



(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 I728594 B

(45)公告日：中華民國 110 (2021) 年 05 月 21 日

(21)申請案號：108145771

(22)申請日：中華民國 108 (2019) 年 12 月 13 日

(51)Int. Cl. : C07F15/00 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/00 (2006.01)

H01L51/50 (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

(72)發明人：劉嘉倫 LIOU, JIA LUN (TW)；許博榮 HSU, PO JUNG (TW)；葉翰政 YEH, HAN CHENG (TW)；曾美榕 TSENG, MEI RURNG (TW)

(74)代理人：洪澄文

(56)參考文獻：

TW I327148B

TW I366563B

TW I498044B

TW I671306B

CN 105529406A

審查人員：蔡榮哲

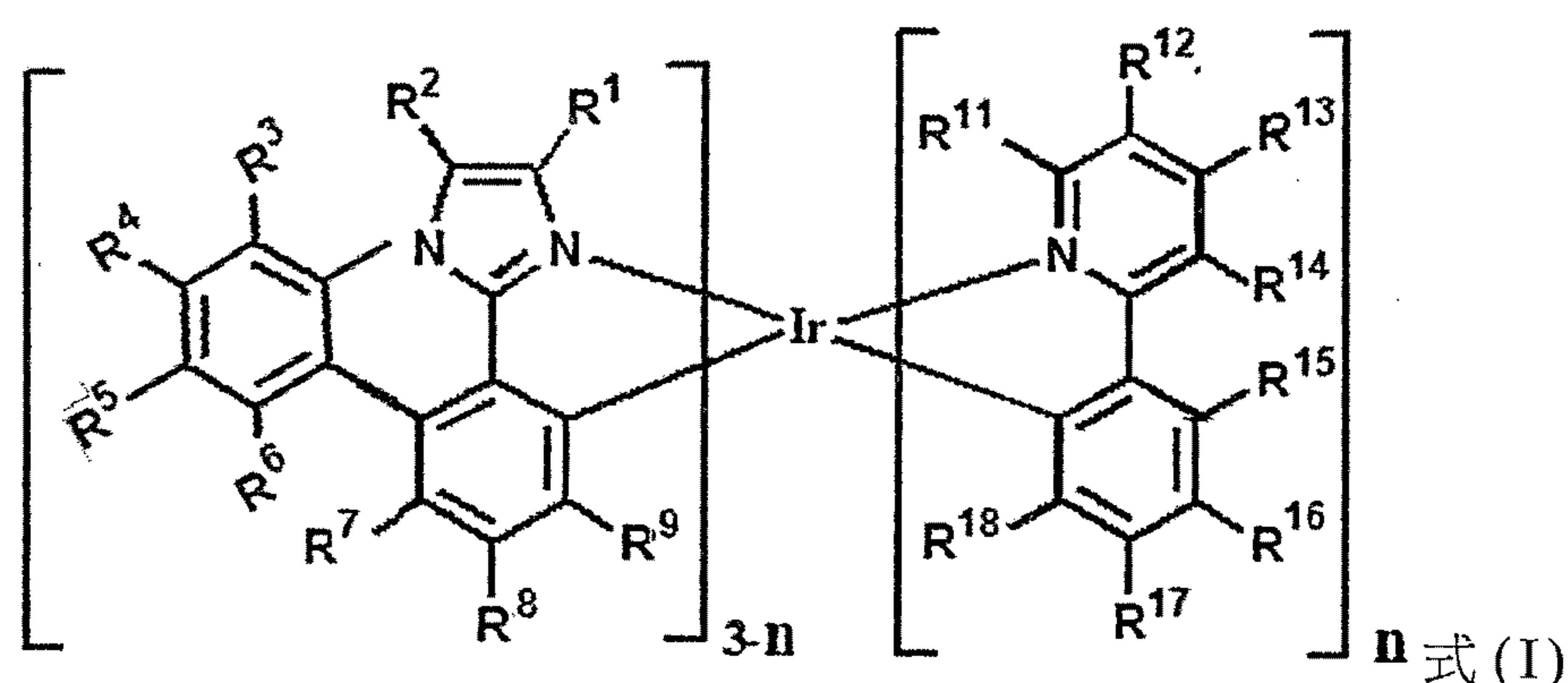
申請專利範圍項數：10 項 圖式數：1 共 40 頁

(54)名稱

有機金屬化合物及包含其之有機發光裝置

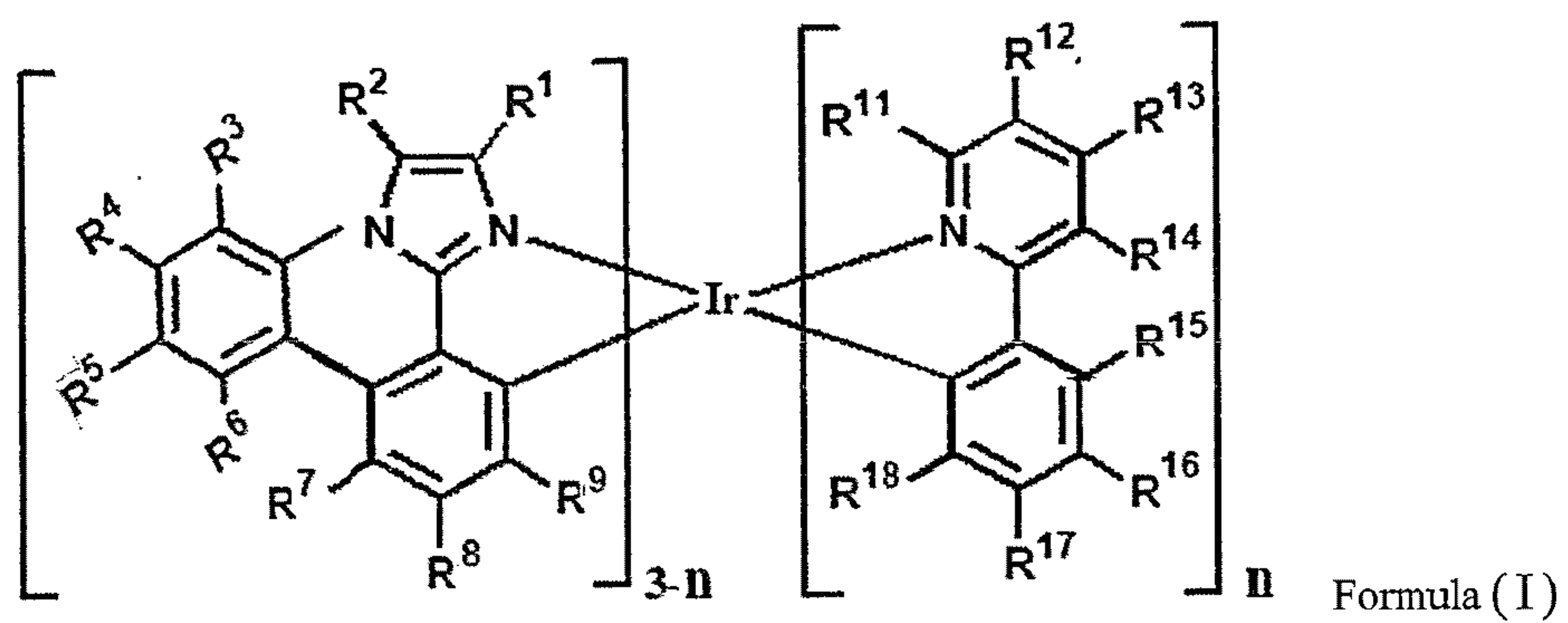
(57)摘要

本發明揭示一種有機金屬化合物、及包含其之有機發光裝置。該有機金屬化合物係具有如式(I)所示之結構：



$R^1$ - $R^{18}$ 、 $n$  如說明書中所定義。

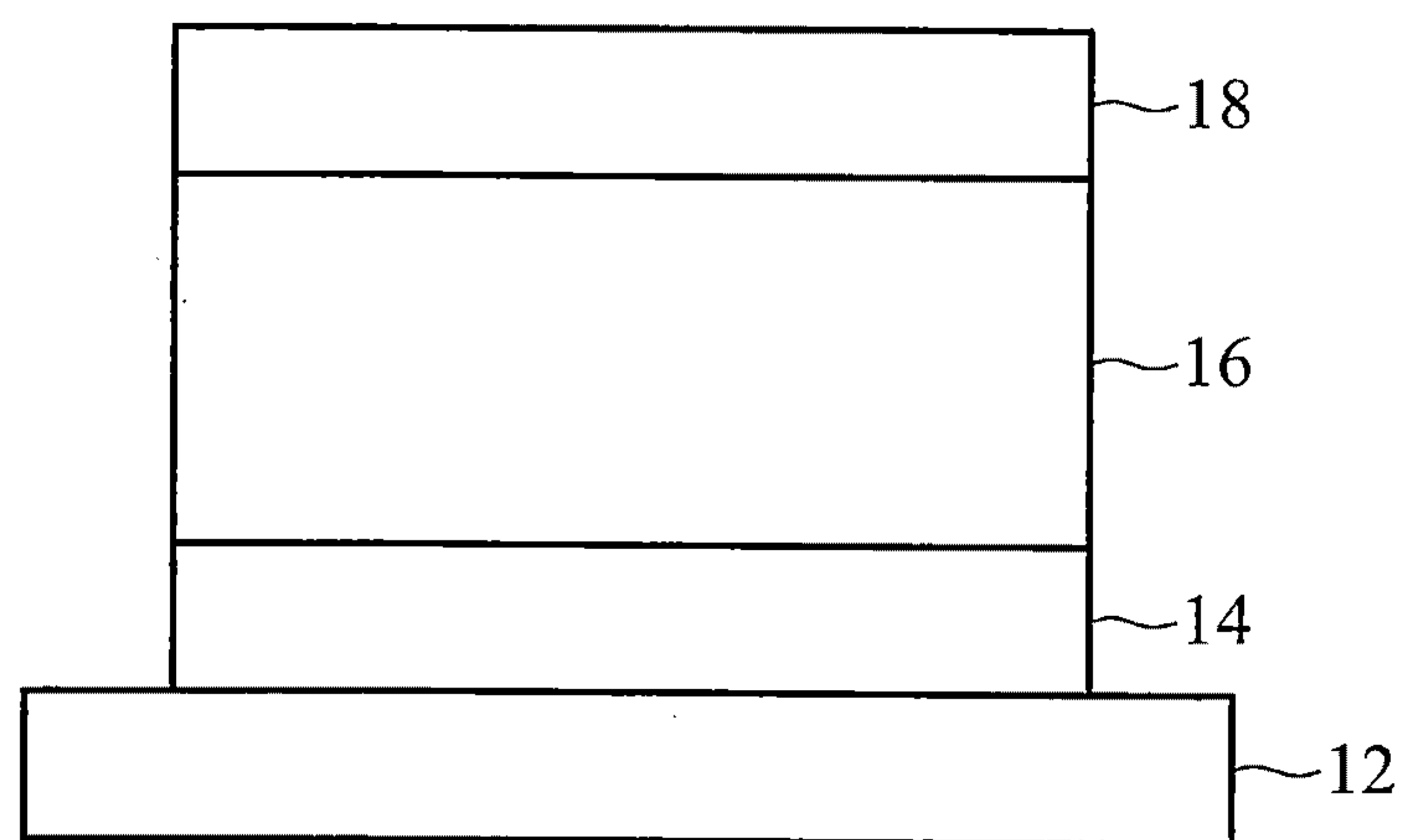
Organic metal compounds, and organic light-emitting devices employing the same are provided. The organic metal compound has a chemical structure of Formula (I):



The definitions of R<sup>1</sup>-R<sup>18</sup> and n are as defined in specification.

指定代表圖：

10

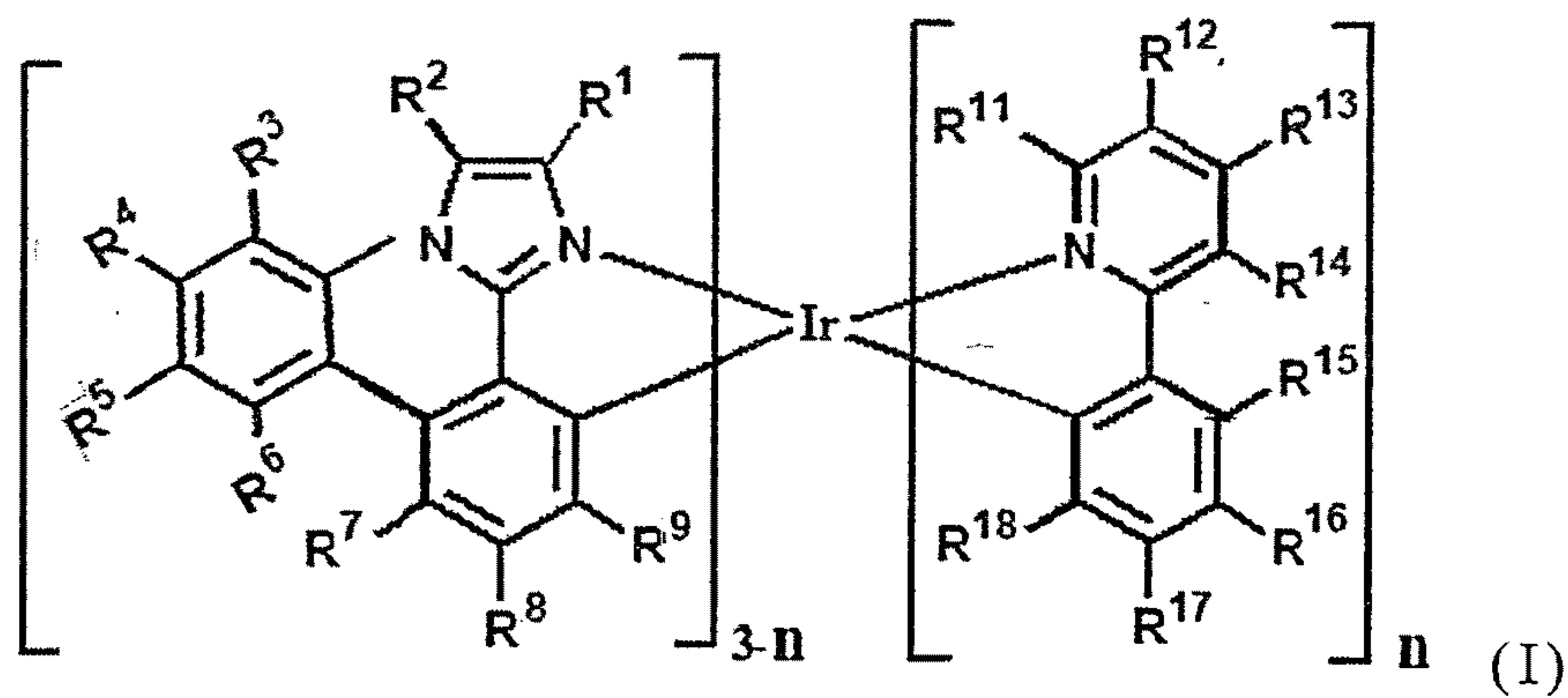


符號簡單說明：

- 10 . . . 有機發光裝置
- 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：



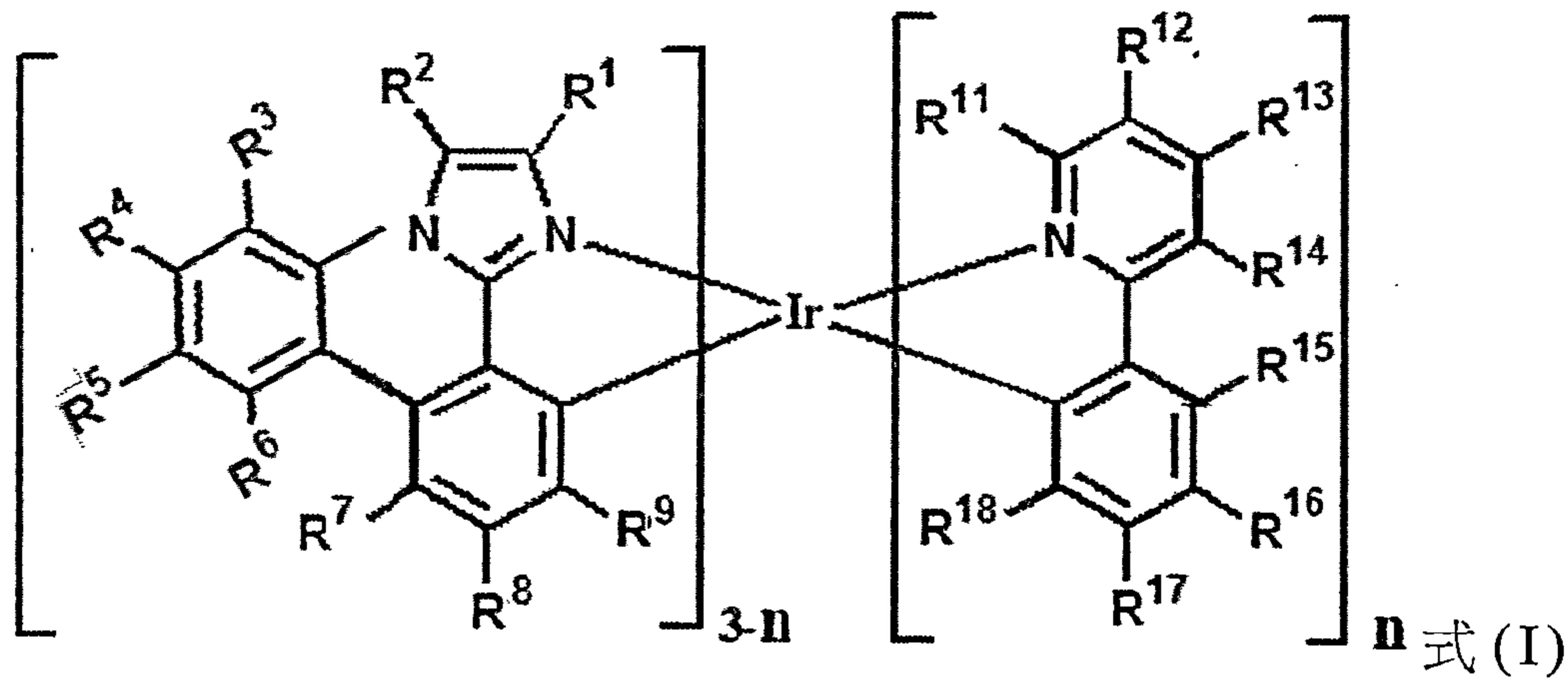
發明摘要

【發明名稱】 有機金屬化合物及包含其之有機發光裝置

Organic metal compound and organic light-emitting device

【中文】

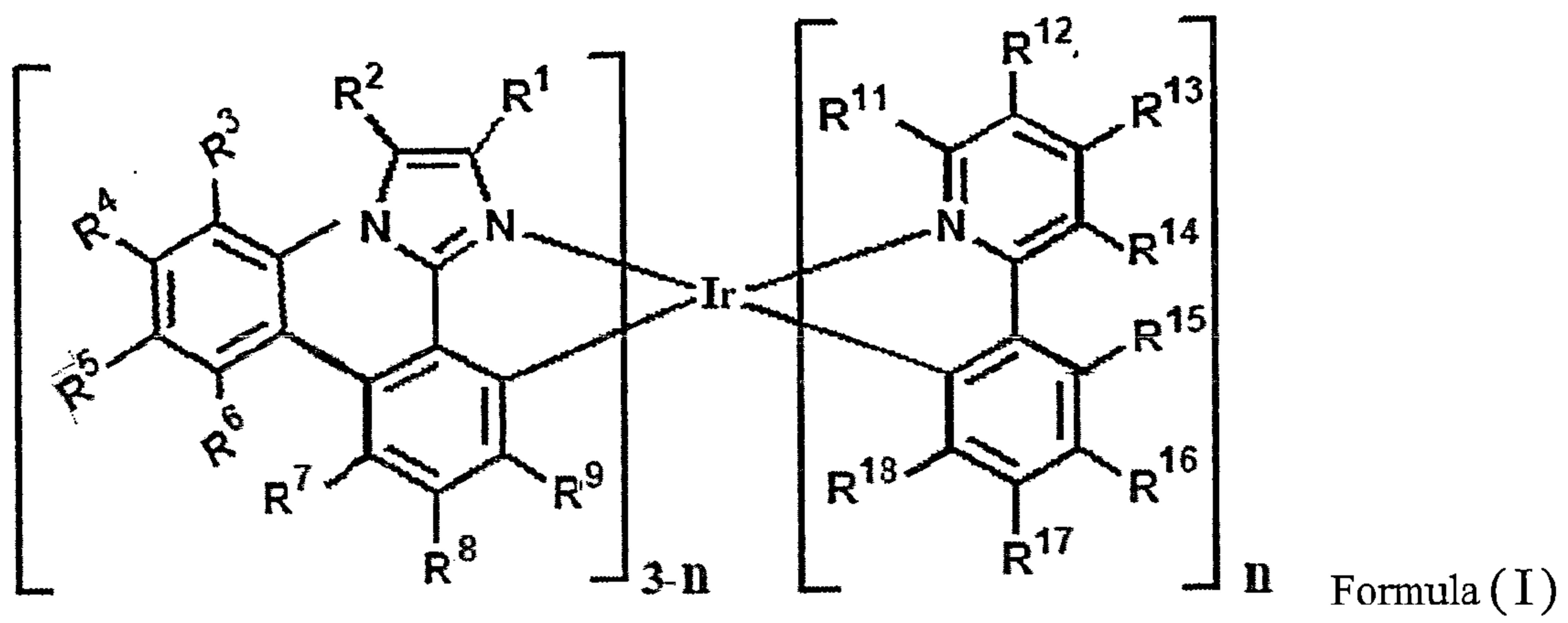
本發明揭示一種有機金屬化合物、及包含其之有機發光裝置。該有機金屬化合物係具有如式(I)所示之結構：



$R^1-R^{18}$ 、 $n$ 如說明書中所定義。

【英文】

Organic metal compounds, and organic light-emitting devices employing the same are provided. The organic metal compound has a chemical structure of Formula (I):



The definitions of R<sup>1</sup>-R<sup>18</sup> and n are as defined in specification.

## 【代表圖】

【本案指定代表圖】：第（ 1 ）圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

10 有機發光裝置；

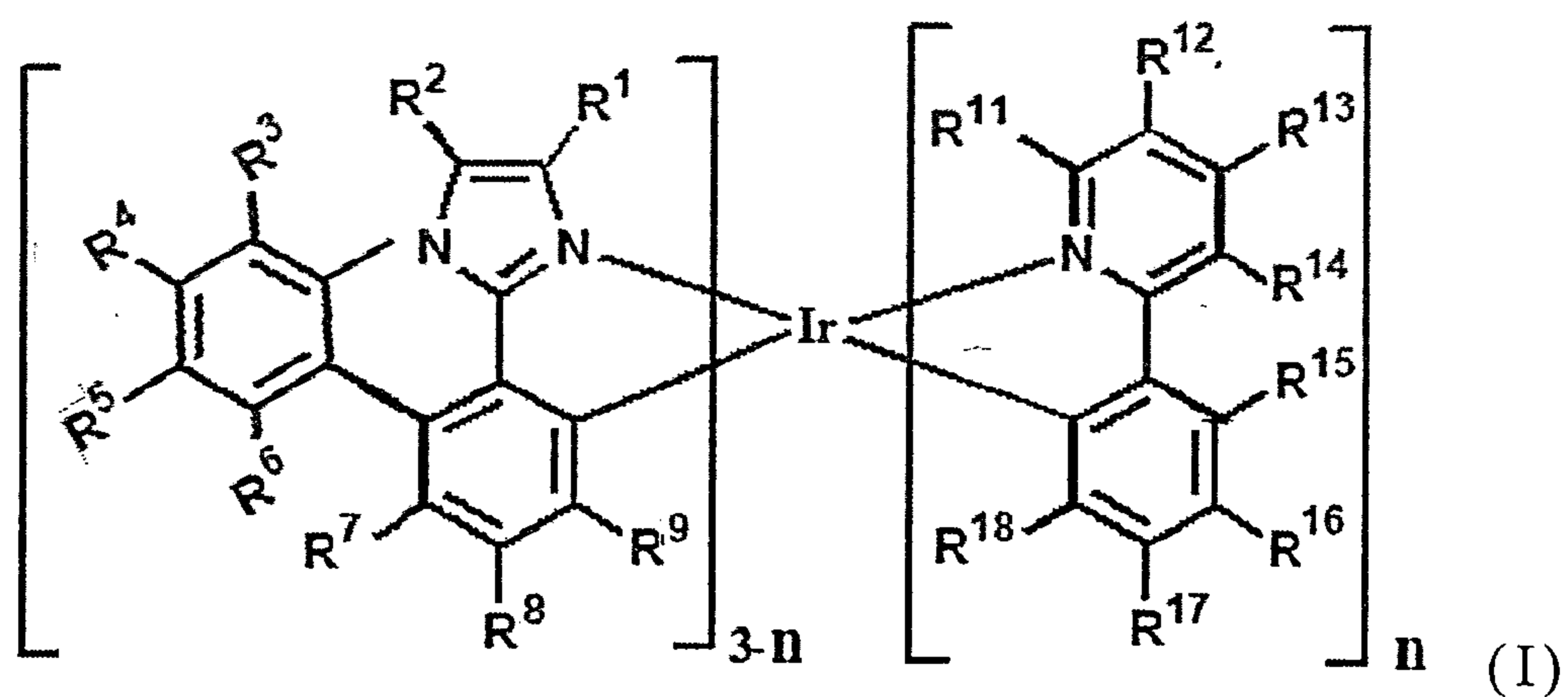
12 基底；

14 下電極；

16 有機發光單元；

18 上電極。

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



# 發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

**【發明名稱】** 有機金屬化合物及包含其之有機發光裝置

Organic metal compound and organic light-emitting device

**【技術領域】**

**【0001】** 本揭露係有關於一種有機金屬化合物及包含其之有機發光裝置。

**【先前技術】**

**【0002】** 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。

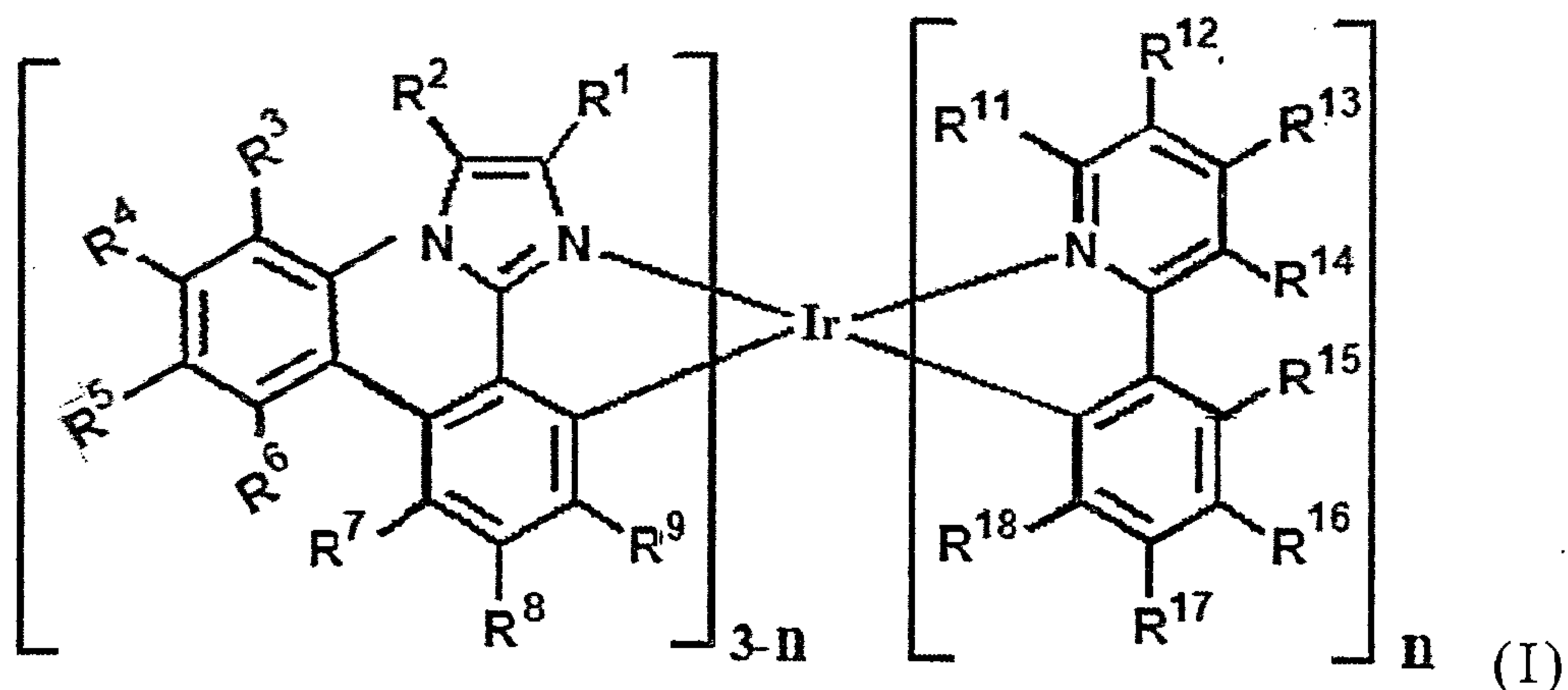
**【0003】** 一般而言，有機發光二極體元件包括一對電極，以及在電極之間的一有機發光介質層。發光是導因於以下的現象。當電場施於兩電極時，陰極射出電子到有機發光介質層，陽極射出電洞到有機發光介質層。當電子與電洞在有機發光介質層內結合時，會產生激子 (excitons)。電子和電洞的再結合就伴隨著發光。

**【0004】** 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時勢所趨。

### 【發明內容】

【0005】 根據本揭露實施例，本揭露提供一種有機金屬化合物，其係具有如式(I)所示之結構：



$R^1$ 或 $R^2$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基； $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 或 $R^9$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-Si(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基； $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或 $R^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-Si(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；且 $n$ 係符合以下(1)-(3)條件之任一

者：

(1)  $n$ 係0，且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 及 $R^9$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $\text{C}_{1-8}$ 烷基；

(2)  $n$ 係1或2，且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、及 $R^{14}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $\text{C}_{1-8}$ 烷基；以及

(3)  $n$ 係3，且 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、及 $R^{14}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $\text{C}_{1-8}$ 烷基。

**【0006】** 根據本揭露另一實施例，本揭露係提供一種有機發光裝置(organic light emitting device)，該裝置包含一對電極；以及一發光單元，配置於該對電極之間，其中該發光單元包含上述之有機金屬化合物。

**【0007】** 為讓本揭露之上述目的、特徵及優點能更明顯易懂，下文特舉一較佳實施例，並配合所附的圖式，作詳細說明如下。

#### **【圖式簡單說明】**

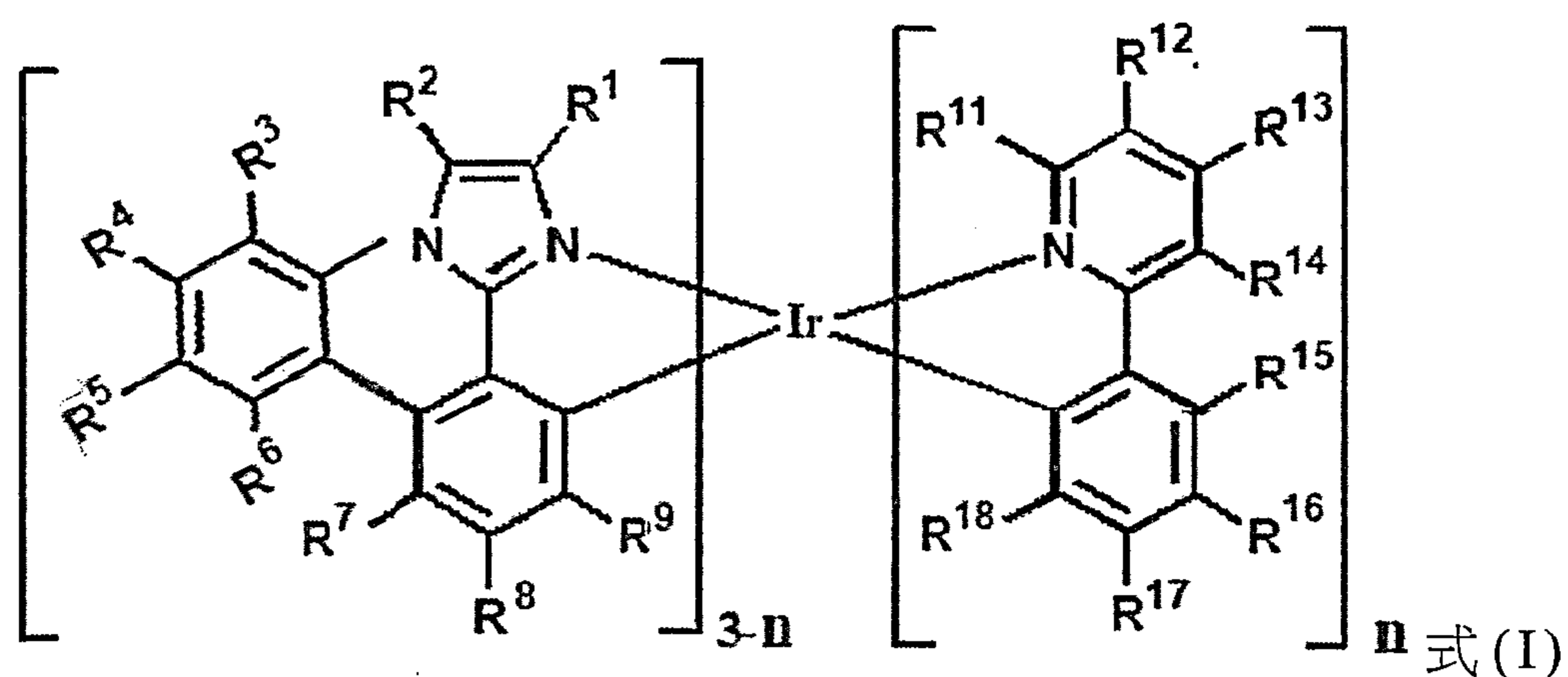
#### **【0008】**

第1圖係本揭露一較佳實施例所述之有機發光裝置的剖面結構示意圖。

#### **【實施方式】**

**【0009】** 根據本揭露實施例，本揭露揭示一種有機金屬化合物，其係具有如式(I)所示之結構：





$R^1$ 或 $R^2$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基； $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 或 $R^9$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基； $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或 $R^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；且 $n$ 係符合以下(1)-(3)條件之任一者：

(1)  $n$ 係0，且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 及 $R^9$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；

(2)  $n$ 係1或2，且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、及 $R^{14}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；以及

(3)  $n$ 係3，且 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、及 $R^{14}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基。

【0010】 根據本揭露實施例， $C_{1-8}$ 烷基可為直鏈或分支(linear

or branched)鏈的烷基。舉例來說，C<sub>1-8</sub>烷基可為甲基(methyl)、乙基(ethyl)、丙基(propyl)、異丙基(isopropyl)、正丁基(n-butyl)、叔丁基(t-butyl)、仲丁基(sec-butyl)、異丁基(isobutyl)、戊基(pentyl)、或己基(hexyl)。根據本揭露實施例，C<sub>1-8</sub>鹵烷基係指碳上的氫全部或部份被鹵素取代的烷基，且可為直鏈(linear)或分支鏈(branched)。舉例來說，氟甲基可為單氟甲基、二氟甲基、或全氟甲基。根據本揭露實施例，C<sub>1-8</sub>烷基可為直鏈或分支(linear or branched)鏈的烷氧基。舉例來說，C<sub>1-8</sub>烷氧基為甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、仲丁氧基、異丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、或己氧基。根據本揭露實施例，C<sub>5-10</sub>環烷基可為環戊基(cyclopentyl)或環己基(cyclohexyl)。根據本揭露實施例，C<sub>6-12</sub>芳香基可為苯基(phenyl)、聯苯基(biphenyl)、或萘基(naphthyl)。根據本揭露實施例，官能基-Si(R<sup>19</sup>)<sub>3</sub>可例如為三甲基矽烷基(trimethylsilyl group)、三乙基矽烷基(triethylsilyl group)、三丙基矽烷基(tripropylsilyl group)、丁基二甲基矽烷基(butyldimethylsilyl group)、丙基二甲基矽烷基(propyldimethylsilyl group)、或異丁基二甲基矽烷基(t-butyldimethylsilyl group)。

**【0011】** 根據本揭露實施例，R<sup>1</sup>或R<sup>2</sup>可各自獨立地為氫、氘、氘代甲基、氘代乙基、氟、甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、己基、氟甲基、氟乙基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、仲丁氧基、異丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、環戊基、環己基、苯基、聯苯基、或萘基。

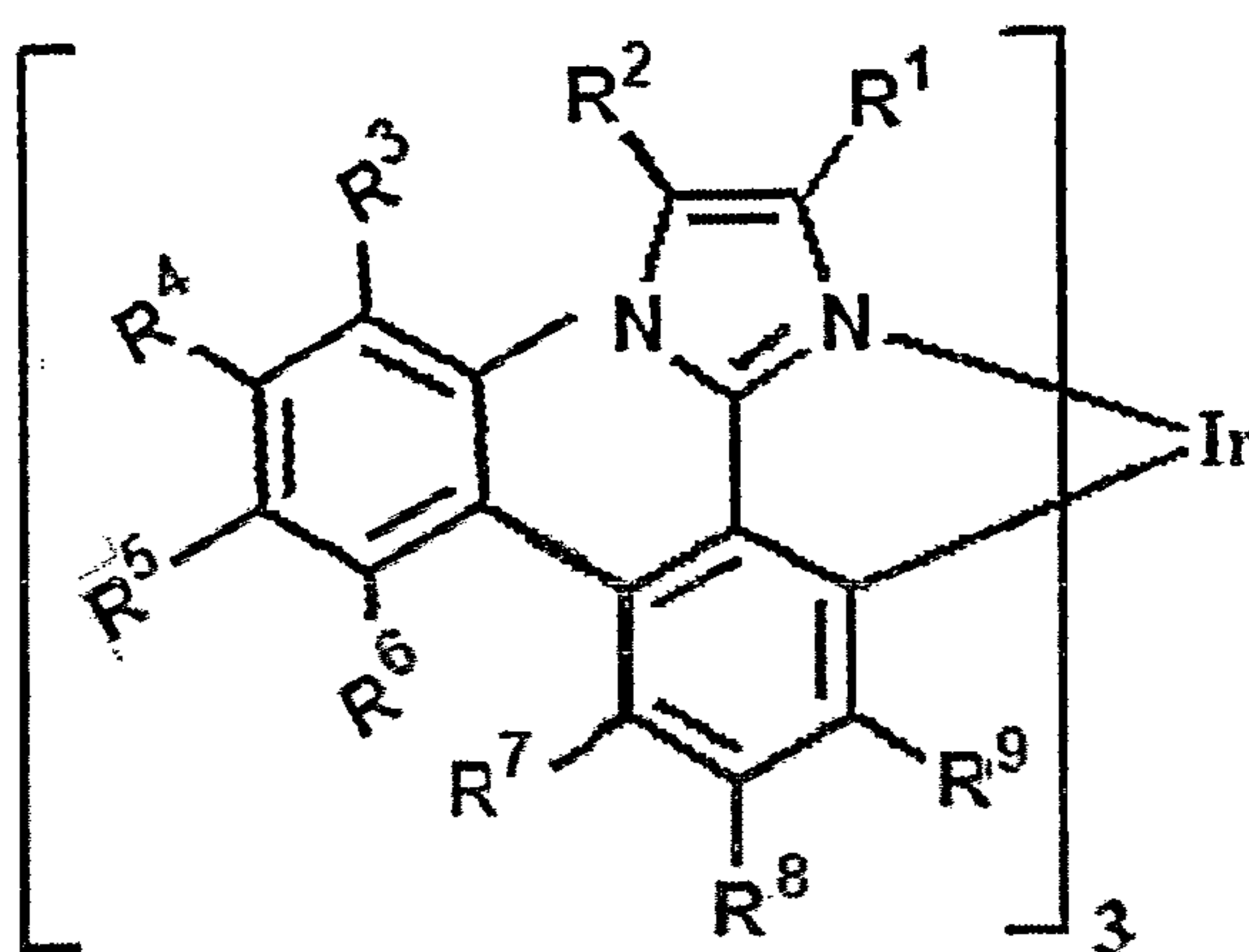
【0012】 根據本揭露實施例， $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或 $R^{15}$ 係各自獨立地為氫、氟、氬代甲基、氬代乙基、氟、甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、己基、氟甲基、氟乙基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、仲丁氧基、異丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、環戊基、環己基、苯基、聯苯基、萘基、或三甲基矽烷基。

【0013】 根據本揭露實施例， $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或 $R^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、氬代甲基、氬代乙基、氟、甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、己基、氟甲基、氟乙基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、仲丁氧基、異丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、環戊基、環己基、苯基、聯苯基、或萘基。

【0014】 根據本揭露實施例， $R^{19}$ 可各自獨立地為氫、氟、甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、或己基。

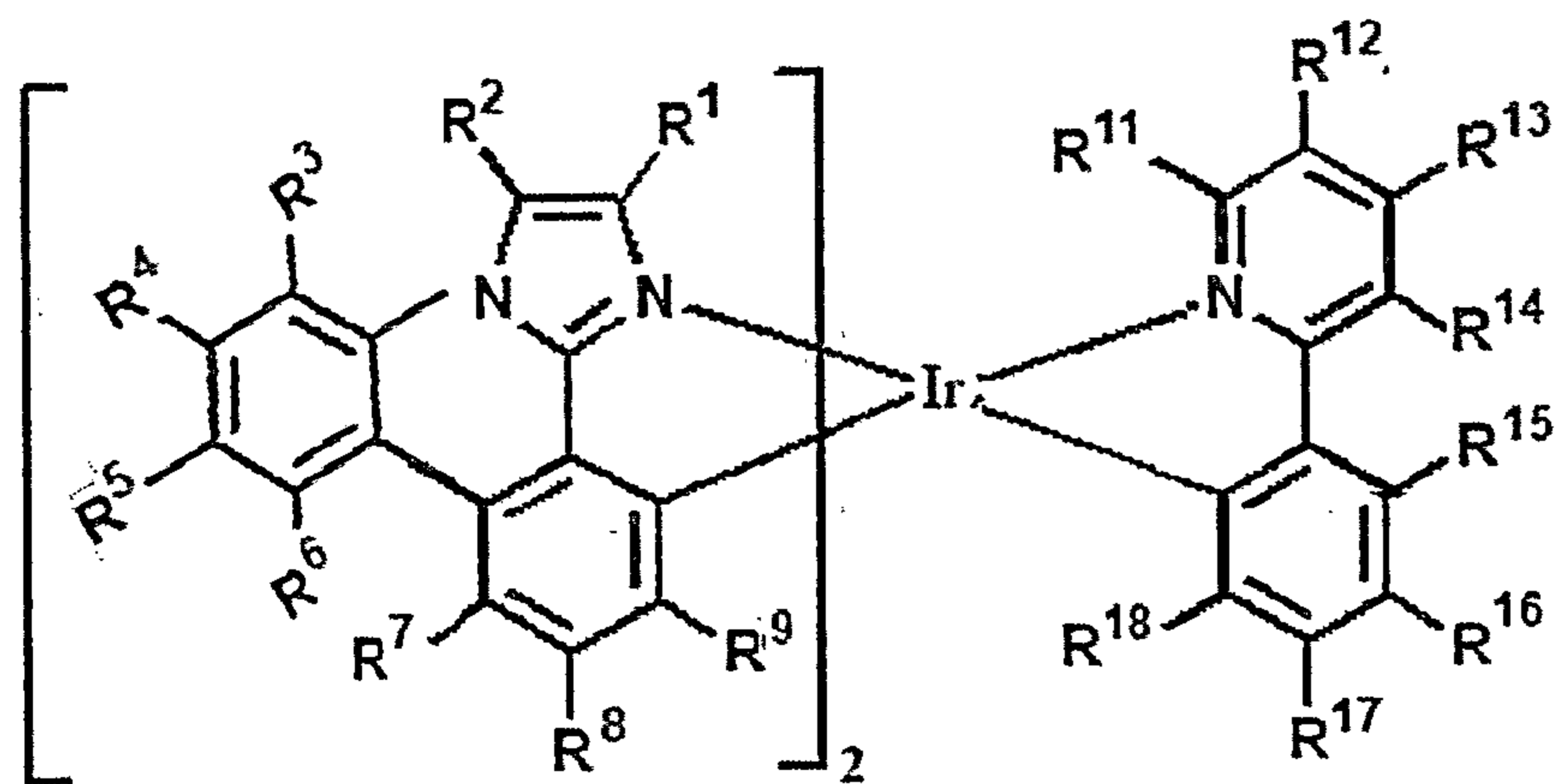
【0015】 根據本申請案實施例，本揭露所述具有式(I)所示結構的有機金屬化合物，其具有至少一個三烷基矽烷基，以具有適當的最高鍵結電子能階(highest occupied molecular orbital、HOMO)與最低未占分子軌域(lowest unoccupied molecular orbital、LUMO)能階，以及較佳的電化學穩定及熱穩定性質。如此一來，可有效提升有機發光裝置之壽命表現與發光效率。

【0016】 根據本揭露實施例，本揭露所述具有式(I)所示結構



的有機金屬化合物可為  $\left[ \text{Ir}(\text{C}_6\text{H}_3\text{R}_3\text{R}_4\text{R}_5\text{R}_6)(\text{C}_3\text{H}_3\text{N}_2\text{R}^1\text{R}^2)(\text{C}_6\text{H}_3\text{R}^7\text{R}^8\text{R}^9) \right]_3$ ，其中  $\text{R}^1$  或  $\text{R}^2$  可各自獨立地為氫、氘、 $\text{C}_{1-8}$  烷基、 $\text{C}_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、 $\text{C}_{1-8}$  鹵烷基、 $\text{C}_{1-8}$  烷氧基、 $\text{C}_{5-10}$  環烷基、或  $\text{C}_{6-12}$  芳香基；以及， $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、或  $\text{R}^9$  係各自獨立地為氫、氘、 $\text{C}_{1-8}$  烷基、 $\text{C}_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、 $\text{C}_{1-8}$  鹵烷基、 $\text{C}_{1-8}$  烷氧基、 $\text{C}_{5-10}$  環烷基、 $\text{C}_{6-12}$  芳香基、或  $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中  $\text{R}^{19}$  係各自獨立地為  $\text{C}_{1-8}$  烷基；且  $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、及  $\text{R}^9$  之至少一者之至少一者為  $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ 。

【0017】 根據本揭露實施例，該有機金屬化合物可為



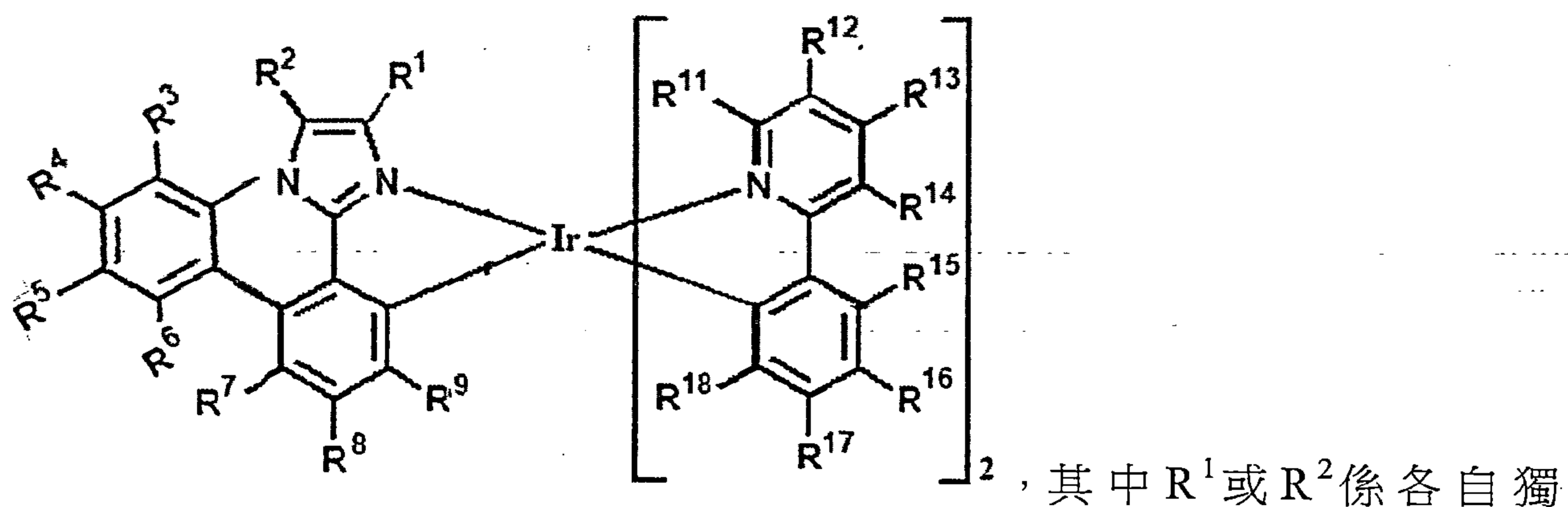
，其中  $\text{R}^1$  或  $\text{R}^2$  係各自

獨立地為氫、氘、 $\text{C}_{1-8}$  烷基、 $\text{C}_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、 $\text{C}_{1-8}$  鹵烷基、 $\text{C}_{1-8}$  烷氧基、 $\text{C}_{5-10}$  環烷基、或  $\text{C}_{6-12}$  芳香基； $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{11}$ 、 $\text{R}^{12}$ 、 $\text{R}^{13}$ 、 $\text{R}^{14}$ 、或  $\text{R}^{15}$  係各自獨立地為氫、氘、 $\text{C}_{1-8}$  烷基、 $\text{C}_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、 $\text{C}_{1-8}$  鹵烷基、 $\text{C}_{1-8}$

烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；以及 $\text{R}^{16}$ 、 $\text{R}^{17}$ 、或 $\text{R}^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、氫、鹵素、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基；且 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{11}$ 、 $\text{R}^{12}$ 、 $\text{R}^{13}$ 、 $\text{R}^{14}$ 、或 $\text{R}^{15}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ 。

【0018】 根據本揭露實施例，其中 $\text{R}^1$ 或 $\text{R}^2$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基； $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{11}$ 、 $\text{R}^{12}$ 、 $\text{R}^{13}$ 、 $\text{R}^{14}$ 、或 $\text{R}^{15}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，其中 $\text{R}^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；以及 $\text{R}^{16}$ 、 $\text{R}^{17}$ 、或 $\text{R}^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、氫、鹵素、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基；且 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、或 $\text{R}^9$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ 。

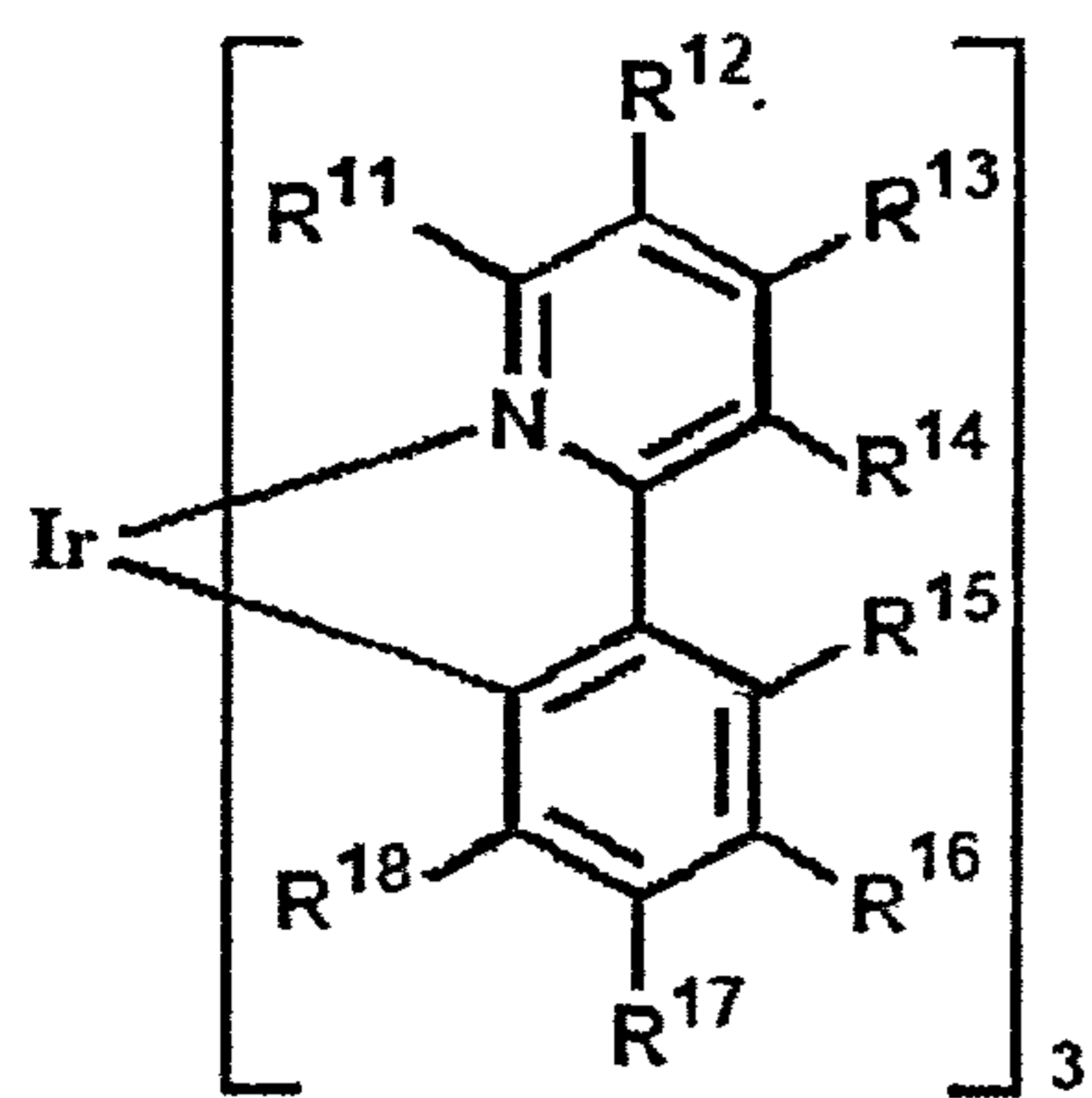
【0019】 根據本揭露實施例，該有機金屬化合物可為



$R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或 $R^{15}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-Si(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；以及 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或 $R^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、氫、鹵素、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基；且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或 $R^{15}$ 之至少一者為 $-Si(R^{19})_3$ 。

**【0020】** 根據本揭露實施例，其中 $R^1$ 或 $R^2$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基； $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或 $R^{15}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-Si(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；以及 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或 $R^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、氫、鹵素、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基；且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、或 $R^9$ 之至少一者為 $-Si(R^{19})_3$ 。

**【0021】** 根據本揭露實施例，該有機金屬化合物可為

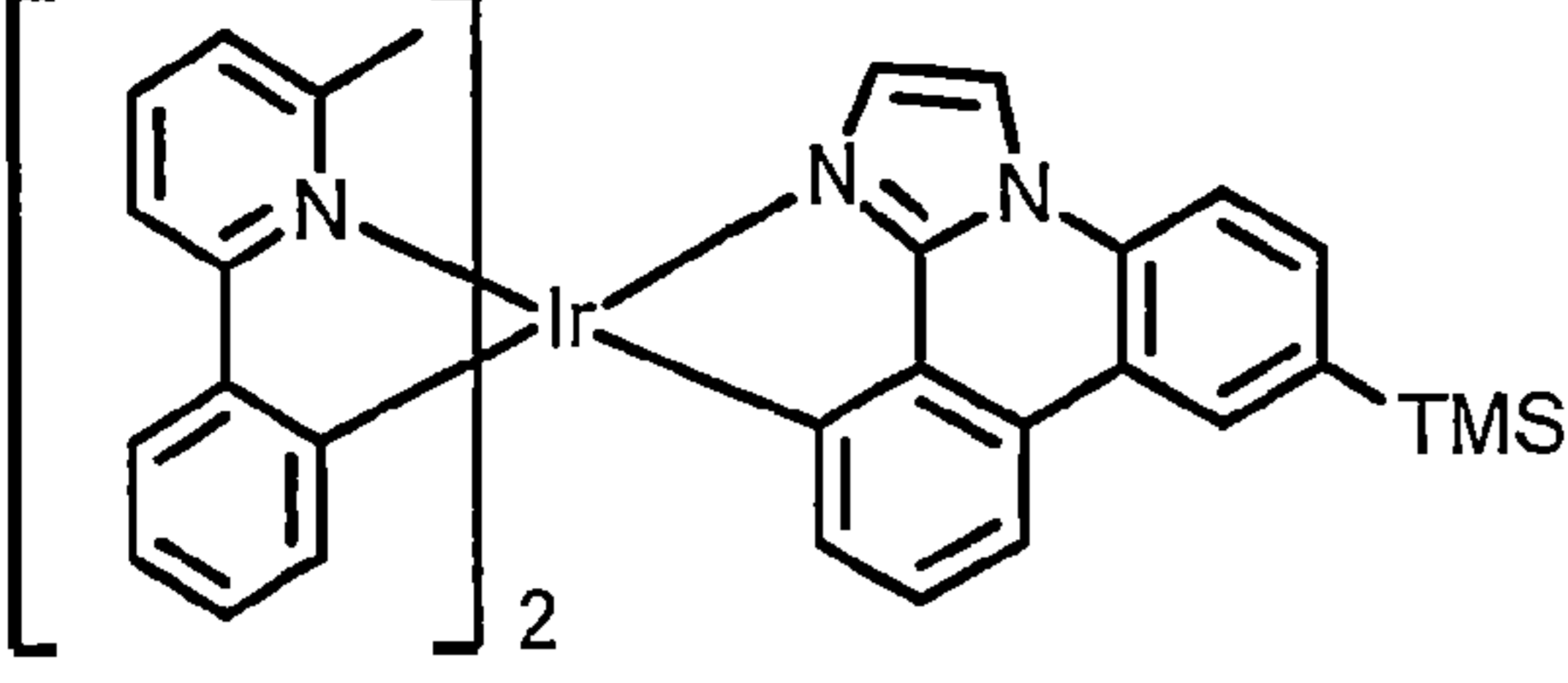
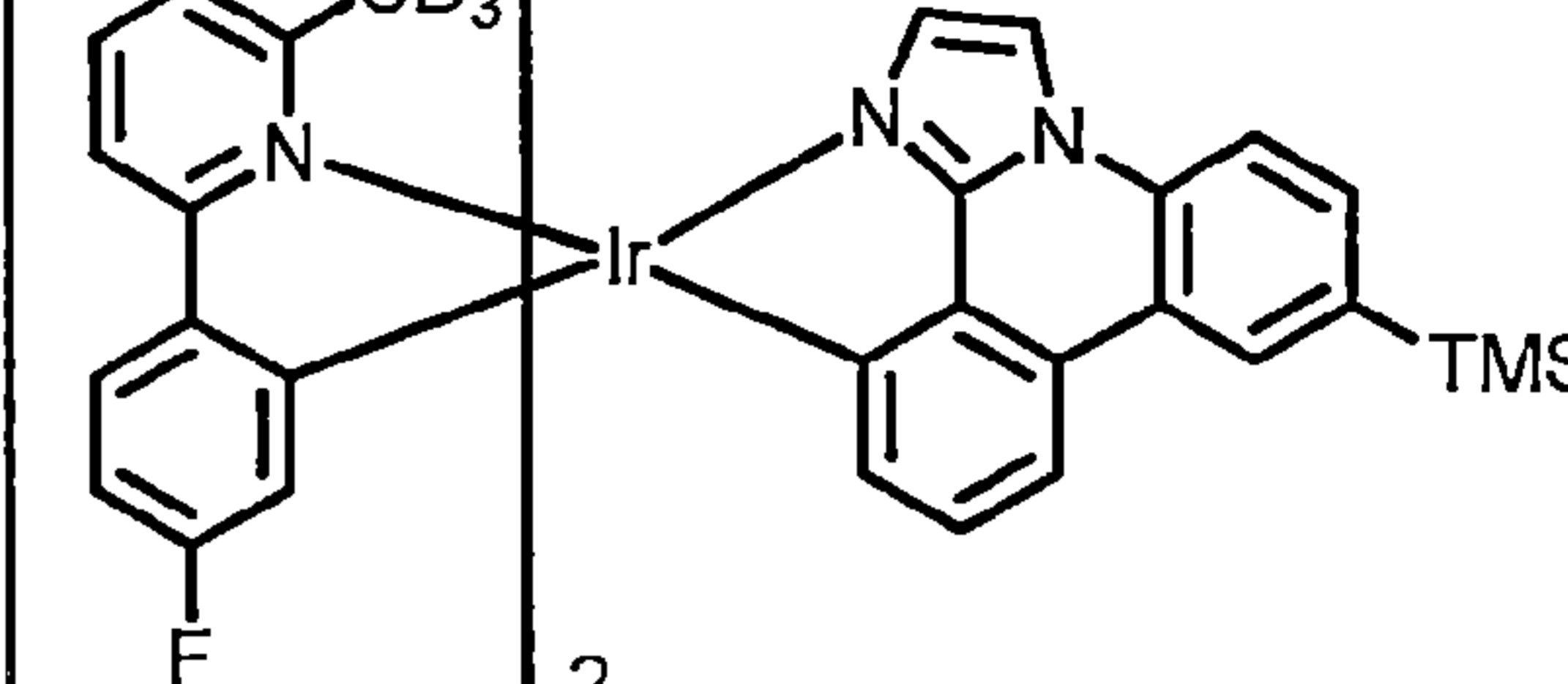
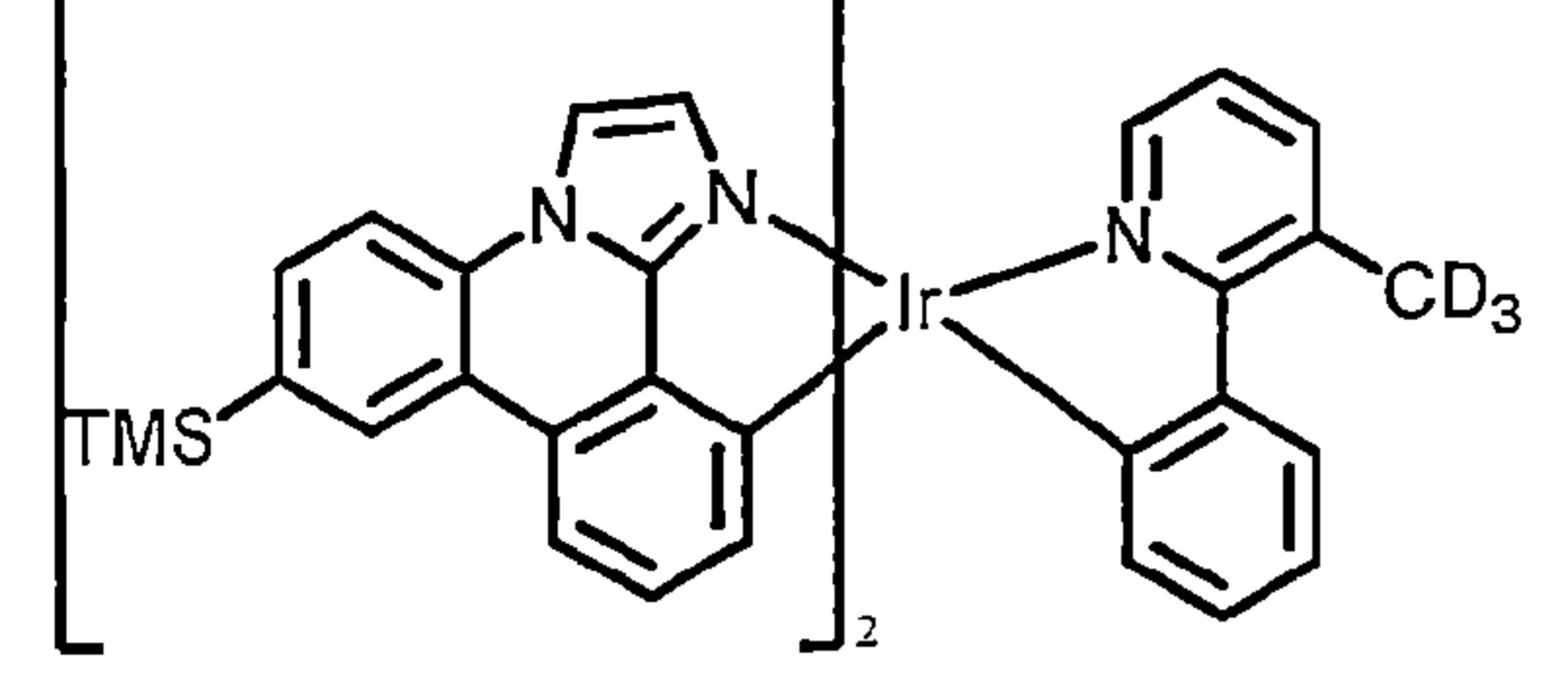
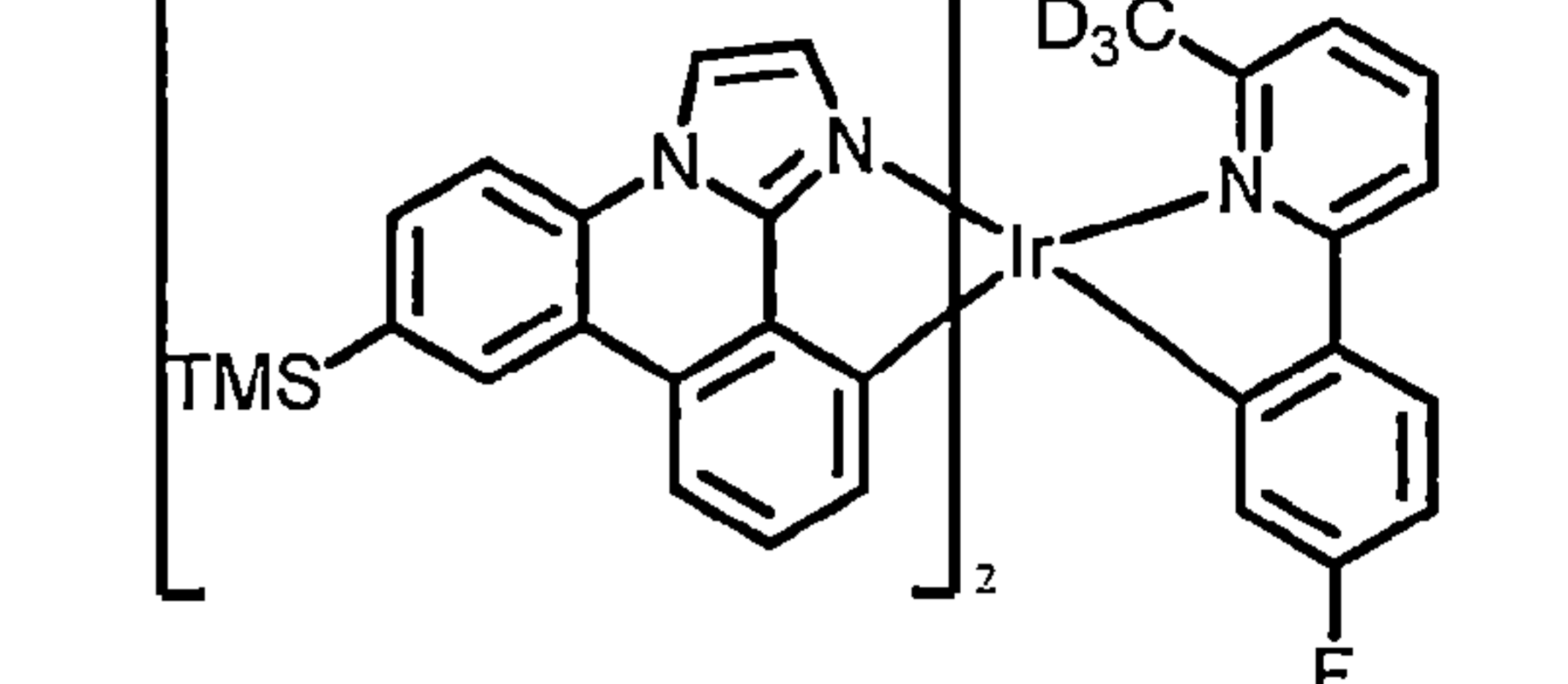
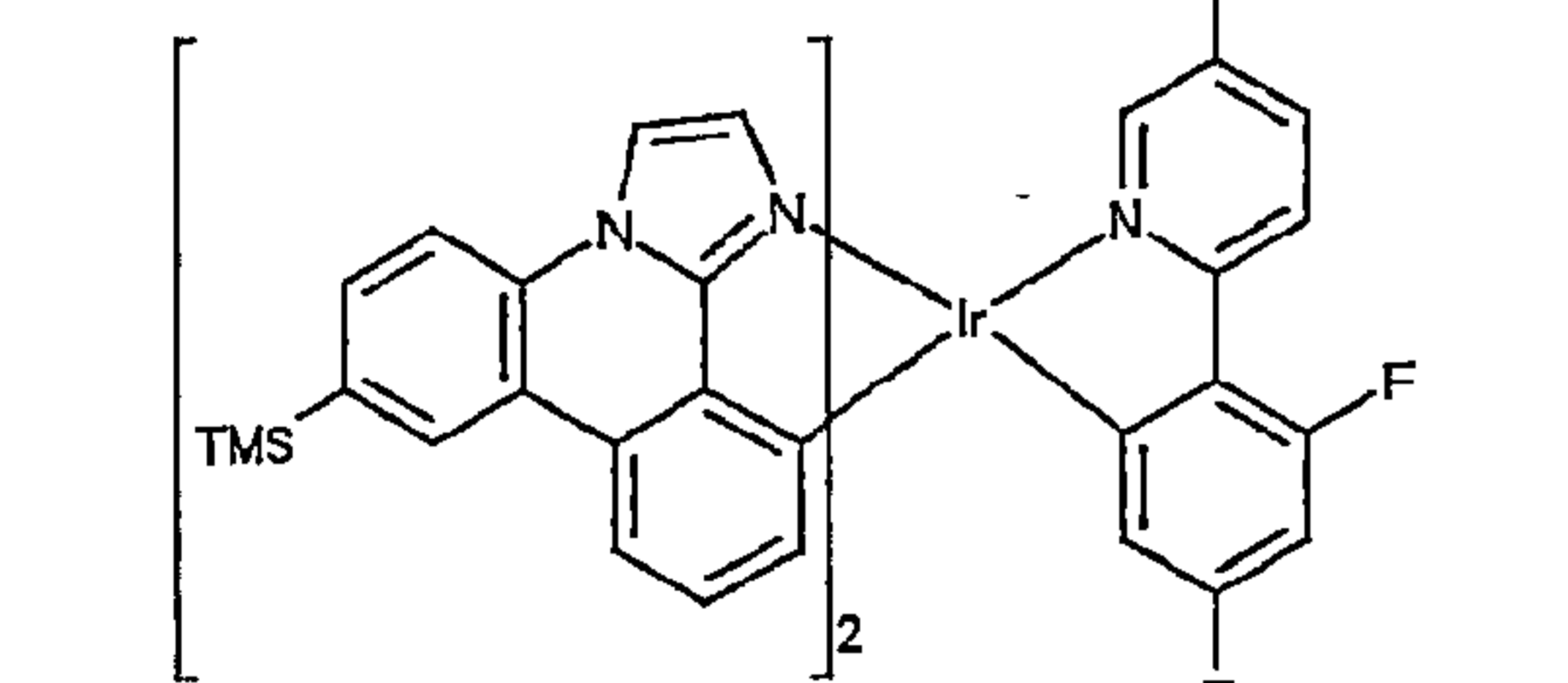


，其中 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或 $R^{18}$ 可各自獨立地為氫、氘、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氘代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、或 $C_{6-12}$ 芳香基； $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、或 $R^{14}$ 可各自獨立地為氫、氘、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氘代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ，且 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、或 $R^{14}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(\text{R}^{19})_3$ ； $R^{19}$ 可各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基。

【0022】 表1係列舉出本揭露實施例所得之具有式(I)所示結構之有機金屬化合物，其各自之化學結構均詳列於表中。

【0023】 表1

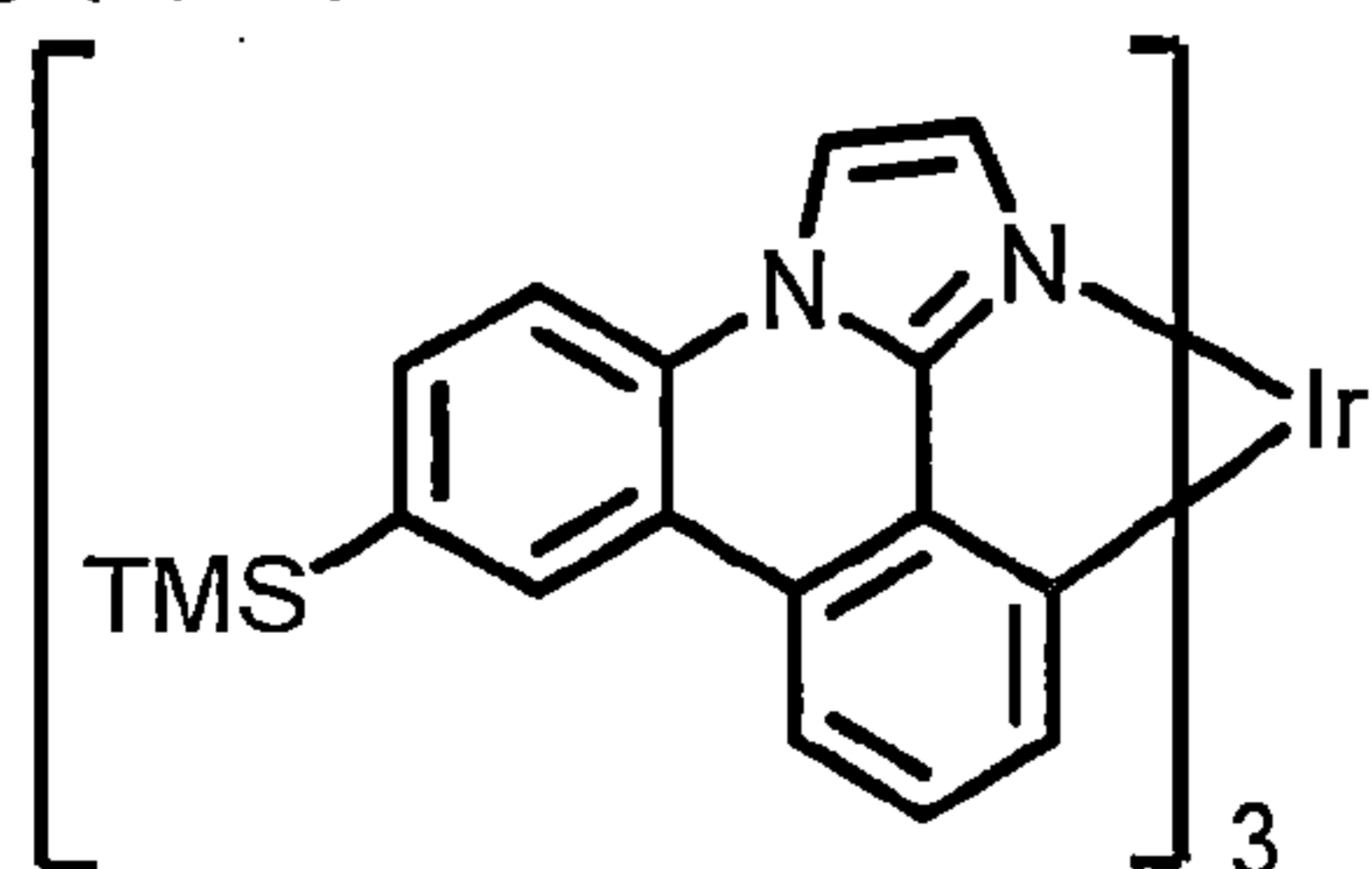
	有機金屬化合物結構式		有機金屬化合物結構式
實施例 1	<p>有機金屬化合物(I)</p>	實施例 2	<p>有機金屬化合物(II)</p>
實施例 3	<p>有機金屬化合物(III)</p>	實施例 4	<p>有機金屬化合物(IV)</p>

實 施 例 5	 <p>有機金屬化合物(V)</p>	實 施 例 6	 <p>有機金屬化合物(VI)</p>
實 施 例 7	 <p>有機金屬化合物(VII)</p>	實 施 例 8	 <p>有機金屬化合物(VIII)</p>
實 施 例 9	 <p>有機金屬化合物(IX)</p>		

(TMS:  $(\text{CH}_3)_3\text{Si}-$ )

【0024】 為進一步說明本揭露所述有機金屬化合物的製備方法，以下說明實施例1至實施例9所述有機金屬化合物其製備流程。

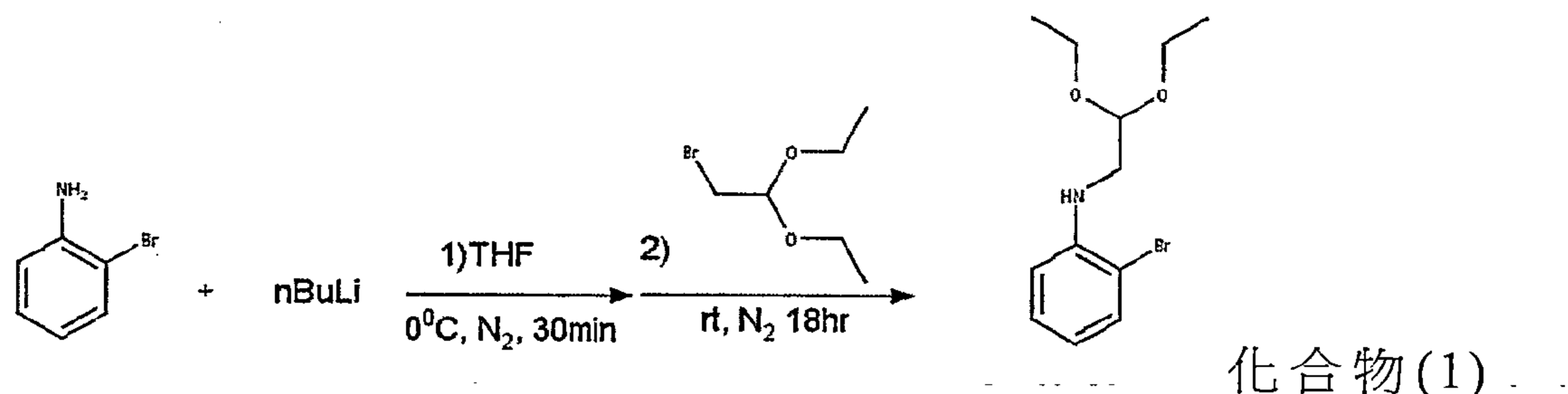
【0025】 實施例1：有機金屬化合物(I)的製備



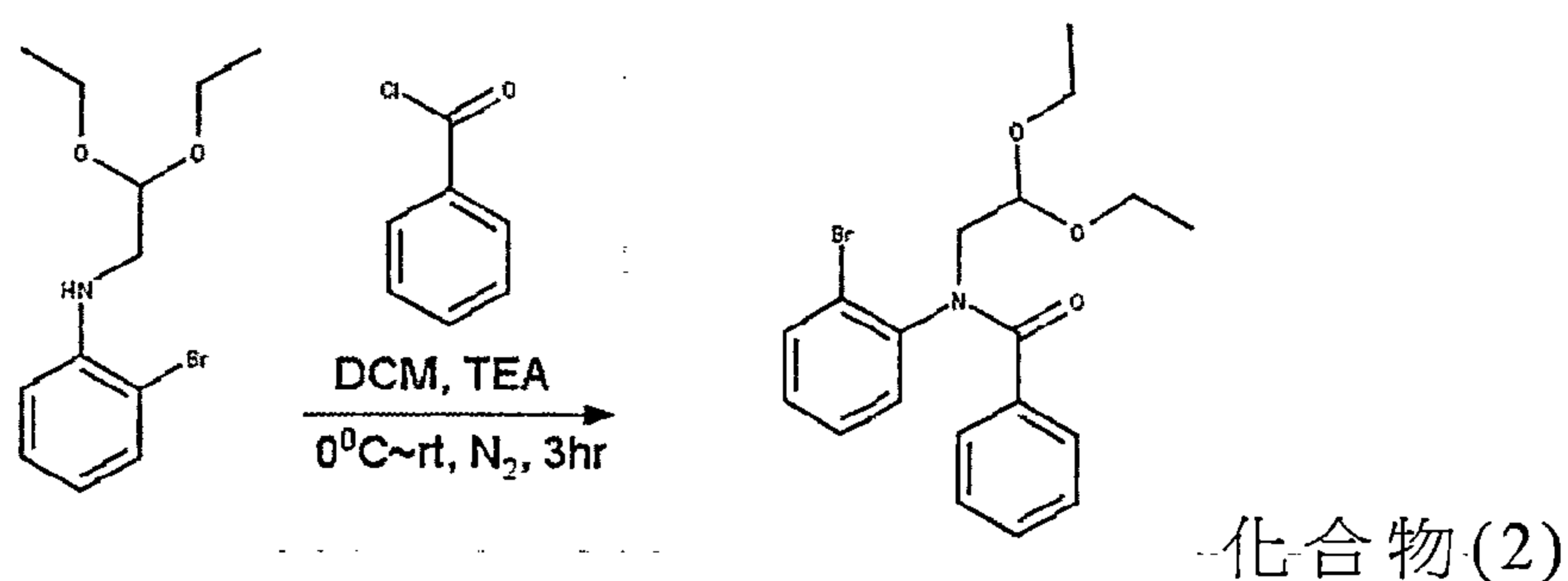
【0026】 取 2-bromoaniline(20.20g, 117.4mmol)放入雙頸瓶，加入無水THF(500.0 mL)後將雙頸瓶放入冰浴，並放置10分鐘使其



溫度平衡，用針筒取 nBuLi(92.0 mL, 147.2mmol)並緩慢加入，在冰浴下反應1小時，以針筒取2-bromo-1,1-diethoxyethane(26.0 mL, 176.0 mmol)加入雙頸瓶後在室溫下反應18小時。反應完加少量的水終止反應並以減壓濃縮去除THF，再用EA和水萃取，除水過濾後，用管柱層析純化，動相為EA:Hexane=1:20，得到化合物(1)。

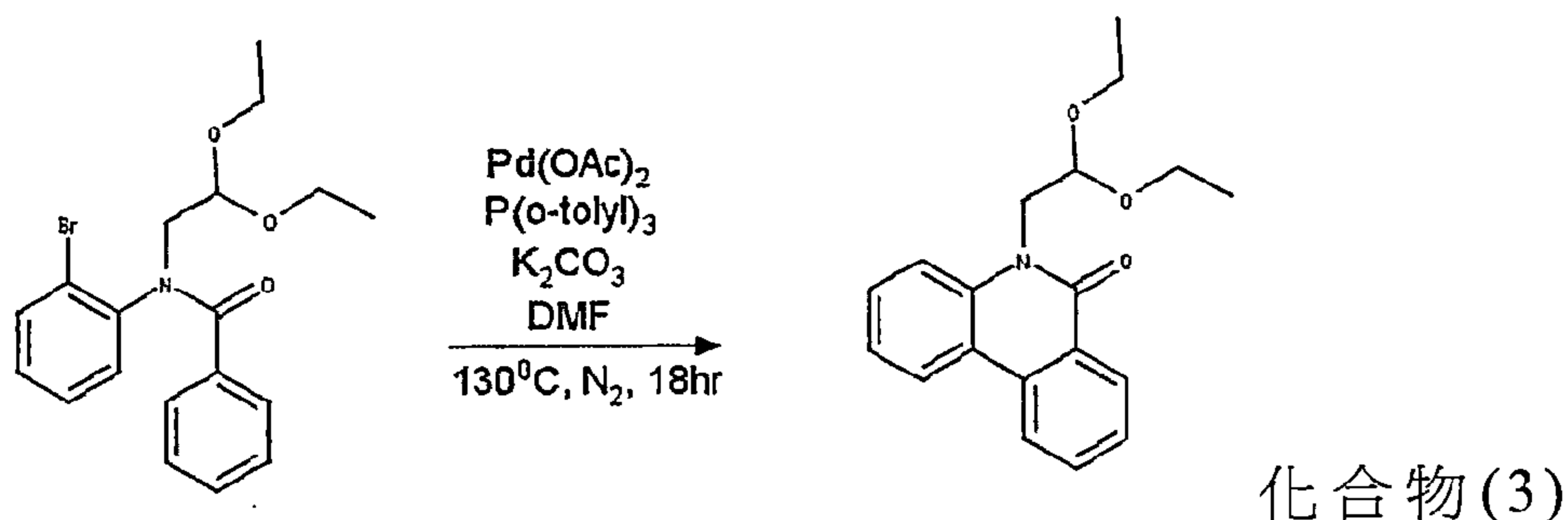


【0027】 將化合物(1)(27.26 g, 94.6mmol)放入雙頸瓶並加入DCM(240.0 mL)，將雙頸瓶放入冰浴並放置10分鐘使其溫度平衡，加入 triethylamine(26.0 mL, 186.4 mmol)後緩慢加入 benzoyl chloride(14.3 mL, 123.2 mmol)，在冰浴下攪拌約10分鐘後將雙頸瓶取出並在室溫下反應18小時，反應完用 DCM及水萃取，除水過濾後以管柱層析純化，動相為EA:Hexane=1:10，減壓濃縮得到化合物(2)。

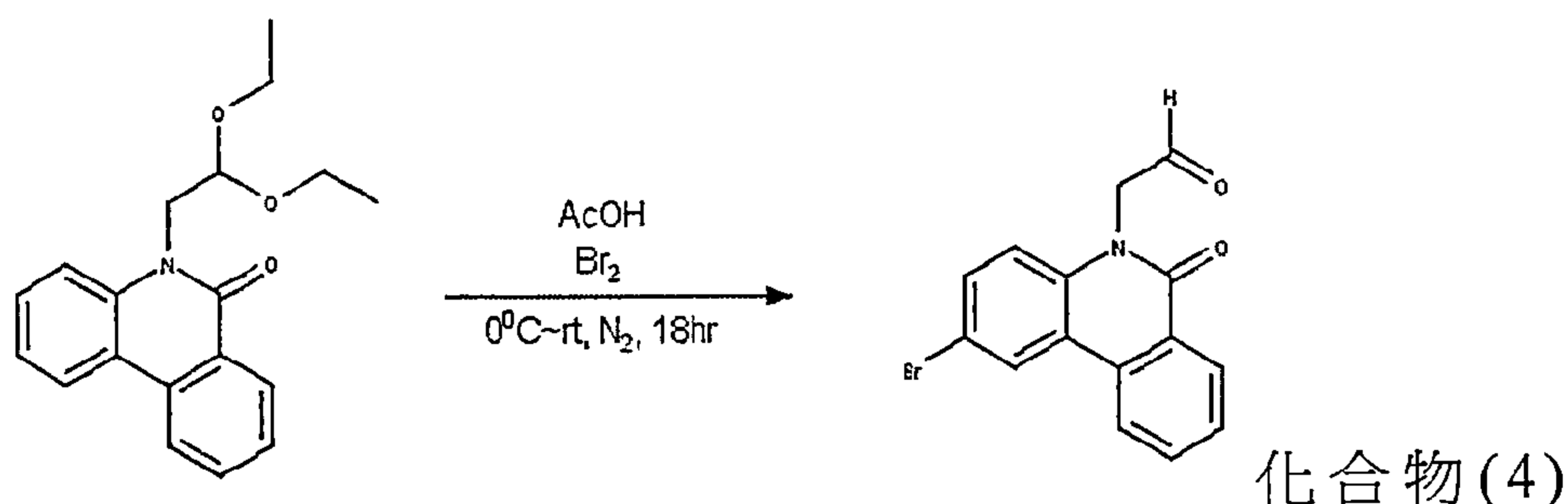


【0028】 取化合物(2)(25.90 g, 66.0 mmol)、Pd(OAc)<sub>2</sub>(1.48 g, 6.6mmol)、P(o-tolyl)<sub>3</sub>(4.02 g, 13.2 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(18.25 g, 132 mmol)、DMF(330.0mL)放入單頸瓶，在130°C及氬氣下反應1小時，反應完後用矽藻土過濾去除催化劑，以EA及水萃取，除水過濾後

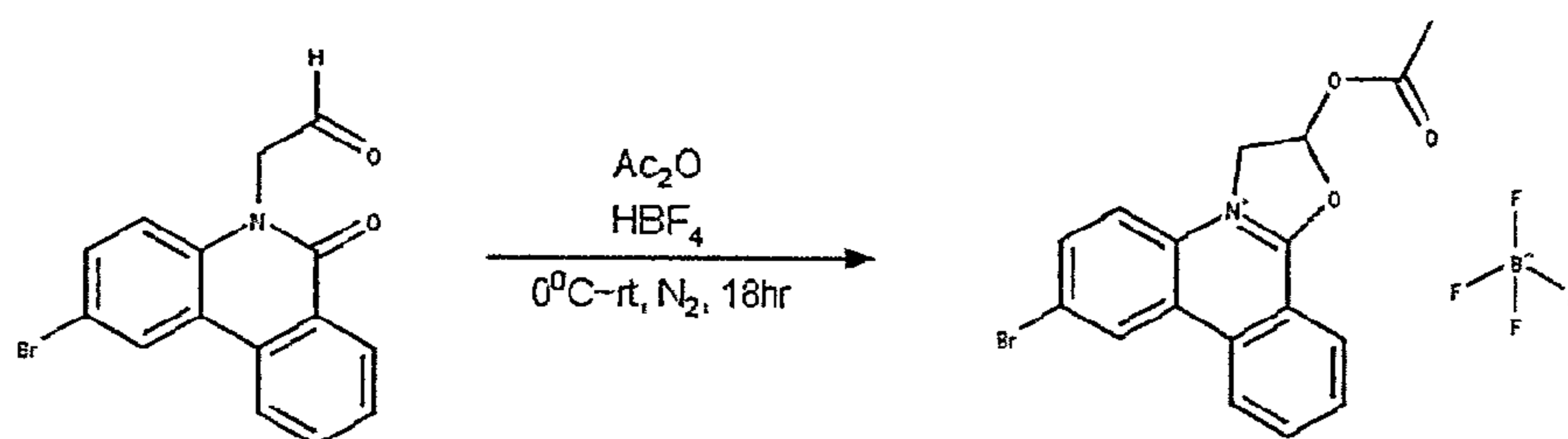
用管柱層析純化，動相為EA：Hexane=1:10，減壓濃縮去除溶劑後得到化合物(3)。



【0029】 取化合物(3) (18.40 g, 59.1 mmol)放入雙頸瓶並加入冰醋酸100.0 mL，將雙頸瓶置入冰浴10分鐘後，緩慢加入溴水(7.7 mL, 150.5 mmol)，加完並攪拌10分鐘後將雙頸瓶取出在室溫下反應18小時，反應完後加入Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(aq)去除溴水，再用水及DCM萃取，除水過濾後用管柱層析純化，動相為EA：DCM=1：3，減壓濃縮去除溶劑後得到化合物(4)。

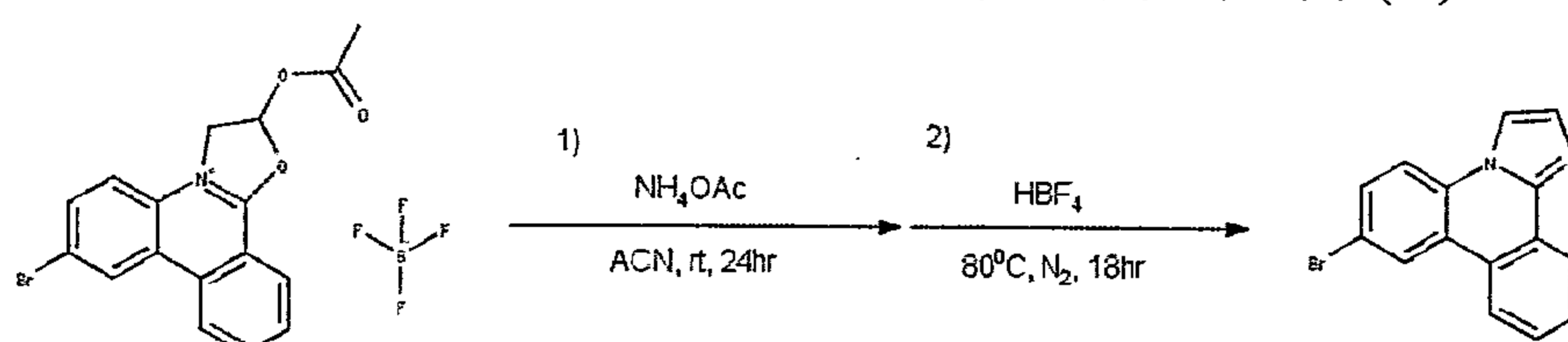


【0030】 取起始物(5.90 g, 18.7 mmol)放入雙頸瓶並加入醋酸酐56.0 mL，將雙頸瓶放入冰浴10分鐘後，緩慢加入HBF<sub>4</sub>(aq)(4.0 mL, 32.1 mmol)，加完後將雙頸瓶取出並在室溫下反應18小時。反應完加入乙醚使產物析出，抽氣過濾並用乙醚沖洗固體，得到化合物(5)。



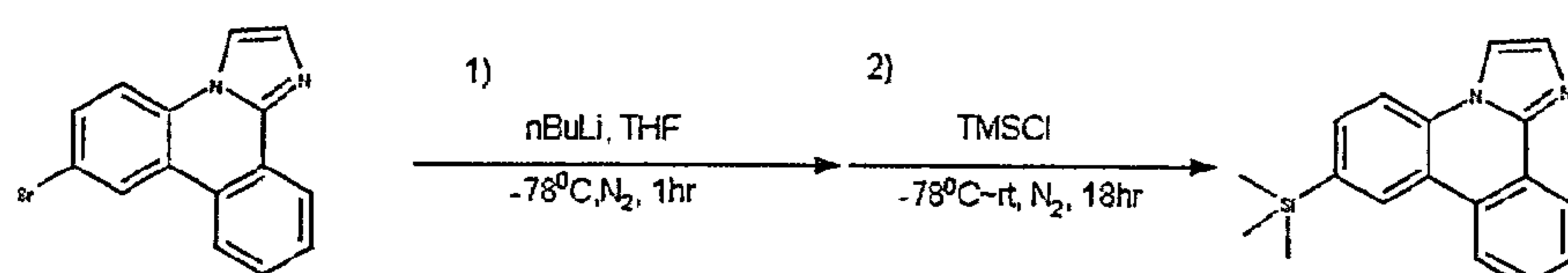
化合物(5)

【0031】 將起始物(7.73 g, 16.8 mmol)、NH<sub>4</sub>OAc(2.20 g, 28.5 mmol)、ACN(50.4 mL)放入雙頸瓶，在室溫下反應24小時後，將油鍋預熱至80°C，雙頸瓶置入冰浴10分鐘，緩慢加入HBF<sub>4</sub>(aq)(5.3 mL, 85.1 mmol)，加完後將雙頸瓶取出並在80°C反應18小時。加入K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(aq)中和後過濾並用水沖洗固體，將其放入烘箱除水，最後再以管柱層析純化，減壓濃縮得到化合物(6)。



化合物(6)

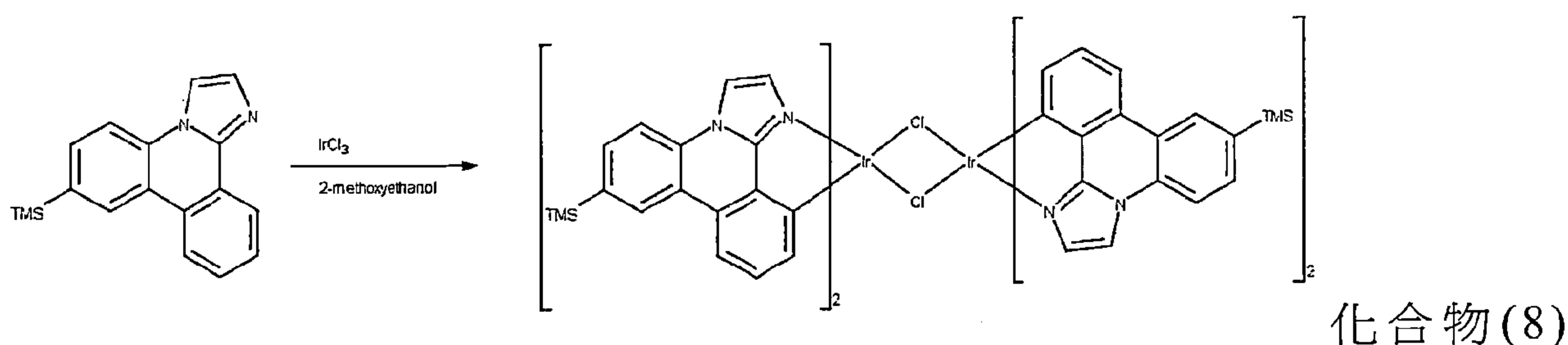
【0032】 取起始物(1.00 g, 3.4 mmol)放入雙頸瓶，加入無水THF(35.0 mL)後將雙頸瓶放入皿式杜爾瓶，並加入丙酮至杜爾瓶內，再加入液態氮使丙酮呈固液共存，並放置10分鐘使其溫度平衡，用針筒取nBuLi(2.5 mL, 4.0 mmol)並緩慢加入，反應1小時後以針筒取TMSCl(0.9 mL, 7.0 mmol)加入雙頸瓶並在室溫下反應18小時。反應完加少量的水終止反應並以減壓濃縮去除THF，用管柱層析純化，動相為EA: Hexane=1:3，減壓濃縮去除溶劑後得到化合物(7)。



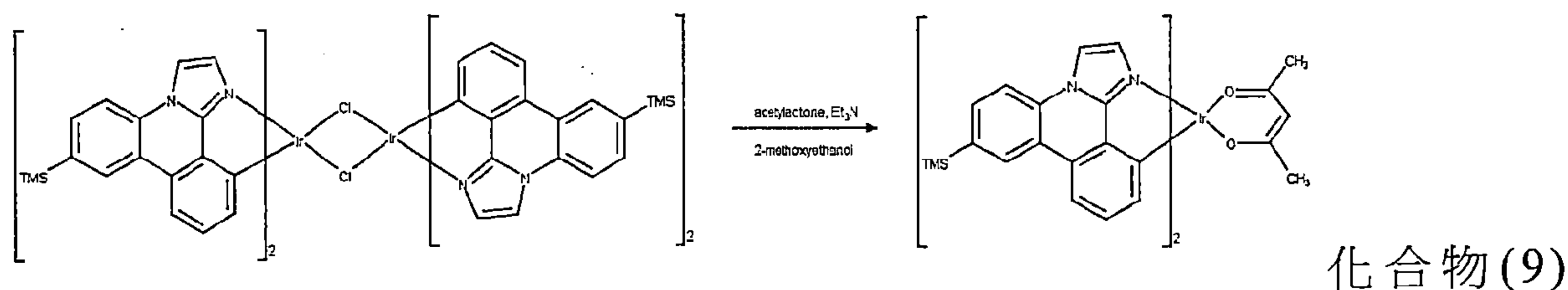
化合物(7)

【0033】 接著，提供一反應瓶，加入化合物(7) (1.92 g, 6.6

mmol)、以及三氯化銱( iridium trichloride、 $\text{IrCl}_3$ ) (0.89 g, 3 mmol)、2-甲氧基乙醇(2-methoxyethanol)(24毫升)、以及水(8毫升)於該反應瓶中。接著，經過反覆除水氧乾燥後充入氮氣，將反應加熱至迴流( $120^\circ\text{C}$ )。反應24小時後，將反應回至室溫，加水沉澱析出，將溶液過濾並用水和正己烷清洗固體，收集固體並利用真空乾燥，得到化合物(8)。上述反應之反應式如下所示：

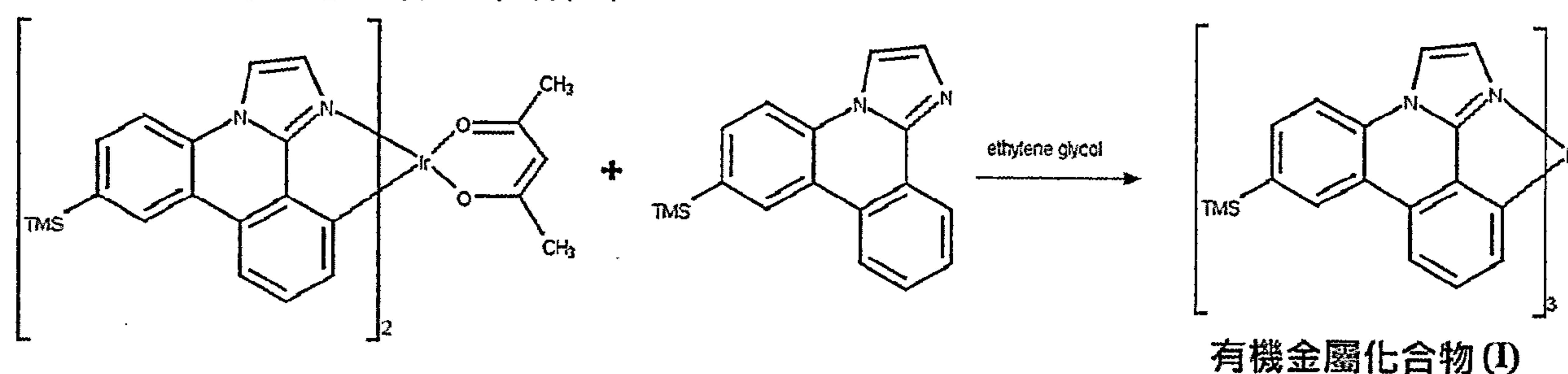


【0034】 接著，提供一反應瓶，加入化合物(8) (1.61 g, 1 mmol)、乙醯丙酮(acetylacetonone) (0.4 g, 4 mmol)、三乙胺(triethylamine、 $\text{Et}_3\text{N}$ ) (0.5 ml, 4 mmol)、以及2-甲氧基乙醇(2-methoxyethanol)(10毫升)。接著，再經過反覆除水氧乾燥後，充入氮氣，並將反應加熱至 $120^\circ\text{C}$ 。反應3小時後，將反應回至室溫，加水沉澱析出，將溶液過濾並用水和正己烷清洗固體，收集固體並用二氯甲烷( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )溶解。接著，以二氯甲烷( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，並將產物以迴旋濃縮儀抽乾。最後，以管柱層析法進行(沖提液為二氯甲烷/己烷(比例為1:5))純化，得到化合物(9)。上述反應之反應式如下所示：



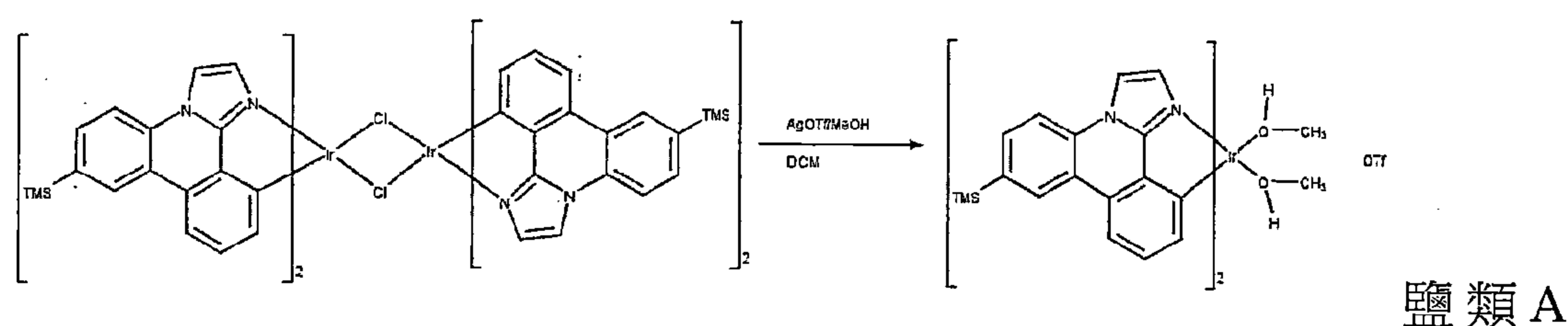
【0035】 接著，將化合物(9)(0.87 g, 1 mmol)、化合物(7)(0.58

g, 2 mmol)、與乙二醇(ethylene glycol)(20 mL)置入一反應瓶中。接著，在氮氣環境下氣，將該反應瓶加熱至160°C。攪拌48小時後，將該反應瓶回至室溫，並加入水(30 mL)。攪拌後，收及析出之固體，並以水清洗。烘乾後，收集固體並以管柱層析方式加以純化(沖提液為二氯甲烷/己烷(比例為1:5))，得到有機金屬化合物(I)。上述反應之反應式如下所示：



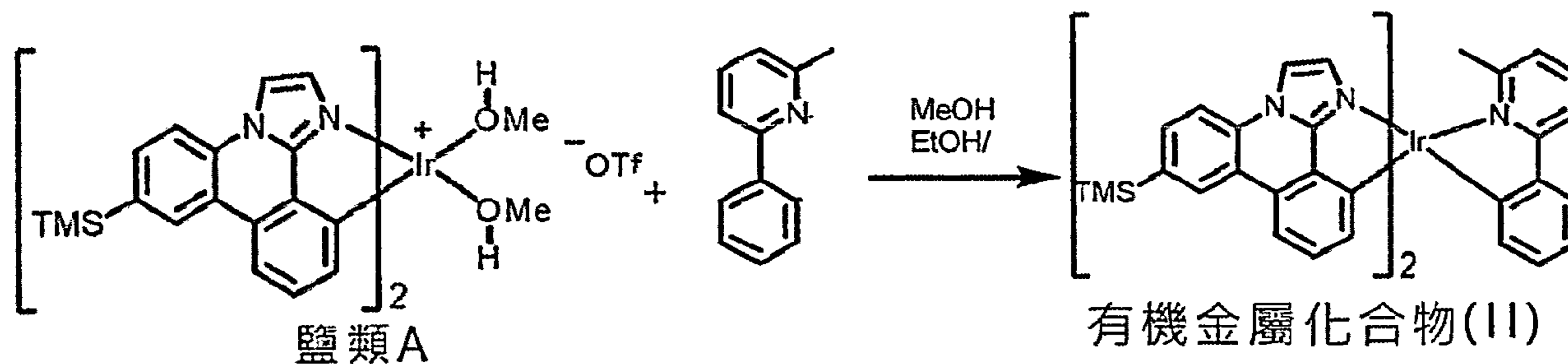
【0036】 實施例2：有機金屬化合物(II)的製備

【0037】 分別將化合物(8) (1.61g, 1 mmol)溶於10 ml的CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>及AgOTf (0.56g, 2.2 mmol)溶於11 ml的methanol中，並且在氮氣下將AgOTf溶液以針筒加入化合物(8)/ CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>溶液中，在室溫下反應12小時，過濾後將溶液濃縮得到固體即為鹽類A。上述反應之反應式如下所示：



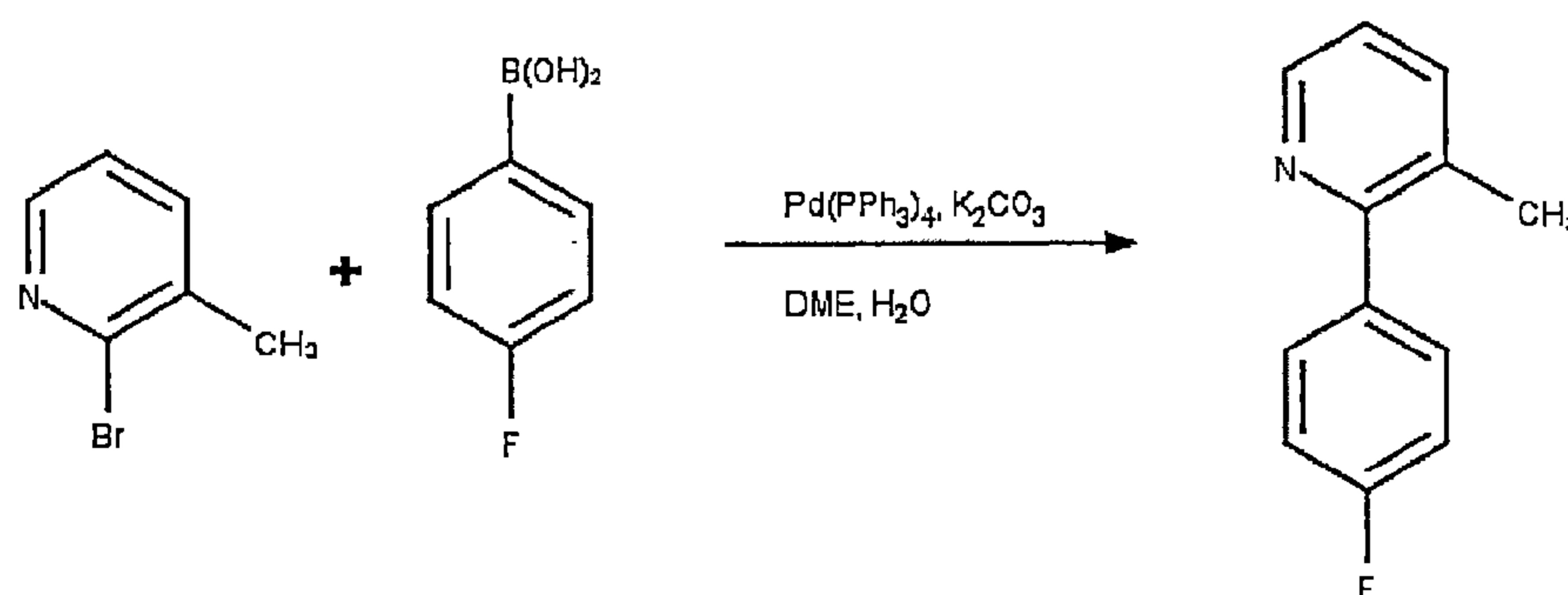
【0038】 接著，將鹽類A (0.98g, 1 mmol)及2-甲基-6-苯基吡啶(2-Methyl-6-phenylpyridine)(0.25g, 1.5 mmol)置於反應瓶中，加入10 ml的MeOH/EtOH = 5/5當溶劑，在經過反覆除水除氧乾燥後，充入氮氣，加熱至90°C後，反應12小時，將反應回至室溫，以CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，利用

迴旋濃縮儀抽乾後，進行管柱層析法加以純化，即可獲得本實施例的有機金屬化合物(II)。上述反應之反應式如下所示：



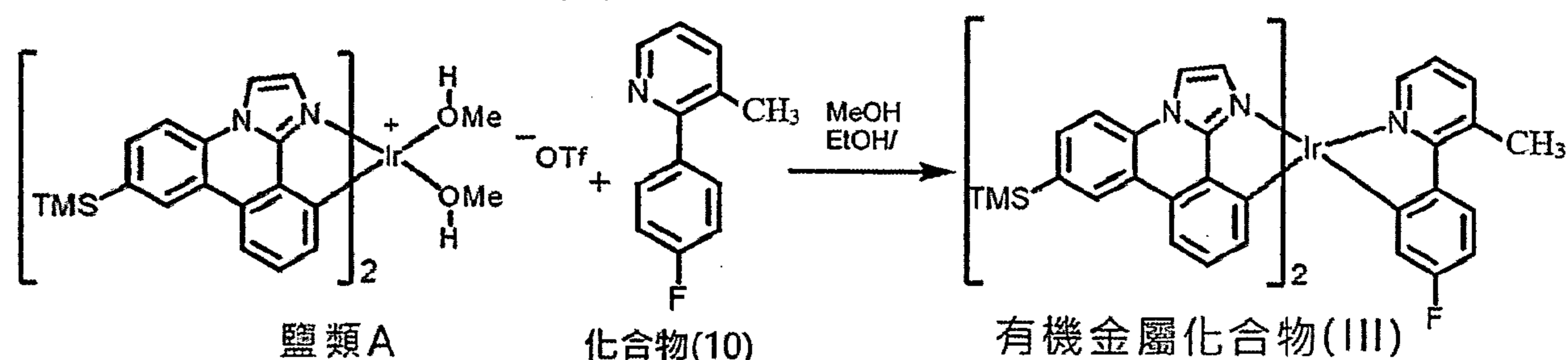
【0039】 實施例3：有機金屬化合物(III)的製備

【0040】 將2-溴-3-甲基吡啶(2-bromo-3-methylpyridine)(0.52 g, 3 mmol)、4-氟苯硼酸(4-fluorophenylboronic acid) (0.5 g, 3.6 mmol)、碳酸鉀 ( $K_2CO_3$ )(0.4g, 3 mmol)、二甲氧基乙烷(dimethoxyethane)( 20 mL)、以及水(10 mL)加入一反應瓶中。接著，加入催化劑量的四(三苯基磷)鈀( $Pd(PPh_3)_4$ )於該反應瓶中。在經過反覆除水氧乾燥後充入氮氣，接著將反應瓶加熱至迴流。待反應8小時後，將反應回至室溫，加入碳酸氫鈉( $NaHCO_3$ )水溶液中中和反應，以乙酸乙酯(ethyl acetate、EA)及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，利用迴旋濃縮儀抽乾後，並進行管柱層析法加以純化(沖提液為乙酸乙酯/己烷(比例為1:40))，得到化合物(10)。上述反應之反應式如下所示：



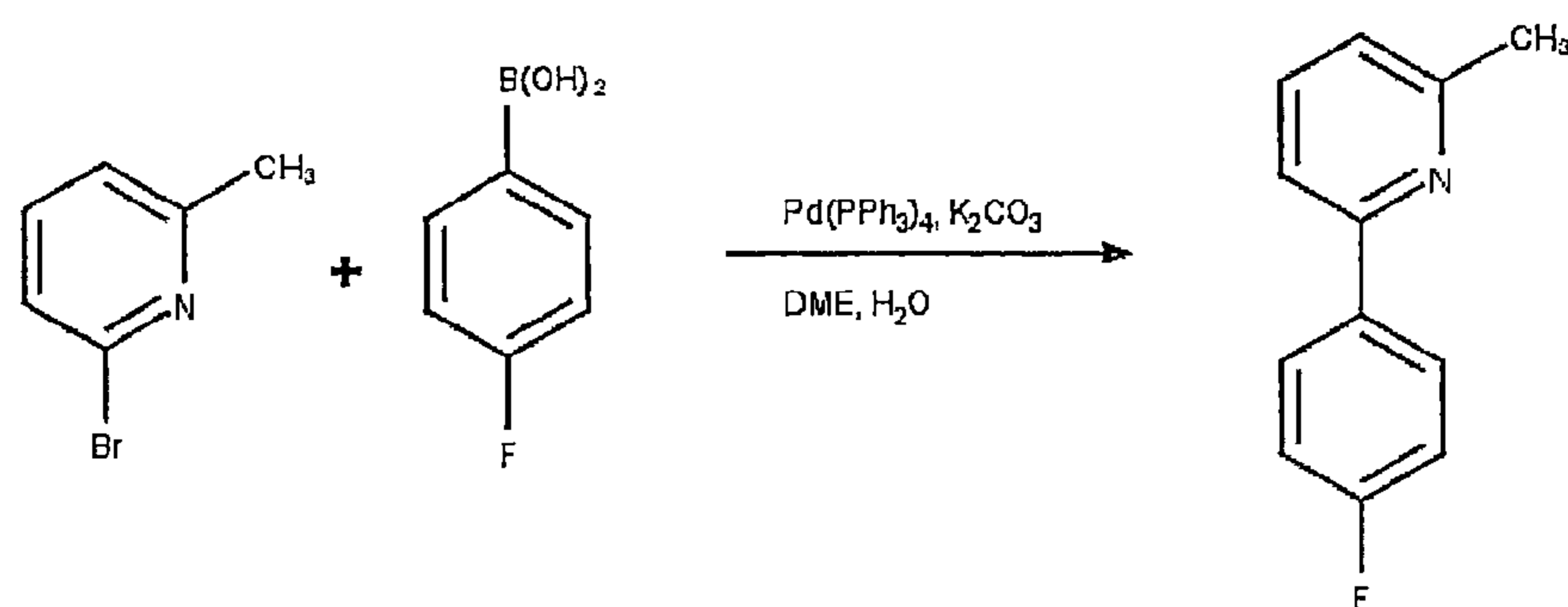
【0041】 接著，將鹽類A (0.98g, 1 mmol)及化合物(10)(0.28g, 1.5 mmol)置於反應瓶中，加入10 ml的MeOH/EtOH = 5/5當溶劑，

在經過反覆除水除氧乾燥後，充入氮氣，加熱至90℃後，反應12小時，將反應回至室溫，以CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，利用迴旋濃縮儀抽乾後，進行管柱層析法加以純化，即可獲得本實施例的有機金屬化合物(III)。上述反應之反應式如下所示：

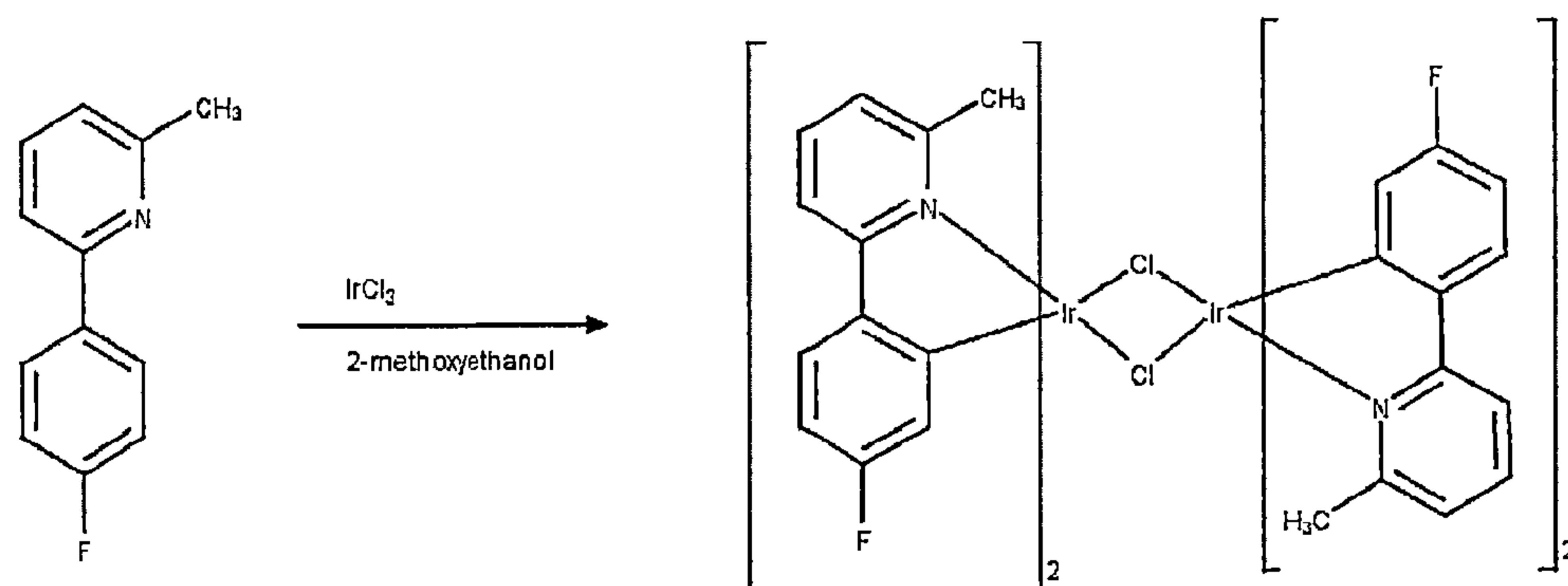


【0042】 實施例4：有機金屬化合物(IV)的製備

【0043】 將2-溴-6-甲基吡啶(2-bromo-6-methylpyridine)(0.52 g, 3 mmol)、4-氟苯硼酸(4-fluorophenylboronic acid) (0.5 g, 3.6 mmol)、碳酸鉀(K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>)(0.4g, 3 mmol)、二甲氧基乙烷(dimethoxyethane)(20 mL)、以及水(10 mL)加入一反應瓶中。接著，加入催化劑量的四(三苯基磷)鈀(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>)於該反應瓶中。在經過反覆除水氧乾燥後充入氮氣，接著將反應瓶加熱至迴流。待反應8小時後，將反應回至室溫，加入碳酸氫鈉(NaHCO<sub>3</sub>)水溶液中中和反應，以乙酸乙酯(ethyl acetate、EA)及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，利用迴旋濃縮儀抽乾後，並進行管柱層析法加以純化(沖提液為乙酸乙酯/己烷(比例為1:40))，得到化合物(11)。上述反應之反應式如下所示：



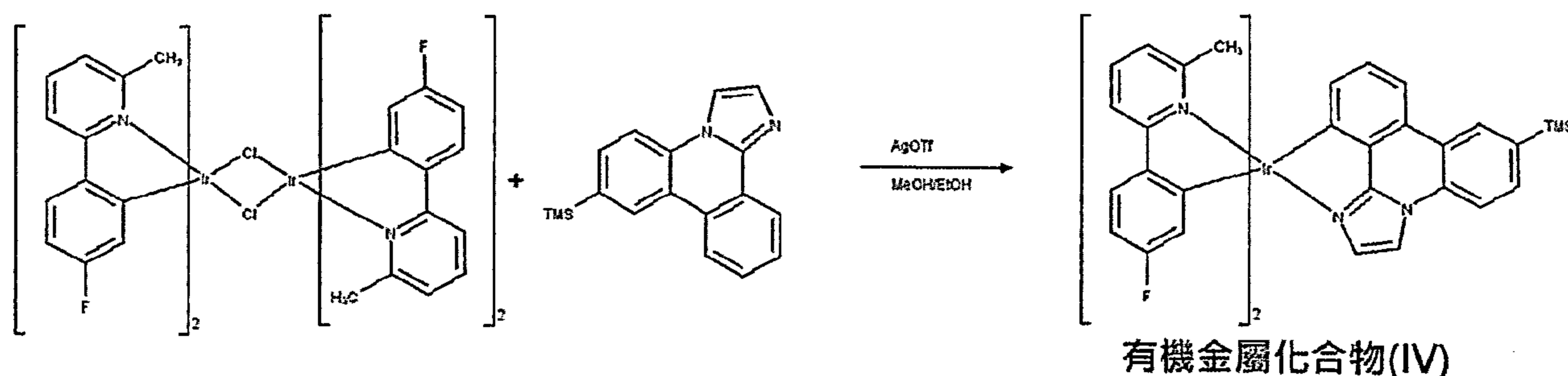
【0044】 接著，提供一反應瓶，加入化合物(11)(1.23 g, 6.6 mmol)、以及三氯化銱(iridium trichloride、 $\text{IrCl}_3$ ) (0.89 g, 3 mmol)、2-甲氧基乙醇(2-methoxyethanol)(24毫升)、以及水(8毫升)於該反應瓶中。接著，經過反覆除水氧乾燥後充入氮氣，將反應加熱至迴流( $120^\circ\text{C}$ )。反應18小時後，將反應回至室溫，加水沉澱析出，將溶液過濾並用水和正己烷清洗固體，收集固體並利用真空乾燥，得到化合物(12)。上述反應之反應式如下所示：



【0045】 將化合物(12)(1.2 g, 1 mmol)、化合物(7)(0.73 g, 2.5 mmol)、三氟甲磺酸銀(silver trifluoromethanesulfonate、 $\text{AgOTf}$ )(0.56g, 2.2 mmol)、甲醇( $\text{MeOH}$ )(5 mL)、與乙醇( $\text{EtOH}$ )(5 mL)置於一應瓶中。接著，在 $90^\circ\text{C}$ 下反應12小時。在降溫至室溫後，以二氯甲烷( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )與水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，並將產物以迴旋濃縮儀抽乾。最後，以管柱層析法進行(沖提液為二氯甲烷/己烷(比例為1:4))純化，得到有機

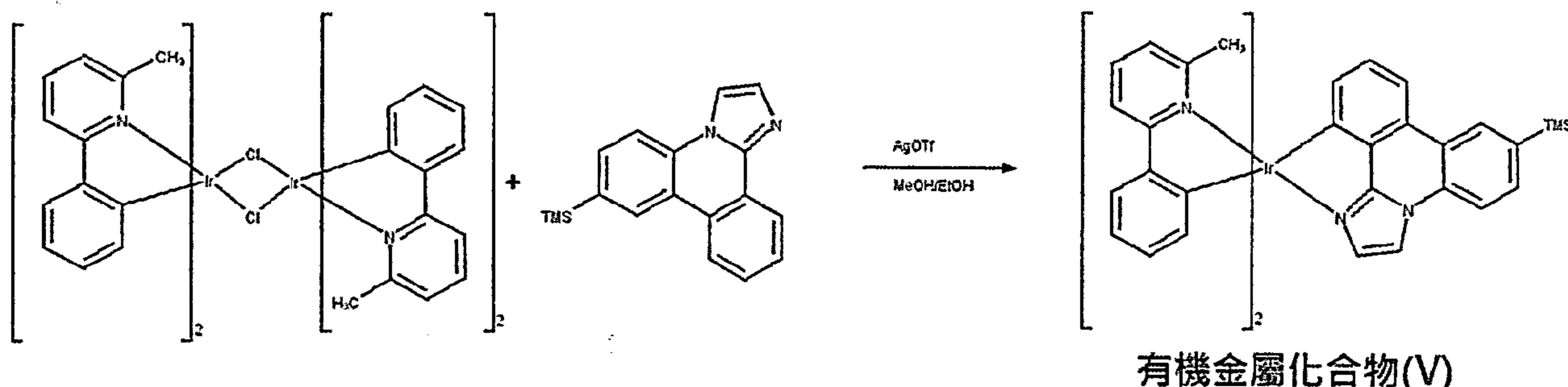


金屬化合物(IV)。上述反應之反應式如下所示：



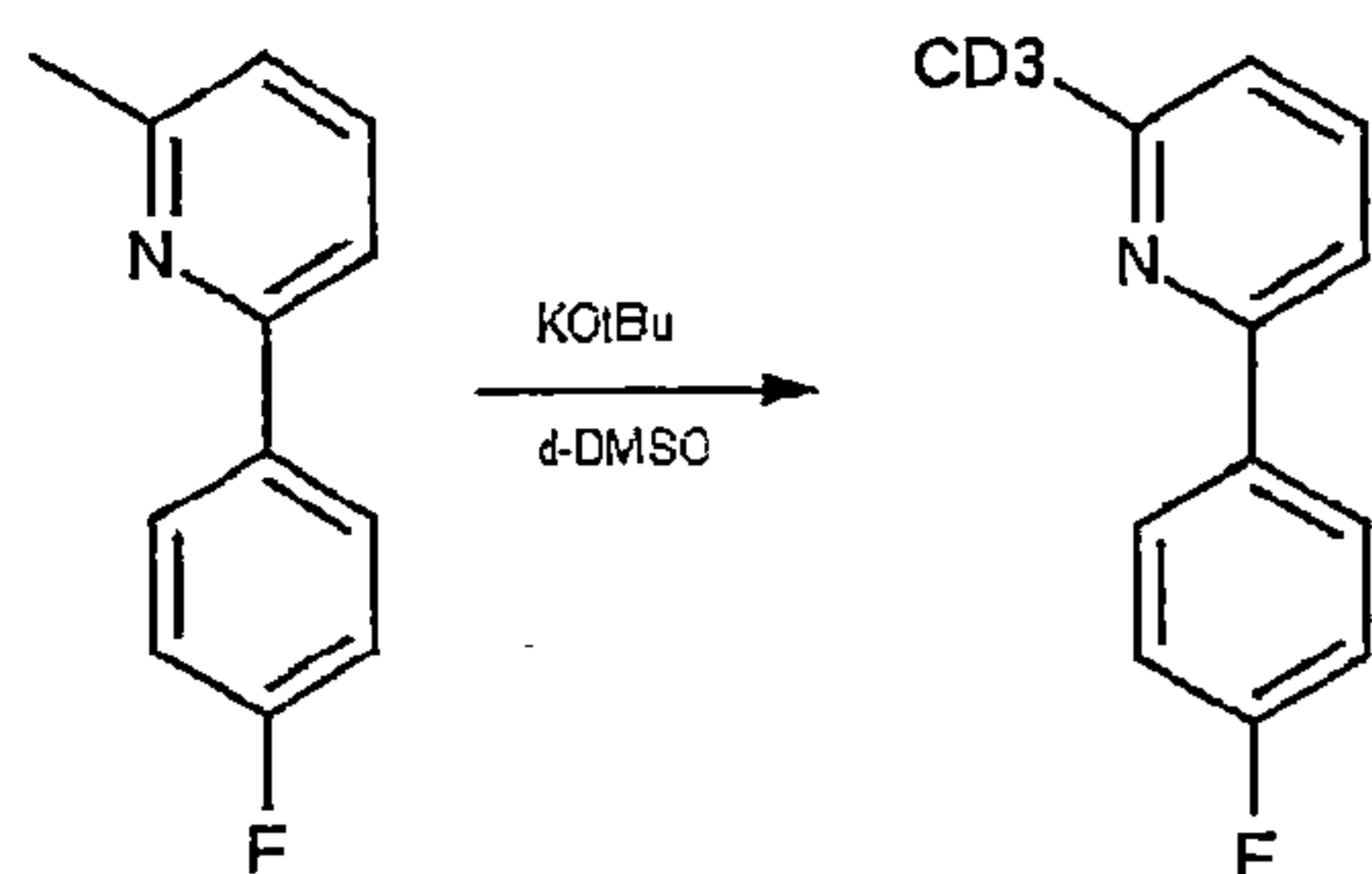
【0046】 實施例5：有機金屬化合物(V)的製備

【0047】 將dimer(1.1 g, 1 mmol)、化合物(7)(0.73 g, 2.5 mmol)、三氟甲磺酸銀(silver trifluoromethanesulfonate、AgOTf)(0.56g, 2.2 mmol)、甲醇(MeOH)(5 mL)、與乙醇(EtOH)(5 mL)置於一應瓶中。接著，在90°C下反應12小時。在降溫至室溫後，以二氯甲烷(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)與水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，並將產物以迴旋濃縮儀抽乾。最後，以管柱層析法進行(沖提液為二氯甲烷/己烷(比例為1:4))純化，得到有機金屬化合物(V)。上述反應之反應式如下所示：

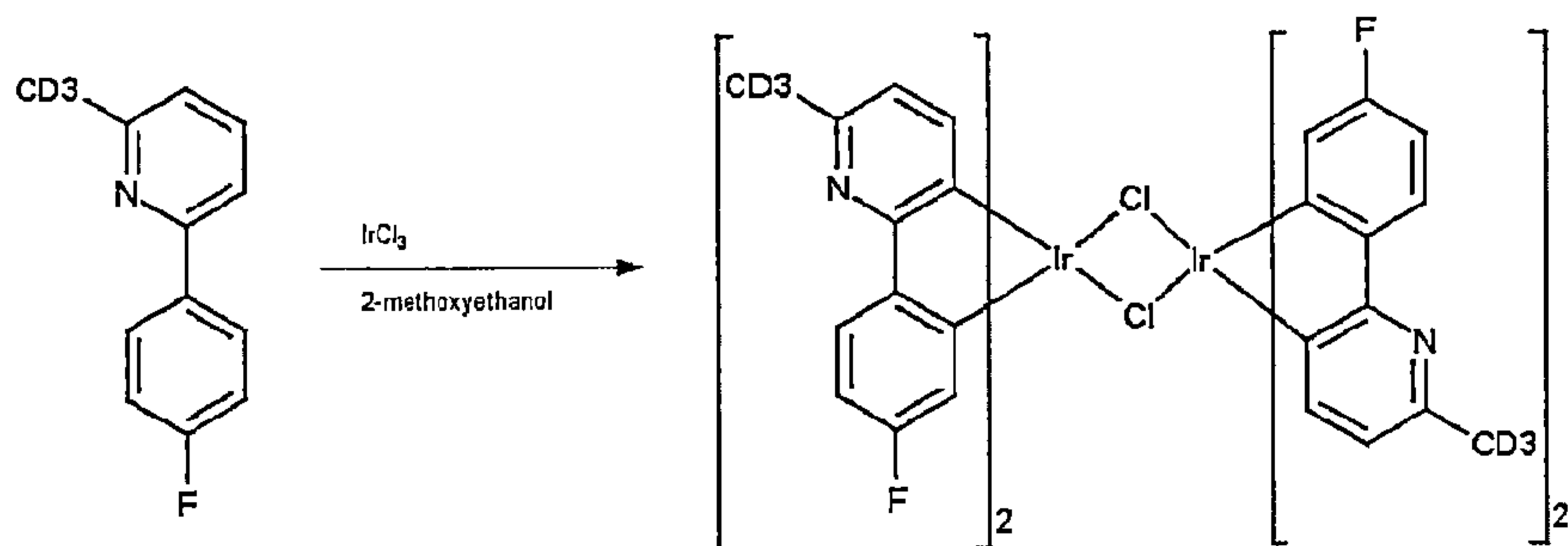


【0048】 實施例6：有機金屬化合物(VI)的製備

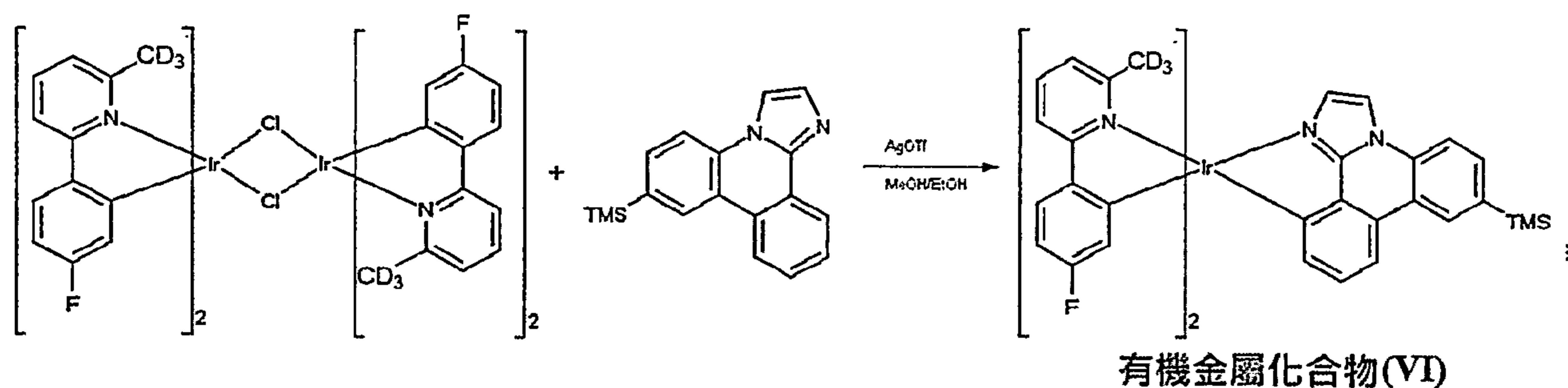
【0049】 將油鍋預熱至80°C，取化合物11(11.623 g, 62.1 mmol)、KOtBu(0.697 mg, 6.2 mmol)、DMSO-d<sub>6</sub> 16 mL放入圓底瓶，抽真空灌氮氣，在80°C下反應24小時，反應完加水終止反應，再用EA及水萃取，利用管柱層析純化，動向為EA: Hexane=1:10，減壓濃縮去除溶劑後得到化合物。上述反應之反應式如下所示：



【0050】 接著，提供一反應瓶，加入化合物(11)(1.23 g, 6.6 mmol)、以及三氯化銱(iridium trichloride,  $\text{IrCl}_3$ ) (0.89 g, 3 mmol)、2-甲氧基乙醇(2-methoxyethanol)(24毫升)、以及水(8毫升)於該反應瓶中。接著，經過反覆除水氧乾燥後充入氮氣，將反應加熱至迴流( $120^\circ\text{C}$ )。反應18小時後，將反應回至室溫，加水沉澱析出，將溶液過濾並用水和正己烷清洗固體，收集固體並利用真空乾燥，得到化合物(13)。上述反應之反應式如下所示：

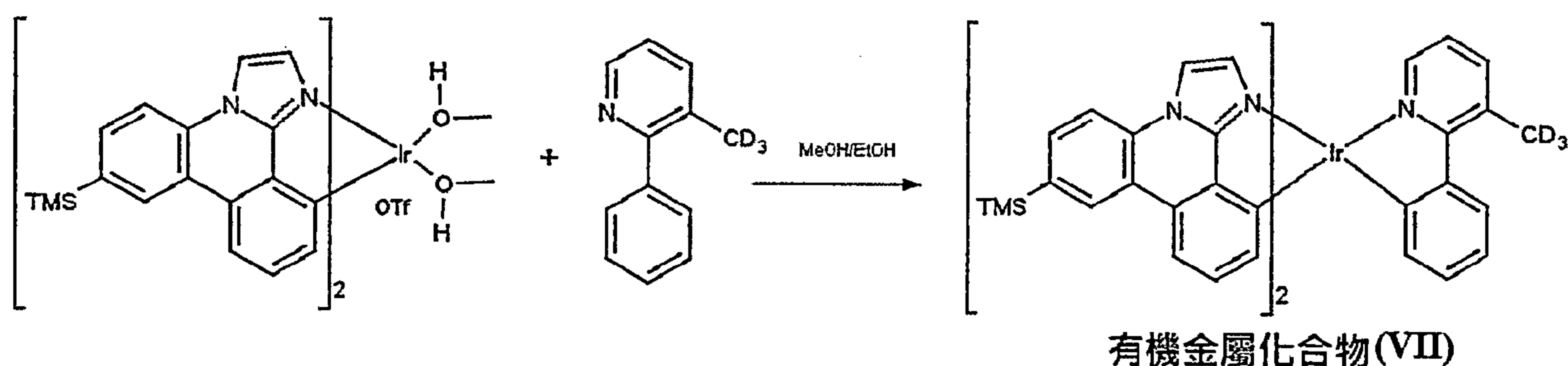


【0051】 將化合物(13)(1.2 g, 1 mmol)、化合物(7)(0.73 g, 2.5 mmol)、三氟甲磺酸銀(silver trifluoromethanesulfonate、 $\text{AgOTf}$ )(0.56g, 2.2 mmol)、甲醇( $\text{MeOH}$ )(5 mL)、與乙醇( $\text{EtOH}$ )(5 mL)置於一應瓶中。接著，在 $90^\circ\text{C}$ 下反應12小時。在降溫至室溫後，以二氯甲烷( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )與水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，並將產物以迴旋濃縮儀抽乾。最後，以管柱層析法進行(沖提液為二氯甲烷/己烷(比例為1:4))純化，得到有機金屬化合物(VI)。上述反應之反應式如下所示：



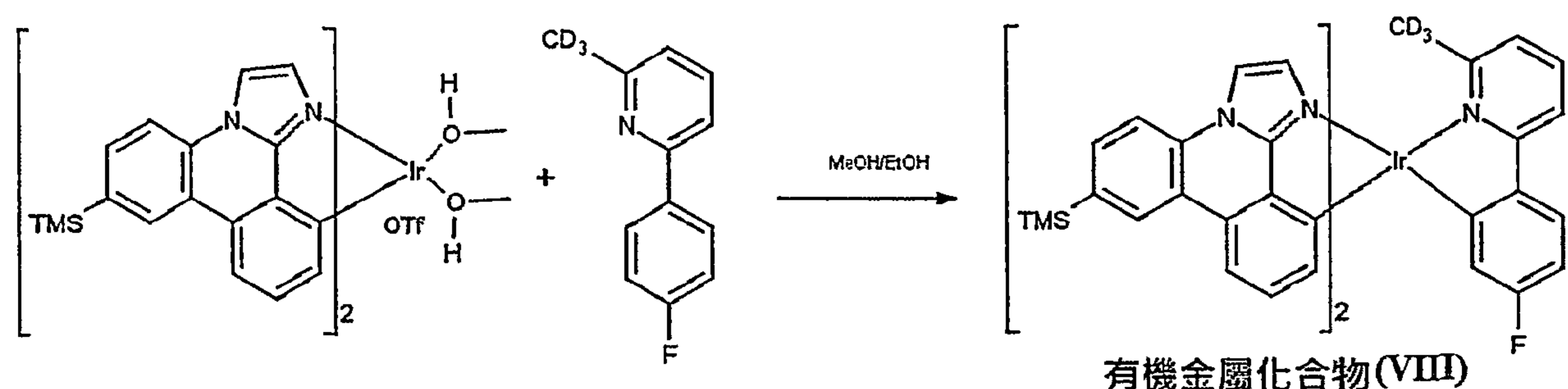
【0052】 實施例7：有機金屬化合物(VII)的製備

【0053】 將鹽類A (0.98g, 1 mmol)及化合物(14)(0.26g, 1.5 mmol)置於反應瓶中，加入10 ml的MeOH/EtOH = 5/5當溶劑，在經過反覆除水除氧乾燥後，充入氬氣，加熱至90°C後，反應12小時，將反應回至室溫，以CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，利用迴旋濃縮儀抽乾後，進行管柱層析法加以純化，即可獲得本實施例的有機金屬化合物(VII)。



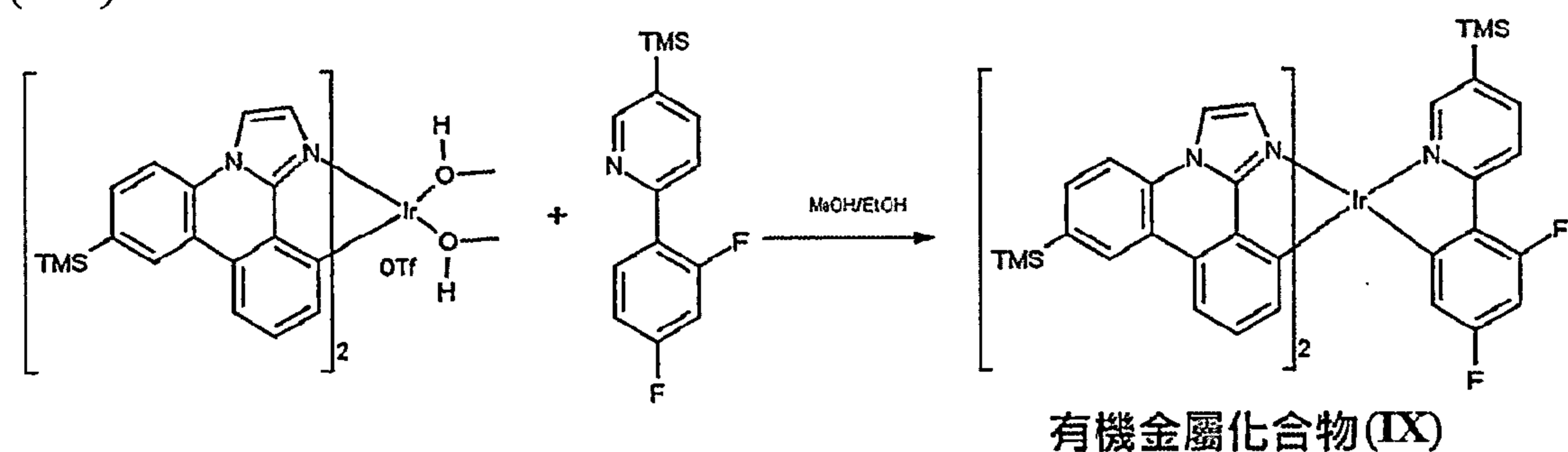
【0054】 實施例8：有機金屬化合物(VIII)的製備

【0055】 將鹽類A (0.98g, 1 mmol)及化合物(12)(0.28g, 1.5 mmol)置於反應瓶中，加入10 ml的MeOH/EtOH = 5/5當溶劑，在經過反覆除水除氧乾燥後，充入氬氣，加熱至90°C後，反應12小時，將反應回至室溫，以CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，利用迴旋濃縮儀抽乾後，進行管柱層析法加以純化，即可獲得本實施例的有機金屬化合物(VIII)。



【0056】 實施例9：有機金屬化合物(IX)的製備

【0057】 將鹽類 A (0.98g, 1 mmol)及化合物(15)(0.39g, 1.5 mmol)置於反應瓶中，加入10 ml的MeOH/EtOH = 5/5當溶劑，在經過反覆除水除氧乾燥後，充入氮氣，加熱至90℃後，反應12小時，將反應回至室溫，以CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>及水進行萃取三次，並將三次所收集的有機層乾燥且過濾，利用迴旋濃縮儀抽乾後，進行管柱層析法加以純化，即可獲得本實施例的有機金屬化合物(IX)。



【0058】 接著，利用核磁共振光譜分析實施例1-8所述有機金屬化合物(I)-(IX)，所得之光譜資訊如表2所示。

【0059】 表2

	核磁共振光譜資訊
有機金屬化合物(I)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, CD <sub>3</sub> OD, 294 K): 7.52 (d, 6H), 6.80 (s, 3H), 6.79~6.73 (m, 6H), 6.55 (t, 3H), 6.38 (d, 3H), 6.15 (d, 3H), 0.32 (s, 27H)
有機金屬化	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, d-DMSO, 294 K): 7.72 (d, 1H), 7.54~7.49

合物(II)	(m, 2H), 7.36~7.29 (m, 4H), 7.20 (t, 1H), 7.07 (t, 1H), 6.95 (d, 2H), 6.75 (d, 1H), 6.68 (t, 1H), 6.59(s, 1H), 6.44~6.36 (m, 4H), 6.22~6.09 (m, 4H), 6.01 (dd, 1H), 1.92 (s,3H), 0.25 (s, 9H), 0.22 (s, 9H)
有機金屬化合物(III)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, d-DMSO, 294 K): 8.30(d, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.53 (d, 1H), 7.47 (d, 2H), 7.35~7.28 (m, 4H), 7.15 (t, 1H), 7.02 (t, 1H), 6.85 (d, 2H), 6.75 (d, 1H), 6.68 (s, 1H), 6.59(s, 1H), 6.44~6.36 (m, 3H), 6.22~6.09 (m, 3H), 1.89 (s,3H), 0.24 (s, 9H), 0.22 (s, 9H)
有機金屬化合物(IV)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, CDCl <sub>3</sub> , 294 K): 8.53 (s, 1H), 7.78 (d, 1H), 7.72~7.65 (m, 2H), 7.62~7.52 (m, 3H), 7.49 (s, 1H), 7.42~7.35 (m, 2H), 7.31 (t, 1H), 7.14 (t, 1H), 6.77 (d, 1H), 6.69 (s, 1H), 6.62~6.53 (m, 3H), 6.45 (t, 2H), 6.02 (d, 1H), 1.97 (s, 3H), 1.62 (s, 3H), 0.33 (s, 9H)
有機金屬化合物(V)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, CDCl <sub>3</sub> , 294 K): 8.54 (s, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.75~7.68 (m, 2H), 7.63~7.52 (m, 3H), 7.46 (s, 1H), 7.42~7.35 (m, 3H), 7.30 (t, 1H), 7.14 (t, 1H), 6.82 (d, 1H), 6.65 (s, 1H), 6.62~6.51 (m, 4H), 6.45 (t, 2H), 6.12 (d, 1H), 1.95 (s, 3H), 1.65 (s, 3H),0.32 (s, 9H)
有機金屬化合物(VI)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, CDCl <sub>3</sub> , 294 K): 8.55 (s, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.73~7.68 (m, 2H), 7.62~7.54 (m, 3H), 7.50 (s, 1H), 7.49~7.45 (m, 2H), 7.34 (t, 1H), 7.15 (t, 1H), 6.79 (d, 1H), 6.69 (s, 1H), 6.65~6.59 (m, 3H), 6.45 (t, 2H), 6.01 (d, 1H), 0.33 (s, 9H)
有機金屬化合物(VII)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, CDCl <sub>3</sub> , 294 K): 8.30(d, 1H), 7.65 (d, 1H), 7.53~7.42 (m, 2H), 7.35~7.27 (m, 4H), 7.22 (t, 1H), 7.11 (t, 1H),

	6.89 (d, 2H), 6.72 (d, 1H), 6.68 (t, 1H), 6.55(s, 1H), 6.43~6.37 (m, 3H), 6.22~6.12 (m, 4H), 6.01 (d, 1H), 0.25 (s, 9H), 0.22 (s, 9H)
有機金屬化合物(VIII)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, CDCl <sub>3</sub> , 294 K): 7.73 (d, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.45 (d, 2H), 7.33~7.22 (m, 4H), 7.15 (t, 1H), 7.10 (t, 1H), 6.84 (d, 2H), 6.73 (d, 1H), 6.70 (s, 1H), 6.55(s, 1H), 6.42~6.35 (m, 4H), 6.22~6.09 (m, 3H), 0.24 (s, 9H), 0.22 (s, 9H)
有機金屬化合物(IX)	<sup>1</sup> H NMR (500 MHz, CDCl <sub>3</sub> , 294 K): 8.35 (s, 1H), 8.24 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.54~7.49 (m, 2H), 7.36~7.29 (m, 4H), 7.22 (d, 2H), 7.10(t, 1H) 6.59(s, 1H), 6.43~6.36 (m, 4H), 6.21~6.10 (m, 4H), 6.01 (dd, 1H), 0.26 (s, 9H), 0.24 (s, 9H)

【0060】 接著，分別取實施例1-9所述有機金屬化合物(I)-(IX)，溶於二氯甲烷中(重量百分比濃度為 $10^{-5}$  M)，量測其光致螢光(Photoluminescence, PL)光譜，結果如表3所示。

【0061】 表3

	最強發光峰值(Emission $\lambda_{\max}$ )
有機金屬化合物(I)	465 nm
有機金屬化合物(II)	507 nm
有機金屬化合物(III)	499 nm
有機金屬化合物(IV)	496 nm
有機金屬化合物(V)	510 nm
有機金屬化合物(VI)	494 nm
有機金屬化合物(VII)	499 nm

有機金屬化合物(VIII)	497nm
有機金屬化合物(IX)	489nm

【0062】 由表3可知，本揭露所述具有式(I)所示結構的有機金屬化合物其最強發光峰值係介於465至510nm(屬於藍光偏綠的磷光材料)。接著，各有機金屬化合物的昇華溫度請參照表4：

【0063】 表4

	昇華溫度(°C)
有機金屬化合物(I)	270
有機金屬化合物(II)	265
有機金屬化合物(III)	280
有機金屬化合物(IV)	280
有機金屬化合物(V)	275
有機金屬化合物(VI)	275
有機金屬化合物(VII)	280
有機金屬化合物(VIII)	270
有機金屬化合物(IX)	265

【0064】 有機發光裝置

【0065】 請參照第1圖，係顯示一符合本揭露所述之有機發光裝置(organic light emitting diode, OLED)10之剖面結構示意圖，該有機發光裝置10包括一基底12、一下電極14、一發光單元16及一上電極18。該有機發光裝置10可為上發光、下發光、或雙面發光有機發光裝置。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。

【0066】 該發光單元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，根據本揭露較佳實施例，該發光單元16必需包含本揭露所述具有式(I)之有機金屬化合物。換言之，在該發光單元16中，至少有一膜層包含該有機金屬化合物。

【0067】 根據本揭露另一實施例，該有機發光裝置可為一磷光有機發光裝置(phosphorescent organic light-emitting device、PHOLED)，而該磷光有機發光裝置之發光單元16具有一發光層，該發光層包含一主體(host)材料及一磷光摻雜材料，而該磷光摻雜材料包含本揭露所述具有式(I)所示結構之有機金屬化合物，且該發光層係發出藍光或藍綠光。熟悉本技術者可視所使用之有機發光材料及所需之元件特性，將本揭露所述之有機金屬化合物與所需的磷光摻雜材料進行摻雜，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揭露之特徵，非為限制本揭露範圍之依據。

【0068】 為進一步說明本揭露有機發光裝置，以下實施例係將由上述實施例所得之有機金屬化合物作為摻雜材料，提供數個有機發光裝置的實施例。

【0069】 實施例10



【0070】 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150nm)玻璃基底洗淨。接著，以氮氣將基材吹乾，然後UV-OZONE進行30分鐘。接著，選用PEDOT:PSS (poly(3,4-ethylenedioxythiophene)-poly(styrenesulfonate))當作電洞注入層(hole-inject layer)，以旋轉塗佈方式(轉速500rpm維持5秒、2000rpm維持30秒)形成膜層(厚度為40nm)，然後加熱130℃持續10分鐘。接著，在PEDOT:PSS層上於 $10^{-6}$ torr的壓力下依序沉積TAPC (1,1-bis[4-[N,N'-di(p-tolyl)amino]phenyl]cyclobexane)、厚度為35nm)、TCTA(4,4',4'-tri(N-carbazolyl)triphenylamine)摻雜有機金屬化合物(I)(TCTA與有機金屬化合物(I)的重量比為6%、厚度為10nm)、TmPyPB (1,3,5-Tri(m-pyridin-3-ylphenyl)benzene)、厚度為42nm)、LiF(厚度為0.5nm)、及Al(厚度為120nm)，封裝後獲致有機發光裝置(I)。該有機發光裝置(I)之結構可表示為：ITO/PEDOT:PSS/TAPC/TCTA: 有機金屬化合物(I)(6%)/TmPyPB/LiF/Al。

【0071】 接著，以輝度計及色度計有機發光裝置(I)進行電致螢光(electroluminescence, EL)光譜之最強發光峰值(Emission  $\lambda_{max}$ )、電壓、亮度、電流效率、功率效率、及色座標的量測，結果請參照下表5。

【0072】 實施例11

【0073】 如實施例10之相同方式進行，但將實施例10所使用的有機金屬化合物(I)置換為有機金屬化合物(IV)，得到有機發光裝置(II)。該有機發光裝置(II)之結構可表示為：ITO/PEDOT:PSS/TAPC/TCTA: 有機金屬化合物(IV)(6%)/

TmPyPB/LiF/Al。

【0074】 接著，以輝度計及色度計對有機發光裝置(II)進行電致螢光(electroluminescence, EL)光譜之最強發光峰值(Emission  $\lambda_{\max}$ )、電壓、亮度、電流效率、功率效率、及色座標的量測，結果請參照表5。

【0075】 實施例12

【0076】 如實施例10之相同方式進行，但將實施例10所使用的有機金屬化合物(I)置換為有機金屬化合物(VII)，得到有機發光裝置(III)。該有機發光裝置(III)之結構可表示為：ITO/PEDOT:PSS/TAPC/TCTA:有機金屬化合物(VII)(6%)/TmPyPB/LiF/Al。

【0077】 接著，以輝度計及色度計對有機發光裝置(III)進行電致螢光(electroluminescence, EL)光譜之最強發光峰值(Emission  $\lambda_{\max}$ )、電壓、亮度、電流效率、功率效率、及色座標的量測，結果請參照表5。

【0078】 實施例13

【0079】 如實施例10之相同方式進行，但將實施例10所使用的有機金屬化合物(I)置換為有機金屬化合物(IX)，得到有機發光裝置(IV)。該有機發光裝置(IV)之結構可表示為：ITO/PEDOT:PSS/TAPC/TCTA:有機金屬化合物(IX)(6%)/TmPyPB/LiF/Al。

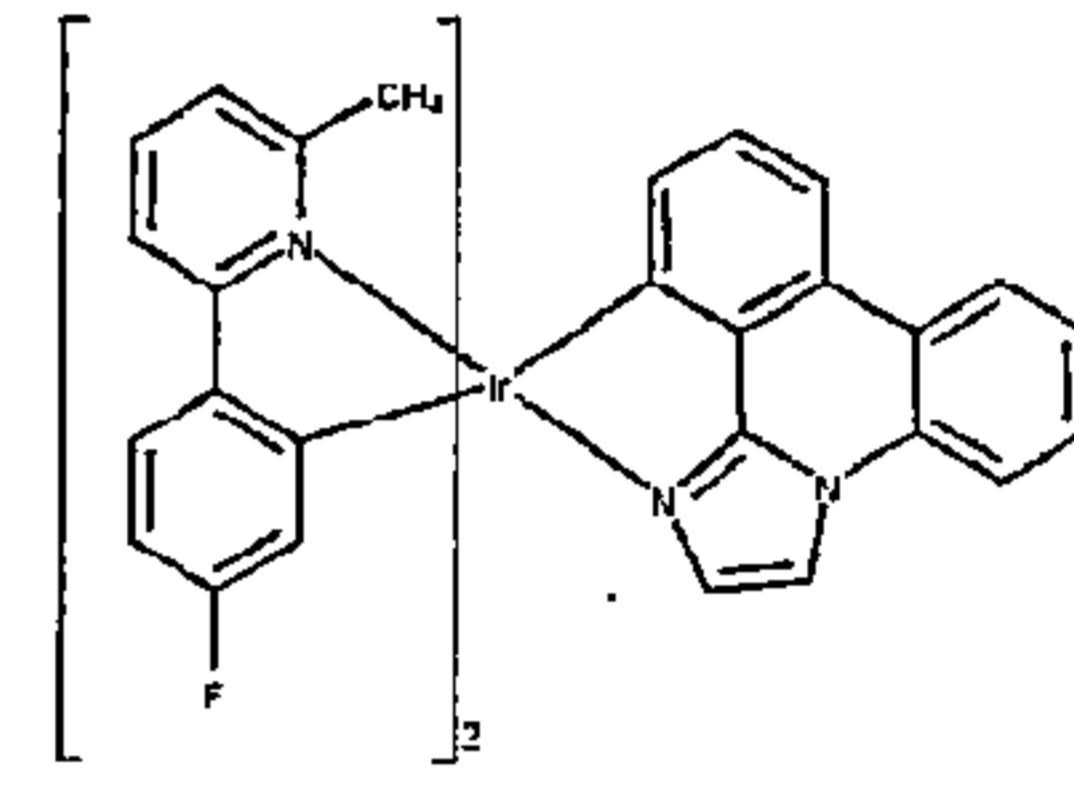
【0080】 接著，以輝度計及色度計對有機發光裝置(IV)進行電致螢光(electroluminescence, EL)光譜之最強發光峰值(Emission  $\lambda_{\max}$ )、電壓、亮度、電流效率、功率效率、及色座標的量測，

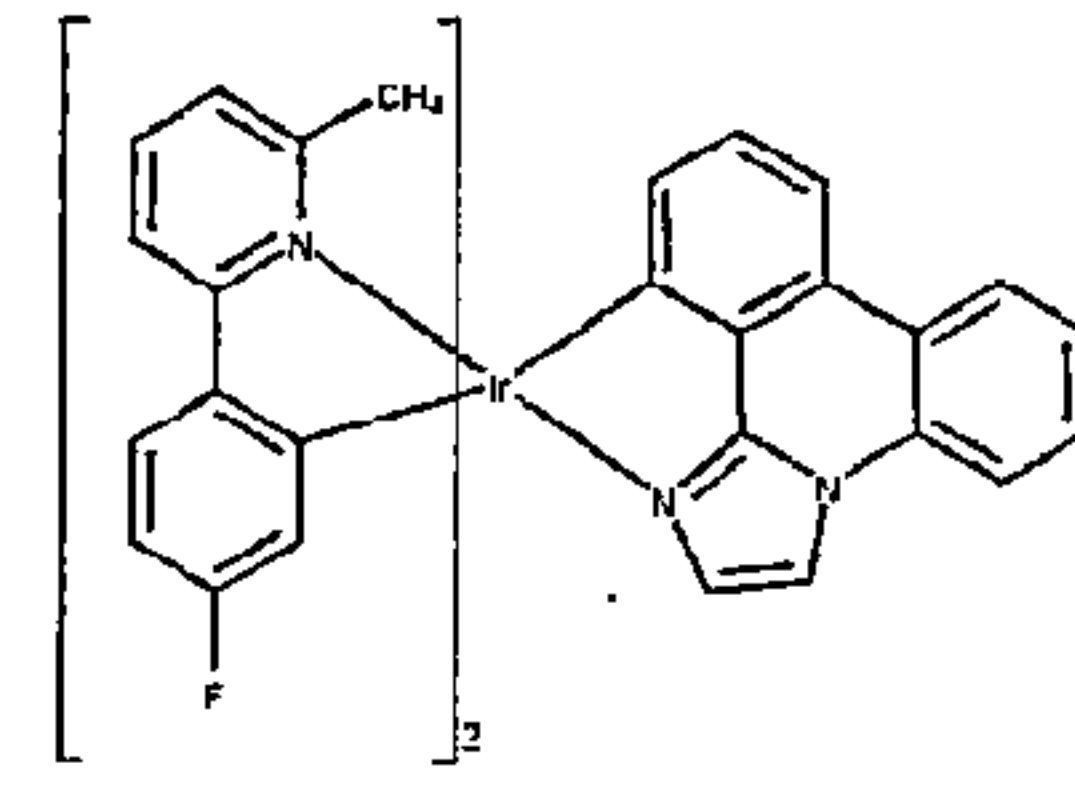
結果請參照表5。

【0081】 接著，以輝度計及色度計對有機發光裝置(V)進行電致螢光(electroluminescence, EL)光譜之最強發光峰值(Emission  $\lambda_{\max}$ )、電壓、亮度、電流效率、功率效率、及色座標的量測，結果請參照表5。

【0082】 比較實施例1

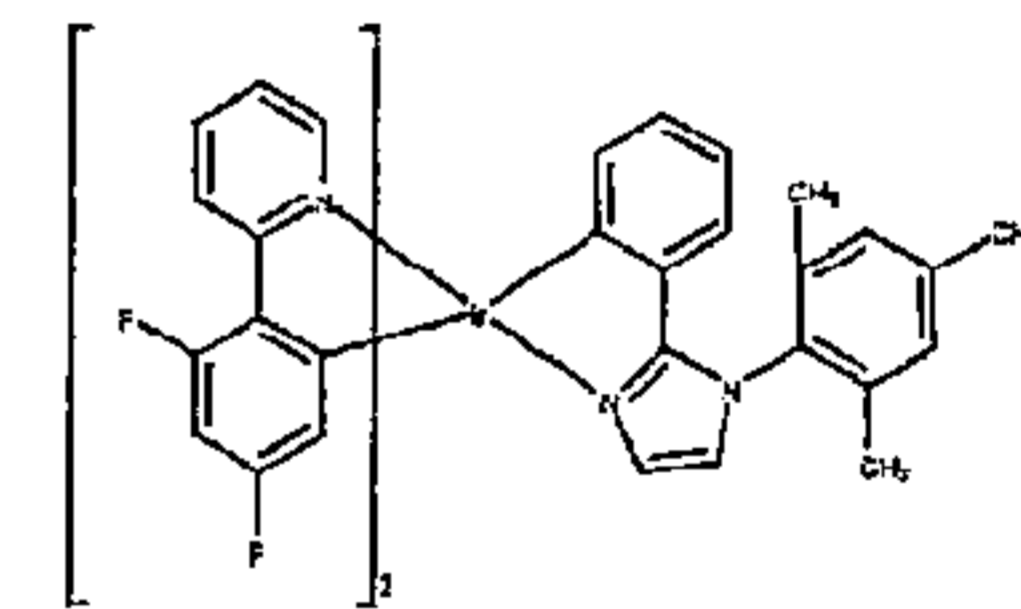
【0083】 如實施例10之相同方式進行，但將實施例10所使用

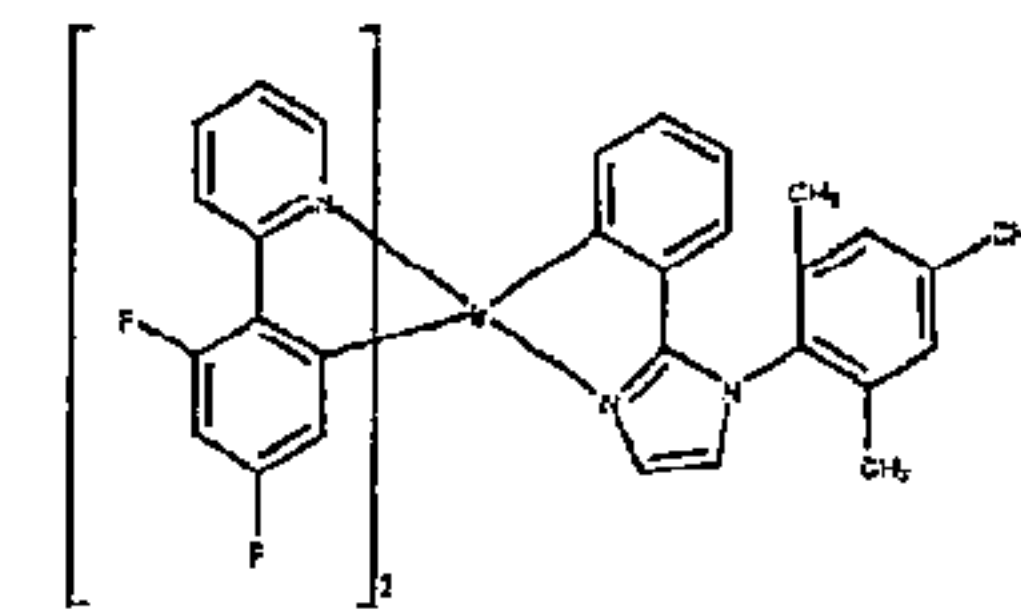


的有機金屬化合物(I)置換為化合物15(結構為  )，得到有機發光裝置(VI)。該有機發光裝置(VI)之結構可表示為：ITO/PEDOT:PSS/TAPC/TCTA: 化合物15 (6%)/ TmPyPB/LiF/Al。

【0084】 比較實施例2

【0085】 如實施例10之相同方式進行，但將實施例10所使用



的有機金屬化合物(I)置換為化合物16(結構為  )，得到有機發光裝置(VI)。該有機發光裝置(VI)之結構可表示為：ITO/PEDOT:PSS/TAPC/TCTA: 化合物16 (6%)/ TmPyPB/LiF/Al。

【0086】 接著，以輝度計及色度計對有機發光裝置(VI)進行電致螢光(electroluminescence, EL)光譜之最強發光峰值(Emission  $\lambda_{\max}$ )、電壓、亮度、電流效率、功率效率、及色座標的量測，結果請參照表5。

【0087】 表5

	電壓 (V)	亮度 (cd/m <sup>2</sup> )	電流效率 (cd/A)	功率效率 (lm/W)	CIE座標	最大發光 波長(nm)
實施例 10	4.5	1000	30.0	26.0	(0.18, 0.36)	469
實施例 11	4.8	1000	32.2	21.1	(0.22, 0.57)	496
實施例 12	4.2	1000	39.1	29.5	(0.22, 0.58)	496
實施例 13	4.9	1000	30.3	19.3	(0.19, 0.51)	488
比較實施例1	4.5	1000	25.5	20.3	(0.24, 0.55)	498
比較實施例2	4.9	1000	17.2	11.0	(0.25, 0.53)	499

【0088】 由表5可知，藉由導入三甲基矽烷基於有機金屬化合物中，可使得有機金屬化合物的最高鍵結電子能階(HOMO)與傳輸材料更佳匹配。與比較實施例1所述有機發光裝置相比，本揭露所述有機金屬化合物可有效提升有機發光裝置的發光效率。

【0089】 雖然本揭露已以數個較佳實施例發明如上，然其並非用以限定本揭露，任何所屬技術領域中具有通常知識者，在不脫離本揭露之精神和範圍內，當可作任意之更動與潤飾，因此本揭露之保護範圍當視後附之申請專利範圍所界定者為準。

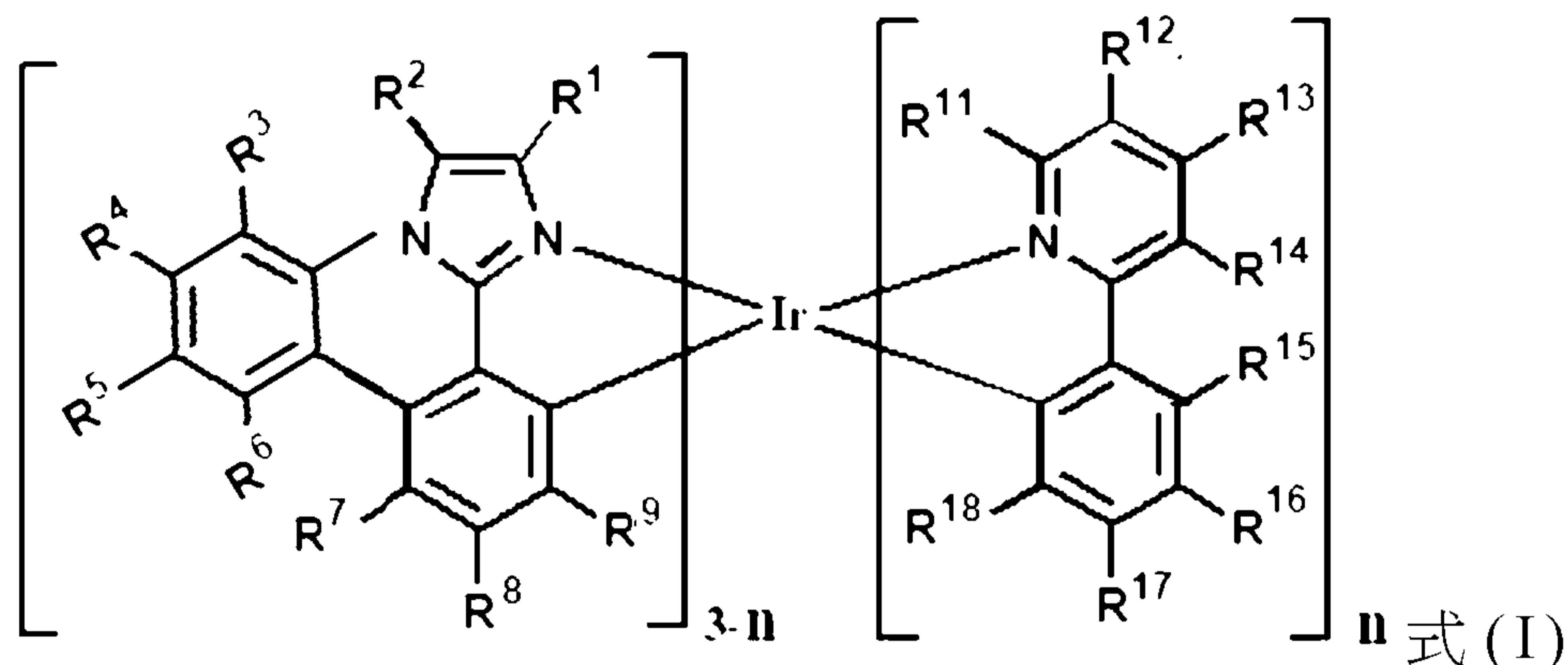
#### 【符號說明】

##### 【0090】

- 10 有機發光裝置；
- 12 基底；
- 14 下電極；
- 16 有機發光單元；
- 18 上電極。

## 申請專利範圍

1. 一種有機金屬化合物，具有下列式(I)所示結構：



其中， $R^1$ 或 $R^2$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、或 $C_{1-8}$ 烷氧基； $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 或 $R^9$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-\text{Si}(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基； $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或 $R^{18}$ 係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$ 烷基、 $C_{1-8}$ 氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$ 鹵烷基、 $C_{1-8}$ 烷氧基、 $C_{5-10}$ 環烷基、 $C_{6-12}$ 芳香基、或 $-\text{Si}(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；且 $n$ 係符合以下(1)-(3)條件之任一者：

(1)  $n$ 係0，且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 及 $R^9$ 之至少一者為 $-\text{Si}(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；

(2)  $n$ 係1或2，且 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 及 $R^{14}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基；以及

(3)  $n$ 係3，且 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、及 $R^{14}$ 之至少一者為 $-\text{Si}(R^{19})_3$ ，其中 $R^{19}$ 係各自獨立地為 $C_{1-8}$ 烷基。

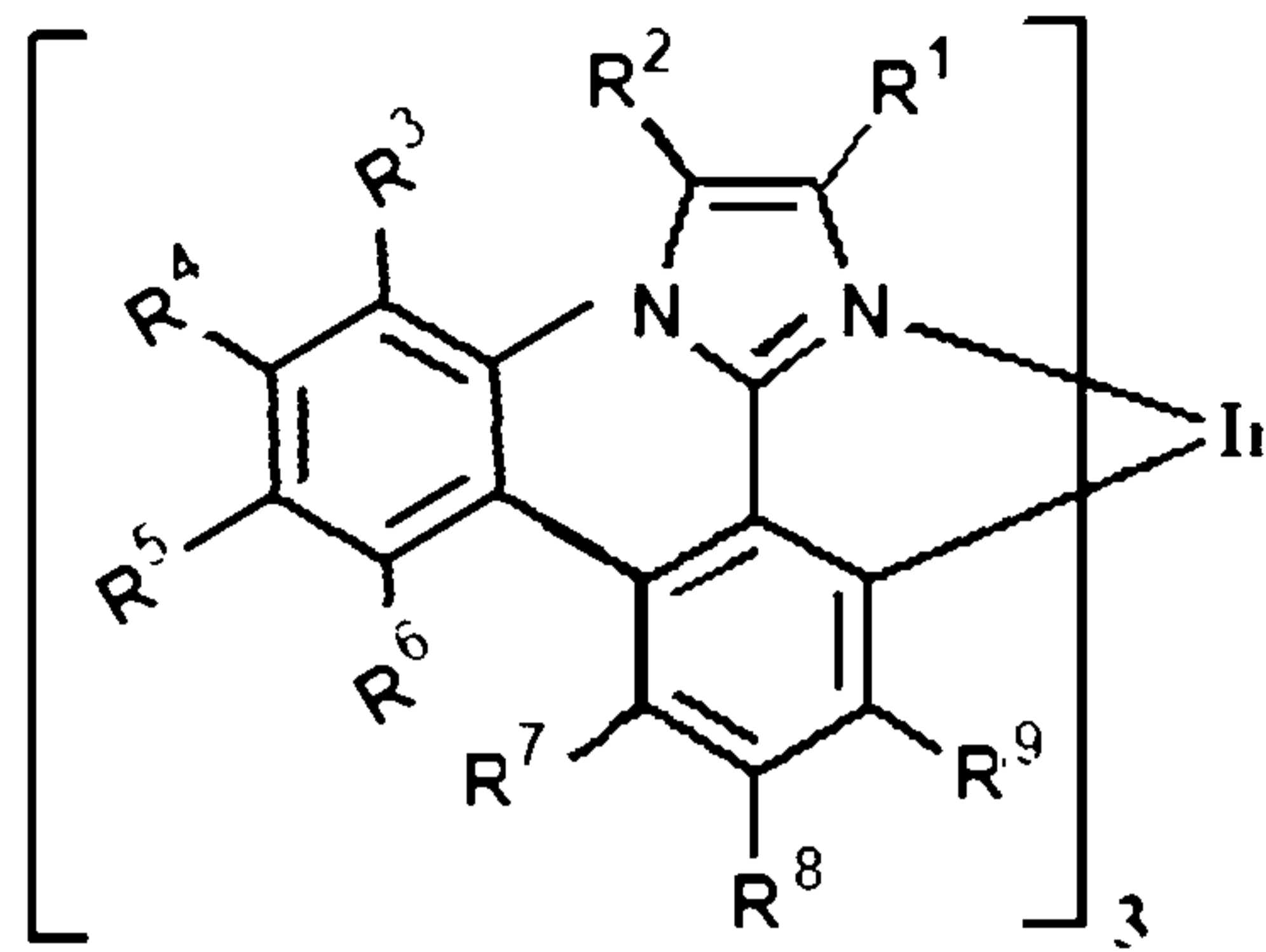
2. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中  $R^1$  或  $R^2$  係各自獨立地為氫、氟、氟代甲基、氟代乙基、氟、甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、己基、氟甲基、氟乙基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、仲丁氧基、異丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、或己氧基。

3. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中  $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或  $R^{15}$  係各自獨立地為氫、氟、氟代甲基、氟代乙基、氟、甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、己基、氟甲基、氟乙基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、仲丁氧基、異丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、環戊基、環己基、苯基、聯苯基、萘基、或三甲基矽烷基。

4. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中  $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或  $R^{18}$  係各自獨立地為氫、氟、甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、己基、氟甲基、氟乙基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、仲丁氧基、異丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、環戊基、環己基、苯基、聯苯基、或萘基。

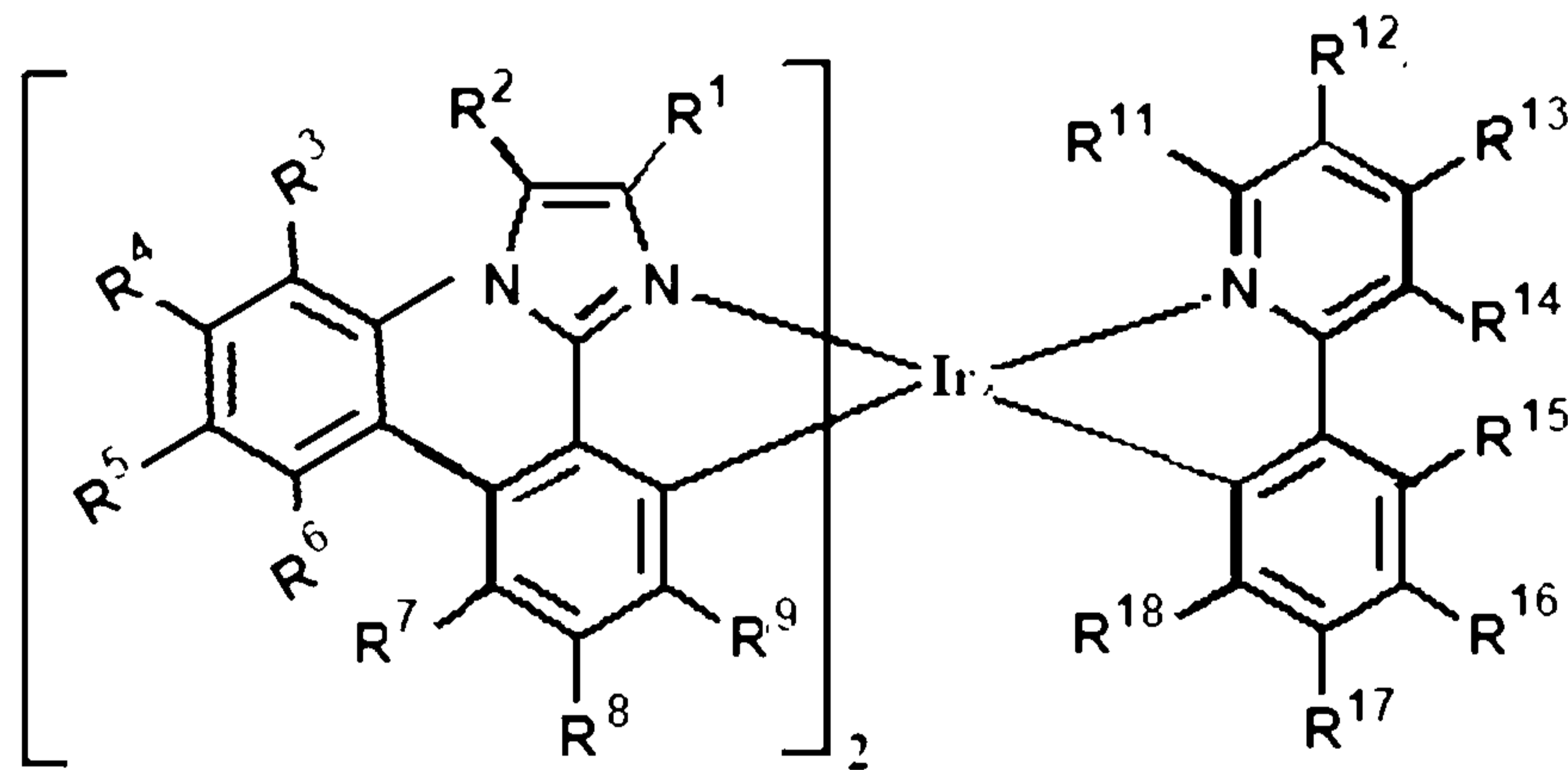
5. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中  $R^{19}$  係各自獨立地為甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、第二丁基、異丁基、叔丁基、戊基、或己基。

6. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中



該有機金屬化合物係為  $\left[ \text{Ir}(\text{L}_1)(\text{L}_2)(\text{L}_3) \right]_3$ ，其中  $R^1$  或  $R^2$  係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、或  $C_{1-8}$  烷氧基；以及， $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、或  $R^9$  係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、 $C_{1-8}$  烷氧基、 $C_{5-10}$  環烷基、 $C_{6-12}$  芳香基、或  $-\text{Si}(R^{19})_3$ ，其中  $R^{19}$  係各自獨立地為  $C_{1-8}$  烷基；且  $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、及  $R^9$  之至少一者之至少一者為  $-\text{Si}(R^{19})_3$ 。

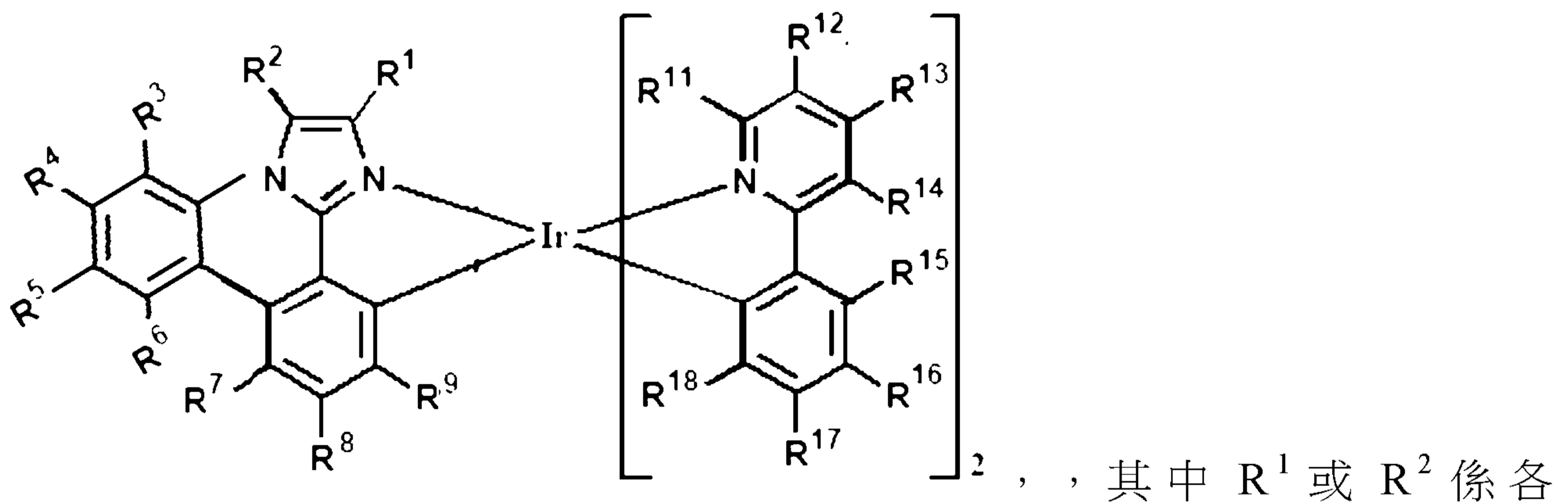
7. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中該有機金屬化合物係為



，其中  $R^1$  或  $R^2$  係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、或  $C_{1-8}$  烷氧基； $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或  $R^{15}$  係各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、 $C_{1-8}$  烷氧基、 $C_{5-10}$  環烷基、

$C_{6-12}$  芳香基、或  $-Si(R^{19})_3$ ，其中  $R^{19}$  係各自獨立地為  $C_{1-8}$  烷基；以及  $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或  $R^{18}$  係各自獨立地為氫、氘、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、氫、鹵素、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  鹵烷基、 $C_{1-8}$  烷氧基、 $C_{5-10}$  環烷基、或  $C_{6-12}$  芳香基；且  $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或  $R^{15}$  之至少一者為  $-Si(R^{19})_3$ 。

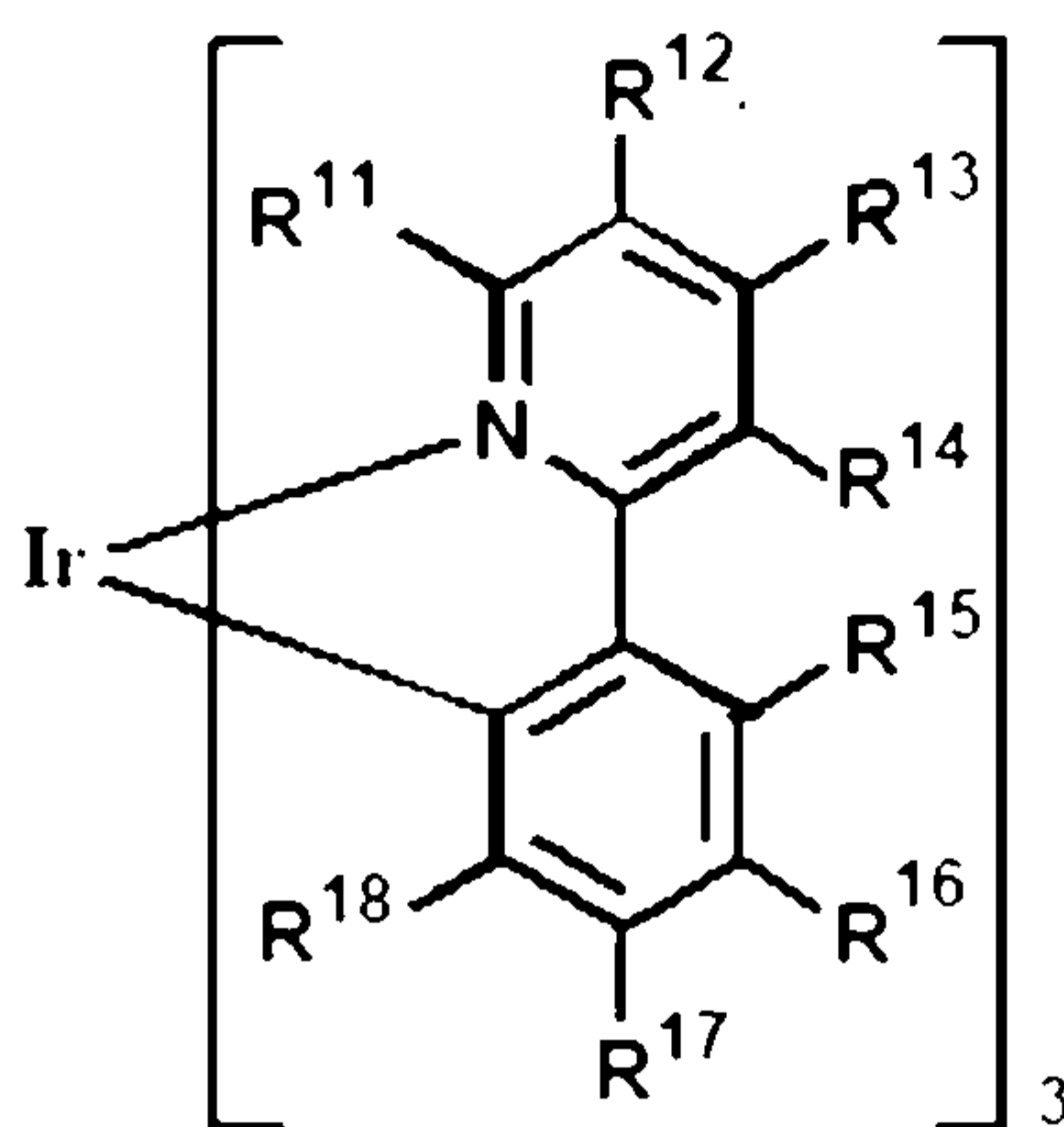
8. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中該有機金屬化合物係為



，其中  $R^1$  或  $R^2$  係各自獨立地為氫、氘、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、或  $C_{1-8}$  烷氧基； $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或  $R^{15}$  係各自獨立地為氫、氘、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、 $C_{1-8}$  烷氧基、 $C_{5-10}$  環烷基、 $C_{6-12}$  芳香基、或  $-Si(R^{19})_3$ ，其中  $R^{19}$  係各自獨立地為  $C_{1-8}$  烷基；以及  $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、或  $R^{18}$  係各自獨立地為氫、氘、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氘代烷基、鹵素、氫、鹵素、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  鹵烷基、 $C_{1-8}$  烷氧基、 $C_{5-10}$  環烷基、或  $C_{6-12}$  芳香基；且  $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、或  $R^{15}$  之至少一者為  $-Si(R^{19})_3$ 。

9. 如申請專利範圍第 1 項所述之有機金屬化合物，其中





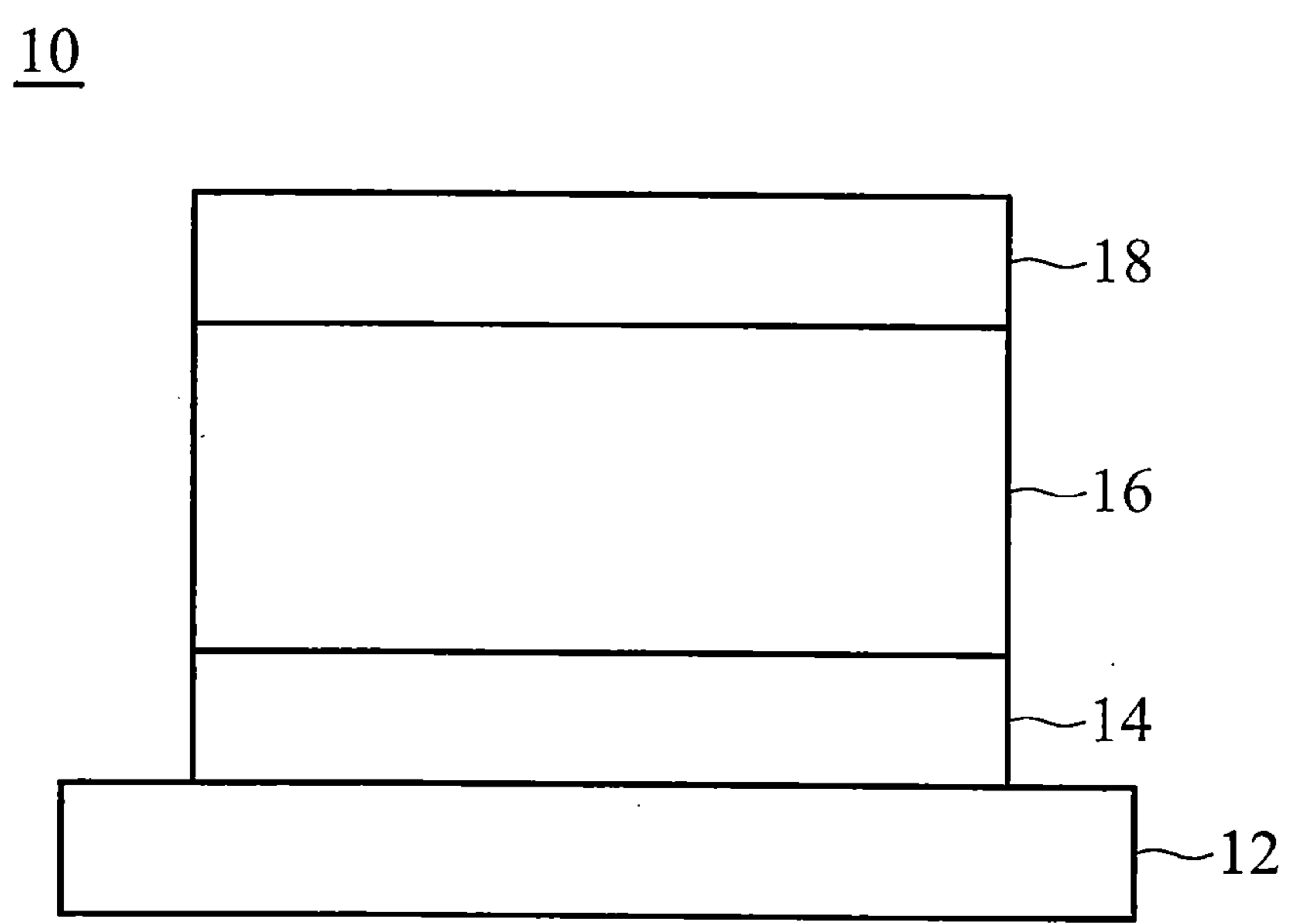
該有機金屬化合物可為  
或  $R^{18}$  可各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、 $C_{1-8}$  烷氧基、 $C_{5-10}$  環烷基、或  $C_{6-12}$  芳香基； $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、或  $R^{14}$  可各自獨立地為氫、氬、 $C_{1-8}$  烷基、 $C_{1-8}$  氬代烷基、鹵素、 $C_{1-8}$  鹵烷基、 $C_{1-8}$  烷氧基、 $C_{5-10}$  環烷基、 $C_{6-12}$  芳香基、或  $-\text{Si}(R^{19})_3$ ，且  $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、或  $R^{14}$  之至少一者為  $-\text{Si}(R^{19})_3$ ； $R^{19}$  可各自獨立地為  $C_{1-8}$  烷基。

10. 一種有機發光裝置，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申請專利範圍第 1-9 項所述之有機金屬化合物。

【發明圖式】



第 1 圖