



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I546297 B

(45)公告日：中華民國 105 (2016) 年 08 月 21 日

(21)申請案號：100127919

(22)申請日：中華民國 100 (2011) 年 08 月 05 日

(51)Int. Cl. : C07D403/10 (2006.01)

H01L51/54 (2006.01)

(71)申請人：財團法人工業技術研究院(中華民國) INDUSTRIAL TECHNOLOGY RESEARCH INSTITUTE (TW)

新竹縣竹東鎮中興路4段195號

國立清華大學(中華民國) NATIONAL TSING HUA UNIVERSITY (TW)

新竹市光復路2段101號

(72)發明人：黃賀隆 HUANG, HEH LUNG (TW)；吳政安 WU, CHENG AN (TW)；鄭建鴻 CHENG, CHIEN HONG (TW)

(74)代理人：洪澄文；顏錦順

(56)參考文獻：

US 2008/0286607A1

審查人員：官速貞

申請專利範圍項數：7 項 圖式數：1 共 39 頁

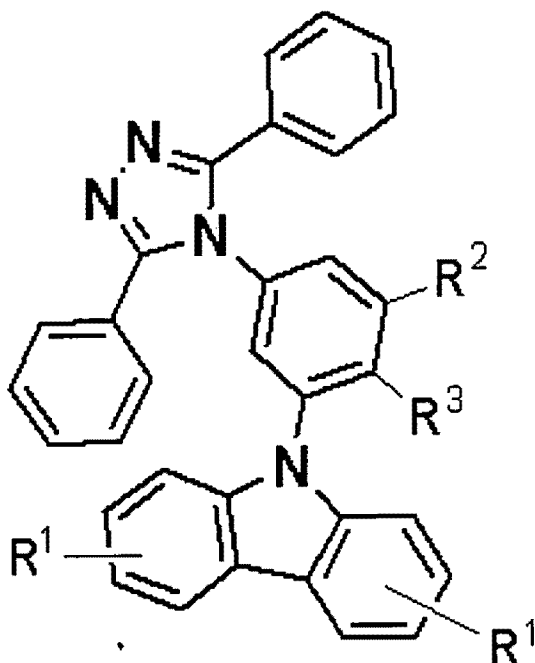
(54)名稱

有機化合物及包含其之有機電激發光裝置

ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENCE DEVICE EMPLOYING THE SAME

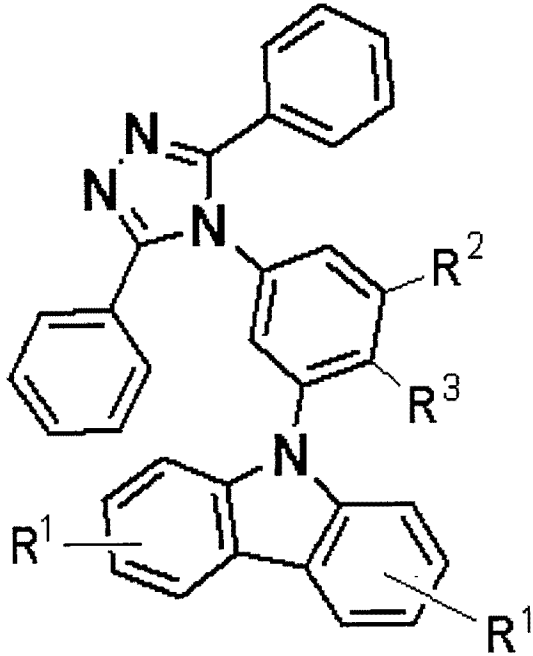
(57)摘要

本發明提供一有機化合物及包含其之有機電激發光裝置。該有機化合物具以下所示之化學式：



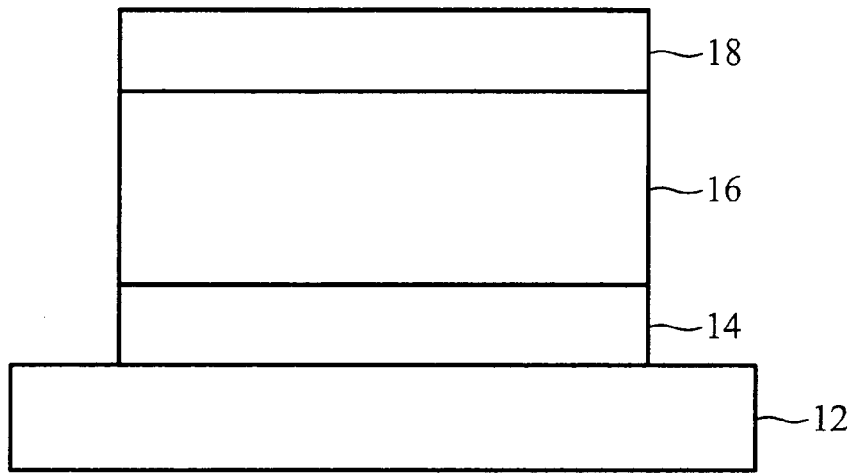
其中， R^1 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫或 C_{1-8} 烷基；以及 R^2 及 R^3 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫、羥基、 C_{1-8} 烷基、 C_{1-8} 烷氧基、 C_{5-10} 芳香基及其衍生物、或 C_{2-8} 異芳基及其衍生物。

Organic compounds and organic electroluminescence devices employing the same are provided. The organic compound has a chemical structure represented below:



wherein, R^1 are independent and can hydrogen, or C_{1-8} alkyl, and R^2 , and R^3 can be hydrogen, hydroxy, C_{1-8} alkyl, C_{1-8} alkoxy, C_{5-10} aryl, or C_{2-8} heteroaryl.

指定代表圖：

10

符號簡單說明：

10 . . . 有機電激發
光裝置

12 . . . 基底

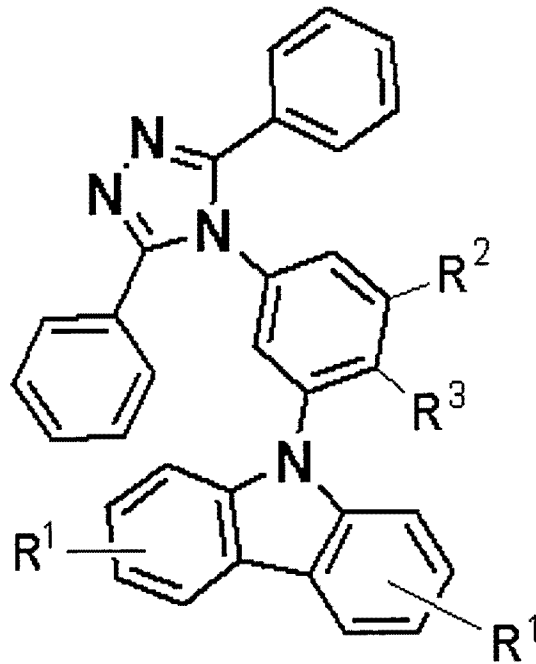
14 . . . 下電極

16 . . . 有機發光單
元

18 . . . 上電極

第 1 圖

特徵化學式：



公 告 本
 修正日期:109.12.22

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※ 申請案號：100127919

※ 申請日：100.8.5

※IPC 分類：C07D 403/10,

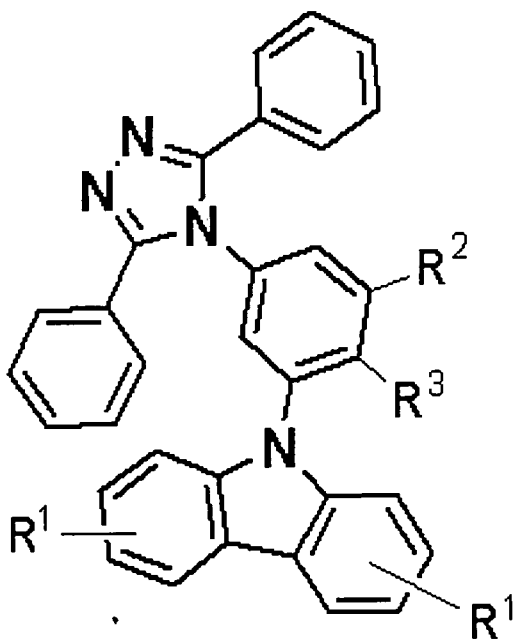
H01L 51/54

一、發明名稱：(中文/英文)

有機化合物及包含其之有機電激發光裝置 / Organic compound and Organic electroluminescence device employing the same

二、中文發明摘要：

本發明提供一有機化合物及包含其之有機電激發光裝置。該有機化合物具以下所示之化學式：



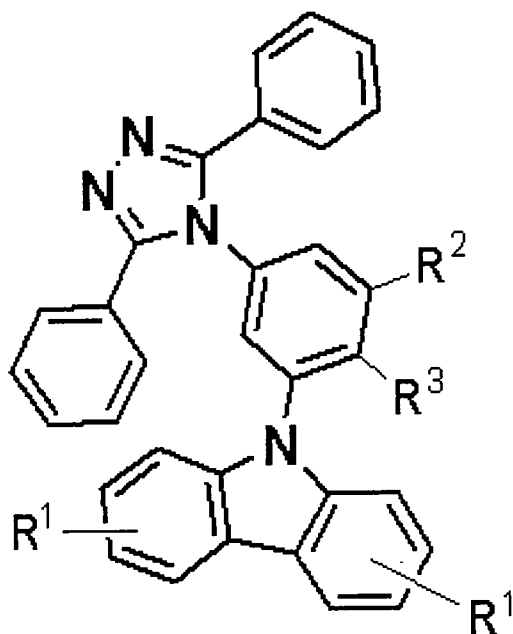
其中， R^1 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫或 C_{1-8} 烷基；以及

R^2 及 R^3 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫、羥基、 C_{1-8} 烷基、 C_{1-8} 烷氧基、 C_{5-10} 芳香基

及其衍生物、或 C₂₋₈ 異芳基及其衍生物。

三、英文發明摘要：

Organic compounds and organic electroluminescence devices employing the same are provided. The organic compound has a chemical structure represented below:



wherein, R¹ are independent and can hydrogen, or C₁₋₈ alkyl, and R², and R³ can be hydrogen, hydroxy, C₁₋₈ alkyl, C₁₋₈ alkoxy, C₅₋₁₀ aryl, or C₂₋₈ heteroaryl.

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第 (1) 圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

有機電激發光裝置~10；

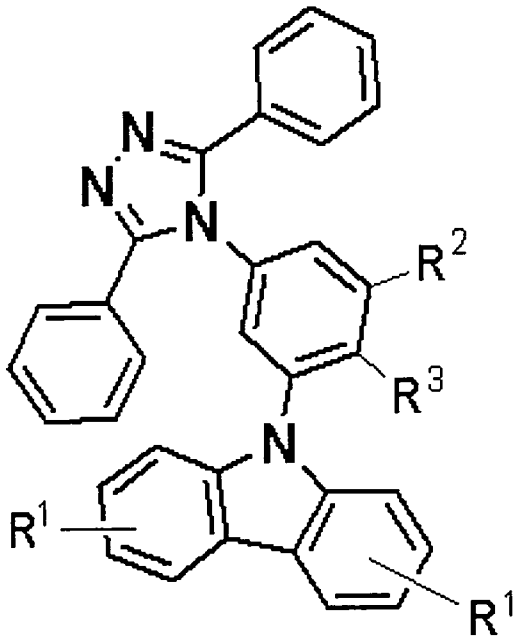
基底~12；

下電極~14；

有機發光單元~16；

上電極~18。

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：



六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明關於一種有機化合物及包含其之有機電激發光裝置，特別關於一種作為主體材料之有機化合物及包含其之磷光有機電激發光裝置。

【先前技術】

有機電致發光裝置 (organic electroluminescent device)，亦稱作有機發光二極體 (organic light-emitting diode; OLED)，是以有機層作為主動層的一種發光二極體 (LED)。由於有機電致發光裝置具有低電壓操作、高亮度、重量輕、廣視角、以及高對比值等優點，近年來已漸漸使用於平面面板顯示器 (flat panel display) 上。與液晶顯示器不同，有機電激發光顯示器所包含之有機發光二極體畫素陣列係具有自發光的特性，因此不需外加背光源。

一般而言，有機發光二極體元件包括一對電極，以及在電極之間的一有機發光介質層。發光是導因於以下的現象。當電場施於兩電極時，陰極射出電子到有機發光介質層，陽極射出電洞到有機發光介質層。當電子與電洞在有機發光介質層內結合時，會產生激子 (excitons)。電子和電洞的再結合就伴隨著發光。

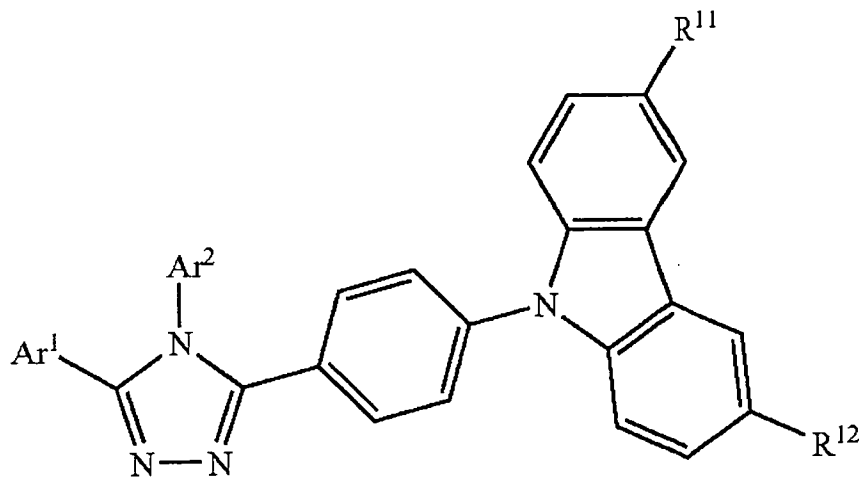
依據電洞和電子的自旋態 (spin state)，由電洞和電子之再結合而產生的激子可具有三重態 (triplet) 或單重態

(singlet)之自旋態。由單重態激子(singlet exciton)所產生的發光為螢光(fluorescence)，而由三重態激子(triplet exciton)所產生的發光為磷光(phosphorescence)。磷光的發光效率是螢光的三倍。因此，發展高效率的磷光材料以增進有機發光二極體元件的發光效率是非常重要的。

現今磷光材料在有機發光二極體元件的應用上，其放光機制須搭配能量相符的各種主體(host)材料才能達到最佳的放光效果與量子效率，而其中藍光的主體材料需要較大的能階差值，而須符合這類要件的分子須有較短的共軛體系(conjugated system)。另外，還必須考慮主發光體材料所具備的熱穩定性，因此對於主發光體材料結構設計上將有相對的難度。

傳統市售或學術上發表的磷光 OLED 元件用主發光層材料多屬於單單只有咔唑(carbazole)片段或是多苯矽取代基的衍生物，然而這些已知的材料有著熱穩定性不佳或運用在元件上產生低電流密度，導致電壓過高等問題。

已有一些有機化合物被報導出來應用於藍色、綠光磷光發光二極體(PHOLED)元件上，如美國專利 20080286607 所揭露具有以下結構的化合物：



其中 Ar¹ 及 Ar² 代表苯環或是吡啶，而 R¹¹ 及 R¹² 代表氫、烷基、氧基、或芳香基。然而上述化合物其三氮唑 (trizole) 基團及咔唑 (carbazole) 基團係以對位方式配置於苯環上，使得共軛體系加長，如此一來高的共振效果使得發光能隙降低，不適合於綠光磷光發光二極體。此外，該對位配置的氮唑 (trizole) 基團及咔唑 (carbazole) 基團，也增加了該化合物的結構對稱，使得該化合物易形成結晶，較不適合蒸鍍成膜。

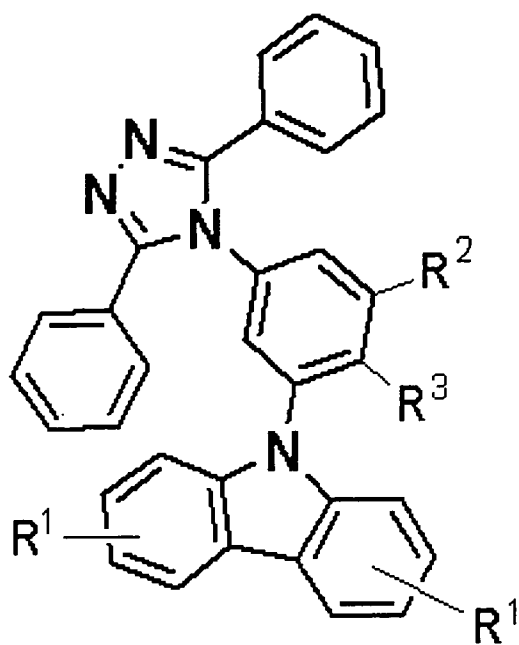
因此開發適用於藍色、綠光磷光材料的主發光層材料是一個很重要的課題。

【發明內容】

本發明提出一種有機化合物，具有高三重態能階 (T₁)，可應用在有機電激發光裝置，作為有機發光單元的材料。此外，由於該有機化合物可增加傳遞能量到客發光體 (guest emitter) 的效率，因此可進一步作為藍光及綠光磷

光有機電激發光裝置之發光層主體材料，可以達到提升磷光有機電激發光裝置的元件效率。

根據本發明一較佳實施例，該有機化合物，具有如式 (I) 所示之化學結構：



式 (I)

其中，

R^1 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫或 C_{1-8} 烷基；以及

R^2 及 R^3 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫、羥基、 C_{1-8} 烷基、 C_{1-8} 烷氧基、 C_{5-10} 芳香基及其衍生物、或 C_{2-8} 異芳基及其衍生物。

根據本發明另一較佳實施例，本發明係提供一種有機電激發光裝置，該裝置包含一對電極；以及一有機發光單元，配置於該對電極之間，其中該有機發光單元包含上述之有機化合物。

此外，根據本發明其他較佳實施例，該有機電激發

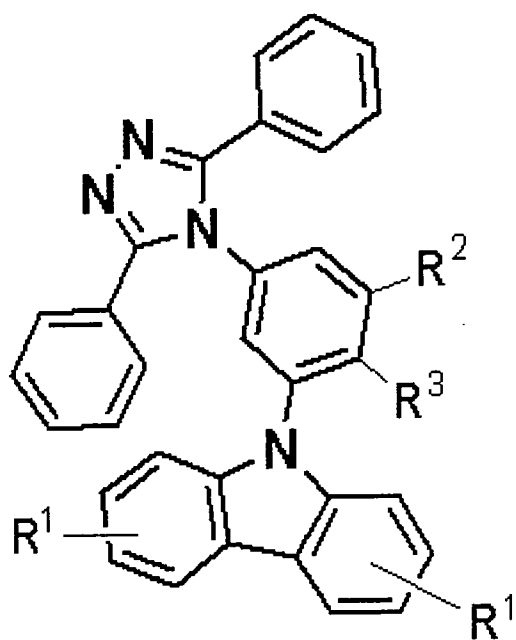
光裝置之有機發光單元可包含一發光層，該發光層包含一主體(host)材料及一磷光摻雜材料，而該主體(host)材料包含上述之有機化合物，且該發光層係發出藍光或綠光。

以下藉由數個實施例及比較實施例，以更進一步說明本發明之方法、特徵及優點，但並非用來限制本發明之範圍，本發明之範圍應以所附之申請專利範圍為準。

【實施方式】

有機化合物

本發明係揭露一種有機化合物，係為具有式(I)所示之化學式：



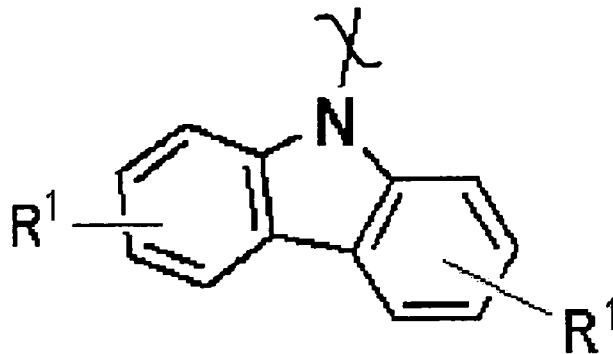
式 (I)

其中，

R¹ 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫或 C₁₋₈ 烷基；以及

R² 及 R³ 係各自獨立且分別為相同或不同之取代

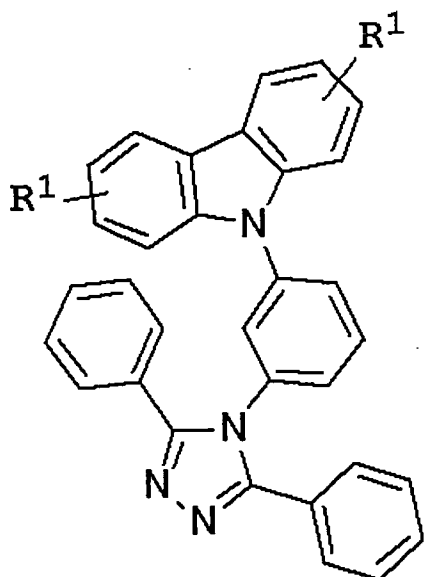
基，包含氫、羥基、 C_{1-8} 烷基、 C_{1-8} 烷氧基、 C_{5-10} 芳香基及其衍生物、或 C_{2-8} 異芳基及其衍生物。



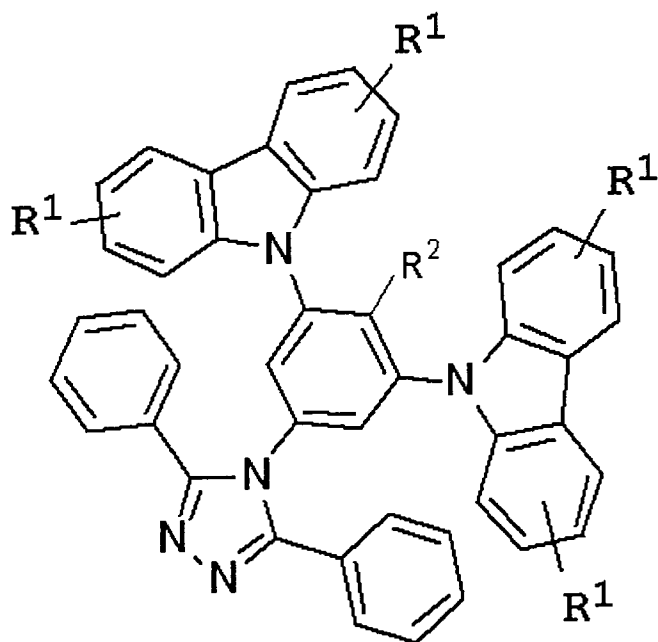
在式(I)結構中 係表示 R^1 可在所在苯環上可具有取代基的四個位置的任一位置，而該 R^1 係彼此獨立的。舉例來說， R_1 可分別為相同或不同之取代基，包含甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、戊基、或己基。

此外， R^2 及 R^3 可分別為相同或不同之取代基，包含甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、戊基、或己基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、丁氧基、或異丁氧基、苯基(phenyl)、聯苯基(biphenyl)、吡啶基(pyridyl)、呋喃基(furyl)、咪唑基(imidazolyl)、萘基(naphthyl)、蒽基(anthryl)、菲基(phenanthrenyl)、咪唑基(imidazolyl)、嘧啶基(pyrimidinyl)、奎啉基(quinolinyl)、吲哚基(indolyl)，或噻唑基(thiazolyl)。

根據本發明其他實施例，本發明所述之有機化合物可具有如式 (II) 或式(III)所示之結構：



式 (II)

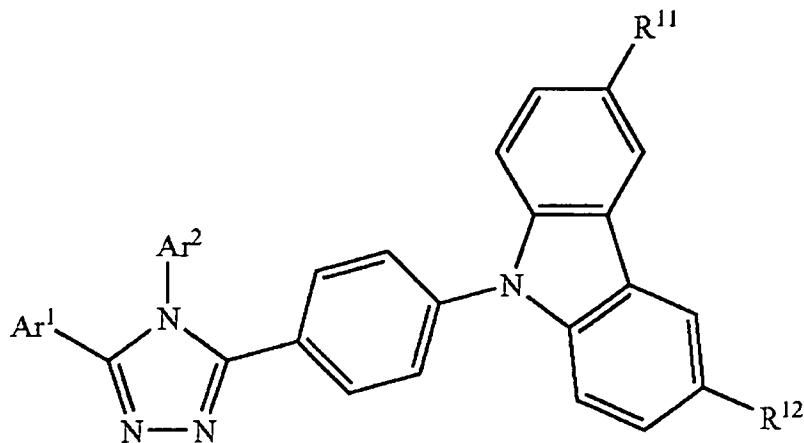


式 (III)

其中， R^1 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫或 C_{1-8} 烷基；以及 R^2 係為氫、羥基、 C_{1-8} 烷基、 C_{1-8} 烷氧基。

整體而言，本發明所述之具有式(I)的有機化合物，具有高三重態能階(T_1)，可以改善主體材料傳遞能量到客

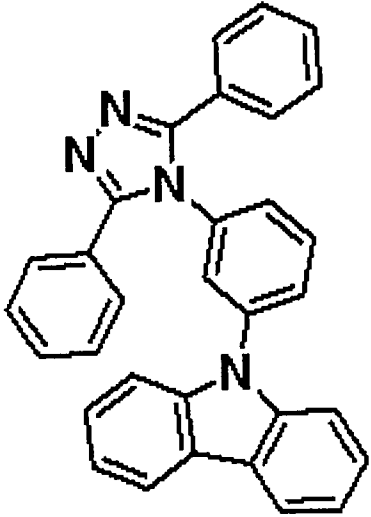
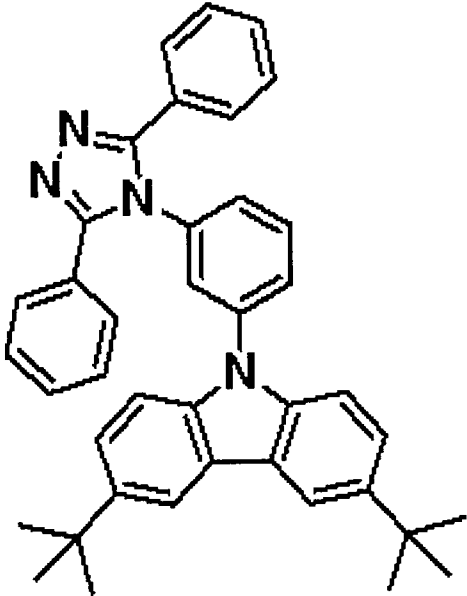
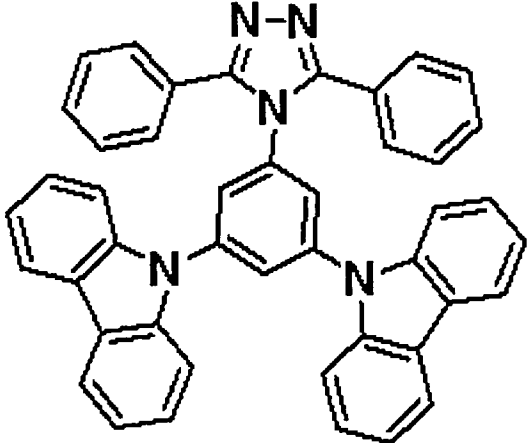
發光體 (guest emitter) 的效率。此外，與習知技術相比



(
 其中 Ar¹ 及 Ar² 代表苯環或是吡啶，而 R¹¹ 及 R¹² 代表氫、烷基、氧基、或芳香基)，本發明所述之具有式(I)的有機化合物其三氮唑(triazole)基團及咔唑(carbazole)基團係以間位方式配置於苯環上，使得其具有較短的共軛體系，因此除了適合作為藍光磷光有機電激發光裝置之發光層主體材料，亦適合作為綠光磷光有機電激發光裝置之發光層主體材料。再者，本發明所述之具有式(I)的有機化合物，與習知技術相比，由於在結構上較不對稱，因此具有較低的結晶度，在以蒸鍍成膜後，分子間較不易團聚而結晶。

表 1 係列舉出本發明一系列較佳實施例所得之具有公式(I)之有機化合物，其各自之化學結構均詳列於表中，因此可清楚辨識其不同取代基所分別代表的官能基。

實施例 編號	化合物結構式	代稱

1	 <p>The structure shows a central nitrogen atom bonded to a phenyl ring, a benzimidazole ring, and a 1,2,4-triazole ring. The triazole ring is further substituted with a phenyl group at the 5-position.</p>	<i>m</i> -TAZCz
2	 <p>The structure is similar to m-TAZCz, but the benzimidazole ring is substituted with two tert-butyl groups at the 2 and 6 positions.</p>	<i>m</i> -TAZtCz
3	 <p>The structure features a central 1,2,4-triazole ring substituted with two phenyl groups at the 3 and 5 positions. This triazole ring is connected at its 4-position to a central benzene ring, which is further substituted with two benzimidazole rings at the 1 and 3 positions.</p>	<i>m</i> -TAZDCz

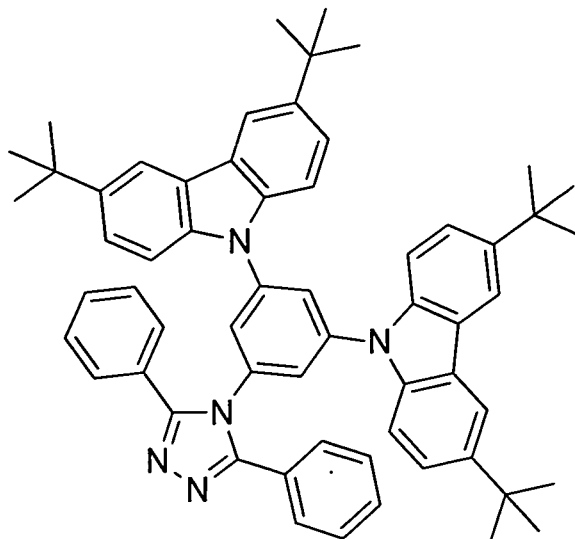
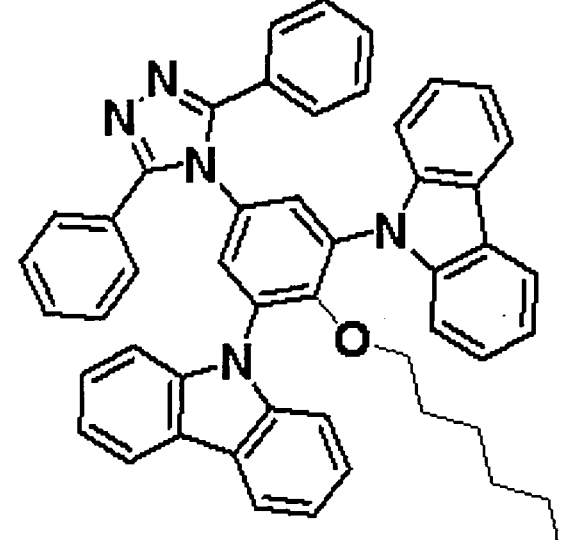
4	 <p>The structure shows a central benzene ring substituted at the 1, 3, and 5 positions. At the 1-position, there is a 1,2,4-triazole ring with phenyl groups at the 4 and 5 positions. At the 3-position, there is a carbazole ring with a tert-butyl group at the 6-position. At the 5-position, there is another carbazole ring with a tert-butyl group at the 6-position.</p>	<i>m</i> -TAZDtCz
5	 <p>The structure shows a central benzene ring substituted at the 1, 3, and 5 positions. At the 1-position, there is a 1,2,4-triazole ring with phenyl groups at the 4 and 5 positions. At the 3-position, there is a carbazole ring with a phenyl group at the 6-position. At the 5-position, there is another carbazole ring with a phenyl group at the 6-position. A wavy line is attached to the oxygen atom of the carbazole at the 5-position, indicating a polymer chain.</p>	<i>m</i> -TAZDCz-nH

表 1

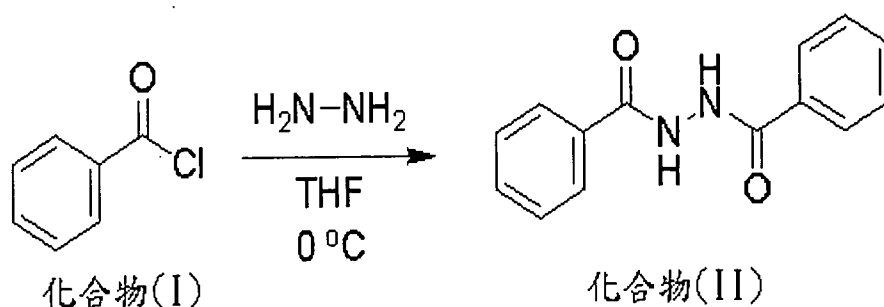
為進一步說明本發明有機化合物的製備方法，以下特別詳述實施例 1-4 所示之化合物其製備流程。

實施例 1

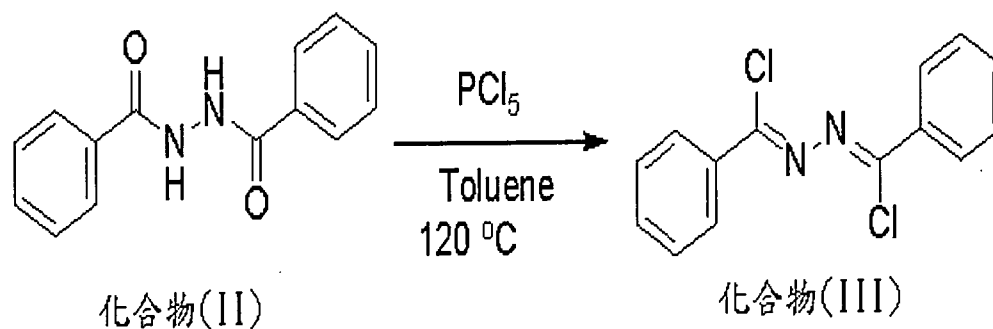
化合物 *m*-TAZCz 之合成

取化合物 1(Benzoyl chloride)(71.42 mmol,10g)置入 250mL 反應瓶中，並加入四氫呋喃 (THF) (100mL) 於該反應瓶中。接著，於 0°C 環境下，將聯氨(N₂H₄，32.46

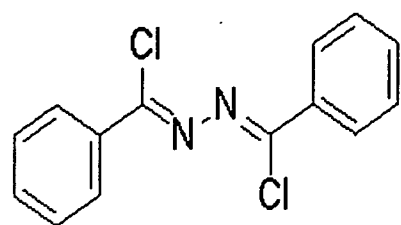
mmol.1.62g)加入該反應瓶中，並反應 4 小時，得到化合物(II)，產率為 92%。上述反應之反應式如下所示：



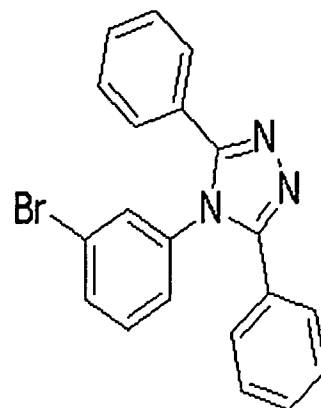
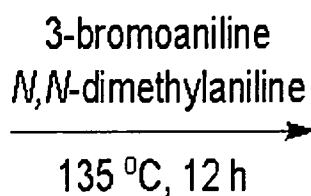
接著，將化合物(II)(41.66 mmol.10g)及 PCl_5 (91.51 mmol.18.76g)置入 250mL 反應瓶中，並加入經除水過的溶劑 Toluene(100mL)。接著，加熱到 120°C 。待反應 3 小時後，將所得之產物以管柱層析法純化，得到化合物(III)，產率為 90%。上述反應之反應式如下所示：



接著，將化合物(III)(18.11 mmol.5g)置入一 100ml 反應瓶中，並將 3-bromoaniline (21.73 mmol、3.69g)、及 N,N-dimethyl aniline (25 mL)加入反應瓶內。接著，加熱至 130°C ，反應 12 小時後。反應完成後，得到化合物(IV)，產率為 50%。上述反應之反應式如下所示：

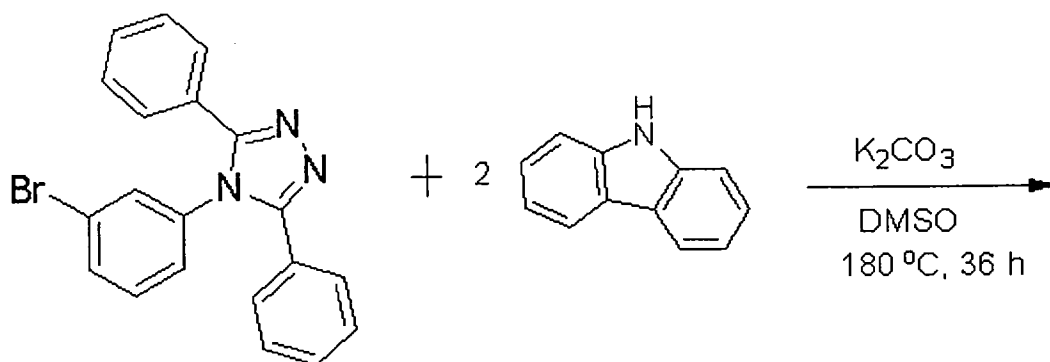


化合物(III)

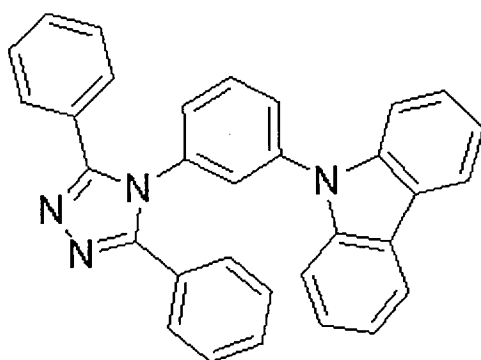


化合物(IV)

接著，將化合物(IV)(8 mmol.3g)、咪唑(carbazole、9.6 mmol.1.61g)及碳酸鉀(K_2CO_3 、40 mmol.5.52g)置入 50ml 反應瓶中，加入二甲基亞砷(DMSO、30mL)作為溶劑，加熱至 180°C 並反應 36 小時。待冷卻後，讓反應回到室溫並以水洗淨，得到產物 *m*-TAZCz。上述反應之反應式如下所示：



化合物(IV)

**m-TAZCz**

利用核磁共振光譜分析化合物 *m*-TAZCz(9-(3-(3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazol-4-yl)phenyl)-9H-carbazole)，所得之光譜資訊如下：

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.07 (m, 4H), 7.72-7.21 (m, 20H), 6.85(m, 4H).

$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3 , δ): 154.70, 139.98, 139.38, 136.38, 131.22, 129.92, 129.17, 128.77, 127.42, 126.73, 126.15, 125.93, 123.68, 120.60, 120.44, 109.10.

利用高解析質譜儀(HIGH RESOLUTION MASS SPECTROMETER)分析化合物 *m*-TAZCz，所得之資訊如下：

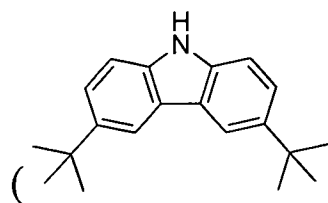
HRMS (EI) Calcd for $C_{32}H_{22}N_4$ (M^+):462.1844.
Found:462.1844。

元素比例分析: C 83.09, H 4.79, N 12.11; Found: C 83.33, H 4.69, N 12.22。

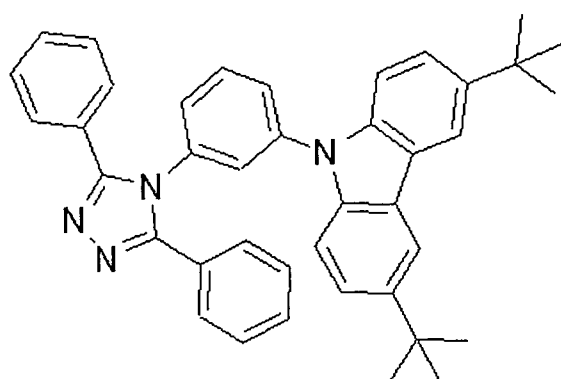
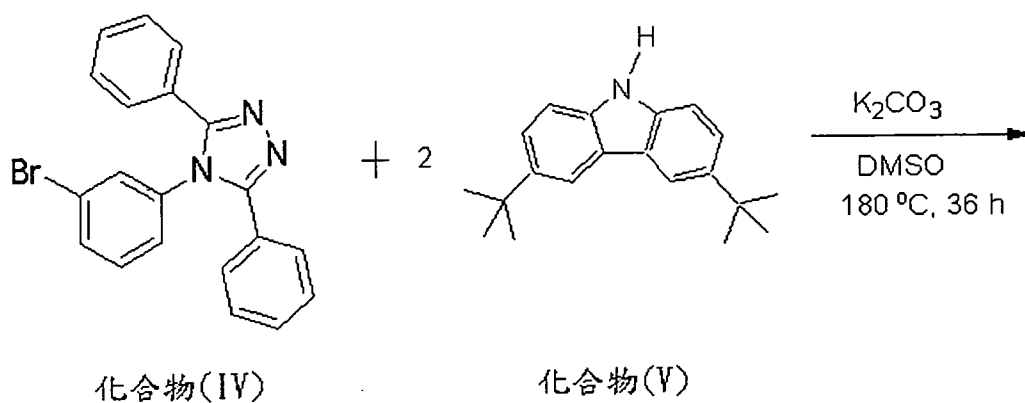
實施例 2

化合物 *m*-TAZtCz 之合成

將化合物 (IV)(13.33 mmol, 5 g)、化合物 (V)



(16 mmol, 4.46g)及碳酸鉀(K_2CO_3 , 66.66 mmol, 9.2g)置入 50ml 反應瓶中，加入二甲基亞砜(DMSO, 30mL)作為溶劑，加熱至 $180^\circ C$ 並反應 36 小時。待冷卻後，讓反應回到室溫並以水洗淨，得到產物 *m*-TAZtCz。上述反應之反應式如下所示：

**m-TAZtCz**

利用核磁共振光譜分析化合物 *m*-TAZtCz (3,6-di-tert-butyl-9-(3-(3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazol-4-yl)phenyl)-9H-carbazole)，所得之光譜資訊如下：

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.07 (s, 2H), 7.71-7.16 (m, 16H), 6.84 (d, $J = 8$, 2H), 1.44 (s, 18H)。

$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3 , δ): 143.69, 138.28, 131.21, 130.06, 129.12, 128.80, 125.38, 123.76, 116.43, 108.58, 34.69, 31.89。

利用高解析質譜儀 (HIGH RESOLUTION MASS SPECTROMETER) 分析化合物 *m*-TAZtCz，所得之資訊如下：

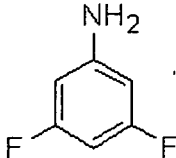
HRMS (EI) Calcd for $C_{32}H_{22}N_4$ (M^+):462.1844.
Found:462.1844。

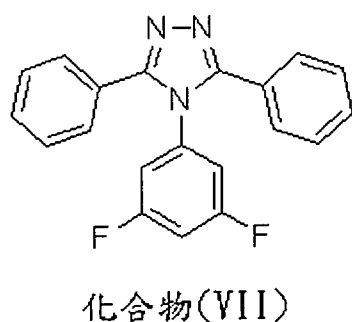
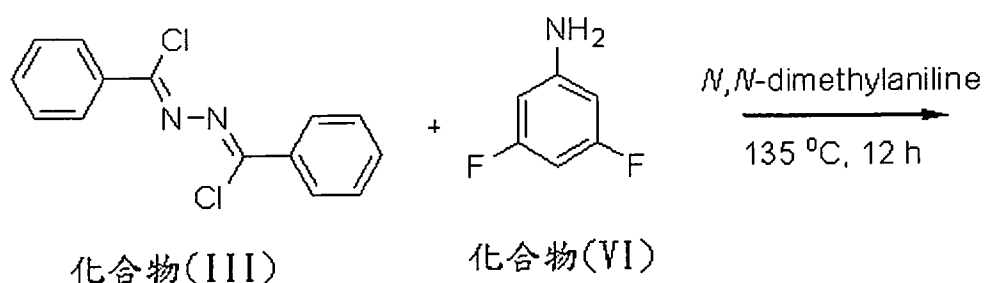
HRMS (EI) Calcd for $C_{40}H_{38}N_4$ (M^+): 574.3096.
Found: 574.3100。元素比例分析:C 83.59, H 6.66, N 9.75;
Found: C 83.69, H 6.74, N 9.78。

實施例 3

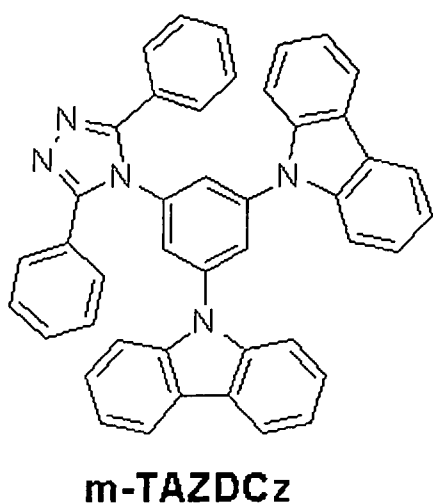
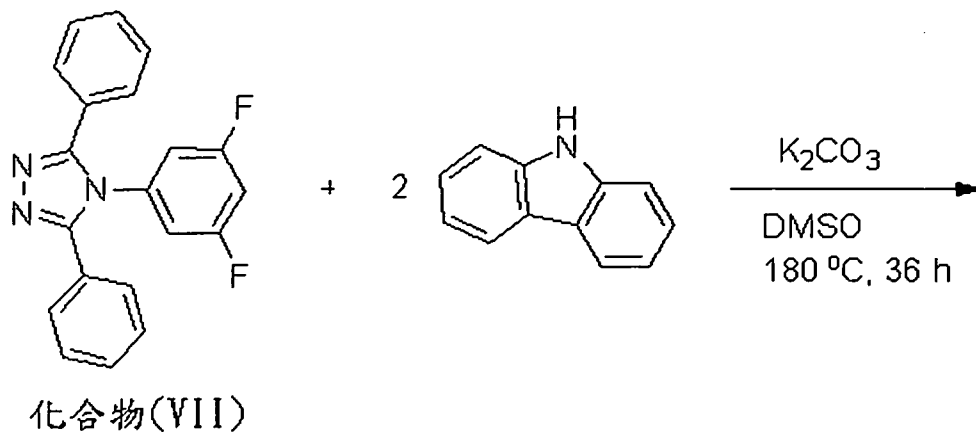
化合物 *m*-TAZDCz 之合成

將化合物(III)(36.22 mmol.10g)置入一 100ml 反應

瓶中，並加入化合物(VI)( 39.85 mmol.5.14g)、
及 *N,N*-dimethyl aniline (30 mL)於反應瓶內。接著，加
熱至 135°C，反應 12 小時後。反應完成後，得到化合物
(VII)，產率為 50%。上述反應之反應式如下所示：



接著，將化合物 (VII)(15.01 mmol.5g)、咔唑 (carbazole、33.03 mmol.5.54g)及碳酸鉀(K_2CO_3 、75.05 mmol、10.35g)置入 50ml 反應瓶中，加入二甲基亞砜 (DMSO、30mL)作為溶劑，加熱至 180°C 並反應 36 小時。待冷卻後，讓反應回到室溫並以水洗淨，得到產物 *m*-TAZDCz，產率為 82%。上述反應之反應式如下所示：



利用核磁共振光譜分析化合物 *m*-TAZDCz (9,9'-(5-(3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazol-4-yl)-1,3-phenylene)bis(9H-carbazole))，所得之光譜資訊如下：

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.07 (d, $J = 8$ Hz, 4H), 7.97 (s, 1H), 7.68-7.55 (m, 11H), 7.34 (s, 2H), 7.29-7.23 (m, 7H), 6.92 (m, 4H)。

$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3 , δ): 154.55, 140.64, 139.66, 130.17, 129.57, 129.15, 126.59, 126.35, 124.00, 123.87, 123.56, 120.99, 120.57, 109.14。

利用高解析質譜儀(HIGH RESOLUTION MASS

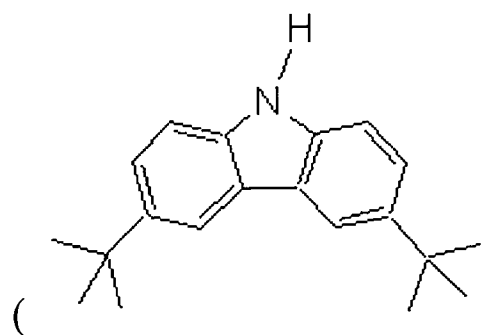
SPECTROMETER)分析化合物 *m*-TAZDCz，所得之資訊如下：

HRMS (EI) Calcd for $C_{44}H_{29}N_5$ (M^+):627.2523.
Found:627.2428。原素比例分析：C 84.19, H 4.66, N 11.16; Found: C 84.06, H 4.69, N 11.15。

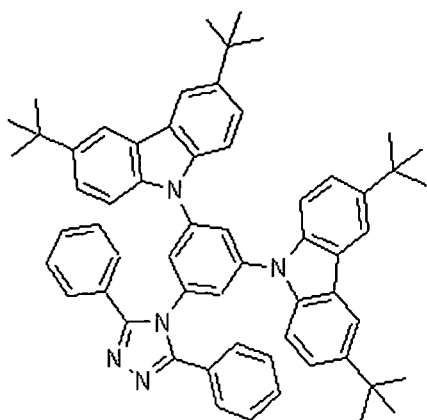
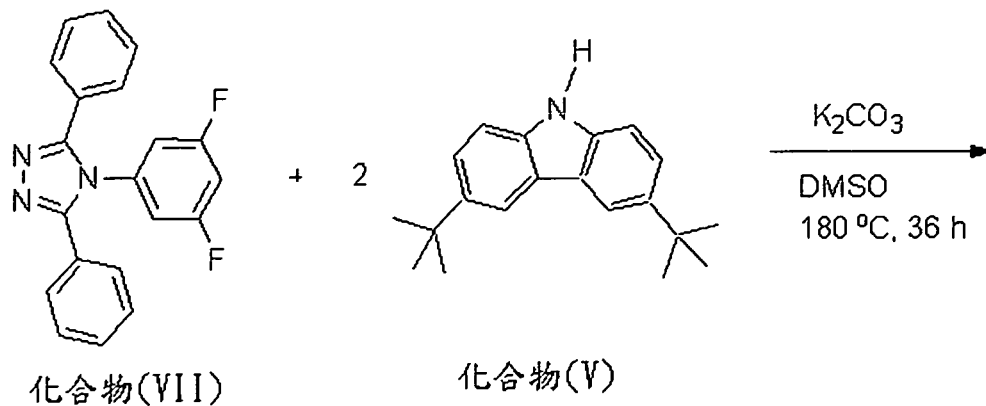
實施例 4

化合物 *m*-TAZDtCz 之合成

將化合物 (VII)(15.01 mmol.5 g)、化合物 (V)



(K_2CO_3 、75.07 mmol.10.36g)置入 50ml 反應瓶中，加入二甲基亞砜(DMSO、30mL)作為溶劑，加熱至 $180^\circ C$ 並反應 36 小時。待冷卻後，讓反應回到室溫並以水洗淨，得到產物 *m*-TAZDtCz。上述反應之反應式如下所示：



利用核磁共振光譜分析化合物 *m*-TAZDtCz (9,9'-(5-(3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazol-4-yl)-1,3-phenylene)bis(3,6-di-tert-butyl-9H-carbazole))，所得之光譜資訊如下：

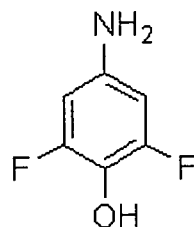
$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.10 (s, 4H), 8.09 (s, 1H), 7.66-7.28 (m, 16H), 6.89 (m, 4H), 1.47 (s, 36H)。

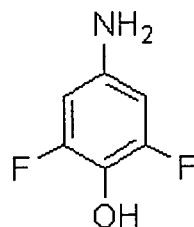
$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3 , δ): 154.71, 144.04, 141.07, 138.02, 137.21, 130.03, 129.49, 129.08, 126.88, 123.97, 123.88, 123.14, 122.58, 116.55, 108.68, 34.71, 31.88。元素比例分析: C 84.57, H 7.22, N 8.22; Found: C 84.70, H 7.60, N 8.29。

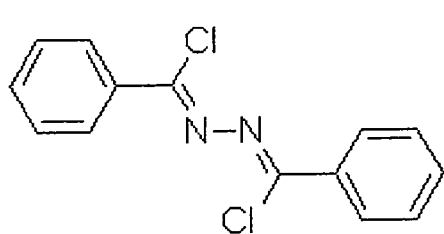
實施例 5

化合物 *m*-TAZDCz-nH 之合成

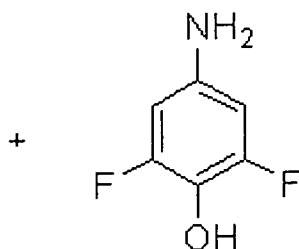
將化合物(III)(36.23 mmol、10 g)置入一 100 ml 反



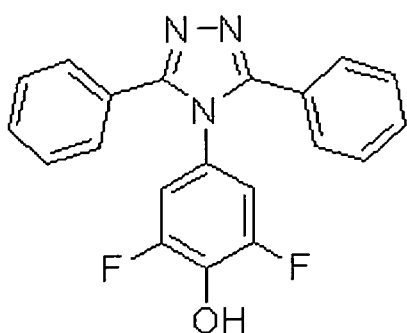
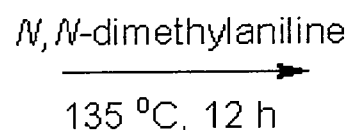
應瓶中，並加入化合物(VIII)(、43.47 mmol、6.30 g)、及 *N,N*-dimethyl aniline 於反應瓶內。接著，加熱至 135°C，反應 12 小時後。反應完成後，得到化合物(VII)，產率為 50%。上述反應之反應式如下所示：



化合物(III)



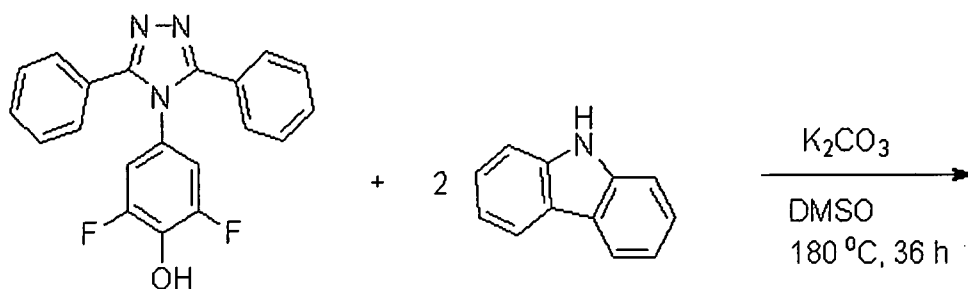
化合物(VIII)



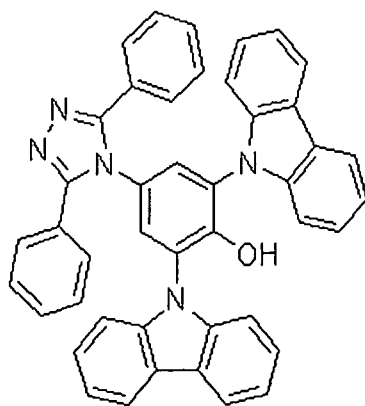
化合物(IX)

接著，將化合物(IX)(14.32 mmol、5 g)、咪唑(carbazole、31.51mmol、5.29g)及碳酸鉀(K_2CO_3 、71.6

mmol.9.8g) 置入 50ml 反應瓶中，加入二甲基亞砜 (DMSO、30mL) 作為溶劑，加熱至 180°C 並反應 36 小時。待冷卻後，讓反應回到室溫並以水洗淨，得到產物化合物 (X)，產率為 90%。上述反應之反應式如下所示：

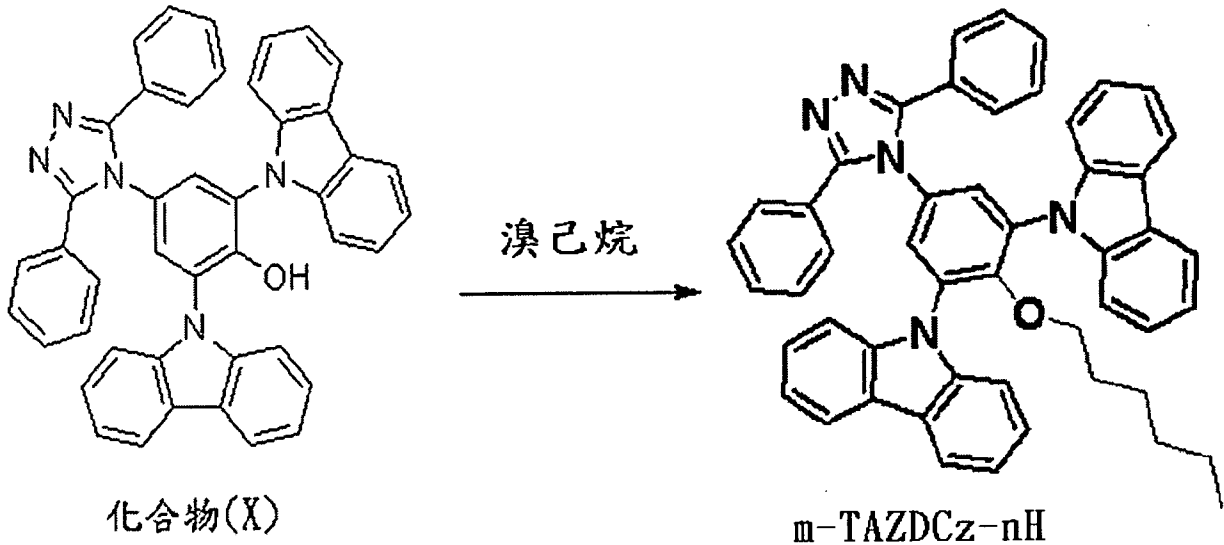


化合物(IX)



化合物(X)

接著，將化合物 (X)(3.1 mmol、2g)、溴己烷 (1-Bromohexane、3.73mmol、0.61g) 及氫氧化鉀 (4.04 mmol、0.22g) 溶於乙醇 (30ml)，加熱到迴流並反應 3 小時。完應完成後得到產物 *m*-TAZDCz-nH，產率為 98%。上述反應之反應式如下所示：



利用核磁共振光譜分析化合物 *m*-TAZDCz-nH，所得之光譜資訊如下：

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.06 (d, $J = 8$ Hz, 2H), 7.87 (d, 1H), 7.52-7.20 (m, 11H), 6.93 (d, $J = 8$ Hz, 1H), 6.68 (d, $J = 8$ Hz, 2H), 3.93 (t, $J_1 = 4$ Hz, $J_2 = 12$ Hz, 2H), 1.42 (m, 2H), 1.03-0.98 (m, 6H), 0.73-0.70 (t, $J_1 = 8$ Hz, $J_2 = 12$ Hz)。

$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3 , δ): 155.73, 154.73, 140.55, 129.69, 128.98, 128.58, 128.09, 127.04, 127.06, 126.80, 125.58, 123.29, 120.03, 119.82, 114.11, 109.73, 68.91, 31.06, 28.53, 25.16, 22.20, 13.75。

化合物之物理性質測定

對化合物 *m*-TAZCz、*m*-TAZtCz 及 *m*-TAZDCz 之玻璃轉化溫度(T_g)、結晶融點(T_m)、熱裂解溫度(T_d)、能隙(E_s)、三重態能階(E_T)、最高鍵結電子能階(HOMO)、及

最低未鍵結能階(LUMO)，其量測結果請參照表 2:

化合物	<i>m</i> -TAZCz	<i>m</i> -TAZtCz	<i>m</i> -TAZDCz	<i>m</i> -TAZDtCz
T _g	-----	120.6 °C	159 °C	-----
T _m	312.4°C	288.7 °C	301.06 °C	-----
T _d (5%)	358°C	367°C	432°C	421 °C
LUMO	2.31	1.92	2.03	2.13
HOMO	5.99	5.54	5.6	5.68
E _T	3.0	2.99	3.01	2.97
E _S	3.68	3.62	3.57	3.54

表 2

由表 2 可以發現本發明所述之化合物 *m*-TAZCz、*m*-TAZtCz 及 *m*-TAZDCz 其熱裂解溫度(T_d)皆大於 350°C (*m*-TAZDCz 甚至大於 430°C)，玻璃轉換溫度(T_g) 大於 120°C，顯示這類型材料在熱穩定性質上有優秀的表現。而 HOMO、LUMO 也落在適合的位置，因此電子注入非常容易。

有機電激發光裝置

請參照第 1 圖，係顯示一符合本發明所述之有機電激發光裝置 10 之剖面結構示意圖，該有機電激發光裝置 10 包括一基底 12、一下電極 14、一有機發光單元 16 及一上電極 18。該有機電激發光裝置 10 可為上發光、下發光、或雙面發光有機電激發光裝置。該基底可例如為玻璃、塑膠基板、或半導體基板。該下電極 14 及上電極 18 之材質可例如為鋰、鎂、鈣、鋁、銀、銦、金、鎢、鎳、鉑、銅、銦錫氧化物 (ITO)、銦鋅氧化物 (IZO)、鋅鋁氧化物 (AZO)、氧化鋅 (ZnO) 或其結合，而其形成方式可為熱蒸鍍、濺射或電漿強化式化學氣相沉積方式。此外，該下電極 14 及上電極 18 至少一者需具有透光的性質。

該有機發光單元 16 至少包含一發光層，可更包含一電洞注入層、一電洞傳輸層、一電子傳輸層、一電子注入層或其他膜層。值得注意的是，根據本發明較佳實施例，該有機發光單元 16 必需包含本發明所述具有公式 (I) 之有機化合物。換言之，在該有機發光單元 16 中，至少有一膜層包含該有機化合物。

根據本發明另一較佳實施例，該有機電激發光裝置可為一磷光有機電激發光裝置，而該磷光有機發光單元之發光層包含一主體 (host) 材料及一磷光摻雜材料，而該主體 (host) 材料包含本發明所述具有公式 (I) 所示結構之有機化合物。熟悉本技術者可視所使用之有機電激發

光材料及所需之元件特性，將本發明所述之有機化合物與所需的磷光摻雜材料摻雜，並改變所搭配的摻雜物之摻雜量。因此，摻雜物之摻雜量之多寡非關本發明之特徵，非為限制本發明範圍之依據。

為進一步說明本發明有機電激發光裝置，以下實施例係將由實施例 1 所得之有機化合物 *m*-TAZCz 作為發光層材料，分別搭配藍光或綠光的摻雜材料，來驗證本發明所述之有機化合物可提昇有機電激發光裝置的效率。

實施例 6:

綠色磷光電激發光裝置

使用中性清潔劑、丙酮、及乙醇以超音波振盪將已製作圖樣的ITO(厚度為100nm)玻璃基底洗淨。

接著，以氮氣將基材吹乾，然後UV-OZONE 30分鐘，接著於 10^{-6} torr 的壓力下依序沉積 TAPC(1,1-bis(di-4-tolylaminophenyl) cyclohexane、厚度為 40nm)、*m*-TAZCz 摻雜 Irppy₃((tris(2-phenylpyridine)iridium)(*m*-TAZCz 與 Irppy₃ 的比例為 100:15、厚度為 30nm)、BPhen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline、厚度為 30nm)、LiF(厚度為 0.5nm)、及 Al(厚度為 110nm)，封裝後獲致該電激發光裝置(1)。該電激發光裝置(1)之結構可表示為：

第 100127919 號

修正日期:103.12.22

修正本

ITO(100 nm)/TAPC(40nm)/ Irppy3
 (15%):*m*-TAZCz(30 nm)/BPhen (30 nm)/ LiF(0.5
 nm)/Al(110 nm)

接著，量測該電激發光裝置(1)之光學特性，其量測結果如下：

最佳元件效率在 31.9 cd/A，及 22.7 lm/W 左右；

元件效率在 31.8cd/A，及 22.2 lm/W(@1000 cd/m²)；

發光波長 CIE 座標：(0.30,0.63)。

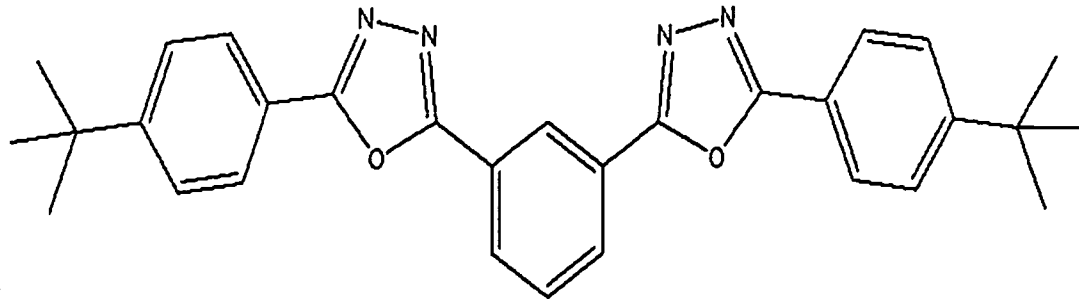
實施例 7:

藍色磷光電激發光裝置

使用中性清潔劑、丙酮、及乙醇以超音波振盪將已製作圖樣的ITO(厚度為100nm)玻璃基底洗淨。

接著，以氮氣將基材吹乾，然後UV-OZONE 30分鐘，接著於10⁻⁶ torr的壓力下依序沉積

NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenyl-benzidine、厚度為 50 nm)、TAPC(1,1-bis(di-4-tolylaminophenyl) cyclohexane、厚度為 15 nm)、*m*-TAZCz 摻雜 Firpic (Iridium-bis(4,6difluorophenyl-pyridinato-N,C²)-picolinat e) (*m*-TAZCz與Firpic的比例為100:11、厚度為40nm)、*m*-TPhOXD



(厚度為 12.5nm)、BPhen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)、厚度為 12.5nm)、LiF(厚度為 1nm)、及 Al(厚度為 100nm)，封裝後獲致該電激發光裝置(2)。該電激發光裝置(2)之結構可表示為：

NPB (50 nm) / TAPC (15nm) / *m*-TAZCz : Firpic 11% (40nm) / *m*-TPhOXD (12.5nm) / BPhen (12.5nm) / LiF (1nm) / Al (100nm)。

接著，量測該電激發光裝置(2)之光學特性，其量測結果如下：

最佳元件效率在 21.43 cd/A，11.99 lm/W；

元件效率在 20 cd/A，7.2 lm/W(@1000 cd/m²)；

發光波長 CIE 座標：(0.16, 0.35)。

如上所述，本發明所述具有式(I)之化合物作為主發光體材料的電激發光裝置，經過進一步調整後，在 1000Cd/m² 亮度下，元件效率可提昇至 7lm/W(藍光磷光有機電激發光裝置)，甚至達到 22 lm/W 以上(綠光磷光有機電激發光裝置)，此在磷光有機電激發光裝置技術領

域中，實屬相當優秀的表現。本發明所述之具有式(I)的有機化合物，其三氮唑(trizole)基團及咔唑(carbazole)基團係以間位方式配置於苯環上，使得其具有較短的共軛體系，因此除了適合作為藍光磷光有機電激發光裝置之發光層主體材料，亦適合作為綠光磷光有機電激發光裝置之發光層主體材料。

雖然本發明已以較佳實施例揭露如上，然其並非用以限定本發明，任何熟習此技藝者，在不脫離本發明之精神和範圍內，當可作些許之更動與潤飾，因此本發明之保護範圍當視後附之申請專利範圍所界定者為準。

【圖式簡單說明】

第 1 圖係為本發明一較佳實施例所述之有機電激發光裝置的剖面結構圖。

【主要元件符號說明】

有機電激發光裝置~10；

基底~12；

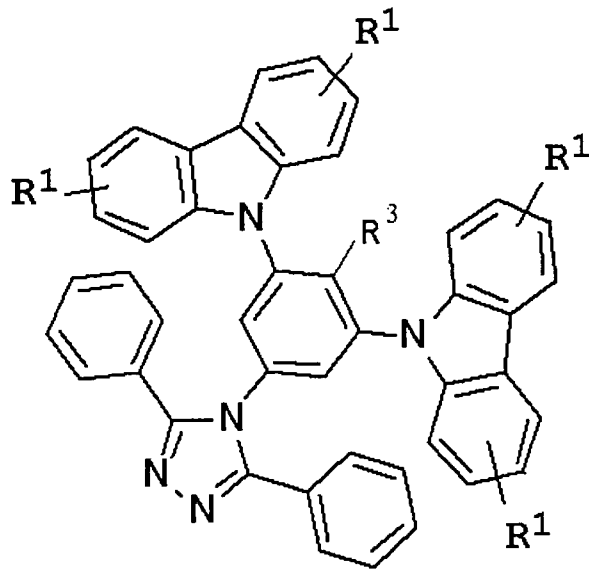
下電極~14；

有機發光單元~16；以及

上電極~18。

七、申請專利範圍：

1. 一種有機化合物，其係具有如式 (III) 所示之結構：



式 (III)

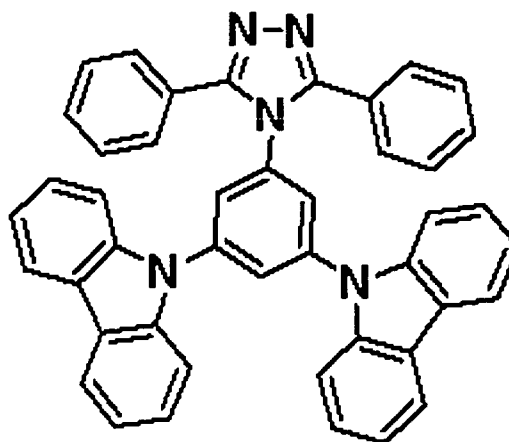
其中， R^1 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含氫或 C_{1-8} 烷基；以及

R^3 係氫、羥基、 C_{1-8} 烷基、或 C_{1-8} 烷氧基。

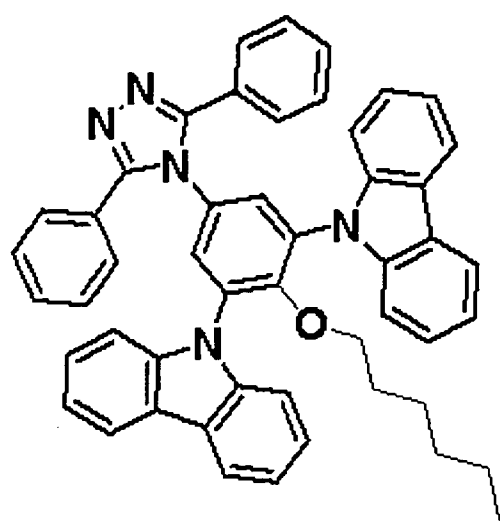
2. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機化合物，其中 R^1 係為甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、戊基、或己基。

3. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機化合物，其中 R^3 係甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、丁氧基、異丁氧基。

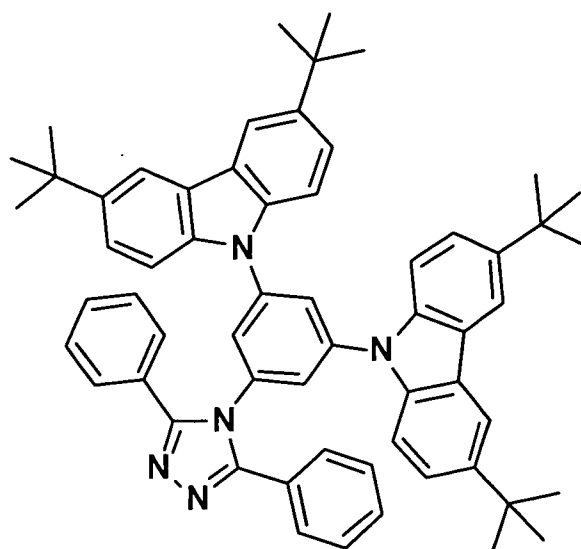
4. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機化合物，其中



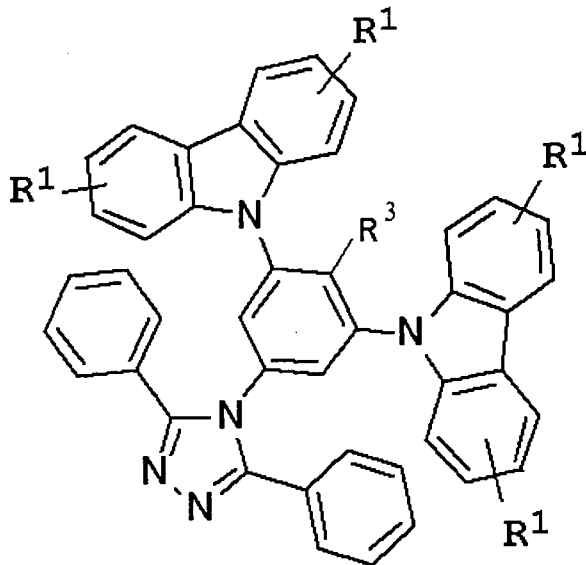
該有機化合物係為



、或



5. 一種有機電激發光裝置，包括：
- 一對電極；以及
 - 一有機發光單元，配置於該對電極之間，其中該有機發光單元包含具有式 (III) 所示結構之化合物：



式 (III)

其中，R¹ 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含 C₁₋₈ 烷基；以及

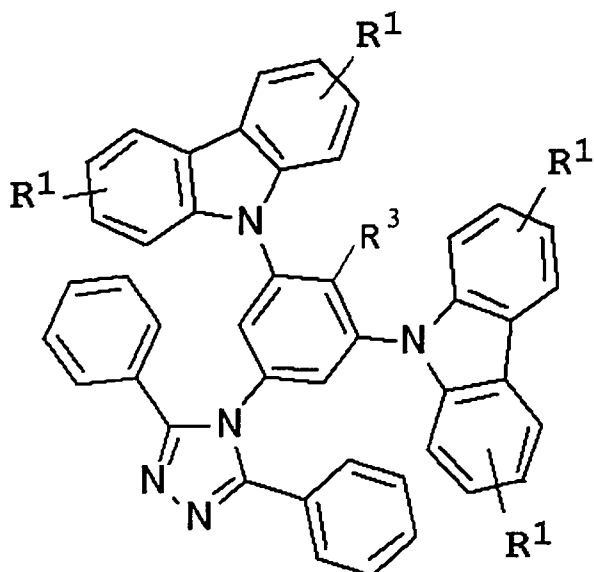
R³ 係氫、羥基、C₁₋₈ 烷基、或 C₁₋₈ 烷氧基。

6. 一種有機電激發光裝置，包括：

一對電極；以及

一有機發光單元，配置於該對電極之間，

其中，該有機發光單元包含一發光層，該發光層包含一主體材料及一磷光摻雜材料，而該主體材料包含具有式 (III) 所示結構之化合物：



式 (III)

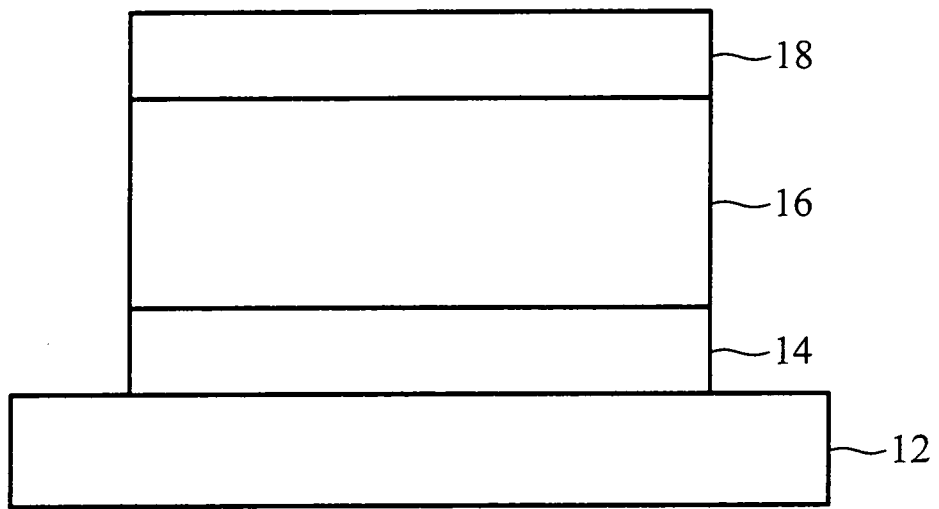
其中，R¹ 係各自獨立且分別為相同或不同之取代基，包含 C₁₋₈ 烷基；以及

R³ 係氫、羥基、C₁₋₈ 烷基、或 C₁₋₈ 烷氧基。

7. 如申請專利範圍第 6 項所述之有機電激發光裝置，其中該發光層係發出藍光、或綠光。

八、圖式：(如後所示)

10



第 1 圖