OLED器件。

EP1939208A1 係關於具有由以下通式代表之結構之有機金屬錯合物：



(G1) ,

其中Ar代表具有6至25個碳原子之芳基；

A¹代表氫、具有1至4個碳原子之烷基及具有1至4個碳原子之烷氧基中之任一者；

A²至A⁸各自代表氫、具有1至4個碳原子之烷基、具有1至4個碳

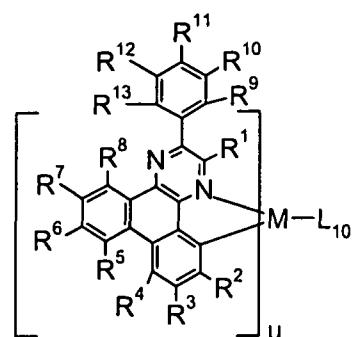
原子之烷氧基及鹵素基團中之任一者；

M_{10} 代表第9族元素及第10族元素之金屬；

L_{10} 代表單陰離子配體；且

在金屬係第9族元素時， u 為2，且在金屬係第10族元素時， u 為1。

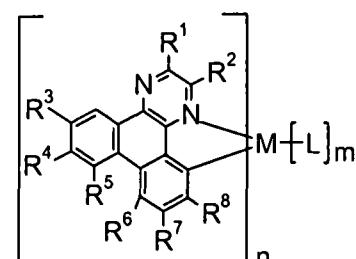
WO2009069535係關於在第一電極與第二電極之間包括發光層之發光元件，其中該發光層包括具有電洞傳輸性質之第一有機化合物、具有電子傳輸性質之第二有機化合物及有機金屬錯合物，其中該有機金屬錯合物之配體具有二苯并[f,h]喹噁啉骨架、尤其2-芳基二苯并[f,h]喹噁啉衍生物，且其中該有機金屬錯合物之中心金屬係第9族或第10族元素。



WO2009157498係關於式之金屬錯合物，其中 R^1 至 R^{13} 代表氫、具有1至4個碳原子之烷基或具有1至4個碳原子之烷氧基中之任一者；

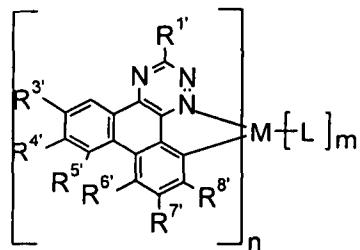
M 代表選自第9族或第10族元素之中心金屬；

L_{10} 代表單陰離子配體；且在中心金屬係第9族元素時， u 為2或在中心金屬係第10族元素時， u 為1；且其在發光器件中之用途。

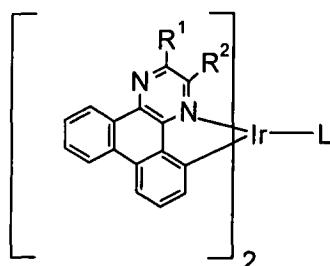


WO2009100991 係 關 於 式

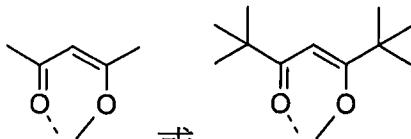
(I) 或



(II) 之金屬錯合物及其在 OLED 中之用途。式

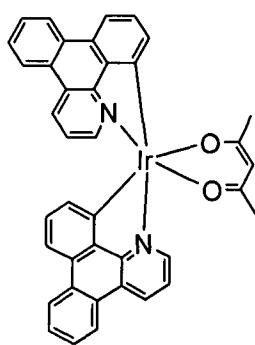


(其中 R' 係 C_2-C_{10} 烷基， R'' 係 H 或 CH_3 ，且 L 係

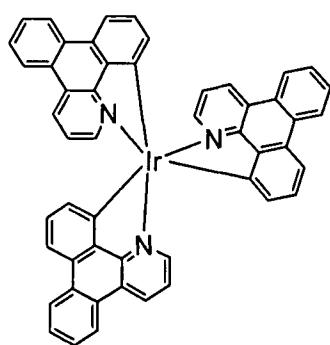


或) 之化合物尤佳。

WO2005049762 係關於至少包括基板、陽極、發光層及陰極之發光器件，其中發光層含有鉻錯合物 IrL_3 且其中至少兩個配體 L 係二苯并喹噁啉。特定而言，WO2005049762 係關於錯合物 $Ir(\text{二苯并}[f,h]\text{喹噁啉})_2(\text{戊烷}-2,4\text{-二酸鹽})$ 及 $Ir(\text{二苯并}[f,h]\text{喹噁啉})_3$ ，其分別發射具有 $\lambda_{max} = 545\text{ nm}$ 及 $\lambda_{max} = 595\text{ nm}$ 之波長之光：



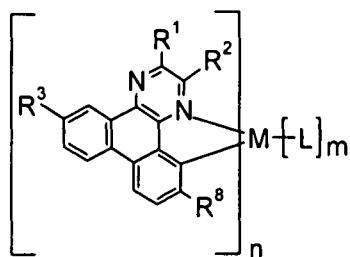
及



然而，持續需要具有改良性能之電致發光化合物、尤其橙色或紅色發射體，例如具有高發射效率、極佳可汽化性、熱穩定性、處理穩定性、高電荷載流子遷移率、低開啓電壓及發射顏色之高溫穩定性之化合物。

令人吃驚的的是，與自先前技術已知之式 I 化合物 (其中 R^3 及 R^8 係

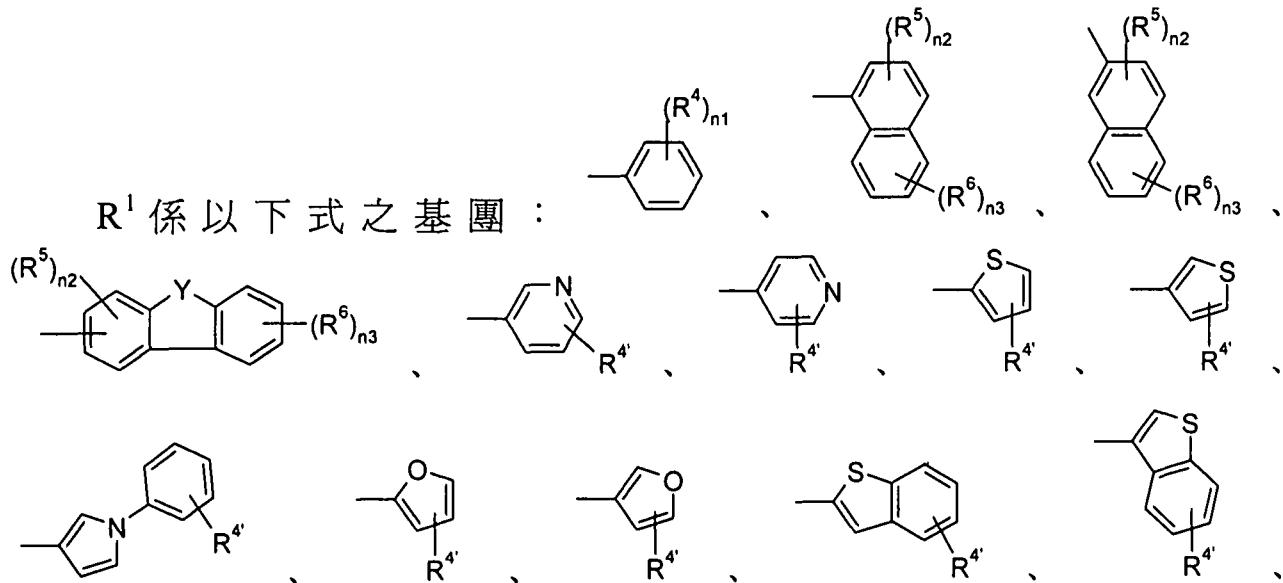
H)相比，發現式I化合物(其中R³及R⁸係C₁-C₈烷基)展示(例如)因綠色發射部分變窄而使得發射之半高全寬(FWHM)較窄。R¹係具支鏈C₁-C₈烷基之式I化合物展示發射之FWHM甚至更窄。因發射之FWHM較窄，在用作有機發光器件(OLED)中之發射體時，令人吃驚的是，藉由僅在適當位置引入烷基，式I化合物展示較飽和之橙色至紅色發射，且具有較深橙色至紅色色指數坐標(CIE x,y)。另外，烷基取代基尤其重要，此乃因其提供關於蒸發溫度、溶解度、能級、器件效率等之寬範圍可調諧性。另外，其作為官能基在適當施加時在化學上及在器件操作中係穩定的。

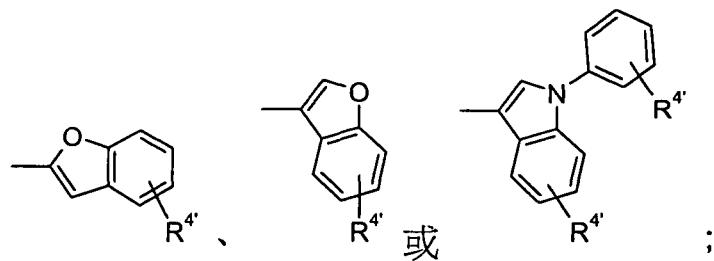


因此，本發明係關於式(I)之化合物(金屬錯合物)，其中

R¹係H；C₃-C₈環烷基，其視情況經C₁-C₈烷基或C₁-C₈全氟烷基取代；或C₁-C₈烷基，或

R¹係以下式之基團：





R²係H或C₁-C₈烷基，或

R¹及R²一起形成環-(CH₂)₃-或-(CH₂)₄-，其視情況經一個或兩個C₁-C₈烷基及/或一個或兩個C₁-C₈全氟烷基取代；

R³及R⁸彼此獨立地係C₁-C₈烷基、-Si(C₁-C₈烷基)₃或C₃-C₈環烷基；

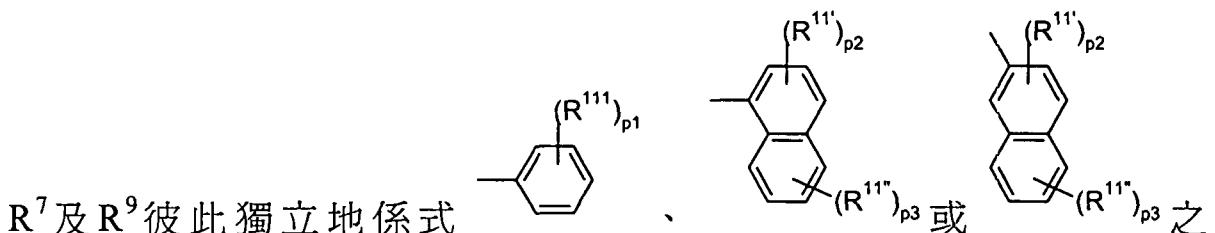
n1為0或1至5之整數，n2為0或1至3之整數，n3為0或1至4之整數，

Y係-O-、-S-、-NR³⁰-或-CR³¹R³²-；

R⁴係C₁-C₈烷基、環己基、F、C₁-C₈全氟烷基或NR⁷R⁹，

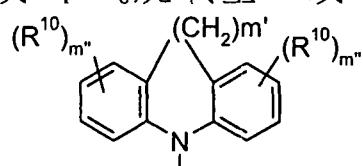
R^{4'}係H、C₁-C₈烷基、環己基或C₁-C₈全氟烷基，尤其係H、C₁-C₈烷基或CF₃，極尤其係H或C₁-C₈烷基，

R⁵及R⁶彼此獨立地係C₁-C₈烷基或環己基；



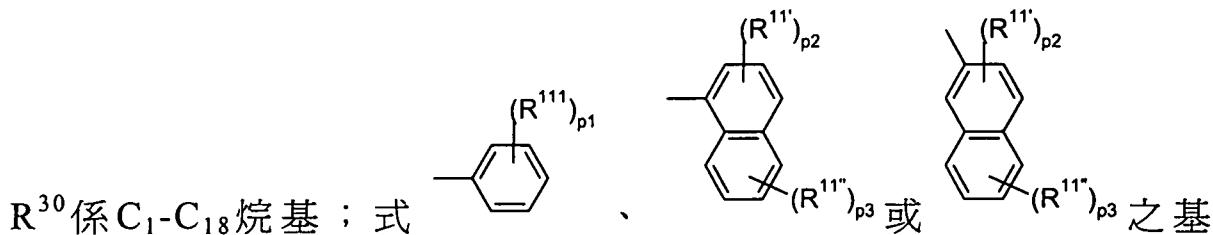
基團，

R¹¹¹、R^{11'}及R^{11''}彼此獨立地係C₁-C₈烷基或C₁-C₈烷氧基；或



R⁷及R⁹與其所鍵結之氮原子一起形成式團；m'為0、1或2；

R¹⁰在每次出現時可相同或不同且係C₁-C₈烷基或C₃-C₈環烷基，



團，

$p1$ 為 0 或 1 至 3 之整數， $p2$ 為 0 或 1 至 2 之整數， $p3$ 為 0 或 1 至 2 之整數，

R^{31} 及 R^{32} 彼此獨立地係氫、 C_1-C_{18} 烷基、 C_7-C_{25} 芳基烷基或苯基，其視情況可經 C_1-C_8 烷基及/或 C_1-C_8 烷氧基取代一至三次，

m'' 在每次出現時可相同或不同且為 0、1、2 或 3；

M 係 Pt、Pd、Rh、Ir 或 Re，

L 係單齒或二齒配體，

若 L 係單齒配體，

若 M 係 Pd 或 Pt，則 m 為 0 或 2，且 n 為 1 或 2，

若 M 係 Rh、Ir 或 Re，則 m 為 0、2 或 4，且 n 為 1、2 或 3，

若 L 係二齒配體，

若 M 係 Pd 或 Pt，則 m 為 0 或 1，且 n 為 1 或 2，

若 M 係 Rh、Ir 或 Re，則 m 為 0、1 或 2，且 n 為 1、2 或 3。

本發明化合物較佳係 λ_{max} 大於約 580 nm、尤其大於約 610 nm 及極尤其而言大於約 615 nm 之橙色或紅色發射體。一或多種二苯并 [f,h] 噻噁啉化合物之色坐標 (CIE x,y) 應介於約 (0.62, 0.38) 與約 (0.68, 0.32) 之間，尤其色坐標介於約 (0.63, 0.37) 與約 (0.68, 0.32) 之間，極尤其色坐標介於約 (0.64, 0.36) 與約 (0.68, 0.32) 之間。

二苯并 [f,h] 噻噁啉之金屬錯合物展示高發射效率、極佳可汽化性、熱穩定性、處理穩定性、高電荷載流子遷移率、低開啓電壓及發射顏色之高溫穩定性。

【圖式簡單說明】

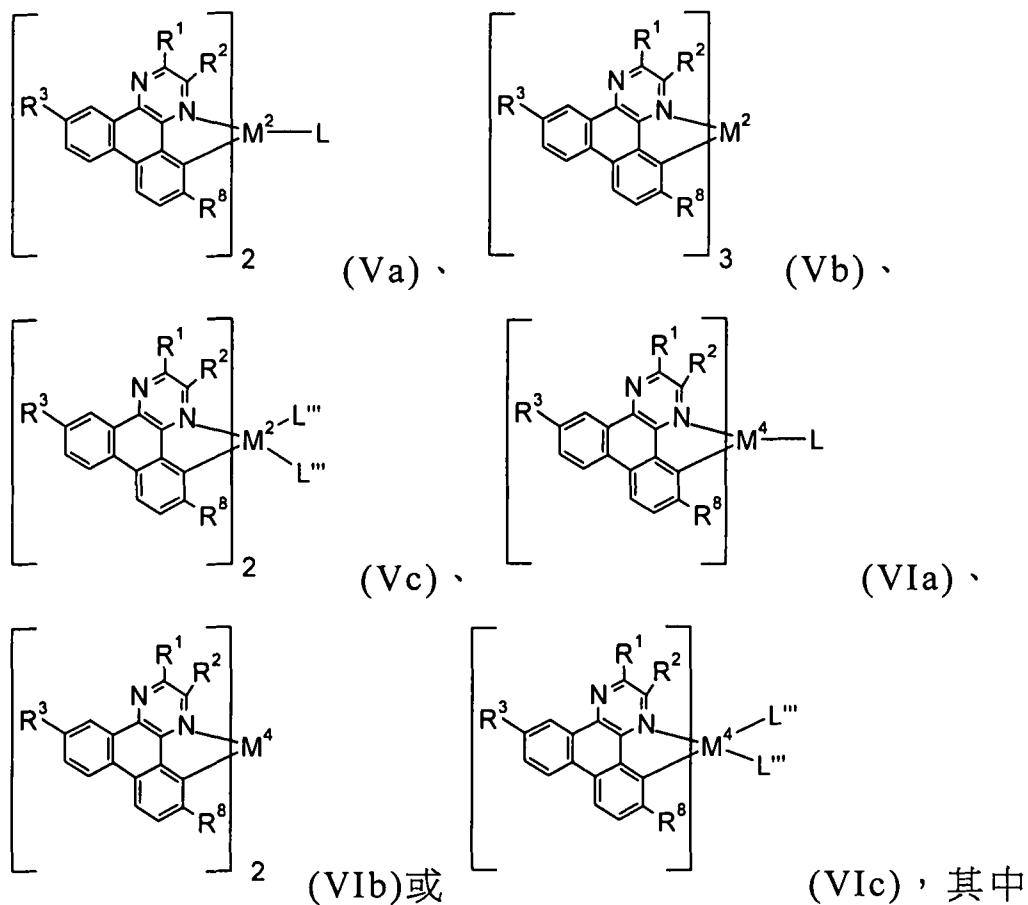
圖1提供化合物CC-1及A-17之EL強度隨波長而變化之圖線。

圖2提供化合物CC-3及A-79之EL強度隨波長而變化之圖線。

根據本發明，金屬錯合物至少包括二苯并[f,h]喹噁啉配體，亦即其可包括兩個或三個二苯并[f,h]喹噁啉配體。術語「配體」欲指附接至金屬離子之配位圈之分子、離子或原子。在用作名詞時，術語「錯合物」欲指具有至少一個金屬離子及至少一個配體之化合物。術語「基團」欲指化合物之一部分，例如有機化合物中之取代基或錯合物中之配體。術語「面式異構體」欲指錯合物 Ma_3b_3 之具有八面體幾何結構之一種如下異構體：其中三個「a」基團皆毗鄰，亦即位於八面體之一個三角形面之角上。術語「經式異構體」欲指錯合物 Ma_3b_3 之具有八面體幾何結構之一種如下異構體：其中三個「a」基團佔據三個位置，從而兩個基團彼此呈順式關係，亦即三個「a」基團位於三個共面位置中，從而形成跨越配位圈之可視為經線之弧。在用於指器件中之層時，片語「毗鄰」未必意指一層緊鄰另一層。

本發明之金屬錯合物之特徵在於至少一個配體係衍生自二苯并[f,h]喹噁啉化合物。適宜二苯并[f,h]喹噁啉或其中間體已為人所習知或可根據已知程序產生。適宜二苯并[f,h]喹噁啉及其中間體之合成(例如)闡述於J.-P. Duan等人，Adv. Mat. 2003, 15, 224、WO2006/097419及WO2008031743A1以及其中所引用之參考文獻中。

化合物較佳地具有下文之結構(Va)、(Vb)、(Vc)、(VIa)、(VIb)或(VIc)：



M²係Rh、Ir或Re，

M⁴係Pd或Pt，

L係二齒配體，且

L'''係單齒配體，且

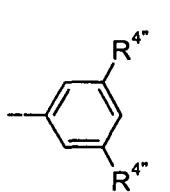
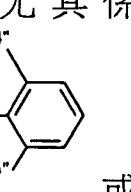
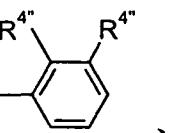
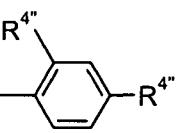
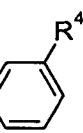
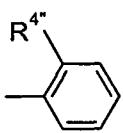
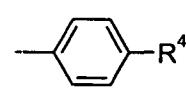
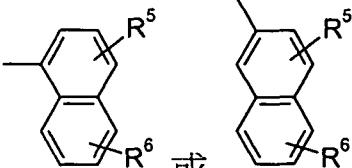
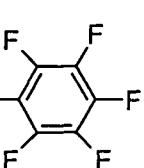
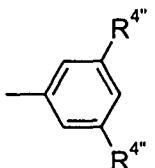
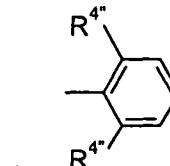
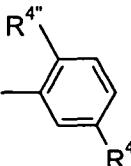
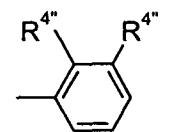
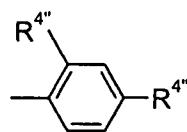
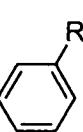
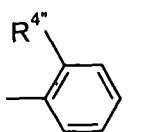
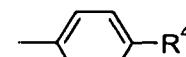
R¹、R²、R³及R⁸係如上文所定義。更佳者係R²係H之式(Va)、(Vb)、(Vc)、(VIa)、(VIb)或(VIc)之化合物。

金屬M係選自Ir、Rh及Re以及Pt及Pd，其中Pt及Ir較佳且Ir最佳。

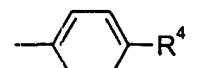
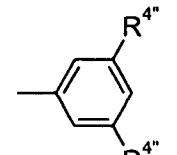
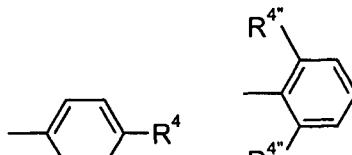
在一較佳實施例中，R¹係C₃-C₈環烷基，其視情況經一個或兩個C₁-C₈烷基及/或一個或兩個C₁-C₈全氟烷基取代；或C₁-C₈烷基，或R¹及R²一起形成環-(CH₂)₃-或-(CH₂)₄-，其視情況經一個或兩個C₁-C₈烷基及/或一個或兩個C₁-C₈全氟烷基取代。R²較佳係H。更佳R¹係C₃-C₈環烷基或C₁-C₈烷基，R²係H；或R¹及R²一起形成環-(CH₂)₄-。最佳R¹係C₃-C₈環烷基或C₁-C₅烷基(例如，甲基、乙基、異丁基、第三丁基或

新戊基)。R²較佳係H。

在另一較佳實施例中，R¹係以下式之基團：



至更尤其係



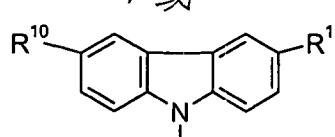
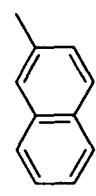
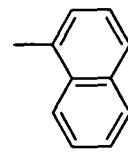
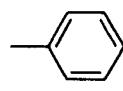
，極尤其係

R⁴係H、C₁-C₈烷基、環己基、F、C₁-C₈全氟烷基或NR⁷R⁹，尤其係C₁-C₈烷基、CF₃或NR⁷R⁹，甚至更尤其係CF₃、NR⁷R⁹，極尤其係NR⁷R⁹，

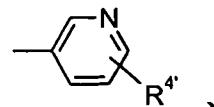
R⁵及R⁶彼此獨立地係H、C₁-C₈烷基，尤其係H或C₁-C₈烷基；

R^{4''}係C₁-C₈烷基、環己基、F、C₁-C₈全氟烷基、NR⁷R⁹，尤其係C₁-C₈烷基或CF₃、NR⁷R⁹，甚至更尤其係C₁-C₈烷基或CF₃，極尤其係C₁-C₈烷基，

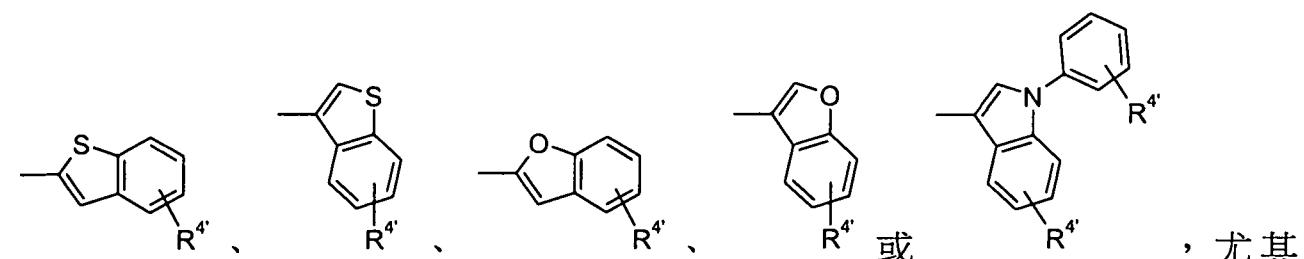
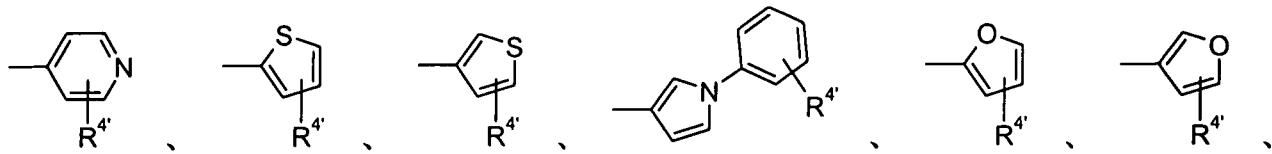
R⁷及R⁹彼此獨立地係



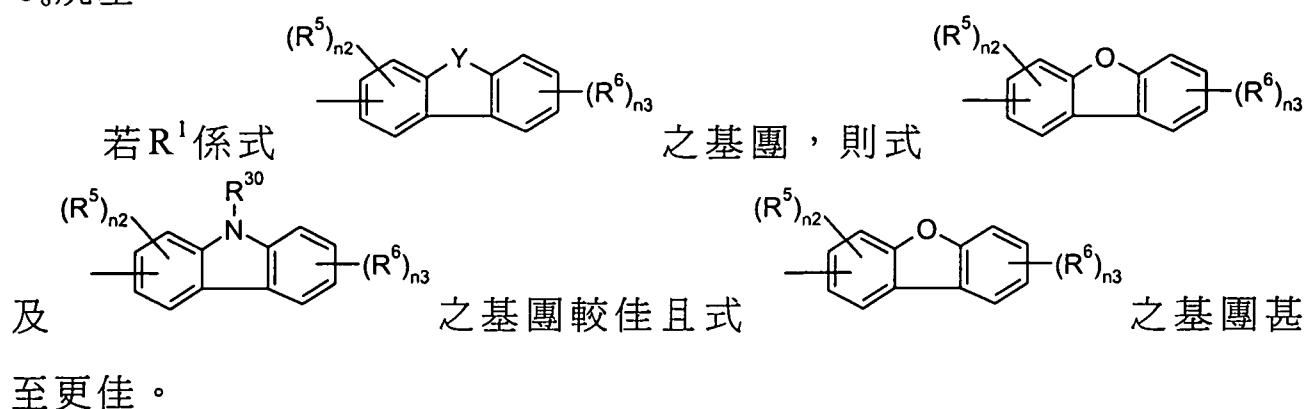
R⁷及R⁹與其所鍵結之氮原子一起形成式之基團；R¹⁰係H或C₁-C₈烷基，且R²係H。



在另一較佳實施例中，R¹係以下式之基團：

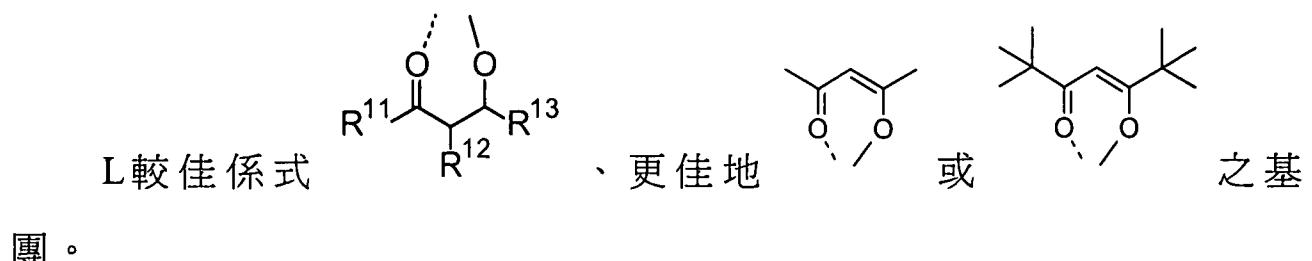


，尤其
係
係
，其中R^{4'}係H、C₁-C₈烷基、環己基或C₁-C₈全氟烷基，尤其係H、C₁-C₈烷基或CF₃，極尤其係H或C₁-C₈烷基。



對於R¹之上述較佳實施例而言，優先適用下列R²、R³、R⁸、L及M：

M較佳係Pt及Ir，更佳係Ir。



R^2 較佳係H。

R^3 及 R^8 較佳係C₁-C₈烷基、Si(C₁-C₄烷基)₃或C₃-C₆環烷基。

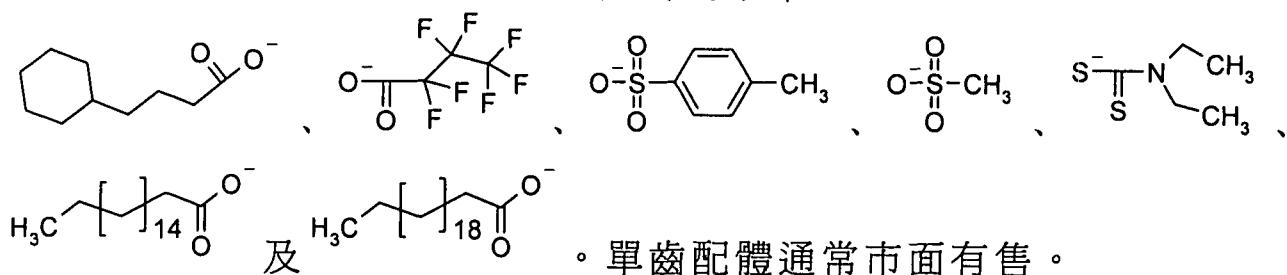
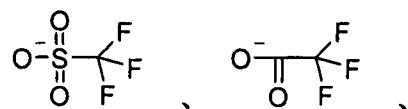
若 R^3 及 R^8 代表環烷基，則其較佳係環丙基、環丁基或環戊基。

若 R^3 及 R^8 代表三烷基矽烷基，則其較佳係三甲基矽烷基。

若 R^3 及 R^8 代表C₁-C₈烷基，則其較佳係C₁-C₅烷基，尤其係甲基、乙基、異丁基或新戊基。

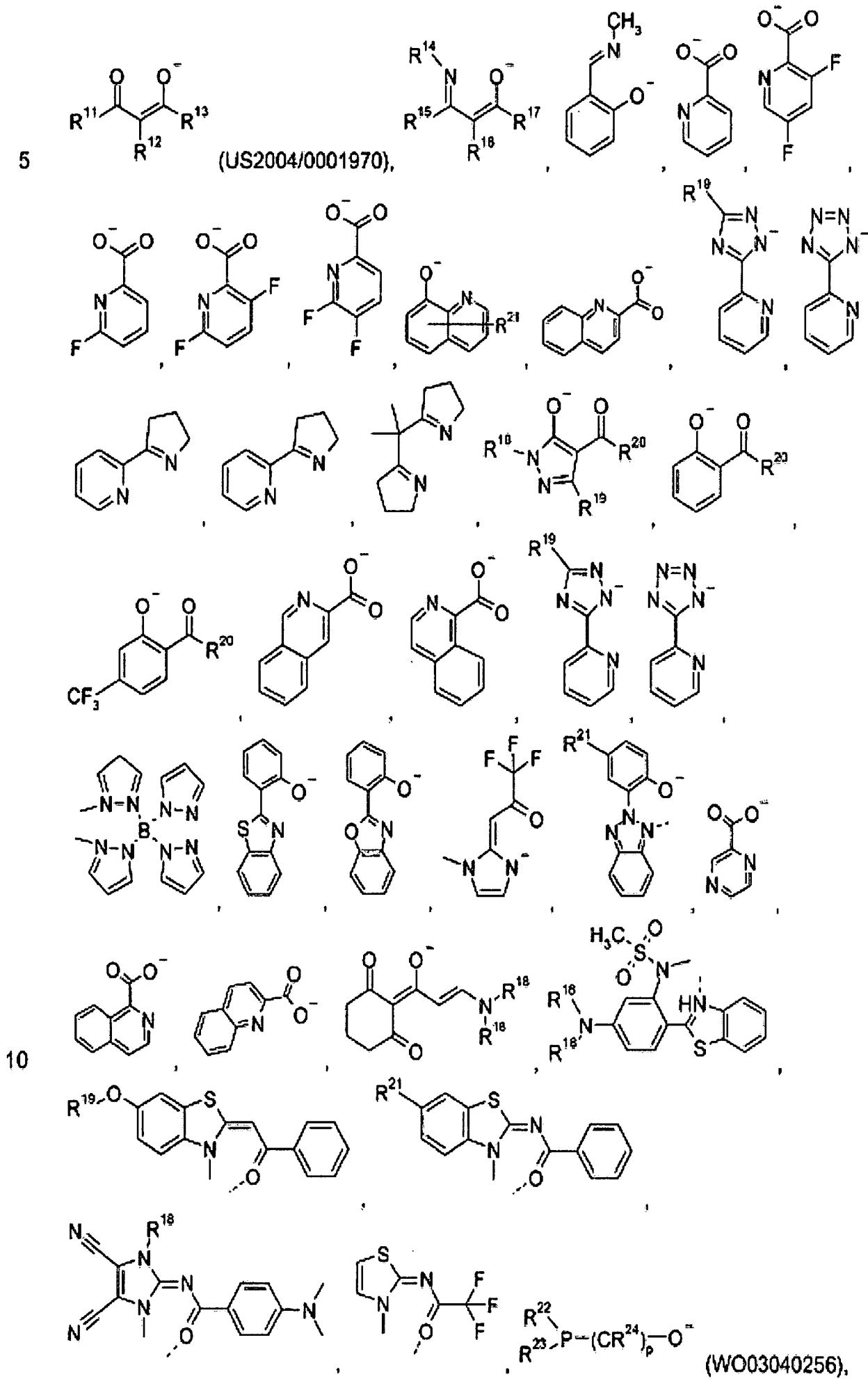
單齒配體較佳係單陰離子性。該等配體可具有O或S作為配位原子，其中配位基團係(例如)醇酸根、羧酸根、硫代羧酸根、二硫代羧酸根、磺酸根、硫醇酸根、氨基甲酸根、二硫代氨基甲酸根、硫卡巴腙(thiocarbazone)陰離子、磺醯胺陰離子及諸如此類。在一些情形下，諸如 β -烯醇化物等配體可用作單齒配體。單齒配體亦可為配位陰離子，例如鹵化物、硝酸根、硫酸根、六鹵代錫酸根及諸如此類。適

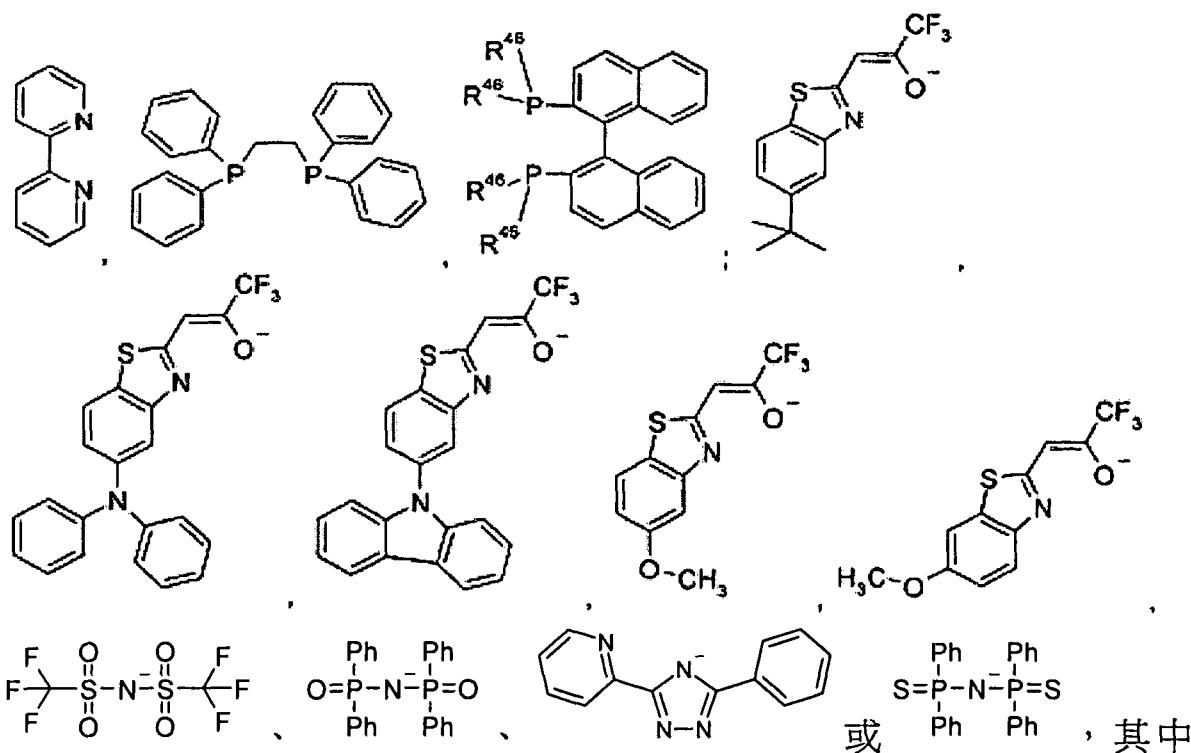
宜單齒配體之實例展示於下文中：



在本發明之一較佳實施例中，配體係(單陰離子)二齒配體。一般而言，該等配體具有N、O、P或S作為配位原子且在配位至鉈時形成5員或6員環。適宜配位基團包含氨基、亞氨基、醯氨基、醇酸根、羧基根、膦基、硫醇酸根及諸如此類。用於該等配體之適宜母體化合物之實例包含 β -二羰基(β -烯醇化物配體)及其N及S類似物、氨基羧酸(氨基羧酸鹽配體)、吡啶羧酸(亞氨基羧酸鹽配體)、水楊酸衍生物(水楊酸鹽配體)、羥基喹啉(羥基喹啉酸鹽配體)及其S類似物及二芳基膦基烷醇(二芳基膦基醇鹽配體)。

該等二齒配體L之實例係





R¹¹及R¹⁵彼此獨立地係氫、C₁-C₈烷基、C₆-C₁₈芳基(其可視情況經C₁-C₈烷基取代)、環戊基(其可視情況經C₁-C₈烷基或苯基取代)、環己基(其可視情況經C₁-C₈烷基或苯基取代)、C₂-C₁₀雜芳基或C₁-C₈全氟烷基，

R¹²及R¹⁶彼此獨立地係氫、C₆-C₁₈芳基或C₁-C₈烷基，或

R¹²係式 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}^{11}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}(=\text{O})-\text{R}^{13} \end{array}$ 之基團，

R¹³及R¹⁷彼此獨立地係氫、C₁-C₈烷基、C₆-C₁₈芳基、C₂-C₁₀雜芳基、C₁-C₈全氟烷基或C₁-C₈烷氧基，且

R¹⁴係C₁-C₈烷基、C₆-C₁₀芳基或C₇-C₁₁芳烷基，

R¹⁸係C₆-C₁₀芳基，

R¹⁹係C₁-C₈烷基、C₁-C₈全氟烷基，

R²⁰係C₁-C₈烷基或C₆-C₁₀芳基，

R²¹係氫、C₁-C₈烷基或C₁-C₈烷氧基，其可部分地或完全氟化，

R²²及R²³彼此獨立地係C_q(H+F)_{2q+1}或C₆(H+F)₅，R²⁴在每次出現時

可相同或不同且係選自H或C_q(H+F)_{2q+1}，

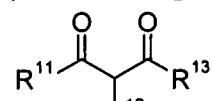
q為1至24之整數，p為2或3，且

R⁴⁶係C₁-C₈烷基、C₆-C₁₈芳基或經C₁-C₈烷基取代之C₆-C₁₈芳基。

適宜膦基醇鹽配體 R²³₂₂P-(CR²⁴)_p-O⁻ (WO03040256)之實例列示如下：

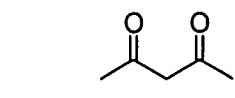
3-(二苯基膦基)-1-氧基丙烷[dppO]

1,1-雙(三氟甲基)-2-(二苯基膦基)-乙醇鹽[tfmdpeO]。

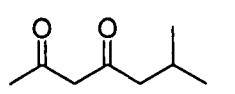


衍生配體L之尤其適宜化合物HL

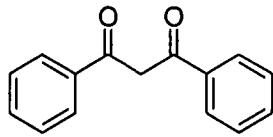
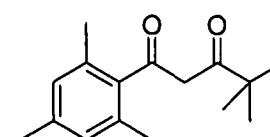
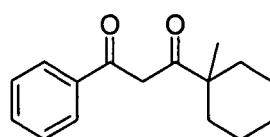
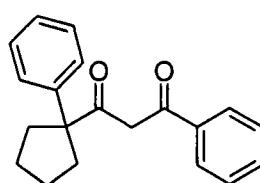
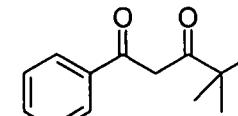
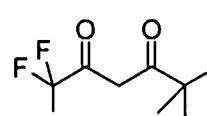
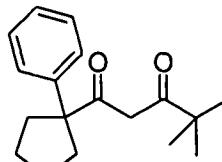
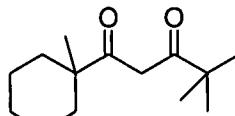
之實例包含



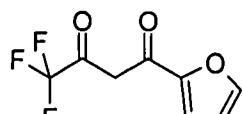
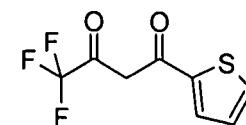
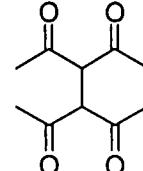
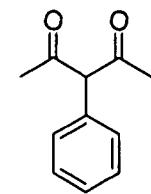
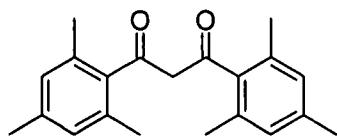
(2,4-戊烷二酸鹽[acac])、



(2,2,6,6-四甲基-3,5-庚烷二酸鹽[TMH])、

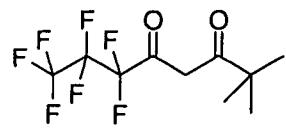


(1,3-二苯基-1,3-丙烷二酸鹽[DI])、

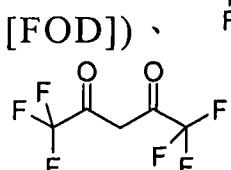
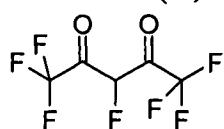


(4,4,4-三氟-1-(2-噁吩基)-1,3-丁烷二酸鹽[TTFA])、

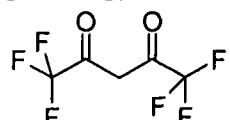
201332980



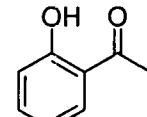
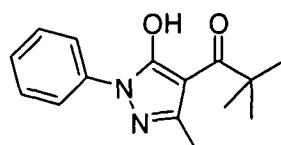
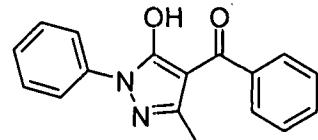
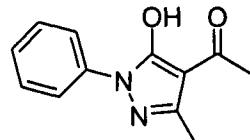
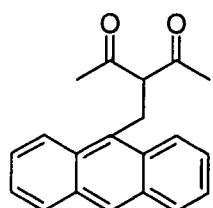
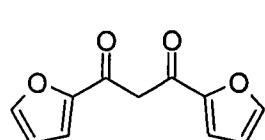
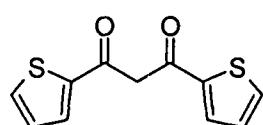
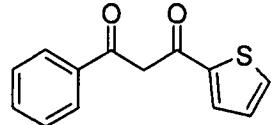
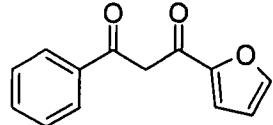
(7,7-二甲基-1,1,1,2,2,3,3-七氟-4,6-辛烷二酸鹽)



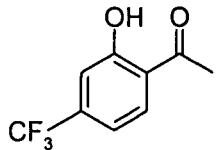
(1,1,1,3,5,5,5-七氟-2,4-戊烷二酸鹽[F7acac])、



(1,1,1,5,5,5-六氟-2,4-戊烷二酸鹽[F6acac])、



(1-苯基-3-甲基-4-異丁醯基-呡啉酸鹽[FMBP])、及

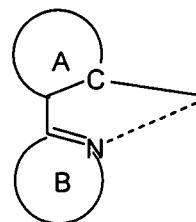


羥基呡啉母體化合物HL可經諸如烷基或烷氧基等可部分地或完全氟化之基團取代。一般而言，該等化合物市面有售。適宜羥基呡啉酸鹽配體L之實例包含：

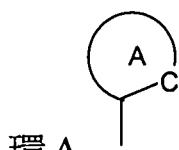
8-羥基呡啉酸鹽[8hq]

2-甲基-8-羥基呡啉酸鹽[Me-8hq]

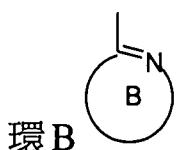
10-羥基苯并呡啉酸鹽[10-hbq]



在本發明之另一實施例中，二齒配體L係式
之配體，
其中

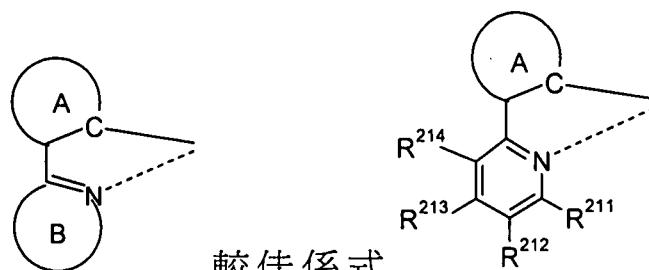


環A 代表可視情況含有雜原子之視情況經取代之芳基，



環B 代表視情況經取代之含氮芳基，其可視情況含有其他雜
原子，或環A可連同結合至環A之環B一起形成環。

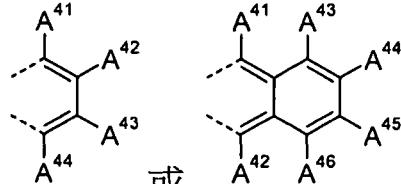
較佳環A包含苯基、經取代苯基、萘基、經取代萘基、呋喃基、
經取代呋喃基、苯并呋喃基、經取代苯并呋喃基、噁吩基、經取代噁
吩基、苯并噁吩基、經取代苯并噁吩基及諸如此類。經取代苯基、經
取代萘基、經取代呋喃基、經取代苯并呋喃基、經取代噁吩基及經取
代苯并噁吩基上之取代基包含C₁-C₂₄烷基、C₂-C₂₄烯基、C₂-C₂₄炔基、
芳基、雜芳基、C₁-C₂₄烷氧基、C₁-C₂₄烷硫基、氰基、C₂-C₂₄醯基、
C₁-C₂₄烷氧基羰基、硝基、鹵素原子、伸烷基二氧基及諸如此類。



在該實施例中，二齒配體
較佳係式
之
基團

，其中R²¹¹、R²¹²、R²¹³及R²¹⁴彼此獨立地係氫、C₁-C₂₄烷基、C₂-
C₂₄烯基、C₂-C₂₄炔基、芳基、雜芳基、C₁-C₂₄烷氧基、C₁-C₂₄烷硫
基、氰基、醯基、烷氧基羰基、硝基或鹵素原子；環A代表視情況經
取代之芳基或雜芳基；或環A可連同結合至環A之吡啶基以一起形成

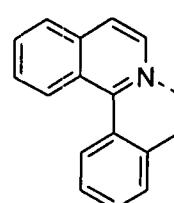
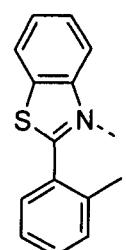
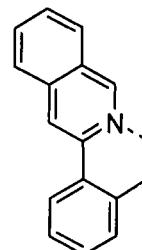
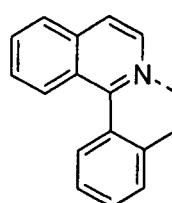
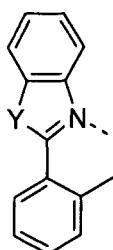
環；由R²¹¹、R²¹²、R²¹³及R²¹⁴代表之烷基、烯基、炔基、芳基、雜芳基、烷氧基、烷硫基、醯基及烷氨基可經取代；或



R²¹³及R²¹⁴或R²¹²及R²¹³係式 之基團，其中

A⁴¹、A⁴²、A⁴³、A⁴⁴、A⁴⁵及A⁴⁶如上文所定義。

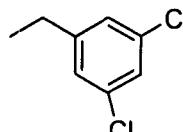
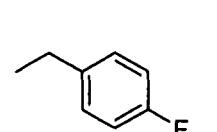
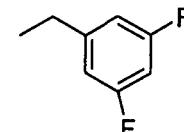
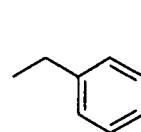
較佳種類之該等二齒配體L之實例係以下式之化合物：



，其

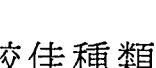
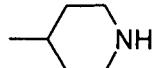
中Y係S、O、NR²⁰⁰，其中R²⁰⁰係C₁-C₄烷基、C₂-C₄烯基、視情況經取代之C₆-C₁₀芳基、尤其苯基；-(CH₂)_r-Ar，其中Ar係視情況經取代之

C₆-C₁₀芳基、尤其

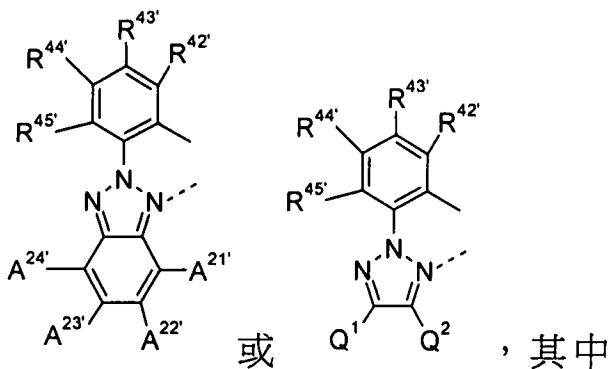


；基團-(CH₂)_{r'}X²⁰，其中r'係1至5之整數，X²⁰係鹵素、尤其F或Cl、羥基、氰基、-O-C₁-C₄烷基、二(C₁-C₄烷基)胺基、胺基或氰基；基團-(CH₂)_rOC(O)(CH₂)_{r''}CH₃，其中r為1或2，且r''

為0或1；



另一較佳種類之配體L闡述於WO06/000544中，其中根據本發明可有利地使用下列配體：



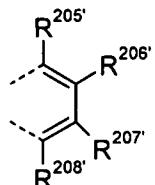
Q¹及Q²彼此獨立地係氫、C₁-C₂₄烷基或C₆-C₁₈芳基，

A^{21'}係氫，

A^{22'}係氫或C₆-C₁₀芳基，

A^{23'}係氫或C₆-C₁₀芳基，

A^{24'}係氫，或



A^{23'}及A^{24'}一起形成基團，其中R^{205'}、R^{206'}、R^{207'}及R^{208'}

彼此獨立地係H或C₁-C₈烷基，

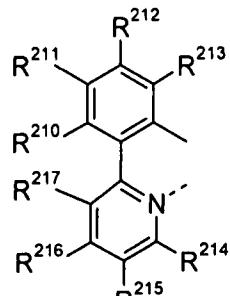
R^{42'}係H、F、C₁-C₄烷基、C₁-C₈烷氧基或C₁-C₄全氟烷基，

R^{43'}係H、F、C₁-C₄烷基、C₁-C₈烷氧基、C₁-C₄全氟烷基或C₆-C₁₀芳基，

R^{44'}係H、F、C₁-C₄烷基、C₁-C₈烷氧基或C₁-C₄全氟烷基，且

R^{45'}係H、F、C₁-C₄烷基、C₁-C₈烷氧基或C₁-C₄全氟烷基。

另一較佳種類之二齒配體L係下式之化合物：



，其中R²¹⁴係氫、鹵素、尤其F或Cl；C₁-C₄烷基、C₁-C₄全氟烷基、C₁-C₄烷氧基或視情況經取代之C₆-C₁₀芳基、尤其苯

基，

R^{215} 係氫、鹵素、尤其F或Cl； C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 全氟烷基、視情況經取代之 C_6-C_{10} 芳基、尤其苯基或視情況經取代之 C_6-C_{10} 全氟芳基、尤其 C_6F_5 ，

R^{216} 係氫、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 全氟烷基、視情況經取代之 C_6-C_{10} 芳基、尤其苯基或視情況經取代之 C_6-C_{10} 全氟芳基、尤其 C_6F_5 ，

R^{217} 係氫、鹵素、尤其F或Cl；硝基、氰基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 全氟烷基、 C_1-C_4 烷氧基或視情況經取代之 C_6-C_{10} 芳基、尤其苯基，

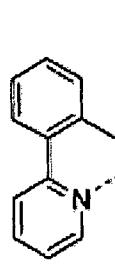
R^{218} 係氫，

R^{219} 係氫、鹵素、尤其F或Cl；硝基、氰基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_2-C_4 烯基、 C_1-C_4 全氟烷基、 $-O-C_1-C_4$ 全氟烷基、三(C_1-C_4 烷基)矽烷基、尤其三(甲基)矽烷基、視情況經取代之 C_6-C_{10} 芳基、尤其苯基或視情況經取代之 C_6-C_{10} 全氟芳基、尤其 C_6F_5 ，

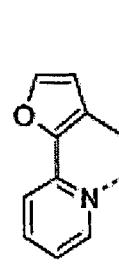
R^{220} 係氫、鹵素、尤其F或Cl；硝基、羥基、疏基、胺基、 C_1-C_4 烷基、 C_2-C_4 烯基、 C_1-C_4 全氟烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 $-O-C_1-C_4$ 全氟烷基、 $-S-C_1-C_4$ 烷基、三(C_1-C_4 烷基)矽氧烷基、視情況經取代之 $-O-C_6-C_{10}$ 芳基、尤其苯氧基、環己基、視情況經取代之 C_6-C_{10} 芳基、尤其苯基或視情況經取代之 C_6-C_{10} 全氟芳基、尤其 C_6F_5 ，且

R^{221} 係氫、硝基、氰基、 C_1-C_4 烷基、 C_2-C_4 烯基、 C_1-C_4 全氟烷基、 $-O-C_1-C_4$ 全氟烷基、三(C_1-C_4 烷基)矽烷基或視情況經取代之 C_6-C_{10} 芳基、尤其苯基。

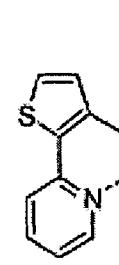
二齒配體L之具體實例係下列化合物(X-1)至(X-57)：



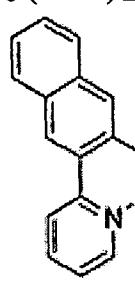
(X-1),



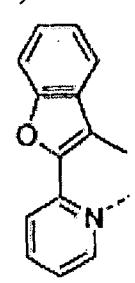
(X-2),



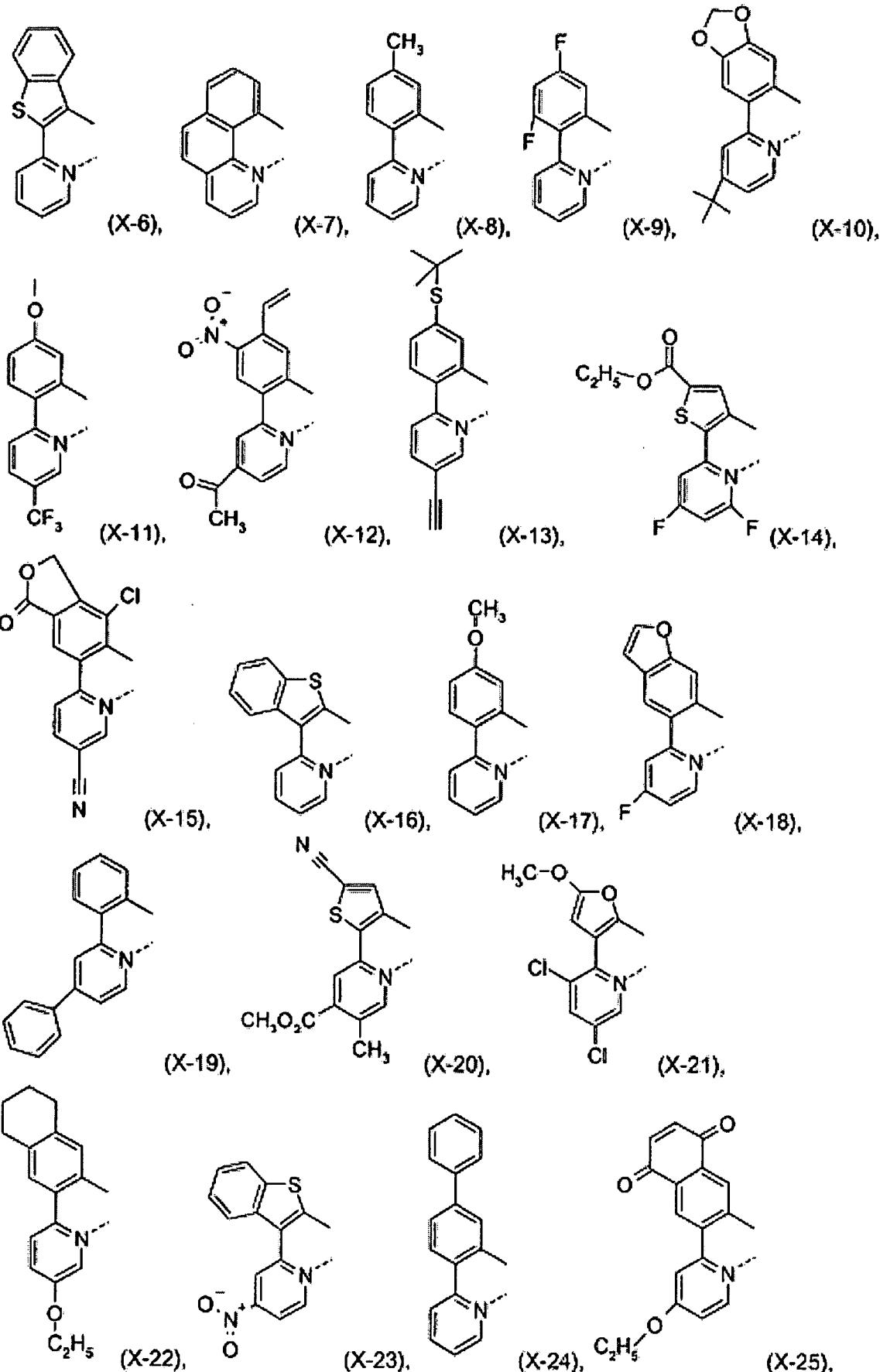
(X-3),

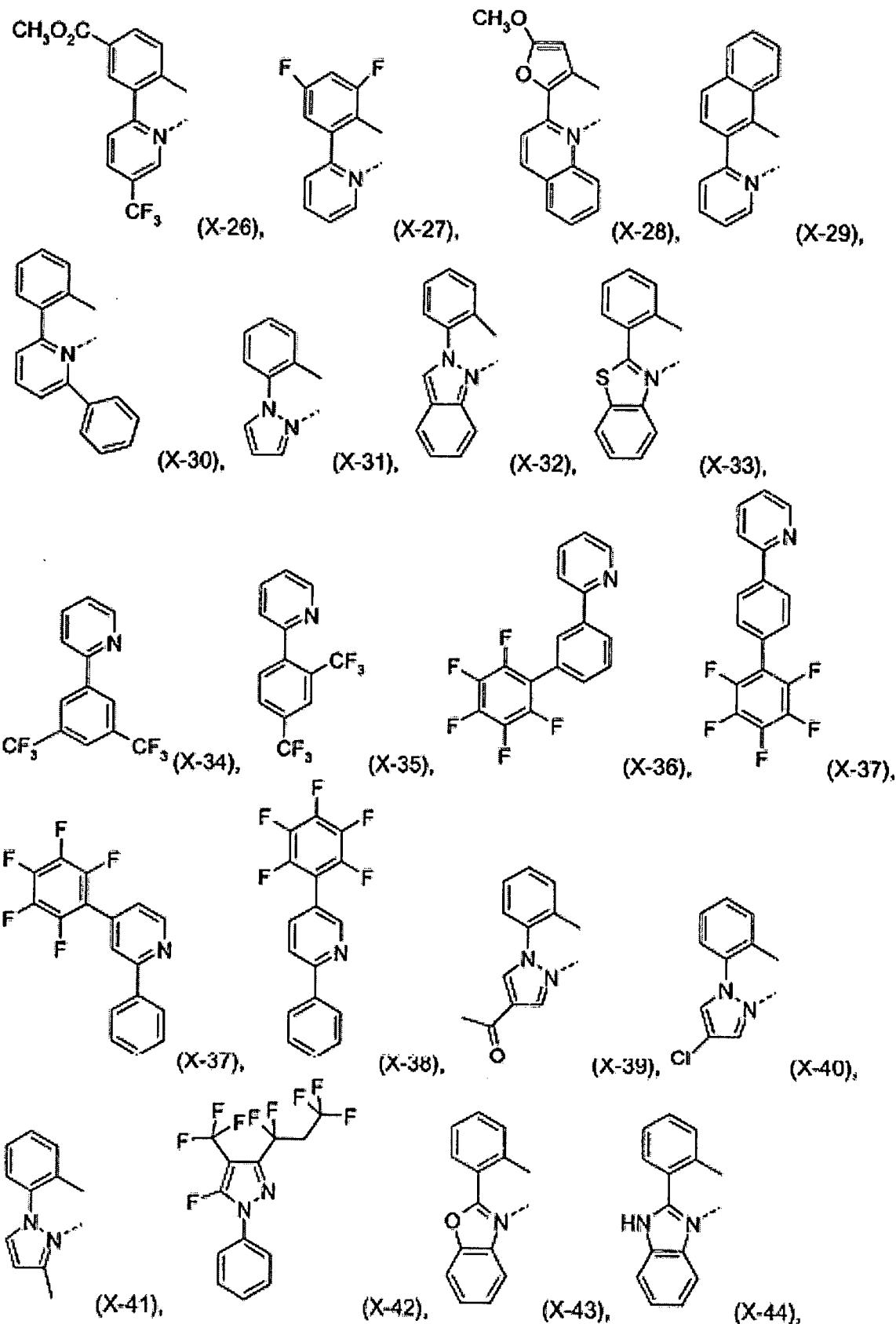


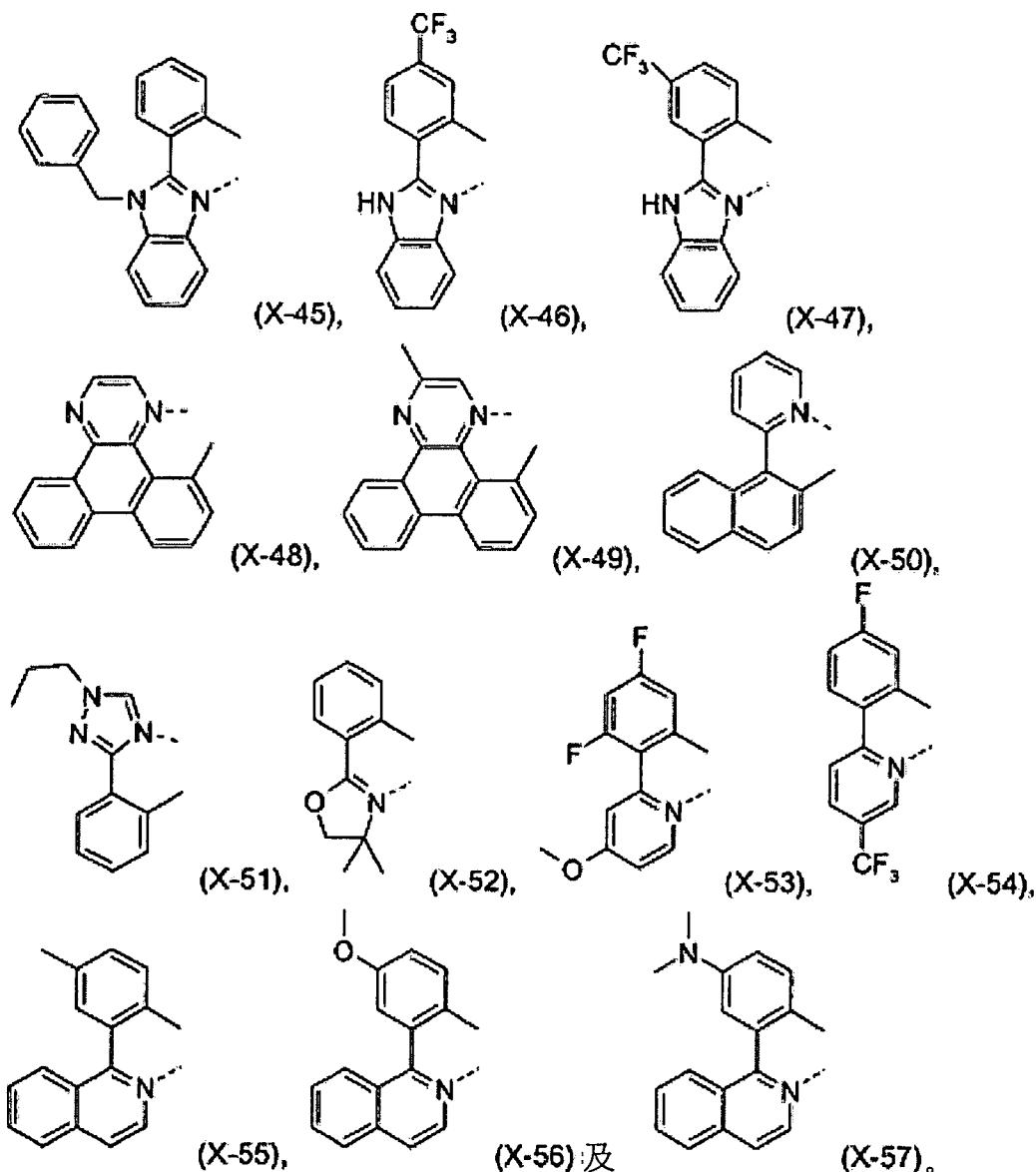
(X-4),



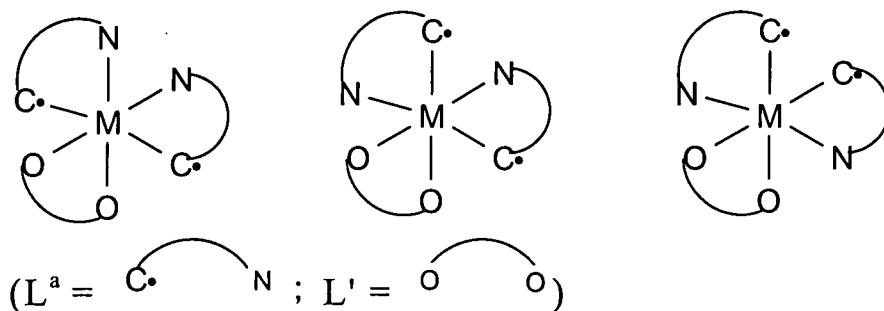
(X-5),





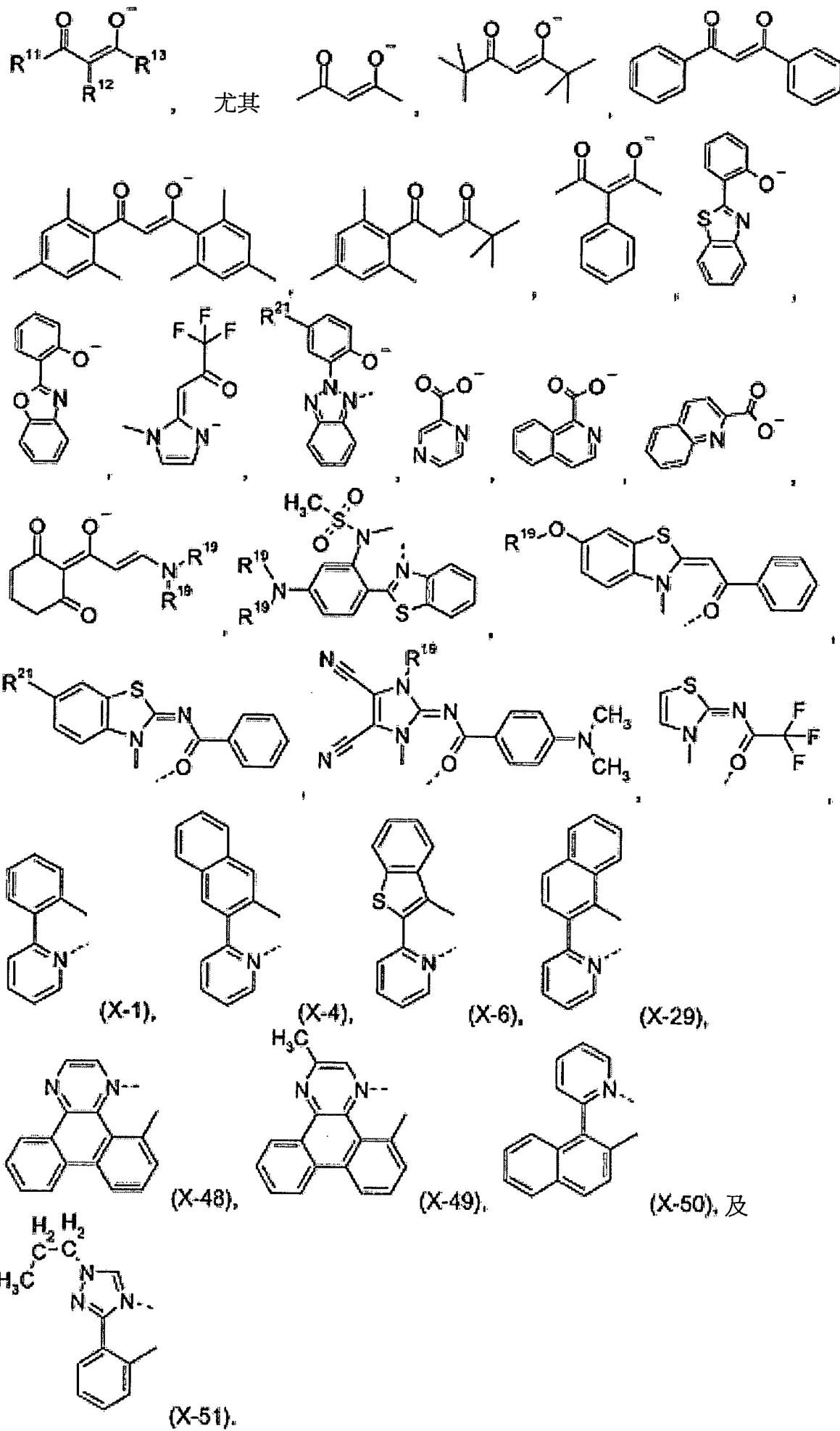


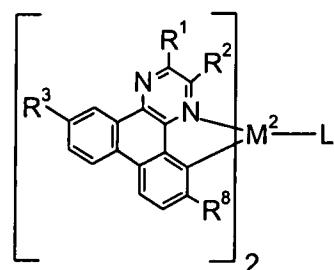
在金屬錯合物 $(L^a)_2IrL'$ 之情形下，可存在三種異構體。



在一些情形下，獲得異構體混合物。通常，可使用混合物而無需分離個別異構體。可藉由習用方法分離異構體，如A. B. Tamayo等人，J. Am. Chem. Soc. 2003, 125, 7377-7387中所闡述。

當前最佳之配體L列示如下：





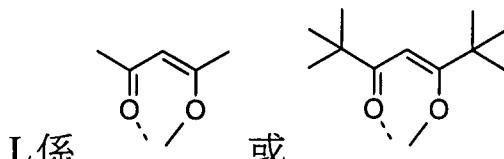
在一較佳實施例中，本發明係關於式物，其中M²係銻，

R¹係C₁-C₈烷基，

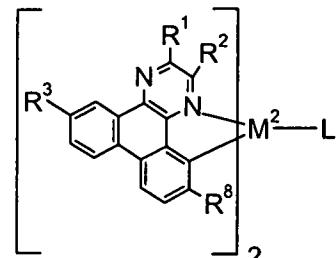
R²係H；或

R¹及R²一起形成環-(CH₂)₃-或-(CH₂)₄-，其視情況經一個或兩個C₁-C₈烷基取代，

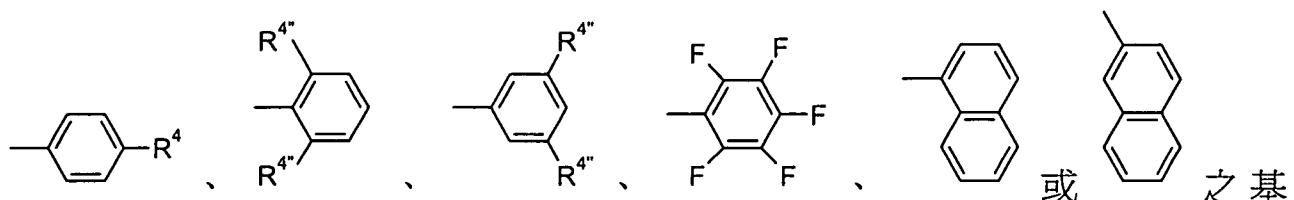
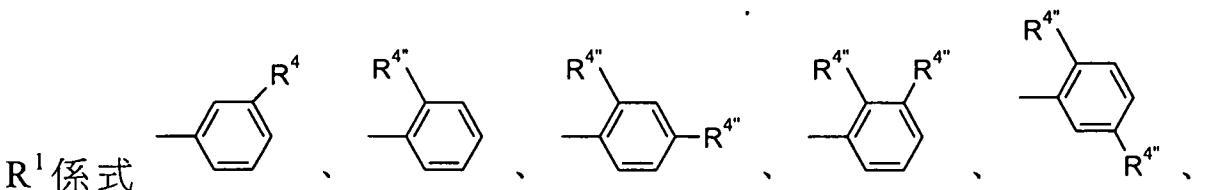
R³及R⁸係C₁-C₈烷基、-Si(C₁-C₄烷基)₃或C₃-C₆環烷基，且



L係 或 。若R¹及R²一起形成環，則-(CH₂)₄-較佳。



在另一較佳實施例中，本發明係關於式化合物，其中M²係銻，



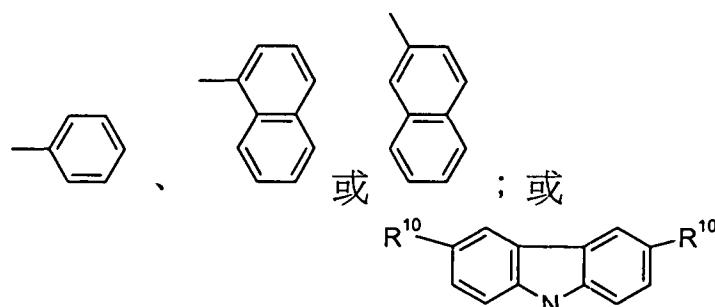
團，

R²係H；

R^4 係環己基、F、尤其 C_1-C_8 烷基、 CF_3 或 NR^7R^9 ，

$R^{4''}$ 係 C_1-C_8 烷基或 CF_3 ，

R^7 及 R^9 彼此獨立地係



R^7 及 R^9 與其所鍵結之氮原子一起形成式

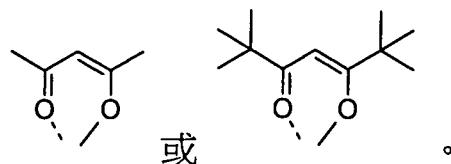
之基

團；

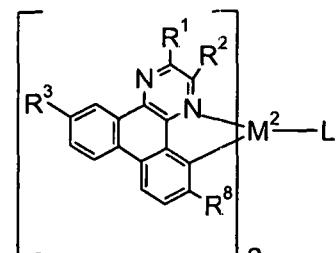
R^{10} 係 H 或 C_1-C_8 烷基，

R^3 及 R^8 係 C_1-C_8 烷基、 $-Si(C_1-C_4\text{烷基})_3$ 或 C_3-C_6 環烷基；且

L 係



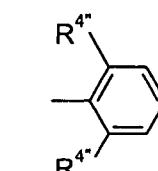
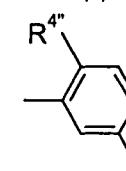
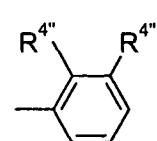
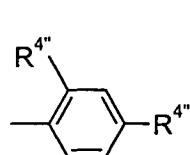
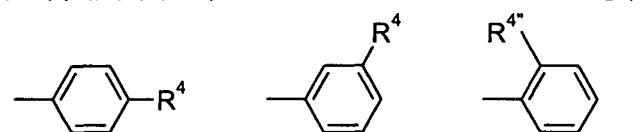
或



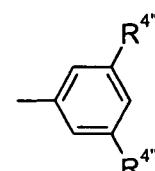
在另一較佳實施例中，本發明係關於式

之化

合物，其中 M^2 係鋨， R^1 係式



或



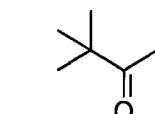
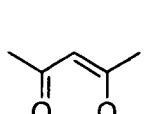
、

C_1-C_8 烷基或 CF_3 ， $R^{4''}$ 係 C_1-C_8 烷基， R^2 係 H， R^3 及 R^8 係 C_1-C_8 烷基、 $-$

或

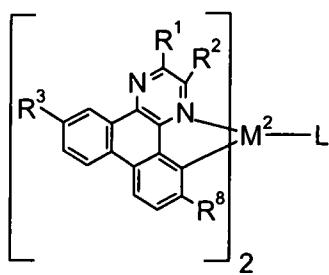
、

$Si(C_1-C_4\text{烷基})_3$ 或 C_3-C_6 環烷基；且 L 係

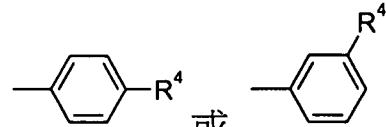


。

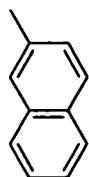
在另一較佳實施例中，本發明係關於下式之化合物：



，其中 M^2 係銻， R^1 係式

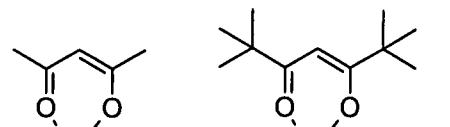


之基團， R^4 係 NR^7R^9 ， R^7 及 R^9 彼此獨立地係



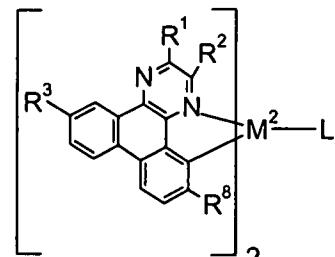
；或 R^7 及 R^9 與其所鍵結之氮原子一起形成式

之基團； R^{10} 係 H 或 C_1-C_8 烷基， R^2 係 H， R^3 及 R^8 係 C_1-C_8 烷基、 $-Si(C_1-C_4$



C_4 烷基)3 或 C_3-C_6 環烷基；且 L 係

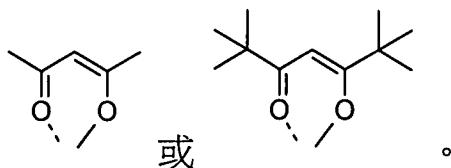
。

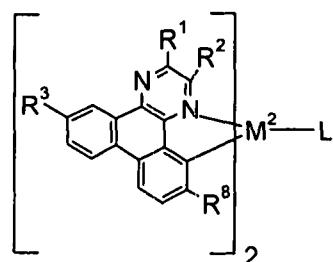


在另一較佳實施例中，本發明係關於式

之化

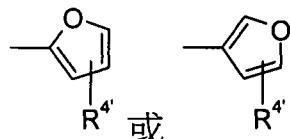
合物，其中 M^2 係銻， R^1 係式 $-C_6H_4-R^4$ 或 $-C_6H_3(R^4)-C_6H_4$ 之基團， R^4 係 CF_3 ， R^2 係 H， R^3 及 R^8 係 C_1-C_8 烷基、 $-Si(C_1-C_4$ 烷基)3 或 C_3-C_6 環烷基；且 L 係





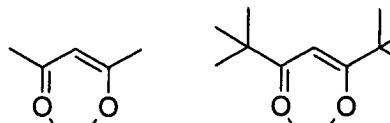
在另一較佳實施例中，本發明係關於式之化

合物，其中M²係鉻，R¹係式



或之基團，

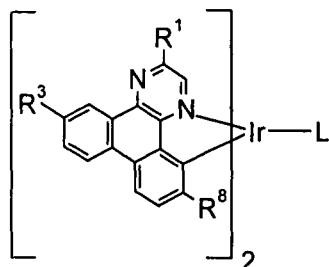
R^{4'}係H、CF₃或C₁-C₈烷基；R²係H，R³及R⁸係C₁-C₈烷基、-Si(C₁-



C₄烷基)₃或C₃-C₆環烷基；且L係

。

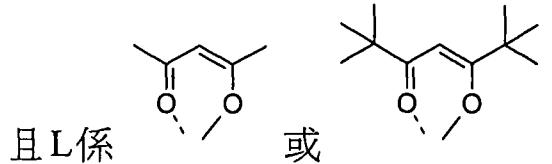
最佳者係下式之化合物：



，其中R¹係C₁-C₅烷基，尤其係甲基、乙基、

第三丁基、異丁基或新戊基，

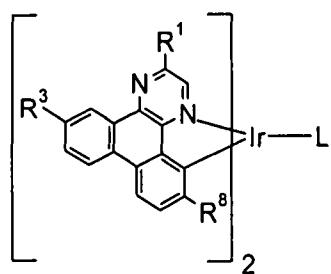
R³及R⁸係C₁-C₅烷基，尤其係甲基、乙基、異丁基或新戊基



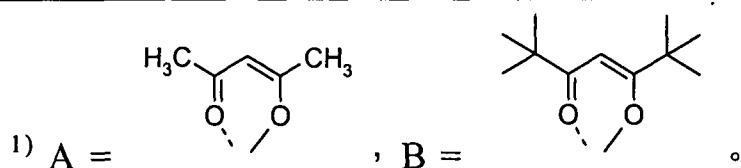
具體式I化合物之實例係化合物A-1至A-114、B-1至B-144、C-1至C-120及D-1至D41。參照技術方案9。R¹係H之化合物A-1、A-16、A-30、A-44、A-58、A-72、A-87及A-101次佳。

尤其著眼於化合物A-9、A-23、A-37、A-2、A-3、A-31、A-10、A-24、A-38、A-65、A-79、A-94、A-59、A-73、A-88、A-66、A-

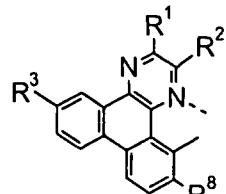
80、A-95、A-12、A-14、A-26、A-28、A-40、A-42、A-54、A-56、A-68、A-70、A-82、A-84、A-97、A-99、A-111、A-113、B-1、B-2、B-3、B-4、B-7、B-9、B-13、B-15、B-17、B-20、B-21、B-22、B-23、B-26、B-27、B-31、B-33、B-35、B-38、B-39、B-40、B-41、B-44、B-45、B-49、B-51、B-53、B-56、B-57、B-58、B-59、B-62、B-63、B-67、B-69、B-71、B-74、B-75、B-76、B-79、B-80、B-84、B-86、B-88、B-91、B-92、B-93、B-94、B-97、B-98、B-102、B-104、B-106、B-109、B-110、B-111、B-112、B-115、B-116、B-120、B-122、B-124、B-127、B-128、B-129、B-133、B-134、B-138、B-140、B-142、C-2至C-4、C-6、C-9至C-12、C-14、C-63至C-65、C-67、C-69至C-72、C-74、D-2至D-4、D-6、D-9至D-12及D-14。更佳化合物係A-9、A-23、A-37、A-2、A-3、A-31、A-10、A-24、A-38、A-65、A-79、A-94、A-59、A-73、A-88、A-66、A-80、A-95、A-12、A-14、A-26、A-28、A-40、A-42、A-54、A-56、A-68、A-70、A-82、A-84、A-97、A-99、A-111、C-2至C-4、C-6、C-9至C-12、C-14、C-63至C-65、C-67、C-69至C-72及C-74。甚至更佳之化合物係A-9、A-23、A-37、A-2、A-3、A-31、A-10、A-24、A-38、A-65、A-79、A-94、A-59、A-73、A-88、A-66、A-80、A-95、A-12、A-14、A-26、A-28、A-40、A-42、A-54、A-56、A-68、A-70、A-82、A-84、A-97、A-99、A-111及A-113。最佳者係下式之化合物：

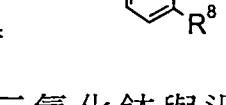


化合物	L	R ¹	R ³	R ⁸
A-9	A ¹⁾	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₃	-CH ₃
A-23	A ¹⁾	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-37	A ¹⁾	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-2	A ¹⁾	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃
A-3	A ¹⁾	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-31	A ¹⁾	-CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-10	A ¹⁾	-C(CH ₃) ₃	-CH ₃	-CH ₃
A-24	A ¹⁾	-C(CH ₃) ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-38	A ¹⁾	-C(CH ₃) ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-65	B ¹⁾	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₃	-CH ₃
A-79	B ¹⁾	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-94	B ¹⁾	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-59	B ¹⁾	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃
A-73	B ¹⁾	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-88	B ¹⁾	-CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-66	B ¹⁾	-C(CH ₃) ₃	-CH ₃	-CH ₃
A-80	B ¹⁾	-C(CH ₃) ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-95	B ¹⁾	-C(CH ₃) ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂



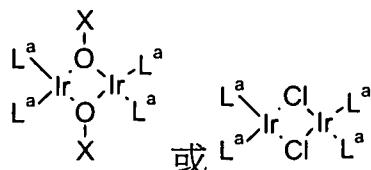
可根據先前技術中已知之常用方法來製備本發明之金屬錯合

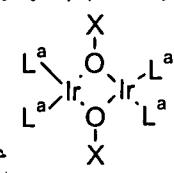
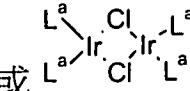


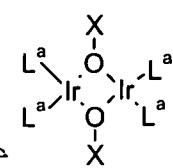
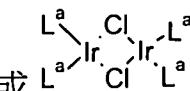
物。製備式Ir(L^a)₃ (L^a = )之鉻金屬錯合物之便利單步驟方法包括使市面有售水合三氯化鉻與過量L^aH在3當量三氟乙酸銀存在下及視情況在溶劑(例如基於鹵素之溶劑、基於醇之溶劑、基於醚之溶劑、基於酯之溶劑、基於酮之溶劑、基於腈之溶劑及水)存在下進行

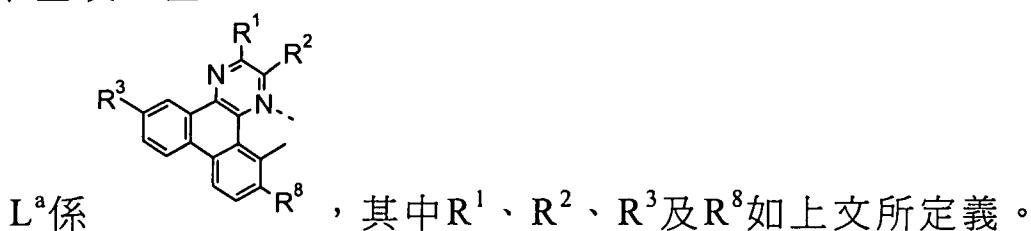
反應。藉由習用方法分離及純化叁-環金屬化鉻錯合物。在一些情形下，獲得異構體混合物。通常，可使用混合物而無需分離個別異構體。

可(例如)藉由以下方式來製備式 $\text{Ir}(\text{L}^{\text{a}})_2\text{L}$ 之鉻金屬錯合物：首先製

備式  或  (其中X係H、甲基或乙基，且 L^{a} 如上文所定義)之中間體鉻二聚體，且然後添加 HL^{a} 。通常可藉由以下方式來製備鉻二聚體：首先使水合三氯化鉻與 HL^{a} 進行反應且添加 NaX ，及藉由使水合三氯化鉻與 HL^{a} 在適宜溶劑(例如2-乙氧基乙醇)中進行反應。

式  或  之化合物係新化合物且形成本發明之另一態樣。

因此，本發明係關於式  或  之化合物，其中X係H、甲基或乙基，



可(例如)如US7166368之圖7及圖8中所概述來合成式VIa或VIb之化合物。

$\text{C}_{1\text{-C}_{18}}$ 烷基係具支鏈或無支鏈基團，例如甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、第三丁基、2-乙基丁基、正戊基、異戊基、1-甲基戊基、1,3-二甲基丁基、正己基、1-甲基己基、正庚基、異庚基、1,1,3,3-四甲基丁基、1-甲基庚基、3-甲基庚基、正

辛基、2-乙基己基、1,1,3-三甲基己基、1,1,3,3-四甲基戊基、壬基、癸基、十一烷基、1-甲基十一烷基、十二烷基、1,1,3,3,5,5-六甲基己基、十三烷基、十四烷基、十五烷基、十六烷基、十七烷基、十八烷基、二十烷基或二十二烷基。 C_1-C_8 烷基係具支鏈或無支鏈基團，例如甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、第三丁基、2-乙基丁基、正戊基、異戊基、1-甲基戊基、1,3-二甲基丁基、正己基、1-甲基己基、正庚基、異庚基、1,1,3,3-四甲基丁基、1-甲基庚基、3-甲基庚基、正辛基或2-乙基己基。

C_1-C_8 全氟烷基係具支鏈或無支鏈基團，例如 $-CF_3$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_2CF_3$ 、 $-CF(CF_3)_2$ 、 $-(CF_2)_3CF_3$ 及 $-C(CF_3)_3$ 。

C_3-C_8 環烷基係較佳。 C_5-C_{12} 環烷基或該環烷基經一個或兩個 C_1-C_8 烷基或 C_1-C_8 全氟烷基取代，例如，環丙基、環丁基、環戊基、甲基環戊基、二甲基環戊基、環己基、甲基環己基、二甲基環己基、三甲基環己基及第三丁基環己基。

C_1-C_8 烷氧基係直鏈或具支鏈烷氧基，例如甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、第二丁氧基、第三丁氧基、戊氧基、異戊氧基或第三戊氧基、庚氧基或辛氧基。

芳基通常係視情況可經取代之 C_6-C_{18} 芳基、較佳地 C_6-C_{10} 芳基，例如，苯基、4-甲基苯基、4-甲氧基苯基、萘基、聯苯基、2-茀基、菲基、蒽基、并四苯基、聯三苯基或聯四苯基；或經一至三個 C_1-C_4 烷基取代之苯基，例如鄰-、間-或對-甲基苯基、2,3-二甲基苯基、2,4-二甲基苯基、2,5-二甲基苯基、2,6-二甲基苯基、3,4-二甲基苯基、3,5-二甲基苯基、2-甲基-6-乙基苯基、4-第三丁基苯基、2-乙基苯基或2,6-二乙基苯基。

C_7-C_{24} 芳烷基較佳係可經取代之 C_7-C_{15} 芳烷基，例如，苄基、2-苄基-2-丙基、 β -苯乙基、 α -甲基苄基、 α , α -二甲基苄基、 ω -苯基-丁

基、 ω -苯基-辛基、 ω -苯基-十二烷基；或在苯環上經一至三個C₁-C₄烷基取代之苯基-C₁-C₄烷基，例如，2-甲基苄基、3-甲基苄基、4-甲基苄基、2,4-二甲基苄基、2,6-二甲基苄基或4-第三丁基苄基或3-甲基-5-(1',1',3',3'-四甲基-丁基)-苄基。

雜芳基通常係C₂-C₁₀雜芳基，亦即氮、氧或硫係可能雜原子之具有5至7個環原子或稠合環系統之環，且通常係具有5至12個原子且具有至少6個共軛π-電子之不飽和雜環基團，例如噻吩基、苯并[b]噻吩基、二苯并[b,d]噻吩基、噻蒽基、呋喃基、糠基、2H-吡喃基、苯并呋喃基、異苯并呋喃基、二苯并呋喃基、苯氧基噻吩基、吡咯基、咪唑基、吡唑基、吡啶基、二吡啶基、三嗪基、嘧啶基、吡嗪基、噁嗪基、吲哚基、異吲哚基、吲哚基或吲唑基，其可未經取代或經取代。

上述基團之可能取代基係C₁-C₈烷基、C₁-C₈烷氧基、氟、C₁-C₈全氟烷基或氰基。

三C₁-C₈烷基矽烷基較佳係三C₁-C₄烷基矽烷基，例如三甲基矽烷基。

若取代基(例如R⁴、R⁵或R⁶)在基團中出現一次以上，則在每次出現時其可不同。

已發現式I化合物尤其適用於需要電荷載流子導電性之應用中，尤其用於(例如)選自開關元件之有機電子應用中，該等開關元件係(例如)有機電晶體(例如有機FET及有機TFT)、有機太陽能電池及有機發光二極體(OLED)，式I化合物尤其適於在OLED中用作客體材料尤其與主體材料組合用於發光層中。在OLED中使用本發明式I化合物之情形下，獲得具有良好效率及長壽命且可尤其在低使用及操作電壓下操作之OLED。本發明式I化合物尤其適於用作發射材料(磷光發射體)。

有機電子器件之適宜結構已為彼等熟習此項技術者所習知且指定於下文中。



有機電晶體通常包含半導體層，其係自具有電洞傳輸能力及/或電子傳輸能力之有機層形成；閘電極，其係自導電層形成；及絕緣層，其係引入半導體層與導電層之間。按順序將源電極及汲電極安裝於此配置上以由此產生電晶體元件。此外，彼等熟習此項技術者已知之其他層可存在於有機電晶體中。

有機太陽能電池(光電轉換元件)通常包括存在於並聯配置之兩個板型電極之間之有機層。有機層可組態於梳型電極上。對於有機層之位置並無特定限制關且對於電極之材料並無特定限制。然而，在使用並聯配置之板型電極時，至少一個電極較佳地自透明電極(例如ITO電極或摻氟氧化錫電極)形成。自兩個亞層(亦即具有p型半導體性質或電洞傳輸能力之層，及所形成之具有n型半導體性質或電子傳輸能力之層)形成有機層。此外，在有機太陽能電池中可能存在彼等熟習此項技術者已知之其他層。

本發明進一步提供有機發光二極體，其包括陽極An及陰極Ka及配置於陽極An與陰極Ka之間之發光層E及(若適宜)至少一個之選自由以下組成之群之其他層：至少一個電洞/激發子阻斷層、至少一個電子/激發子阻斷層、至少一個電洞注入層、至少一個電洞傳輸層、至少一個電子注入層及至少一個電子傳輸層，其中至少一種式I化合物存在於發光層E及/或至少一個其他層中。至少一種式I化合物較佳存在於發光層及/或電洞阻斷層及/或電子傳輸層中。對於式I化合物在電子器件中之應用而言，關於式I化合物之相同參數選擇同樣適用，如上文關於式I化合物所指定。

本發明OLED之結構

本發明有機發光二極體(OLED)由此通常具有下列結構：

陽極(An)及陰極(Ka)及配置於陽極(An)與陰極(Ka)之間之發光層E。

舉例而言，在一較佳實施例中，本發明OLED可自下列層形成：

- 1.陽極
- 2.電洞傳輸(導體)層
- 3.發光層
- 4.電洞/激發子阻斷層
- 5.電子傳輸(導體)層
- 6.陰極

亦可具有與上述結構不同之層順序，且已為彼等熟習此項技術者所習知。舉例而言，OLED可能並不具有所有所述層；舉例而言，具有層(1) (陽極)、(3) (發光層)及(6) (陰極)之OLED同樣適宜，在該情形下，層(2) (電洞導體層)及(4) (電洞/激發子阻斷層)及(5) (電子導體層)之功能由毗鄰層承擔。具有層(1)、(2)、(3)及(6)或層(1)、(3)、(4)、(5)及(6)之OLED同樣適宜。此外，OLED可在陽極(1)與電洞導體層(2)之間具有電子/激發子阻斷層。

另外，複數個上述功能(電子/激發子阻斷劑、電洞/激發子阻斷劑、電洞注入、電洞傳導、電子注入、電子傳導)可組合於一個層中且(例如)由存在於此層中之單一材料承擔。舉例而言，在一實施例中，電洞導體層中所使用之材料可同時阻斷激發子及/或電子。

另外，OLED之上文所指定彼等層中之個別層可繼而自兩個或更多個層形成。舉例而言，電洞導體層可自自電極注入電洞之層及將電洞自電洞注入層傳輸至發光層之層形成。同樣，電子傳導層可由複數個層組成，例如藉由電極注入電子之層及自電子注入層接收電子且將其傳輸至發光層之層。

為獲得尤其有效之OLED，舉例而言，電洞傳輸層之HOMO (最高佔據分子軌道)應匹配陽極之功函數，且電子傳輸層之LUMO (最低未佔據分子軌道)應匹配陰極之功函數，前提係上述層存在於本發明

OLED中。

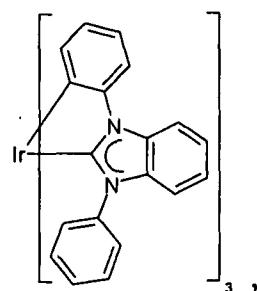
陽極(1)係提供正電荷載流子之電極。其可(例如)自包括金屬、各種金屬之混合物、金屬合金、金屬氧化物或各種金屬氧化物之混合物之材料形成。另一選擇為，陽極可為導電聚合物。適宜金屬包括主族之金屬及金屬合金、過渡金屬及鑭系元素之金屬，尤其係元素週期表之第Ib、IVa、Va及VIIa族金屬及第VIIIa族之過渡金屬。在陽極透明時，則通常使用元素週期表(IUPAC版本)之第IIb、IIIb及IVb族之混合金屬氧化物，例如氧化銦錫(ITO)。陽極(1)同樣可包括有機材料，例如聚苯胺，如(例如)Nature，第357卷，第477至479頁(1992年6月11日)中所闡述。至少陽極或陰極應至少部分地透明以能夠發射所形成之光。用於陽極(1)之材料較佳係ITO。

用於本發明OLED之層(2)之適宜電洞傳輸材料揭示於(例如)Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology，第4版，第18卷，第837至860頁，1996。電洞傳輸分子及聚合物皆可用作電洞傳輸材料。通常使用之電洞傳輸分子係選自由以下組成之群：參[N-(1-萘基)-N-(苯基胺基)]三苯基胺(1-NaphDATA)、4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD)、N,N'-二苯基-N,N'-雙(3-甲基苯基)-[1,1'-聯苯]-4,4',-二胺(TPD)、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)、四(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)苯甲醛二苯基腙(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]吡唑啉(PPR或DEASP)、1,2-反式-雙(9H-咔唑-9-基)環丁烷(DCZB)、N,N,N',N'-四(4-甲基苯基)-(1,1'-聯苯)-4,4'-二胺(TTB)、4,4',4''-參(N,N-二苯基胺基)三苯基胺(TDTA)、4,4',4''-參(N-咔唑基)三

苯基胺(TCTA)、N,N'-雙(萘-2-基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(β -NPB)、N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)-9,9-螺二茀(螺-TPD)、N,N'-雙(萘-1-基)-N,N'-雙(苯基)-9,9-螺二茀(螺-NPB)、N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)-9,9-二甲基茀(DMFL-TPD)、二[4-(N,N-二甲苯基胺基)苯基]環己烷、N,N'-雙(萘-1-基)-N,N'-雙(苯基)-9,9-二甲基茀、N,N'-雙(萘-1-基)-N,N'-雙(苯基)-2,2-二甲基聯苯胺、N,N'-雙(萘-1-基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺、N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺、2,3,5,6-四氟-7,7,8,8-四氟基喹諾二甲烷(F4-TCNQ)、4,4',4"-叁(N-3-甲基苯基-N-苯基胺基)三苯基胺、4,4',4"-叁(N-(2-萘基)-N-苯基-胺基)三苯基胺、吡嗪并[2,3-f][1,10]菲咯啉-2,3-二甲腈(PPDN)、N,N,N',N'-四(4-甲氧基苯基)聯苯胺(MeO-TPD)、2,7-雙[N,N-雙(4-甲氧基苯基)胺基]-9,9-螺二茀(MeO-螺-TPD)、2,2'-雙[N,N-雙(4-甲氧基苯基)胺基]-9,9-螺二茀(2,2'-MeO-螺-TPD)、N,N'-二苯基-N,N'-二[4-(N,N-二甲苯基胺基)苯基]聯苯胺(NTNPB)、N,N'-二苯基-N,N'-二[4-(N,N-二苯基胺基)苯基]聯苯胺(NPNPB)、N,N'-二(萘-2-基)-N,N'-二苯基苯-1,4-二胺(β -NPP)、N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)-9,9-二苯基茀(DPFL-TPD)、N,N'-雙(萘-1-基)-N,N'-雙(苯基)-9,9-二苯基茀(DPFL-NPB)、2,2',7,7'-四(N,N-二苯基胺基)-9,9'-螺二茀(螺-TAD)、9,9-雙[4-(N,N-雙(聯苯-4-基)胺基)苯基]-9H-茀(BPAPF)、9,9-雙[4-(N,N-雙(萘-2-基)胺基)苯基]-9H-茀(NPAPF)、9,9-雙[4-(N,N-雙(萘-2-基)-N,N'-聯苯胺基)苯基]-9H-茀(NPBAPF)、2,2',7,7'-四[N-萘基(苯基)胺基]-9,9'-螺二茀(螺-2NPB)、N,N'-雙(菲-9-基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(PAPB)、2,7-雙[N,N-雙(9,9-螺二茀-2-基)胺基]-9,9-螺二茀(螺-5)、2,2'-雙[N,N-雙(聯苯-4-基)胺基]-9,9-螺二茀(2,2'-螺-DBP)、2,2'-雙(N,N-二苯基胺基)-9,9-螺二茀(螺-BPA)、2,2',7,7'-四(N,N-二甲苯基)胺基螺二茀(螺-TTB)、N,N,N',N'-四萘-2-基聯苯胺(TNB)、卟啉化合物及酞菁(例如銅酞菁及

氧化鈦酞菁)。使用通常之電洞傳輸聚合物係選自由以下組成之群：聚乙烯基咔唑、(苯基甲基)聚矽烷及聚苯胺。同樣可藉由將電洞傳輸分子摻雜至諸如聚苯乙烯及聚碳酸酯等聚合物中來獲得電洞傳輸聚合物。適宜電洞傳輸分子係上文已提及之分子。

此外，在一實施例中，可使用碳烯錯合物作為電洞傳輸材料，至少一種電洞傳輸材料之帶隙通常大於所用發射體材料之帶隙。在本申請案之上下文中，「帶隙」應理解為意指三重態能量。適宜碳烯錯合物係(例如)如以下文件中所闡述之碳烯錯合物：WO 2005/019373 A2、WO 2006/056418 A2、WO 2005/113704、WO 2007/115970、WO 2007/115981及WO 2008/000727。適宜碳烯錯合物之一實例係具有下式之 Ir(dpobic)_3 ：



其揭示於(例如)WO2005/019373中。原則上，電洞傳輸層可包括至少一種式I化合物作為電洞傳輸材料。

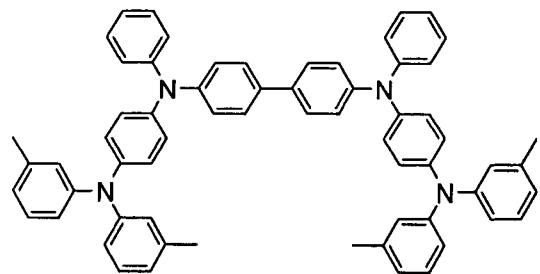
發光層(3)包含本發明之式I化合物(發射體)。

發光層(3)可包括主體材料。適宜主體材料闡述於(例如)EP2363398A1、WO2008031743、WO2008065975、WO2010145991、WO2010047707、US20090283757、US20090322217、US20100001638、WO2010002850、US20100060154、US20100060155、US20100076201、US20100096981、US20100156957、US2011186825、US2011198574、US20110210316、US2011215714、US2011284835及

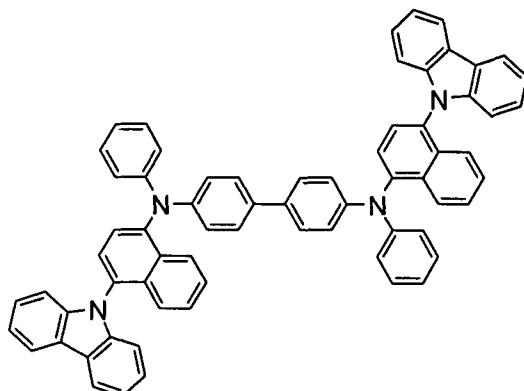
PCT/EP2011/067255中。主體材料可為具有電洞傳輸性質之有機化合物及/或具有電子傳輸性質之有機化合物。較佳地，發光層(3)包括本發明之式I化合物及具有電洞傳輸性質之有機化合物；或發光層(3)包括本發明之式I化合物、具有電洞傳輸性質之有機化合物及具有電子傳輸性質之有機化合物。

基於式I化合物、具有電洞傳輸性質之有機化合物及/或具有電子傳輸性質之有機化合物之量，式I化合物以0.01重量%至15重量%、較佳地1重量%至10重量%之量用於發射層(3)中。另外，具有電洞傳輸性質之有機化合物與具有電子傳輸性質之有機化合物之重量比率較佳在1:20至20:1的範圍內。對於式I化合物而言，相同參數選擇同樣適用，如上文所指定。

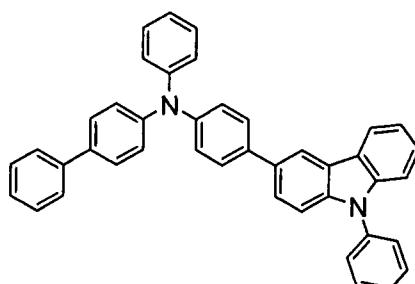
原則上，具有電洞傳輸性質之任一有機化合物皆可用作發射層中之主體。可用於主體材料之具有電洞傳輸性質之有機化合物之實例包含芳族胺化合物，例如4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD)、4,4'-雙[N-(萘基)-N-苯基胺基]聯苯(=NPB)、4,4'-雙[N-(9-菲基)-N-苯基胺基]聯苯(=PPB)、4,4'-雙[N-(3-甲基苯基)-N-苯基胺基]聯苯(=TPD)、4,4'-雙[N-(9,9-二甲基芴-2-基)-N-苯基胺基]聯苯(=DFLDPBi)、4,4',4"-叁(N,N-二苯基胺基)-三苯基胺(=TDATA)、4,4',4"-叁[N-(3-甲基苯基)-N-苯基胺基]三苯基胺(=間-MTDA)、4,4',4"-叁-(N-咔唑基)三苯基胺(=TCTA)、1,1-雙[4-(二苯基胺基)苯基]-環己烷(=TPAC)、9,9-雙[4-(二苯基胺基)苯基]芴(=TPAF)、N-[4-(9-咔唑基)苯基]-N-苯基-9,9-二甲基芴-2-胺(縮寫：YGAF)；及咔唑衍生物，例如4,4'-二(咔唑基)聯苯(縮寫：CBP)、1,3-雙(咔唑基)苯(縮寫：mCP)或1,3,5-叁(N-咔唑基)苯(縮寫：TCzB)、



(縮 寫 : DNTPD)



或

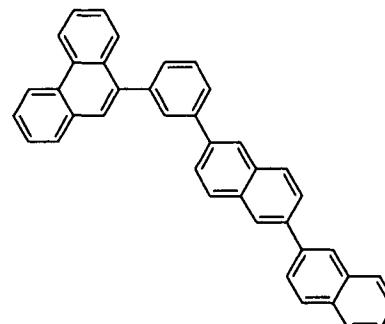


。

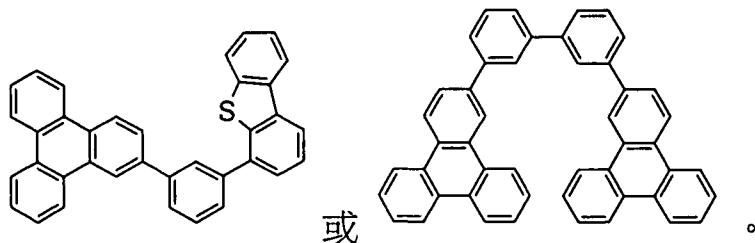
可用於主體材料之具有電洞傳輸性質之高分子化合物之實例包含聚(N-乙烯基咔唑) (= PVK)、聚(4-乙烯基三苯基胺) (= PVTPA)、聚[N-(4-{N'-(4-(4-二苯基胺基)苯基}苯基-N'-苯基胺基)苯基]甲基丙烯醯胺] (= PTP-DMA)、聚[N,N'-雙(4-丁基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(=聚-TPD)及諸如此類。

原則上，具有電子傳輸性質之任一有機化合物皆可用作發射層中之主體。可用於主體材料之具有電子傳輸性質之有機化合物之實例包含雜芳族化合物，例如9-[4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基]咔唑、1, 3-雙[5-(對-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(= OXD-7)、2-(4-聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(= PBD)、2,2',2"- (1,3,5-苯三基)叁(1-苯基-1H-苯并咪唑)(= TPBI)、3-(4-第三丁基苯基)-4-苯基-5-(4-聯苯基)-1,2,4-三唑(= TAZ)、3-(4-第三丁基苯基)-4-(4-乙基苯基)-5-(4-聯苯基)-1,2,4-三唑(= p-EtTAZ)、9,9',9"- [1,3,5-三嗪-2,4,6-三基]三咔唑(= TCz TRZ)、2,2',2"- (1,3,5-苯三基)叁(6,7-二甲基-3-苯基噁啉)(= TriMeQn)、2,3-雙(4-二苯基胺基苯基)噁啉(= TPAQn)、9,9'- (噁啉-2,3-二基二-4,1-伸苯基)二(9H-咔唑)(= CzQn)、3,3',6,6'-四苯

基-9,9'-(喹噁啉-2,3-二基二-4,1-伸苯基)二(9H-咔唑) (= DCzPQ)、紅菲咯啉(= BPhen)或浴銅靈(bathocuproine) (= BCP)；及金屬錯合物，例如參(8-羥基喹啉根基)鋁(= Alq₃)、雙(2-甲基-8-羥基喹啉根基)(4-苯基酚根基)鋁(III) (= BALq)、參[2(2-羥基苯基)-5-苯基-1,3,4-噁二唑根基]鋁(III) (= Al(OXD)₃)、參(2-羥基苯基-1-苯基-1-H-苯并咪唑根基)鋁(III) (= Al(BIZ)₃)、雙[2-(2-羥基苯基)苯并噁唑根基]鋅(II) (= Zn(BTZ)₂)、雙[2-(2-羥基苯基)苯并噁唑根基]鋅(II) (= Zn(PBO)₂)雙[2-

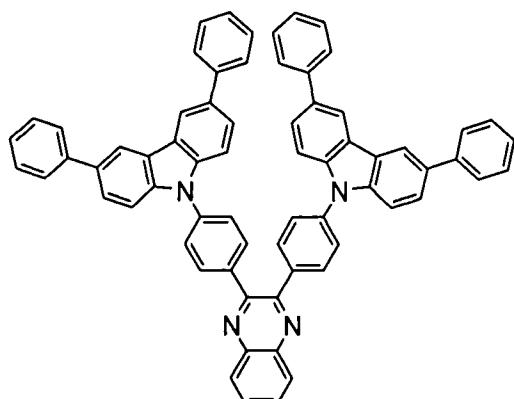


(2-羥基苯基)吡啶根基]鋅 (= Znpp₂)、

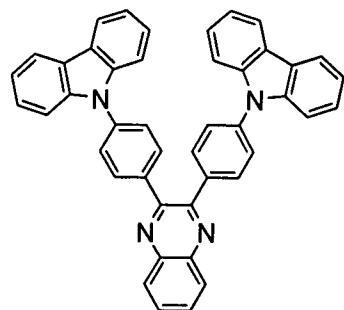


可用於主體材料之具有電子傳輸性質之高分子化合物之實例包含聚(2,5-吡啶二基) (縮寫：PPy)、聚[(9,9-二己基茀-2,7-二基)-共-(吡啶-3,5-二基)] (縮寫：PF-Py)、聚[(9,9-二辛基茀-2,7-二基)-共-(2,2'-聯吡啶-6,6'-二基)] (縮寫：PF-BPy)及諸如此類。

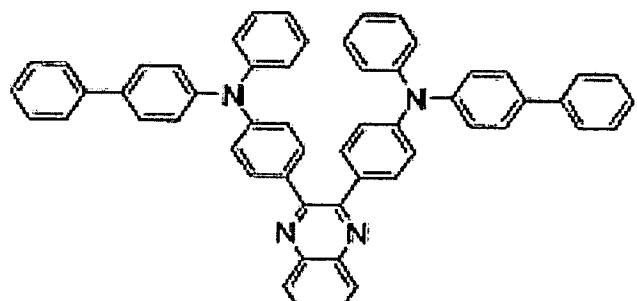
在本發明之另一實施例中，可使用雙極性主體材料，例如



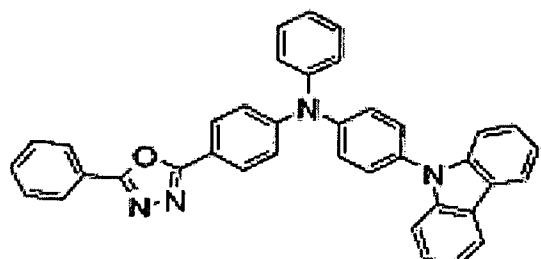
(縮寫：DCzPQ)、



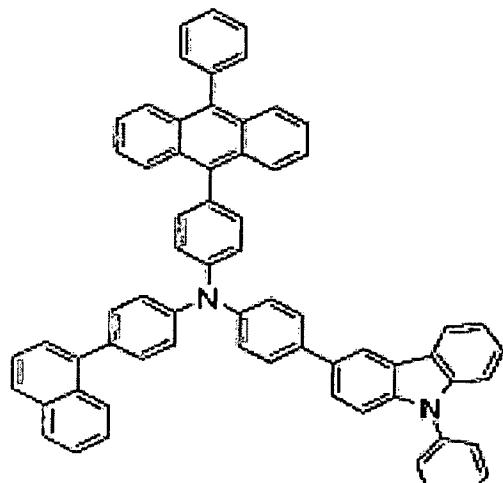
(縮寫 : CzQn)、



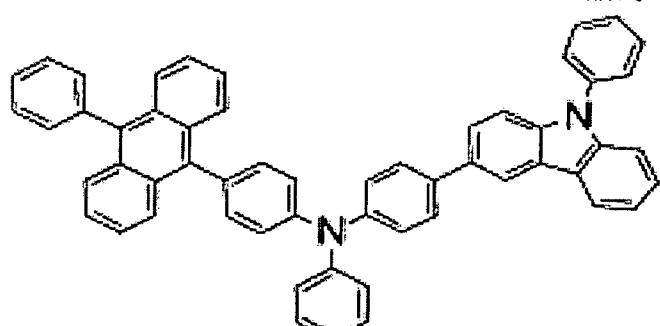
(縮寫 : BPAPQ),



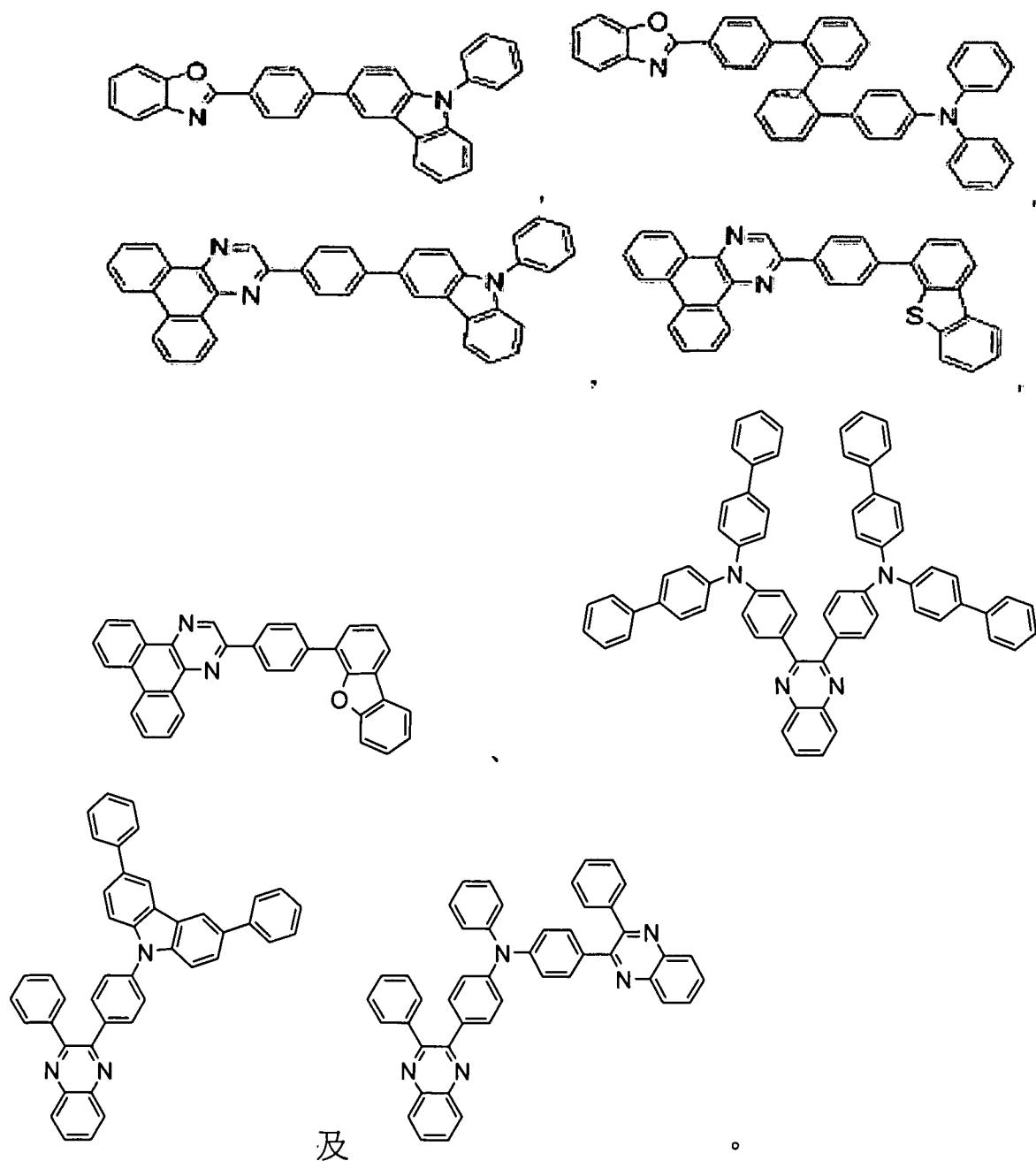
(縮寫 : YGA011),



(總寫 : PCBNA),



(總寫 : PCBA),



除發射體材料外，發光層亦可包括其他組份。舉例而言，螢光

染料可存在於發光層中以改變發射體材料之發射顏色。此外，在一較佳實施例中，可使用基質材料。此基質材料可為聚合物，例如聚(N-乙烯基咔唑)或聚矽烷。然而，基質材料可為小分子，例如4,4'-N,N'-二咔唑聯苯(CDP=CBP)或三級芳族胺(例如TCTA)。在本發明之一較佳實施例中，將至少一種式I化合物用作基質材料。

可存在電洞阻斷層。通常用於OLED中之電洞阻斷劑材料之實例係2,6-雙(N-咔唑基)吡啶(mCPy)、2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉

(浴銅靈，(BCP))、雙(2-甲基-8-喹啉根基)-4-苯基苯酸根基)鋁(III)(BAIq)、吩噻嗪S,S-二氧化物衍生物及1,3,5-叁(N-苯基-2-苄基咪唑基)苯) (TPBI)，TPBI亦適於作為電子導電材料。其他適宜電洞阻斷劑及/或電子傳輸材料係2,2',2''-(1,3,5-苯三基)叁(1-苯基-1-H-苯并咪唑)、2-(4-聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑、8-羥基喹啉根基鋰、4-(萘-1-基)-3,5-二苯基-4H-1,2,4-三唑、1,3-雙[2-(2,2'-聯吡啶-6-基)1,3,4-噁二唑-5-基]苯、4,7-二苯基-1,10-菲咯啉、3-(4-聯苯基)-4-苯基-5-第三丁基苯基-1,2,4-三唑、6,6'-雙[5-(聯苯-4-基)-1,3,4-噁二唑-2-基]-2,2'-雙吡啶基、2-苯基-9,10-二(萘-2-基)蒽、2,7-雙[2-(2,2'-聯吡啶-6-基)-1,3,4-噁二唑-5-基]-9,9-二甲基茀、1,3-雙[2-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-5-基]苯、2-(萘-2-基)-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉、叁(2,4,6-三甲基-3-(吡啶-3-基)苯基)硼烷、2,9-雙(萘-2-基)-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉、1-甲基-2-(4-(萘-2-基)苯基)-1H-咪唑并[4,5-f][1,10]菲咯啉。在另一實施例中，可使用如下化合物作為電洞/激發子阻斷層(4)或作為發光層(3)中之基質材料：其包括經由包括以下之基團連結之芳族或雜芳族環：羰基(如WO2006/100298中所揭示)、二矽烷基化合物(其選自由以下組成之群：二矽烷基咪唑、二矽烷基苯并呋喃、二矽烷基苯并噁吩、二矽烷基苯并磷雜環戊二烯、二矽烷基苯并噁吩S-氧化物及二矽烷基苯并噁吩S,S-二氧化物，如(例如)在PCT申請案WO2009003919及WO2009003898中所指定，該等申請案擬在本申請案之優先日期公開)及如WO2008/034758中所揭示之二矽烷基化合物。

用於本發明OLED之層(5)之適宜電子傳輸材料包括金屬螯合之類鴨辛化合物，例如2,2',2''-(1,3,5-伸苯基)叁[1-苯基-1H-苯并咪唑](TPBI)、叁(8-羥基喹啉根基)鋁(Alq₃)；基於菲咯啉之化合物，例如2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(DDPA = BCP)或4,7-二苯基-1,10-

菲咯啉(DPA)；及噁化合物，例如2-(4-聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(PBD)及3-(4-聯苯基)-4-苯基-5-(4-第三丁基苯基)-1,2,4-三唑(TAZ)、8-羥基喹啉根基鋰(Liq)、4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(BPhen)、雙(2-甲基-8-羥基喹啉根基)-4-(苯基酚根基)鋁(BAlq)、1,3-雙[2-(2,2'-聯吡啶-6-基)-1,3,4-噁二唑-5-基]苯(Bpy-OXD)、6,6'-雙[5-(聯苯-4-基)-1,3,4-噁二唑-2-基]-2,2'-雙吡啶基(BP-OXD-Bpy)、4-(萘-1-基)-3,5-二苯基-4H-1,2,4-三唑(NTAZ)、2,9-雙(萘-2-基)-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(NBphen)、2,7-雙[2-(2,2'-聯吡啶-6-基)-1,3,4-噁二唑-5-基]-9,9-二甲基茀(Bpy-FOXD)、1,3-雙[2-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-5-基]苯(OXD-7)、叁(2,4,6-三甲基-3-(吡啶-3-基)苯基)硼烷(3TPYMB)、1-甲基-2-(4-(萘-2-基)苯基)-1H-咪唑并[4,5-f][1,10]菲咯啉(2-NPIP)、2-苯基-9,10-二(萘-2-基)蒽(PADN)、2-(萘-2-基)-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉(HNBphen)。層(5)可用於促進電子傳輸且用作緩衝層或障壁層以防止激發子在OLED之層界面處猝滅。層(5)較佳地改良電子之遷移率且減小激發子之猝滅。在一較佳實施例中，BCP用作電子傳輸材料。在另一較佳實施例中，電子傳輸層包括至少一種式I化合物作為電子傳輸材料。

在作為電洞傳輸材料及電子傳輸材料之上述材料中，一些可實施若干功能。舉例而言，一些電子導電材料在具有低HOMO時，其同時係電洞阻斷材料。該等材料可用於(例如)電洞/激發子阻斷層(4)中。然而，同樣，層(5)亦可採用其用作電洞/激發子阻斷劑，從而可省去層(4)。

亦可以電子方式摻雜電荷傳輸層以改良所用材料之傳輸性質，從而首先使層厚度更大(避免針孔/短路)且其次最小化器件之操作電壓。舉例而言，電洞傳輸材料可摻雜有電子受體；舉例而言，酞菁或芳基胺(例如TPD或TDTA)可摻雜有四氟四氰基醌二甲烷(F4-TCNQ)或

摻雜有 MoO_3 或 WO_3 。電子傳輸材料可摻雜有(例如)鹼金屬，例如摻雜有鋰之 Alq_3 。此外，電子傳輸材料可摻雜有鹽，例如 Cs_2CO_3 或8-羥基喹啉根基-鋰(Liq)。電子摻雜已為彼等熟習此項技術者所習知且揭示於(例如)以下文件中：W. Gao, A. Kahn, J. Appl. Phys., 第94卷，第1期，2003年7月1日(p-摻雜有機層)；A. G. Werner, F. Li, K. Harada, M. Pfeiffer, T. Fritz, K. Leo. Appl. Phys. Lett., 第82卷，第25期，2003年6月23日及Pfeiffer等人，Organic Electronics 2003, 4, 89 - 103。舉例而言，除碳烯錯合物(例如 $\text{Ir}(\text{dpbic})_3$)外，電洞傳輸層可摻雜有 MoO_3 或 WO_3 。舉例而言，電子傳輸層可包括摻雜有 Cs_2CO_3 之BCP。

陰極(6)係用於引入電子或負電荷載流子之電極。用於陰極之適應材料係選自由以下組成之群：第Ia族之鹼金屬(例如Li、Cs)、第IIa族之鹼土金屬(例如鈣、鋇或鎂)、元素週期表(舊IUPAC版本)之第IIb族之金屬(包括鑭系元素及銅系元素，例如釤)。此外，亦可使用諸如鋁或銦等金屬及所提及所有金屬之組合。此外，可將包括鹼金屬之有機金屬化合物或鹼金屬氟化物(例如， LiF 、 CsF 或 KF)施加於有機層與陰極之間以減小操作電壓。

本發明OLED可另外包括彼等熟習此項技術者已知之其他層。舉例而言，可將促進正電荷之傳輸及/或使各層之帶隙彼此匹配之層施加於層(2)與發光層(3)之間。另一選擇為，此另一層可用作保護層。以類似方式，在發光層(3)與層(4)之間可存在其他層以促進負電荷之傳輸及/或使各層之間之帶隙彼此匹配。另一選擇為，此層可用作保護層。

在一較佳實施例中，除層(1)至(6)外，本發明OLED亦包括下述層中之至少一者：

-電洞注入層，其位於陽極(1)與電洞傳輸層(2)之間且厚度為2 nm至100 nm、較佳地5 nm至50 nm；

-電子阻斷層，其位於電洞傳輸層(2)與發光層(3)之間；

-電子注入層，其位於電子傳輸層(5)與陰極(6)之間。

用於電洞注入層之材料可選自銅酞菁、4,4',4''-叁(N-3-甲基苯基-N-苯基胺基)三苯基胺(m-MTDATA)、4,4',4''-叁(N-(2-萘基)-N-苯基胺基)三苯基胺(2T-NATA)、4,4',4''-叁(N-(1-萘基)-N-苯基胺基)三苯基胺(1T-NATA)、4,4',4''-叁(N,N-二苯基胺基)三苯基胺(NATA)、氧化鈦酞菁、2,3,5,6-四氟-7,7,8,8-四氟基醌二甲烷(F4-TCNQ)、吡嗪并[2,3-f][1,10]菲咯啉-2,3-二甲腈(PPDN)、N,N,N',N'-四(4-甲氧基苯基)聯苯胺(MeO-TPD)、2,7-雙[N,N-雙(4-甲氧基苯基)胺基]-9,9-螺二茀(MeO-螺-TPD)、2,2'-雙[N,N-雙(4-甲氧基苯基)胺基]-9,9-螺二茀(2,2'-MeO-螺-TPD)、N,N'-二苯基-N,N'-二-[4-(N,N-二甲苯基胺基)苯基]聯苯胺(NTNPB)、N,N'-二苯基-N,N'-二-[4-(N,N-二苯基胺基)苯基]聯苯胺(NPNPB)、N,N'-二(萘-2-基)-N,N'-二苯基苯-1,4-二胺(α -NPP)。原則上，電洞注入層可包括至少一種式I化合物作為電洞注入材料。此外，可使用聚合電洞注入材料，例如聚(N-乙烯基咔唑)(PVK)、聚噻吩、聚吡咯、聚苯胺、自摻雜聚合物(例如，礦化聚(噻吩-3-[2[(2-甲氧基乙氧基)乙氧基]-2,5-二基])(Plexcore[®] OC導電墨水，購自Plextronics)]及共聚物(例如聚(3,4-伸乙基二氧化噻吩)/聚(4苯乙烯礦酸酯)，亦稱為PEDOT/PSS)。

可選擇(例如)LiF作為用於電子注入層之材料。

此外，可能對本發明OLED中所使用之某些層實施表面處理以增加電荷載流子傳輸之效率。

本發明OLED可藉由彼等熟習此項技術者已知之方法產生。一般而言，藉由將個別層連續氣相沈積於適宜基板上來產生本發明OLED。適宜基板係(例如)玻璃、無機半導體或聚合物膜。對於氣相沈積而言，可使用常用技術，例如熱蒸發、化學氣相沈積(CVD)、物



理氣相沈積(PVD)及其他技術。在替代製程中，可採用彼等熟習此項技術者已知之塗覆技術自存於適宜溶劑中之溶液或分散液來施加OLED之有機層。

一般而言，不同層具有下列厚度：陽極(1) 50 nm至500 nm、較佳地100 nm至200 nm；電洞導電層(2) 5 nm至100 nm、較佳地20 nm至80 nm；發光層(3) 1 nm至100 nm、較佳地10 nm至80 nm；電洞/激發子阻斷層(4) 2 nm至100 nm、較佳地5 nm至50 nm；電子導電層(5) 5 nm至100 nm、較佳地20 nm至80 nm；陰極(6) 20 nm至1000 nm、較佳地30 nm至500 nm。各層之相對厚度尤其可影響本發明OLED中電洞及電子之重組區關於陰極之相對位置及由此OLED的發射光譜。此意味著電子傳輸層之厚度應較佳地經選擇以便重組區之位置匹配二極體之光學共振器性質及由此發射體的發射波長。OLED中個別層之層厚度之比率取決於所用材料。電子導電層及/或電洞導電層之厚度可大於在其電摻雜時所指定之層厚度。

在OLED之至少一層中、較佳地在發光層中使用式I化合物(較佳作為發射體材料)使得可獲得具有高效率及低使用及操作電壓之OLED。通常，藉由使用式I化合物獲得之OLED另外具有高壽命。另外，可藉由優化OLED之其他層來改良OLED之效率。舉例而言，若適宜，則可使用高效陰極(例如Ca或Ba)與LiF中間層之組合。使操作電壓減小或增加量子效率之成形基板及電洞傳輸材料同樣可用於本發明OLED中。另外，可在OLED中存在其他層以調節不同層之能級且促進電致發光。

OLED可進一步包括至少一個第二發光層。OLED之總發射可由至少兩個發光層之發射構成且亦可包括白光。

OLED可用於使用電致發光之所有裝置中。適宜器件較佳選自固定式及移動視覺顯示單元及照明單元。固定式視覺顯示單元係(例如)

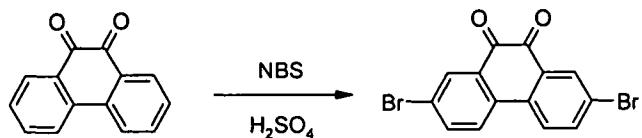
電腦、電視之視覺顯示單元、印表機、廚房用具及廣告面板中之視覺顯示單元、照明器及資訊面板。移動視覺顯示單元係(例如)行動電話、膝上型電腦、數位相機、MP3播放器、車輛中之視覺顯示單元以及公共汽車及火車上之目的地顯示器。可使用本發明OLED之其他器件係(例如)鍵盤、衣物、傢具、壁紙。

此外，本發明係關於選自由以下組成之群之包括至少一個本發明有機發光二極體或至少一個本發明發光層之器件：固定式視覺顯示單元，例如電腦、電視之視覺顯示單元、印表機、廚房用具及廣告面板中之視覺顯示單元、照明器、資訊面板；及移動視覺顯示單元，例如行動電話、膝上型電腦、數位相機、MP3播放器、車輛中之視覺顯示單元以及公共汽車及火車上之目的地顯示器；照明單元；鍵盤；衣物；傢具；壁紙。

下列實例闡釋本發明之某些特徵及優點。其意欲闡釋本發明，但並不具有限制意義。除非另外指明，否則所有百分比皆係重量百分比。

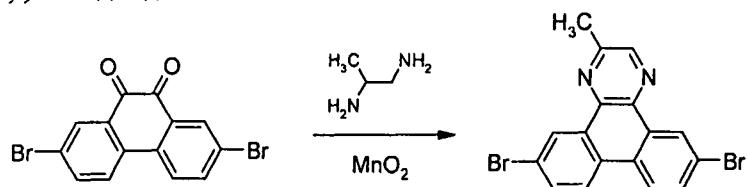
實例

配體實例1



a)在氮下，將104 g (0.50 mol) 9,10-二側氨基菲懸浮於2000 ml硫酸中並在一小時期間在低於40°C之溫度下使用總共182.5 g (1.03 mol) N-溴琥珀醯亞胺以小份進行處理。將所得紅褐色黏性反應物質在室溫下攪拌4小時。在緩慢攪拌下，將反應混合物緩慢滴加至6000 ml冰-水混合物中。過濾所得橙色懸浮液並使用5000 ml水及2000 ml乙醇洗滌固體，且然後在真空及70°C下乾燥。在回流下將橙色固體溶於2100 ml N,N-二甲基甲醯胺(DMF)中並在80°C下再攪拌一小時。在80°C下

過濾所得懸浮液並使用 1000 ml DMF 及 600 ml 甲醇洗滌固體，隨後在真空及 80°C 下乾燥，從而得到紅色粉末形式之標題產物(產量：96.8 g (53%))。熔點：284-285°C。



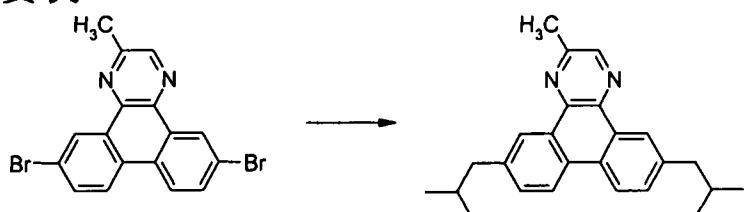
b) 在氮下，將 7.9 g (0.11 mol) 1,2-二胺基丙烷添加至存於 2000 ml 甲苯中之 32.6 g (0.09 mol) 2,7-二溴-9,10-菲二酮中。使用水分離器將紅色懸浮液在回流下加熱 2 h。使用 40 g 氧化錳(IV)在 94°C 下處理所得褐色懸浮液，且在回流下繼續加熱直至在 TLC 上不再看到中間體產物為止。經由矽膠(5 cm 層)使用預加熱漏斗過濾熱黑色懸浮液，並使用 800 ml 热甲苯沖洗矽膠層。固體迅速自濾液沈澱出且使用少量甲苯進一步洗滌固體，隨後在真空烘箱中乾燥，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：27.7 g (77%))。



c) 在氮下，將 11.1 g (27.6 mmol) 6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例 1b 之產物)及 4.97 g (83 mmol) 甲基硼酸懸浮於 70 ml 二噁烷及 200 ml 甲苯中。添加 0.12 g (0.53 mmol) 乙酸鈀(II) 及 1.36 g (3.3 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，且使用氮將反應混合物脫氣。添加存於 70 ml 水中之 63.6 g (0.28 mol) 水合磷酸鉀之經氣溶液。將黃色懸浮液在回流下加熱 5 小時。經由 Hyflo 過濾所得灰色懸浮液並使用甲苯洗滌濾餅。分離有機相，使用 200 ml 水進一步洗滌三次，並在真空下濃縮。將所得固體自乙醇重結晶三次，從而提供淺白色固體形式之標題產物(產量：1.9 g (25%))。熔點：176-178°C。¹H-

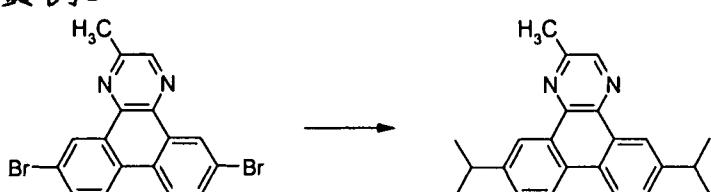
NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 2.64 (s, 3 H), 2.65 (s, 3 H), 2.86 (s, 3 H), 7.55-7.62 (m, 2 H), 8.47 (d, 2 H), 8.76 (s, 1 H), 8.95 (s, 1 H), 9.02 (s, 1 H)。

配體實例2



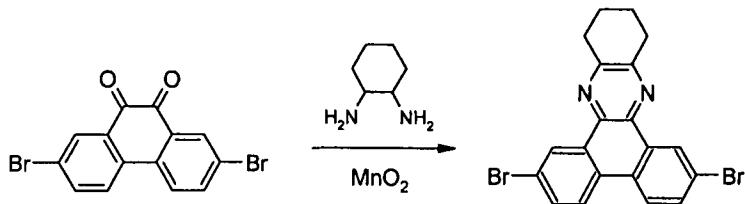
在氬下，將6.03 g (15.0 mmol) 6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例1b之產物)及4.58 g (44.9 mmol) (2-甲基丙基)硼酸懸浮於200 ml甲苯中。添加0.13 g (0.58 mmol)乙酸鈀(II)及0.74 g (1.8 mmol)2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加34.5 g (0.15 mol)水合磷酸鉀。使用氬將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱三小時。經由矽膠(2 cm層)過濾熱灰色懸浮液，並使用甲苯沖洗矽膠層。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：4.3 g (80.4%))。熔點：129-130°C。¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 0.98 (d, 6 H), 1.00 (d, 6 H), 1.99-2.17 (m, 2 H), 2.76 (dd, 4 H), 2.84 (s, 3 H), 7.52-7.59 (m, 2 H), 8.50 (d, 2 H), 8.76 (s, 1 H), 8.92 (d, 1 H), 9.00 (d, 1 H)。

配體實例3

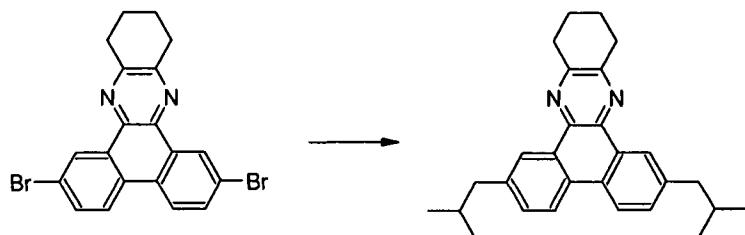


根據配體實例2之程序使用6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例1b之產物)來製備標題產物，從而在自乙醇重結晶之後得到白色固體形式之標題產物。

配體實例4



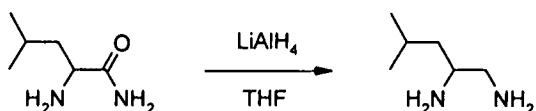
a) 在氮下，將 13.7 g (0.12 mol) 1,2-二胺基環己烷添加至存於 1000 ml 甲苯中之 36.6 g (0.10 mol) 2,7-二溴-9,10-菲二酮中。使用水分離器將紅色懸浮液在回流下加熱一小時。藉由添加 1000 ml 甲苯來稀釋所得褐色懸浮液並在 84°C 下使用 75 g 氧化錳(IV)處理，且在回流下繼續加熱直至在 TLC 上不再看到中間體產物為止。經由矽膠(5 cm 層)使用預加熱漏斗過濾熱黑色懸浮液，並使用 500 ml 熱甲苯沖洗矽膠層。濃縮合併之濾液並在真空下乾燥所得固體，從而白色固體形式之標題產物(產量：42.3 g (96%))。熔點：253-254°C。¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 2.07-2.15 (m, 4 H), 3.15-3.26 (m, 4 H), 7.74 (dd, 2 H), 8.22 (d, 2 H), 9.15 (d, 2 H)。



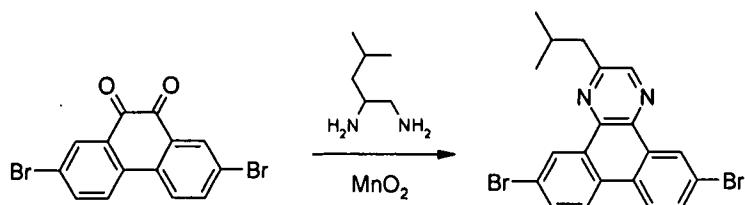
b) 在氬下，將 6.63 g (15.0 mmol) 6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]噁啉(配體實例 4a 之產物)及 4.58 g (44.9 mmol) (2-甲基丙基)硼酸懸浮於 200 ml 甲苯中。添加 0.13 g (0.58 mmol) 乙酸鈀(II) 及 0.74 g (1.8 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加 34.5 g (0.15 mol) 水合磷酸鉀。使用氬將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱兩小時。經由矽膠(2 cm 層)過濾熱灰色懸浮液，並使用甲苯沖洗矽膠層。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：4.3 g (72%))。熔點：211-212°C。¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 0.99 (d, 12 H), 1.99-2.16

(m, 6 H), 2.75 (d, 4 H), 3.17-3.28 (m, 4 H), 7.51 (dd, 2 H), 8.47 (d, 2 H), 8.93 (d, 2 H)。

配體實例5

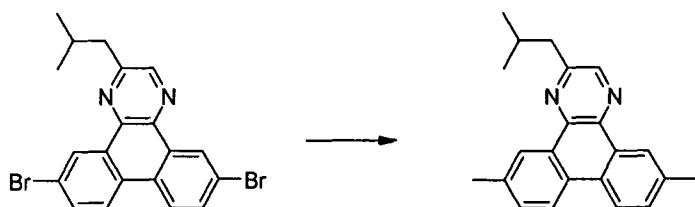


a)在氮流及室溫下，將25.0 g (0.19 mol)白胺酸醯胺(H-Leu-NH₂)以小份添加至存於250 ml無水THF中之16.0 g (0.42 mol)氫化鋰鋁之懸浮液中。將溫度緩慢增加至回流溫度並繼續攪拌8小時。將灰色懸浮液冷卻至室溫，緩慢添加30 ml水，經由Hyflo過濾懸浮液，隨後使用THF充分洗滌Hylo。濃縮合併之濾液，從而得到18.4 g粗產物。在86-95°C之溫度及50毫巴下進一步蒸餾以提供無色油狀物形式之標題產物之純淨部分(12.1 g (54%))。¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 0.90 (d, 3H), 0.93 (d, 3 H), 1.18-1.22 (m, 2 H), 1.38 (br. s, 4 H), 1.69-1.79 (m, 1 H), 2.38-2.48 (m, 1 H), 2.67-2.79 (m, 2 H)。



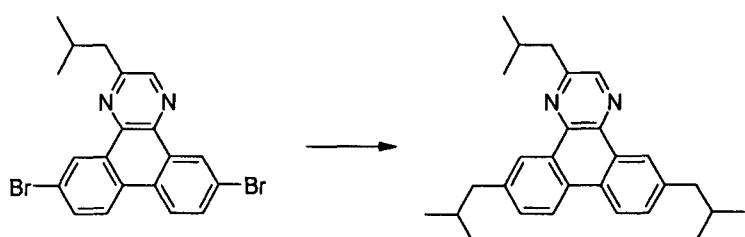
b)在氮下，將6.4 g (55 mmol)配體實例5a之產物添加至存於100 ml甲苯中之36.6 g (50 mmol) 2,7-二溴-9,10-菲二酮中。使用水分離器將橙-紅色懸浮液在回流下加熱兩小時。使用20 g氧化錳(IV)在95°C下處理所得橙-黃色物質，並在回流下繼續加熱直至在TLC上不再看到中間體產物為止。經由Hyflo (5 cm層)使用預加熱漏斗過濾熱黑色懸浮液，並使用熱甲苯沖洗Hyflo層。將濾液冷卻至室溫並過濾出固體，從而得到第一部分之12.1 g白色固體。濃縮濾液，從而得到額外之10.2 g白色固體。合併兩個固體部分並懸浮於熱甲苯中，隨後在室溫下過濾，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：12.4 g (56%))。

熔點：217-218°C。¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 1.06 (d, 6 H), 2.28-2.49 (m, 1 H), 2.96 (d, 2 H), 7.81-7.87 (m, 2 H), 8.38 (dd, 2 H), 8.74 (s, 1 H), 9.29 (d, 1 H), 9.35 (d, 1 H)。



c)在氫下，將3.7 g (8.3 mmol)配體實例5b)之產物及1.5 g (25.1 mmol) (2-甲基丙基)硼酸懸浮於150 ml甲苯中。添加74 mg (0.33 mmol)乙酸鈀(II)及0.37 g (0.90 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加19.2 g (83.4 mmol)水合磷酸鉀。使用氢將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱27 h。經由矽膠(2 cm層)過濾熱灰色懸浮液，並使用甲苯沖洗矽膠層。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：2.2 g (71%))。熔點：211-212°C。

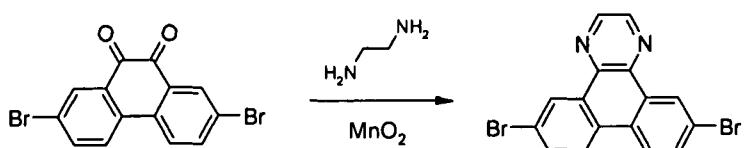
配體實例6



在氫下，將4.4 g (8.3 mmol)配體實例1b)之產物及3.06 g (30.0 mmol) (2-甲基丙基)硼酸懸浮於150 ml甲苯中。添加90 mg (0.40 mmol)乙酸鈀(II)及0.5 g (1.22 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加23 g (99.9 mmol)水合磷酸鉀。使用氢將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱三小時。經由矽膠(2 cm層)過濾熱灰色懸浮液，並使用甲苯沖洗矽膠層。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶，從而得到白色固體形式之標題產物

(產量：2.9 g (73%)）。熔點：129-130°C。¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 0.99 (d, 6 H), 1.00 (d, 6 H), 1.06 (d, 6 H), 2.00-2.16 (m, 2 H), 2.29-2.44 (m, 1 H), 2.76 (dd, 4 H), 2.96 (d, 2 H), 7.52-7.59 (m, 2 H), 7.00 (d, 2 H), 8.71 (s, 1 H), 8.93 (d, 1 H), 9.02 (d, 1 H)。

配體實例7

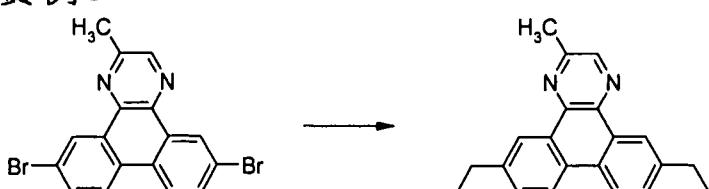


a)在氮下，將7.2 g (0.12 mol) 1,2-二胺基乙烷添加至存於1000 ml甲苯中之36.6 g (0.10 mol) 2,7-二溴-9,10-菲二酮中。使用水分離器將紅色懸浮液在回流下加熱一小時。使用1000 ml甲苯稀釋所得褐色懸浮液並使用25 g氧化錳(IV)在84°C下處理，且在回流下繼續加熱直至在TLC上不再看到中間體產物為止(一小時反應時間)。經由矽膠(5 cm層)使用預加熱漏斗過濾熱黑色懸浮液，並使用500 ml熱甲苯沖洗矽膠層。固體迅速自濾液沈澱出且使用少量冷甲苯進一步洗滌固體，隨後在真空烘箱中乾燥，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：30.9 g (80%))。¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 7.91 (d, 2 H), 8.45 (d, 2 H), 8.96 (s, 2 H), 9.39 (s, 2 H)。



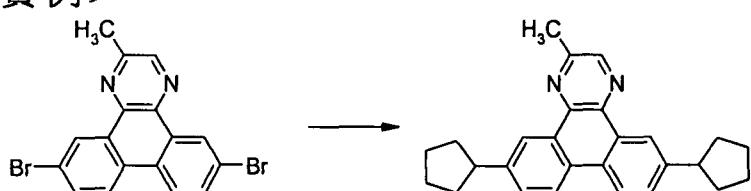
b)根據配體實例6之程序使用6,11-二溴二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例7a之產物)來製備標題產物，從而在自己醇重結晶之後得到白色固體形式之標題產物。

配體實例8



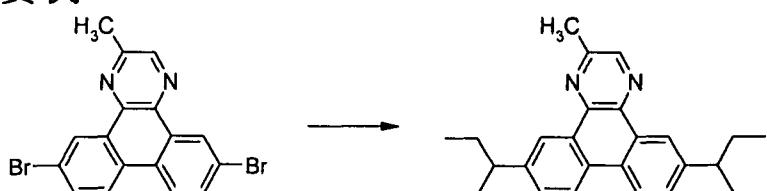
在氳下，將12.06 g (30.0 mmol) 6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例1b之產物)及6.65 g (90.0 mmol)乙基硼酸懸浮於200 ml甲苯中。添加0.27 (1.20 mmol)乙酸鈀(II)及1.47 g (3.58 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加69 g (0.30 mol)水合磷酸鉀。使用氳將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱兩小時。經由矽膠(2 cm層)過濾熱灰色懸浮液，並使用甲苯沖洗矽膠層。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶三次，從而提供淺灰棕色粉末形式之標題產物(產量：4.98 g (55%))。熔點：139-140°C。¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 1.44 (dt, 6 H), 2.85 (s, 3 H), 2.96 (dq, 4 H), 7.57-7.63 (m, 2 H), 8.48 (d, 2 H), 8.75 (s, 1 H), 9.51 (dd, 2 H)。

配體實例9



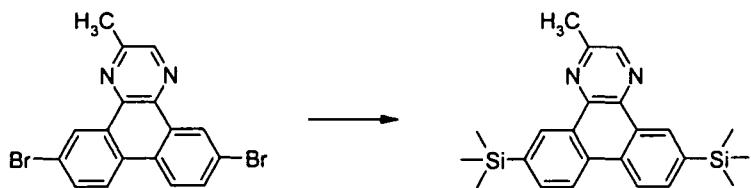
根據配體實例6之程序使用6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例1b之產物)來製備標題產物，從而在自乙醇重結晶之後得到白色固體形式之標題產物。

配體實例10



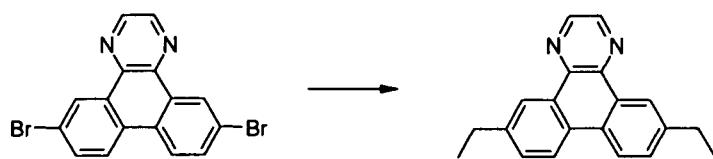
根據配體實例6之程序使用6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例1b之產物)來製備標題產物，從而在自乙醇重結晶之後得到白色固體形式之標題產物。

配體實例11



在氬下，將4.02 g (10.0 mmol) 6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例1b之產物)及3.5 g (23.6 mmol)六甲基二矽烷懸浮於100 ml DMF及0.72 g水中。添加0.09 g (0.01 mmol)叁(二亞苄基丙酮)二鈀(0)及0.06 g (0.18 mmol) 2-二-第三丁基膦基-2'-(N,N-二甲基胺基)聯苯，隨後添加3.3 g (50 mmol)乙酸鋰。使用氬將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在100°C下加熱21 h。使用額外之3.5 g六甲基二矽烷處理熱灰色懸浮液且在109°C下繼續加熱4 h，隨後添加相同量之六甲基二矽烷並在109°C下加熱兩小時。經由矽膠(2 cm層)過濾灰色懸浮液，並使用100 ml DMF沖洗矽膠層，從而得到澄清黃色濾液。使用水處理濾液直至獲得灰棕色懸浮液為止。過濾出所得固體並溶於200 ml熱乙醇/異丙醇之1:1-混合物中。過濾渾濁混合物，冷卻至室溫並使用5 ml水處理，從而提供灰棕色懸浮液。過濾並在真空烘箱中乾燥以得到淺灰棕色固體形式之標題產物。(產量：1.9 g (49%))。

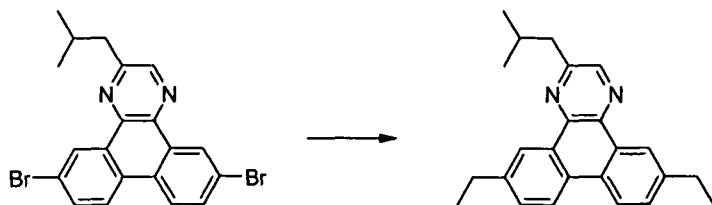
配體實例12



在氬下，將8.53 g (22.0 mmol) 6,11-二溴二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例7a之產物)及4.90 g (66.3 mmol)乙基硼酸懸浮於300 ml甲苯中。添加0.2 (0.89 mmol)乙酸鈀(II)及1.08 g (2.63 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加50 g (0.22 mol)水合磷酸鉀。使用氬將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱兩小時。經由矽膠(2 cm層)過濾熱灰色懸浮液，並使用甲苯沖洗矽膠層。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶，從而提供淺灰棕色粉末形

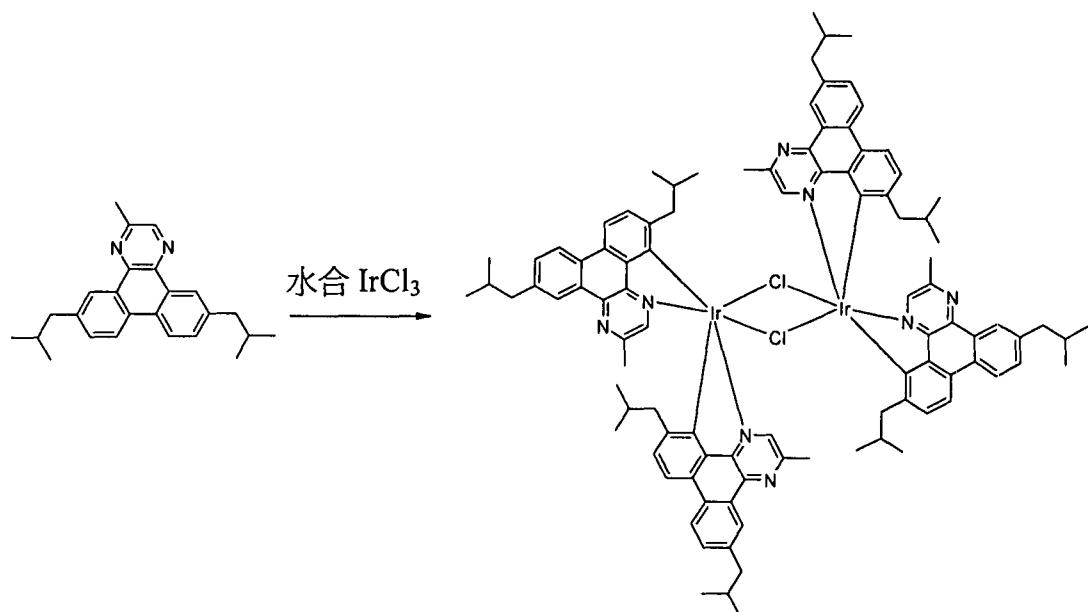
式之標題產物(產量：2.6 g (41%))。

配體實例13



在氮下，將5.7 g (12.8 mmol)配體實例5b)之產物及2.9 g (39.3 mmol)乙基硼酸懸浮於200 ml甲苯中。添加0.11 g (0.49 mmol)乙酸鉑(II)及0.63 g (1.53 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加29.5 g (128.1 mmol)水合磷酸鉀。使用氮將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱三小時。經由矽膠(2 cm層)過濾熱灰色懸浮液，並使用甲苯沖洗矽膠層。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：3.3 g (73%))。熔點：99-100°C。¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 1.09 (d, 6 H), 1.44 (dt, 6 H), 2.34-2.47 (m, 1 H), 2.92-3.02 (m, 6 H), 7.61-7.67 (m, 2 H), 8.54 (d, 2 H), 8.75 (s, 1 H), 9.02 (d, 1 H), 9.10 (d, 1 H)。

二鋨錯合物實例1



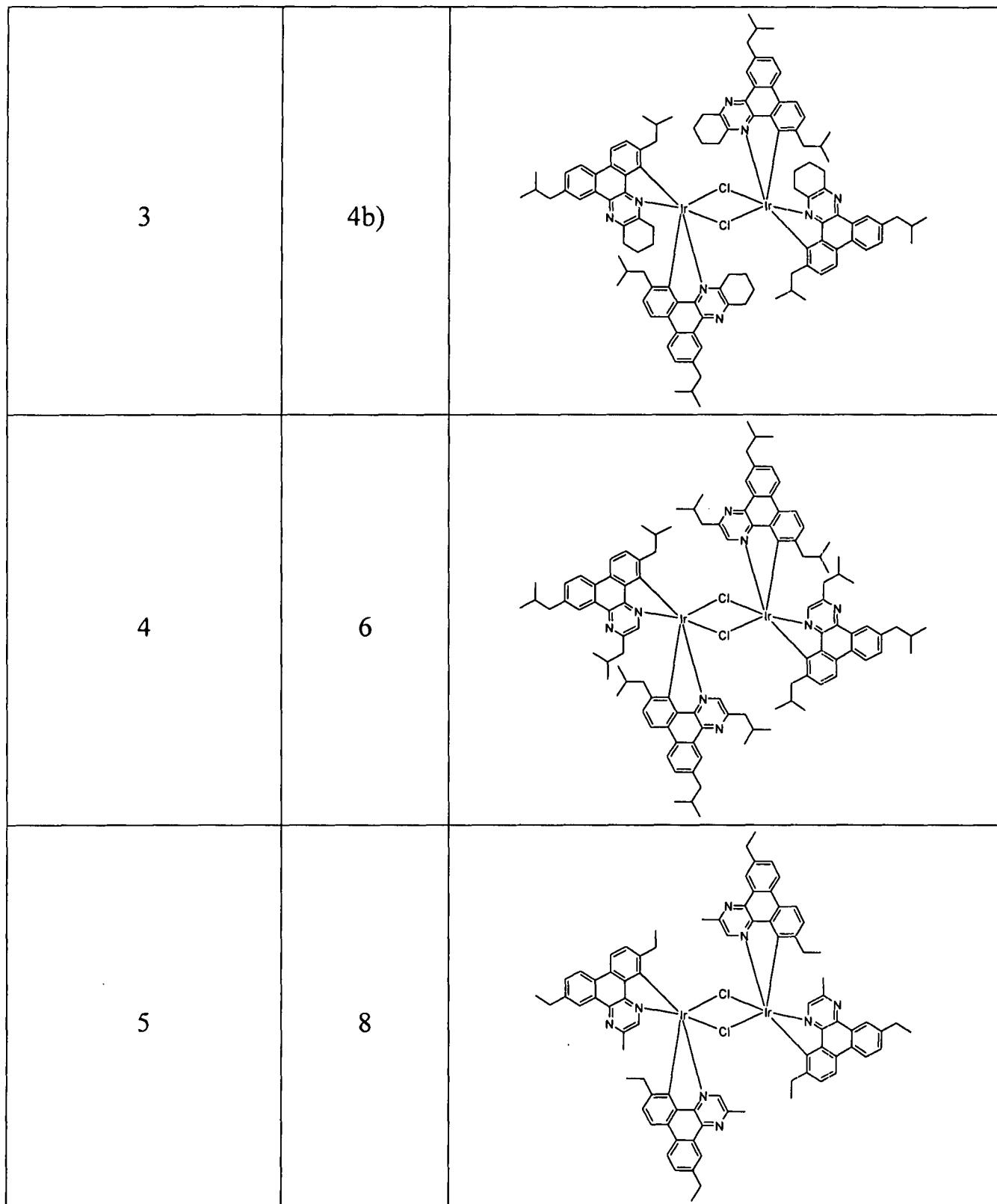
在室溫及氮下，將3.56 (10 mmol)配體實例2之產物及1.73 g (4.8

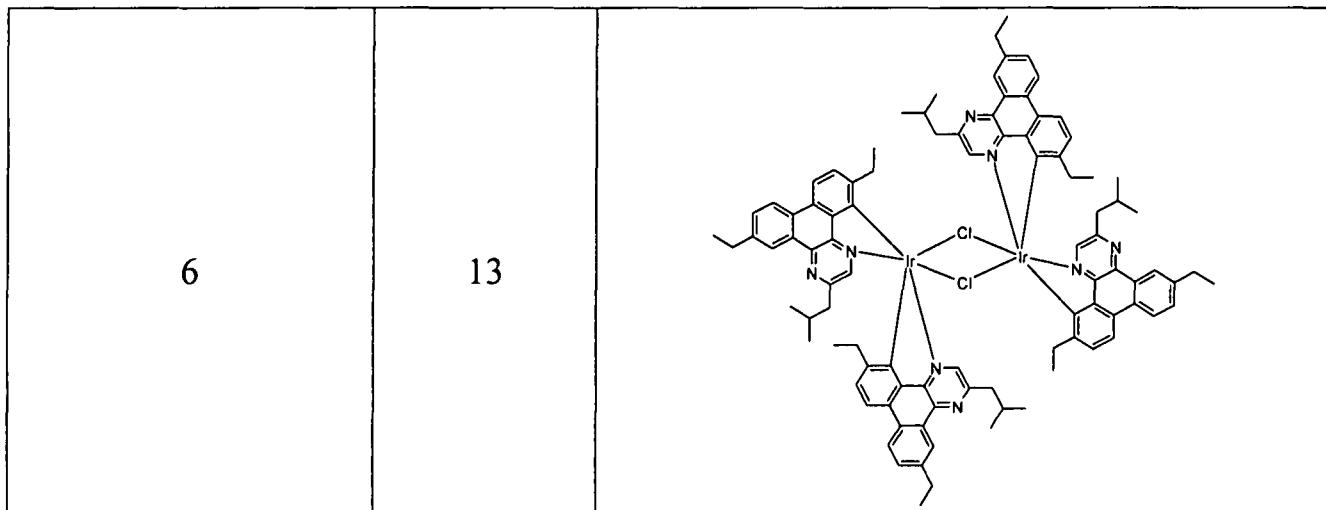
mmol)水合氯化銻(III) (銻含量為 53.01%)懸浮於 50 ml 2-乙氧基乙醇中。將黃色懸浮液加熱至 116°C 並在此溫度下保持 17 h。過濾紅色懸浮液，首先使用乙醇洗滌，隨後使用己烷洗滌，並在真空下進一步乾燥，從而得到亮紅色粉末形式之標題產物(產量：4.3 g (96%))。

二銻錯合物實例 2-7

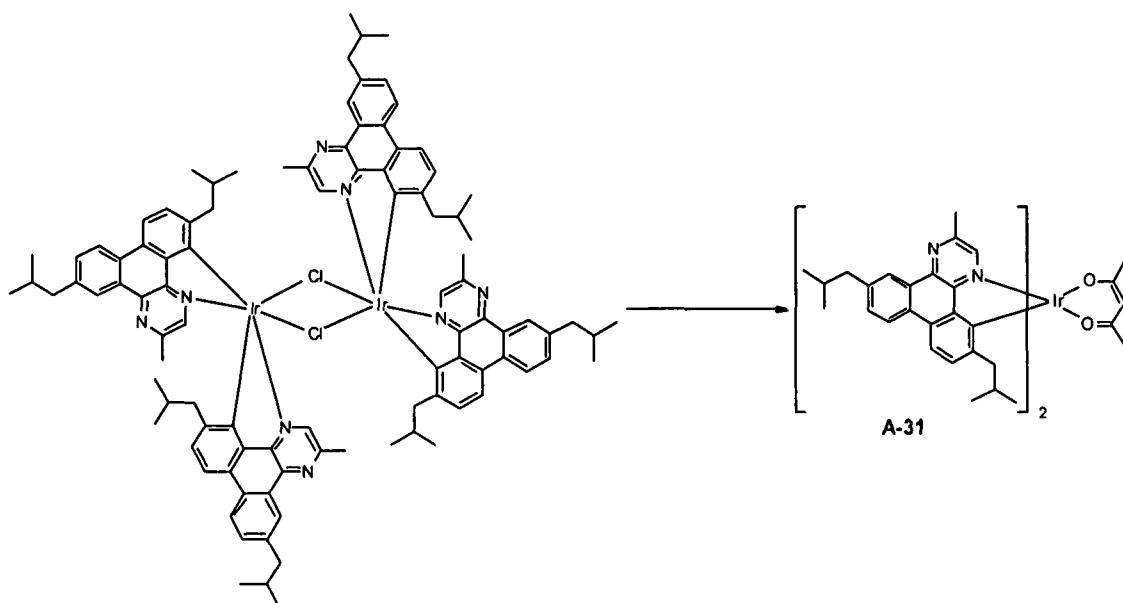
根據針對二銻錯合物實例 1 所報告之程序來製備下列二銻錯合物，從而得到二銻錯合物實例 2-6 之產物。各別產物結構已藉由 HPLC-MS 量測予以證實。

二銻錯合物實例	配體實例	二銻錯合物
1	2	
2	1c)	





錯合物實例1



在氮下，將2.0 g (1.1 mmol)二銻錯合物實例1之產物及1.1 g (10 mmol)碳酸鈉懸浮於30 ml乙氧基乙醇中。使用0.85 g (8.5 mmol)乙醯丙酮處理紅色懸浮液並在108°C下攪拌一小時。過濾所得暗紅色懸浮液，使用乙醇沖洗，並在水中攪拌兩次。使用乙醇及己烷進一步洗滌剩餘固體且然後在真空及50°C下乾燥。獲得亮紅色粉末形式之標題產物-化合物A-31 (產量：1.74 g (76%)。藉由高真空昇華進一步純化產物。¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = -0.38 (d, 6 H), 0.03 (d, 6 H), 0.55-0.71 (m, 2 H), 1.03 (d, 12 H), 1.35 (dd, 2 H), 1.64 (s, 6 H), 1.68 (dd, 2 H), 2.04-2.20 (m, 2 H), 2.80 (d, 4 H), 2.88 (s, 6 H), 5.12 (s, 1 H), 7.01 (d, 2 H), 7.60 (dd, 2 H), 8.00 (d, 2 H), 8.50 (s, 2 H), 8.51 (d, 2 H),

8.98 (d, 2 H)。

錯合物實例2-7

根據錯合物實例1自二鋁錯合物實例2至6之相應產物開始來製備鋁錯合物A-2、A-88、A-37、A-17、A-73及A-79。各別產物結構已藉由HPLC-MS及NMR量測予以證實。

A-2之¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 1.29 (s, 6 H), 1.72 (s, 6 H), 2.69 (s, 6 H), 2.93 (s, 6 H), 5.23 (s, 1 H), 6.98 (d, 2 H), 7.64 (dd, 2 H), 7.95 (d, 2 H), 8.49 (d, 2 H), 8.60 (s, 2 H), 9.04 (br. s, 2 H)。

A-88之¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = -0.25 (d, 6 H), 0.07 (d, 6 H), 0.69 (s, 18 H), 0.72-0.83 (m, 2 H), 1.03 (d, 12 H), 1.47 (dd, 2 H), 1.64 (dd, 2 H), 2.05-2.20 (m, 2 H), 2.79 (d, 4 H), 2.84 (s, 6 H), 5.48 (s, 1 H), 7.00 (d, 2 H), 7.61 (dd, 2 H), 7.99 (d, 2 H), 8.37 (s, 2 H), 8.52 (d, 2 H), 8.96 (d, 2 H)。

A-37之¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = -0.41 (d, 6 H), 0.06 (d, 6 H), 0.59-0.72 (m, 2 H), 1.00-1.15 (m, 24 H), 1.42 (dd, 2 H), 1.63 (s, 6 H), 1.75 (dd, 2 H), 2.09-2.20 (m, 2 H), 2.29-2.42 (m, 2 H), 2.76-2.88 (m, 4 H), 2.91-3.05 (m, 4 H), 5.12 (s, 1 H), 7.04 (d, 2 H), 7.63 (dd, 2 H), 8.03 (d, 2 H), 8.49 (s, 2 H), 8.53 (d, 2 H), 9.02 (d, 2 H)。

A-17之¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 0.29 (t, 6 H), 1.45 (t, 6 H), 1.45-1.65 (m, 4 H), 1.67 (s, 6 H), 2.90 (s, 6 H), 2.98 (q, 4 H), 5.19 (s, 1 H), 7.03 (d, 2 H), 7.66 (dd, 2 H), 8.01 (d, 2 H), 8.51 (d, 2 H), 8.54 (s, 2 H), 9.05 (br. s, 2 H)。

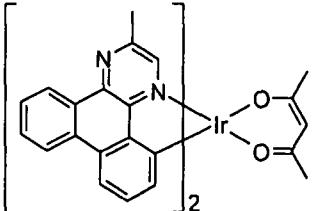
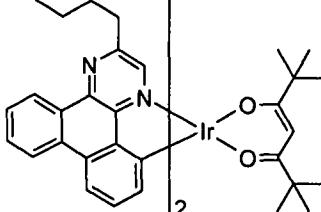
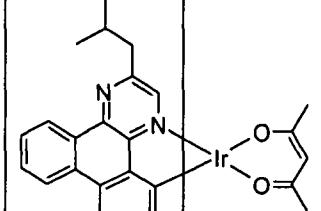
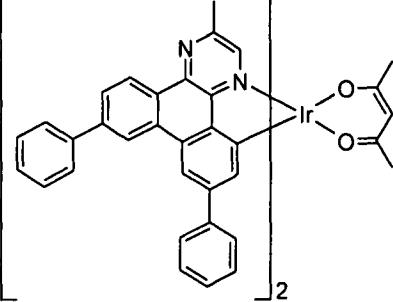
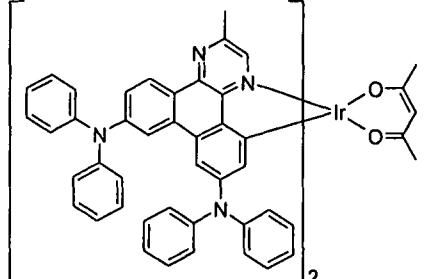
A-73之¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 0.38 (t, 6 H), 0.73 (s, 18 H), 1.48 (t, 6 H), 1.61 (q, 4 H), 2.87 (s, 6 H), 3.00 (q, 4 H), 5.56 (s, 1 H), 7.05 (d, 2 H), 7.69 (dd, 2 H), 8.03 (d, 2 H), 8.43 (s, 2 H), 8.55 (d, 2 H), 9.06 (br. s, 2 H)。

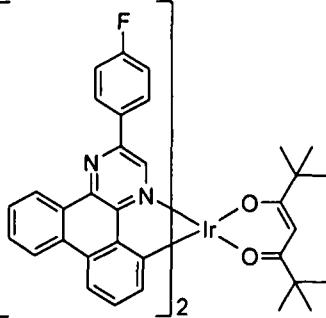
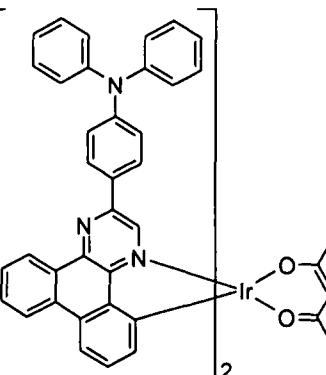
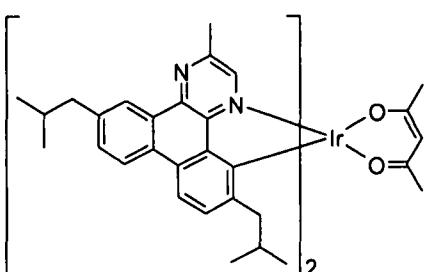
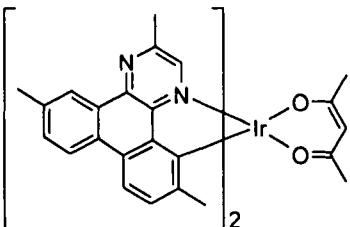
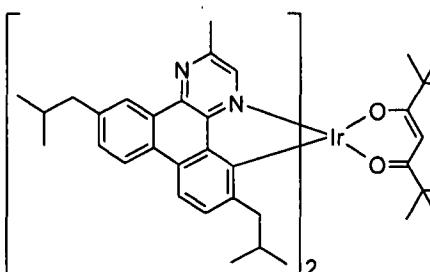
A-79之¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 0.27 (t, 6 H), 0.96-1.09 (m, 12 H), 1.40-1.52 (m, 8 H), 1.63 (s, 6 H), 1.59-1.76 (m, 2 H), 2.26-2.42 (m, 2 H), 2.86-3.06 (m, 8 H), 5.16 (s, 1 H), 7.04 (d, 2 H), 7.66 (dd, 2 H), 8.01 (d, 2 H), 8.48 (s, 2 H), 8.52 (d, 2 H), 9.06 (br. s, 2 H)。

對比錯合物CC-1至CC-7闡述於WO2009100991中。

在摻雜有各別鋮錯合物之薄聚合物膜上量測鋮錯合物之光致發光(PL)光譜。藉由下列程序來製備薄膜：藉由將1 g聚合物「PMMA 6N」(Evonik)溶於9 g二氯甲烷中來製備10%-w/w聚合物溶液，隨後攪拌一小時。將2 mg各別鋮錯合物添加至0.98 g PMMA溶液中，並繼續攪拌一分鐘。藉由使用具有60 μm間隙之膜施加器(360 2082型，Erichsen)進行刮塗來將溶液澆鑄於石英基板上，從而提供經摻雜聚合物薄膜(厚度約為6 μm)。利用積分球方法使用絕對PL量子產率量測系統(Absolute PL Quantum Yield Measurement System)(Hamamatsu，C9920-02型) (激發波長：400 nm)來量測該等膜之PL光譜及量子產率(Q.Y.)。相對於Ir(MDQ)₂ (acac) (CC-1)給出PL量子效率，如J.-P. Duan等人，Adv. Mat. 2003, 15, 224中所闡述，其中Ir(MDQ)₂ (acac)之PL量子產率(Q.Y.)值給出為100%。鋮錯合物摻雜之PMMA膜之PL O.Y.、λ_{max}、CIE x, y及FWHM展示於下表中：



化合物	鉻錯合物之結構	PL Q.Y.	λ_{\max} (nm)	CIE x, y	FWHM (nm)
CC-1		100%	615	0.62, 0.38	95
CC-2		101%	619	0.63, 0.37	94
CC-3		103%	612	0.62, 0.38	91
CC-4		100%	617	0.63, 0.37	98
CC-5		101%	621	0.65, 0.35	93

CC-6		100%	638	0.66, 0.34	94
CC-7		100%	628	0.67, 0.33	93
A-31		108%	618	0.64, 0.36	83
A-2		105%	618	0.64, 0.36	86
A-88		108%	621	0.65, 0.35	83

A-37		114%	612	0.63, 0.37	79
A-17		115%	619	0.64, 0.36	84
A-73		109%	623	0.65, 0.35	85
A-79		114%	613	0.63, 0.37	83

自上表顯而易見，本發明之銥錯合物展示較深紅色色指數坐標(CIE x,y)、較窄發射光譜以及發射光譜之較小半高全寬(FWHM)，此係由以下事實所致：與WO2009100991中所闡述R³及R⁸代表H之銥錯合物相比，R³及R⁸代表烷基。與EP1939208A1之教示內容相反，該效應可在並不引入芳基作為R¹下達成。

在摻雜有4%-w/w各別銥錯合物之薄α-NPD膜上量測銥錯合物之光致發光(PL)光譜。藉由下列程序來製備薄膜試樣：將1 mg各別銥錯

合物及24 mg α -NPD添加至2.5 mL二氯甲烷中並將混合物攪拌1-5分鐘。藉由使用具有30 μm 間隙之膜施加器(360 2082型，Erichsen)進行刮塗來將所得溶液澆鑄於石英基板上。如針對PMMA膜所闡述來量測PL光譜(激發波長：400 nm)。藉由下列程序來量測所製備膜中銥錯合物之磷光之壽命(τ_v)：為激發發射，使用較短雷射脈衝序列(THG Nd-YAG，355 nm，1 nsec脈衝長度，1 kHz重複頻率)。藉由時間解析光子計數技術以多通道標度法使用光電倍增管、鑑別器及多路定標器卡之組合(FAST ComTec GmbH，P7888型)來檢測發射。銥錯合物摻雜之 α -NPD膜之 τ_v 、 λ_{\max} 、CIE x, y及FWHM展示於下表中：

化合物	λ_{\max} (nm)	CIE x, y	FWHM (nm)	τ_v (μs)
CC-1	615	0.62, 0.38	90	1.83
CC-2	625	0.64, 0.36	99	1.64
CC-5	622	0.65, 0.35	92	3.15
A-31	627	0.65, 0.35	86	1.44
A-88	630	0.66, 0.34	86	1.53
A-17	625	0.65, 0.35	78	1.37
A-37	615	0.64, 0.36	72	1.30
A-79	617	0.64, 0.36	73	1.34

自上表顯而易見，本發明之銥錯合物展示較深紅色色指數坐標(CIE x,y)以及較窄發射光譜與發射光譜之較小半高全寬(FWHM)及減小之三重態壽命 τ_v ，此乃因以下事實：與WO2009100991中所闡述R³及R⁸代表H之銥錯合物相比，R³及R⁸代表烷基。

以濃度系列在摻雜有2%-w/w、5%-w/w或10%-w/w各別銥錯合物之薄 α -NPD膜上量測銥錯合物之光致發光(PL)光譜。藉由下列程序來製備該等濃度系列之 α -NPD膜試樣：將0.5 mg銥錯合物及24.5 mg α -NPD、1.25 mg銥錯合物及23.75 mg α -NPD、2.5 mg銥錯合物及22.5 mg α -NPD各自添加至2.5 ml二氯甲烷中。在將所有混合物攪拌1-5 min

之後，藉由使用具有30 μm間隙之膜施加器(360 2082型，Erichsen)進行刮塗來將溶液澆鑄於石英基板上。如上所述來量測PL光譜(激發波長：400 nm)。銻錯合物摻雜之 α -NPD膜之 λ_{\max} 、CIE x, y及FWHM展示於下表中：

	在 α -NPD中摻雜2%			在 α -NPD中摻雜5%			在 α -NPD中摻10%		
	λ_{\max} (nm)	CIE x, y	FWHM (nm)	λ_{\max} (nm)	CIE x, y	FWHM (nm)	λ_{\max} (nm)	CIE x, y	FWHM (nm)
CC-1	615	0.62 0.38	86	616	0.63 0.37	90	627	0.64 0.36	94
A-37	615	0.64 0.36	70	620	0.65 0.35	77	622	0.65 0.35	79
A-17	619	0.64 0.36	77	623	0.65 0.35	78	626	0.65 0.35	78
A-31	620	0.64 0.36	76	623	0.65 0.35	83	628	0.66 0.34	87
A-88	625	0.65 0.35	80	629	0.66 0.34	83	628	0.66 0.34	84

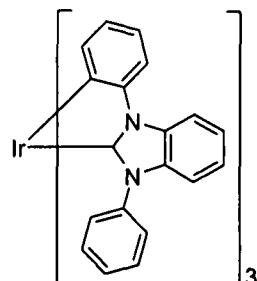
自上表顯而易見，本發明之銻錯合物在寬濃度範圍內展示較深紅色色指數坐標(CIE x,y)以及較窄發射光譜與發射光譜之較小半高全寬(FWHM)，此與施加所主張錯合物相關。色指數坐標(CIE x,y)亦可較不依賴於基質材料中所使用發射體之量，如在WO2009100991中所闡述銻錯合物之情形下。

比較應用實例1

首先使用丙酮/異丙醇混合物在超音波浴中清洗用作陽極之ITO基板。為消除任何可能之有機殘餘物，將基板在臭氧烘箱中再暴露於連續臭氧流25分鐘。此處理亦改良了ITO之電洞注入性質。然後旋塗Plexcore® OC AJ20-1000 (購自Plextronics公司)並乾燥以形成電洞注入

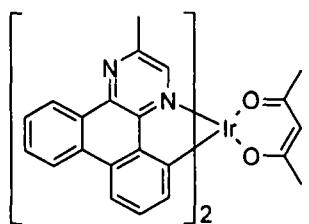
層(約40 nm)。

然後，以大約0.5-5 nm/min之速率在約 10^{-7} - 10^{-9} 毫巴下藉由氣相沈積將下文指定之有機材料施加至清潔基板上。對於電洞傳輸及激發

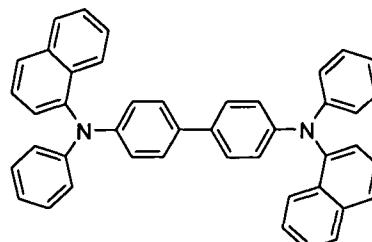


子阻斷劑而言，以20 nm之厚度將
[Ir(dpbiC)₃] (其製備
可參見專利申請案 WO2005/019373 中之銻錯合物(7))施加至基板上，
其中使前10 nm摻雜有MoO_x (約10%)以改良導電性。

隨後，藉由氣相沈積以20 nm之厚度施加10重量%發射體化合物



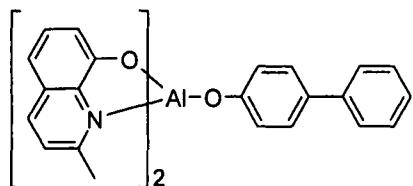
(CC-1) 及 90 重量% 化合物



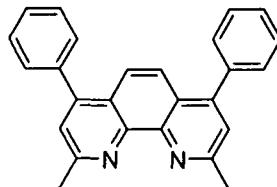
(α-NPD)

NPD)之混合物。

隨後，藉由氣相沈積以10 nm之厚度施加BAIq



作為阻斷劑。藉由氣相沈積以50 nm之厚度施



加摻雜有Cs₂CO₃之BCP 之額外層作為電子傳輸層，且
最後使用100 nm厚Al電極完成器件。

所有製造部分皆使用玻璃蓋及吸氣劑密封於惰性氮氣氛中。

為表徵OLED，在各種電流及電壓下記錄電致發光光譜。此外，

結合所發射之光輸出來量測電流-電壓特性。可藉由使用光度計進行校準來將光輸出轉化成光度參數。為測定壽命，在恆定電流密度下操作OLED且記錄光輸出之降低。將壽命定義為推進至亮度降低至初始亮度之一半時之時間。

比較應用實例2

如同對比應用實例之器件1來製備對比應用實例2之器件，只是使用化合物CC-3代替化合物CC-1

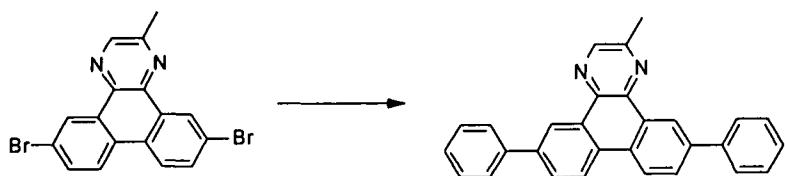
應用實例1及2

如同對比應用實例1之器件來製備應用實例1及2之器件，只是分別使用化合物A-79及(A-17)代替化合物CC-1。

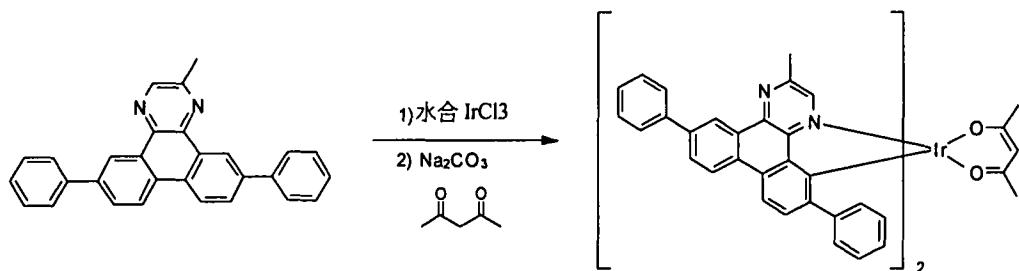
	λ_{\max}	CIE _x	CIE _y	FWHM	U[V]	cd/A	lm/W	EQE
對比應用實例1 (CC-1)	615	0.63	0.37	88	3.04	18.7	19.4	12.6
對比應用實例2 (CC-3)	608	0.62	0.38	84	3.06	28	28.8	16.1
應用實例1 (A-79)	614	0.64	0.36	71	3.35	25	23.5	16.2
應用實例2 (A-17)	619	0.65	0.35	76	3.38	22.4	20.9	16.7

自上表顯而易見，在高EQE下，本發明之鋁錯合物展示較深紅色指數坐標(CIE x,y)以及較窄發射光譜與發射光譜之較小半高全寬(FWHM)，此乃因以下事實：與WO2009100991中所闡述R³及R⁸代表H之鋁錯合物相比，R³及R⁸代表烷基。可參照圖1(其提供化合物CC-1及A-17之EL強度隨波長而變化之圖線)及圖2(其提供化合物CC-3及A-79之EL強度隨波長而變化之圖線)。

對比錯合物實例1 (錯合物CC-8 = WO2009/100991中所闡述之錯合物A-156)



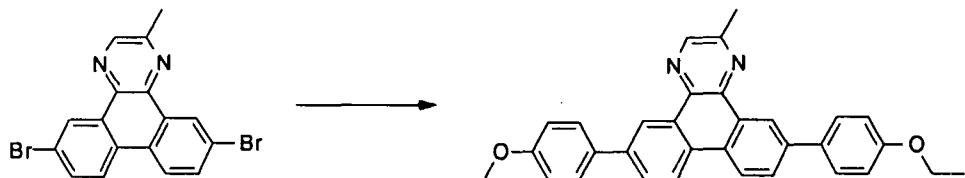
a) 在氬下，將 10.0 g (24.9 mmol) 6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]噁啉(配體實例 1b 之產物)及 9.1 g (74.6 mmol) 苯基硼酸懸浮於 250 ml 甲苯中。添加 0.22 g (1.0 mmol) 乙酸鈀(II) 及 1.23 g (3.0 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加 57.3 g (0.25 mol) 水合磷酸鉀。使用氬將反應混合物脫氣並將淺黃色懸浮液在回流下加熱兩小時。經由矽藻土(Celite)過濾熱灰色懸浮液，並使用 200 ml 熱甲苯將矽藻土層萃取若干次。在真空下濃縮所收集之洗脫液並將所得固體自乙醇重結晶，從而得到白色固體形式之標題產物(產量：5.1 g (52%)。熔點：288-290°C。¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 2.80 (s, 3 H), 7.32-7.40 (m, 2 H), 7.43-7.52 (m, 4 H), 7.81 (d, 4 H), 7.94-8.01 (m, 2 H), 8.63 (d, 2 H), 8.74 (s, 1 H), 9.39 (d, 1 H), 9.45 (d, 1 H)。



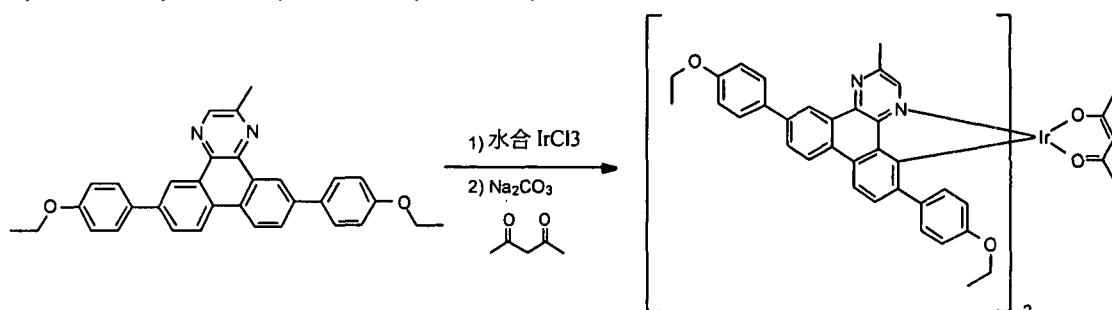
b) 首先根據針對二鋨錯合物實例 1 所報告之程序使用 1.11 g (2.8 mmol) 對比錯合物實例 2a) 之產物、0.48 g (1.3 mmol) 水合氯化鋨(III) 及 30 ml 2-乙氧基乙醇來製備二鋨錯合物中間體，從而得到橙色粉末形式之二鋨錯合物中間體 (1.24 g, 92%)。在下一步驟中，根據錯合物實例 1 使用 1.19 g (0.58 mmol) 之前分離之二鋨錯合物中間體、0.62 g (5.8 mmol) 碳酸鈉、0.47 g (4.7 mmol) 乙醯基丙酮及 20 ml 2-乙氧基乙醇來製備對比錯合物 CC-8，從而在充分純化之後得到橙色粉末形式之對比錯合物 CC-8 (1.08 g, 85%)，其中在 250 nm UV 檢測下之 HPLC

純度 >99%。APCI-LC-MS (負離子, m/z)：準確質量 = 1082.32 g/mol；實驗值：1082.1 [M]⁺。APCI-LC-MS (負離子, m/z)：準確質量 = 1082.32 g/mol；實驗值：1083.2 [M+1]⁺。

對比錯合物實例2 (錯合物CC-9 = WO2009/100991中所闡述之錯合物A-18)



a)在氬下，將 8.0 g (19.9 mmol) 6,11-二溴-2-甲基二苯并[f,h]喹噁啉(配體實例1b之產物)及 9.91 g (59.7 mmol) 4-乙氧基苯基硼酸懸浮於 250 ml 甲苯中。添加 0.18 g (0.8 mmol) 乙酸鈀(II) 及 0.98 g (2.4 mmol) 2-二環己基-膦基-2',6'-二甲氧基聯苯，隨後添加 45.8 g (0.20 mol) 水合磷酸鉀。使用氬將反應混合物脫氣並將灰色懸浮液在回流下加熱 21 小時。經由矽藻土過濾熱灰色懸浮液，並使用 200 ml 熱甲苯將矽藻土層萃取若干次。在真空下濃縮所收集之洗脫液，從而得到淺黃色固體形式之標題產物(產量：4.0 g (41%)。熔點：310-312°C。¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃): δ = 1.45-1.56 (m, 6 H), 2.90 (s, 3 H), 4.11-4.20 (m, 4 H), 7.04-7.13 (m, 4 H), 7.84 (d, 4 H), 7.98-8.07 (m, 2 H), 8.68 (d, 2 H), 8.83 (s, 1 H), 9.43 (d, 1 H), 9.49 (d, 1 H)。



b)首先根據針對二鋨錯合物實例1所報告之程序使用 1.3 g (2.7 mmol) 對比錯合物實例2a)之產物、0.46 g (1.3 mmol) 水合氯化鋨(III) 及 50 ml 2-乙氧基乙醇來製備二鋨錯合物中間體，從而得到紅色粉末

形式之二鉻錯合物中間體(1.50 g, 99%)。在下一步驟中，根據錯合物實例1使用1.5 g (0.63 mmol)之前分離之二鉻錯合物中間體、0.67 g (6.3 mmol)碳酸鈉、0.5 g (5.0 mmol)乙醯基丙酮及20 ml 2-乙氧基乙醇來製備對比錯合物CC-9，從而在充分純化之後得到紅色粉末形式之標題錯合物(1.49 g, 94%)。

如上所述在PMMA膜中量測錯合物CC-1、CC-8、A-37及A-17之光致發光光譜且展示於下表中。

化合物	鉻錯合物之結構	PL Q.Y.	λ_{\max} (nm)	CIE x, y
CC-1		100%	615	0.62, 0.38
CC-8		111%	587	0.57, 0.43
A-37		114%	612	0.63, 0.37
A-17		115%	619	0.64, 0.36

自上表顯而易見，與本發明錯合物相比，對比錯合物CC-8並不

產生較深紅色點。CC-8展示發射光譜具有較大綠色偏移且CIE x,y為(0.57, 0.43)，此乃因附接至R³及R⁸位置之苯基產生延長之共軛。錯合物CC-8在低至10⁻⁶至10⁻⁷毫巴之壓力下並不昇華且並不適用於真空沈積製程，但溫度增加會導致降解。錯合物CC-8之熱重分析(TGA)展示重量損失且起始溫度為240-250°C。與之相比，本發明錯合物基於極高熱穩定性及揮發性展示>70-80%之高昇華產率，且TGA之起始溫度高於330°C。

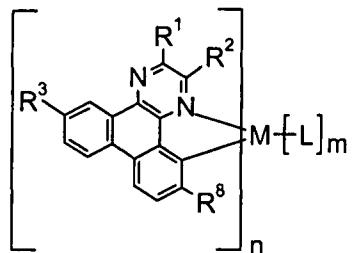
錯合物CC-9不溶且在低至10⁻⁶至10⁻⁷毫巴之壓力下並不昇華且並不適用於真空沈積製程，但溫度增加會導致降解。錯合物CC-9之熱重分析(TGA)展示重量損失且起始溫度為200-210°C。本發明錯合物基於極高熱穩定性及揮發性展示>70-80%之高昇華產率，且TGA之起始溫度高於330°C。

【符號說明】

(無)

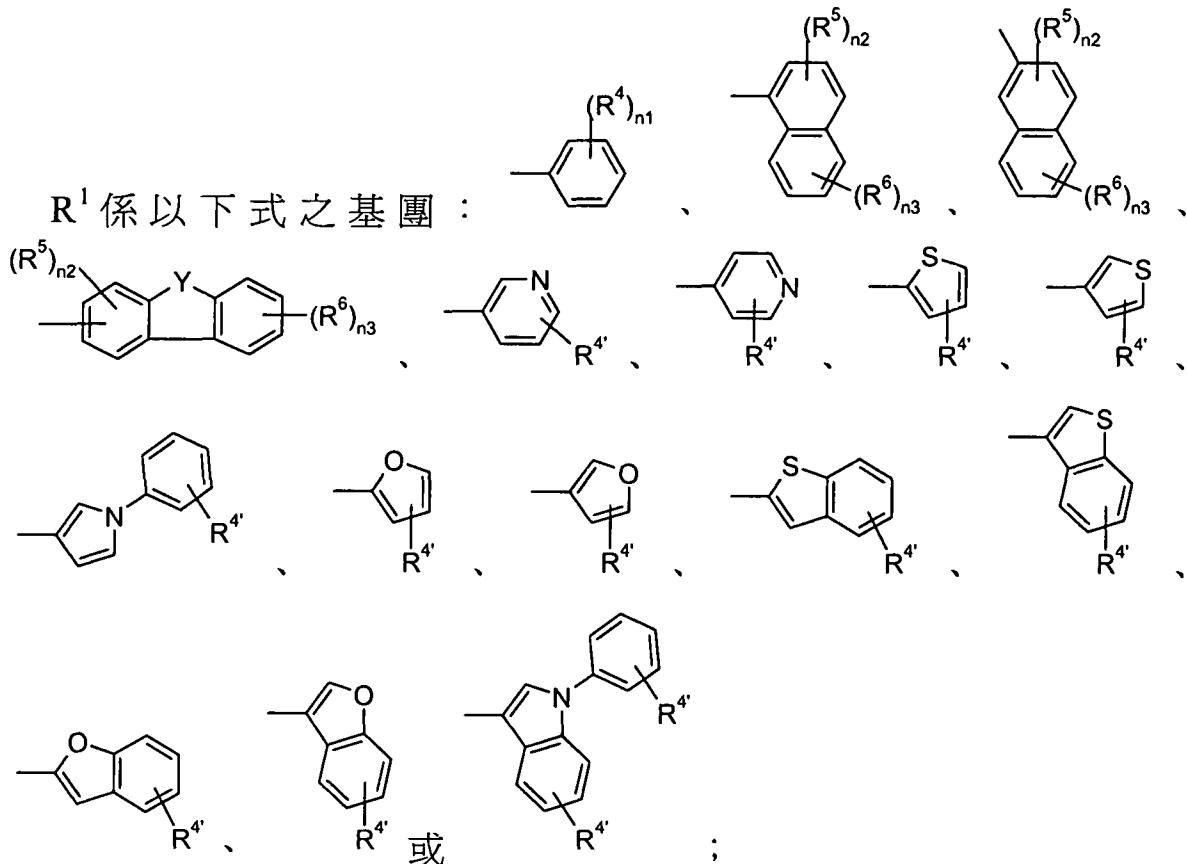
申請專利範圍

1. 一種下式之化合物，



(I)，其中

R^1 係H； C_3-C_8 環烷基，其視情況經 C_1-C_8 烷基或 C_1-C_8 全氟烷基取代；或 C_1-C_8 烷基，或



R^2 係H或 C_1-C_8 烷基，或

R^1 及 R^2 一起形成環- $(CH_2)_3-$ 或- $(CH_2)_4-$ ，其視情況經一個或兩個 C_1-C_8 烷基及/或一個或兩個 C_1-C_8 全氟烷基取代，

R^3 及 R^8 彼此獨立地係 C_1-C_8 烷基、- $Si(C_1-C_8\text{烷基})_3$ 或 C_3-C_8 環烷基；

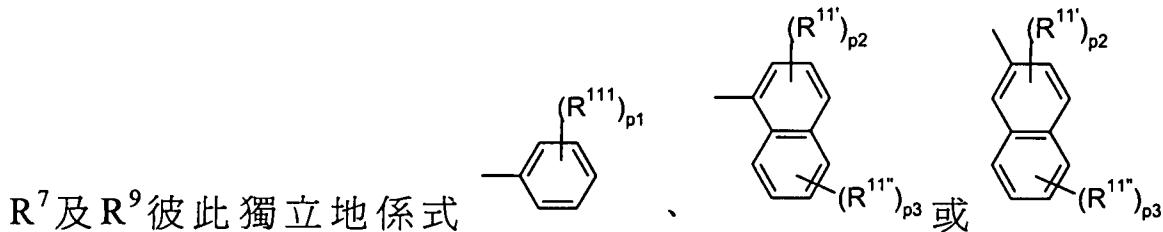
n₁為0或1至5之整數，n₂為0或1至3之整數，n₃為0或1至4之整數，

Y係-O-、-S-、-NR³⁰-或-CR³¹R³²-；

R⁴係C₁-C₈烷基、環己基、F、C₁-C₈全氟烷基或NR⁷R⁹，

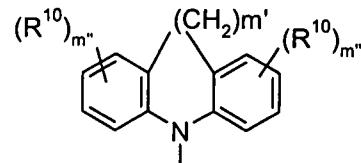
R^{4'}係H、C₁-C₈烷基、環己基或C₁-C₈全氟烷基，

R⁵及R⁶彼此獨立地係C₁-C₈烷基或環己基；



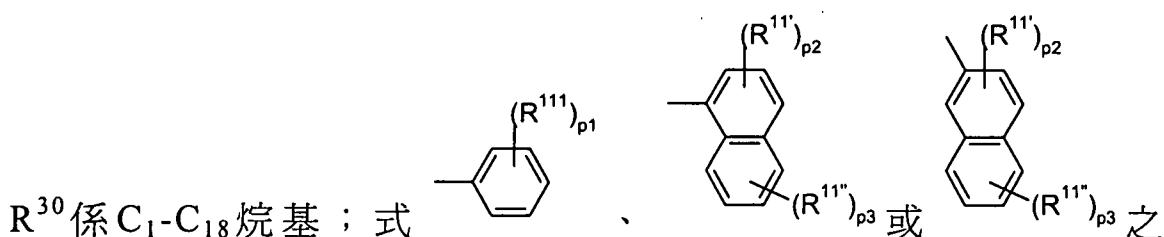
之基團，

R¹¹¹、R^{11'}及R^{11''}彼此獨立地係C₁-C₈烷基或C₁-C₈烷氧基；或



R⁷及R⁹與其所鍵結之氮原子一起形成式之基團；m'為0、1或2；m"在每次出現時可相同或不同且為0、1、2或3；

R¹⁰在每次出現時可相同或不同且係C₁-C₈烷基或C₃-C₈環烷基，



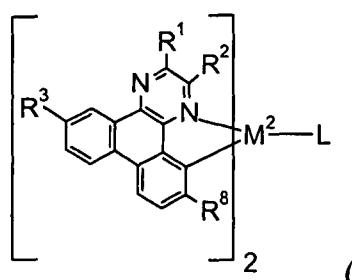
之基團，

p₁為0或1至3之整數，p₂為0或1至2之整數，p₃為0或1至2之整數，

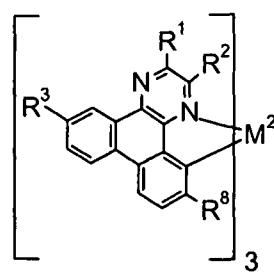
R³¹及R³²彼此獨立地係氫、C₁-C₁₈烷基、C₇-C₂₅芳基烷基或苯基，其視情況可經C₁-C₈烷基及/或C₁-C₈烷氧基取代一至三次，

M係Pt、Pd、Rh、Ir或Re，
 L係單齒或二齒配體，
 若L係單齒配體，
 若M係Pd或Pt，則m為0或2，且n為1或2，
 若M係Rh、Ir或Re，則m為0、2或4，且n為1、2或3，
 若L係二齒配體，
 若M係Pd或Pt，則m為0或1，且n為1或2，
 若M係Rh、Ir或Re，則m為0、1或2，且n為1、2或3。

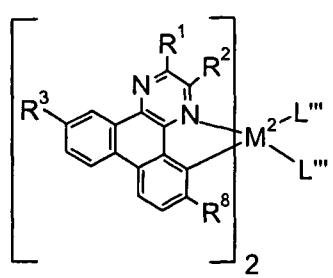
2. 如請求項1之化合物，其具有下文之結構(Va)、(Vb)、(Vc)、(VIa)、(VIb)或(VIc)：



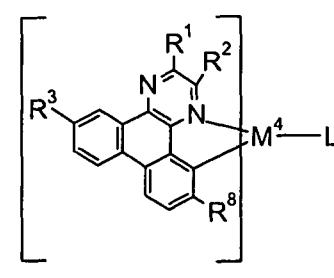
(Va)、



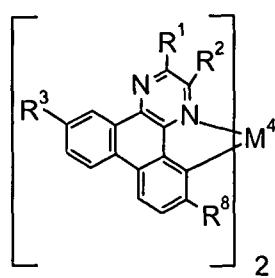
(Vb)、



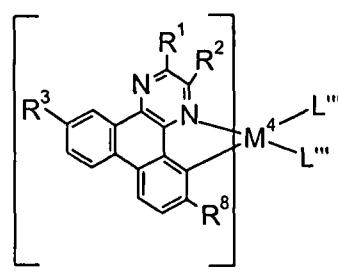
(Vc)、



(VIa)、



(VIb)或



(VIc)，其中

M²係Rh、Ir或Re，

M⁴係Pd或Pt，

L係二齒配體，且

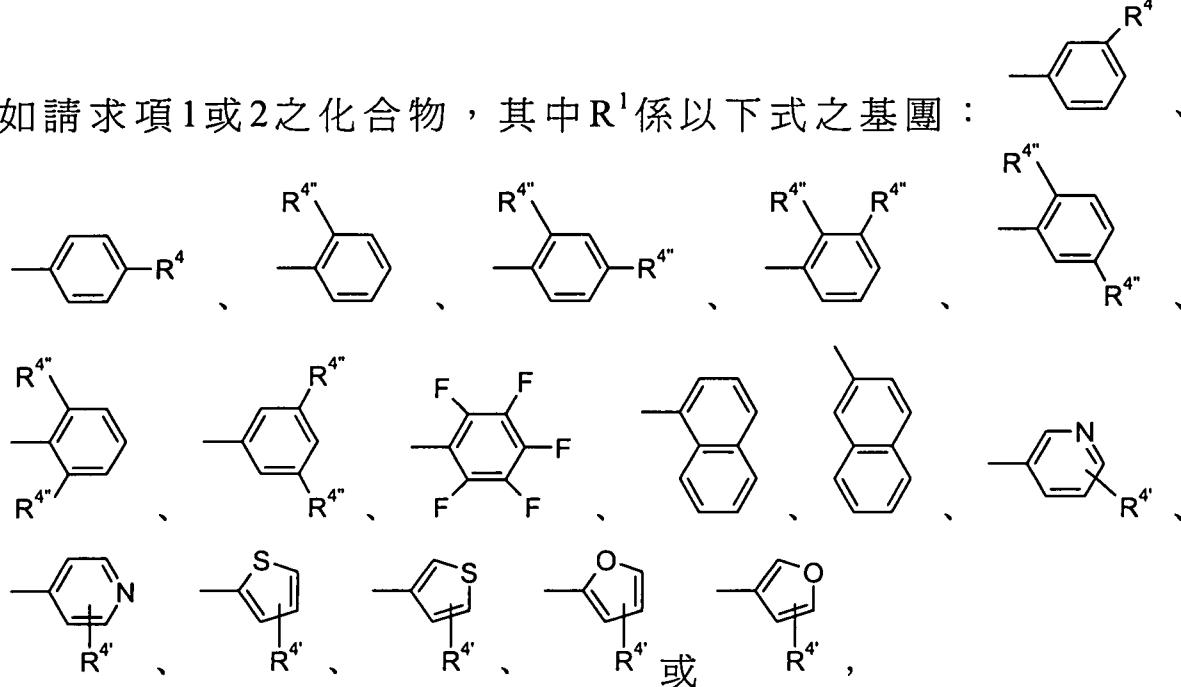
L^{'''}係單齒配體，且

R¹、R²、R³及R⁸係如請求項1中所定義。

3. 如請求項1或2之化合物，其中R¹係C₃-C₈環烷基，其視情況經一個或兩個C₁-C₈烷基及/或一個或兩個C₁-C₈全氟烷基取代；或C₁-C₈烷基；或

R¹及R²一起形成環-(CH₂)₃-或-(CH₂)₄-，其視情況經一個或兩個C₁-C₈烷基及/或一個或兩個C₁-C₈全氟烷基取代。

4. 如請求項1或2之化合物，其中R¹係以下式之基團：

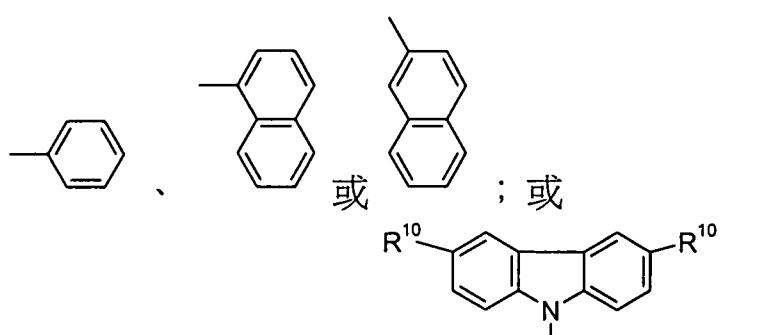


R⁴係C₁-C₈烷基、CF₃或NR⁷R⁹，

R^{4'}係H、CF₃或C₁-C₈烷基，

R^{4''}係C₁-C₈烷基或CF₃，

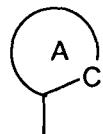
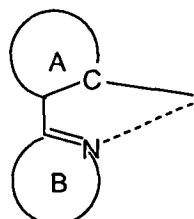
R⁷及R⁹彼此獨立地係



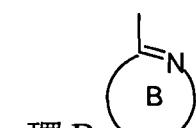
R⁷及R⁹與其所鍵結之氮原子一起形成式之基團：

R^{10} 係H或 C_1-C_8 烷基，且
 R^2 係H。

5. 如請求項1至4中任一項之化合物，其中 R^3 及 R^8 係 C_1-C_8 烷基、-
 $Si(C_1-C_4$ 烷基)₃或 C_3-C_6 環烷基。
6. 如請求項1至5中任一項之化合物，其中該二齒配體L係式

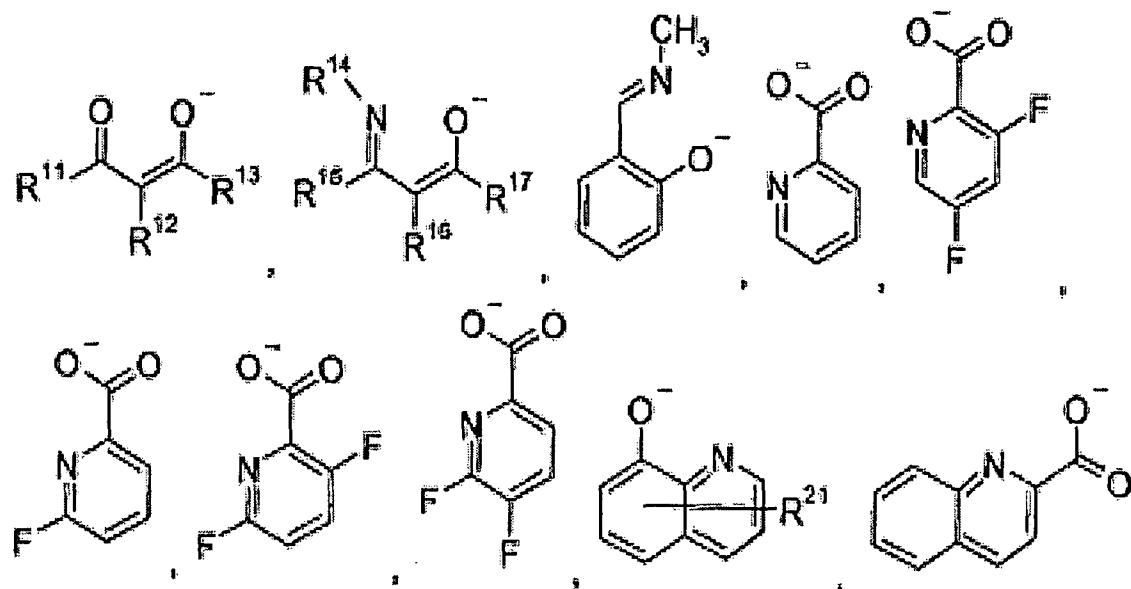


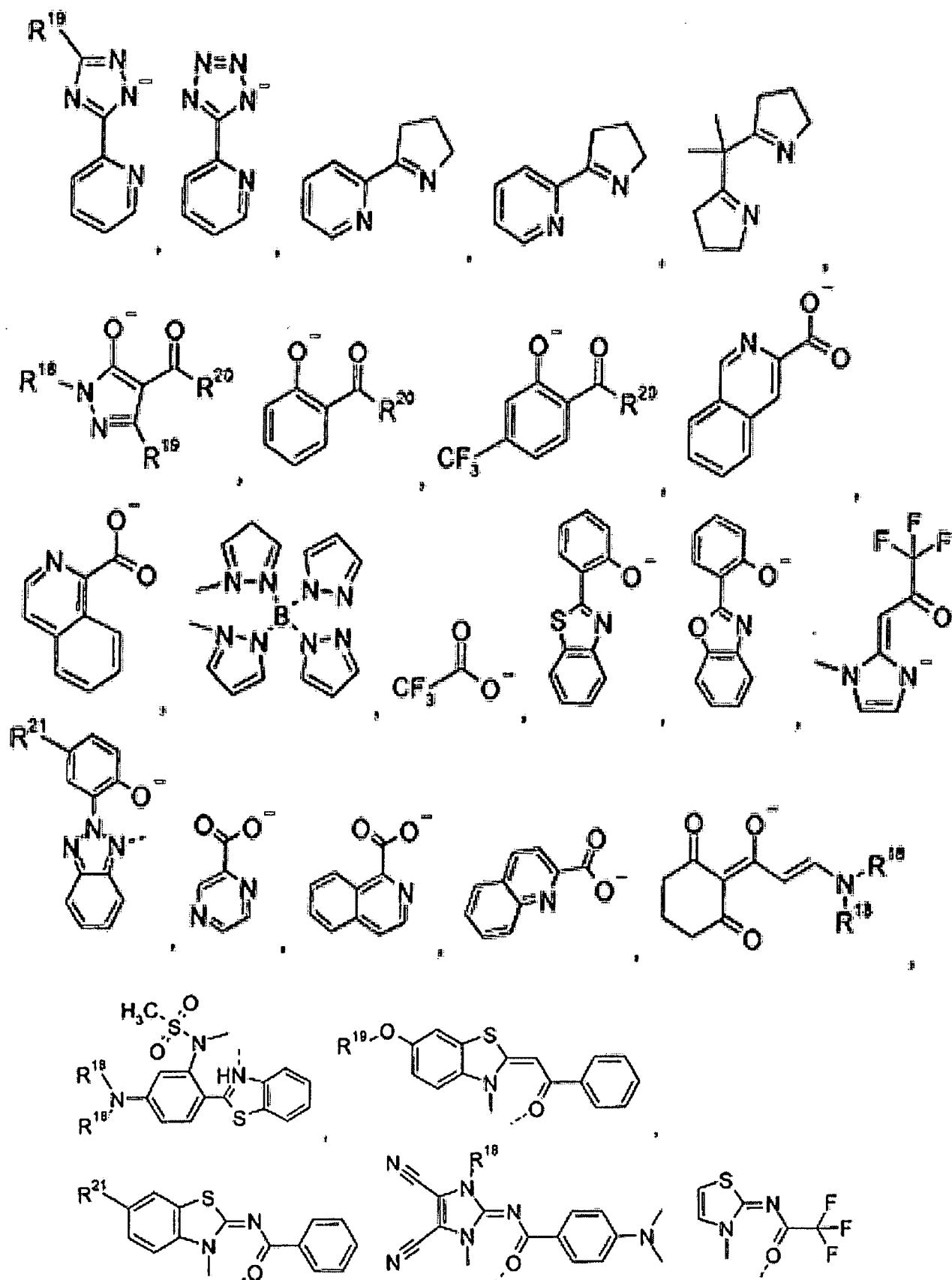
之化合物，其中環A 代表可視情況含有雜原子之
視情況經取代之芳基，

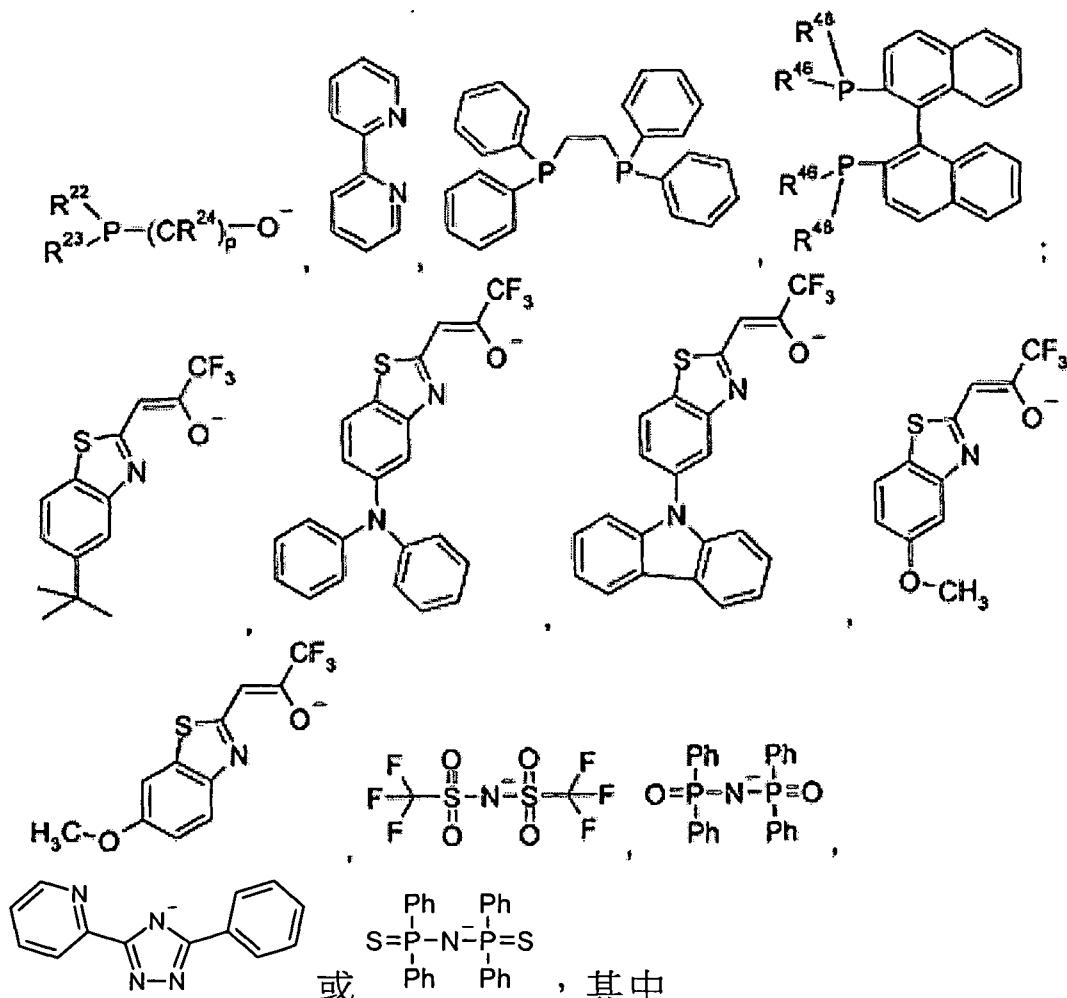


環B 代表視情況經取代之含氮芳基，其可視情況含有其
他雜原子，或該環A可連同結合至該環A之該環B一起形成環；
或

L係選自以下之二齒配體L'：







R^{11} 及 R^{15} 彼此獨立地係氫； $C_1\text{-}C_8$ 烷基； $C_6\text{-}C_{18}$ 芳基，其可視情況經 $C_1\text{-}C_8$ 烷基取代；環戊基，其可視情況經 $C_1\text{-}C_8$ 烷基或苯基取代；環己基，其可視情況經 $C_1\text{-}C_8$ 烷基或苯基取代； $C_2\text{-}C_{10}$ 雜芳基或 $C_1\text{-}C_8$ 全氟烷基，

R^{12} 及 R^{16} 彼此獨立地係氫、 $C_6\text{-}C_{18}$ 芳基或 $C_1\text{-}C_8$ 烷基，或

R^{12} 係式 $\begin{array}{c} O \\ | \\ R^{11}-C(=O)-C(R^{13})-C(=O)-R^{13} \end{array}$ 之基團，

R^{13} 及 R^{17} 彼此獨立地係氫、 $C_1\text{-}C_8$ 烷基、 $C_6\text{-}C_{18}$ 芳基、 $C_2\text{-}C_{10}$ 雜芳基、 $C_1\text{-}C_8$ 全氟烷基或 $C_1\text{-}C_8$ 烷氧基，且

R^{14} 係 $C_1\text{-}C_8$ 烷基、 $C_6\text{-}C_{10}$ 芳基或 $C_7\text{-}C_{11}$ 芳烷基，

R^{18} 係 $C_6\text{-}C_{10}$ 芳基，

R^{19} 係 $C_1\text{-}C_8$ 烷基或 $C_1\text{-}C_8$ 全氟烷基，

R^{20} 係氫、 C_1-C_8 烷基或 C_6-C_{10} 芳基，

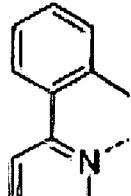
R^{21} 係氫、 C_1-C_8 烷基或 C_1-C_8 烷氧基，其可部分地或完全氟化，

R^{22} 及 R^{23} 彼此獨立地係 $C_q(H+F)_{2q+1}$ 或 $C_6(H+F)_5$ ，

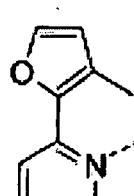
R^{24} 在每次出現時可相同或不同且係選自H或 $C_q(H+F)_{2q+1}$ ，

R^{46} 係 C_1-C_8 烷基、 C_6-C_{18} 芳基或經 C_1-C_8 烷基取代之 C_6-C_{18} 芳基，

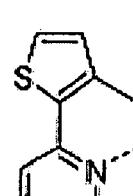
q 為1至24之整數， p 為2或3，或L係選自以下之二齒配體 L'' ：



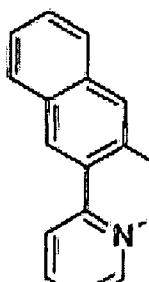
(X-1),



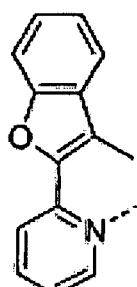
(X-2),



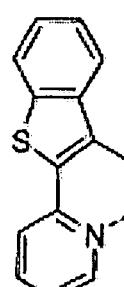
(X-3),



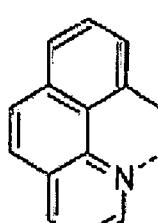
(X-4),



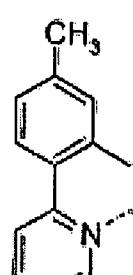
(X-5),



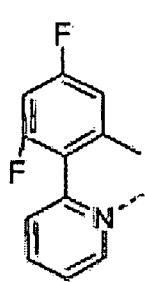
(X-6),



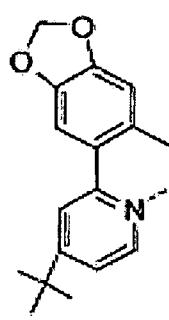
(X-7),



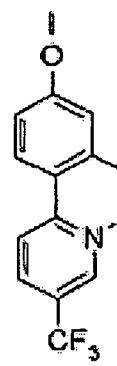
(X-8),



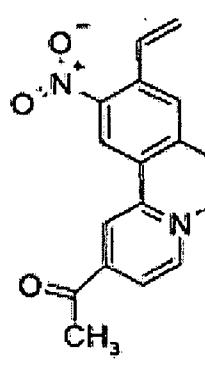
(X-9),



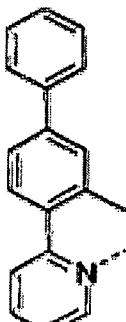
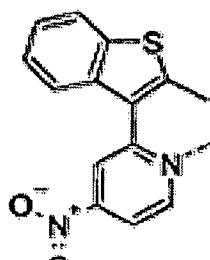
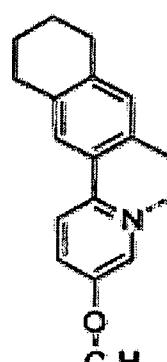
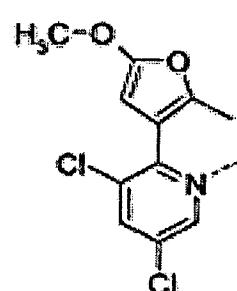
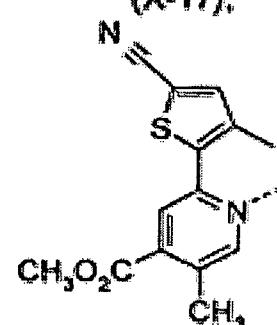
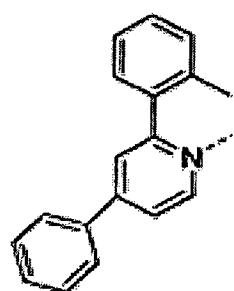
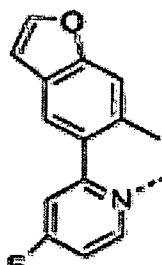
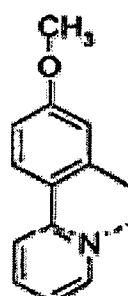
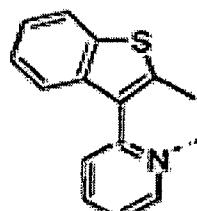
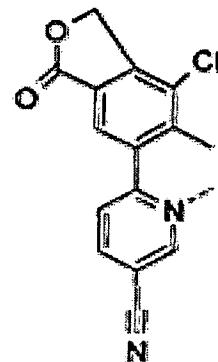
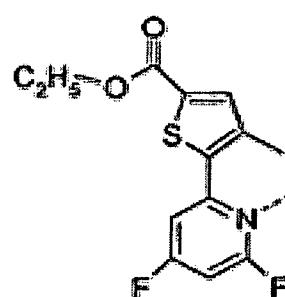
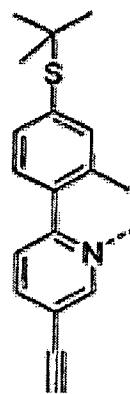
(X-10),

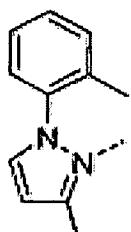
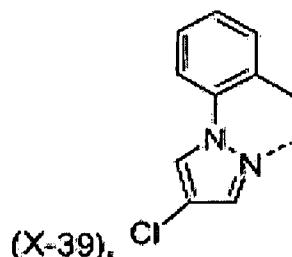
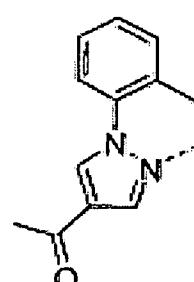
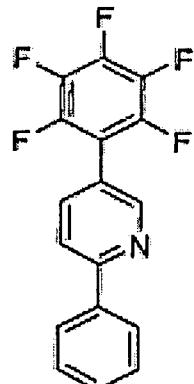
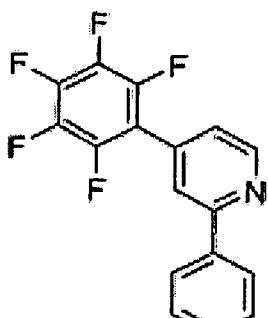
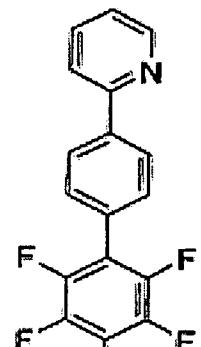
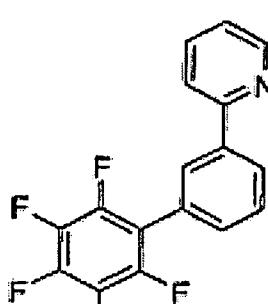
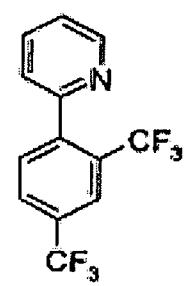
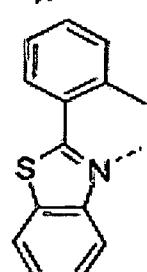
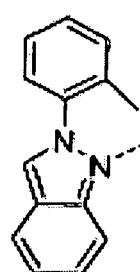
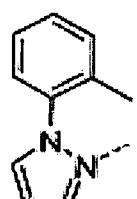
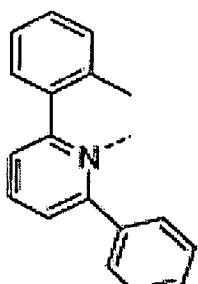
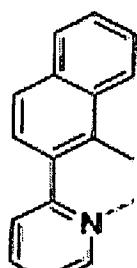
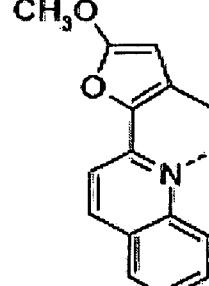
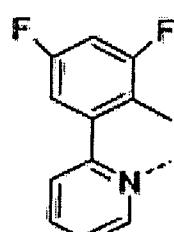
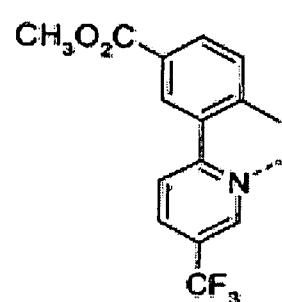
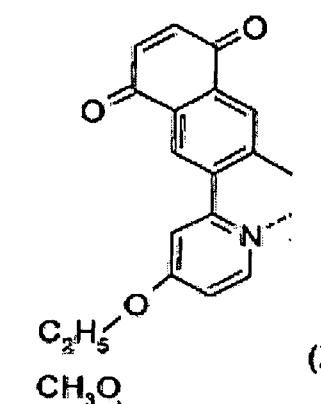


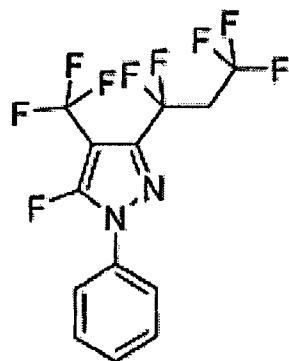
(X-11),



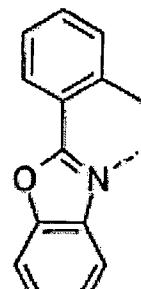
(X-12),



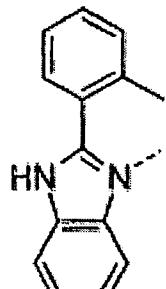




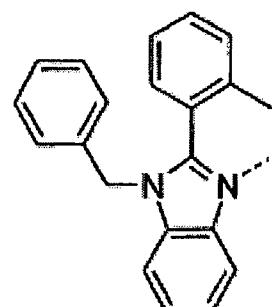
(X-42),



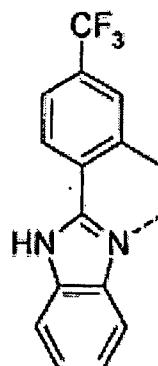
(X-43),



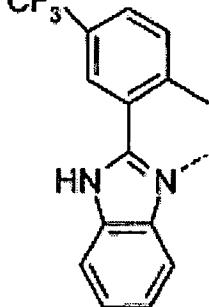
(X-44),



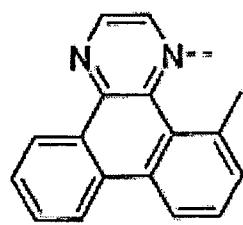
(X-45),



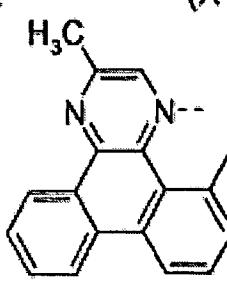
(X-46),



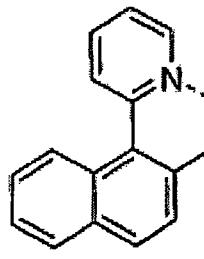
(X-47),



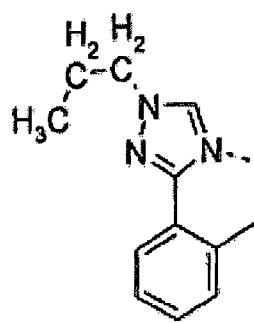
(X-48),



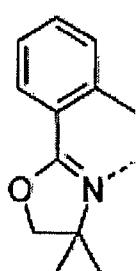
(X-49),



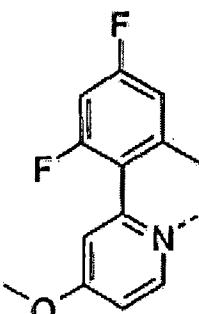
(X-50),



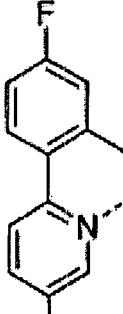
(X-51),



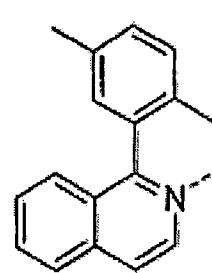
(X-52),



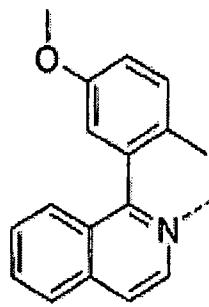
(X-53),



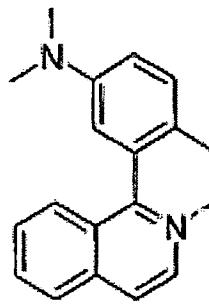
(X-54),



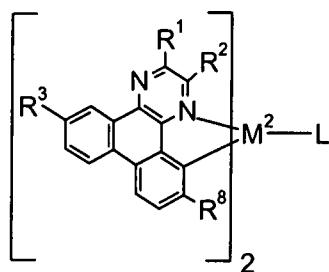
(X-55),



(X-56), 或



(X-57).



7. 如請求項6之化合物，其係式

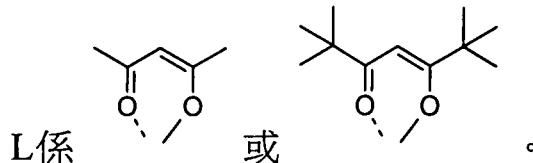
M^2 係鋁，

R^1 係 C_1-C_8 烷基，

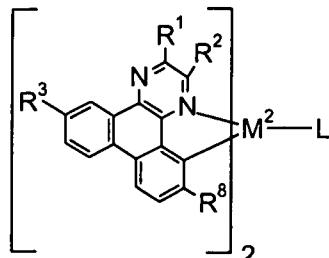
R^2 係H；或

R^1 及 R^2 一起形成環- $(CH_2)_3$ -或- $(CH_2)_4$ -，其視情況經一個或兩個 C_1-C_8 烷基取代，

R^3 及 R^8 係 C_1-C_8 烷基、- $Si(C_1-C_4$ 烷基) $_3$ 或 C_3-C_6 環烷基，且

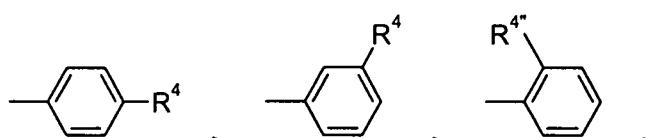


L 係 或 。

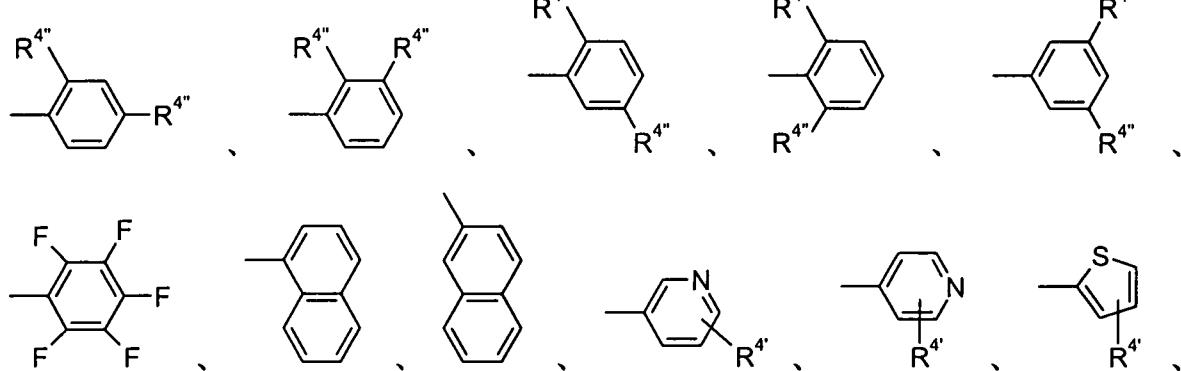


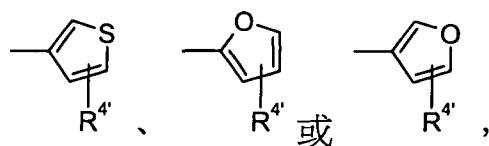
8. 如請求項6之化合物，其係式

M^2 係鋁，



R^1 係以下式之基團：





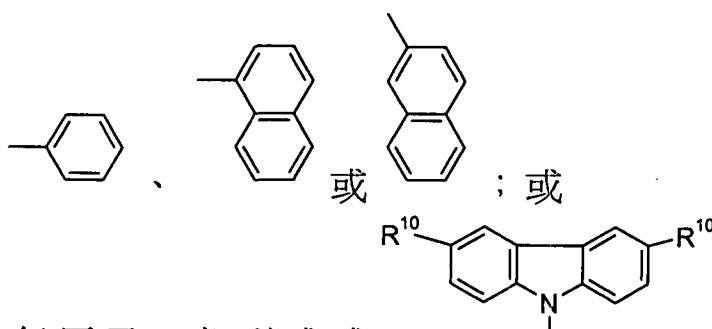
R^2 係H：

R^4 係 C_1-C_8 烷基、 CF_3 或 NR^7R^9 ，

$R^{4''}$ 係H、 CF_3 或 C_1-C_8 烷基，

$R^{4''}$ 係 C_1-C_8 烷基或 CF_3 ，

R^7 及 R^9 彼此獨立地係



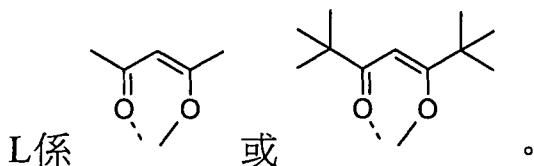
R^7 及 R^9 與其所鍵結之氮原子一起形成式

之

基團；

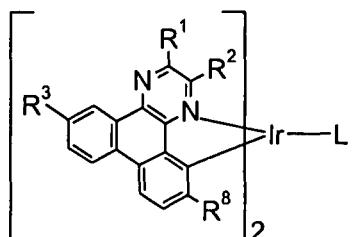
R^{10} 係H或 C_1-C_8 烷基，

R^3 及 R^8 係 C_1-C_8 烷基、 $-Si(C_1-C_4\text{烷基})_3$ 或 C_3-C_6 環烷基；且



L 係

9. 如請求項1之化合物，



化合物	L	R^1	R^2	R^3 及 R^8
A-1	$A^{1)}$	H	H	$-CH_3$
A-2	$A^{1)}$	$-CH_3$	H	$-CH_3$
A-3	$A^{1)}$	$-CH_2CH_3$	H	$-CH_3$
A-4	$A^{1)}$	正丙基	H	$-CH_3$
A-5	$A^{1)}$	異丙基	H	$-CH_3$

A-6	A ¹⁾	正丁基	H	-CH ₃
A-7	A ¹⁾	第二丁基	H	-CH ₃
A-9	A ¹⁾	異丁基	H	-CH ₃
A-10	A ¹⁾	第三丁基	H	-CH ₃
A-11	A ¹⁾	新戊基	H	-CH ₃
A-12	A ¹⁾	2-乙基己基	H	-CH ₃
A-13	A ¹⁾	環戊基	H	-CH ₃
A-14	A ¹⁾	環己基	H	-CH ₃
A-15	A ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		-CH ₃
A-16	A ¹⁾	H	H	-CH ₂ CH ₃
A-17	A ¹⁾	-CH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
A-18	A ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
A-19	A ¹⁾	正丙基	H	-CH ₂ CH ₃
A-20	A ¹⁾	異丙基	H	-CH ₂ CH ₃
A-21	A ¹⁾	正丁基	H	-CH ₂ CH ₃
A-22	A ¹⁾	第二丁基	H	-CH ₂ CH ₃
A-23	A ¹⁾	異丁基	H	-CH ₂ CH ₃
A-24	A ¹⁾	第三丁基	H	-CH ₂ CH ₃
A-25	A ¹⁾	新戊基	H	-CH ₂ CH ₃
A-26	A ¹⁾	2-乙基己基	H	-CH ₂ CH ₃
A-27	A ¹⁾	環戊基	H	-CH ₂ CH ₃
A-28	A ¹⁾	環己基	H	-CH ₂ CH ₃
A-29	A ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		-CH ₂ CH ₃
A-30	A ¹⁾	H	H	異丁基
A-31	A ¹⁾	-CH ₃	H	異丁基
A-32	A ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	異丁基
A-33	A ¹⁾	正丙基	H	異丁基
A-34	A ¹⁾	異丙基	H	異丁基
A-35	A ¹⁾	正丁基	H	異丁基
A-36	A ¹⁾	第二丁基	H	異丁基

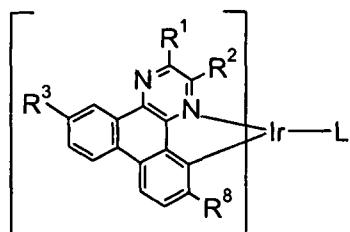


A-37	A ¹⁾	異丁基	H	異丁基
A-38	A ¹⁾	第三丁基	H	異丁基
A-39	A ¹⁾	新戊基	H	異丁基
A-40	A ¹⁾	2-乙基己基	H	異丁基
A-41	A ¹⁾	環戊基	H	異丁基
A-42	A ¹⁾	環己基	H	異丁基
A-43	A ¹⁾	- $(CH_2)_4-$		異丁基
A-44	A ¹⁾	H	H	新戊基
A-45	A ¹⁾	-CH ₃	H	新戊基
A-46	A ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	新戊基
A-47	A ¹⁾	正丙基	H	新戊基
A-48	A ¹⁾	異丙基	H	新戊基
A-49	A ¹⁾	正丁基	H	新戊基
A-50	A ¹⁾	第二丁基	H	新戊基
A-51	A ¹⁾	異丁基	H	新戊基
A-52	A ¹⁾	第三丁基	H	新戊基
A-53	A ¹⁾	新戊基	H	新戊基
A-54	A ¹⁾	2-乙基己基	H	新戊基
A-55	A ¹⁾	環戊基	H	新戊基
A-56	A ¹⁾	環己基	H	新戊基
A-57	A ¹⁾	- $(CH_2)_4-$		新戊基
A-58	B ¹⁾	H	H	-CH ₃
A-59	B ¹⁾	-CH ₃	H	-CH ₃
A-60	B ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃
A-61	B ¹⁾	正丙基	H	-CH ₃
A-62	B ¹⁾	異丙基	H	-CH ₃
A-63	B ¹⁾	正丁基	H	-CH ₃
A-64	B ¹⁾	第二丁基	H	-CH ₃
A-65	B ¹⁾	異丁基	H	-CH ₃
A-66	B ¹⁾	第三丁基	H	-CH ₃

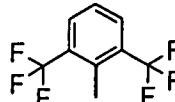
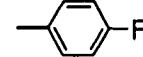
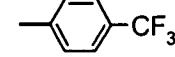
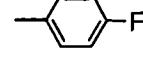
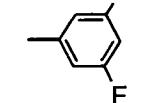
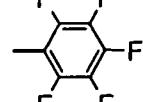
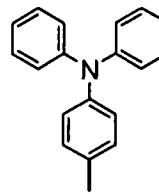
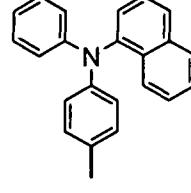
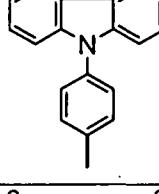
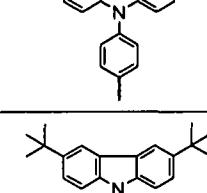
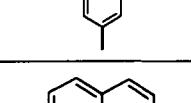
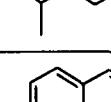
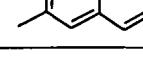
A-67	B ¹⁾	新戊基	H	-CH ₃
A-68	B ¹⁾	2-乙基己基	H	-CH ₃
A-69	B ¹⁾	環戊基	H	-CH ₃
A-70	B ¹⁾	環己基	H	-CH ₃
A-71	B ¹⁾		-(CH ₂) ₄ -	異丁基
A-72	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
A-73	B ¹⁾		-CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-74	B ¹⁾		-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃
A-75	B ¹⁾		正丙基	-CH ₂ CH ₃
A-76	B ¹⁾		異丙基	-CH ₂ CH ₃
A-77	B ¹⁾		正丁基	-CH ₂ CH ₃
A-78	B ¹⁾		第二丁基	-CH ₂ CH ₃
A-79	B ¹⁾		異丁基	-CH ₂ CH ₃
A-80	B ¹⁾		第三丁基	-CH ₂ CH ₃
A-81	B ¹⁾		新戊基	-CH ₂ CH ₃
A-82	B ¹⁾		2-乙基己基	-CH ₂ CH ₃
A-83	B ¹⁾		環戊基	-CH ₂ CH ₃
A-84	B ¹⁾		環己基	-CH ₂ CH ₃
A-85	B ¹⁾		-(CH ₂) ₄ -	異丁基
A-86	B ¹⁾		-(CH ₂) ₄ -	-CH ₂ CH ₃
A-87	B ¹⁾		H	異丁基
A-88	B ¹⁾		-CH ₃	異丁基
A-89	B ¹⁾		-CH ₂ CH ₃	異丁基
A-90	B ¹⁾		正丙基	異丁基
A-91	B ¹⁾		異丙基	異丁基
A-92	B ¹⁾		正丁基	異丁基
A-93	B ¹⁾		第二丁基	異丁基
A-94	B ¹⁾		異丁基	異丁基
A-95	B ¹⁾		第三丁基	異丁基
A-96	B ¹⁾		新戊基	異丁基

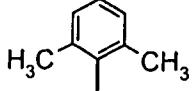
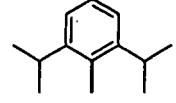
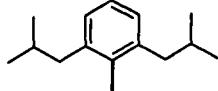
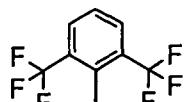
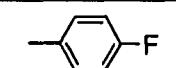
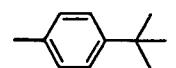
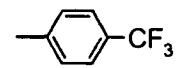
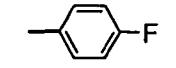
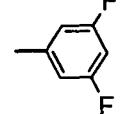
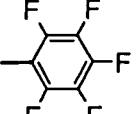
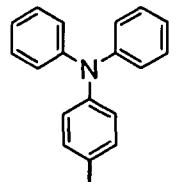
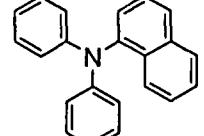
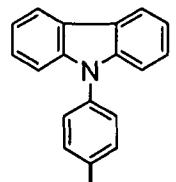


A-97	B ¹⁾	2-乙基己基	H	異丁基
A-98	B ¹⁾	環戊基	H	異丁基
A-99	B ¹⁾	環己基	H	異丁基
A-100	B ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		異丁基
A-101	B ¹⁾	H	H	新戊基
A-102	B ¹⁾	-CH ₃	H	新戊基
A-103	B ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	新戊基
A-104	B ¹⁾	正丙基	H	新戊基
A-105	B ¹⁾	異丙基	H	新戊基
A-106	B ¹⁾	正丁基	H	新戊基
A-107	B ¹⁾	第二丁基	H	新戊基
A-108	B ¹⁾	異丁基	H	新戊基
A-109	B ¹⁾	第三丁基	H	新戊基
A-110	B ¹⁾	新戊基	H	新戊基
A-111	B ¹⁾	2-乙基己基	H	新戊基
A-112	B ¹⁾	環戊基	H	新戊基
A-113	B ¹⁾	環己基	H	新戊基
A-114	B ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		新戊基

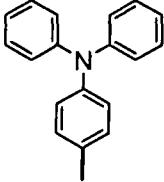
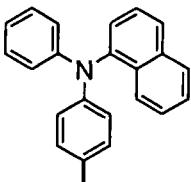
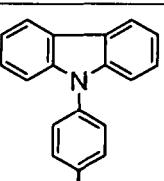
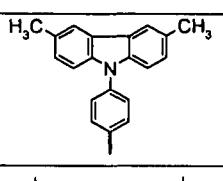
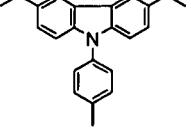
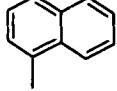
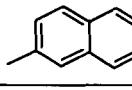
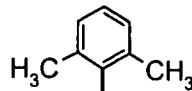
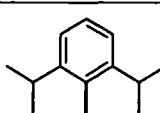
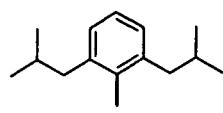
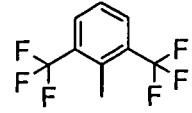
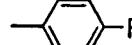
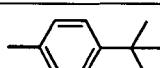


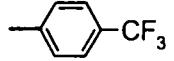
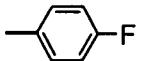
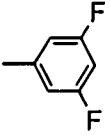
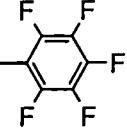
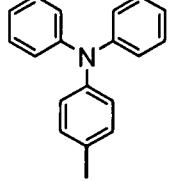
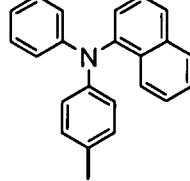
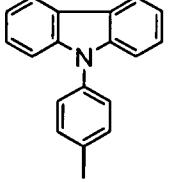
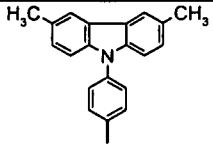
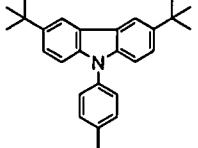
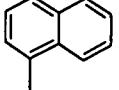
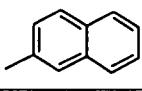
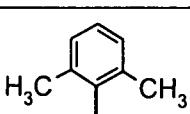
化合物	L	R ¹	R ²	R ³ 及R ⁸
B-1	A ¹⁾	Ph	H	-CH ₃
B-2	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-3	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-4	A ¹⁾		H	-CH ₃

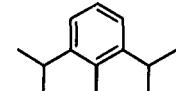
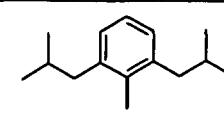
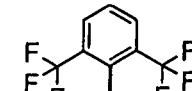
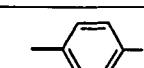
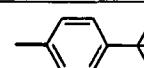
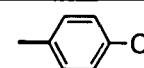
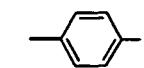
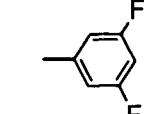
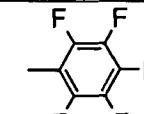
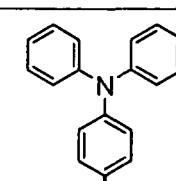
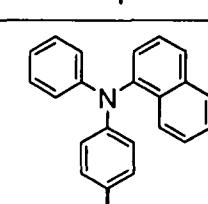
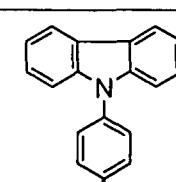
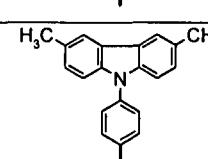
B-5	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-6	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-7	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-9	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-10	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-11	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-12	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-13	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-14	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-15	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-16	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-17	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-18	A ¹⁾		H	-CH ₃
B-19	A ¹⁾		H	-CH ₃

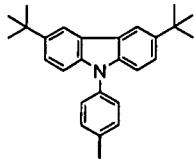
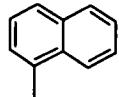
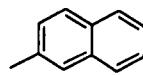
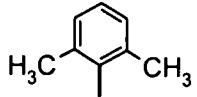
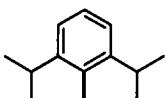
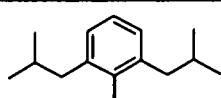
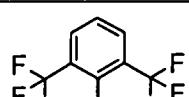
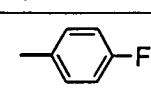
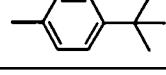
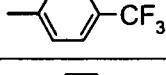
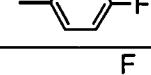
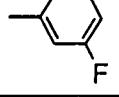
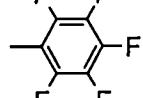
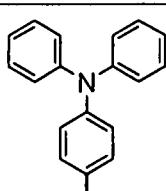
B-20	A ¹⁾	Ph	H	-CH ₂ CH ₃
B-21	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-22	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-23	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-24	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-25	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-26	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-27	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-28	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-29	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-30	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-31	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-32	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-33	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃

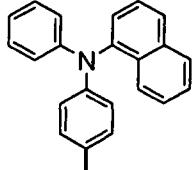
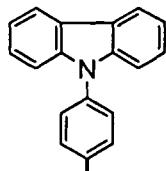
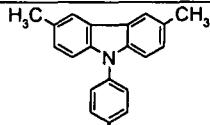
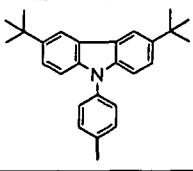
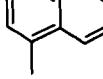
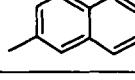
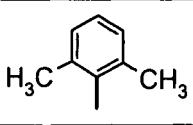
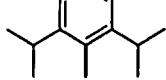
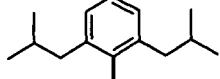
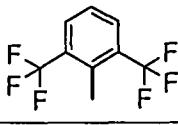
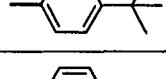
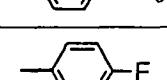
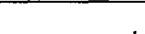
B-34	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-35	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-36	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-37	A ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-38	A ¹⁾	Ph	H	異丁基
B-39	A ¹⁾		H	異丁基
B-40	A ¹⁾		H	異丁基
B-41	A ¹⁾		H	異丁基
B-42	A ¹⁾		H	異丁基
B-43	A ¹⁾		H	異丁基
B-44	A ¹⁾		H	異丁基
B-45	A ¹⁾		H	異丁基
B-46	A ¹⁾		H	異丁基
B-47	A ¹⁾		H	異丁基
B-48	A ¹⁾		H	異丁基

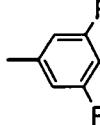
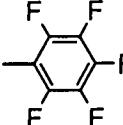
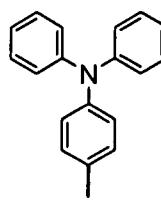
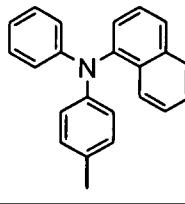
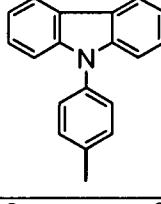
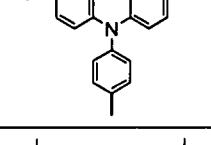
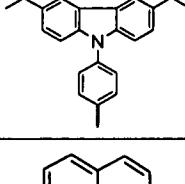
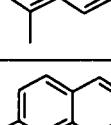
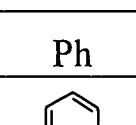
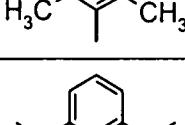
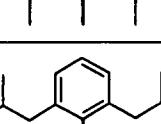
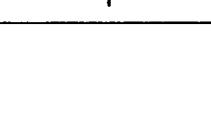
B-49	A ¹⁾		H	異丁基
B-50	A ¹⁾		H	異丁基
B-51	A ¹⁾		H	異丁基
B-52	A ¹⁾		H	異丁基
B-53	A ¹⁾		H	異丁基
B-54	A ¹⁾		H	異丁基
B-55	A ¹⁾		H	異丁基
B-56	A ¹⁾	Ph	H	新戊基
B-57	A ¹⁾		H	新戊基
B-58	A ¹⁾		H	新戊基
B-59	A ¹⁾		H	新戊基
B-60	A ¹⁾		H	新戊基
B-61	A ¹⁾		H	新戊基
B-62	A ¹⁾		H	新戊基

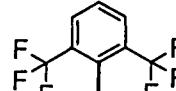
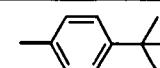
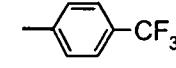
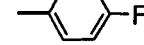
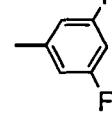
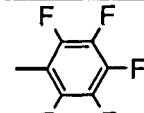
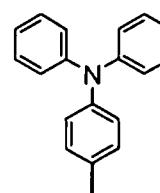
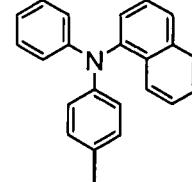
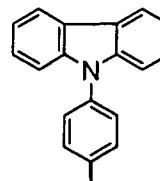
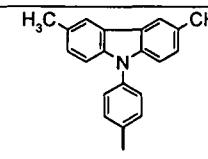
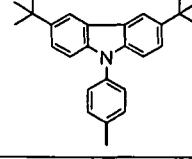
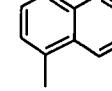
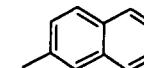
B-63	A ¹⁾		H	新戊基
B-64	A ¹⁾		H	新戊基
B-65	A ¹⁾		H	新戊基
B-66	A ¹⁾		H	新戊基
B-67	A ¹⁾		H	新戊基
B-68	A ¹⁾		H	新戊基
B-69	A ¹⁾		H	新戊基
B-70	A ¹⁾		H	新戊基
B-71	A ¹⁾		H	新戊基
B-72	A ¹⁾		H	新戊基
B-73	A ¹⁾		H	新戊基
B-74	B ¹⁾	Ph	H	-CH ₃
B-75	B ¹⁾		H	-CH ₃

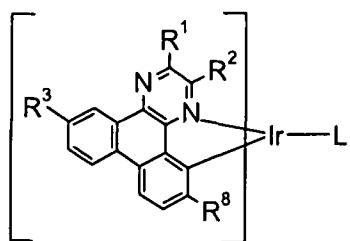
B-75	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-76	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-77	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-78	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-79	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-80	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-81	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-82	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-83	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-84	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-85	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-86	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-87	B ¹⁾		H	-CH ₃

B-88	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-89	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-90	B ¹⁾		H	-CH ₃
B-91	B ¹⁾	Ph	H	-CH ₂ CH ₃
B-92	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-93	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-94	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-95	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-96	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-97	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-98	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-99	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-100	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-101	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-102	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃

B-103	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-104	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-105	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-106	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-107	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-108	B ¹⁾		H	-CH ₂ CH ₃
B-109	B ¹⁾	Ph	H	異丁基
B-110	B ¹⁾		H	異丁基
B-111	B ¹⁾		H	異丁基
B-112	B ¹⁾		H	異丁基
B-113	B ¹⁾		H	異丁基
B-114	B ¹⁾		H	異丁基
B-115	B ¹⁾		H	異丁基
B-116	B ¹⁾		H	異丁基
B-117	B ¹⁾		H	異丁基

B-118	B ¹⁾		H	異丁基
B-119	B ¹⁾		H	異丁基
B-120	B ¹⁾		H	異丁基
B-121	B ¹⁾		H	異丁基
B-122	B ¹⁾		H	異丁基
B-123	B ¹⁾		H	異丁基
B-124	B ¹⁾		H	異丁基
B-125	B ¹⁾		H	異丁基
B-126	B ¹⁾		H	異丁基
B-127	B ¹⁾	Ph	H	新戊基
B-128	B ¹⁾		H	新戊基
B-129	B ¹⁾		H	新戊基
B-130	B ¹⁾		H	新戊基

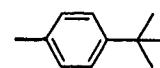
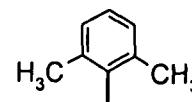
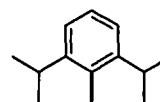
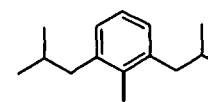
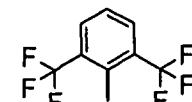
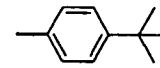
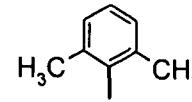
B-131	B ¹⁾		H	新戊基
B-132	B ¹⁾		H	新戊基
B-133	B ¹⁾		H	新戊基
B-134	B ¹⁾		H	新戊基
B-135	B ¹⁾		H	新戊基
B-136	B ¹⁾		H	新戊基
B-137	B ¹⁾		H	新戊基
B-138	B ¹⁾		H	新戊基
B-139	B ¹⁾		H	新戊基
B-140	B ¹⁾		H	新戊基
B-141	B ¹⁾		H	新戊基
B-142	B ¹⁾		H	新戊基
B-143	B ¹⁾		H	新戊基
B-144	B ¹⁾		H	新戊基

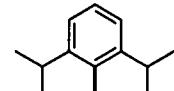
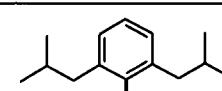
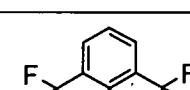
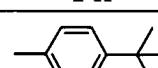
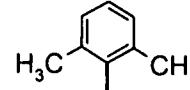
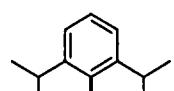
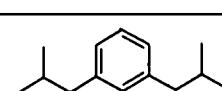
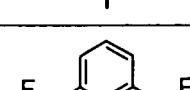


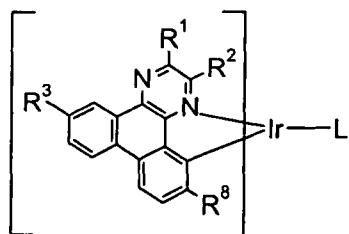
化合物	L	R ¹	R ²	R ³ 及R ⁸
C-1	A ¹⁾	H	H	環戊基
C-2	A ¹⁾	-CH ₃	H	環戊基
C-3	A ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	環戊基
C-4	A ¹⁾	正丙基	H	環戊基
C-5	A ¹⁾	異丙基	H	環戊基
C-6	A ¹⁾	正丁基	H	環戊基
C-7	A ¹⁾	第二丁基	H	環戊基
C-9	A ¹⁾	異丁基	H	環戊基
C-10	A ¹⁾	第三丁基	H	環戊基
C-11	A ¹⁾	新戊基	H	環戊基
C-12	A ¹⁾	2-乙基己基	H	環戊基
C-13	A ¹⁾	環戊基	H	環戊基
C-14	A ¹⁾	環己基	H	環戊基
C-15	A ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		環戊基
C-16	A ¹⁾	Ph	H	環戊基
C-17	A ¹⁾		H	環戊基
C-18	A ¹⁾		H	環戊基
C-19	A ¹⁾		H	環戊基
C-20	A ¹⁾		H	環戊基
C-21	A ¹⁾		H	環戊基
C-22	A ¹⁾	H	H	環丁基

C-23	A ¹⁾	-CH ₃	H	環丁基
C-24	A ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	環丁基
C-25	A ¹⁾	正丙基	H	環丁基
C-26	A ¹⁾	異丙基	H	環丁基
C-27	A ¹⁾	正丁基	H	環丁基
C-28	A ¹⁾	第二丁基	H	環丁基
C-29	A ¹⁾	異丁基	H	環丁基
C-30	A ¹⁾	第三丁基	H	環丁基
C-31	A ¹⁾	新戊基	H	環丁基
C-32	A ¹⁾	2-乙基己基	H	環丁基
C-33	A ¹⁾	環戊基	H	環丁基
C-34	A ¹⁾	環己基	H	環丁基
C-35	A ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		環丁基
C-36	A ¹⁾	Ph	H	環丁基
C-37	A ¹⁾		H	環丁基
C-38	A ¹⁾		H	環丁基
C-39	A ¹⁾		H	環丁基
C-40	A ¹⁾		H	環丁基
C-41	A ¹⁾		H	環丁基
C-42	A ¹⁾	H	H	環丙基
C-43	A ¹⁾	-CH ₃	H	環丙基
C-44	A ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	環丙基
C-45	A ¹⁾	正丙基	H	環丙基
C-46	A ¹⁾	異丙基	H	環丙基
C-47	A ¹⁾	正丁基	H	環丙基
C-48	A ¹⁾	第二丁基	H	環丙基

C-49	A ¹⁾	異丁基	H	環丙基
C-50	A ¹⁾	第三丁基	H	環丙基
C-51	A ¹⁾	新戊基	H	環丙基
C-52	A ¹⁾	2-乙基己基	H	環丙基
C-53	A ¹⁾	環戊基	H	環丙基
C-54	A ¹⁾	環己基	H	環戊基
C-55	A ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		環丙基
C-56	A ¹⁾	Ph	H	環丙基
C-57	A ¹⁾		H	環丙基
C-58	A ¹⁾		H	環丙基
C-59	A ¹⁾		H	環丙基
C-60	A ¹⁾		H	環丙基
C-61	A ¹⁾		H	環丙基
C-62	B ¹⁾	H	H	環戊基
C-63	B ¹⁾	-CH ₃	H	環戊基
C-64	B ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	環戊基
C-65	B ¹⁾	正丙基	H	環戊基
C-66	B ¹⁾	異丙基	H	環戊基
C-67	B ¹⁾	正丁基	H	環戊基
C-68	B ¹⁾	第二丁基	H	環戊基
C-69	B ¹⁾	異丁基	H	環戊基
C-70	B ¹⁾	第三丁基	H	環戊基
C-71	B ¹⁾	新戊基	H	環戊基
C-72	B ¹⁾	2-乙基己基	H	環戊基
C-73	B ¹⁾	環戊基	H	環戊基
C-74	B ¹⁾	環己基	H	環戊基

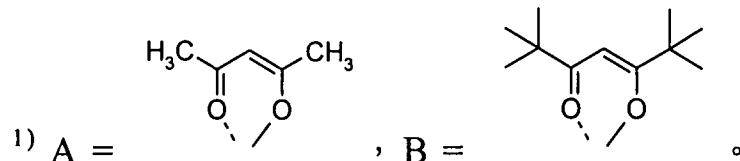
C-75	B ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		環戊基
C-75	B ¹⁾	Ph		環戊基
C-76	B ¹⁾			環戊基
C-77	B ¹⁾			環戊基
C-78	B ¹⁾			環戊基
C-79	B ¹⁾			環戊基
C-80	B ¹⁾			環戊基
C-81	B ¹⁾	H		環丁基
C-82	B ¹⁾	-CH ₃		環丁基
C-83	B ¹⁾	-CH ₂ CH ₃		環丁基
C-84	B ¹⁾	正丙基		環丁基
C-85	B ¹⁾	異丙基		環丁基
C-86	B ¹⁾	正丁基		環丁基
C-87	B ¹⁾	第二丁基		環丁基
C-88	B ¹⁾	異丁基		環丁基
C-89	B ¹⁾	第三丁基		環丁基
C-90	B ¹⁾	新戊基		環丁基
C-91	B ¹⁾	2-乙基己基		環丁基
C-92	B ¹⁾	環戊基		環丁基
C-93	B ¹⁾	環己基		環丁基
C-94	B ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		環丁基
C-95	B ¹⁾	Ph		環丁基
C-96	B ¹⁾			環丁基
C-97	B ¹⁾			環丁基

C-98	B ¹⁾		H	環丁基
C-99	B ¹⁾		H	環丁基
C-100	B ¹⁾		H	環丁基
C-101	B ¹⁾	H	H	環丙基
C-102	B ¹⁾	-CH ₃	H	環丙基
C-103	B ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	環丙基
C-104	B ¹⁾	正丙基	H	環丙基
C-105	B ¹⁾	異丙基	H	環丙基
C-106	B ¹⁾	正丁基	H	環丙基
C-107	B ¹⁾	第二丁基	H	環丙基
C-108	B ¹⁾	異丁基	H	環丙基
C-109	B ¹⁾	第三丁基	H	環丙基
C-110	B ¹⁾	新戊基	H	環丙基
C-111	B ¹⁾	2-乙基己基	H	環丙基
C-112	B ¹⁾	環戊基	H	環丙基
C-113	B ¹⁾	環己基	H	環戊基
C-114	B ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		環丙基
C-115	B ¹⁾	Ph	H	環丙基
C-116	B ¹⁾		H	環丙基
C-117	B ¹⁾		H	環丙基
C-118	B ¹⁾		H	環丙基
C-119	B ¹⁾		H	環丙基
C-120	B ¹⁾		H	環丙基



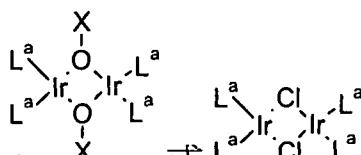
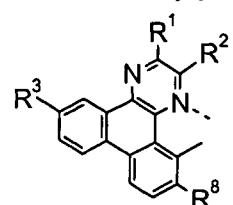
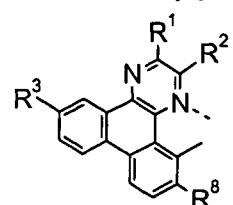
化合物	L	R ¹	R ²	R ³ 及R ⁸
D-1	A ¹⁾	H	H	-Si(CH ₃) ₃
D-2	A ¹⁾	-CH ₃	H	-Si(CH ₃) ₃
D-3	A ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	-Si(CH ₃) ₃
D-4	A ¹⁾	正丙基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-5	A ¹⁾	異丙基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-6	A ¹⁾	正丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-7	A ¹⁾	第二丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-9	A ¹⁾	異丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-10	A ¹⁾	第三丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-11	A ¹⁾	新戊基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-12	A ¹⁾	2-乙基己基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-13	A ¹⁾	環戊基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-14	A ¹⁾	環己基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-15	A ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		-Si(CH ₃) ₃
D-16	A ¹⁾	Ph	H	-Si(CH ₃) ₃
D-17	A ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-18	A ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-19	A ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-20	A ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-21	A ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-22	B ¹⁾	H	H	-Si(CH ₃) ₃

D-23	B ¹⁾	-CH ₃	H	-Si(CH ₃) ₃
D-24	B ¹⁾	-CH ₂ CH ₃	H	-Si(CH ₃) ₃
D-25	B ¹⁾	正丙基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-26	B ¹⁾	異丙基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-27	B ¹⁾	正丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-28	B ¹⁾	第二丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-29	B ¹⁾	異丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-30	B ¹⁾	第三丁基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-31	B ¹⁾	新戊基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-32	B ¹⁾	2-乙基己基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-33	B ¹⁾	環戊基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-34	B ¹⁾	環己基	H	-Si(CH ₃) ₃
D-35	B ¹⁾	-(CH ₂) ₄ -		-Si(CH ₃) ₃
D-36	B ¹⁾	Ph	H	-Si(CH ₃) ₃
D-37	B ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-38	B ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-39	B ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-40	B ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃
D-41	B ¹⁾		H	-Si(CH ₃) ₃



10. 一種有機電子器件，其包括如請求項1至9中任一項之化合物。
11. 一種發射層，其包括如請求項1至9中任一項之化合物。
12. 如請求項11之發射層，其包括如請求項1至9中任一項之化合物與主體材料之組合。

13. 一種裝置，其選自由以下組成之群：固定式視覺顯示單元，例如電腦、電視之視覺顯示單元、印表機、廚房用具及廣告面板中之視覺顯示單元、照明器、資訊面板；及移動視覺顯示單元，例如行動電話、膝上型電腦、數位相機、MP3播放器、車輛中之視覺顯示單元以及公共汽車及火車上之目的地顯示器；照明單元；鍵盤；衣物；傢具；壁紙；該裝置包括如請求項10之有機電子器件或如請求項11或12之發射層。
14. 一種如請求項1至9中任一項之化合物之用途，其用於電子照像光感受器、光電轉換器、有機太陽能電池(有機光伏打裝置)、開關元件、有機發光場效應電晶體(OLEFET)、影像感測器、染料雷射及電致發光器件。

15. 一種式  或  之化合物，其中X係H、甲基或乙基，

 L^a 係 ，其中R¹、R²、R³及R⁸係如請求項1中所定義。

201332980

圖式

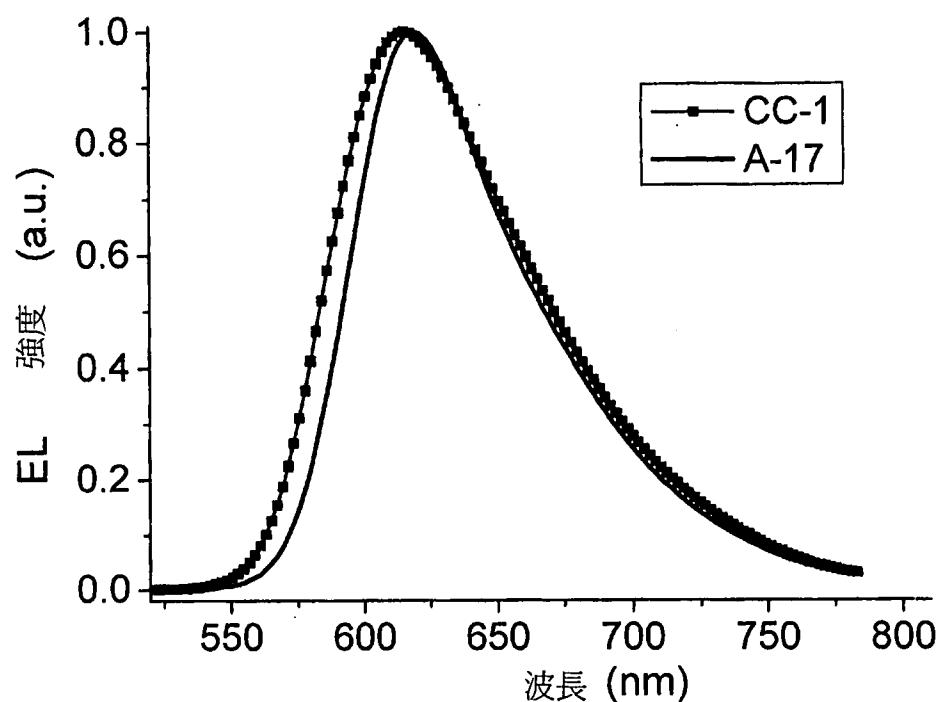


圖 1

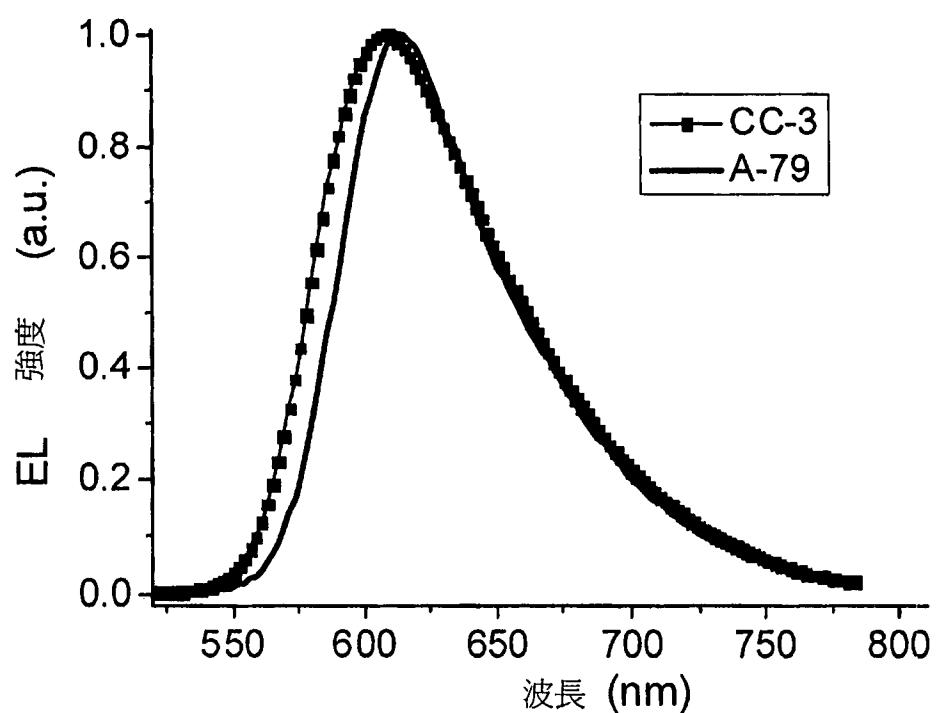


圖 2