

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国际局

(43) 国际公布日
2024 年 12 月 19 日 (19.12.2024)



(10) 国际公布号
WO 2024/254915 A1

- (51) 国际专利分类号:
C07F 5/02 (2006.01) *H10K 85/60* (2023.01)
C09K 11/06 (2006.01) *H10K 50/11* (2023.01)
- (21) 国际申请号: PCT/CN2023/104688
- (22) 国际申请日: 2023 年 6 月 30 日 (30.06.2023)
- (25) 申请语言: 中文
- (26) 公布语言: 中文
- (30) 优先权:
202310696805.3 2023年6月13日 (13.06.2023) CN
- (71) 申请人: 深圳市华星光电半导体显示技术有限公司(SHENZHEN CHINA STAR OPTOELECTRONICS SEMICONDUCTOR DISPLAY TECHNOLOGY CO., LTD.) [CN/CN]; 中国广东省深圳市光明新区公明街道塘明大道9-2号, Guangdong 518132 (CN)。

(74) 代理人: 深圳紫藤知识产权代理有限公司(PURPLEVINE INTELLECTUAL PROPERTY (SHENZHEN) CO., LTD.); 中国广东省深圳市南山区粤海街道大冲社区华润置地大厦C座2901, Guangdong 518052 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

(54) **Title:** ORGANIC COMPOUND, MIXTURE, COMPOSITION, ORGANIC LIGHT-EMITTING DEVICE AND DISPLAY PANEL

(54) 发明名称: 有机化合物、混合物、组合物、有机发光器件及显示面板

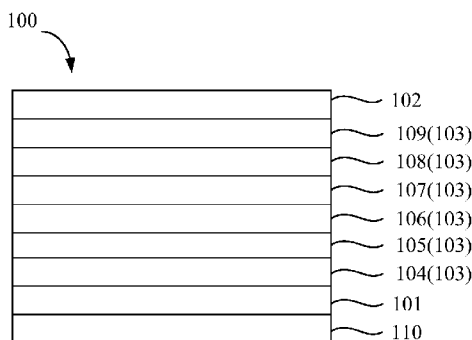
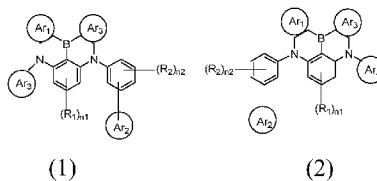


图 1



(57) **Abstract:** An organic compound, a mixture, a composition, an organic light-emitting device, and a display panel. The organic compound has a structure as shown in general formula (1) or (2). By means of introducing a group that enhances the overall conjugation of a compound into a boron-nitrogen compound, the material performance is improved, the luminous efficiency of the organic light-emitting device is improved, and the service life of the organic light-emitting device is prolonged.

(57) **摘要:** 一种有机化合物、混合物、组合物、有机发光器件及显示面板, 该有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构, 通过在硼氮化合物中引入使化合物整体共轭性更大的基团, 改善了材料性能, 提高了有机发光器件的发光效率并延长了有机发光器件的使用寿命

本国际公布:

— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

有机化合物、混合物、组合物、有机发光器件及显示面板

技术领域

本申请涉及显示领域，尤其涉及一种有机化合物、混合物、组合物、有机发光器件及显示面板。

5 背景技术

目前，有机电致发光元件如 OLED (Organic Light-Emitting Diode) 通常具有阳极、阴极以及位于两者之间的有机层，利用有机层的有机物质将电能转化为光能，从而实现有机电致发光。为提高有机电致发光元件的发光效率以及使用寿命，有机层往往为多层，每一层的有机物有所不同。具体地，有机层主要包括空穴注入层、空穴传输层、发光层、电子传输层、电子注入层等。在有机电致发光元件的阳极和阴极之间施加电压，阳极向有机层注入空穴，阴极向有机层注入电子，注入的空穴与电子相遇形成激子，激子跃迁回基态时发光，从而实现了有机电致发光元件的发光。有机电致发光元件具有自主发光、高亮度、高效率、低电压驱动、广视角、高对比度以及高响应等特点，因此，有机电致发光器件具有广泛的应用前景。

为了提高有机电致发光元件的发光效率，各种基于荧光和磷光的发光材料体系被开发出来。其中，使用荧光材料的有机电致发光元件具有可靠性高的特点，但其在电气激发下，由于激子的单重激发态和三重激发态的分支比为 1:3，内部电致发光量子效率会被限制在 25% 以内，而使用磷光材料的有机电致发光元件几乎能够取得 100% 的内部电致发光量子效率。但是，磷光材料通常使用含铱、铂的金属配合物，原料昂贵且合成复杂，并且磷光类有机电致发光元件还会产生 Roll-off (效率滚降) 效应，即发光效率随电流或亮度的增加而迅速降低，限制了其在高亮度下的应用。

为了克服上述问题，现有技术通常为基于有机化合物的各种材料组合，例如，复合受激态材料、热激发延迟荧光(TADF, Thermally Activated Delayed Fluorescence)材料等，尝试利用反向内部转换实现与磷光类有机电致发光元件相媲美的高效率。然而，传统的具有 TADF 的有机化合物无论从效率还是寿命

上,其性能均提升受限,导致应用具有 TADF 的有机化合物的有机电致发光元件的发光效率以及使用寿命难以提升。

因此,亟需一种用于有机发光器件的有机化合物,以解决上述技术问题。

技术问题

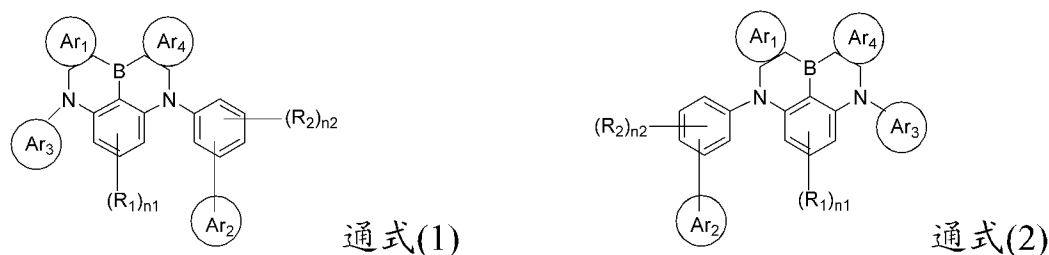
- 5 本申请提供一种有机化合物、混合物、组合物、有机发光器件及显示面板,可以提升有机电致发光元件的发光效率以及寿命。

技术方案

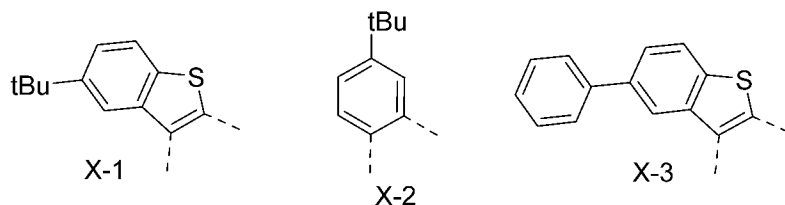
为解决上述问题,本申请提供的技术方案如下:

本申请提供一种有机化合物,所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的

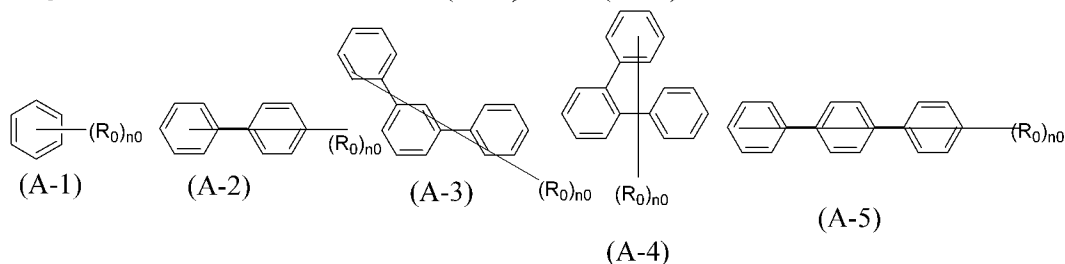
10 结构:



其中, Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-2)中任一者所表示的结构:



Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构:



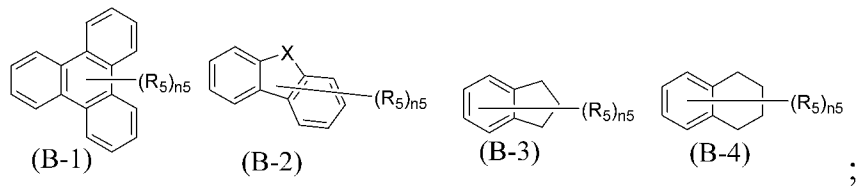
15

当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结构;

Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

20

Ar_2 选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



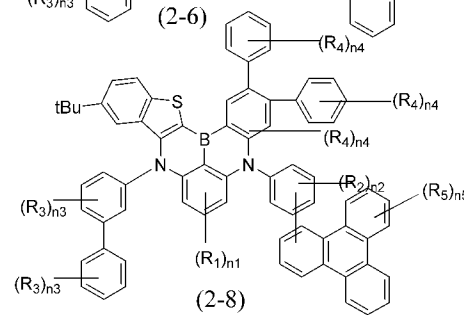
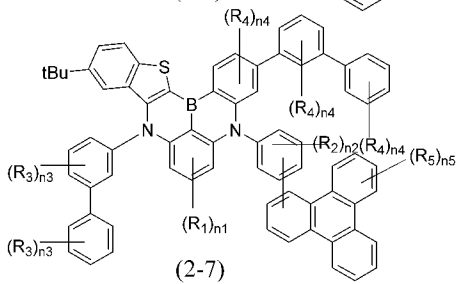
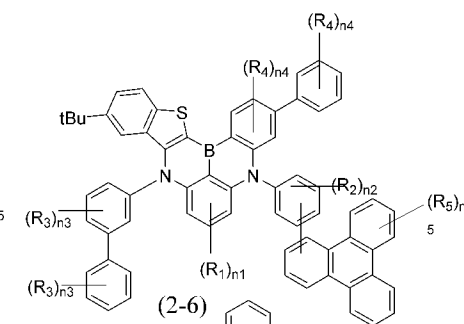
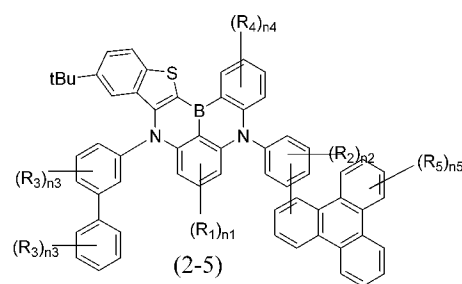
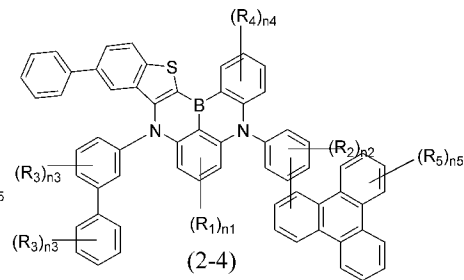
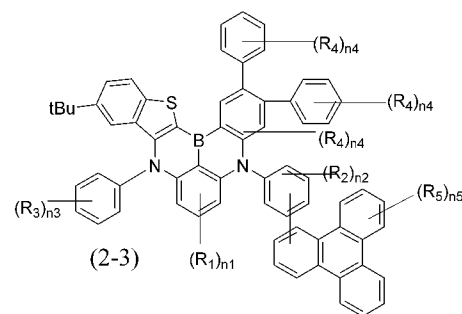
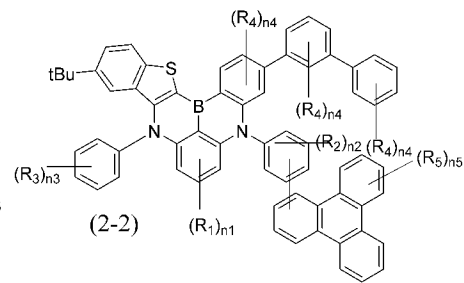
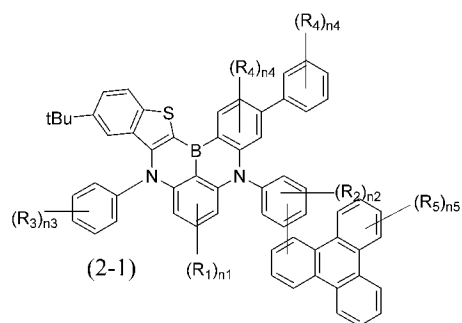
X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

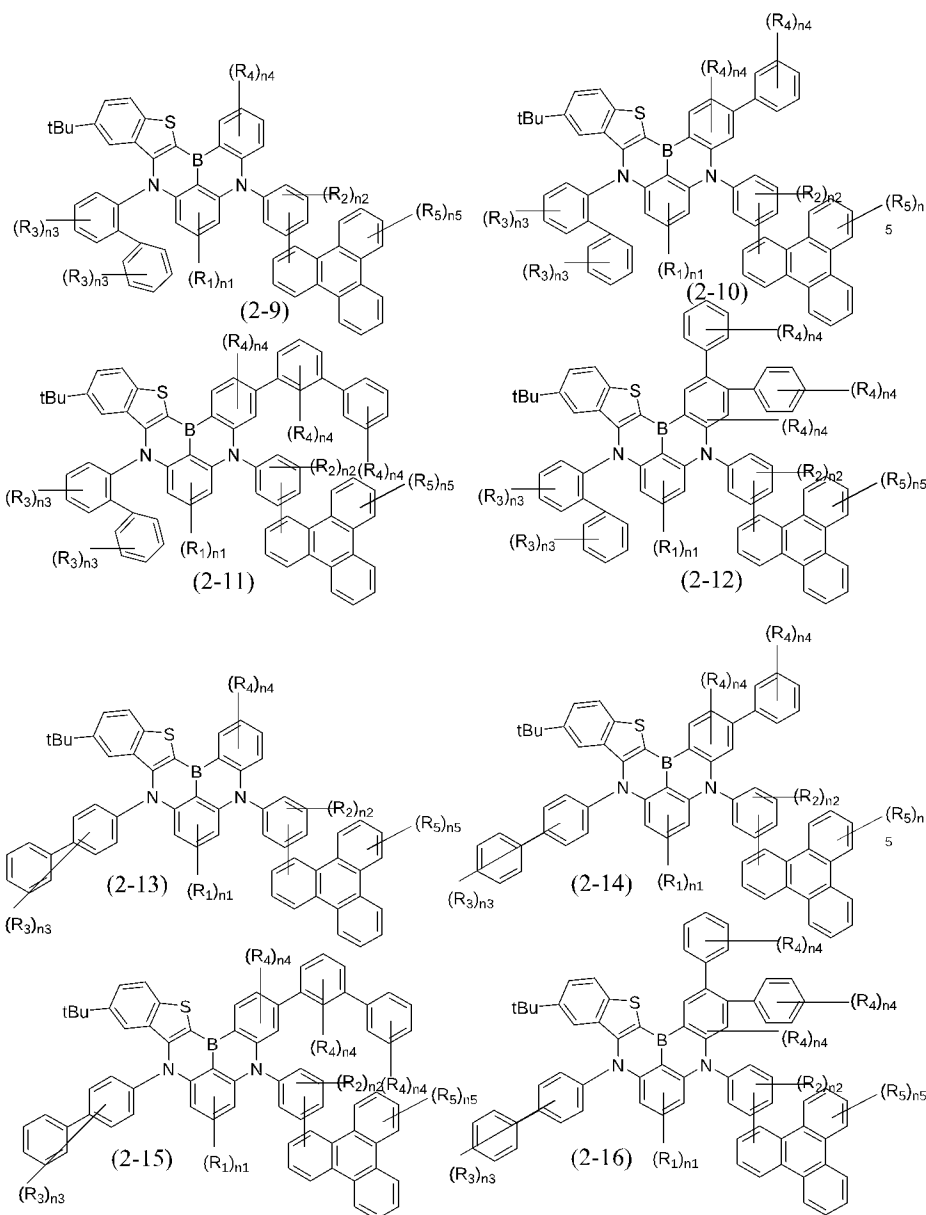
n₀、n₁、n₂、n₅ 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

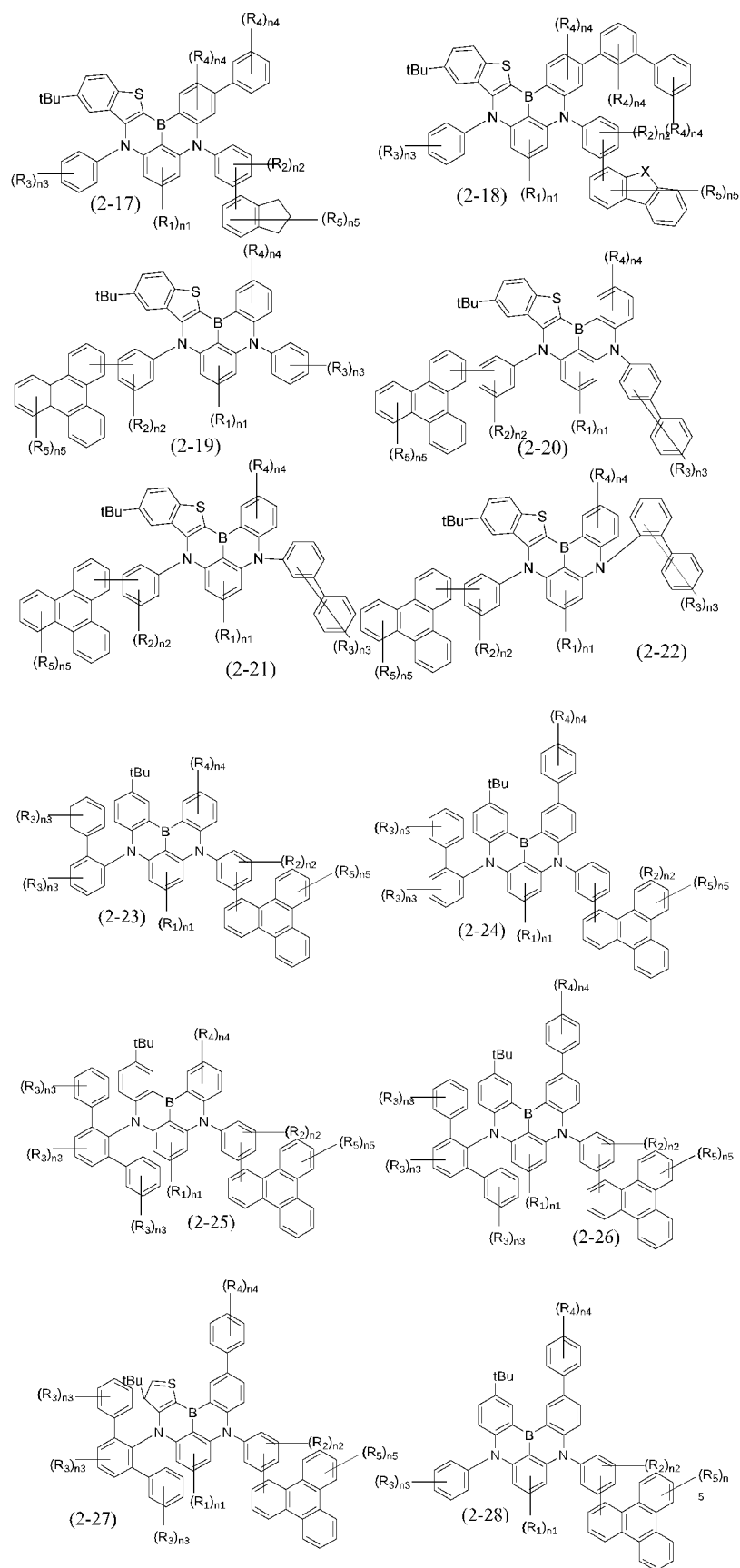
- 5 任一 R₀、R₁、R₂ 或 R₅ 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;
- 10
- 15

20 当 n₀ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₀ 相互成环或不成环; 当 n₁ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₁ 相互成环或不成环; 当 n₂ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₂ 相互成环或不成环; 当 n₅ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₅ 相互成环或不成环。

优选的, 所述有机化合物具有如通式(2-1)至通式(2-28)中任一者所示的结构:







其中，任一 R_3 、 R_4 分别独立地选自：-H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直

链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫
 代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的
 5 硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的
 烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的
 烯烷基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰
 酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的
 10 环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香
 基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子
 数为 5 至 30 的杂芳氧基；

n_3 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

当 n_3 大于或等于 2 时，相邻的两个 R₃ 相互成环或不成环；

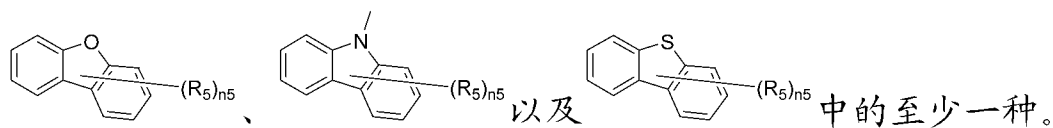
n_4 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

15 当 n_4 大于或等于 2 时，相邻的两个 R₄ 相互成环或不成环。

优选的，任一 R₁、R₂、R₃、R₄ 或 R₅ 独立地选自 -H、-D、具有 1 至 10 个
 碳原子的直链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 10 个碳原子
 的环状烷基。

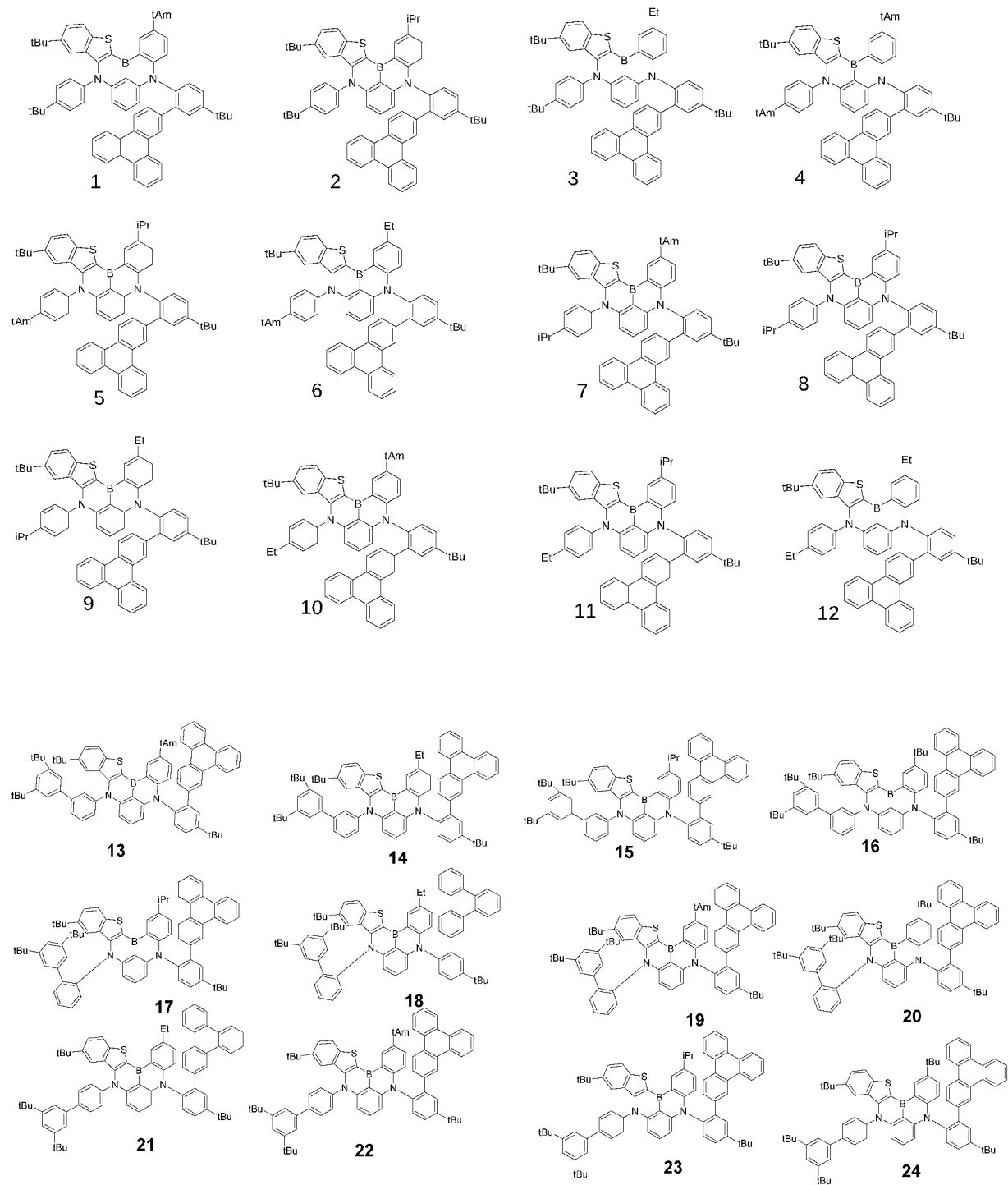
20 优选的，任一 R₁、R₂、R₃、R₄ 或 R₅ 独立地选自：-H、-D、具有 1 至 4 个
 碳原子的直链烷基、具有 3 至 5 个碳原子的支链烷基。

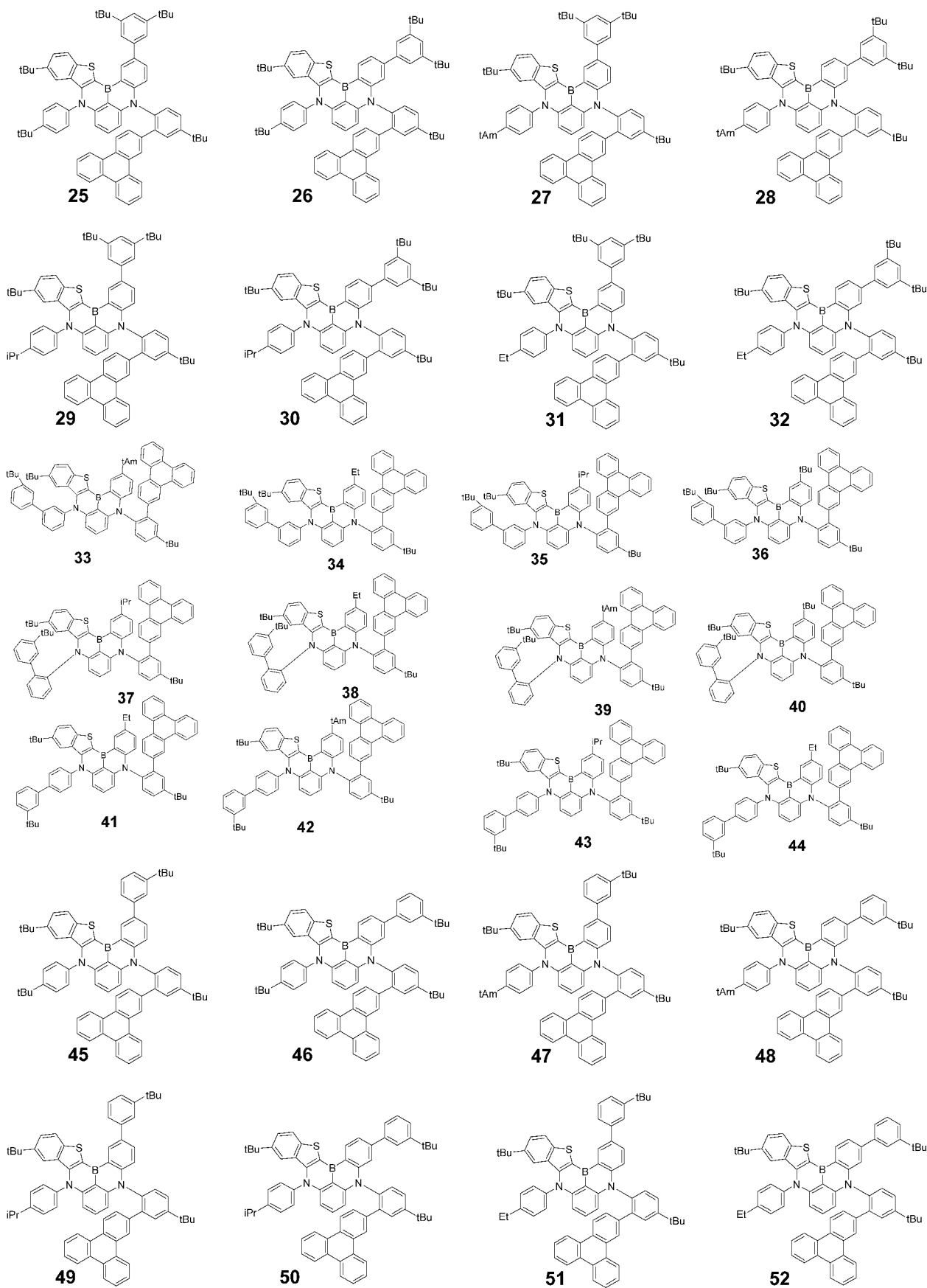
优选的，当 Ar₂ 中存在所述式(B-2)所表示的结构时，所述式(B-2)所表示
 的结构选为：

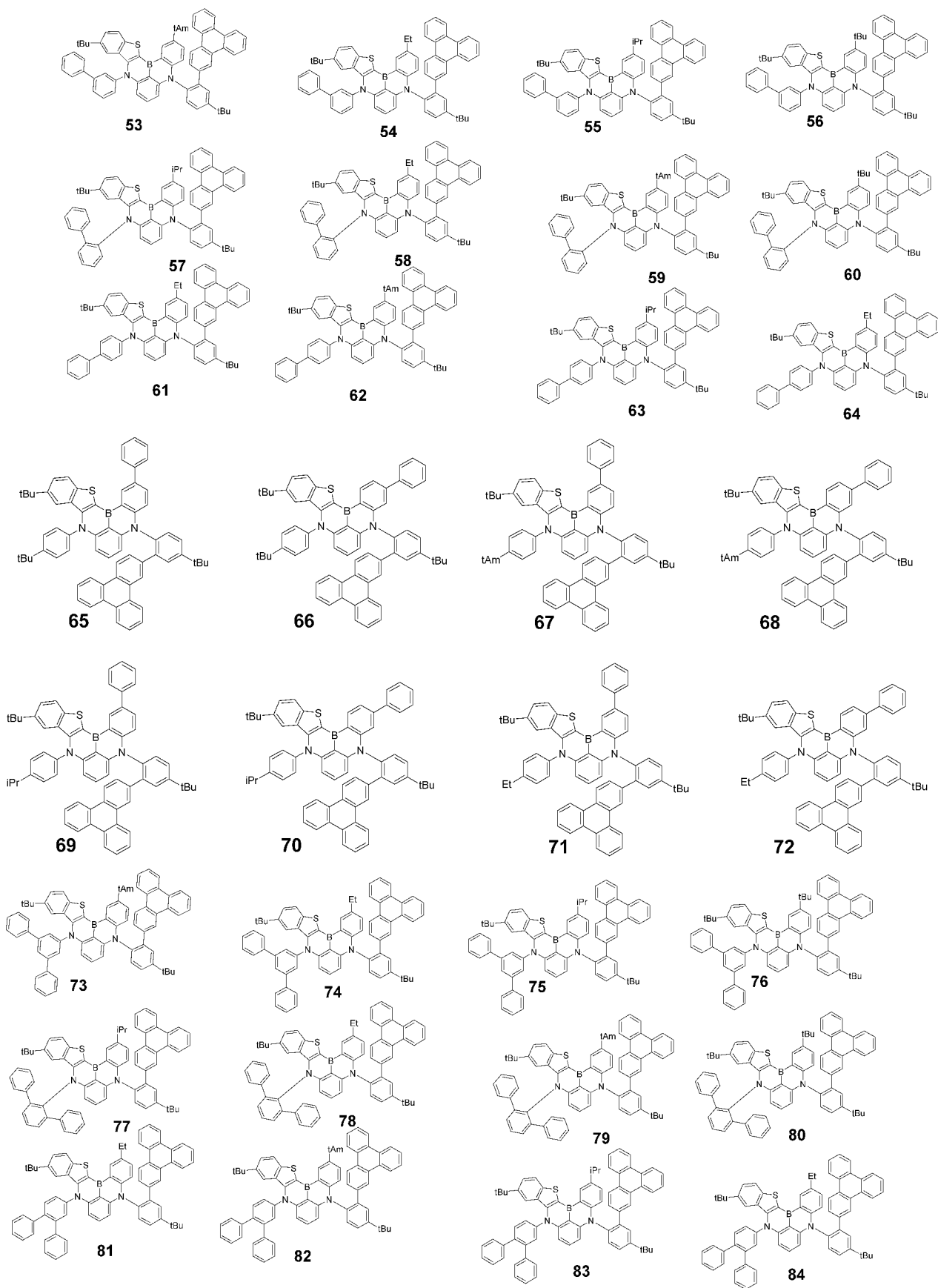


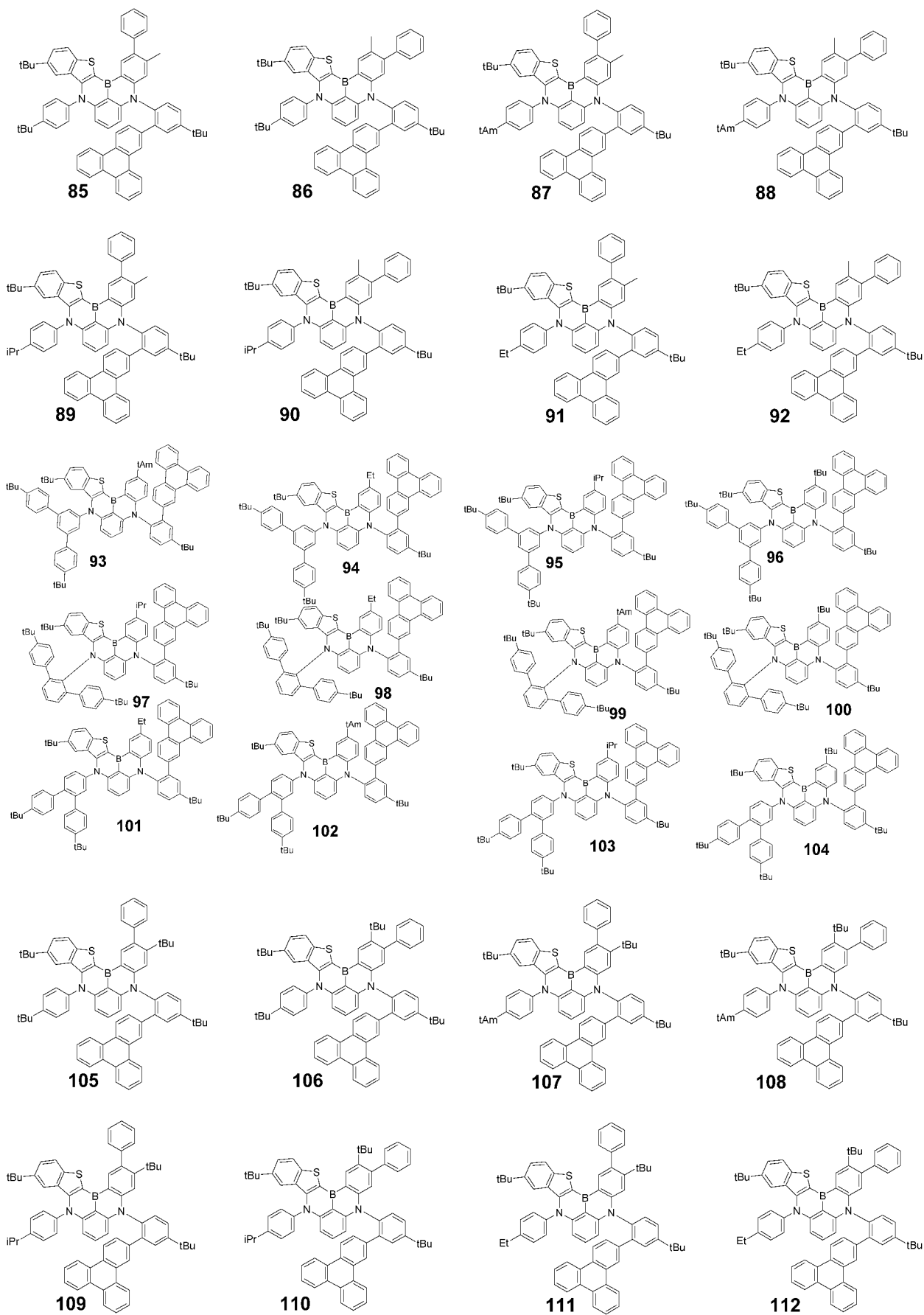
优选的，所述有机化合物为蓝色发光材料。

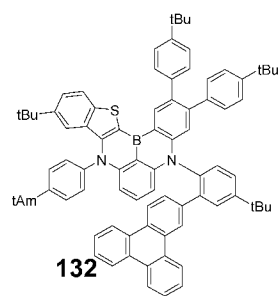
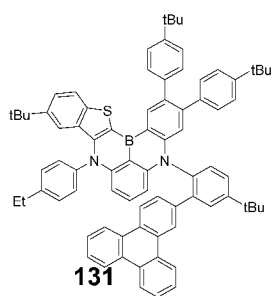
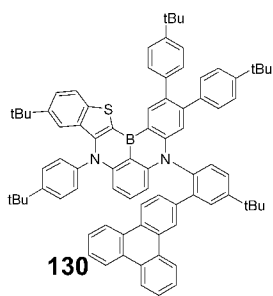
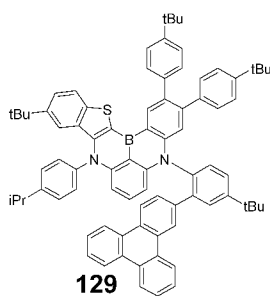
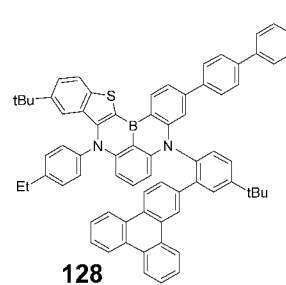
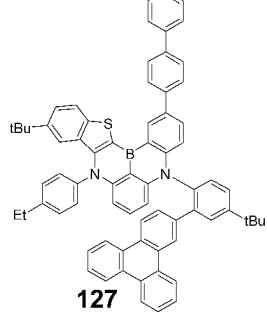
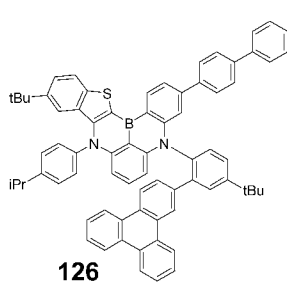
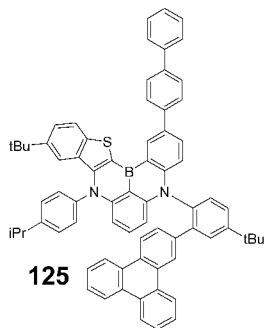
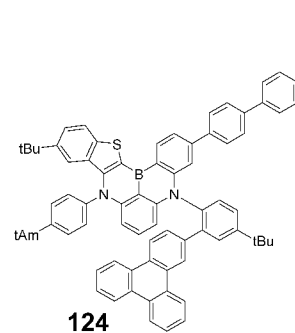
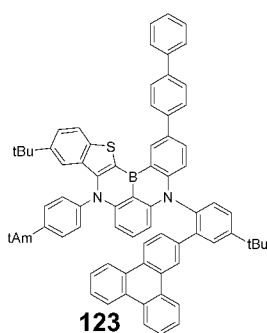
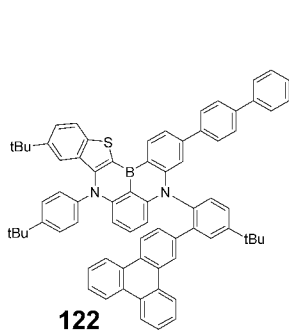
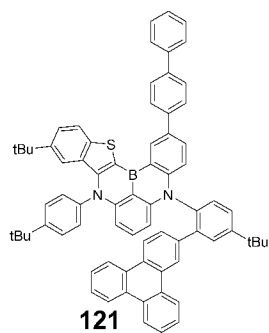
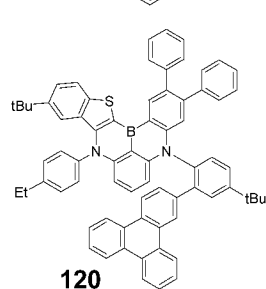
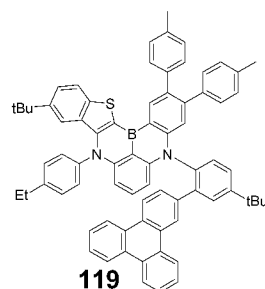
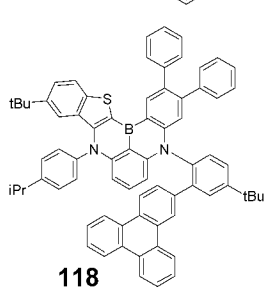
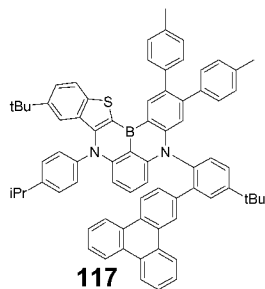
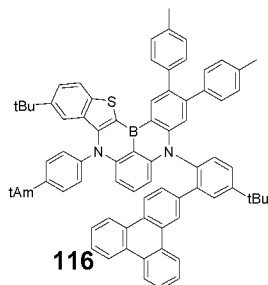
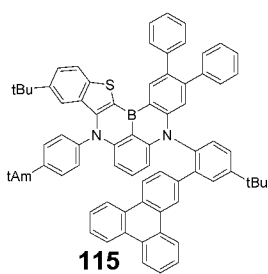
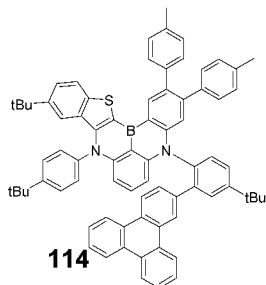
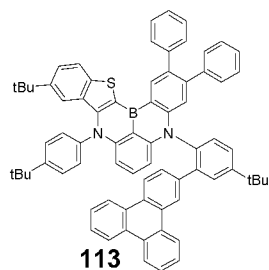
25 优选的，所述有机化合物选自以下化合物：

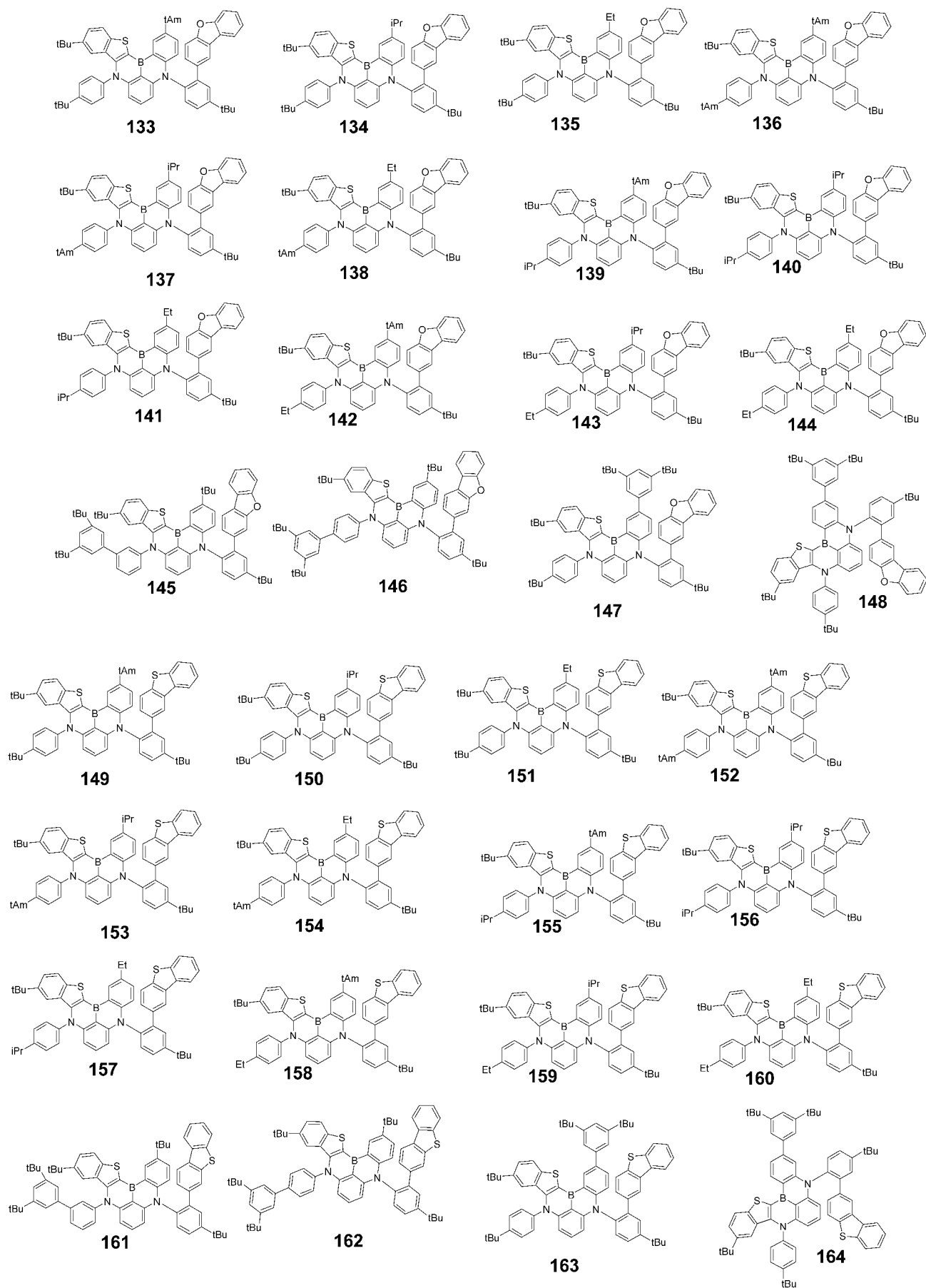


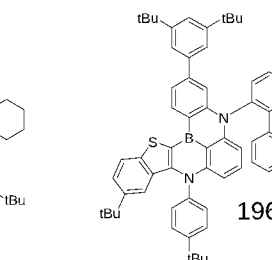
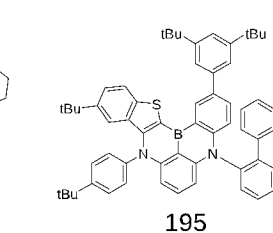
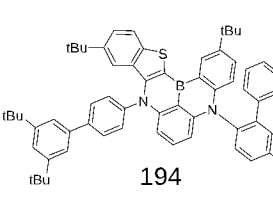
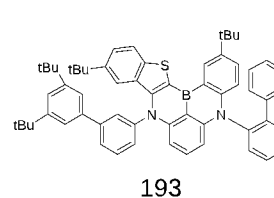
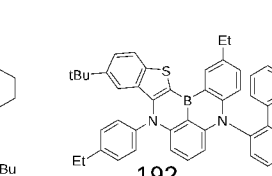
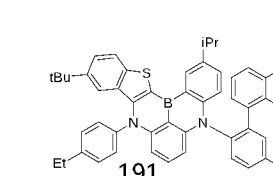
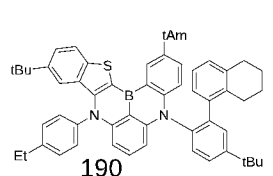
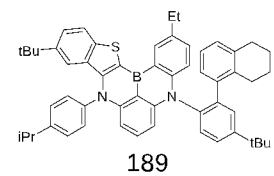
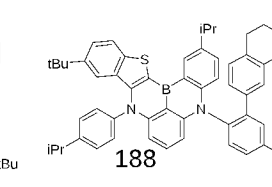
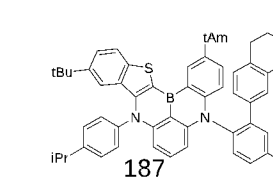
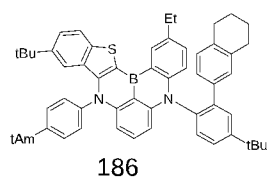
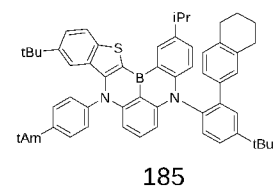
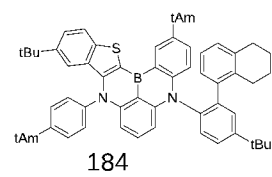
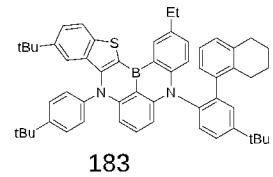
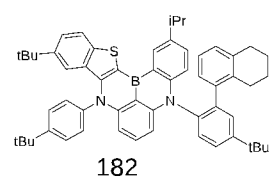
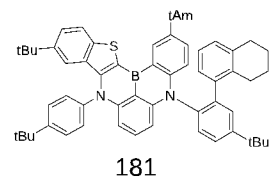
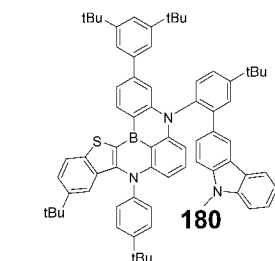
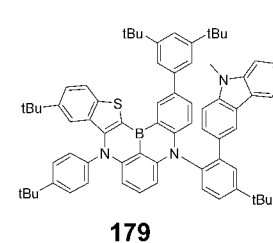
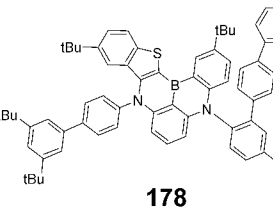
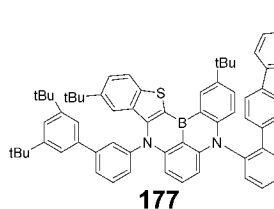
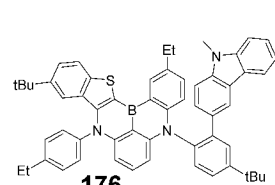
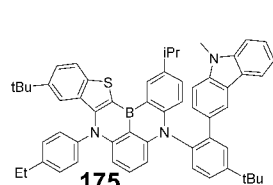
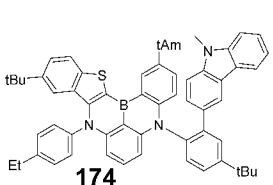
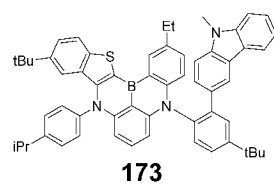
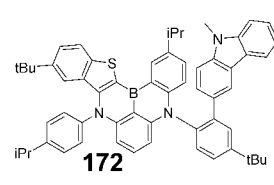
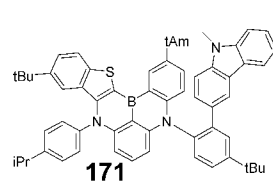
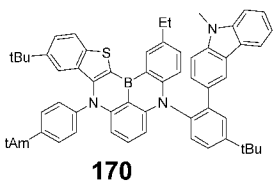
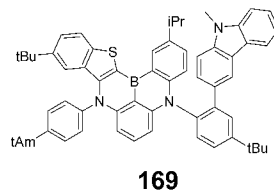
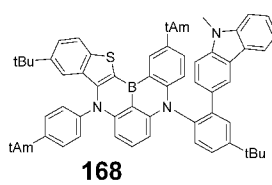
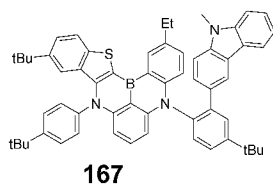
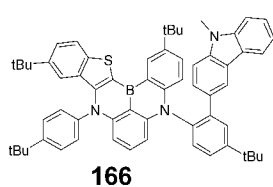
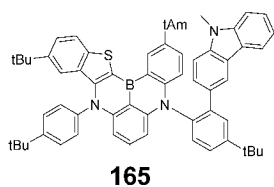


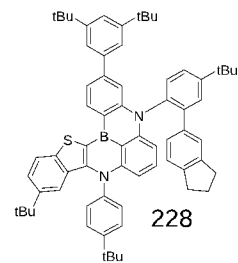
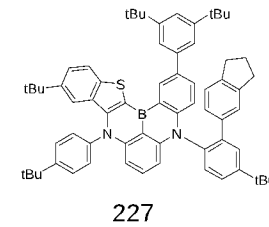
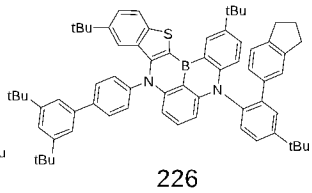
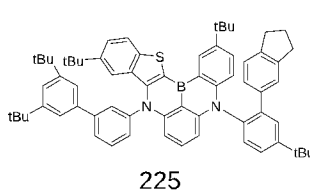
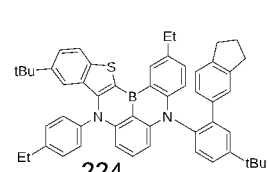
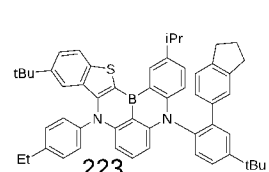
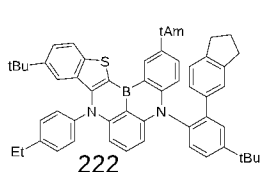
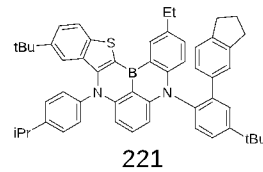
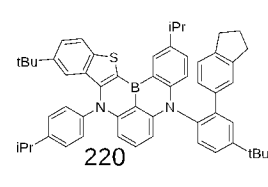
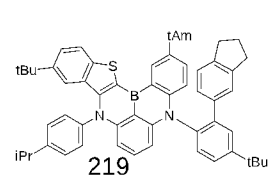
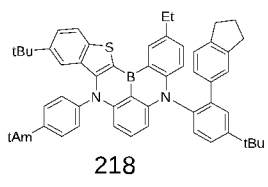
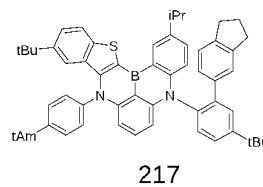
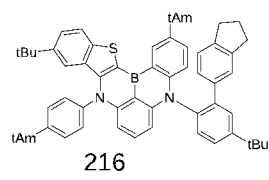
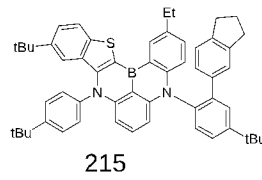
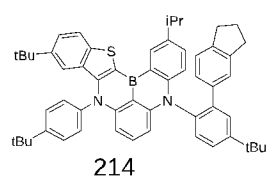
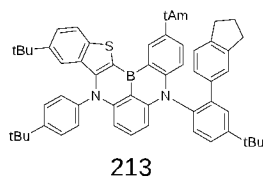
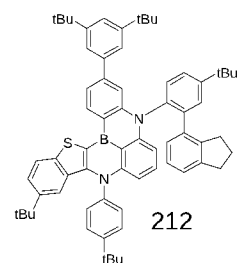
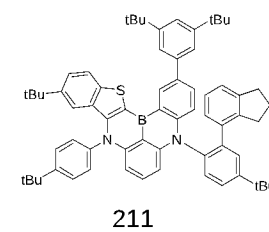
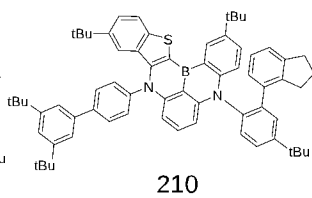
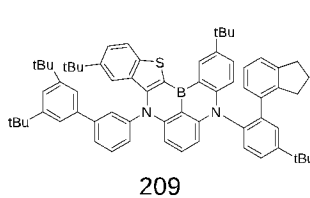
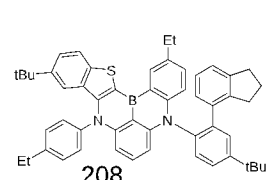
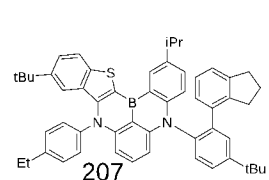
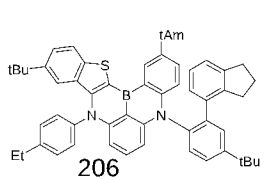
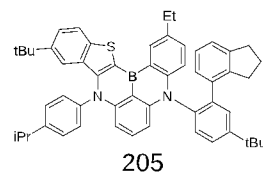
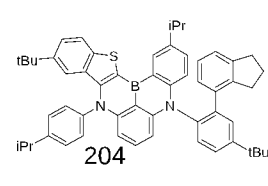
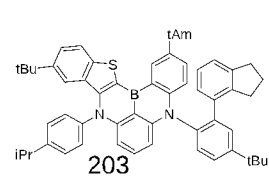
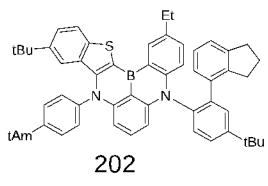
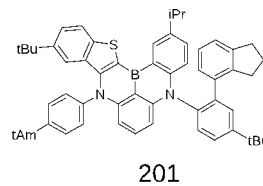
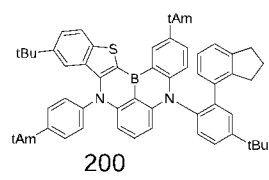
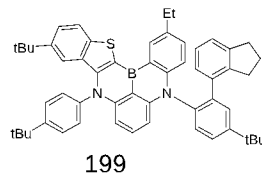
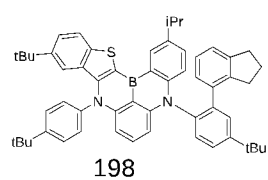
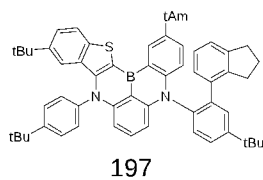


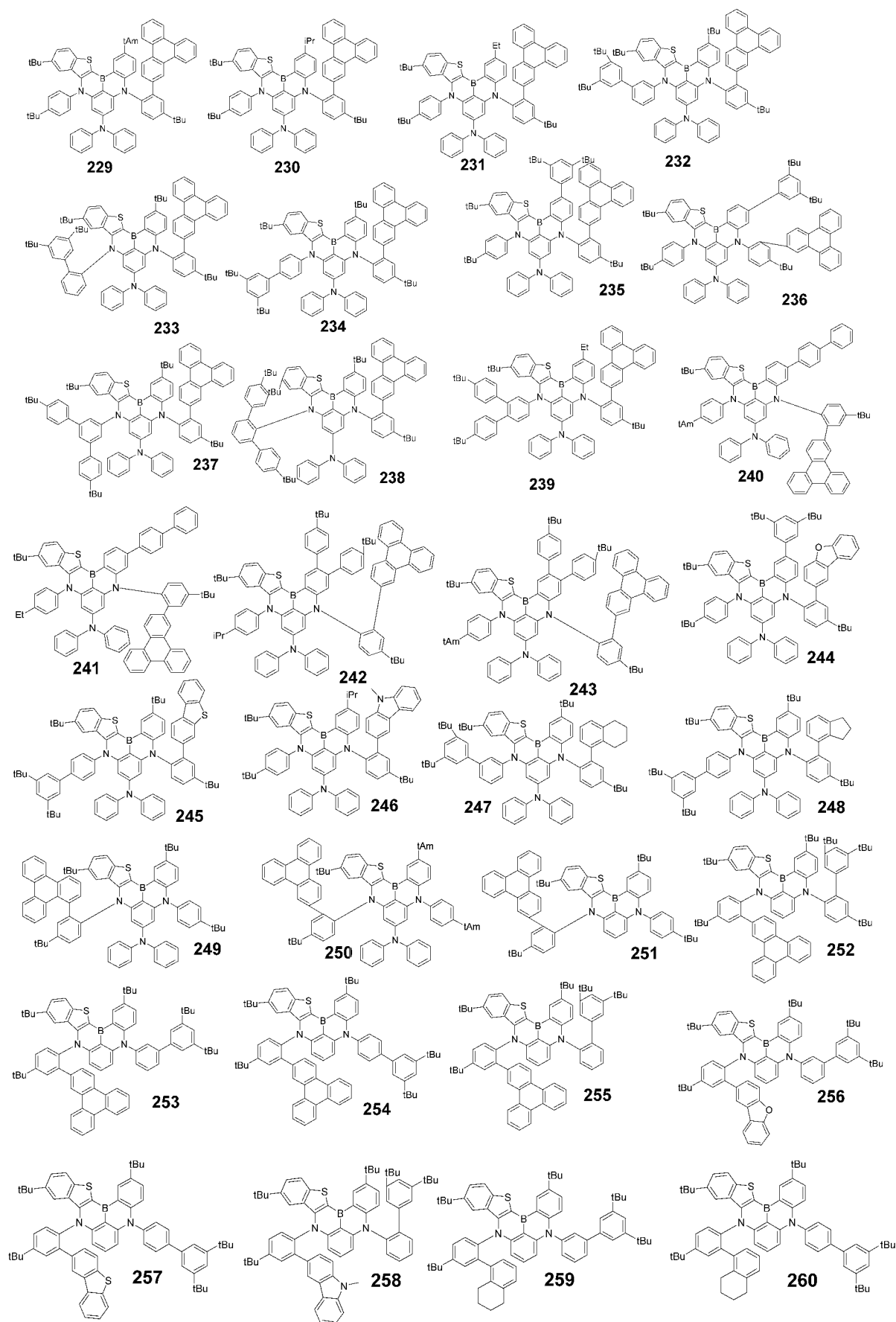


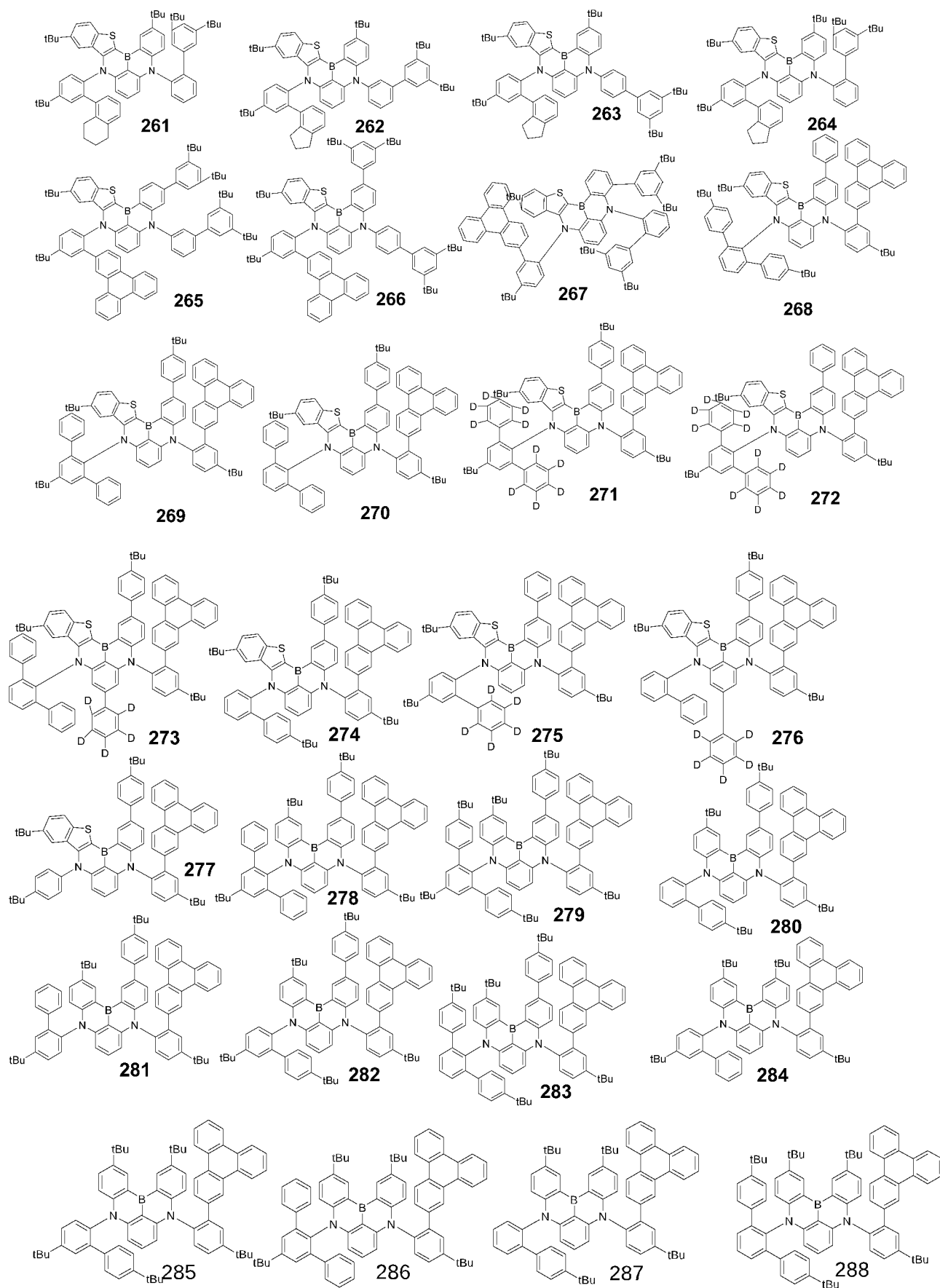


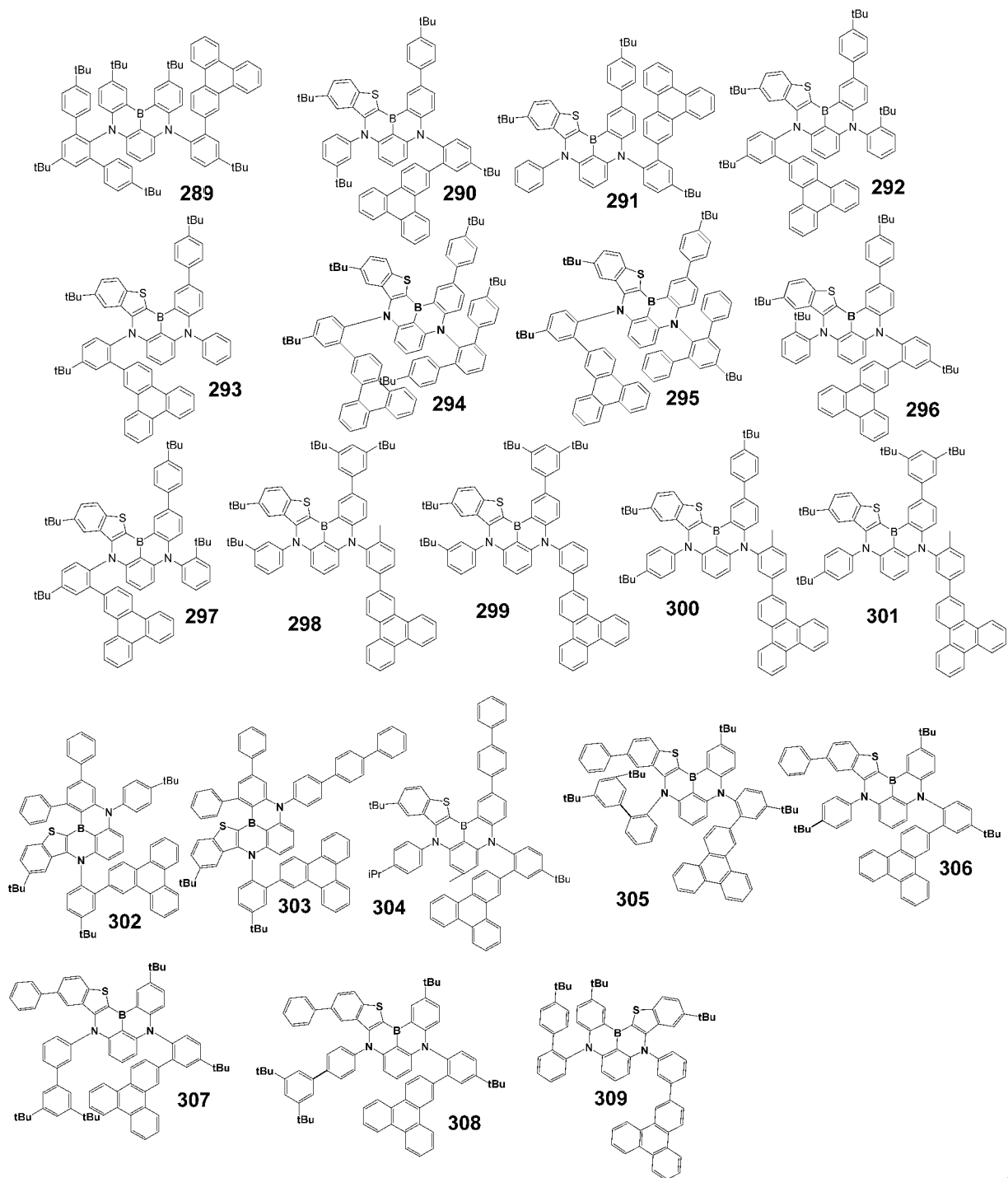






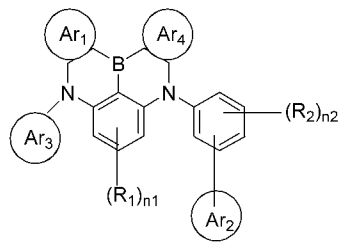




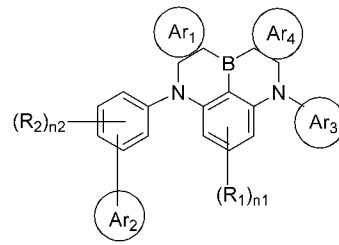


本申请还提供一种混合物，包括有机化合物和至少一种有机功能材料，所述有机功能材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料；

其中，所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构：

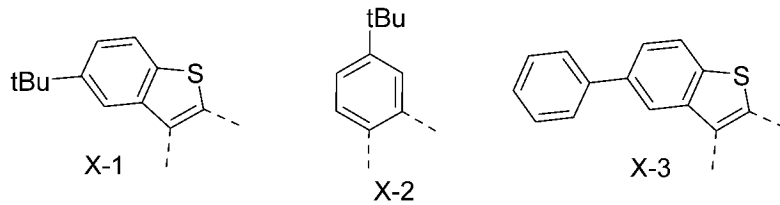


通式(1)

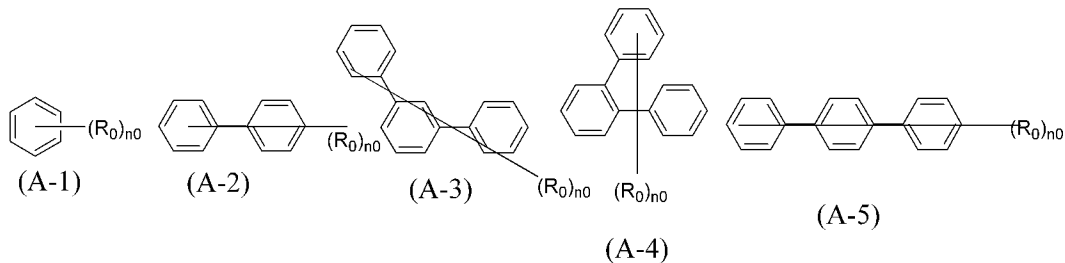


通式(2)

其中, Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构:



Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构:

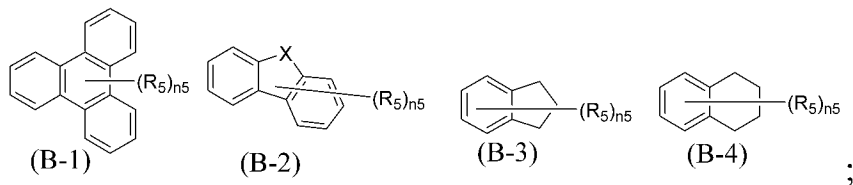


5

当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结构;

10 Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar_2 选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



;

X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

15 n_0 、 n_1 、 n_2 、 n_5 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

任一 R_0 、 R_1 、 R_2 或 R_5 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的

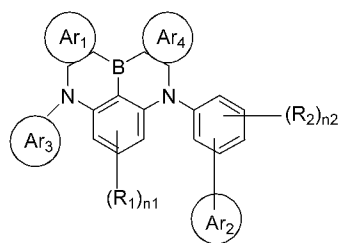
烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基；

当 n_0 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_0 相互成环或不成环；当 n_1 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_1 相互成环或不成环；当 n_2 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_2 相互成环或不成环；当 n_5 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_5 相互成环或不成环。

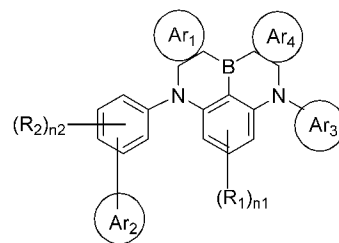
本申请还提供一种组合物，包括有机化合物或混合物、及至少一种有机溶剂；

所述混合物包括所述有机化合物和至少一种有机功能材料，所述有机功能材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料；

所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构：

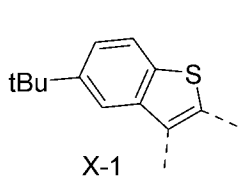


通式(1)

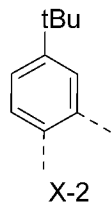


通式(2)

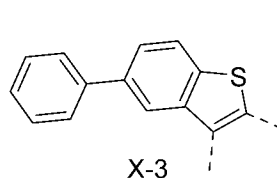
其中， Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构：



X-1

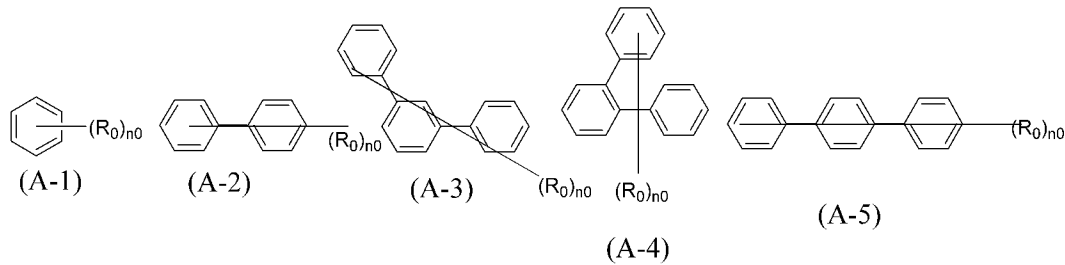


X-2



X-3

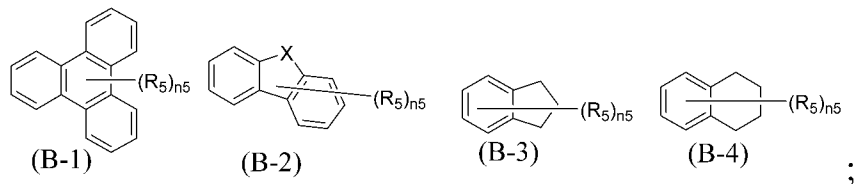
Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构：



当 Ar_1 选自式 X-2 时, Ar_4 独立地选自式 (A-2) 至式 (A-5) 中任一者所表示的结构;

- 5 Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar_2 选自式 (B-1) 至式 (B-4) 中任一者所表示的结构:



- 10 X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

n_0 、 n_1 、 n_2 、 n_5 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

- 任一 R_0 、 R_1 、 R_2 或 R_5 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯烷基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;
- 15
- 20

- 当 n_0 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_0 相互成环或不成环; 当 n_1 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_1 相互成环或不成环; 当 n_2 大于或等于 2 时, 相邻的两
- 25

个 R_2 相互成环或不成环; 当 n_5 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_5 相互成环或不成环。

本申请还提供一种有机发光器件, 包括:

第一电极;

5 第二电极, 与所述第一电极相对设置; 以及

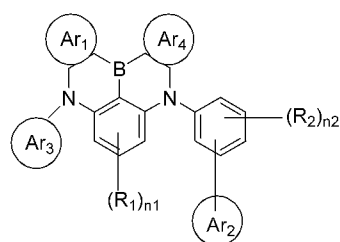
有机功能层, 位于所述第一电极与所述第二电极之间;

其中, 所述有机功能层的材料包括有机化合物中的一种或多种, 或混合物, 或由组合物制备而成;

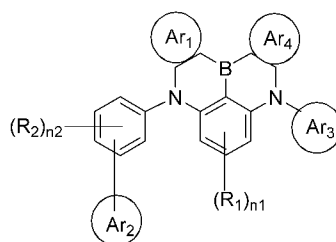
所述组合物包括所述有机化合物或所述混合物、及至少一种有机溶剂;

10 所述混合物包括所述有机化合物和至少一种有机功能材料, 所述有机功能材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料;

所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构:

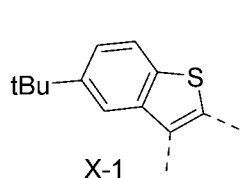


通式(1)

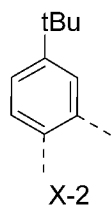


通式(2)

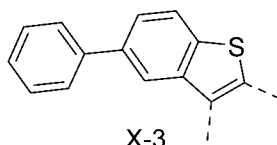
15 其中, Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构:



X-1

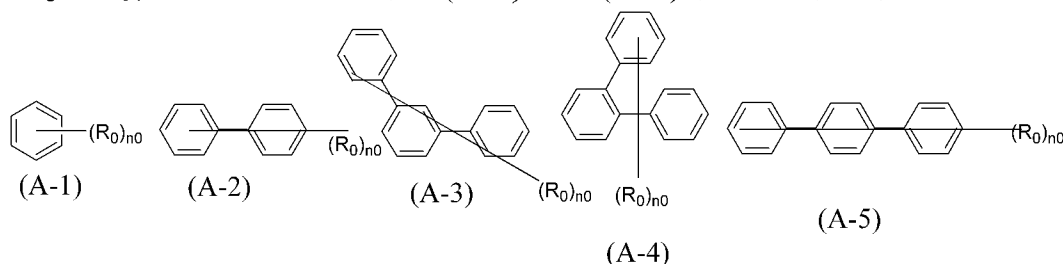


X-2



X-3

Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构:



(A-1)

(A-2)

(A-3)

(A-4)

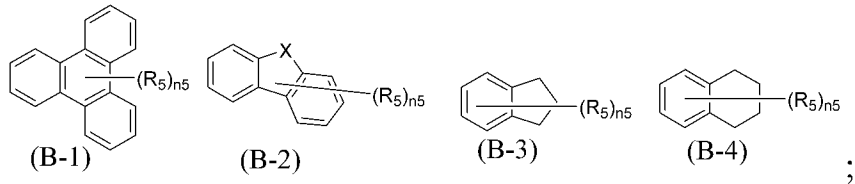
(A-5)

20 当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结

构;

Ar₃的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar₄的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar₂选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

n₀、n₁、n₂、n₅ 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

任一 R₀、R₁、R₂ 或 R₅ 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;

当 n₀ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₀ 相互成环或不成环; 当 n₁ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₁ 相互成环或不成环; 当 n₂ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₂ 相互成环或不成环; 当 n₅ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₅ 相互成环或不成环。

优选的, 所述有机功能层至少包括发光层, 所述发光层包括主体材料以及客体材料, 所述客体材料为所述有机化合物中的一种或多种, 所述主体材料包括稠合芳族衍生物或杂芳族化合物。

优选的, 所述主体材料包括蒽衍生物、芘衍生物、萘衍生物、并五苯衍生

物、菲化合物、蒽蒽化合物、卟啉衍生物、二苯并呋喃衍生物、梯子型呋喃化合物、嘧啶衍生物中的一种或一种以上。

优选的,所述主体材料与所述客体材料的质量比为 99:1 至 70:30。

本申请还提供一种显示面板,包括有机发光器件,所述有机发光器件包括:

5

第一电极;

第二电极,与所述第一电极相对设置;以及

有机功能层,位于所述第一电极与所述第二电极之间;

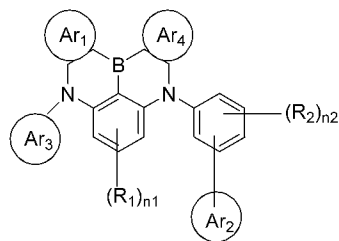
其中,所述有机功能层的材料包括有机化合物中的一种或多种,或混合物,或由组合物制备而成;

10

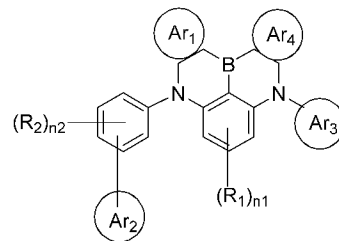
所述组合物包括所述有机化合物或所述混合物、及至少一种有机溶剂;

所述混合物包括所述有机化合物和至少一种有机功能材料,所述有机功能材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料;

所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构:



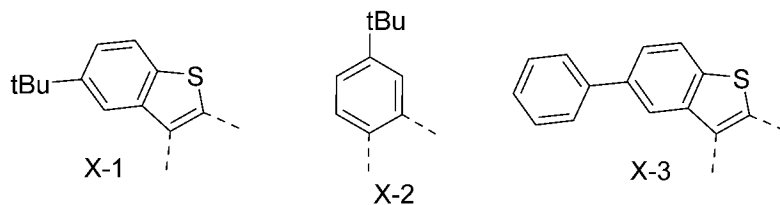
通式(1)



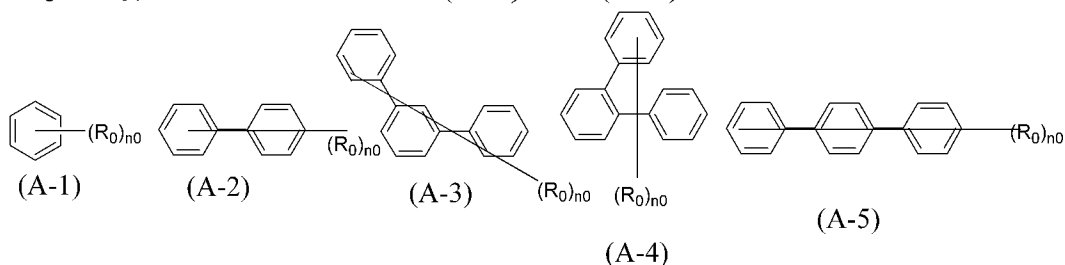
通式(2)

15

其中, Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构:



Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构:

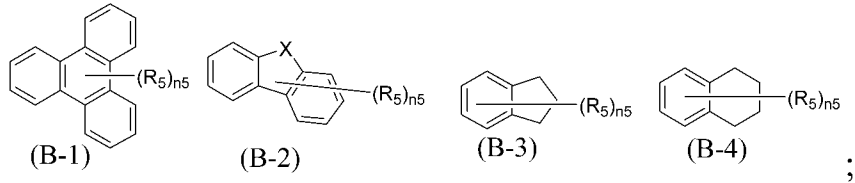


20

当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结构;

Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

5 Ar_2 选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



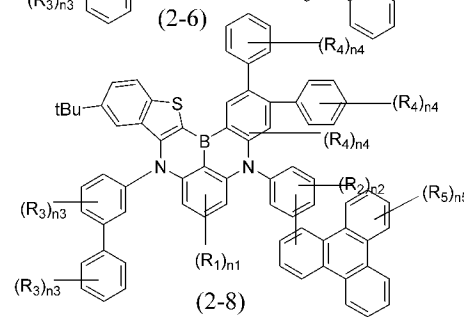
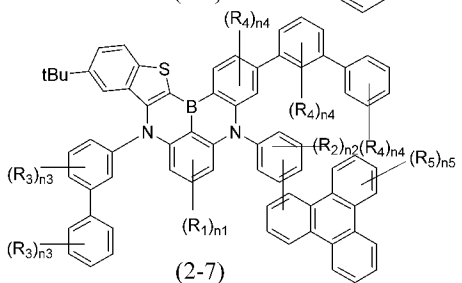
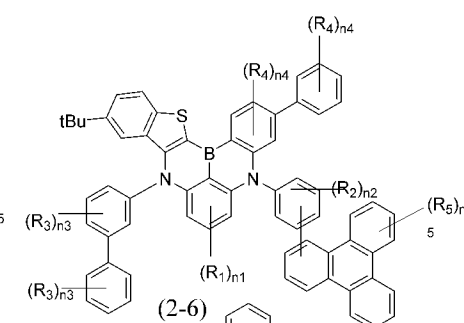
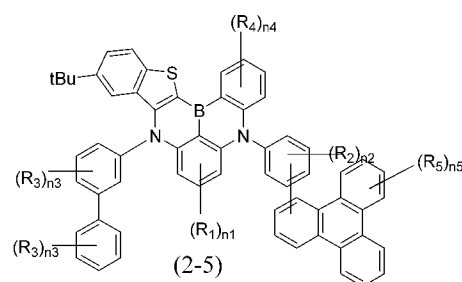
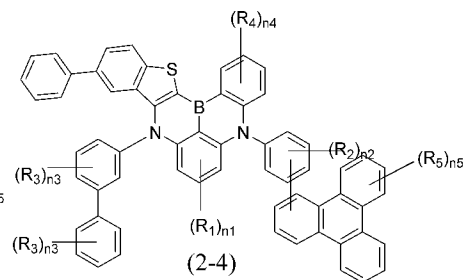
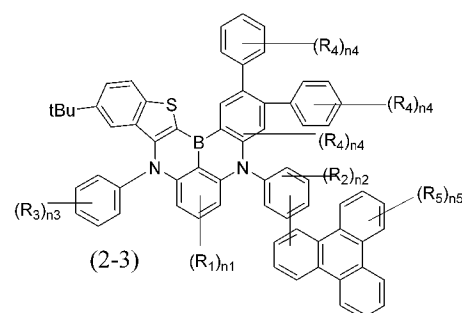
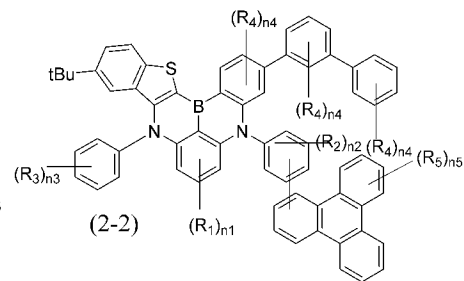
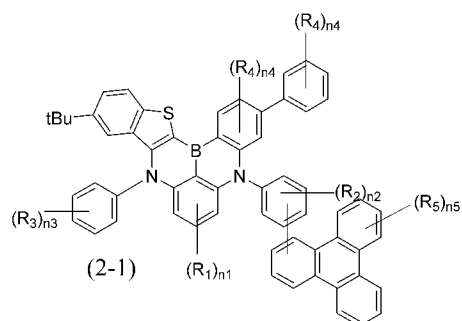
X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

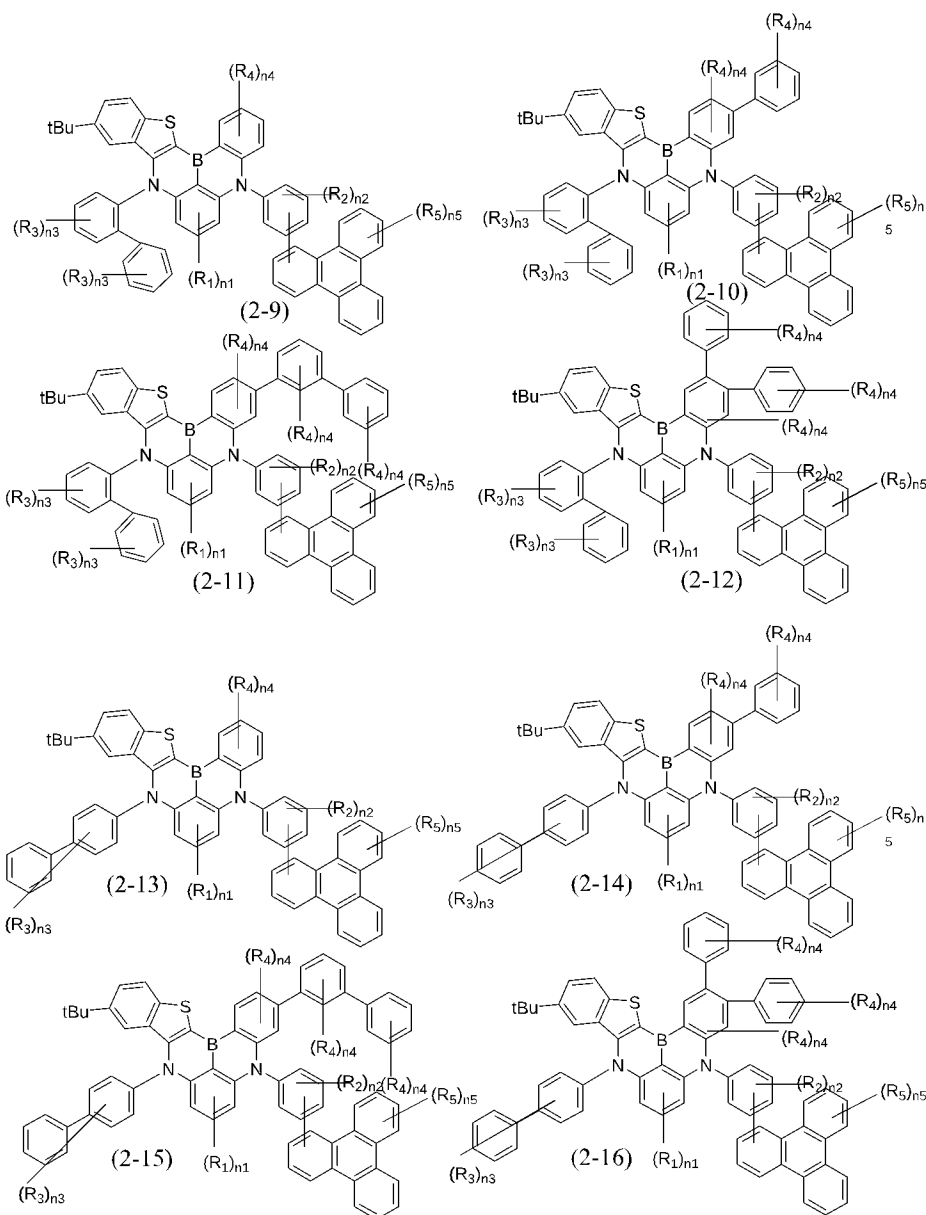
n_0 、 n_1 、 n_2 、 n_5 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

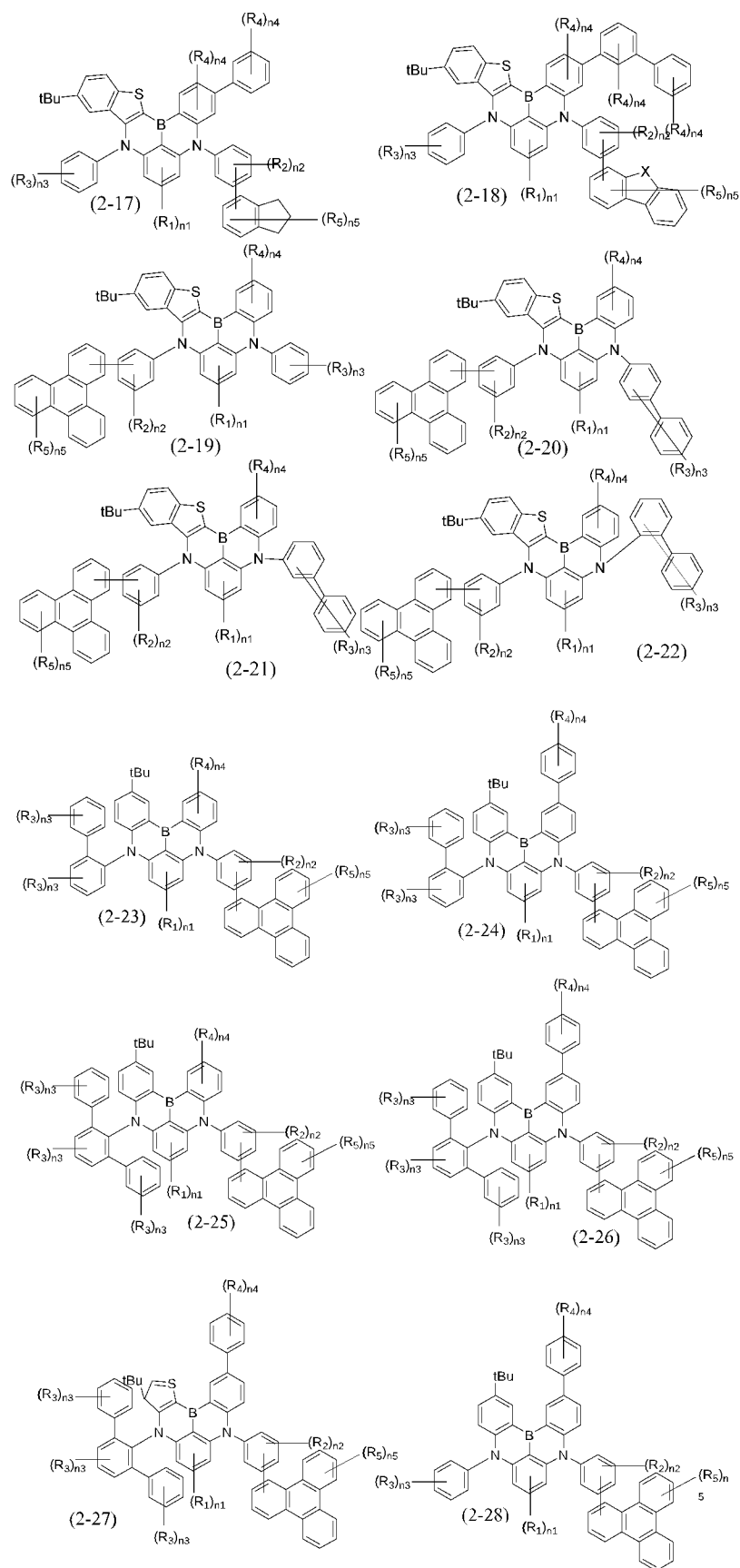
10 任一 R_0 、 R_1 、 R_2 或 R_5 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;

当 n_0 大于或等于2时,相邻的两个 R_0 相互成环或不成环;当 n_1 大于或等于2时,相邻的两个 R_1 相互成环或不成环;当 n_2 大于或等于2时,相邻的两个 R_2 相互成环或不成环;当 n_5 大于或等于2时,相邻的两个 R_5 相互成环或不成环。

25 优选的,所述有机化合物具有如通式(2-1)至通式(2-28)中任一者所示的结构:







其中，任一 R_3 、 R_4 分别独立地选自：-H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直

链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫
 代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的
 5 硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的
 烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的
 烯烷基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰
 酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的
 10 环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香
 基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子
 数为 5 至 30 的杂芳氧基；

n_3 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

当 n_3 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_3 相互成环或不成环；

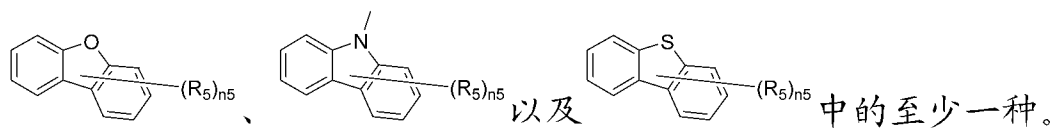
n_4 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

15 当 n_4 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_4 相互成环或不成环。

优选的，任一 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 或 R_5 独立地选自 -H、-D、具有 1 至 10 个碳原
 子的直链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的环状烷
 基。

20 优选的，任一 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 或 R_5 独立地选自：-H、-D、具有 1 至 4 个碳原
 子的直链烷基、具有 3 至 5 个碳原子的支链烷基。

优选的，当 Ar_2 中存在所述式(B-2)所表示的结构时，所述式(B-2)所表示
 的结构选为：



25 优选的，所述有机功能层至少包括发光层，所述发光层包括主体材料以及
 客体材料，所述客体材料为所述有机化合物中的一种或多种，所述主体材料包
 括稠合芳族衍生物或杂芳族化合物。

优选的，所述主体材料包括蒽衍生物、芘衍生物、萘衍生物、并五苯衍生物、菲化合物、蒹蒽化合物、卟啉衍生物、二苯并呋喃衍生物、梯子型呋喃化合物、嘧啶衍生物中的一种或一种以上。

有益效果

- 5 本申请通过在硼氮化合物中引入使化合物整体共轭性更大的基团，改善了材料性能，提高了有机发光器件的发光效率并延长了有机发光器件的使用寿命。

附图说明

- 图1是本申请实施例提供的有机发光器件的第一种结构示意图；
图2是本申请实施例提供的有机发光器件的第二种结构示意图；
10 图3是本申请实施例提供的有机化合物M16的核磁共振氢谱图；
图4是本申请实施例提供的有机化合物M25的核磁共振氢谱图；
图5是本申请实施例提供的有机化合物M277的核磁共振氢谱图；
图6是本申请实施例提供的有机化合物M290的核磁共振氢谱图。

本发明的实施方式

- 15 本申请提供一种有机化合物、混合物、组合物、有机发光器件及显示面板，为使本申请的目的、技术方案及效果更加清楚、明确，以下参照附图并举实施例对本申请进一步详细说明。应当理解，此处所描述的具体实施例仅用以解释本申请，并不用于限定本申请。

- 20 本申请实施例提供一种有机化合物、混合物、组合物、有机发光器件及显示面板。以下分别进行详细说明。需说明的是，以下实施例的描述顺序不作为对实施例优选顺序的限定。

本申请中，芳香基团，芳香族，芳香环系具有相同的含义，可以互换。

本申请中，杂芳香基团，杂芳香族，杂芳香环系具有相同的含义，可以互换。

- 25 本申请中，“取代”表示被取代基中的氢原子被取代基所取代。

本申请中，同一取代基多次出现时，可独立选自不同基团。如通式含有多个R，则R可独立选自不同基团。

本申请中，“取代或未取代”表示所定义的基团可以被取代，也可以不被取

代。当所定义的基团为被取代时，应理解为所定义的基团可以被一个或多个取代基R取代，所述R选自但不限于：氘原子、氰基、异氰基、硝基或卤素，含有1-20个碳原子的烷基、含有3-20个环原子的杂环基、含有6-20个环原子的芳香基团、含有5-20个环原子的杂芳香基团、-NR'R''、硅烷基、羰基、烷氧基、羧基、芳氧基羰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、三氟甲基，且上述基团也可以进一步被本领域可接受取代基取代；可以理解，-NR'R''中R'和R''分别独立选自但不限于：H、氘原子、氰基、异氰基、硝基或卤素、含有1-10个碳原子的烷基、含有3-20个环原子的杂环基、含有6-20个环原子的芳香基团、含有5-20个环原子的杂芳香基团。优选地，R选自但不限于：氘原子、氰基、异氰基、硝基或卤素、含有1-10个碳原子烷基、含有3-10个环原子的杂环基、含有6-20个环原子的芳香基团、含有5-20个环原子的杂芳香基团、硅烷基、羰基、烷氧基羰基、芳氧基羰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、三氟甲基，且上述基团也可以进一步被本领域可接受的取代基取代。

本申请中，“环原子数”表示原子键合成环状而得到的结构化合物（例如，单环化合物、稠环化合物、交联化合物、碳环化合物、杂环化合物）的构成该环自身的原子之中的原子数。该环被取代基所取代时，取代基所包含的原子不包括在成环原子内。关于以下所述的“环原子数”，在没有特别说明的条件下也是同样的。例如，苯环的环原子数为6，萘环的环原子数为10，噻吩基的环原子数为5。

本申请中，“芳基或芳香基团”是指在芳香环化合物的基础上除去一个氢原子衍生的芳族烃基，可以为单环芳基、或稠环芳基、或多环芳基，对于多环的环中，至少一个是芳族环系。例如，“取代或未取代的具有6至40个环原子的芳基”是指包含6至40个环原子的芳基，优选取代或未取代的具有6至30个环原子的芳基，更优选取代或未取代的具有6至18个环原子的芳基，特别优选取代或未取代的具有6至14个环原子的芳基，且芳基上任选进一步被取代；合适的实例包括但不限于：苯基、联苯基、三联苯基、萘基、蒽基、菲基、荧蒽基、三亚苯基、芘基、花基、并四苯基、芴基、二萘嵌苯基、茕基及其衍生物。可以理解，多个芳基也可以被短的非芳族单元间断（例如<10%的非H原子，比如C、

N或O原子), 具体如茈、茈, 或者9,9-二芳基茈、三芳胺、二芳基醚体系也应该包含在芳基的定义中。

本申请中, “杂芳基或杂芳香基团”是指在芳基的基础上至少一个碳原子被非碳原子所替代, 非碳原子可以为N原子、O原子、S原子等。例如, “取代或未取代的具有5至40个环原子的杂芳基”是指具有5至40个环原子的杂芳基, 优选取代或未取代的具有6至30个环原子的杂芳基, 更优选取代或未取代的具有6至18个环原子的杂芳基, 特别优选取代或未取代的具有6至14个环原子的杂芳基, 且杂芳基任选进一步被取代, 合适的实例包括但不限于: 噻吩基、呋喃基、吡咯基、咪唑基、二唑基、三唑基、咪唑基、吡啶基、联吡啶基、嘧啶基、三嗪基、吡啶基、哒嗪基、吡嗪基、喹啉基、异喹啉基、喹唑啉基、喹喔啉基、酞嗪基、吡啶并嘧啶基、吡啶并吡嗪基、苯并噻吩基、苯并呋喃基、吲哚基、吡咯并咪唑基、吡咯并吡咯基、噻吩并吡咯基、噻吩并噻吩基、呋喃并吡咯基、呋喃并呋喃基、噻吩并呋喃基、苯并异噻唑基、苯并异噻唑基、苯并咪唑基、邻二氮萘基、菲啶基、伯啶基、喹唑啉酮基、二苯并噻吩基、二苯并呋喃基、吡唑基及其衍生物。

本申请中, “烷基”可以表示直链、支链和/或环状烷基。烷基的碳数可以为1至50、1至30、1至20、1至10或1至6。包含该术语的短语, 例如, “C₁₋₉烷基”是指包含1~9个碳原子的烷基, 每次出现时, 可以互相独立地为C₁烷基、C₂烷基、C₃烷基、C₄烷基、C₅烷基、C₆烷基、C₇烷基、C₈烷基或C₉烷基。烷基的非限制性实例包括甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、仲丁基、叔丁基、异丁基、2-乙基丁基、3,3-二甲基丁基、正戊基、异戊基、新戊基、叔戊基、环戊基、1-甲基戊基、3-甲基戊基、2-乙基戊基、4-甲基-2-戊基、正己基、1-甲基己基、2-乙基己基、2-丁基己基、环己基、4-甲基环己基、4-叔丁基环己基、正庚基、1-甲基庚基、2,2-二甲基庚基、2-乙基庚基、2-丁基庚基、正辛基、叔辛基、2-乙基辛基、2-丁基辛基、2-己基辛基、3,7-二甲基辛基、环辛基、正壬基、正癸基、金刚烷基、2-乙基癸基、2-丁基癸基、2-己基癸基、2-辛基癸基、正十一烷基、正十二烷基、2-乙基十二烷基、2-丁基十二烷基、2-己基十二烷基、2-辛基十二烷基、正十三烷基、正十四烷基、正十五烷基、正十六烷基、2-乙基十六烷基、2-丁基十六烷基、2-己基十六烷基、2-辛基十六烷基、正十

七烷基、正十八烷基、正十九烷基、正二十烷基、2-乙基二十烷基、2-丁基二十烷基、2-己基二十烷基、2-辛基二十烷基、正二十一烷基、正二十二烷基、正二十三烷基、正二十四烷基、正二十五烷基、正二十六烷基、正二十七烷基、正二十八烷基、正二十九烷基、正三十烷基等。

5 本申请中，取代基缩写对应为：n-正，sec-仲，i-异，t-叔，o-邻，m-间，p-对，Me甲基，Et乙基，Pr丙基，Bu丁基，Am正戊基，Hx己基，Cy环己基。

本申请中，“胺基”是指胺的衍生物，具有式-N(X)₂的结构特征，其中每个“X”独立地是H、取代的或未被取代的烷基、取代的或未被取代的环烷基、取代的或未被取代的杂环基等。胺基的非限制性类型包括-NH₂、-N(烷基)₂、
10 -NH(烷基)、-N(环烷基)₂、-NH(环烷基)、-N(杂环基)₂、-NH(杂环基)、-N(芳基)₂、-NH(芳基)、-N(烷基)(芳基)、-N(烷基)(杂环基)、-N(环烷基)(杂环基)、-N(芳基)(杂芳基)、-N(烷基)(杂芳基)等。

本申请中，如无特别定义，羟基指-OH，羧基指-COOH，羰基指-C(=O)-，氨基指-NH₂，甲酰基指-C(=O)H，卤甲酰基指-C(=O)Z（其中，Z表示卤素），
15 氨基甲酰基指-C(=O)NH₂，异氰酸酯基指-NCO，异硫氰酸酯基指-NCS。

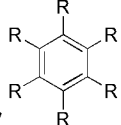
本申请中，术语“烷氧基”是指结构为“-O-烷基”的基团，即如上所定义的烷基经由氧原子连接至其它基团。包含该术语的短语，合适的实例包括但不限于：甲氧基(-O-CH₃或-OMe)、乙氧基(-O-CH₂CH₃或-OEt)和叔丁氧基(-O-C(CH₃)₃或-OtBu)。

20 本申请中，与单键相连的“*”表示连接或稠合位点。

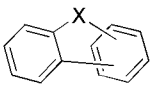
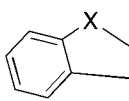
本申请中，基团中未指明连接位点时，表示基团中任选可连接位点作为连接位点。

本申请中，基团中未指明稠合位点时，表示基团中任选可稠合位点作为稠合位点，优选基团中处于邻位的两个或多个位点为稠合位点。

25 本申请中，当同一基团上含有多个相同符号的取代基时，各取代基可以彼此

此相同或不同，例如 ，苯环上6个R可以彼此相同或不同。

本申请中，取代基相连的单键贯穿相应的环，表示该取代基可与环的任选

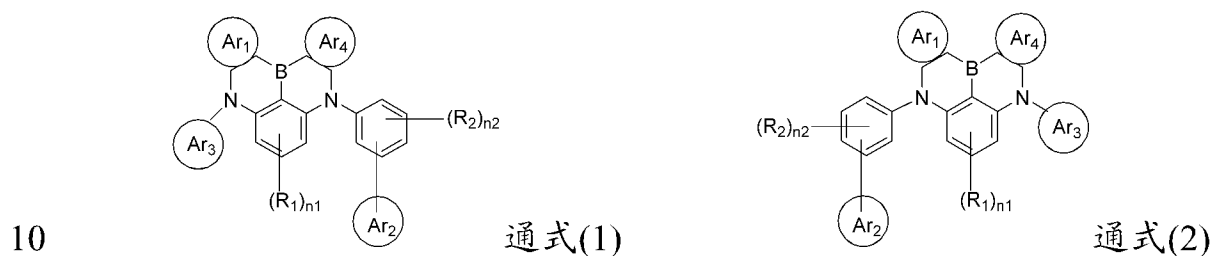
位置连接, 例如  中R与苯环的任一可取代位点相连; 如  表示  可与  中苯环上任选位置形成并环。

按照本申请所述的环状烷基或环烷基具备相同的含义, 可以互换。

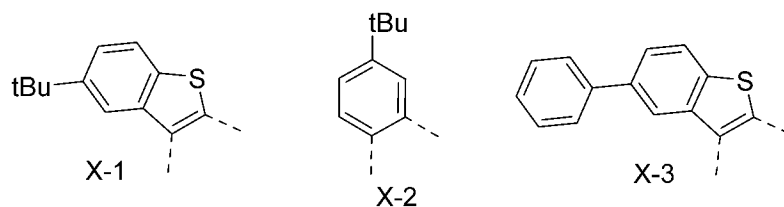
本申请中, “相邻基团”是指两个取代基之间没有可取代的位点。

- 5 本申请中, “相邻的两个 R_1 或 R_3 或 R_5 相互成环”表示通过两个相邻的1或3或 R_5 相互连接而形成的一个环系, 所述环系可选自脂族烃环, 脂族杂环、芳族烃环或芳族杂环。优选地, 可形成 、 或 .

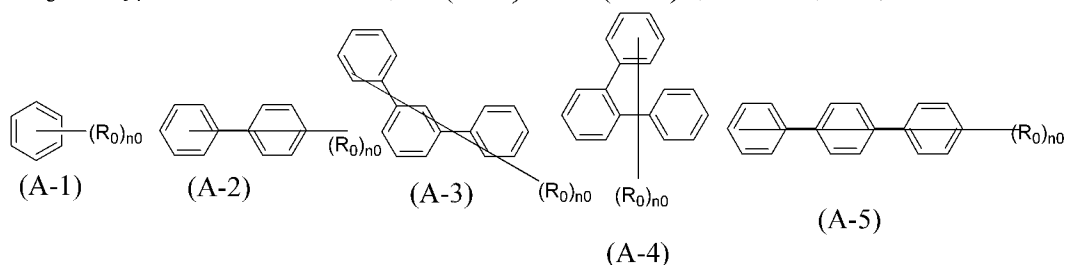
本申请实施例提供了一种有机化合物, 所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构:



其中, Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构:



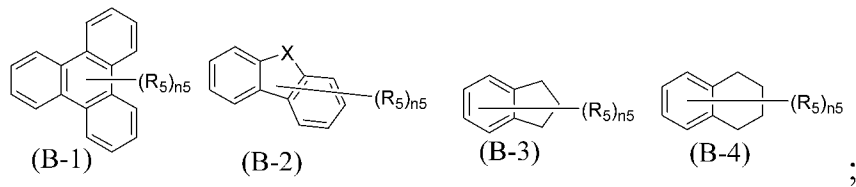
Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构:



- 15 当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结构;

Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar_2 选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



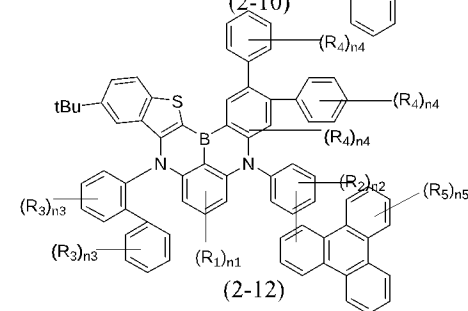
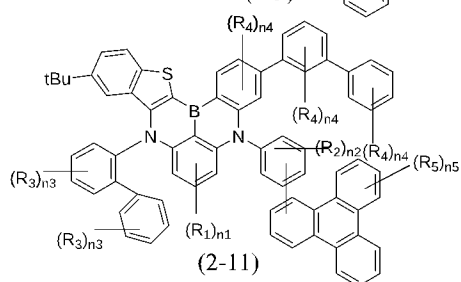
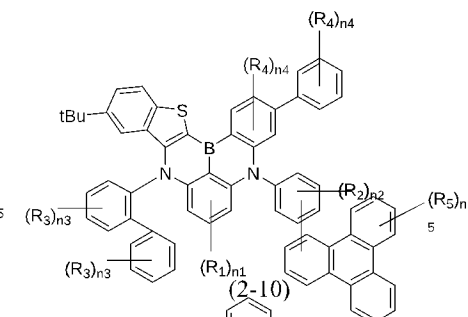
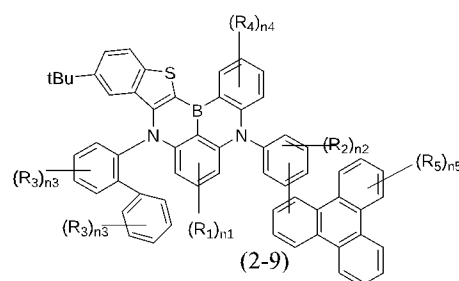
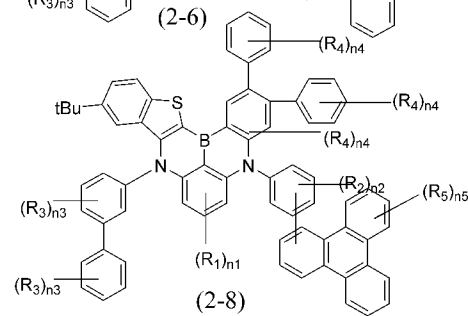
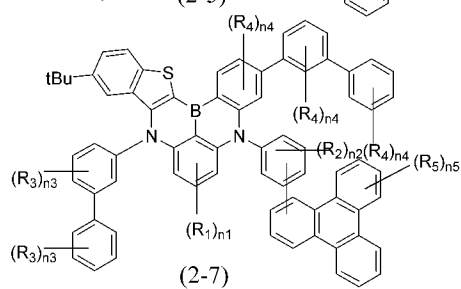
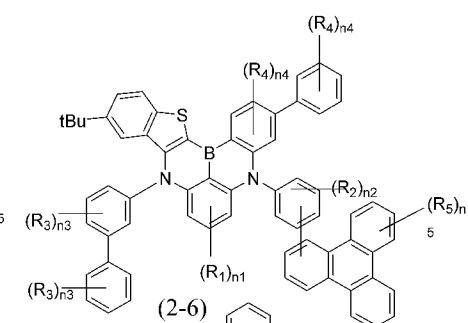
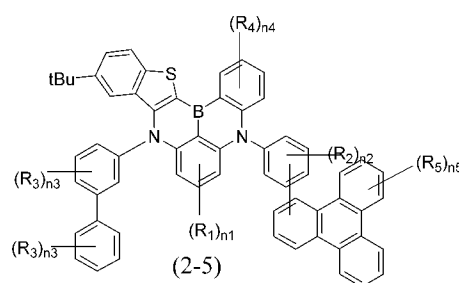
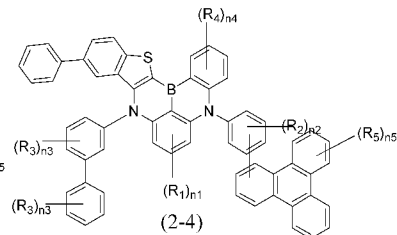
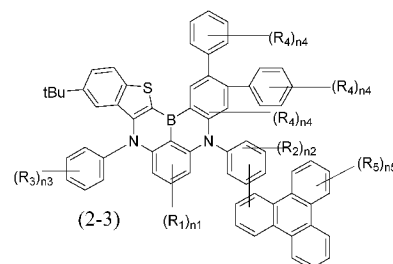
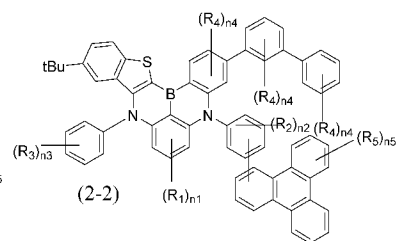
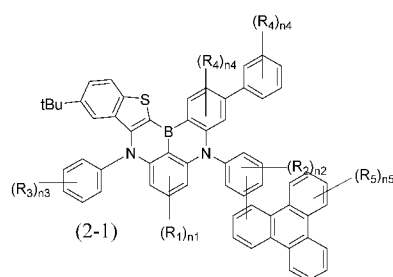
X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

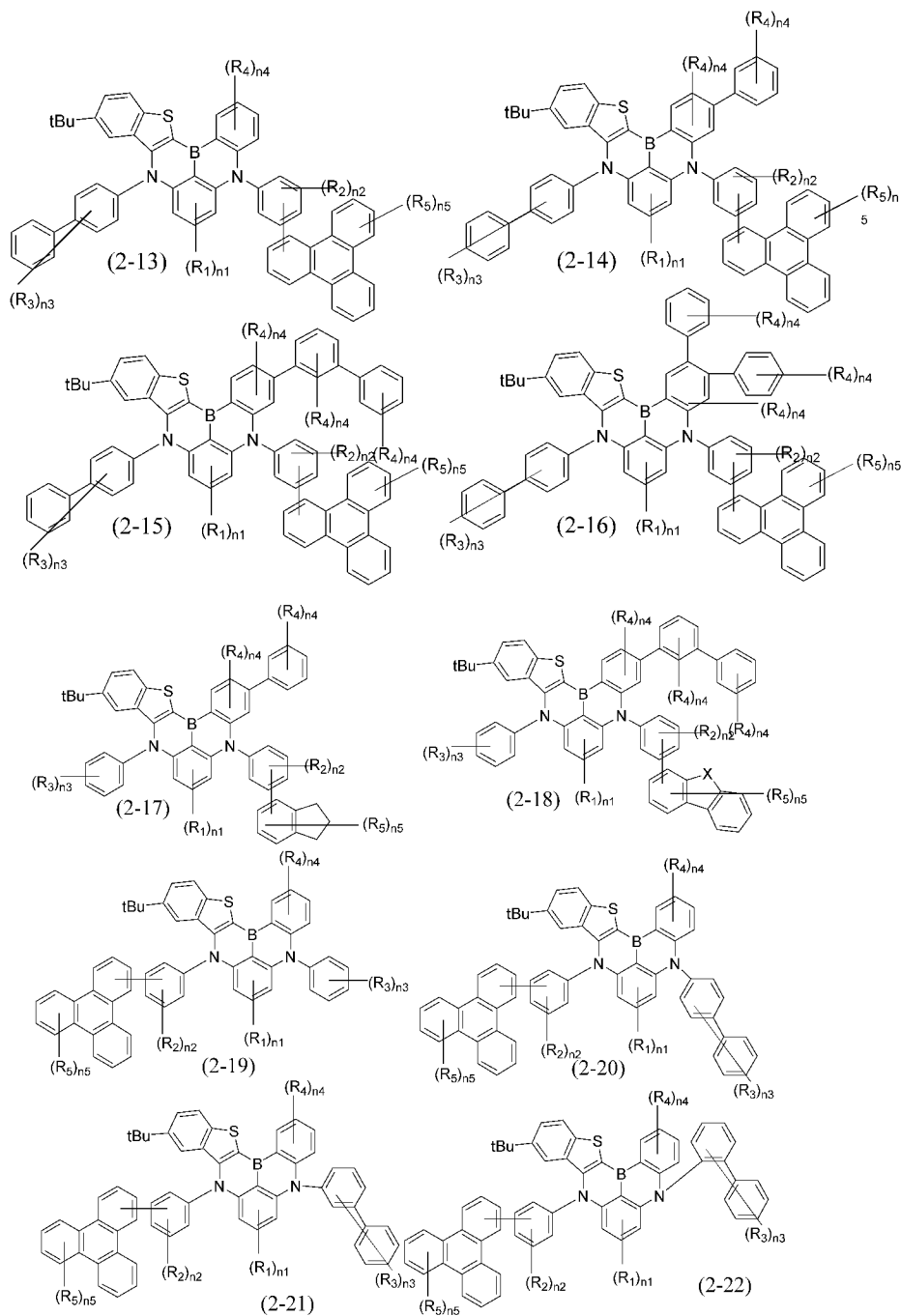
n₀、n₁、n₂、n₅ 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

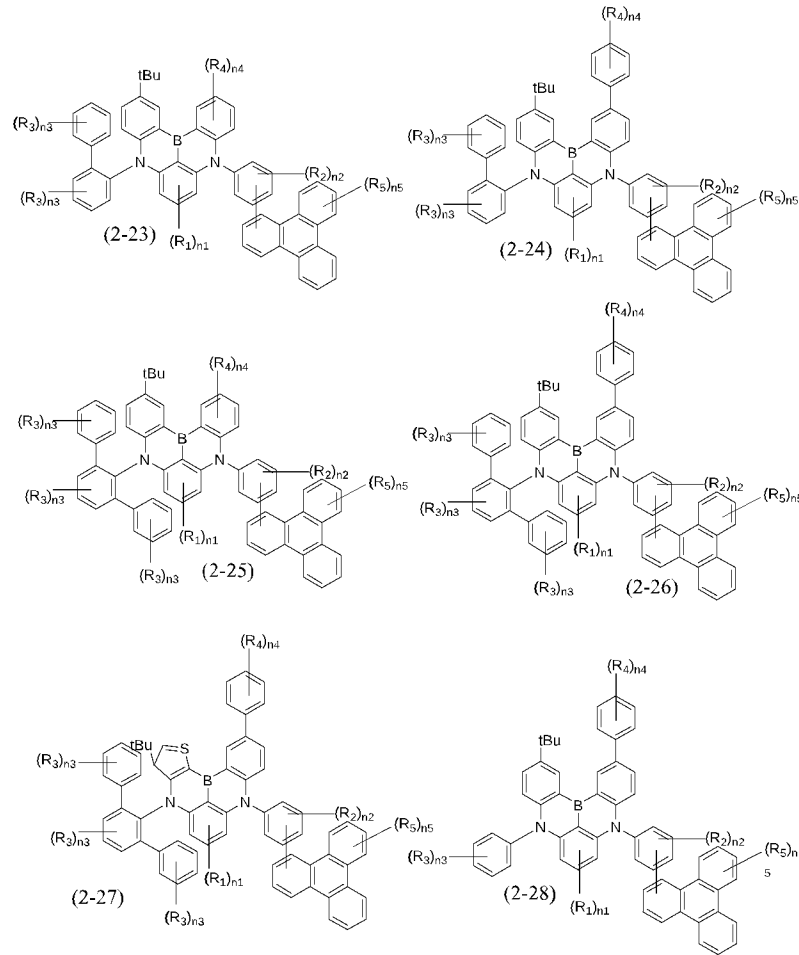
- 5 任一 R₀、R₁、R₂ 或 R₅ 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;
- 10
- 15

20 当 n₀ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₀ 相互成环或不成环; 当 n₁ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₁ 相互成环或不成环; 当 n₂ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₂ 相互成环或不成环; 当 n₅ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₅ 相互成环或不成环。

可选的, 所述有机化合物具有如通式(2-1)至通式(2-28)中任一者所示的结构:







其中，任一 R₃、R₄ 分别独立地选自：-H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基；

n₃ 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

当 n_3 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_3 相互成环或不成环;

n_4 大于或者等于 0 且小于或者等于 5;

当 n_4 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_4 相互成环或不成环。

5 可选的, 任一 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 或 R_5 独立地选自 -H、-D、具有 1 至 10 个碳原子的直链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的环状烷基。

可选的, 任一 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 或 R_5 独立地选自: -H、-D、具有 1 至 4 个碳原子的直链烷基、具有 3 至 5 个碳原子的支链烷基。

10 通过在所述有机化合物中引入烷基, 有利于提高所述有机化合物在用于喷墨打印等制程中的溶解性, 提升应用所述有机化合物的有机发光器件的产品质量。

在一些实施例中, 相邻的两个 R_1 相互成环; 进一步地, 相邻的两个 R_1 相

互成环形成 6 元芳环或脂肪环; 更进一步地, 相邻的两个 R_1 相互成环形成 , 其中, *表示连接位点。

15 在一些实施例中, 相邻的两个 R_2 相互成环; 进一步地, 相邻的两个 R_2 相

互成环形成 6 元芳环或脂肪环; 更进一步地, 相邻的两个 R_2 相互成环形成 , 其中, *表示连接位点。

在一些实施例中, 相邻的两个 R_3 相互成环; 进一步地, 相邻的两个 R_3 相

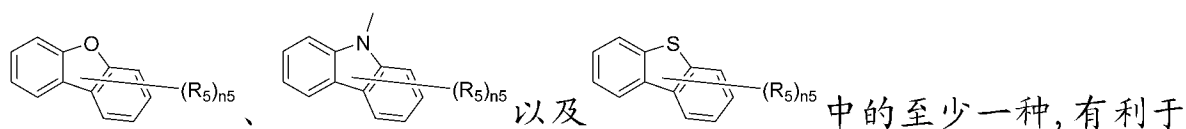
20 互成环形成 6 元芳环或脂肪环; 更进一步地, 相邻的两个 R_3 相互成环形成 , 其中, *表示连接位点。

在一些实施例中, 相邻的两个 R_4 相互成环; 进一步地, 相邻的两个 R_4 相

互成环形成 6 元芳环或脂肪环; 更进一步地, 相邻的两个 R_4 相互成环形成 , 其中, *表示连接位点。

在一些实施例中, 相邻的两个 R_5 相互成环; 进一步地, 相邻的两个 R_5 相互成环形成 6 元芳环或脂肪环; 更进一步地, 相邻的两个 R_5 相互成环形成 , 其中, * 表示连接位点。

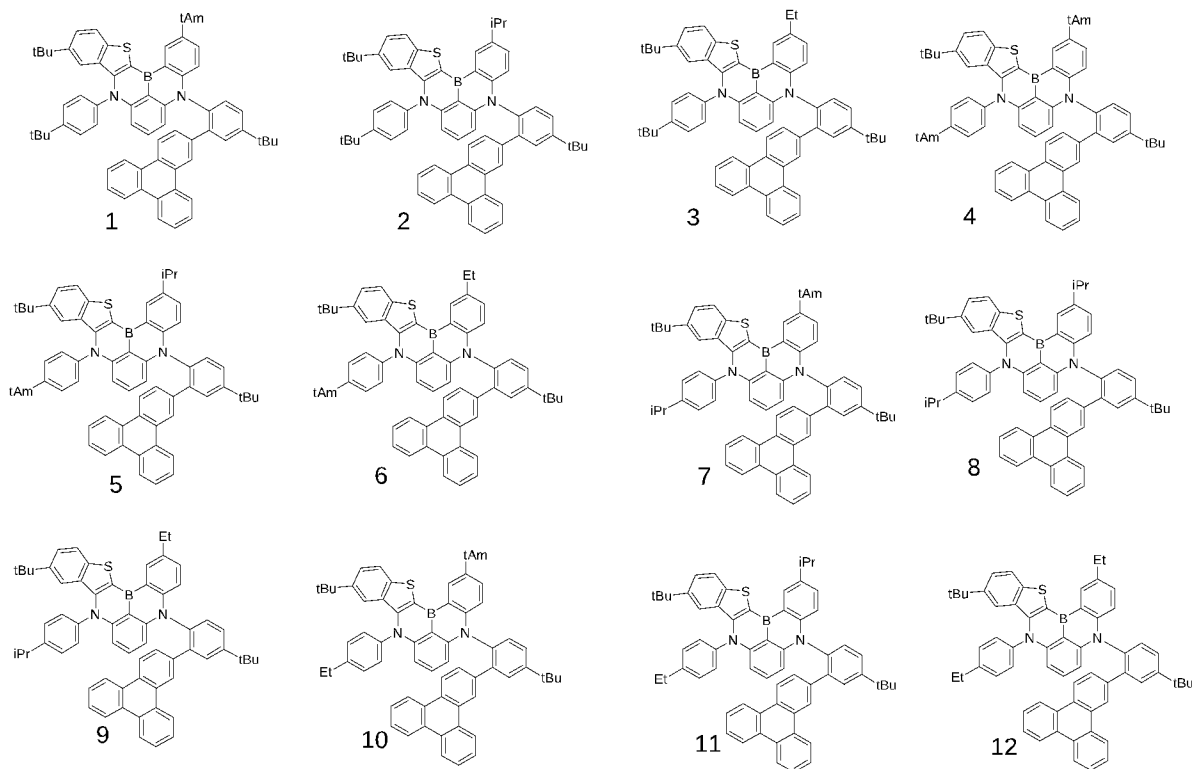
在一些实施例中, 当 Ar_2 中存在所述式(B-2)所表示的结构时, 所述式(B-2) 5 所表示的结构优选为:

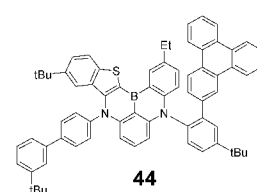
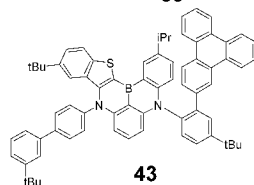
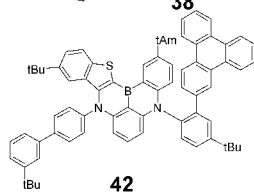
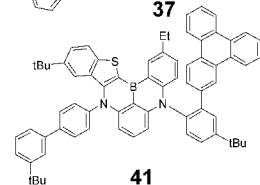
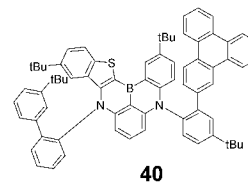
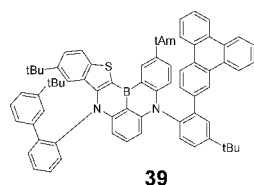
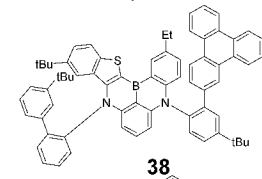
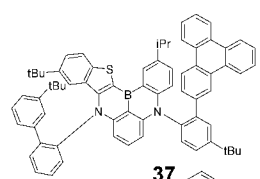
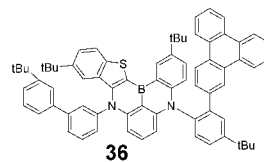
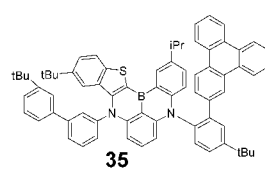
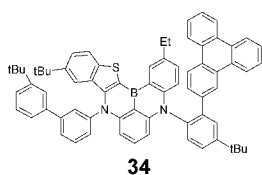
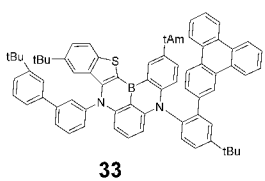
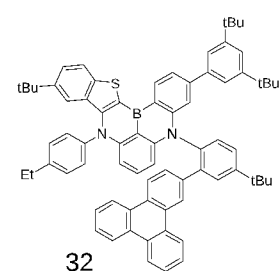
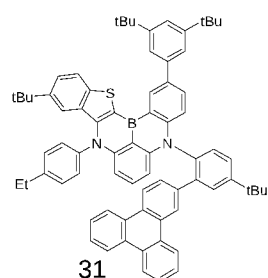
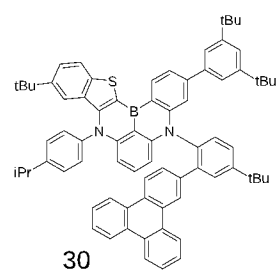
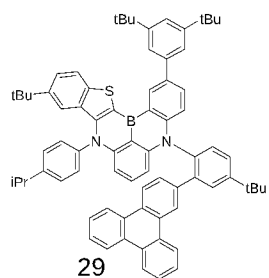
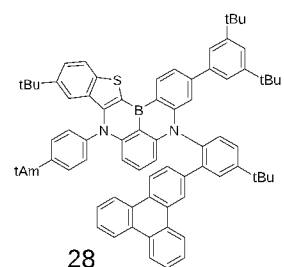
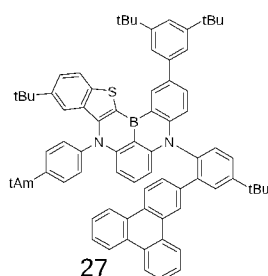
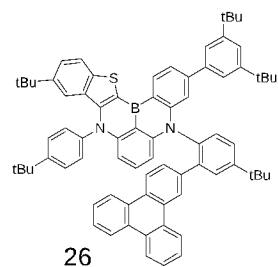
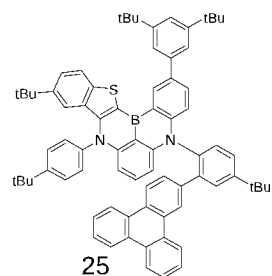
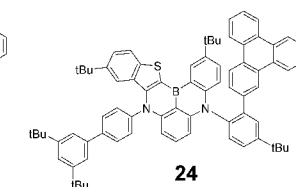
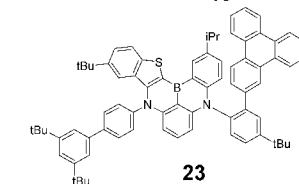
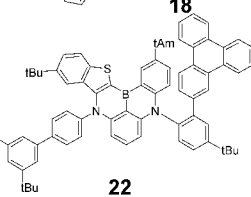
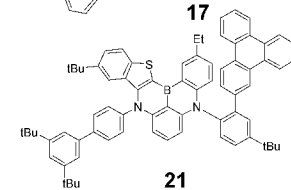
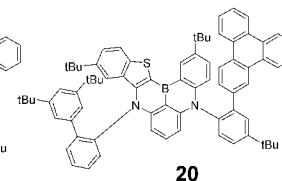
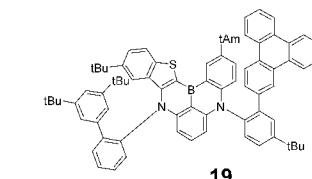
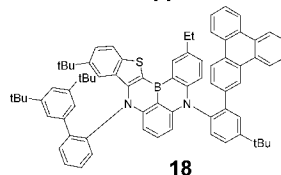
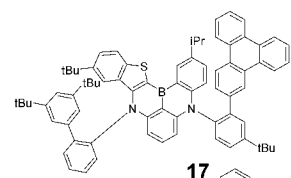
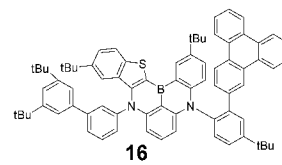
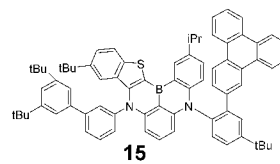
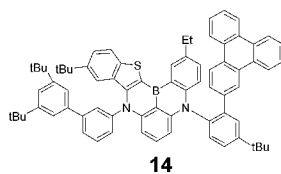
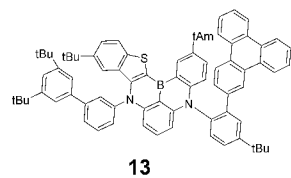


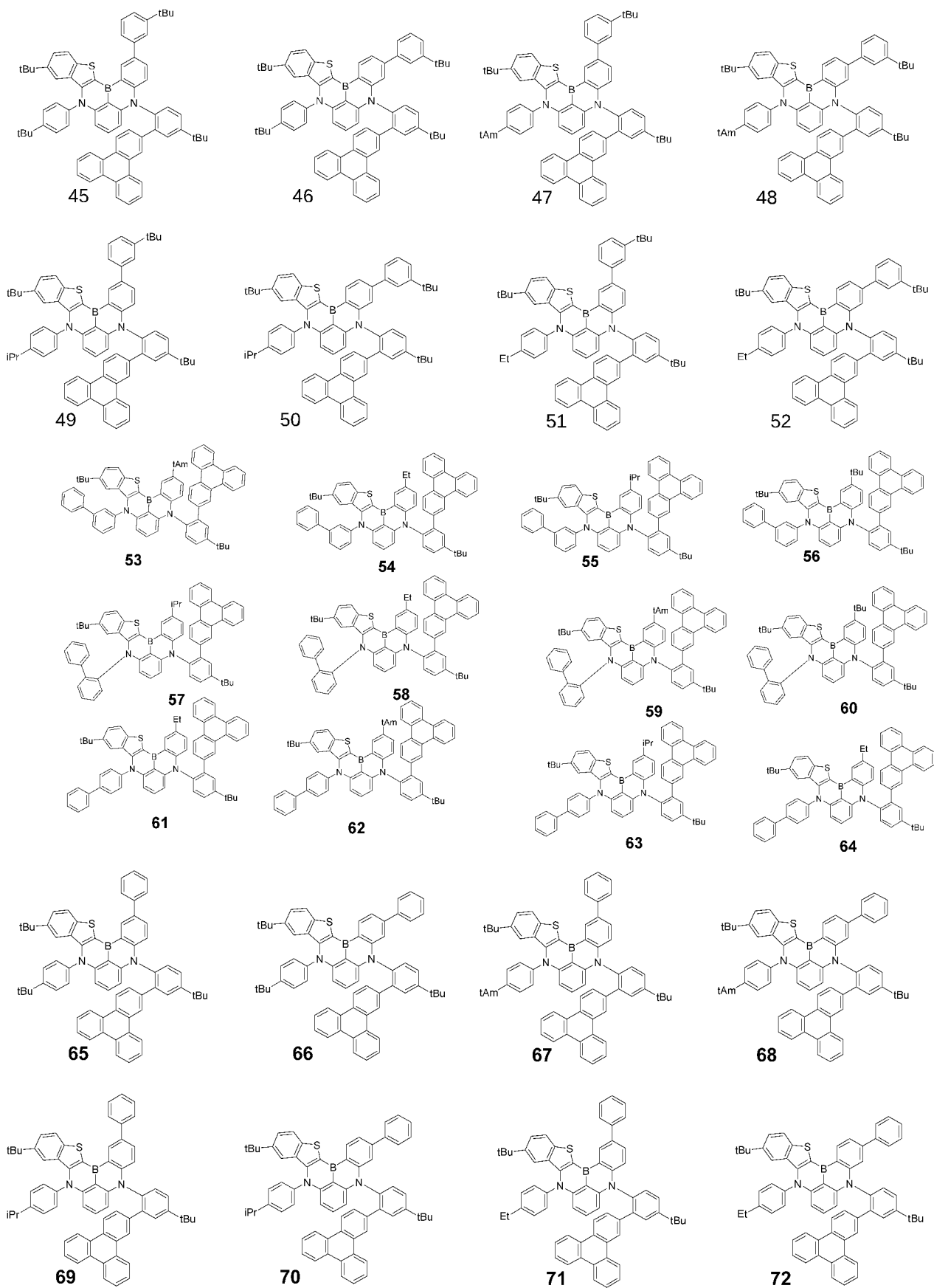
提高应用所述有机化合物的有机发光器件的发光效率和使用寿命。

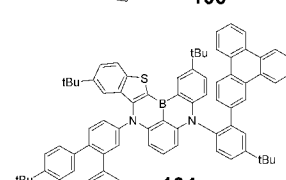
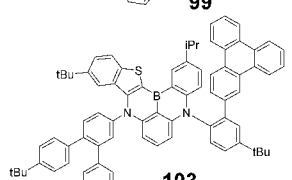
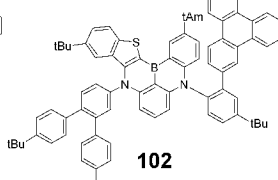
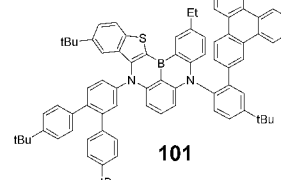
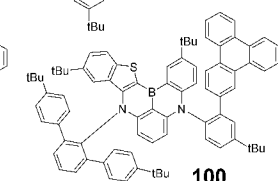
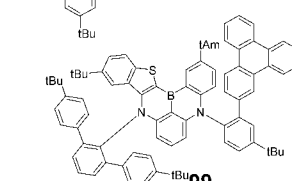
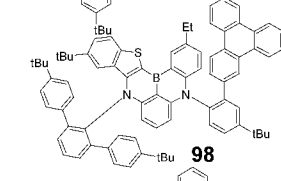
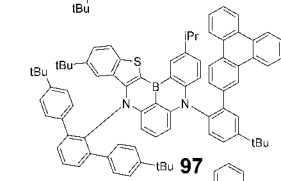
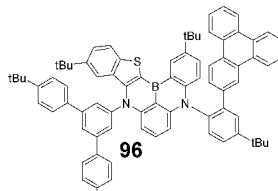
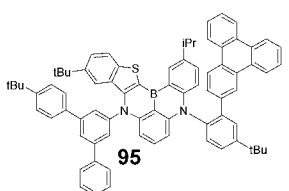
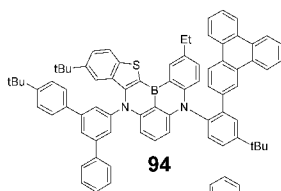
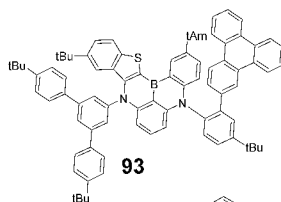
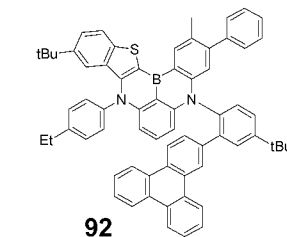
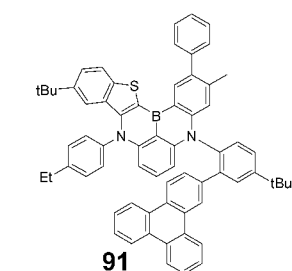
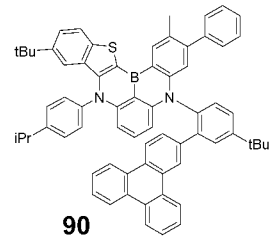
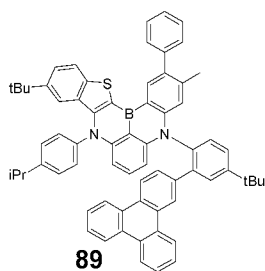
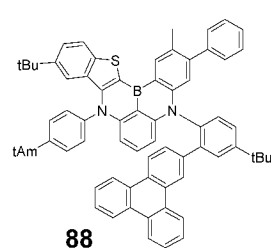
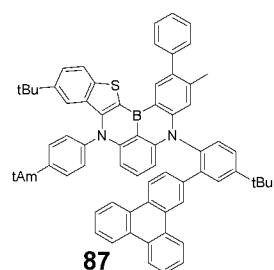
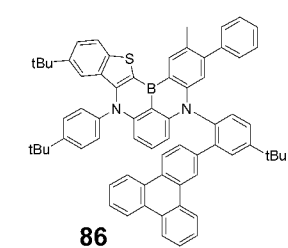
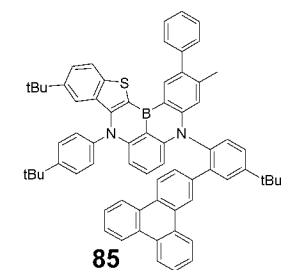
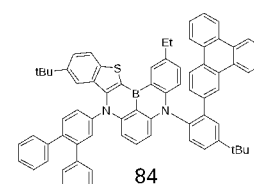
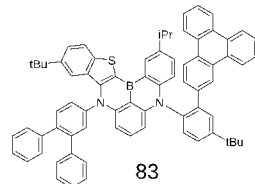
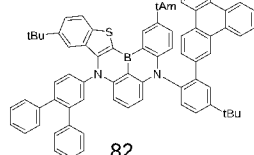
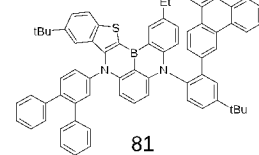
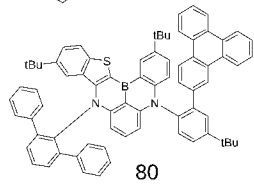
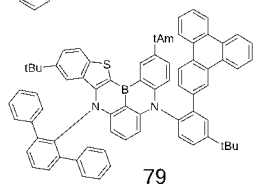
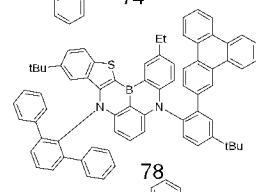
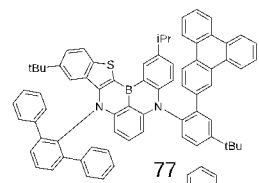
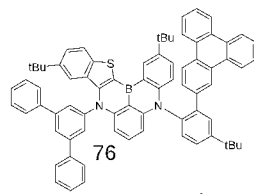
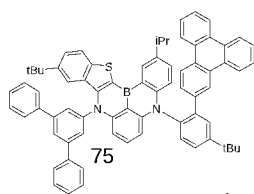
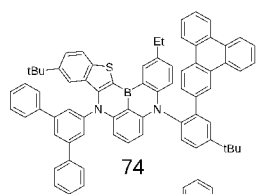
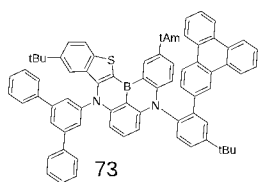
在一些实施例中, 所述有机化合物为蓝色发光材料。

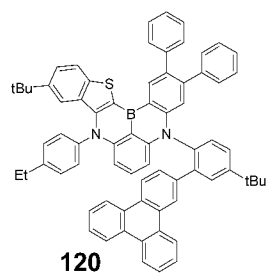
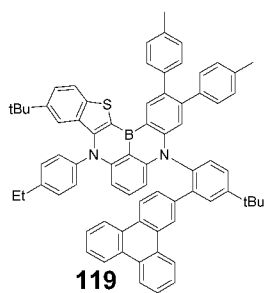
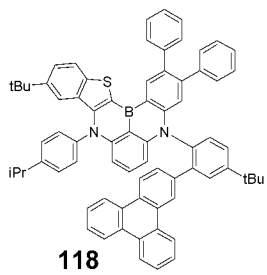
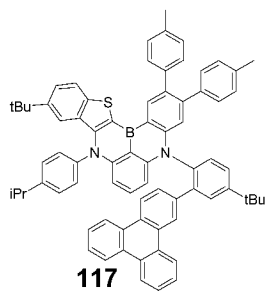
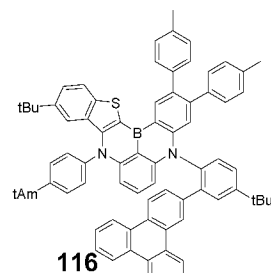
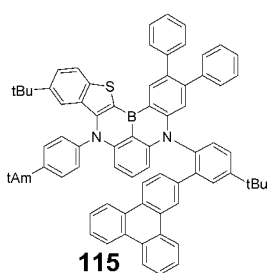
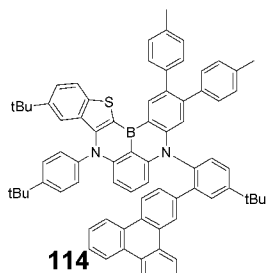
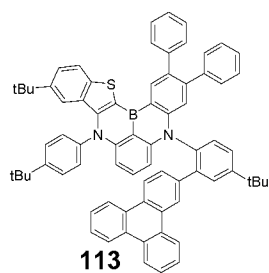
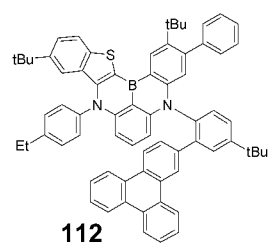
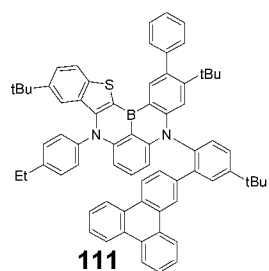
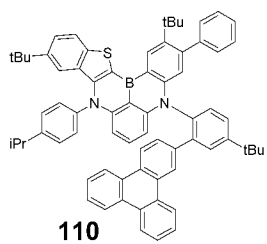
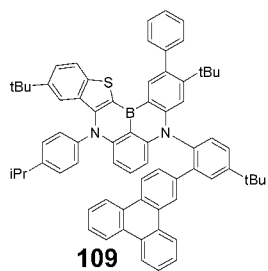
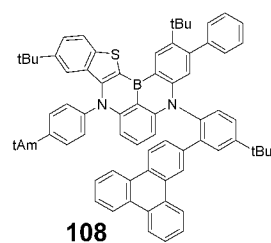
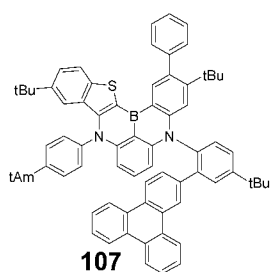
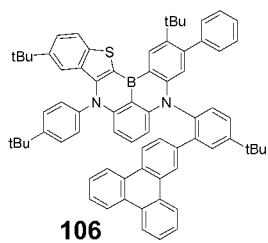
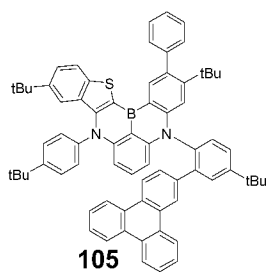
在一些实施例中, 所述有机化合物选自以下化合物:

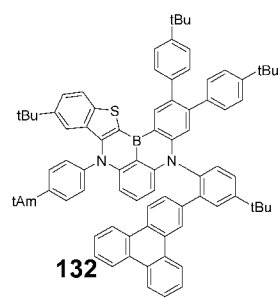
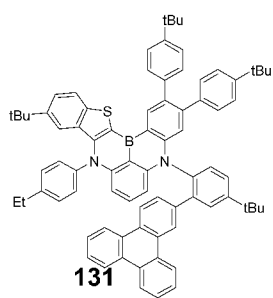
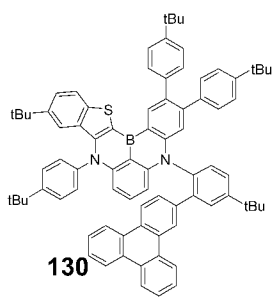
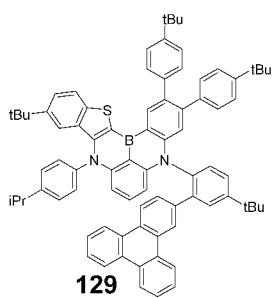
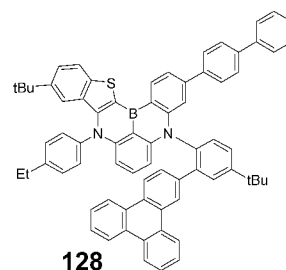
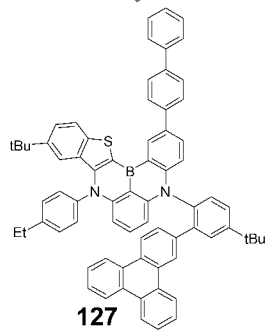
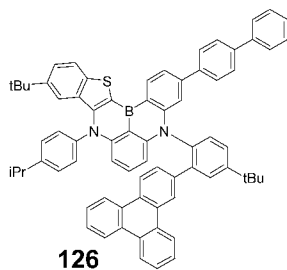
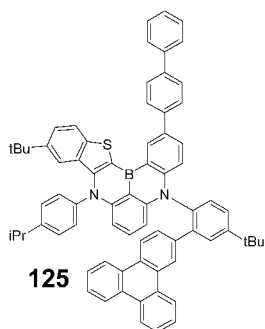
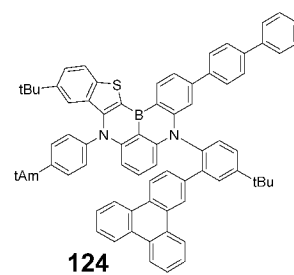
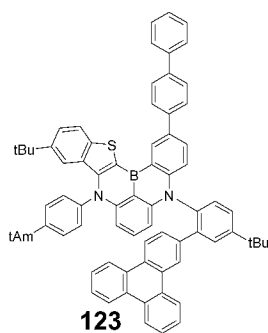
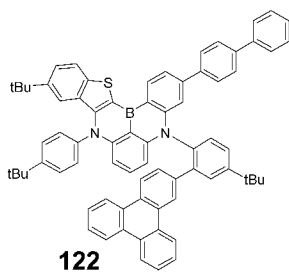
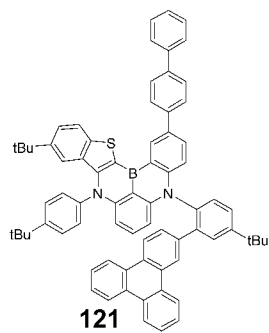


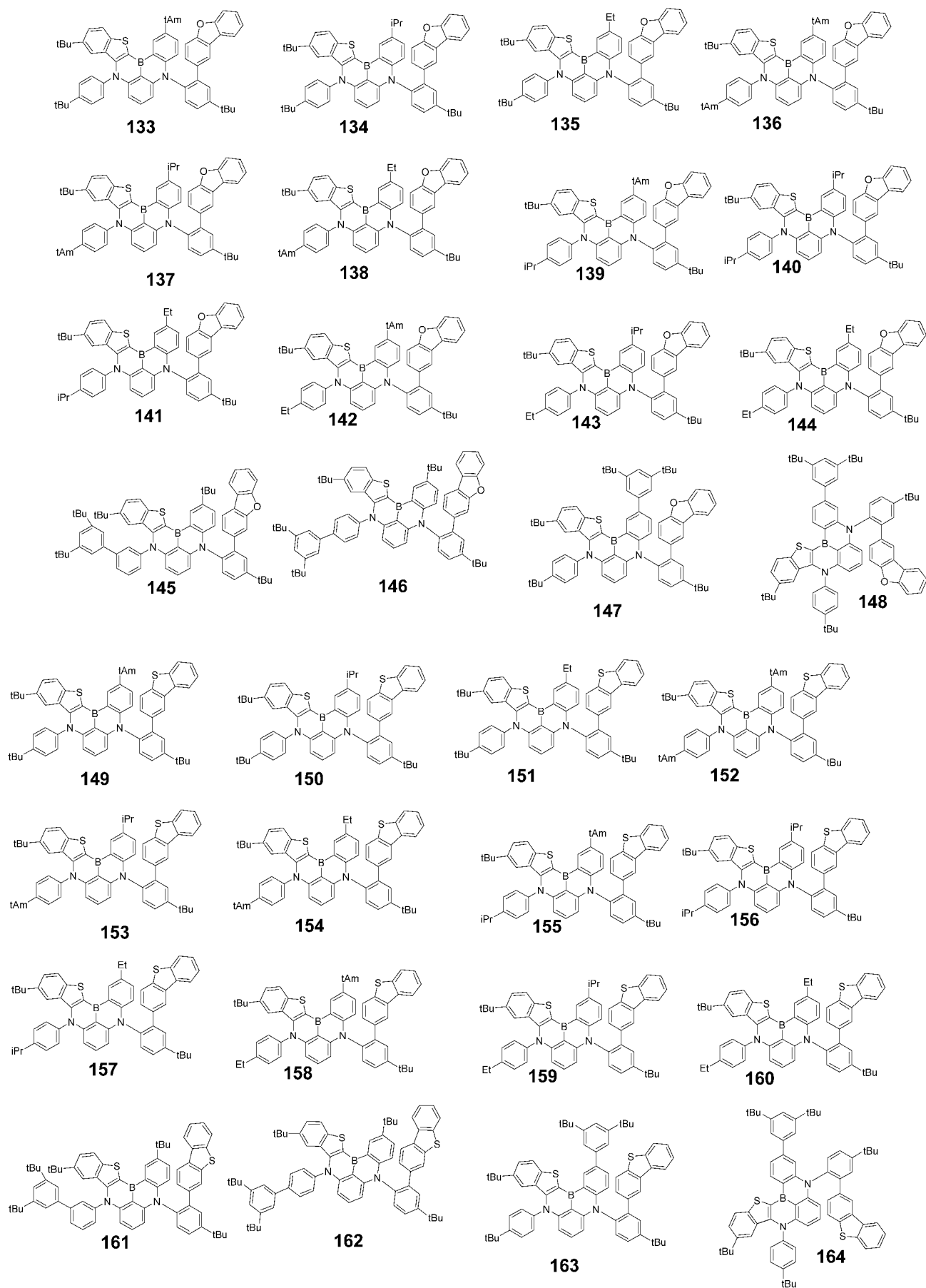


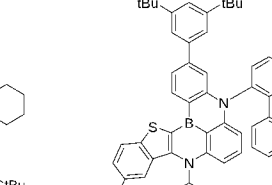
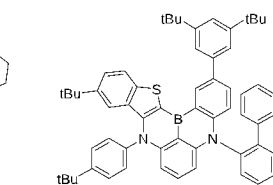
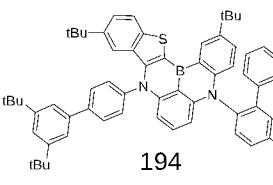
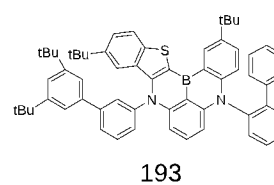
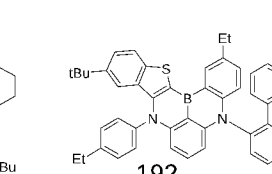
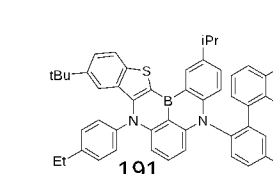
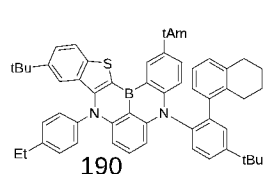
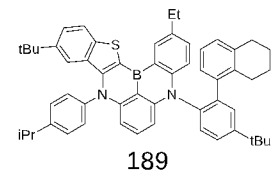
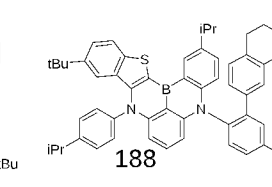
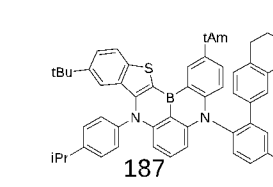
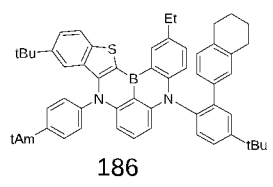
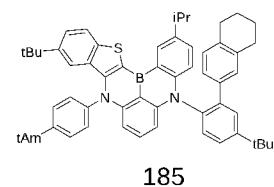
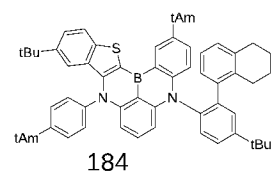
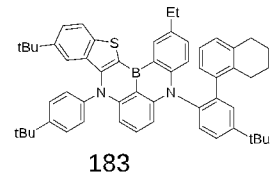
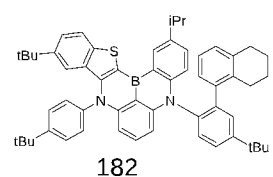
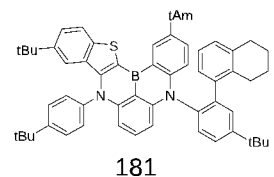
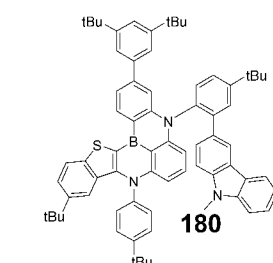
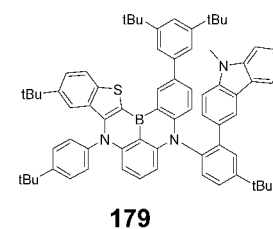
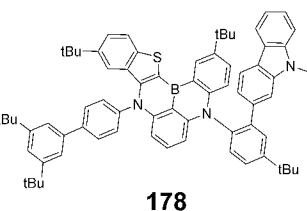
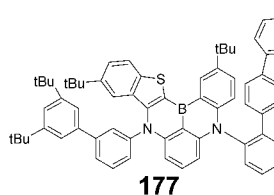
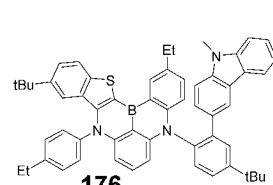
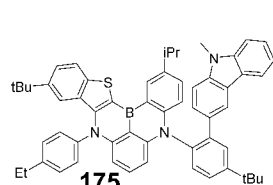
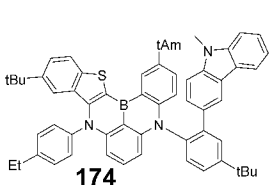
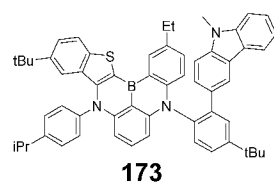
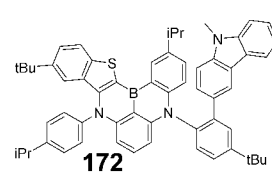
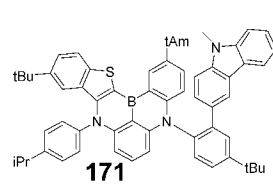
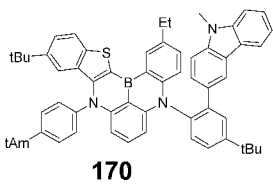
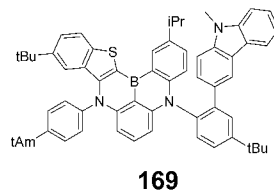
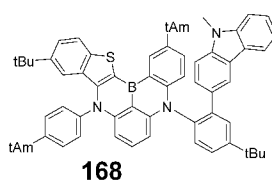
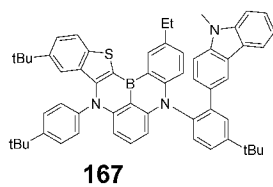
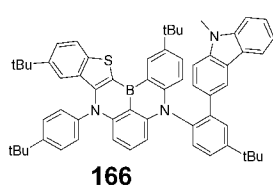
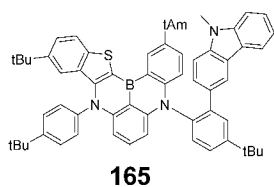


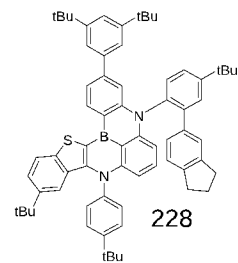
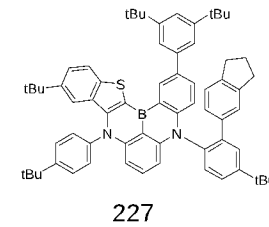
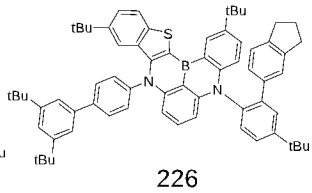
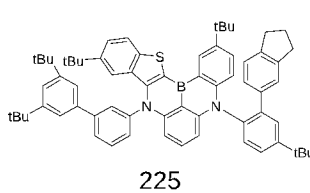
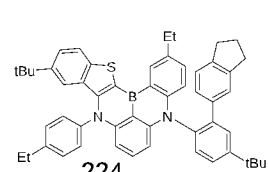
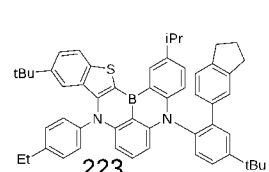
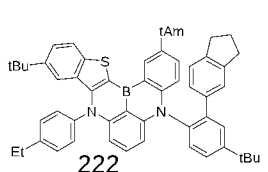
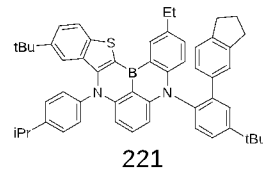
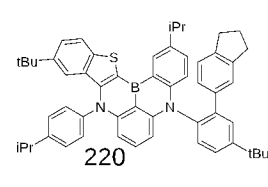
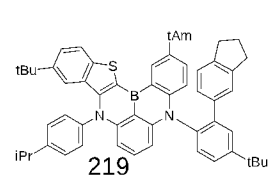
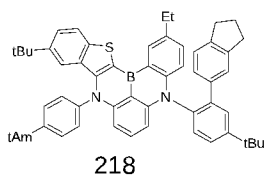
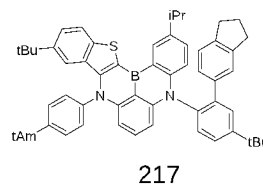
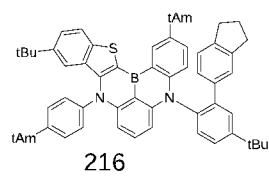
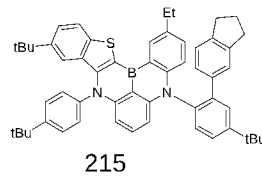
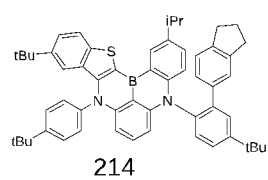
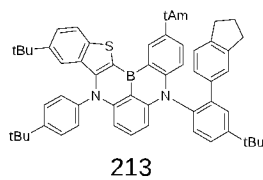
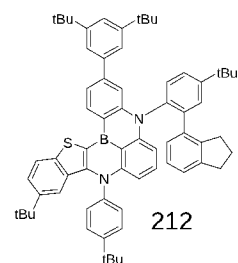
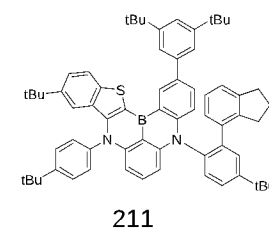
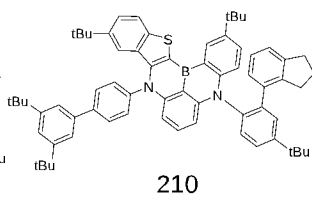
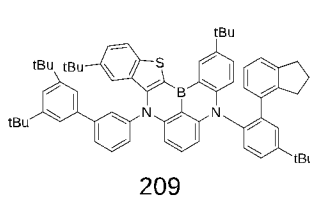
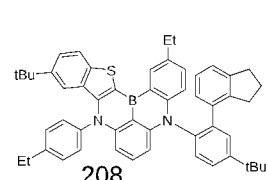
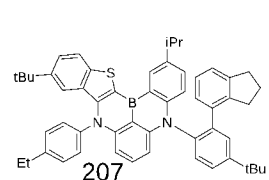
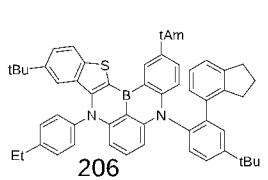
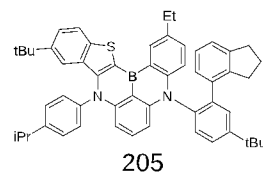
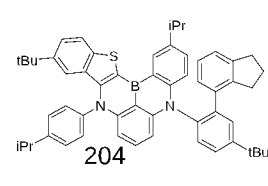
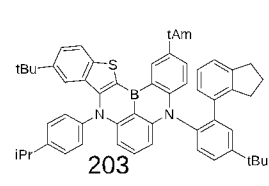
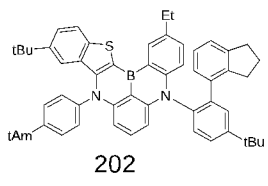
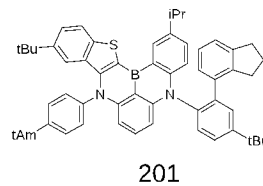
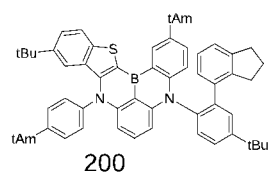
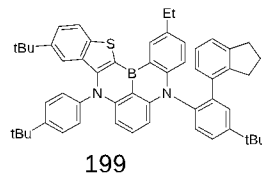
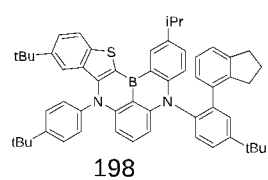
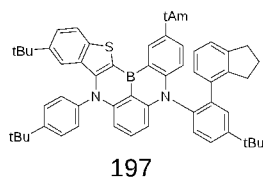


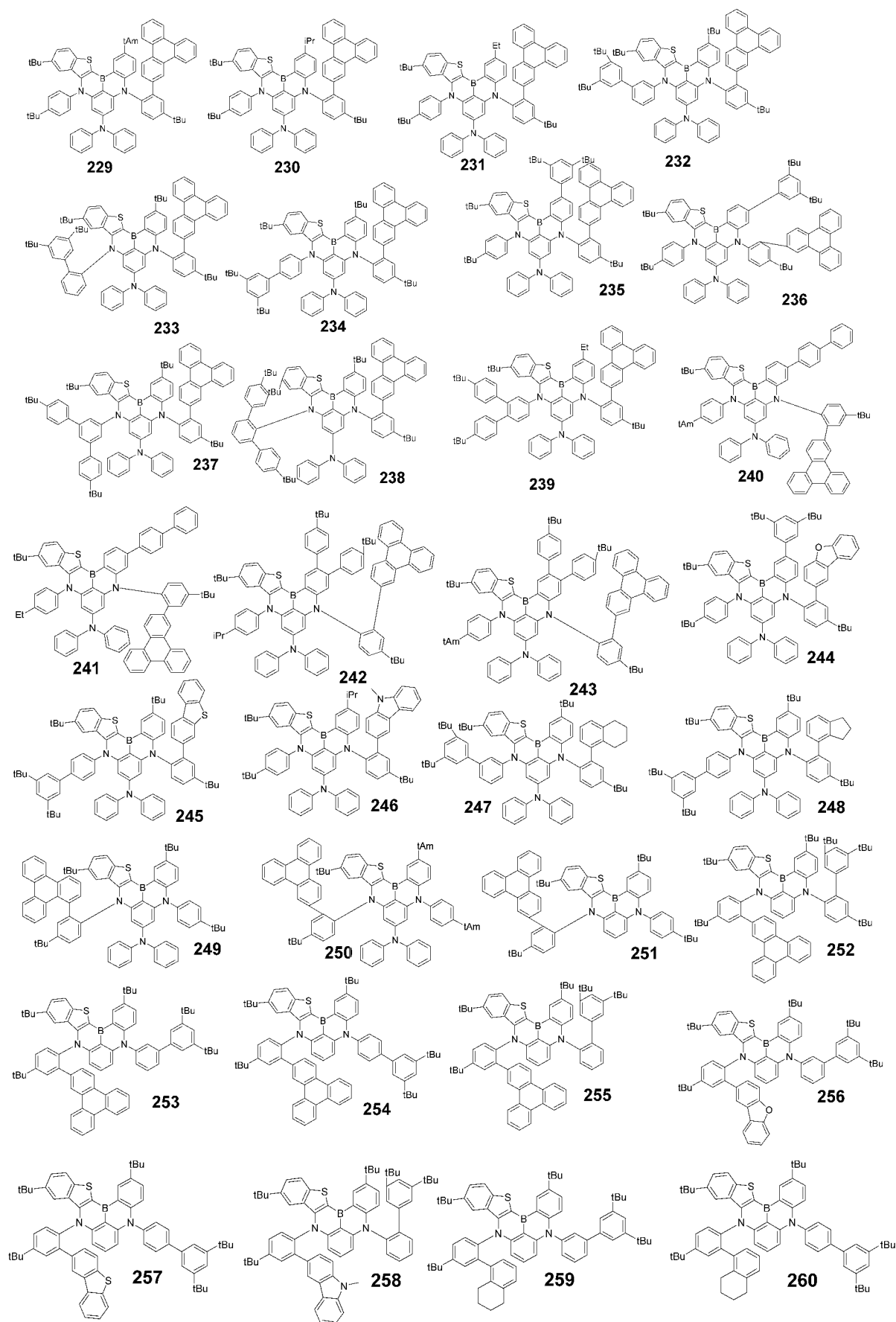


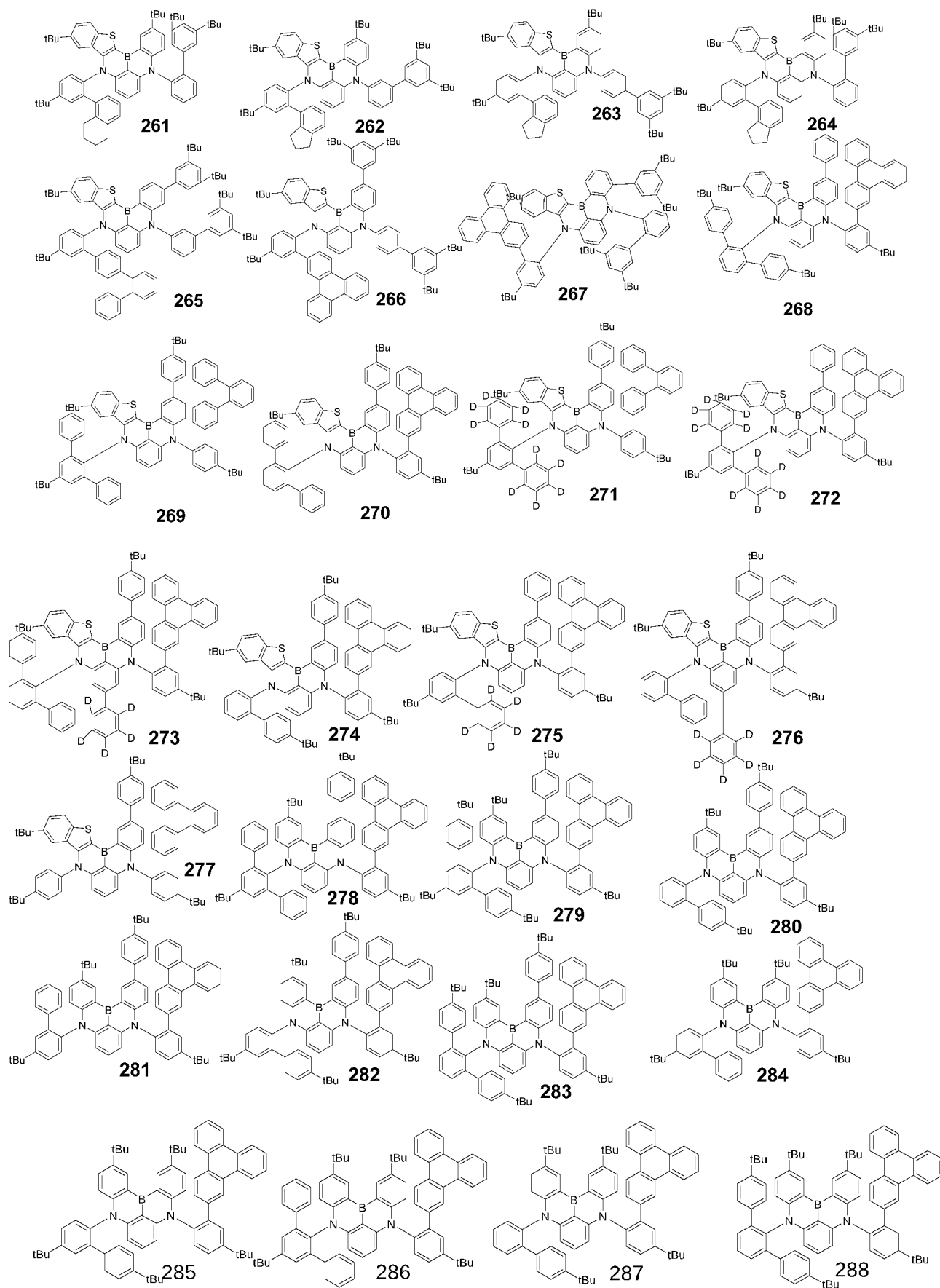


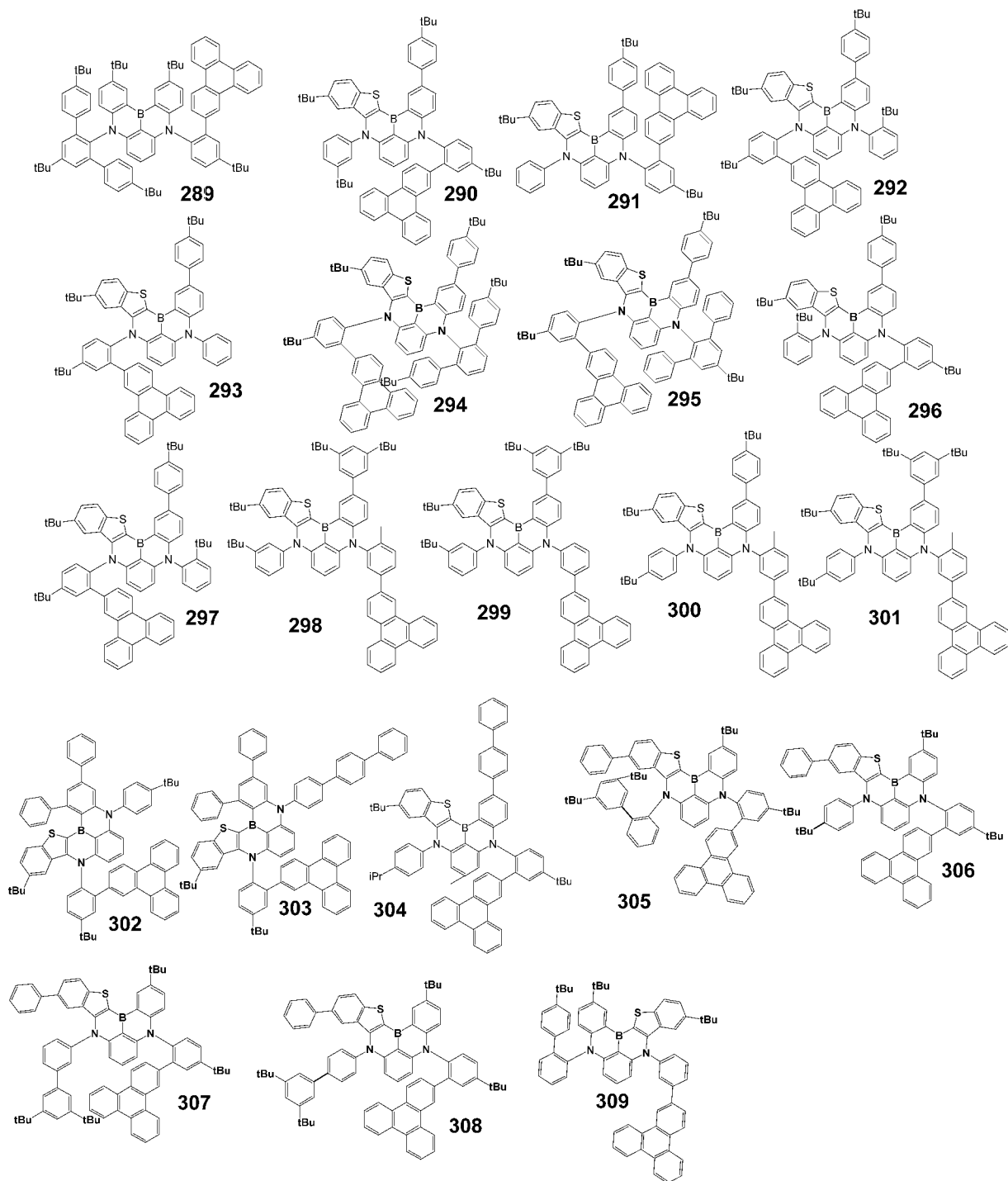












本申请实施例提供的含硼联苯有机化合物,在硼氮化合物中引入二苯并呋喃、二苯并噻吩、咔唑、苯并五元环、三亚苯和/或萘等结构,使得整体分子
5 共轭性更大,提高了应用所述有机化合物的有机发光器件的发光效率和使用寿命;同时,在硼氮化合物中引入四氢化萘和/或茚满等结构则使得分子在喷墨打印等制程中的溶解性更好,易于化合物纯化,从而提高有机化合物的纯度,进而进一步延长应用所述有机化合物的有机发光器件的发光效率和使用寿命。

请参阅图 1 以及图 2，本申请还提供了一种有机发光器件 100，所述有机发光器件 100 包括：第一电极 101 以及第二电极 102；位于所述第一电极 101 以及所述第二电极 102 之间的有机功能层 103；其中，所述有机功能层 103 的材料包括如上所述的有机化合物的一种或一种以上。所述第一电极 101 可以是阳极，所述第二电极 102 可以是阴极。

在一些实施例中，所述有机发光器件 100 可以用于有机发光二极管、有机光伏电池、有机发光电池、有机场效应管、有机发光场效应管、有机激光器、有机自旋电子器件、有机传感器及有机等离子体发射二极管等，优选为有机发光二极管、有机发光电池、有机发光场效应管。

在一些实施例中，所述有机发光器件 100 可以应用于多种电子设备，例如：显示面板、照明设备、光源等。

在一些实施例中，所述有机功能层 103 可以为单层，此时，所述有机功能层 103 为混合物层，所述混合物层中包括第一化合物以及第二化合物，所述第一化合物选自如上所述的有机化合物中的一种或一种以上，所述第二化合物选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、空穴阻挡材料、发光客体材料、发光主体材料、有机染料中的一种或一种以上。所述有机功能层 103 中包括的各种有机功能材料的详细描述详见 WO2010135519A1、US20090134784A1 和 WO 2011110277A1，特此将此 3 件专利文件中的全部内容并入本文作为参考。

所述发光客体材料选自单重态发光体(荧光发光体)、三重态发光体(磷光发光体)及 TADF 材料。

当所述第二化合物选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、空穴阻挡材料、发光主体材料、有机染料中的一种或一种以上时，所述第一化合物与所述第二化合物的质量比为 1:99 至 30:70，优选为 1:99 至 10:90。

当所述第二化合物为发光客体材料时，所述第一化合物与所述第二化合物的质量比为 99:1 至 70:30，优选为 99:1 至 90:10。

在一些实施例中，所述有机功能层 103 可以包括多层。当所述有机功能层 103 为多层时，所述有机功能层 103 至少包括发光层 107；优选的，所述有机功能层 103 包括空穴注入层 104、空穴传输层 105、发光层 107、电子阻挡层

106、电子注入层 109、电子传输层 108 或空穴阻挡层。

5 在一些实施例中，所述有机发光器件 100 可以为蓝色有机发光器件、绿色有机发光器件或红色有机发光器件，所述发光层 107 可以包括主体材料以及客体材料，所述客体材料为如上所述的有机化合物的一种或一种以上，所述主体材料包括稠合芳族衍生物或杂芳族化合物。

所述有机发光器件 100 的发光波长在 300 到 1000nm 之间；进一步的，所述有机发光器件 100 的发光波长在 350 到 900nm 之间；再进一步的，所述有机发光器件 100 的发光波长在 400 到 800nm 之间；更进一步的，所述有机发光器件 100 的发光波长在蓝色光的波长范围内。

10 在一些实施例中，所述主体材料包括蒽衍生物、芘衍生物、萘衍生物、并五苯衍生物、菲化合物、荧蒽化合物、咔唑衍生物、二苯并呋喃衍生物、梯子型呋喃化合物、嘧啶衍生物中的至少一种。优选的，所述主体材料为应用于蓝色有机发光器件的蓝光主体材料；所述主体材料为蓝光主体材料时，所述主体材料优选为蒽类有机化合物。

15 在一些实施例中，所述主体材料与所述客体材料的质量比为 99:1 至 70:30，如：90:10、85:15、80:20、75:25 等；优选为 99:1 至 90:10，如：97:3、96:4、95:5、93:7、92:8 等。所述客体材料分散于所述主体材料中，且所述主体材料与所述客体材料的质量比为 99:1 至 70:30，有利于抑制所述发光层 107 的晶化，并抑制所述客体材料由于高浓度导致的浓度猝灭，从而提高所述有机发光器件
20 100 的发光效率。

在一些实施例中，所述阳极是注入空穴的电极，且所述阳极可以将空穴注入到所述有机功能层 103 中，如：所述阳极将空穴注入到所述空穴注入层、所述空穴传输层或发光层中。所述阳极可包括导电金属、导电金属氧化物、或导电聚合物中的至少一种。优选的，所述阳极的功函数和发光层中的发光材料、
25 或作为所述空穴注入层或空穴传输层或电子阻挡层中的 p 型半导体材料的 HOMO(最高已占分子轨道，Highest Occupied Molecular Orbital)能级或价带能级的差的绝对值小于 0.5eV，优选为小于 0.3eV，更优选为小于 0.2eV。所述阳极的材料包含但不限于：Al、Cu、Au、Ag、Mg、Fe、Co、Ni、Mn、Pd、Pt、ITO(氧化铟锡，Indium Tin Oxide)、铝掺杂氧化锌(AZO)等中的至少一种，或

其它合适且已知的阳极材料，本领域普通技术人员可容易地选择使用。所述阳极的材料可以使用任何合适的技术沉积，如合适的物理气相沉积法，包括射频磁控溅射，真空热蒸发，电子束(e-beam)等。在一些实施例中，所述阳极是可以图案结构化的，如：图案化的 ITO 导电基板可在市场上买到，并且可以用来制备本申请的有机发光器件 100。

在一些实施例中，所述阴极是注入电子的电极，且所述阴极可以将电子注入到所述有机功能层中，如：所述阴极将电子注入到所述电子注入层、电子传输层、或发光层中。所述阴极可包括导电金属或导电金属氧化物中的至少一种。优选的，所述阴极的功函数和发光层中发光材料、或作为电子注入层或电子传输层或空穴阻挡层的 n 型半导体材料的 LUMO(最低未占分子轨道，Lowest Unoccupied Molecular Orbital)能级或导带能级的差的绝对值小于 0.5eV，优选为小于 0.3eV，更优选为小于 0.2eV。所有可用作有机电子器件的阴极的材料都可能作为本申请申请器件的阴极材料，所述阴极的材料包括但不限于：Al、Au、Ag、Ca、Ba、Mg、LiF/Al、MgAg 合金、BaF₂/Al、Cu、Fe、Co、Ni、Mn、Pd、Pt、ITO 等中的至少一种。所述阴极的材料可以使用任何合适的技术沉积，如合适的物理气相沉积法，包括射频磁控溅射，真空热蒸发，电子束(e-beam)等。

在一些实施例中，所述空穴注入层 104 用于促进空穴从所述阳极注入至所述发光层 107，并且所述空穴注入层 104 包括空穴注入材料，所述空穴注入材料是可以在低电压下接收从正电极注入的空穴的材料，并且，优选的，所述空穴注入材料的最高已占分子轨道(HOMO)在所述阳极的材料的功函数与所述空穴注入远离所述阳极一侧的膜层的功能材料(如：所述空穴传输层的空穴传输材料)的 HOMO 之间。所述空穴注入材料包括但不限于金属卟啉、低聚噻吩、基于芳基胺的有机材料、基于六腈六氮杂苯并菲的有机材料、基于喹吖啶酮的有机材料、基于花的有机材料、蒽醌、基于聚苯胺和基于聚噻吩的导电聚合物等中的至少一种。

在一些实施例中，所述空穴传输层 105 可以用于传输空穴至所述发光层 107，所述空穴传输层 105 包括空穴传输材料，所述空穴传输材料接收从所述阳极或所述空穴注入层传输的空穴并将空穴转移至所述发光层。所述空穴传输

材料为本领域已知的具有高的空穴迁移率的材料,所述空穴传输材料可以包括但不限于基于芳基胺的有机材料、导电聚合物、具有共轭部分和非共轭部分二者的嵌段共聚物等中的至少一种。

在一些实施例中,所述电子传输层 108 用于传输电子,所述电子传输层 108 包括电子传输材料,所述电子传输材料接收从负电极注入的电子并将电子转移至所述发光层 107。所述电子传输材料为本领域已知的具有高电子迁移率的材料,所述电子传输材料可以包括但不限于: 8-羟基喹啉的 Al 配合物、包含 Alq₃ 的配合物、有机自由基化合物、羟基黄酮-金属配合物、8-羟基喹啉锂(LiQ)、和基于苯并咪唑的化合物中的至少一种。

在一些实施例中,所述电子注入层 109 用于注入电子,所述电子注入层 109 包括电子注入材料,所述电子注入材料优选为具有传输电子的能力,具有注入来自负电极的电子的效应,并具有将电子注入到所述发光层 107 或发光材料中的优异效应,并具有防止由所述发光层 107 产生的激子移动至所述空穴注入层,并且还具有优异的形成薄膜的能力的材料。所述电子注入材料包括但不限于 8-羟基喹啉锂(LiQ)、芴酮、蒽醌二甲烷、联苯醌、噻喃二氧化物、唑、二唑、三唑、咪唑、茼四羧酸、亚芴基甲烷、蒽酮等及其衍生物,金属配合物化合物,含氮 5 元环衍生物等中的至少一种。

在一些实施例中,所述空穴阻挡层用于阻挡空穴到达负电极,通常可以与所述空穴注入层 104 的形成条件相同。所述空穴阻挡层包括空穴阻挡材料,所述空穴阻挡材料包括但不限于二唑衍生物或三唑衍生物、菲咯啉衍生物、BCP、铝配合物等中的至少一种。

在一些实施例中,所述有机发光器件 100 还包括衬底 110,所述第一电极 101、所述空穴注入层 104、所述空穴传输层 105、所述电子阻挡层 106、所述发光层 107、所述电子传输层 108、所述电子注入层 109、所述第二电极 102 在所述衬底 110 上依次层叠。所述衬底 110 可以为透明衬底或不透明衬底,所述衬底 110 为透明衬底时,可以制作透明有机发光器件 100; 所述衬底 110 可以为刚性衬底或具有弹性的柔性衬底,所述衬底 110 的材料可以包括但不限于塑料、聚合物、金属、半导体晶片或玻璃等。优选的,所述衬底 110 至少包括一个平滑的表面,用于在所述表面上形成所述阳极。更优选的,所述表面无表

面缺陷。优选的,所述衬底 110 的材料为聚合物薄膜或塑料,包括但不限于聚对苯二甲酸乙二醇酯(PET 材料)和聚乙二醇(2,6-萘)(PEN 材料),所述衬底 110 的玻璃化温度大于或等于 150℃,优选为大于或等于 200℃,更优选为大于或等于 250℃,最优选为大于或等于 300℃。

5 在一些实施例中,所述有机发光器件 100 可以为溶液型有机发光器件,即,至少一所述有机功能层通过印刷方式(如:喷墨打印)制备而成。

10 在一些实施例中,所述混合物层或所述发光层可以通过组合物的打印或涂布工艺形成。打印或涂布工艺包括喷墨打印,喷印(Nozzle Printing),活版印刷,丝网印刷,浸涂,旋转涂布,刮刀涂布,辊筒印花,扭转辊印刷,平版印刷,柔版印刷,轮转印刷,喷涂,刷涂或移印,狭缝型挤压式涂布等。优选的,为凹版印刷,喷印及喷墨打印。

所述组合物可以为溶液或悬浮液,所述组合物可以包括分散质以及分散剂。其中,所述分散质为如上所述的所述有机化合物的一种或一种以上及至少一种有机溶剂,所述分散剂用于分散所述分散质。

15 在所述组合物中,如上所述的有机化合物的质量分数可以为 0.3%至 30%,优选为 0.5%至 20%,更优选为 0.5%至 15%,进一步优选为 0.5%至 10%,最优选为 1%至 5%。

20 所述组合物用于印刷工艺时,所述组合物可以为油墨,所述油墨的粘度及表面张力是重要的参数,合适的油墨的表面张力参数适合于特定的基板和特定的印刷方法。在一些实施例中,所述油墨在工作温度或在 25℃时的表面张力的范围为 19dyne/cm 到 50dyne/cm;优选为 22dyne/cm 到 35dyne/cm;更优选为 25dyne/cm 到 33dyne/cm,有利于应用于喷墨印刷制程。在一些实施例中,按所述油墨在工作温度或 25℃时的粘度范围为 1cps 到 100cps;优选为 1cps 到 50cps;更优选为 1.5cps 到 20cps;最优选为在 4.0cps 到 20cps,有利于应用
25 于喷墨印刷制程。

在一些实施例中,所述分散剂的汉森(Hansen)溶解度参数在以下范围内:所述分散剂的 δ_d (色散力)在 17.0~23.2MPa^{1/2} 的范围,优选为在 18.5~21.0MPa^{1/2} 的范围; δ_p (极性力)在 0.2~12.5MPa^{1/2} 的范围,优选为在 2.0~6.0MPa^{1/2} 的范围; δ_h (氢键力)在 0.9~14.2MPa^{1/2} 的范围,优选为在 2.0~6.0MPa^{1/2} 的范围。

在一些实施例中，所述分散剂的沸点大于或等于 150° C；优选为大于或等于 180° C；再优选为大于或等于 200° C；更优选为或等于 250° C；进一步优选为大于或等于 275° C 最优选为大于或等于 300° C。所述分散剂的沸点至少大于或等于 150° C，有利于在喷墨打印时使防止喷墨印刷头的喷嘴堵塞，且沸点越高越有利于防止堵塞。

所述分散剂可以包括至少一种有机溶剂，所述有机溶剂可从溶剂体系中蒸发，以形成包含功能材料薄膜。所述有机溶剂可以包括至少一种第一有机溶剂，所述第一有机溶剂可以选自芳香族或杂芳族。具体的，所述第一有机溶剂可以选自对二异丙基苯、戊苯、四氢萘、环己基苯、氯萘、1,4-二甲基萘、3-异丙基联苯、对甲基异丙苯、二戊苯、三戊苯、戊基甲苯、邻二乙苯、间二乙苯、对二乙苯、1,2,3,4-四甲苯、1,2,3,5-四甲苯、1,2,4,5-四甲苯、丁苯、十二烷基苯、二己基苯、二丁基苯、对二异丙基苯、环己基苯、苄基丁基苯、二甲基萘、3-异丙基联苯、对甲基异丙苯、1-甲基萘、1,2,4-三氯苯、4,4-二氟二苯甲烷、1,2-二甲氧基-4-(1-丙烯基)苯、二苯甲烷、2-苯基吡啶、3-苯基吡啶、N-甲基二苯胺、4-异丙基联苯、 α ， α -二氯二苯甲烷、4-(3-苯基丙基)吡啶、苯甲酸苄酯、1,1-双(3,4-二甲基苯基)乙烷、2-异丙基萘、喹啉、异喹啉、2-呋喃甲酸甲酯、2-呋喃甲酸乙酯等。

所述第一有机溶剂可以选自芳香酮类溶剂。具体的，所述第一有机溶剂可以选自 1-四氢萘酮、2-四氢萘酮、2-(苯基环氧)四氢萘酮、6-(甲氧基)四氢萘酮，苯乙酮、苯丙酮、二苯甲酮、及它们的衍生物，如 4-甲基苯乙酮、3-甲基苯乙酮、2-甲基苯乙酮、4-甲基苯丙酮、3-甲基苯丙酮、2-甲基苯丙酮等。

所述第一有机溶剂可以选自芳香醚类溶剂。具体的，所述第一有机溶剂可以选自 3-苯氧基甲苯、丁氧基苯、对茴香醛二甲基乙缩醛、四氢-2-苯氧基-2H-吡喃、1,2-二甲氧基-4-(1-丙烯基)苯、1,4-苯并二噁烷、1,3-二丙基苯、2,5-二甲氧基甲苯、4-乙基苯乙醚、1,3-二丙氧基苯、1,2,4-三甲氧基苯、4-(1-丙烯基)-1,2-二甲氧基苯、1,3-二甲氧基苯、缩水甘油基苯基醚、二苄基醚、4-叔丁基茴香醚、反式-对丙烯基茴香醚、1,2-二甲氧基苯、1-甲氧基萘、二苯醚、2-苯氧基甲醚、2-苯氧基四氢呋喃、乙基-2-萘基醚等。

所述第一有机溶剂可以选自脂肪族酮。具体的，所述第一有机溶剂可以选自脂肪族酮，例如，2-壬酮、3-壬酮、5-壬酮、2-癸酮、2,5-己二酮、2,6,8-三甲基-4-壬酮、葑酮、佛尔酮、异佛尔酮、二正戊基酮等；或脂肪族醚，例如，戊醚、己醚、二辛醚、乙二醇二丁醚、二乙二醇二乙醚、二乙二醇丁基甲醚、二乙二醇二丁醚、三乙二醇二甲醚、三乙二醇乙基甲醚、三乙二醇丁基甲醚、三丙二醇二甲醚、四乙二醇二甲醚等。

所述第一有机溶剂可以选自有机酯类溶剂。具体的，所述第一溶剂可以选自辛酸烷酯、癸二酸烷酯、硬脂酸烷酯、苯甲酸烷酯、苯乙酸烷酯、肉桂酸烷酯、草酸烷酯、马来酸烷酯、烷内酯、油酸烷酯等。特别优选辛酸辛酯、癸二酸二乙酯、邻苯二甲酸二烯丙酯、异壬酸异壬酯等。

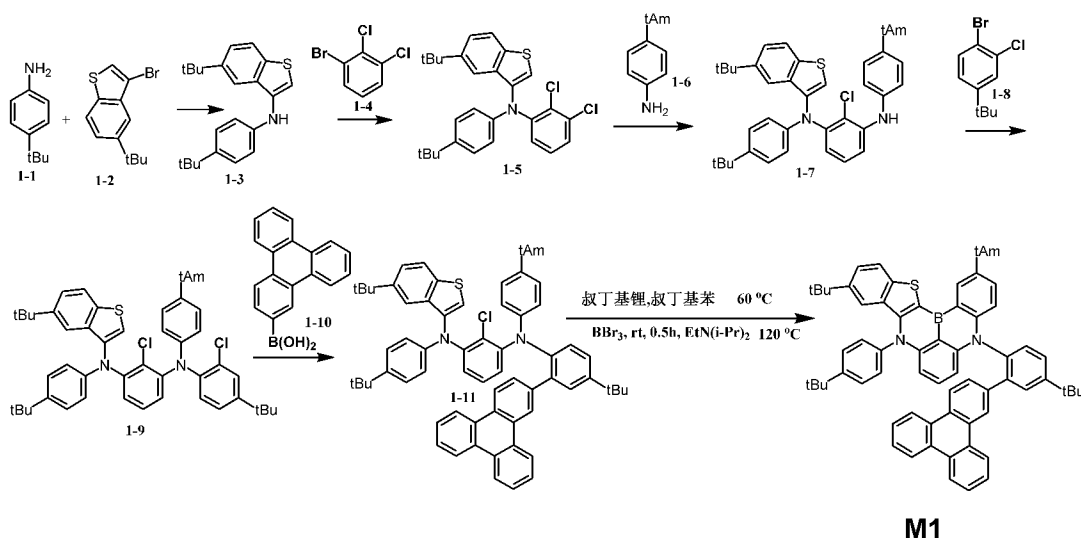
所述有机溶剂还可以包括第二有机溶剂，所述第二有机溶剂可以选自甲醇、乙醇、2-甲氧基乙醇、二氯甲烷、三氯甲烷、氯苯、邻二氯苯、四氢呋喃、苯甲醚、吗啉、甲苯、邻二甲苯、间二甲苯、对二甲苯、1,4-二氧杂环己烷、丙酮、甲基乙基酮、1,2-二氯乙烷、3-苯氧基甲苯、1,1,1-三氯乙烷、1,1,2,2-四氯乙烷、醋酸乙酯、醋酸丁酯、二甲基甲酰胺、二甲基乙酰胺、二甲基亚砷、四氢萘、萘烷、茚等溶剂中的一种或一种以上。

所述组合物除所述分散质以及所述分散剂以外，还可以包括一个或多个组份例如表面活性化合物，润滑剂，润湿剂，分散剂，疏水剂，粘接剂等，用于调节粘度，成膜性能，提高附着性等。

本申请提供的所述有机化合物的示例性的制备方法，如下示例性实施例1至实施例63所示。

实施例1

有机化合物M1的合成路线如下：



中间体1-3的合成:

将化合物1-1 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体1-3, 摩尔量为8.21mmol, 产率为82.1%, 中间体1-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=337。

中间体1-5的合成:

将化合物1-3 (10mmol)、化合物1-4 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体1-5, 摩尔量为7.28mmol, 产率为72.8%, 中间体1-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=481。

中间体1-7的合成:

将中间体1-5 (10mmol)、化合物1-6 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体1-7, 摩尔量为5.45mmol, 产率为54.5%, 中间体1-7的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=608。

中间体1-9的合成:

将中间体1-7 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体1-9, 摩尔量为6.25mmol, 产率为62.5%, 中间体1-9的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=774。

中间体1-11的合成:

将中间体1-9 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2

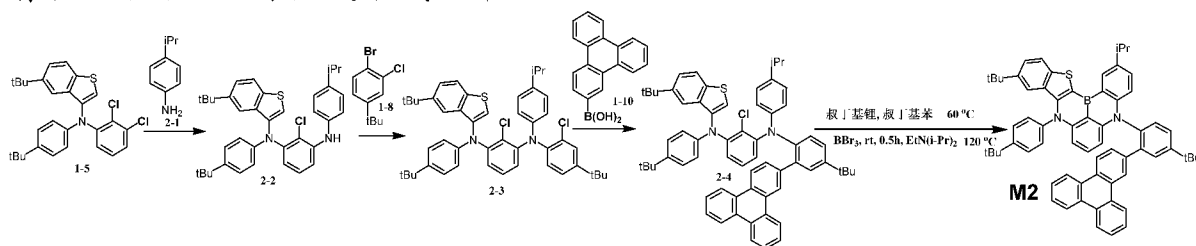
ml) 的混合溶剂中, 并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100°C 搅拌 6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 1-11 摩尔量为 7.81mmol, 产率: 78.1%, 中间体 1-11 的大气压固相分析探针质谱 (ASAP-MS) 结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=966$ 。

5 有机化合物 M1 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 1-11 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至 -30°C , 逐滴加入 $t\text{-BuLi}$ (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60°C 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30°C , 加入三溴化硼 (21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0°C , 加入 42mmol N,N -二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120°C 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M1, 收率为 38.9%, 有机化合物 M1 的大气压固相分析探针质谱 (ASAP-MS) 结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=940$ 。

实施例 2

有机化合物 M2 的合成路线如下:



中间体 2-2 的合成:

20 将中间体 1-5 (10mmol)、化合物 2-1 (10mmol)、 Pd -132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、 S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100°C 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 2-2, 摩尔量为 6.47mmol, 产率为 64.7%, 中间体 2-2 的大气压固相分析探针质谱 (ASAP-MS) 结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=580$ 。

中间体 2-3 的合成:

30 将中间体 2-2 (10mmol)、化合物 1-8 (10mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.1mmol)、 S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100°C 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 2-3, 摩尔量为 8.36mmol, 产率为 83.6%, 中间体 2-3 的大气压固相分析探针质谱 (ASAP-MS) 结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=746$ 。

中间体 2-4 的合成:

将中间体 2-3 (10mmol)、中间体 1-10 (10mmol) 溶于 1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮

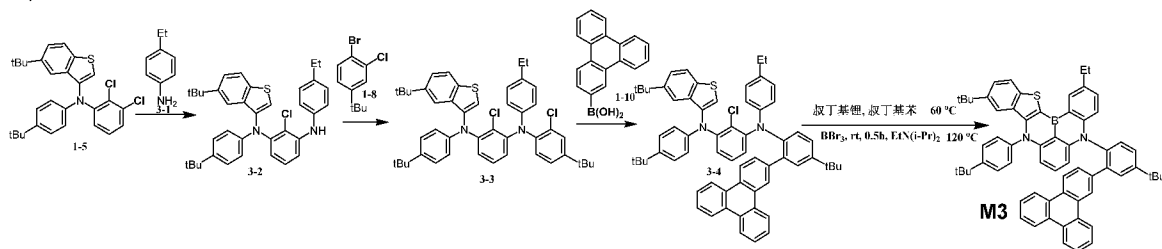
气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体2-4摩尔量为7.09mmol, 产率: 70.9%, 中间体2-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=938。

有机化合物M2的合成:

- 5 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体2-4以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌,
- 10 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M2, 收率为36.7%, 有机化合物M2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=912。

15 实施例3

有机化合物M3的合成路线如下:



中间体3-2的合成:

- 20 将中间体1-5 (10mmol)、化合物3-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体3-2, 摩尔量为7.83mmol, 产率为78.3%, 中间体3-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=566。

25 中间体3-3的合成:

- 将中间体3-2 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体3-3, 摩尔量为8.51mmol, 产率为85.1%, 中间体3-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=732。

30 中间体3-4的合成:

将中间体3-3 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分

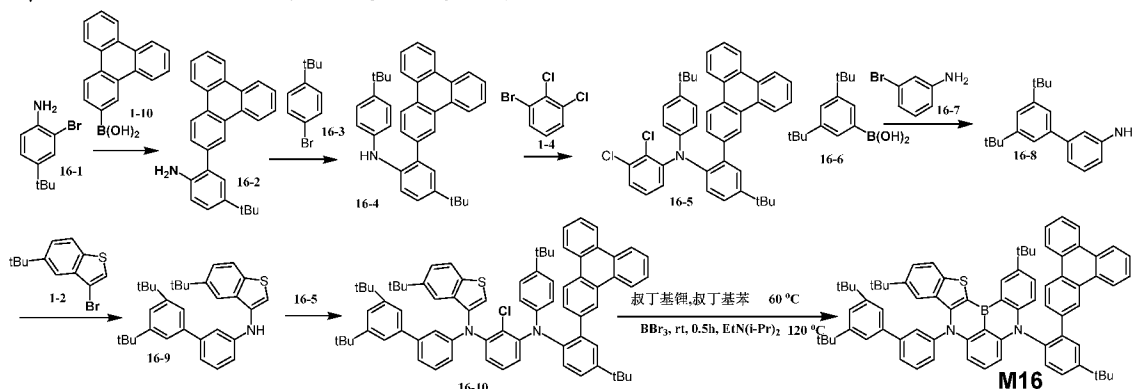
液，有机相柱层析并重结晶得到中间体3-4摩尔量为5.97mmol，产率：59.7%，中间体3-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=924。

有机化合物M3的合成：

- 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体2-4以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M3，收率为40.6%，有机化合物M3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=898。

实施例4

- 15 有机化合物M16的合成路线如下：



中间体 16-2 的合成：

- 将中间体 16-1 (10mmol)、中间体 1-10 (10mmol) 溶于 1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中，并加入 Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol)，在氮气气氛下，100℃搅拌 6h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体 16-2 摩尔量为 9.22mmol，产率：92.2%，中间体 16-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=375。

中间体16-4的合成：

- 将化合物16-2 (10mmol)、化合物16-3 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体16-4，摩尔量为7.68mmol，产率为76.8%，中间体16-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)= 507。

- 30 中间体16-5的合成：

将化合物16-4 (10mmol)、化合物1-4 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基

丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体16-5, 摩尔量为6.97mmol, 产率为69.7%, 中间体16-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=651。

5 中间体16-8的合成:

将中间体16-6 (10mmol)、化合物16-7 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体16-8, 摩尔量为5.42mmol, 产率为54.2%, 中间体16-8的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=281。

中间体16-9的合成:

将中间体16-8 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体16-9, 摩尔量为5.97mmol, 产率为59.7%, 中间体16-9的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=469。

中间体16-10的合成:

将中间体16-9 (10mmol)、中间体16-5 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体16-10摩尔量为7.27mmol, 产率: 72.7%, 中间体16-10的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1084。

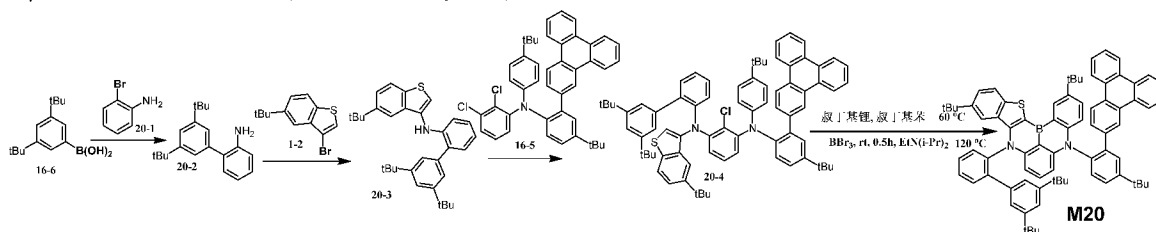
有机化合物M16的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体16-10以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M16, 收率为33.8%, 有机化合物M16的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1058。1H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.17 (d, J = 8.6 Hz, 6H), 8.02 (s, 6H), 7.87 (d, J = 13.4 Hz, 6H), 7.02 (t, J = 7.6 Hz, 6H), 6.73 (d, J = 17.7 Hz, 6H), 6.38 (t, J = 7.5 Hz, 6H), 1.78 (s, 18H), 1.73

(s, 9H), 1.69 (s, 9H), 1.56 (s, 9H)。

实施例5

有机化合物M20的合成路线如下：



5 中间体20-2的合成：

将中间体16-6 (10mmol)、化合物20-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体20-2, 摩尔量为6.94mmol, 产率为69.4%, 中间体20-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=281。

中间体20-3的合成：

将中间体20-2 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体20-3, 摩尔量为6.33mmol, 产率为63.3%, 中间体20-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=469。

中间体20-4的合成：

将中间体20-3 (10mmol)、中间体16-5 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体20-4摩尔量为5.47mmol, 产率: 54.7%, 中间体20-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1084。

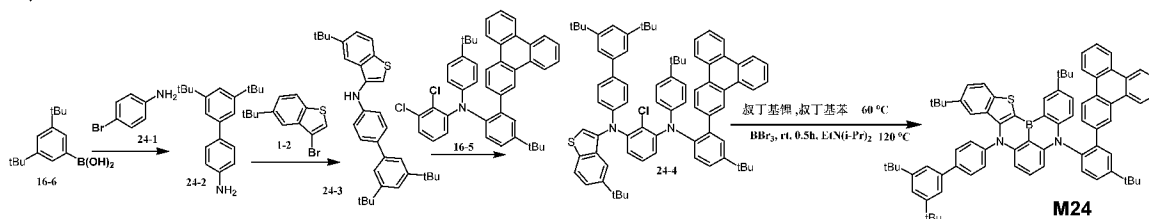
有机化合物M20的合成：

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体20-4以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产

品淡黄色固体粉末,即有机化合物M20,收率为31.9%,有机化合物M20的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1058。

实施例6

有机化合物M24的合成路线如下:



中间体24-2的合成:

将中间体16-6 (10mmol)、化合物24-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体24-2,摩尔量为7.63mmol,产率为76.3%,中间体24-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=281。

中间体24-3的合成:

将中间体24-2 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体24-3,摩尔量为6.55mmol,产率为65.5%,中间体24-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=469。

中间体24-4的合成:

将中间体24-3 (10mmol)、中间体16-5 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下,120℃搅拌3h;冷却后,旋蒸除去大部分溶剂,然后萃取并水洗分液,有机相柱层析并重结晶得到中间体24-4摩尔量为5.02mmol,产率: 50.2%,中间体24-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1084。

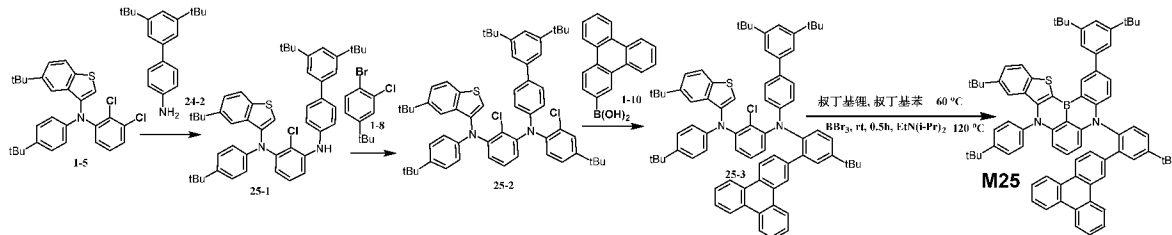
有机化合物M24的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体24-4以及100ml干燥的叔丁基苯,在N₂气氛中,冷却至-30℃,逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液,升高温度至60℃反应2小时,减压蒸除其中的正己烷溶剂;将反应液再次冷却至-30℃,加入三溴化硼(21mmol),升至室温下搅拌0.5小时,然后将反应液冷却至0℃,加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺,待滴加完毕,升温至室温搅拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶

剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M24,收率为36.5%,有机化合物M24的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1058。

实施例7

5 有机化合物M25的合成路线如下:



中间体25-1的合成:

将中间体1-5 (10mmol)、化合物24-2 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体25-1,摩尔量为8.47mmol,产率为84.7%,中间体25-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=726。

中间体25-2的合成:

15 将中间体25-1 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体25-2,摩尔量为6.48mmol,产率为64.8%,中间体25-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=892。

中间体25-3的合成:

25 将中间体25-2 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol)溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml)的混合溶剂中,并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol)和碳酸钾 (30mmol),在氮气气氛下,100℃搅拌6h;冷却后,旋蒸除去大部分溶剂,然后萃取并水洗分液,有机相柱层析并重结晶得到中间体25-3摩尔量为7.75mmol,产率: 77.5%,中间体25-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1084。

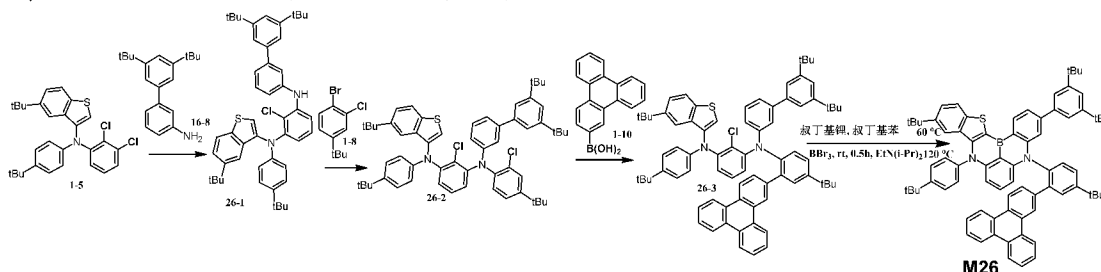
有机化合物M25的合成:

30 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体25-3以及100ml干燥的叔丁基苯,在N₂气氛中,冷却至-30℃,逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液,升高温度至60℃反应2小时,减压蒸除其中的正己烷溶剂;将反应液再次冷却至-30℃,加入三溴化硼(21mmol),升至室温下搅拌0.5小时,然后将反应液冷却至0℃,加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺,待滴加完毕,升温至室温搅拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶

液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M25，收率为42.8%，有机化合物M25的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1058。¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.02 (s, 1H), 8.57 (s, 1H), 8.51 – 8.39 (m, 4H), 7.91 (s, 1H), 7.89 – 7.68 (m, 1H), 7.62 (d, J = 8.5 Hz, 7H), 7.52 (d, J = 9.1 Hz, 1H), 7.49 – 7.32 (m, 2H), 7.25 (d, J = 7.9 Hz, 8H), 7.26 (d, J = 13.4 Hz, 1H), 7.06 (d, J = 15.4 Hz, 1H), 6.49 (s, 1H), 6.44 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 6.31 (d, J = 14.2 Hz, 1H), 1.58 (s, 9H), 1.50 (s, 9H), 1.47 (s, 18H), 1.06 (s, 9H)。

实施例8

有机化合物M26的合成路线如下：



中间体26-1的合成：

将中间体1-5 (10mmol)、化合物16-8 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体26-1，摩尔量为8.66mmol，产率为86.6%，中间体26-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=726。

中间体26-2的合成：

将中间体26-1 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体26-2，摩尔量为6.09mmol，产率为60.9%，中间体26-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=892。

中间体26-3的合成：

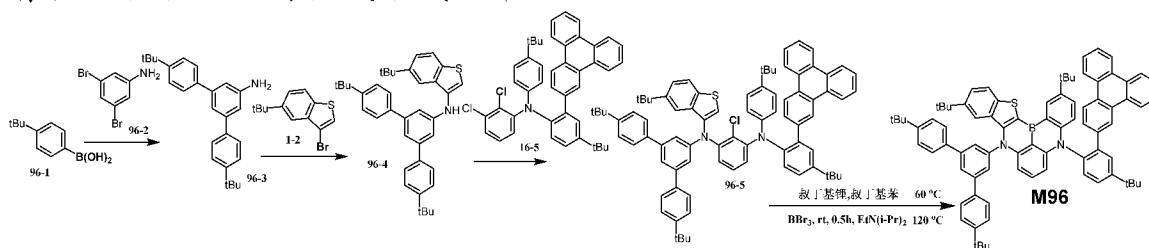
将中间体26-2 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol)，在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体26-3摩尔量为7.54mmol，产率：75.4%，中间体26-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1084。

有机化合物M26的合成：

- 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体26-3以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M26，收率为39.6%，有机化合物M26的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1058。

实施例9

有机化合物M96的合成路线如下：



中间体96-3的合成：

- 将中间体96-1（20mmol）、化合物96-2（10mmol）溶于1,4-二氧六环与水（21/2 ml）的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄（0.1mmol）和碳酸钾（30mmol），在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体96-3，摩尔量为7.29mmol，产率为72.9%，中间体96-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=357。

中间体96-4的合成：

- 将中间体96-3（10mmol）、化合物1-2（10mmol）、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体96-4，摩尔量为6.12mmol，产率为61.2%，中间体96-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=545。

中间体96-5的合成：

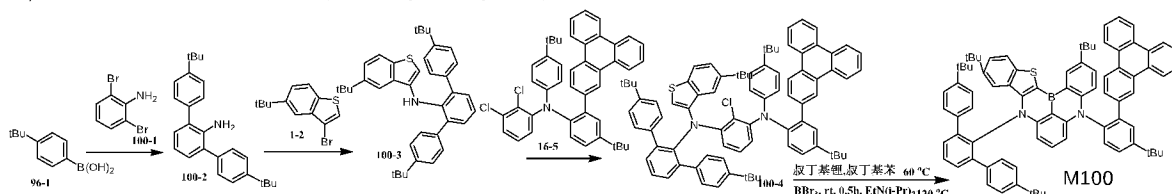
- 将中间体96-4（10mmol）、中间体16-5（10mmol），Pd-132（双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯，0.1mmol）、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下，120℃搅拌3h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体96-5摩尔量为5.38mmol，产率：53.8%，中间体96-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1160。

有机化合物M96的合成：

- 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体96-5以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M96，收率为43.6%，有机化合物M96的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1134。

实施例 10

有机化合物 M100 的合成路线如下：



中间体100-2的合成：

- 将中间体96-1（20mmol）、化合物100-1（10mmol）溶于1,4-二氧六环与水（21/2 ml）的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄（0.1mmol）和碳酸钾（30mmol），在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体100-2，摩尔量为7.67mmol，产率为76.7%，中间体100-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=357。

- 中间体100-3的合成：

- 将中间体100-2（10mmol）、化合物1-2（10mmol）、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体100-3，摩尔量为6.59mmol，产率为65.9%，中间体100-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=545。

中间体100-4的合成：

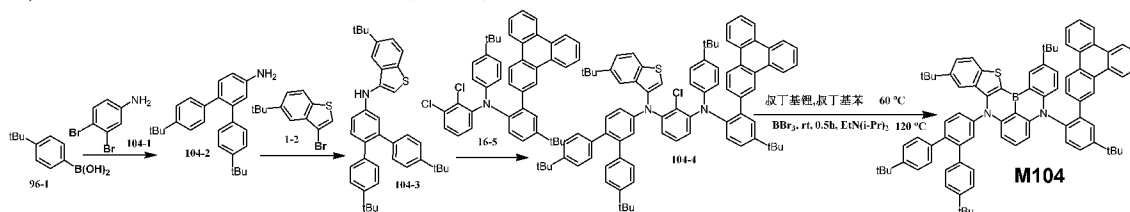
- 将中间体100-3（10mmol）、中间体16-5（10mmol），Pd-132（双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯，0.1mmol）、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下，120℃搅拌3h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体100-4摩尔量为6.87mmol，产率：68.7%，中间体100-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1160。

有机化合物M100的合成：

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体100-4以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M100，收率为41.4%，有机化合物M100的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1134。

实施例 11

有机化合物 M104 的合成路线如下：



中间体104-2的合成：

将中间体96-1（20mmol）、化合物104-1（10mmol）溶于1,4-二氧六环与水（21/2 ml）的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄（0.1mmol）和碳酸钾（30mmol），在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体104-2，摩尔量为7.11mmol，产率为71.1%，中间体104-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=357。

中间体104-3的合成：

将中间体104-2（10mmol）、化合物1-2（10mmol）、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体104-3，摩尔量为5.71mmol，产率为57.1%，中间体104-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=545。

中间体104-4的合成：

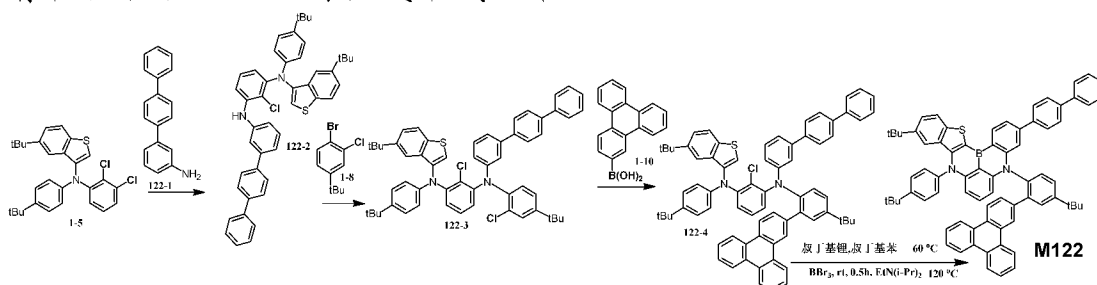
将中间体104-3（10mmol）、中间体16-5（10mmol），Pd-132（双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯，0.1mmol）、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下，120℃搅拌3h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体104-4摩尔量为6.57mmol，产率：65.7%，中间体104-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1160。

有机化合物M104的合成：

- 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体104-4以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M104，收率为45.4%，有机化合物M104的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1134。

实施例 12

有机化合物 M122 的合成路线如下：



中间体122-2的合成：

- 将中间体1-5 (10mmol)、化合物122-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体122-2，摩尔量为8.36mmol，产率为83.6%，中间体122-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=690。

中间体122-3的合成：

- 将中间体122-2 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体122-3，摩尔量为54.9mmol，产率为54.9%，中间体122-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=856。

中间体122-4的合成：

- 将中间体122-3 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol)溶于1,4-二氧六环与水(21/2 ml)的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol)和碳酸钾(30mmol)，在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体122-4摩尔量为6.47mmol，产率：

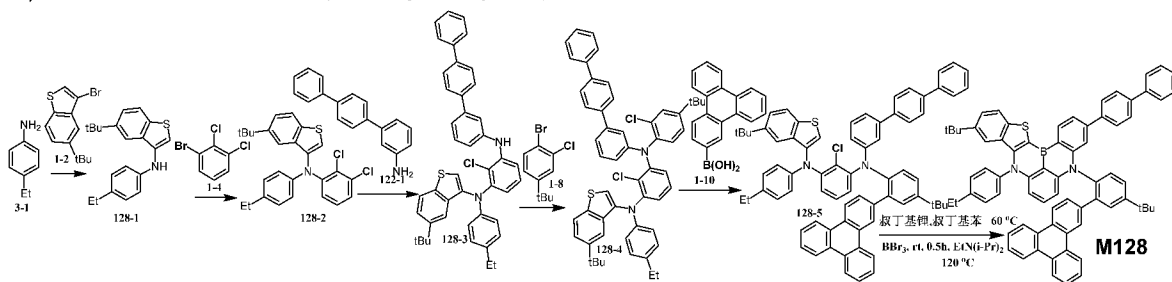
64.7%，中间体122-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1048。

有机化合物M122的合成：

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体122-4以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M124，收率为31.8%，有机化合物M124的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1022。

实施例13

15 有机化合物 M128 的合成路线如下：



中间体128-1的合成：

将化合物3-1（10mmol）、化合物1-2（10mmol）、Pd(dba)₂（双二亚苄基丙酮钯，0.1mmol）、TTBP（三叔丁基膦，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体128-1，摩尔量为8.37mmol，产率为83.7%，中间体128-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=309。

中间体128-2的合成：

将化合物128-1（10mmol）、化合物1-4（10mmol）、Pd(dba)₂（双二亚苄基丙酮钯，0.1mmol）、TTBP（三叔丁基膦，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体128-2，摩尔量为7.05mmol，产率为70.5%，中间体128-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=453。

中间体128-3的合成：

30 将中间体128-2（10mmol）、化合物122-1（10mmol）、Pd-132（双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯，0.1mmol）、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到

中间体128-3, 摩尔量为6.83mmol, 产率为68.3%, 中间体128-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=662。

中间体128-4的合成:

5 将中间体128-3 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体128-4, 摩尔量为6.68mmol, 产率为66.8%, 中间体128-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=828。

10 中间体128-5的合成:

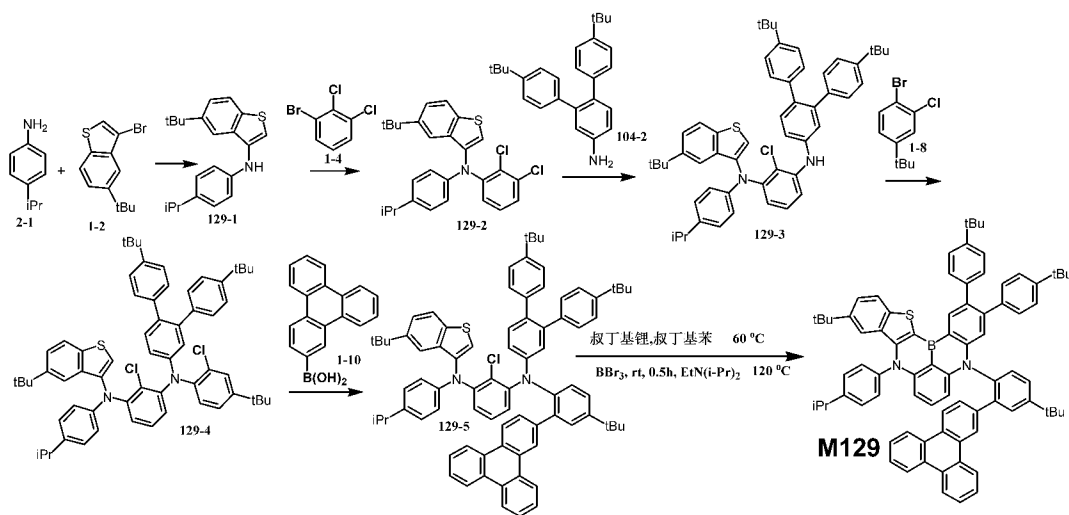
将中间体128-4 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体128-5摩尔量为7.68mmol, 产率: 15 76.8%, 中间体128-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1020。

有机化合物M128的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体128-5以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶 25 剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M128, 收率为40.7%, 有机化合物M128的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=994。

实施例14

有机化合物M129的合成路线如下:



中间体129-1的合成:

将化合物2-1 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体129-1, 摩尔量为7.69mmol, 产率为76.9%, 中间体129-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=323。

中间体129-2的合成:

将化合物129-1 (10mmol)、化合物1-4 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体129-2, 摩尔量为7.59mmol, 产率为75.9%, 中间体129-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=467。

中间体129-3的合成:

将中间体129-2 (10mmol)、化合物104-2 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体129-3, 摩尔量为6.12mmol, 产率为61.2%, 中间体129-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=788。

中间体129-4的合成:

将中间体129-3 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体129-4, 摩尔量为6.51mmol, 产率为65.1%, 中间体129-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=954。

中间体129-5的合成:

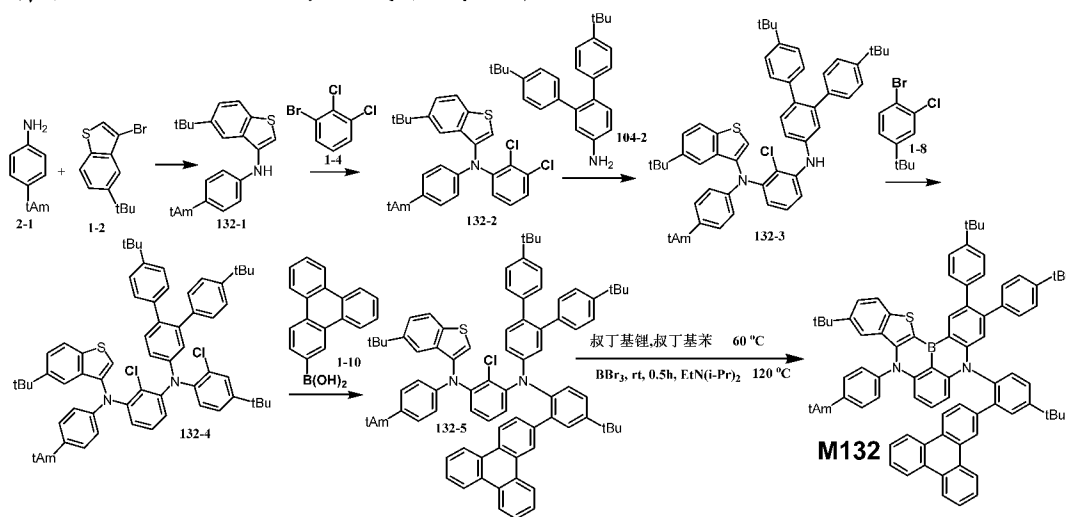
将中间体129-4 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体129-5摩尔量为7.34mmol, 产率: 73.4%, 中间体129-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1146。

有机化合物M129的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体129-5以及100ml干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M129, 收率为29.7%, 有机化合物M129的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1120。

实施例15

有机化合物M132的合成路线如下:



中间体132-1的合成:

将化合物2-1 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体132-1, 摩尔量为8.41mmol, 产率为84.1%, 中间体132-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=351。

中间体132-2的合成:

将化合物132-1 (10mmol)、化合物1-4 (10mmol)、 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (双二亚苄基

丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体132-2, 摩尔量为6.79mmol, 产率为67.9%, 中间体132-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=495。

5 中间体132-3的合成:

将中间体132-2 (10mmol)、化合物104-2 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到
10 中间体132-3, 摩尔量为7.84mmol, 产率为78.4%, 中间体132-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=816。

中间体132-4的合成:

将中间体132-3 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠
15 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体132-4, 摩尔量为5.96mmol, 产率为59.6%, 中间体132-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=982。

中间体132-5的合成:

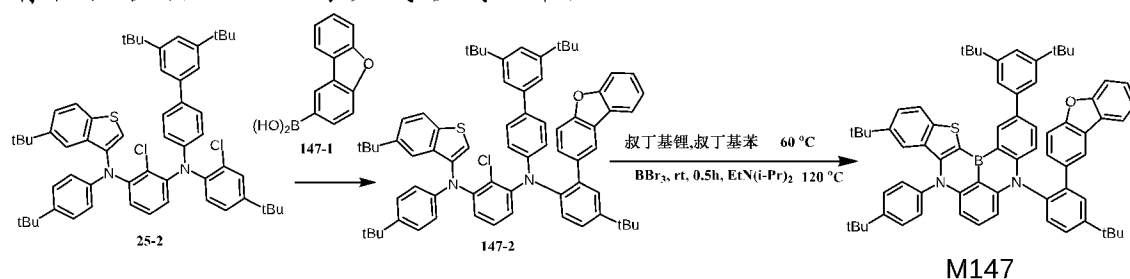
20 将中间体132-4 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体132-5摩尔量为6.47mmol, 产率: 64.7%, 中间体132-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果:
25 MS(ASAP)=1174。

有机化合物M132的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体132-5以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再
30 次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产
35 品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M132, 收率为33.7%, 有机化合物M132的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1148。

实施例 16

有机化合物 M147 的合成路线如下:



中间体147-2的合成:

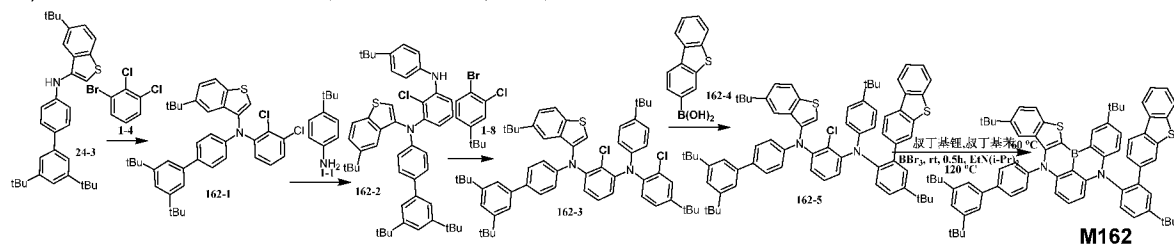
5 将中间体25-2 (10mmol)、中间体147-1 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100°C 搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体147-2摩尔量为7.36mmol, 产率: 73.6%, 中间体147-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=1024$.

10 有机化合物M147的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体147-2以及100ml干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至 -30°C , 逐滴加入 $t\text{-BuLi}$ (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至 60°C 反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30°C , 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至 0°C , 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120°C 搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M147, 收率为34.7%, 有机化合物M147的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=998$.

实施例17

有机化合物 M162 的合成路线如下:



中间体162-1的合成:

25 将中间体24-3 (10mmol)、中间体1-4 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120°C 搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体162-1摩尔量为5.35mmol, 产率: 53.5%, 中间体162-1的

大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=613。

中间体162-2的合成:

5 将中间体162-1 (10mmol)、化合物1-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体162-2, 摩尔量为7.34mmol, 产率为73.4%, 中间体162-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=726。

中间体162-3的合成:

10 将中间体162-2 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体162-3, 摩尔量为5.78mmol, 产率为57.8%, 中间体162-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果:
15 MS(ASAP)=896。

中间体162-5的合成:

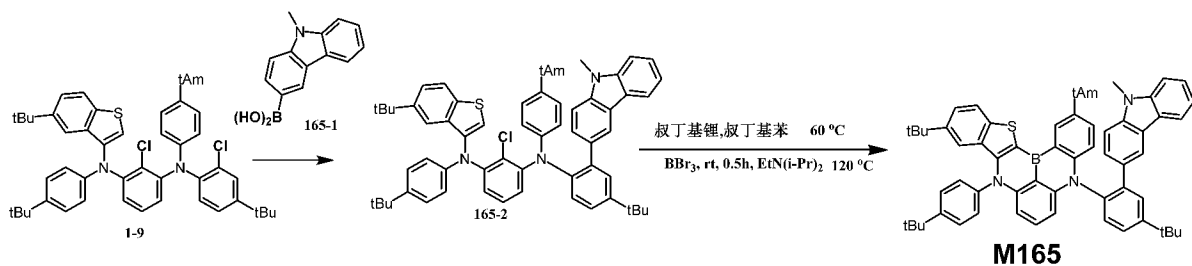
将中间体162-3 (10mmol)、中间体162-4 (10mmol)溶于1,4-二氧六环与水(21/2 ml)的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol)和碳酸钾(30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水
20 洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体162-5摩尔量为6.17mmol, 产率: 61.7%, 中间体162-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1040。

有机化合物M162的合成:

25 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体162-5以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶
30 液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M162, 收率为35.7%, 有机化合物M162的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1014。

实施例18

35 有机化合物M165的合成路线如下:



中间体 165-2 的合成:

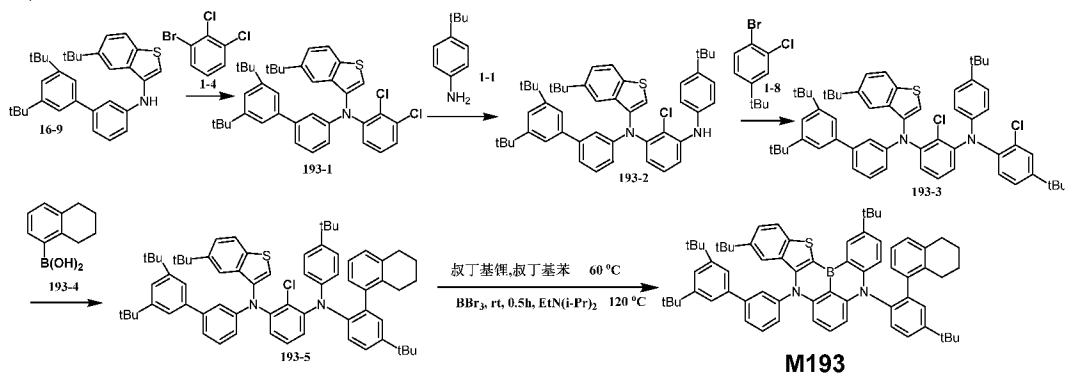
将中间体1-9 (10mmol)、中间体165-1 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体165-2摩尔量为7.38mmol, 产率: 73.8%, 中间体 165-2 的大气压固相分析探针质谱 (ASAP-MS) 结果: MS(ASAP)=919。

有机化合物M165的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体165-2以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M165, 收率为29.6%, 有机化合物M165的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=893。

实施例19

有机化合物M193的合成路线如下:



中间体193-1的合成:

将中间体16-9 (10mmol)、中间体1-4 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析

并重结晶得到中间体193-1摩尔量为7.56mmol，产率：75.6%，中间体193-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=613。

中间体193-2的合成：

将中间体193-1 (10mmol)、中间体1-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中，在氮气气氛下，120℃搅拌3h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体193-2摩尔量为7.13mmol，产率：71.3%，中间体193-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=726。

中间体193-3的合成：

将中间体193-2 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体193-3，摩尔量为5.29mmol，产率为52.9%，中间体193-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=892。

中间体193-5的合成：

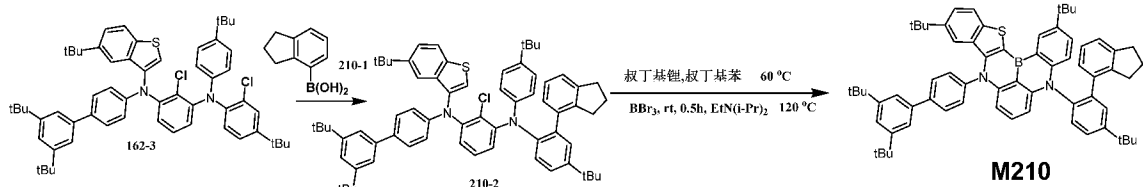
将中间体193-3 (10mmol)、中间体193-4 (10mmol)溶于1,4-二氧六环与水(21/2 ml)的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol)和碳酸钾 (30mmol)，在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体193-5摩尔量为6.56mmol，产率：65.6%，中间体193-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=988。

有机化合物M193的合成：

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体193-5以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M193，收率为29.6%，有机化合物M193的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=962。

实施例20

有机化合物M210的合成路线如下：



中间体210-2的合成:

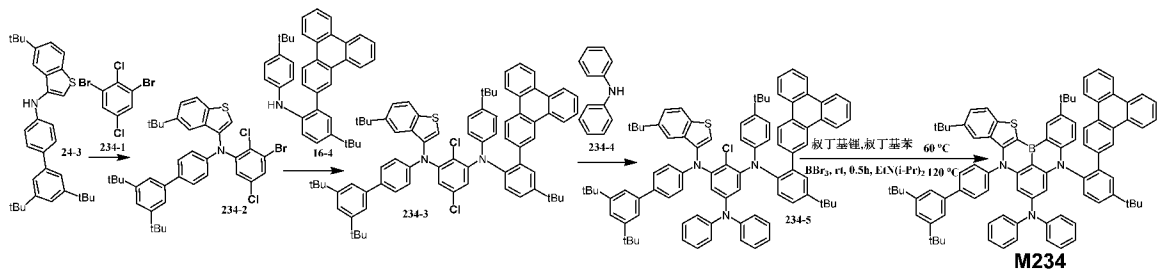
将中间体162-3 (10mmol)、中间体210-1 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100°C 搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体210-2摩尔量为7.38mmol, 产率: 73.8%, 中间体210-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=974$ 。

有机化合物M210的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体210-2以及100ml干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至-30°C, 逐滴加入 $t\text{-BuLi}$ (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至60°C反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30°C, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0°C, 加入42mmol N,N -二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120°C搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M210, 收率为32.8%, 有机化合物M210的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=948$ 。

实施例21

有机化合物M234的合成路线如下:



中间体234-2的合成:

将中间体24-3 (10mmol)、中间体234-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、 S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120°C 搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体234-2摩尔量为6.58mmol, 产率: 65.8%, 中间体234-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=691$ 。

中间体234-3的合成:

将中间体234-2 (10mmol)、化合物16-4 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体234-3, 摩尔量为7.07mmol, 产率为70.7%, 中间体234-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1118。

中间体234-5的合成:

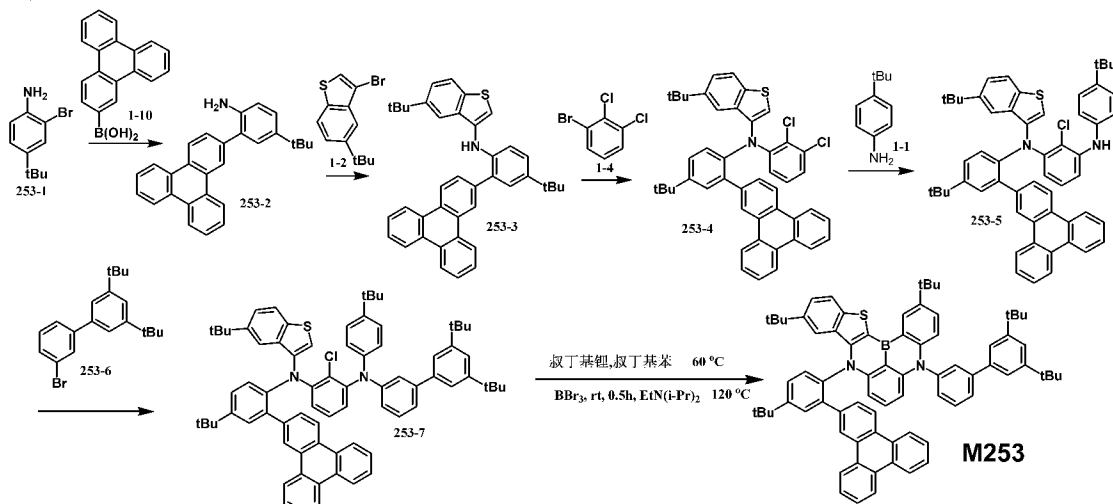
将中间体234-3 (10mmol)、化合物234-4 (10mmol)、Pd2(dba)3(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体234-5, 摩尔量为5.06mmol, 产率为50.6%, 中间体234-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1251。

有机化合物M234的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体234-5以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M234, 收率为22.6%, 有机化合物M234的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1225。

实施例22

有机化合物M253的合成路线如下:



中间体253-2的合成:

将中间体 253-1 (10mmol)、中间体 1-10 (10mmol) 溶于 1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃ 搅拌 6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 253-2 摩尔量为 7.69mmol, 产率: 76.9%, 中间体 253-2 的大气压固相分析探针质谱 (ASAP-MS) 结果: MS(ASAP)=375。

中间体253-3的合成:

将化合物253-2 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体253-3, 摩尔量为8.33mmol, 产率为83.3%, 中间体253-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=563。

中间体253-4的合成:

将化合物253-3 (10mmol)、化合物1-4 (10mmol)、 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体253-4, 摩尔量为6.75mmol, 产率为67.5%, 中间体253-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=707。

中间体253-5的合成:

将中间体253-4 (10mmol)、化合物1-1 (10mmol)、 Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 253-5, 摩尔量为7.24mmol, 产率为72.4%, 中间体253-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=820。

中间体253-7的合成:

将中间体253-5 (10mmol)、化合物253-6 (10mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体253-7, 摩尔量为5.38mmol, 产率为53.8%, 中间体253-7的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1084。

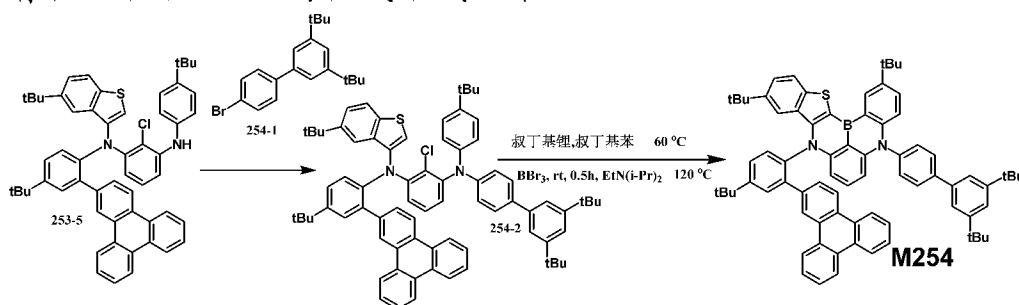
有机化合物M253的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体253-7以及100ml干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温

搅拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M253,收率为38.6%,有机化合物M253的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1058。

实施例23

有机化合物M254的合成路线如下:



中间体254-2的合成:

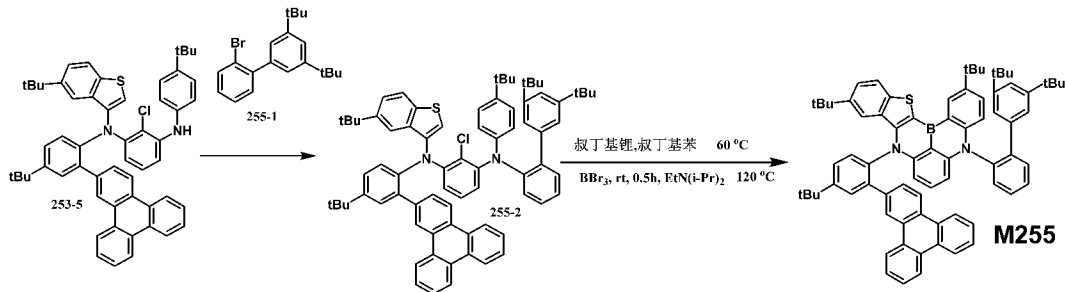
将中间体253-5 (10mmol)、化合物254-1 (10mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体254-2,摩尔量为5.19mmol,产率为51.9%,中间体254-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1084。

有机化合物M254的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体254-2以及100ml干燥的叔丁基苯,在 N_2 气氛中,冷却至-30℃,逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液,升高温度至60℃反应2小时,减压蒸除其中的正己烷溶剂;将反应液再次冷却至-30℃,加入三溴化硼(21mmol),升至室温下搅拌0.5小时,然后将反应液冷却至0℃,加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺,待滴加完毕,升温至室温搅拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M254,收率为42.5%,有机化合物M254的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1058。

实施例24

有机化合物M255的合成路线如下:



中间体255-2的合成:

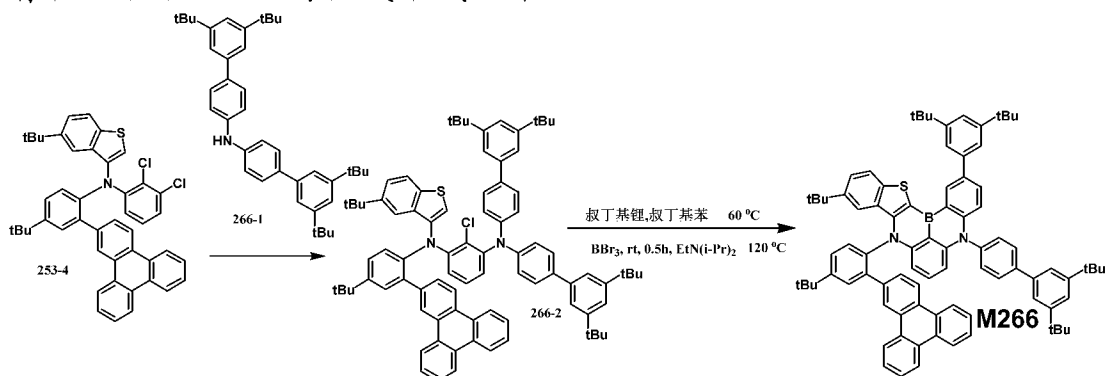
将中间体253-5 (10mmol)、化合物255-1 (10mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体255-2, 摩尔量为6.28mmol, 产率为62.8%, 中间体255-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1084。

有机化合物M255的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体255-2以及100ml干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M255, 收率为47.3%, 有机化合物M255的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1058。

实施例25

有机化合物M266的合成路线如下:



中间体266-2的合成:

将中间体253-4 (10mmol)、化合物266-1 (10mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂,

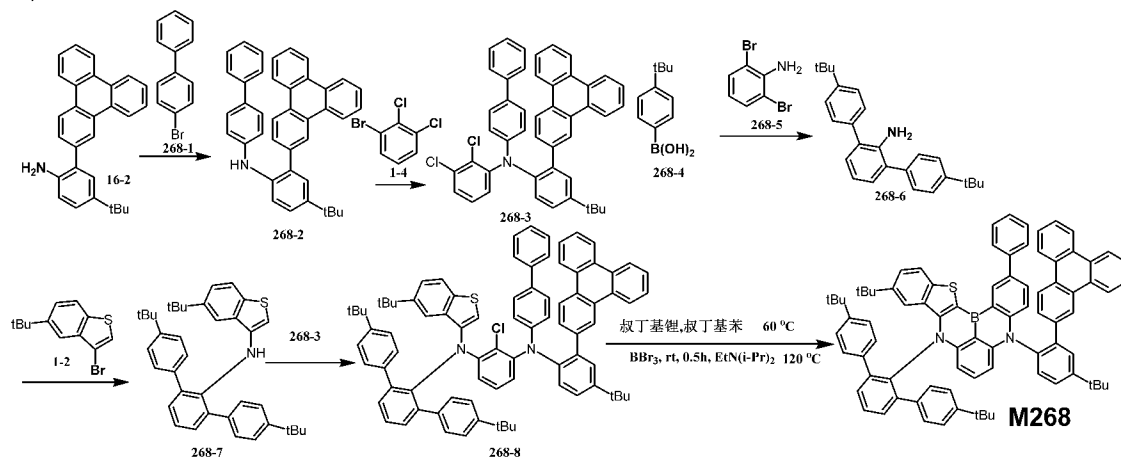
萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体266-2，摩尔量为6.37mmol，产率为63.7%，中间体266-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1216。

有机化合物M266的合成：

- 5 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体266-2以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M266，收率为36.4%，有机化合物M266的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1190。

15 实施例26

有机化合物M268的合成路线如下：



中间体268-2的合成：

- 20 将化合物16-2（10mmol）、化合物268-1（10mmol）、Pd(dba)₂（双二亚苄基丙酮钯，0.1mmol）、TTBP（三叔丁基膦，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体268-2，摩尔量为7.32mmol，产率为73.2%，中间体268-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)= 527。

中间体268-3的合成：

- 25 将化合物268-2（10mmol）、化合物1-4（10mmol）、Pd(dba)₂（双二亚苄基丙酮钯，0.1mmol）、TTBP（三叔丁基膦，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体268-3，摩尔量为6.51mmol，产率为65.1%，中间体268-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=671。

- 30 中间体268-6的合成：

将中间体268-4 (20mmol)、化合物268-5 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到
5 中间体268-6, 摩尔量为5.27mmol, 产率为52.7%, 中间体268-6的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=357。

中间体268-7的合成:

将中间体268-6 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠
10 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体268-7, 摩尔量为5.17mmol, 产率为51.7%, 中间体268-7的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=545。

中间体268-8的合成:

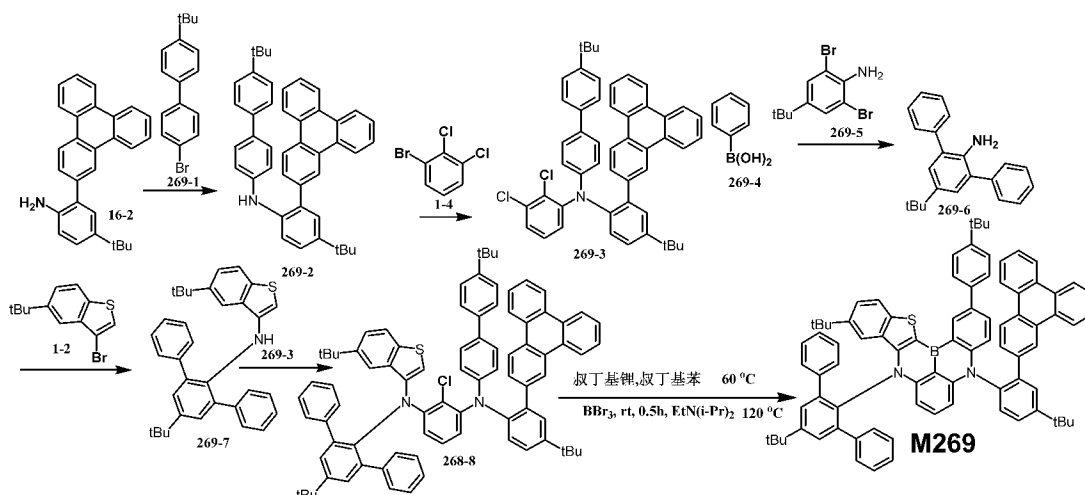
将中间体268-7 (10mmol)、中间体268-3 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下,
15 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体268-8摩尔量为7.02mmol, 产率: 70.2%, 中间体
20 268-8的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1180。

有机化合物M268的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体268-8以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再
25 次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产
30 品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M268, 收率为30.1%, 有机化合物M268的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1154。

实施例27

有机化合物M269的合成路线如下:



中间体269-2的合成:

将化合物16-2 (10mmol)、化合物269-1 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体269-2, 摩尔量为6.45mmol, 产率为64.5%, 中间体269-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=583。

中间体269-3的合成:

将化合物269-2 (10mmol)、化合物1-4 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体269-3, 摩尔量为6.91mmol, 产率为69.1%, 中间体269-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=727。

中间体269-6的合成:

将中间体269-4 (20mmol)、化合物269-5 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体269-6, 摩尔量为5.54mmol, 产率为55.4%, 中间体269-6的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=301。

中间体269-7的合成:

将中间体269-6 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体268-7, 摩尔量为5.49mmol, 产率为54.9%, 中间体269-7的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=489。

中间体269-8的合成:

将中间体269-7 (10mmol)、中间体269-3 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁

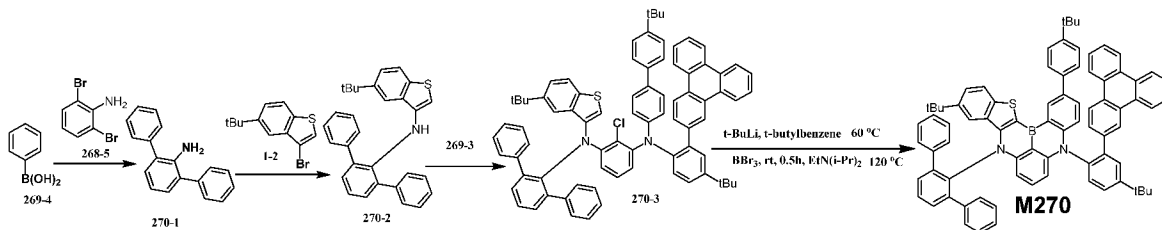
基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体269-8摩尔量为7.55mmol, 产率: 75.5%, 中间体269-8的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1180。

有机化合物M269的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体269-8以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M269, 收率为29.6%, 有机化合物M269的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1154。

实施例28

有机化合物M270的合成路线如下:



中间体270-1的合成:

将中间体269-4 (20mmol)、化合物268-5 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体269-6, 摩尔量为5.76mmol, 产率为57.6%, 中间体269-6的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=245。

中间体270-2的合成:

将中间体270-1 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体270-2, 摩尔量为4.97mmol, 产率为49.7%, 中间体270-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=433。

中间体270-3的合成:

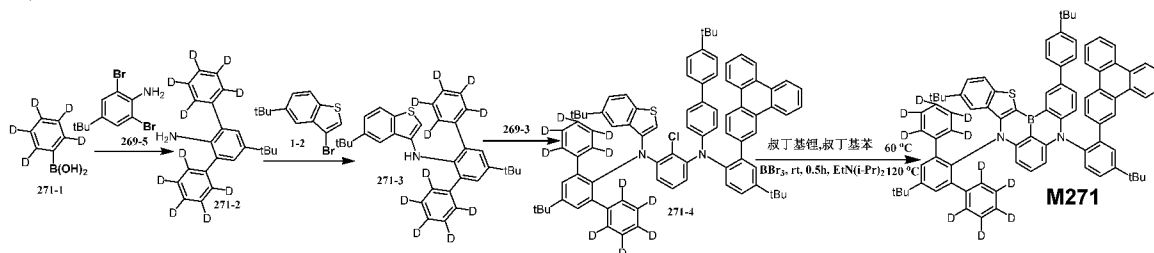
将中间体269-7 (10mmol)、中间体269-3 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体270-3摩尔量为8.47mmol, 产率: 84.7%, 中间体270-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1124。

有机化合物M270的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体270-3以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M270, 收率为35.7%, 有机化合物M270的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1098。

实施例29

有机化合物M271的合成路线如下:



中间体271-2的合成:

将中间体271-1 (20mmol)、化合物269-5 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体271-2, 摩尔量为5.87mmol, 产率为58.7%, 中间体271-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=311。

中间体271-3的合成:

将中间体271-2 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体271-3, 摩尔量为6.78mmol, 产率为67.8%, 中间体271-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=499。

中间体271-4的合成:

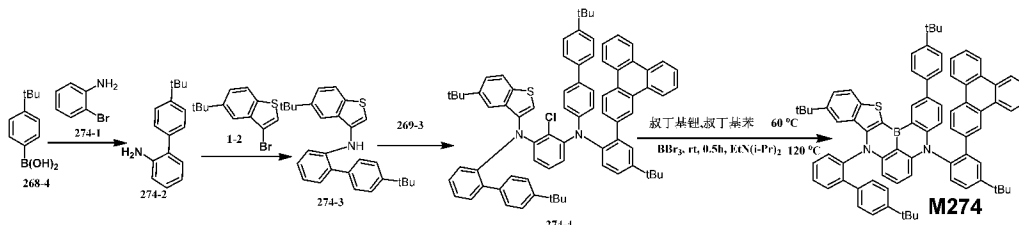
将中间体271-3 (10mmol)、中间体269-3 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下,
5 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体271-4摩尔量为8.09mmol, 产率: 80.9%, 中间体271-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1190。

有机化合物M271的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体271-4以及100ml干燥的叔丁基苯,
10 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶
15 剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M271, 收率为37.1%, 有机化合物M271的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1164。

实施例30

20 有机化合物M274的合成路线如下:



中间体274-2的合成:

将中间体268-4 (10mmol)、化合物274-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下
25 100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体274-2, 摩尔量为6.34mmol, 产率为63.4%, 中间体274-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=225。

中间体274-3的合成:

30 将中间体274-2 (10mmol)、化合物1-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体274-3, 摩尔量为6.18mmol, 产率为61.8%, 中间体274-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果:

MS(ASAP)=413。

中间体274-4的合成:

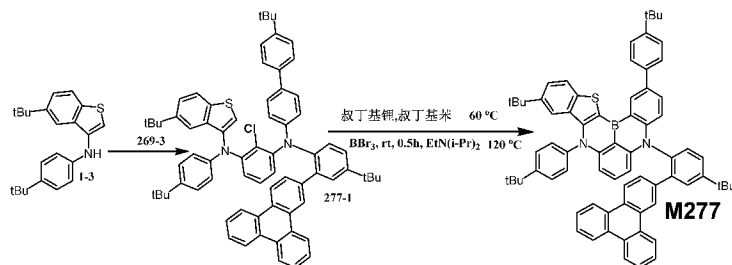
将中间体274-3 (10mmol)、中间体269-3 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体274-4摩尔量为8.39mmol, 产率: 83.9%, 中间体274-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1104。

有机化合物M274的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体274-4以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M274, 收率为32.1%, 有机化合物M274的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1078。

实施例31

有机化合物M277的合成路线如下:



中间体277-1的合成:

将中间体1-3 (10mmol)、中间体269-3 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体277-1摩尔量为8.15mmol, 产率: 81.5%, 中间体277-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1028。

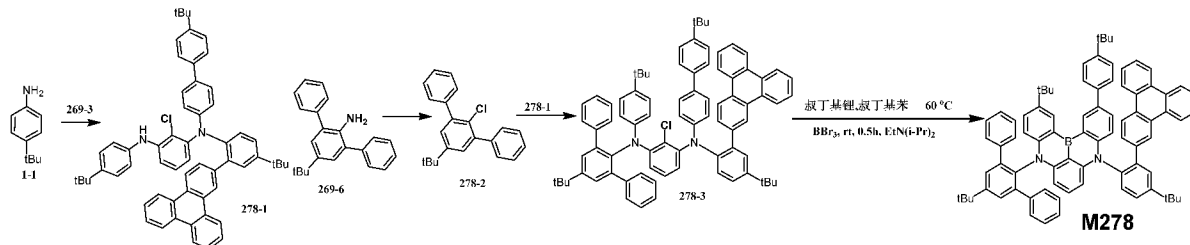
有机化合物M277的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体277-1以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再

次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M277，收率为32.7%，有机化合物M277的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1002。1H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.01 (s, 1H), 8.55 (s, 1H), 8.42 (dd, J = 19.1, 9.7 Hz, 4H), 7.91 (s, 1H), 7.78 (dt, J = 19.1, 10.1 Hz, 7H), 7.59 (t, J = 10.3 Hz, 3H), 7.55 – 7.33 (m, 9H), 7.23 (t, J = 7.4 Hz, 1H), 7.04 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 6.49 (s, 1H), 6.42 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 6.31 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 1.58 (s, 9H), 1.50 (s, 9H), 1.44 (s, 9H), 1.07 (s, 9H)。

实施例32

有机化合物M278的合成路线如下：



15 中间体 278-1 的合成：

将中间体 1-1 (10mmol)、中间体 269-3 (10mmol)，Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯，0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下，120℃搅拌 3h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体 278-1 摩尔量为 8.33mmol，产率：83.3%，中间体 278-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=840。

中间体 278-2 的合成：

在三口瓶中加入中间体278-1 (10mmol)、乙腈 50 mL。在65℃下加入CuCl 20 mmol和亚硝酸叔丁酯 (t-BuONO) 30 mmol。观察到气体逸出。添加完成后，停止放出气体，并将混合物冷却至室温并搅拌1小时。二氯甲烷萃取旋干后，石油醚溶解后过硅胶，得到中间体278-2摩尔量为8.76mmol，产率：87.6%，中间体278-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=320。

中间体 278-3 的合成：

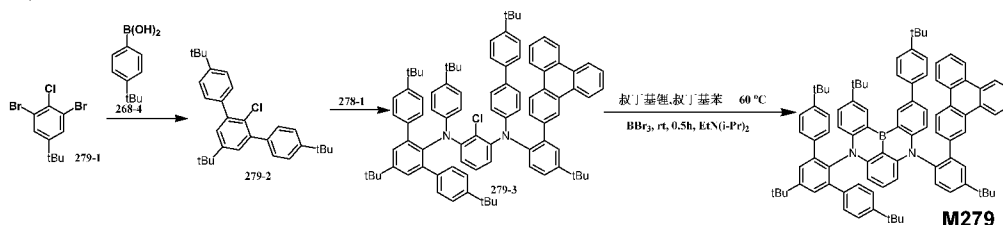
将中间体278-1 (10mmol)、中间体278-2 (10mmol)，Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯，0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下，120℃搅拌3h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体278-3摩尔量为7.54mmol，产率：75.4%，中间体 278-3 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1124。

有机化合物 M278 的合成:

- 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体278-3以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M278, 收率为37.6%, 有机化合物M278的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1098。

实施例 33

有机化合物 M279 的合成路线如下:



- 15 中间体 279-2 的合成:

- 将中间体 279-1 (10mmol)、中间体 268-4 (20mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 279-2 摩尔量为 8.09mmol, 产率: 80.9%, 中间体 279-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=432。

中间体 279-3 的合成:

- 将中间体279-2 (10mmol)、中间体278-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体279-3摩尔量为7.33mmol, 产率: 73.3%, 中间体 279-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1236。

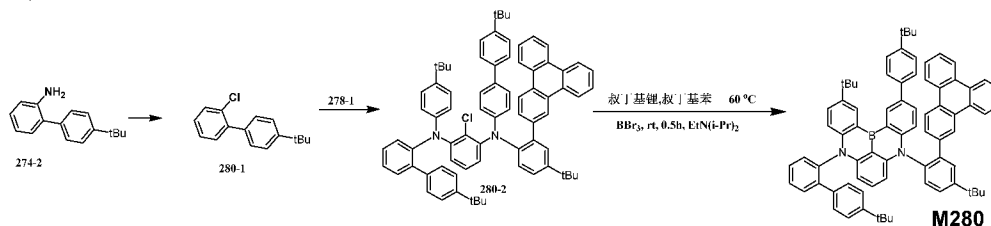
有机化合物 M279 的合成:

- 30 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体279-3以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅

拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M279,收率为45.7%,有机化合物M279的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1210。

实施例 34

有机化合物 M280 的合成路线如下:



中间体 280-1 的合成:

在三口瓶中加入中间体 274-2 (10mmol)、乙腈 50 mL。在 65℃ 下加入 CuCl 20 mmol 和亚硝酸叔丁酯 (t-BuONO) 30 mmol。观察到气体逸出。添加完成后,停止放出气体,并将混合物冷却至室温并搅拌 1 小时。二氯甲烷萃取旋干后,石油醚溶解后过硅胶,得到中间体 280-1 摩尔量为 8.92mmol,产率: 89.2%, 中间体 280-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=244。

中间体 280-2 的合成:

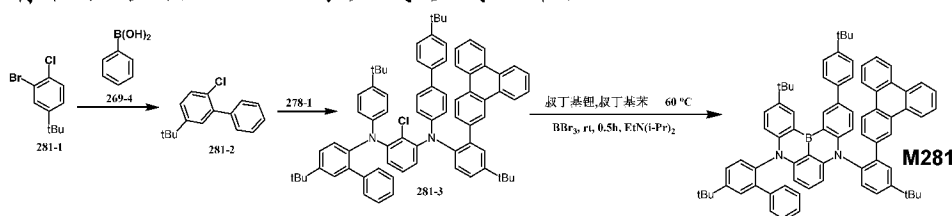
将中间体280-1 (10mmol)、中间体278-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下,120℃搅拌3h;冷却后,旋蒸除去大部分溶剂,然后萃取并水洗分液,有机相柱层析并重结晶得到中间体280-2摩尔量为7.13mmol,产率: 71.3%, 中间体 280-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1048。

有机化合物 M280 的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体280-2以及100ml干燥的叔丁基苯,在N₂气氛中,冷却至-30℃,逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液,升高温度至60℃反应2小时,减压蒸除其中的正己烷溶剂;将反应液再次冷却至-30℃,加入三溴化硼(21mmol),升至室温下搅拌0.5小时,然后将反应液冷却至0℃,加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺,待滴加完毕,升温至室温搅拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M280,收率为34.8%,有机化合物M280的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1022。

实施例 35

有机化合物 M281 的合成路线如下:



中间体 281-2 的合成:

将中间体 281-1 (10mmol)、中间体 269-4 (20mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120°C 搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 281-2 摩尔量为 8.38mmol, 产率: 83.8%, 中间体 281-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=244。

中间体 281-3 的合成:

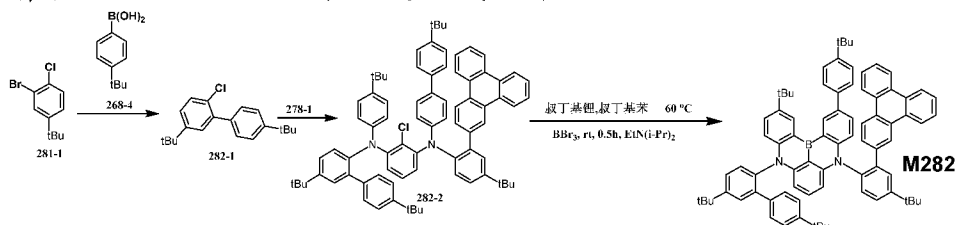
将中间体 281-2 (10mmol)、中间体 278-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120°C 搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 281-3 摩尔量为 6.79mmol, 产率: 67.9%, 中间体 281-3 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1048。

有机化合物 M281 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 281-3 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30°C, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60°C 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30°C, 加入三溴化硼 (21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0°C, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120°C 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M281, 收率为 42.8%, 有机化合物 M281 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1022。

实施例 36

有机化合物 M282 的合成路线如下:



中间体 282-1 的合成:

将中间体 281-1 (10mmol)、中间体 268-4 (20mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 282-1 摩尔量为 7.46mmol, 产率: 74.6%, 中间体 282-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=300。

中间体 282-2 的合成:

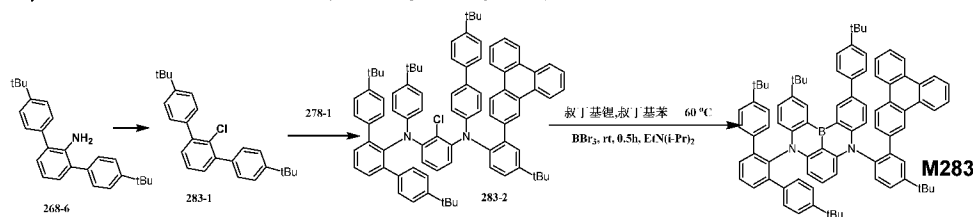
将中间体 281-2 (10mmol)、中间体 278-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 282-2 摩尔量为 6.13mmol, 产率: 61.3%, 中间体 282-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1104。

有机化合物 M282 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 282-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M282, 收率为 33.7%, 有机化合物 M282 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1078。

实施例 37

有机化合物 M283 的合成路线如下:



中间体 283-1 的合成:

在三口瓶中加入中间体 268-6 (10mmol)、乙腈 50 mL。在 65℃下加入 CuCl 20 mmol 和亚硝酸叔丁酯 (t-BuONO) 30 mmol。观察到气体逸出。添加完成后, 停止放出气体, 并将混合物冷却至室温并搅拌 1 小时。二氯甲烷萃取旋干后, 石油醚溶解后过硅胶, 得到中间体 283-1 摩尔量为 9.02mmol, 产率: 90.2%, 中间体 283-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)= 376。

中间体 283-2 的合成:

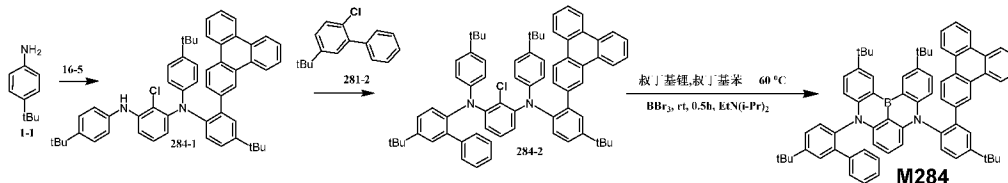
将中间体 283-1 (10mmol)、中间体 278-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 283-2 摩尔量为 6.97mmol, 产率: 69.7%, 中间体 283-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1180。

有机化合物 M283 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 283-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M283, 收率为 36.8%, 有机化合物 M283 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1154。

实施例 38

有机化合物 M284 的合成路线如下:



中间体 284-1 的合成:

将中间体 1-1 (10mmol)、中间体 16-5 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 284-1 摩尔量为 8.25mmol, 产率: 82.5%, 中间体 284-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=764。

中间体 284-2 的合成:

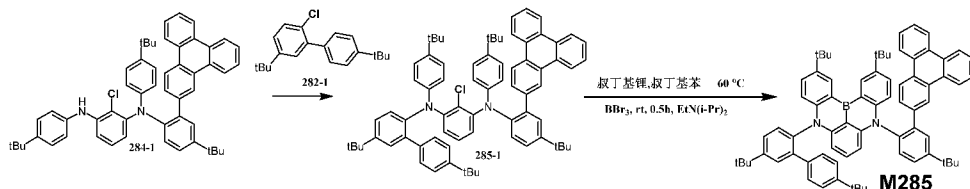
将中间体 284-1 (10mmol)、中间体 281-2 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 284-2 摩尔量为 7.31mmol, 产率: 73.1%, 中间体 284-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=972。

有机化合物 M284 的合成:

- 250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 284-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至 $-30^\circ C$, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 $60^\circ C$ 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 $-30^\circ C$, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 $0^\circ C$, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 $120^\circ C$ 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M284, 收率 47.1%, 有机化合物 M284 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=946。

实施例 39

有机化合物 M285 的合成路线如下:



- 15 中间体 285-1 的合成:

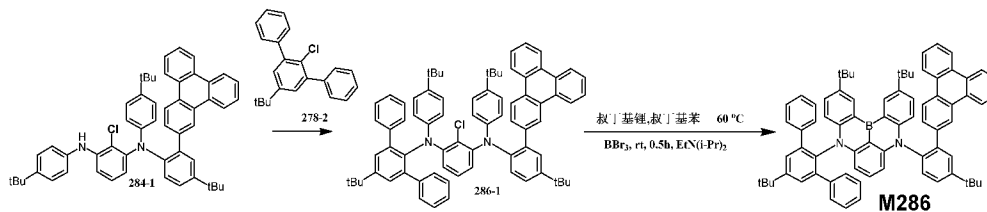
- 将中间体 284-1 (10mmol)、中间体 282-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, $120^\circ C$ 搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 285-1 摩尔量为 8.97mmol, 产率: 89.7%, 中间体 285-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1028。

有机化合物 M285 的合成:

- 250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 285-1 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至 $-30^\circ C$, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 $60^\circ C$ 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 $-30^\circ C$, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 $0^\circ C$, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 $120^\circ C$ 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M285, 收率 40.8%, 有机化合物 M285 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1002。

实施例 40

有机化合物 M286 的合成路线如下:



中间体 286-1 的合成:

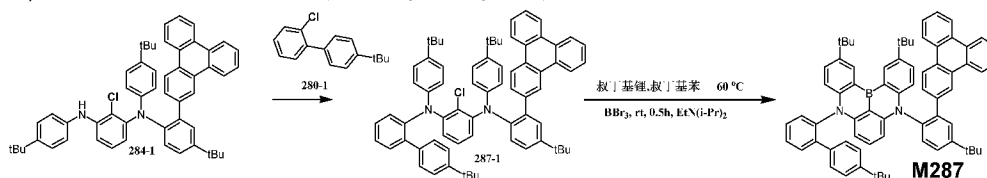
将中间体284-1 (10mmol)、中间体278-2 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体286-1摩尔量为8.45mmol, 产率: 84.5%, 中间体286-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1048。

有机化合物 M286 的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体286-1以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M286, 收率47.3%, 有机化合物M286的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1022。

实施例 41

有机化合物 M287 的合成路线如下:



中间体 287-1 的合成:

将中间体284-1 (10mmol)、中间体280-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体287-1摩尔量为8.22mmol, 产率: 82.2%, 中间体287-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=972。

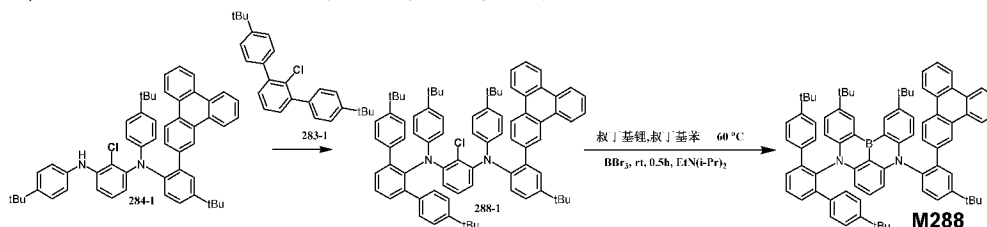
有机化合物 M287 的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体287-1以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶

液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M287，收率36.7%，有机化合物M287的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=946。

实施例 42

有机化合物 M288 的合成路线如下：



中间体 288-1 的合成：

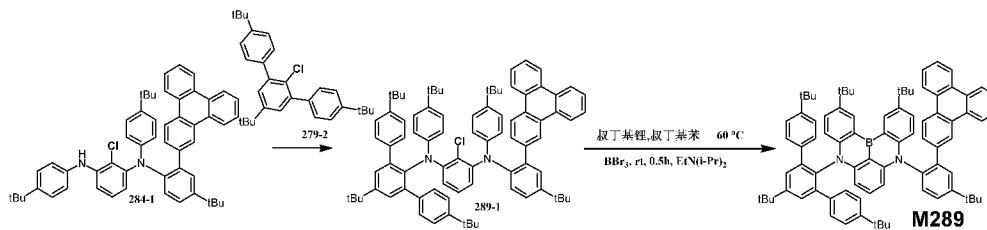
将中间体284-1 (10mmol)、中间体283-1 (10mmol)，Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯，0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中，在氮气气氛下，120℃搅拌3h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体288-1摩尔量为9.12mmol，产率：91.2%，中间体288-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1104。

有机化合物 M288 的合成：

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 288-1 以及 100ml 干燥的叔丁基苯，在 N₂ 气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液，升高温度至 60℃反应 2 小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌 0.5 小时，然后将反应液冷却至 0℃，加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至 120℃搅拌 3 小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物 M288，收率 35.1%，有机化合物 M288 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1078。

实施例 43

有机化合物 M289 的合成路线如下：



中间体 289-1 的合成:

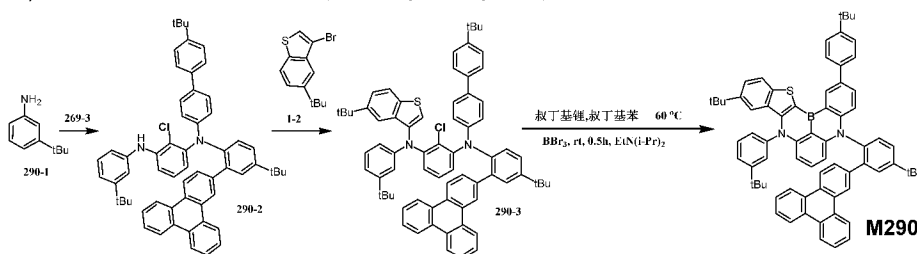
将中间体 284-1 (10mmol)、中间体 279-2 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 289-1 摩尔量为 8.06mmol, 产率: 80.6%, 中间体 289-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1160。

有机化合物 M289 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 288-1 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃ 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30℃, 加入三溴化硼 (21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M289, 收率 33.6%, 有机化合物 M289 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1134。

实施例 44

有机化合物 M290 的合成路线如下:



中间体 290-2 的合成:

将中间体 290-1 (10mmol)、中间体 269-3 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 290-2 摩尔量为 8.15mmol, 产率: 81.5%, 中间体 290-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=840。

中间体 290-3 的合成:

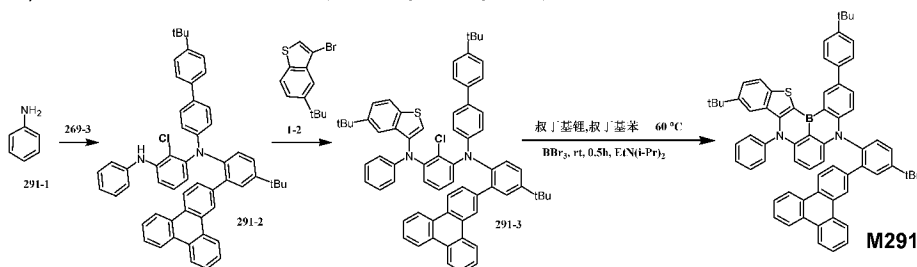
将中间体290-2 (10mmol)、中间体1-2 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体290-3摩尔量为7.39mmol, 产率: 73.9%, 中间体290-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1028。

有机化合物 M290 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 290-3 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至 60℃反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M290, 收率为 33.7%, 有机化合物 M290 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1002。
¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.02 (s, 1H), 8.57 (d, J = 18.8 Hz, 1H), 8.48 – 8.36 (m, 4H), 7.92 (s, 1H), 7.87 – 7.75 (m, 5H), 7.72 (d, J = 7.8 Hz, 6H), 7.69 – 7.61 (m, 4H), 7.53 – 7.32 (m, 4H), 7.20 (d, J = 16.8 Hz, 1H), 7.09 – 6.96 (m, 1H), 6.51 – 6.26 (m, 3H), 1.58 (s, 9H), 1.44 (s, 9H), 1.39 (s, 9H), 1.06 (s, 9H)。

实施例 45

有机化合物 M291 的合成路线如下:



中间体 291-2 的合成:

将中间体 291-1 (10mmol)、中间体 269-3 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠 (30mmol)溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 291-2 摩尔量为 8.84mmol, 产率: 88.4%, 中间体 291-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=784。

中间体 291-3 的合成:

将中间体291-2 (10mmol)、中间体1-2 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基

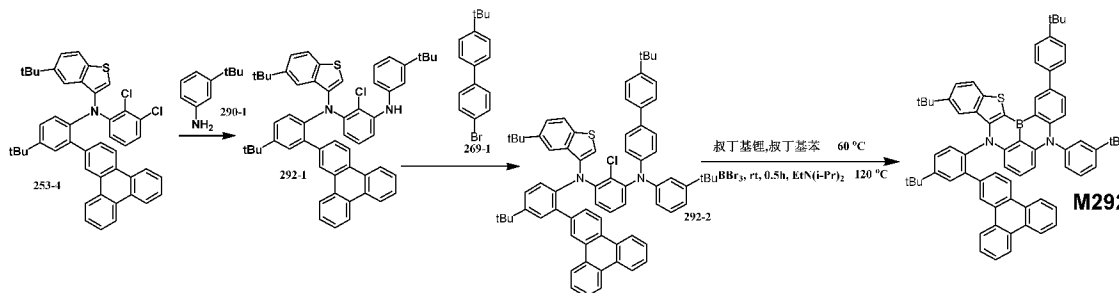
-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体291-3摩尔量为7.22mmol, 产率: 72.2%, 中间体291-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=972。

有机化合物 M291 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 291-3 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M291, 收率为 38.9%, 有机化合物 M291 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=946。

实施例 46

有机化合物 M292 的合成路线如下:



中间体 292-1 的合成:

将中间体 253-4 (10mmol)、化合物 290-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 292-1, 摩尔量为 7.38mmol, 产率为 73.8%, 中间体 292-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=820。

中间体 292-2 的合成:

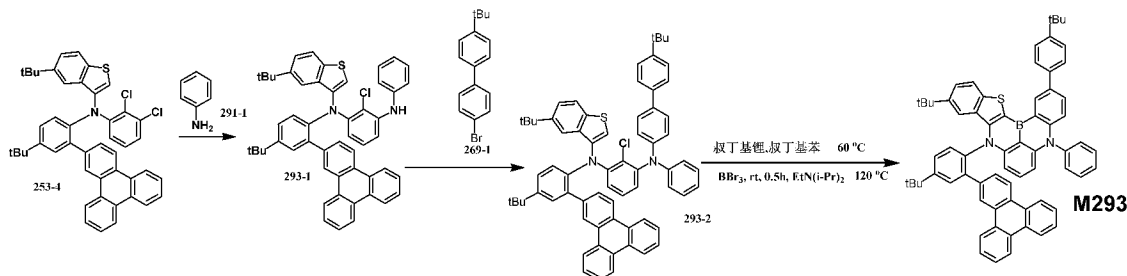
将中间体 292-1 (10mmol)、化合物 269-1 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 292-2, 摩尔量为 6.62mmol, 产率为 66.2%, 中间体 292-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1028。

有机化合物 M292 的合成:

- 250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 292-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至 $-30^\circ C$, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 $60^\circ C$ 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 $-30^\circ C$, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 $0^\circ C$, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 $120^\circ C$ 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M292, 收率为 43.6%, 有机化合物 M292 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1002。

实施例 47

有机化合物 M293 的合成路线如下:



中间体 293-1 的合成:

- 将中间体 253-4 (10mmol)、化合物 291-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 $100^\circ C$ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 293-1, 摩尔量为 7.08mmol, 产率为 70.8%, 中间体 293-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=764。

中间体 293-2 的合成:

- 将中间体 293-1 (10mmol)、化合物 269-1 (10mmol)、 $Pd_2(dba)_3$ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 $100^\circ C$ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 293-2, 摩尔量为 6.51mmol, 产率为 65.1%, 中间体 293-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=972。

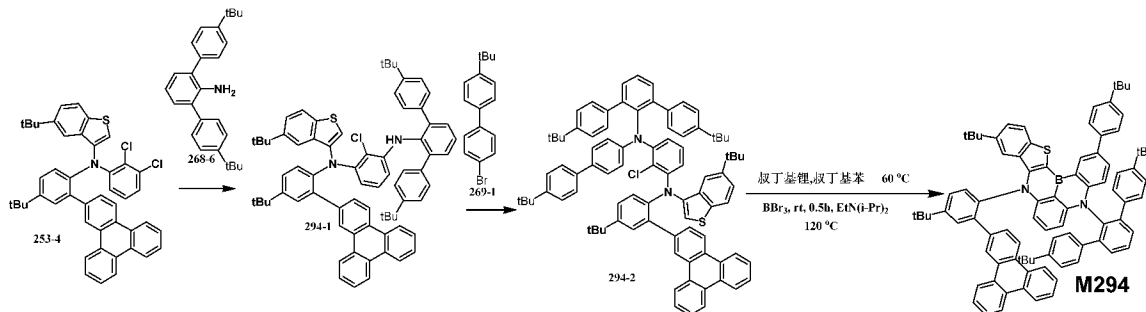
有机化合物 M293 的合成:

- 250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 293-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至 $-30^\circ C$, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 $60^\circ C$ 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 $-30^\circ C$, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 $0^\circ C$, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升

温至室温搅拌，再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物 M293，收率为 41.1%，有机化合物 M293 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=946。

实施例 48

有机化合物 M294 的合成路线如下：



中间体 294-1 的合成：

10 将中间体 253-4 (10mmol)、化合物 268-6 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体 294-1，摩尔量为 7.37mmol，产率为 73.7%，中间体 294-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1028。

中间体 294-2 的合成：

20 将中间体 294-1 (10mmol)、化合物 269-1 (10mmol)、Pd2(dba)3 (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体 294-2，摩尔量为 6.89mmol，产率为 68.9%，中间体 294-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1236。

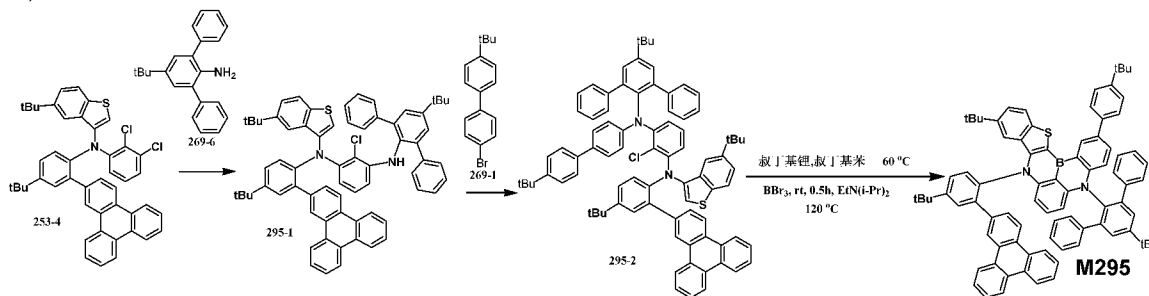
有机化合物 M294 的合成：

25 250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 294-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯，在 N₂ 气氛中，冷却至 -30℃，逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液，升高温度至 60℃ 反应 2 小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至 -30℃，加入三溴化硼 (21mmol)，升至室温下搅拌 0.5 小时，然后将反应液冷却至 0℃，加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重

结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物 M294，收率为 43.7%，有机化合物 M294 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1210。

实施例 49

有机化合物 M295 的合成路线如下：



中间体 295-1 的合成：

将中间体 253-4 (10mmol)、化合物 269-6 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体 295-1，摩尔量为 8.23mmol，产率为 82.3%，中间体 295-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=972。

中间体 295-2 的合成：

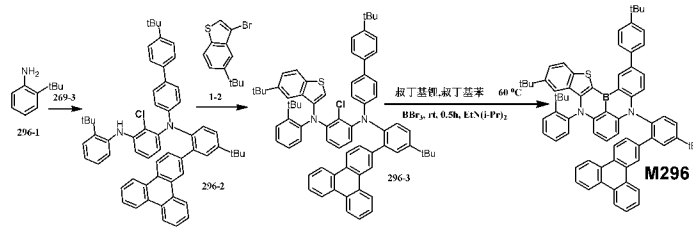
将中间体 295-1 (10mmol)、化合物 269-1 (10mmol)、Pd2(dba)3 (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体 295-2，摩尔量为 7.46mmol，产率为 74.6%，中间体 295-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1180。

有机化合物 M295 的合成：

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 295-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯，在 N₂ 气氛中，冷却至 -30℃，逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液，升高温度至 60℃ 反应 2 小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至 -30℃，加入三溴化硼 (21mmol)，升至室温下搅拌 0.5 小时，然后将反应液冷却至 0℃，加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物 M295，收率为 36.1%，有机化合物 M295 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1154。

实施例 50

有机化合物 M296 的合成路线如下：



中间体 296-2 的合成:

将中间体 296-1 (10mmol)、中间体 269-3 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 296-2 摩尔量为 8.89mmol, 产率: 88.9%, 中间体 296-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=840。

中间体 296-3 的合成:

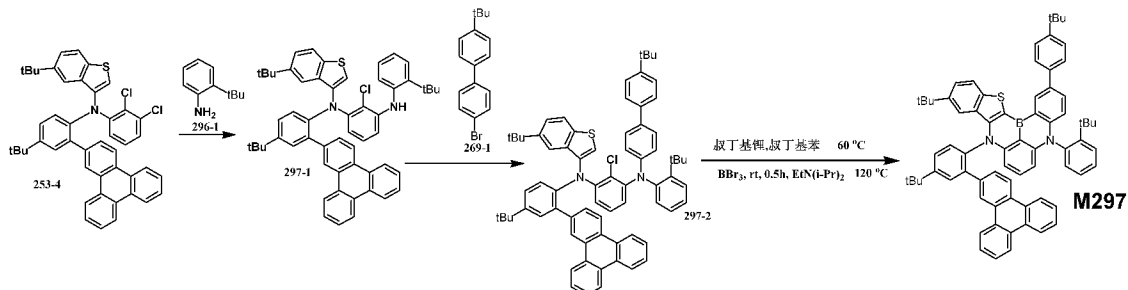
将中间体 296-2 (10mmol)、中间体 1-2 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌 3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 296-3 摩尔量为 7.97mmol, 产率: 79.7%, 中间体 296-3 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1028。

有机化合物 M296 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 296-3 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M296, 收率为 39.2%, 有机化合物 M296 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1002。

实施例 51

有机化合物 M297 的合成路线如下:



中间体 297-1 的合成:

将中间体 253-4 (10mmol)、化合物 296-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 297-1, 摩尔量为 7.81mmol, 产率为 78.1%, 中间体 297-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=820。

中间体 297-2 的合成:

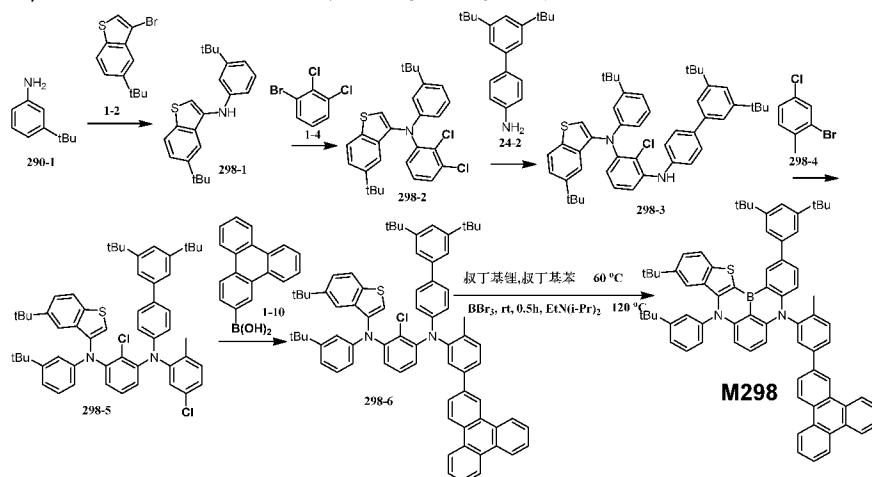
将中间体 297-1 (10mmol)、化合物 269-1 (10mmol)、Pd2(dba)3 (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 297-2, 摩尔量为 6.81mmol, 产率为 68.1%, 中间体 297-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1028。

有机化合物 M297 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 297-2 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃ 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30℃, 加入三溴化硼 (21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M297, 收率为 39.5%, 有机化合物 M297 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1002。

实施例 52

有机化合物 M298 的合成路线如下:



中间体 298-1 的合成:

将化合物 290-1 (10mmol)、化合物 1-2 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 298-1, 摩尔量为 7.33mmol, 产率为 73.3%, 中间体 298-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=337。

中间体 298-2 的合成:

将化合物 298-1 (10mmol)、化合物 1-4 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苄基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 298-2, 摩尔量为 8.25mmol, 产率为 82.5%, 中间体 298-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=481。

中间体 298-3 的合成:

将中间体 298-2 (10mmol)、化合物 24-2 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 298-3, 摩尔量为 6.54mmol, 产率为 65.4%, 中间体 298-3 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=726。

中间体 298-5 的合成:

将中间体 298-3 (10mmol)、化合物 298-4 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 298-5, 摩尔量为 7.38mmol, 产率为 73.8%, 中间体 298-5 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=850。

中间体 298-6 的合成:

将中间体 298-5 (10mmol)、中间体 1-10 (10mmol) 溶于 1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入 Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌 6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体 298-6 摩尔量为 8.76mmol, 产率: 87.6%, 中间体 298-6 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1042。

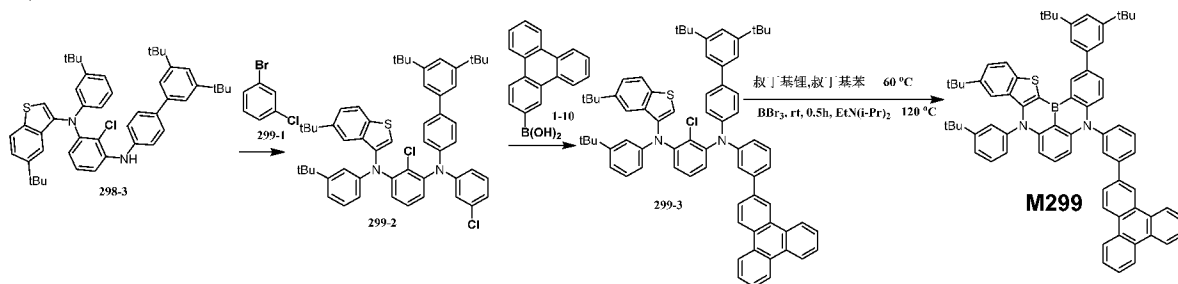
有机化合物 M298 的合成:

250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 298-6 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30℃, 加入三溴化硼 (21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升

温至室温搅拌，再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物 M298，收率为 33.7%，有机化合物 M298 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1016。

实施例 53

有机化合物 M299 的合成路线如下：



中间体299-2的合成：

将中间体298-3 (10mmol)、化合物299-1 (10mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体299-2，摩尔量为 7.10mmol，产率为 71.0%，中间体299-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：

MS(ASAP)=836。

中间体299-3的合成：

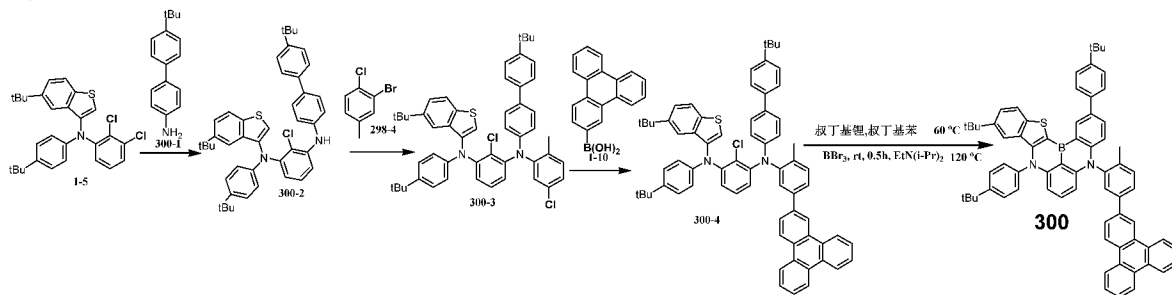
将中间体299-2 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中，并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol)，在氮气气氛下，100℃ 搅拌 6h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体299-3摩尔量为 8.11mmol，产率：81.1%，中间体299-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1028。

有机化合物 M299 的合成：

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体299-3以及100ml干燥的叔丁基苯，在 N_2 气氛中，冷却至 -30℃，逐滴加入 $t\text{-BuLi}$ (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液，升高温度至 60℃ 反应 2 小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至 -30℃，加入三溴化硼 (21mmol)，升至室温下搅拌 0.5 小时，然后将反应液冷却至 0℃，加入 42mmol N,N -二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物 M299，收率为 39.6%，有机化合物 M299 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1002。

实施例 54

有机化合物 M300 的合成路线如下:



中间体300-2的合成:

- 5 将中间体1-5 (10mmol)、化合物300-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体300-2,摩尔量为7.26mmol,产率为72.6%,中间体300-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=670。

中间体300-3的合成:

- 10 将中间体300-2 (10mmol)、化合物298-4 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体300-3,摩尔量为6.85mmol,产率为68.5%,中间体300-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=794。

中间体300-4的合成:

- 20 将中间体300-3 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol)溶于1,4-二氧六环与水(21/2 ml)的混合溶剂中,并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol)和碳酸钾(30mmol),在氮气气氛下,100℃搅拌6h;冷却后,旋蒸除去大部分溶剂,然后萃取并水洗分液,有机相柱层析并重结晶得到中间体300-4摩尔量为7.79mmol,产率: 77.9%,中间体300-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=986。

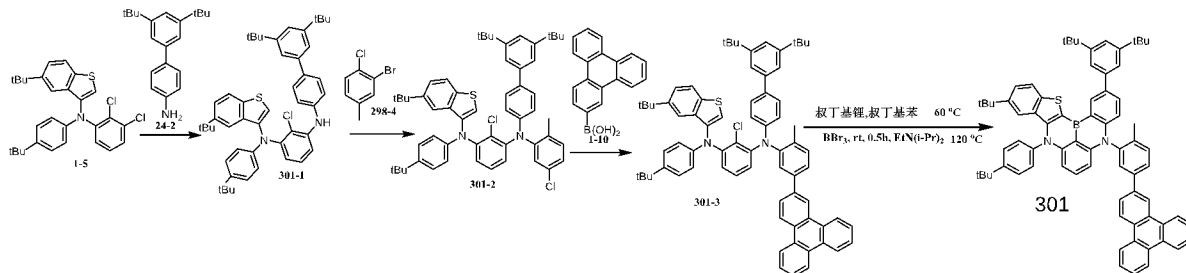
- 25 有机化合物M300的合成:

- 30 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体300-4以及100ml干燥的叔丁基苯,在N₂气氛中,冷却至-30℃,逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液,升高温度至60℃反应2小时,减压蒸除其中的正己烷溶剂;将反应液再次冷却至-30℃,加入三溴化硼(21mmol),升至室温下搅拌0.5小时,然后将反应液冷却至0℃,加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺,待滴加完毕,升温至室温搅拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产

品淡黄色固体粉末，即有机化合物M300，收率为36.7%，有机化合物M300的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=960。

实施例55

有机化合物M301的合成路线如下：



中间体 301-1 的合成：

将中间体1-5 (10mmol)、化合物24-2 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体301-1，摩尔量为7.88mmol，产率为78.8%，中间体301-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=726。

中间体301-2的合成：

将中间体301-1 (10mmol)、化合物298-4 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体301-2，摩尔量为6.21mmol，产率为62.1%，中间体301-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=850。

中间体301-3的合成：

将中间体301-2 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol)，在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后，旋蒸除去大部分溶剂，然后萃取并水洗分液，有机相柱层析并重结晶得到中间体301-3摩尔量为7.53mmol，产率：75.3%，中间体301-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1042。

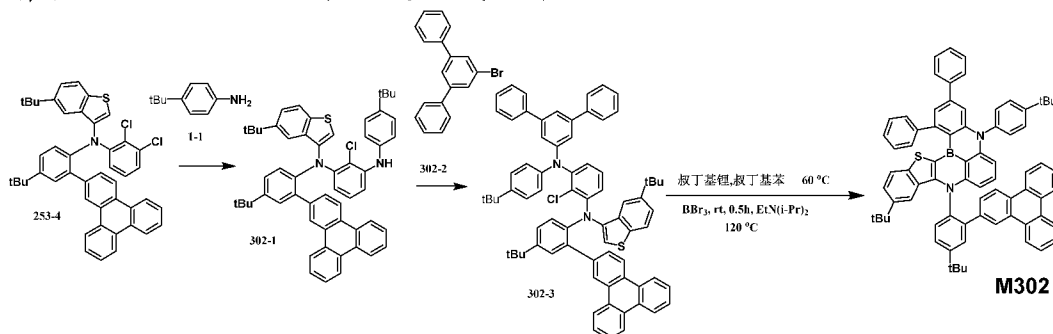
有机化合物M301的合成：

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体301-3以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液

与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M301,收率为37.9%,有机化合物M301的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1016。

5 实施例 56

有机化合物 M302 的合成路线如下:



中间体 302-1 的合成:

10 将中间体 253-4 (10mmol)、化合物 1-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 302-1, 摩尔量为 8.45mmol, 产率为 84.5%, 中间体 302-1 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=820。

15 中间体 302-3 的合成:

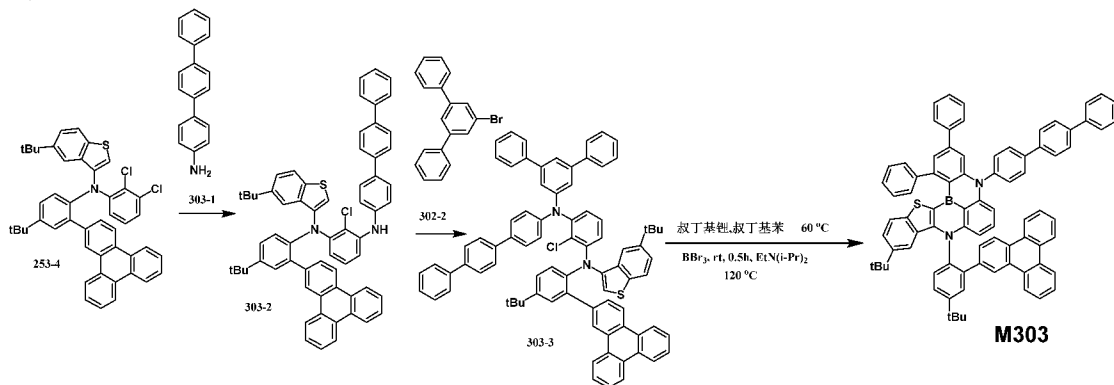
20 将中间体302-1 (10mmol)、化合物302-2 (10mmol)、Pd2(dba)3(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体302-3, 摩尔量为 7.59mmol, 产率为 75.9%, 中间体302-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1048。

有机化合物M302的合成:

25 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体302-3以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M302, 收率为36.3%, 有机化合物M302的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1022。

实施例 57

有机化合物 M303 的合成路线如下:



中间体 303-2 的合成:

- 5 将中间体 253-4 (10mmol)、化合物 303-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 303-2, 摩尔量为 8.31mmol, 产率为 83.1%, 中间体 303-2 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=916。

中间体 303-3 的合成:

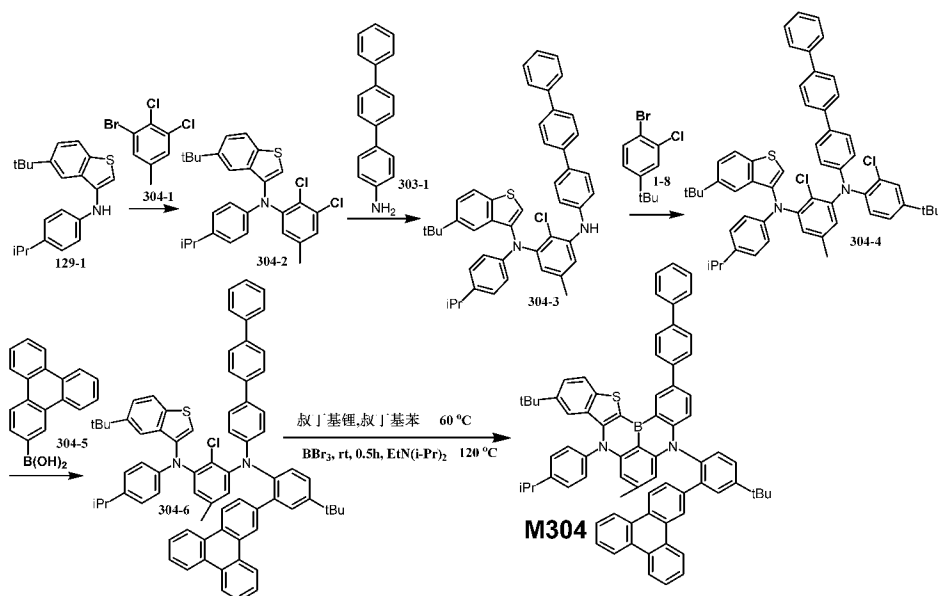
- 15 将中间体 303-2 (10mmol)、化合物 302-2 (10mmol)、Pd2(dba)3 (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下 100℃ 搅拌 6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体 303-3, 摩尔量为 7.17mmol, 产率为 71.7%, 中间体 303-3 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1144。

有机化合物 M303 的合成:

- 20 250ml 的三口烧瓶中加入 10mmol 中间体 303-3 以及 100ml 干燥的叔丁基苯, 在 N₂ 气氛中, 冷却至 -30℃, 逐滴加入 t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol) 的正己烷溶液, 升高温度至 60℃ 反应 2 小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至 -30℃, 加入三溴化硼 (21mmol), 升至室温下搅拌 0.5 小时, 然后将反应液冷却至 0℃, 加入 42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至 120℃ 搅拌 3 小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物 M303, 收率为 37.4%, 有机化合物 M303 的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1118。

实施例 58

- 30 有机化合物 M304 的合成路线如下:



中间体304-2的合成:

将化合物129-1 (10mmol)、化合物304-1 (10mmol)、Pd(dba)₂ (双二亚苧基丙酮钯, 0.1mmol)、TTBP (三叔丁基膦, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体304-2, 摩尔量为7.03mmol, 产率为70.3%, 中间体304-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=481。

中间体304-3的合成:

将中间体304-2 (10mmol)、化合物303-1 (10mmol)、Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体304-3, 摩尔量为6.87mmol, 产率为68.7%, 中间体304-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=690。

中间体304-4的合成:

将中间体304-3 (10mmol)、化合物1-8 (10mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体304-4, 摩尔量为6.87mmol, 产率为68.7%, 中间体304-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=856。

中间体304-6的合成:

将中间体304-4 (10mmol)、中间体304-5 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体304-6摩尔量为7.22mmol, 产率: 72.2%, 中间体304-6的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果:

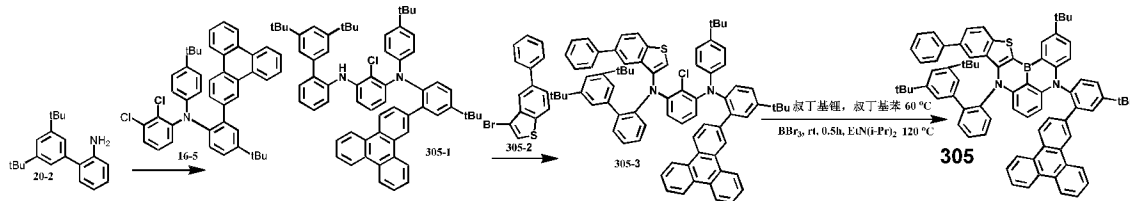
MS(ASAP)=1048。

有机化合物M304的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体304-6以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应；水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相，旋蒸掉其中的溶剂，得到粗品，用快速硅胶柱纯化得到纯品；用甲苯与乙酸乙酯重结晶，得产品淡黄色固体粉末，即有机化合物M304，收率为34.8%，有机化合物M304的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1022。

实施例59

有机化合物M305的合成路线如下:



中间体305-1的合成:

将中间体20-2（10mmol）、化合物16-5（10mmol）溶于1,4-二氧六环与水（21/2 ml）的混合溶剂中，并加入Pd(PPh₃)₄（0.1mmol）和碳酸钾（30mmol），在氮气气氛下，100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体305-1，摩尔量为8.27mmol，产率为82.7%，中间体305-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=896。

中间体305-3的合成:

将中间体305-1（10mmol）、化合物305-2（10mmol）、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos（2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯，0.2mmol）和叔丁醇钠（30mmol）溶于甲苯中，在氮气气氛下100℃搅拌6h；冷却后旋蒸除去溶剂，萃取并水洗分液，有机相柱层析，得到中间体305-3，摩尔量为7.69mmol，产率为76.9%，中间体305-3的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果：MS(ASAP)=1104。

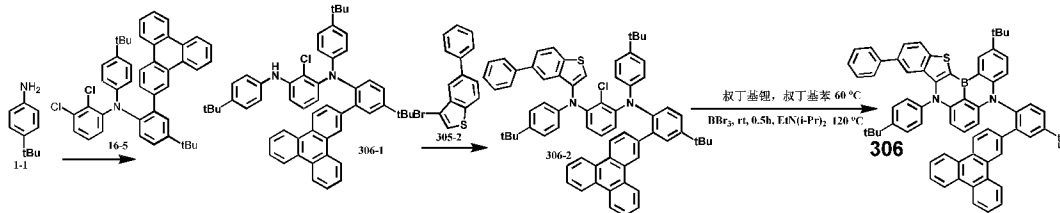
有机化合物M305的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体305-3以及100ml干燥的叔丁基苯，在N₂气氛中，冷却至-30℃，逐滴加入t-BuLi（叔丁基锂）(21mmol)的正己烷溶液，升高温度至60℃反应2小时，减压蒸除其中的正己烷溶剂；将反应液再次冷却至-30℃，加入三溴化硼(21mmol)，升至室温下搅拌0.5小时，然后将反应液冷却至0℃，加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺，待滴加完毕，升温至室温搅拌，再继续升温至120℃搅拌3小时，将反应液冷却至室温；加入碳酸钠水溶液

与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M305,收率为51.2%,有机化合物M305的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1078。

5 实施例60

有机化合物M306的合成路线如下:



中间体306-1的合成:

10 将中间体1-1(10mmol)、化合物16-5(10mmol)溶于1,4-二氧六环与水(21/2 ml)的混合溶剂中,并加入Pd(PPh₃)₄(0.1mmol)和碳酸钾(30mmol),在氮气气氛下,100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体306-1,摩尔量为8.89mmol,产率为88.9%,中间体306-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=764

中间体306-2的合成:

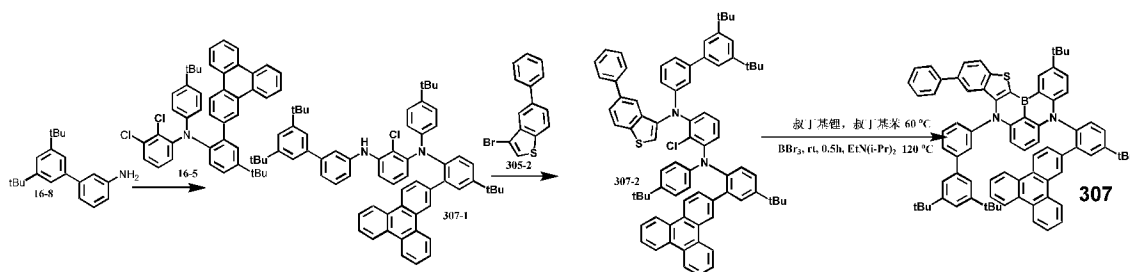
15 将中间体306-1(10mmol)、化合物305-2(10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos(2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯,0.2mmol)和叔丁醇钠(30mmol)溶于甲苯中,在氮气气氛下100℃搅拌6h;冷却后旋蒸除去溶剂,萃取并水洗分液,有机相柱层析,得到中间体306-2,摩尔量为7.33mmol,产率为73.3%,中间体306-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=972

有机化合物M306的合成:

25 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体306-2以及100ml干燥的叔丁基苯,在N₂气氛中,冷却至-30℃,逐滴加入t-BuLi(叔丁基锂)(21mmol)的正己烷溶液,升高温度至60℃反应2小时,减压蒸除其中的正己烷溶剂;将反应液再次冷却至-30℃,加入三溴化硼(21mmol),升至室温下搅拌0.5小时,然后将反应液冷却至0℃,加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺,待滴加完毕,升温至室温搅拌,再继续升温至120℃搅拌3小时,将反应液冷却至室温;加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M306,收率为46.4%,有机化合物M306的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=946

实施例61

有机化合物M307的合成路线如下:



中间体307-1的合成:

将中间体16-8 (10mmol)、化合物16-5 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100°C 搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体307-1, 摩尔量为8.41mmol, 产率为84.1%, 中间体307-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=896$ 。

中间体307-2的合成:

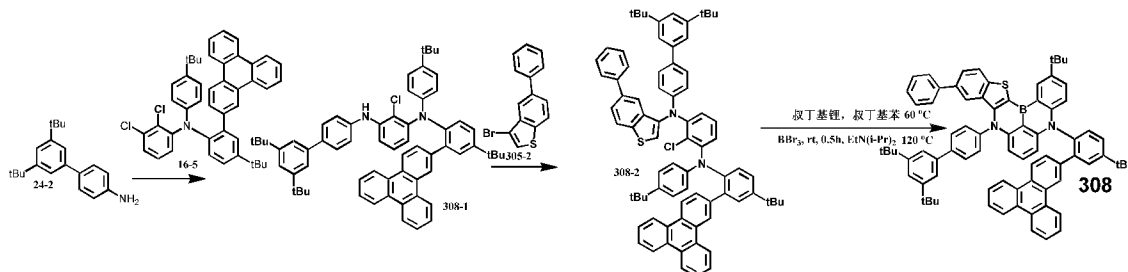
将中间体307-1 (10mmol)、化合物305-2 (10mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100°C 搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体307-2, 摩尔量为7.89mmol, 产率为78.9%, 中间体307-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=1104$ 。

有机化合物M307的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体307-2以及100ml干燥的叔丁基苯, 在 N_2 气氛中, 冷却至-30°C, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60°C反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30°C, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0°C, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120°C搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M307, 收率为44.1%, 有机化合物M307的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: $\text{MS}(\text{ASAP})=1078$ 。

实施例62

有机化合物M308的合成路线如下:



中间体308-1的合成:

将中间体24-2 (10mmol)、化合物16-5 (10mmol) 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体308-1, 摩尔量为8.33mmol, 产率为83.3%, 中间体308-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=896。

中间体308-2的合成:

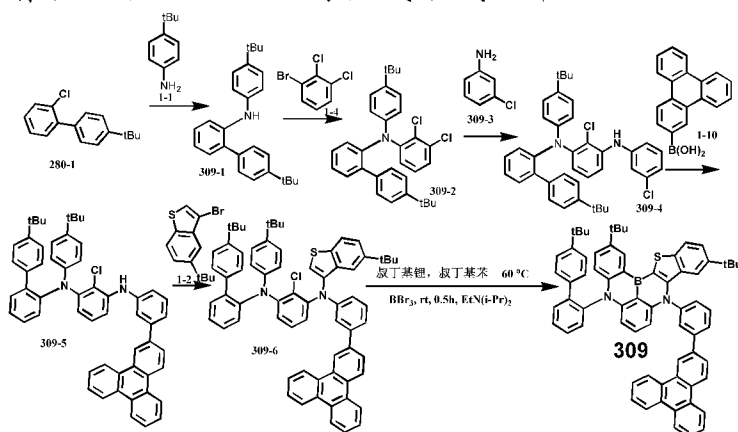
将中间体308-1 (10mmol)、化合物305-2 (10mmol)、Pd₂(dba)₃(0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下100℃搅拌6h; 冷却后旋蒸除去溶剂, 萃取并水洗分液, 有机相柱层析, 得到中间体308-2, 摩尔量为7.93mmol, 产率为79.3%, 中间体308-2的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1104。

有机化合物M308的合成:

250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体308-2以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液与乙酸乙酯淬灭反应; 水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相, 旋蒸掉其中的溶剂, 得到粗品, 用快速硅胶柱纯化得到纯品; 用甲苯与乙酸乙酯重结晶, 得产品淡黄色固体粉末, 即有机化合物M308, 收率为41.6%, 有机化合物M308的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=1078。

实施例 63

有机化合物 M309 的合成路线如下:



中间体 309-1 的合成:

将中间体280-1 (10mmol)、中间体1-1 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下,

120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体309-1摩尔量为7.89mmol, 产率: 78.9%, 中间体309-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=357。

中间体 309-2 的合成:

- 5 将中间体309-1 (10mmol)、中间体1-4 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体309-2摩尔量为7.56mmol, 产率: 75.6%, 中间体
- 10 309-1的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=501。

中间体 309-4 的合成:

- 将中间体309-2 (10mmol)、中间体309-3 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下,
- 15 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体309-4摩尔量为7.11mmol, 产率: 71.1%, 中间体309-4的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=592。

中间体 309-5 的合成:

- 将中间体309-4 (10mmol)、中间体1-10 (10mmol), 溶于1,4-二氧六环与水 (21/2 ml) 的混合溶剂中, 并加入Pd(PPh₃)₄ (0.1mmol) 和碳酸钾 (30mmol), 在氮气气氛下, 100℃搅拌6h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体309-5摩尔量为6.87mmol, 产率: 68.7%, 中间体309-5的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=784。
- 20

- 25 中间体 309-6 的合成:

- 将中间体309-5 (10mmol)、中间体1-2 (10mmol), Pd-132 (双(二叔丁基-4-二甲氨基苯基膦)氯化钯, 0.1mmol)、S-Phos (2-双环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-二联苯, 0.2mmol) 和叔丁醇钠 (30mmol) 溶于甲苯中, 在氮气气氛下, 120℃搅拌3h; 冷却后, 旋蒸除去大部分溶剂, 然后萃取并水洗分液, 有机相柱层析并重结晶得到中间体309-6摩尔量为7.97mmol, 产率: 79.7%, 中间体
- 30 309-6的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=972。

有机化合物 M309 的合成:

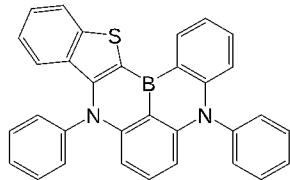
- 250ml的三口烧瓶中加入10mmol中间体309-6以及100ml干燥的叔丁基苯, 在N₂气氛中, 冷却至-30℃, 逐滴加入t-BuLi (叔丁基锂) (21mmol)的正己烷溶液, 升高温度至60℃反应2小时, 减压蒸除其中的正己烷溶剂; 将反应液再次冷却至-30℃, 加入三溴化硼(21mmol), 升至室温下搅拌0.5小时, 然后将反应液冷却至0℃, 加入42mmol N,N-二异丙基乙基胺, 待滴加完毕, 升温至室温搅拌, 再继续升温至120℃搅拌3小时, 将反应液冷却至室温; 加入碳酸钠水溶液
- 35

与乙酸乙酯淬灭反应;水相用乙酸乙酯萃取并合并有机相,旋蒸掉其中的溶剂,得到粗品,用快速硅胶柱纯化得到纯品;用甲苯与乙酸乙酯重结晶,得产品淡黄色固体粉末,即有机化合物M309,收率为42.5%,有机化合物M309的大气压固相分析探针质谱(ASAP-MS)结果: MS(ASAP)=946。

5

对比例1

采用对比化合物1作为上述实施例1至实施例63的对比例,对比化合物1的结构式为:



对比化合物1。

10

如表1所示,通过量子计算可以得到实施例1至实施例63所获得的化合物M1至M309以及对比例1中的化对比化合物1的HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital,最高已占分子轨道)能级、LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital,最低未占分子轨道)能级、T1(第一激发三线态)能级、S1(第一激发单线态)能级。具体的,利用TD-DFT(含时密度泛函理论)通过 Gaussian09W(Gaussian Inc.),具体的模拟方法可参见WO2011141110,首先用半经验方法“Ground State/Semi-empirical/Default Spin/AM1”(Charge 0/Spin Singlet)来优化分子几何结构,然后有机分子的能量结构由TD-DFT(含时密度泛函理论)方法算得“TD-SCF/DFT/Default Spin/B3PW91”与基组“6-31G(d)” (Charge 0/Spin Singlet),HOMO能级和LUMO能级按照下面的校准公式计算, S1能级和T1能级直接使用。

15

20

$$\text{HOMO(eV)} = ((\text{HOMO(G)} \times 27.212) - 0.9899) / 1.1206$$

$$\text{LUMO(eV)} = ((\text{LUMO(G)} \times 27.212) - 2.0041) / 1.385$$

其中,HOMO、LUMO、T1和S1是Gaussian 09W的直接计算结果,单位为Hartree。

25

表1:有机化合物M1至M309以及对比例化合物1的HOMO能级、LUMO、S1能级和T1能级的计算结果

	化合物	HOMO[eV]	LUMO [eV]	T1[eV]	S1[eV]
实施例1	有机化合物M1	-5.03	-2.31	2.39	3.01
实施例2	有机化合物M2	-5.02	-2.29	2.40	3.01
实施例3	有机化合物M3	-5.02	-2.28	2.41	3.00
实施例4	有机化合物M16	-5.04	-2.30	2.41	3.03
实施例5	有机化合物M20	-5.01	-2.30	2.41	3.01
实施例6	有机化合物M24	-5.09	-2.31	2.43	3.05
实施例7	有机化合物M25	-4.99	-2.28	2.39	2.99
实施例8	有机化合物M26	-5.05	-2.28	2.38	2.99

实施例9	有机化合物M96	-5.07	-2.30	2.41	3.01
实施例10	有机化合物M100	-5.08	-2.29	2.41	3.01
实施例11	有机化合物M104	-5.08	-2.29	2.42	3.04
实施例12	有机化合物M122	-4.99	-2.31	2.38	3.01
实施例13	有机化合物M128	-4.99	-2.32	2.40	3.00
实施例14	有机化合物M129	-5.03	-2.29	2.39	3.00
实施例15	有机化合物M132	-5.02	-2.29	2.39	2.99
实施例16	有机化合物M147	-5.07	-2.30	2.41	3.03
实施例17	有机化合物M162	-5.04	-2.28	2.41	3.05
实施例18	有机化合物M165	-4.97	-2.29	2.40	3.07
实施例19	有机化合物M193	-5.00	-2.31	2.42	3.07
实施例20	有机化合物M210	-5.03	-2.31	2.40	3.08
实施例21	有机化合物M234	-5.03	-2.30	2.38	3.14
实施例22	有机化合物M253	-5.01	-2.30	2.41	3.04
实施例23	有机化合物M254	-5.04	-2.28	2.43	3.03
实施例24	有机化合物M255	-5.01	-2.31	2.39	3.08
实施例25	有机化合物M266	-5.03	-2.29	2.35	3.01
实施例26	有机化合物M268	-4.94	-2.30	2.41	3.04
实施例27	有机化合物M269	-4.94	-2.31	2.41	3.01
实施例28	有机化合物M270	-4.95	-2.31	2.38	3.03
实施例29	有机化合物M271	-4.99	-2.29	2.39	3.03
实施例30	有机化合物M274	-4.94	-2.30	2.41	3.02
实施例31	有机化合物M277	-4.98	-2.32	2.47	3.01
实施例32	有机化合物M278	-5.01	-2.30	2.41	3.01
实施例33	有机化合物M279	-5.00	-2.28	2.39	3.03
实施例34	有机化合物M280	-4.96	-2.29	2.43	2.99
实施例35	有机化合物M281	-4.98	-2.31	2.45	2.93
实施例36	有机化合物M282	-5.03	-2.35	2.50	2.98
实施例37	有机化合物M283	-5.07	-2.26	2.46	3.03
实施例38	有机化合物M284	-4.91	-2.27	2.43	3.01
实施例39	有机化合物M285	-5.03	-2.29	2.45	3.04
实施例40	有机化合物M286	-4.91	-2.33	2.42	3.05
实施例41	有机化合物M287	-4.97	-2.33	2.39	3.01
实施例42	有机化合物M288	-5.04	-2.31	2.43	3.03
实施例43	有机化合物M289	-5.06	-2.30	2.44	2.97
实施例44	有机化合物M290	-4.93	-2.27	2.41	3.01
实施例45	有机化合物M291	-5.07	-2.31	2.35	3.00
实施例46	有机化合物M292	-5.01	-2.33	2.38	3.01
实施例47	有机化合物M293	-4.99	-2.29	2.41	2.97
实施例48	有机化合物M294	-4.95	-2.33	2.37	2.95
实施例49	有机化合物M295	-4.96	-2.31	2.41	2.97
实施例50	有机化合物M296	-4.99	-2.31	2.39	2.97
实施例51	有机化合物M297	-4.96	-2.29	2.42	2.99

实施例52	有机化合物M298	-5.02	-2.33	2.37	2.98
实施例53	有机化合物M299	-5.01	-2.30	2.39	2.94
实施例54	有机化合物M300	-4.98	-2.33	2.39	2.98
实施例55	有机化合物M301	-4.99	-2.31	2.41	3.01
实施例56	有机化合物M302	-5.03	-2.33	2.36	2.97
实施例57	有机化合物M303	-4.99	-2.33	2.37	2.99
实施例58	有机化合物M304	-5.02	-2.35	2.40	3.03
实施例59	有机化合物M305	-4.95	-2.31	2.37	3.01
实施例60	有机化合物M306	-4.93	-2.29	2.37	3.03
实施例61	有机化合物M307	-4.97	-2.31	2.38	2.99
实施例62	有机化合物M308	-4.93	-2.31	2.39	2.99
实施例63	有机化合物M309	-4.99	-2.32	2.41	3.01
对比例1	对比化合物1	-5.10	-2.35	2.33	2.91

由表1结果可知，本申请实施例1至实施例63提供的有机化合物M1至有机化合物M309的T1能级以及S1能级均显示高于对比化合物1的T1能级以及S1能级，表明，相较于对比化合物1，有机化合物M1至M309发出的蓝光更加偏向于深蓝，有利于应用有机化合物M1至M309作为发光层中的客体材料的蓝色有机发光器件获得更优的色坐标。

本申请提供的所述有机发光器件100的示例性的制作步骤，如下示例性实施例1所示。

实施例1

本实施例提供的有机发光器件中，ITO(铟锡氧化物)作为阳极，PEDOT(聚乙撑二氧噻吩，Clevios AI4083)作为空穴注入层的材料，PVK (Sigma Aldrich, 平均 Mn 25,000-50,000)作为空穴传输层的材料，BH-1至BH-3分别作为相应有机发光器件的发光层中的主体材料，实施例1至实施例67中的有机化合物M1至M309及对比例1中的对比化合物1分别作为相应有机发光器件的发光层中的客体材料，ET和Liq (8-羟基喹啉锂)作为电子传输层的材料，Al作为阴极，具体制备步骤如下：

a、ITO阳极的清洗：使用氯仿、丙酮和/或异丙醇清洗ITO导电玻璃，然后进行紫外臭氧处理；

b、形成空穴注入层：在ITO阳极上旋涂空穴注入层材料PEDOT (聚乙撑二氧噻吩，Clevios™ AI4083)，并在180℃的热板上处理10分钟，空穴注入层的厚度为40nm；

c、形成空穴传输层：在空穴注入层上旋涂浓度为5mg/ml的PVK(Sigma Aldrich,Mn 25,000-50,000)的甲苯溶液，随后在180℃的热板上处理60分钟，空穴传输层的厚度为20nm；

d、形成发光层：于氮气手套箱中，在空穴传输层上旋涂发光层材料，随后在140℃的热板上处理10分钟，不同有机发光器件的发光层中的主体材料分

别对应为BH-1、BH-2或BH-3，不同有机发光器件的发光层中的客体材料分别对应为有机化合物M1至有机化合物M309中的一种，溶剂为苯甲酸甲酯溶液，主体材料与客体材料的质量比为95:5，发光层的材料的浓度为15mg/ml，最终形成的发光层的厚度为40nm。

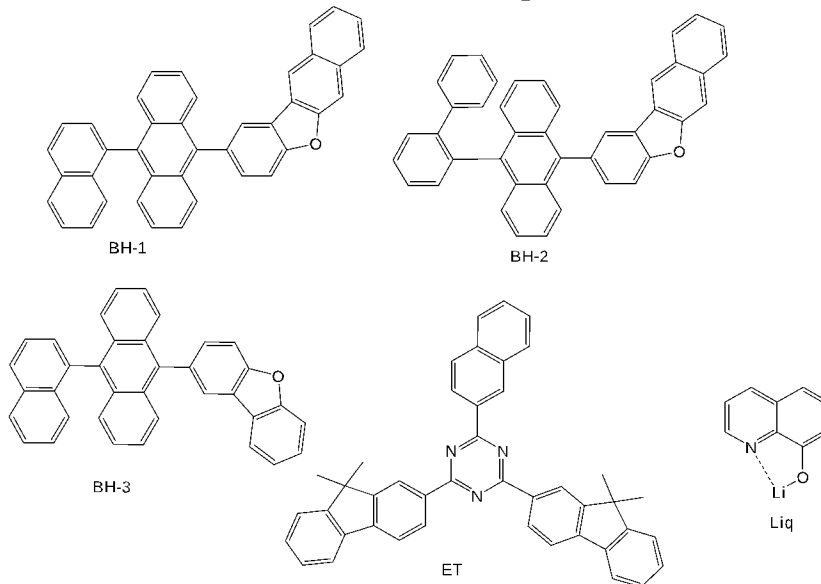
5 e、形成电子传输层：于真空腔中，在发光层之上，将ET和Liq置于不同的蒸发单元，在高真空（ 1×10^{-6} 毫巴）环境下使ET和Liq以重量比50:50进行共沉积，形成厚度为20nm的电子传输层；

f、形成阴极层：在电子传输层之上，沉积Al，得到厚度为100 nm的Al阴极；

10 g、封装：器件在氮气手套箱中用紫外线固化树脂封装。

具体的，本实施例中，通过上述步骤获得有机发光器件1至有机发光器件67、以及对比元件1至对比元件3。其中，有机发光器件1至有机发光器件63使用的客体材料分别为有机化合物M1至有机化合物M309，主体材料为BH-1；有机发光器件64,66使用的客体材料为有机化合物M20，主体材料为BH-2,BH-3；
15 有机发光器件65,67使用的客体材料为有机化合物M234，主体材料为BH-2,BH-3；对比元件1至对比元件3使用的客体材料为对比化合物1，主体材料分别为BH-1、BH-2以及BH-3。

具体的，BH-1、BH-2、BH-3、ET、Liq的化学结构式如下：



20 本实施例中，对有机发光器件1至有机发光器件67、以及对比元件1至对比元件3进行了电流电压(J-V)特性测试，并获得了各有机发光器件及对比元件的CIE色坐标(x,y)、1knits亮度下的驱动电压(电压@1knits[V])、电流密度为10 mA/cm²时所得的发光效率(CE@1knits[cd/A])、以及亮度由1knits的初始亮度下降至初始亮度的90%所用的时间(LT90@1knits[h])，具体结果如表2所示。

25 表2: 有机发光器件1至有机发光器件67以及对比元件1至对比元件3性能数据

	客体	主体	CIE(x,y)	V@1kn its[V]	CE@1knit s[cd/A]	LT90 @1kn
有机发光器件1	有机化合物M1	BH-1	0.141,0.089	5.5	5.7	131
有机发光器件2	有机化合物M2	BH-1	0.141,0.087	5.5	5.8	141
有机发光器件3	有机化合物M3	BH-1	0.143,0.087	5.5	5.7	136
有机发光器件4	有机化合物M16	BH-1	0.143,0.081	5.5	6.4	173
有机发光器件5	有机化合物M20	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.5	171
有机发光器件6	有机化合物M24	BH-1	0.143,0.081	5.5	6.6	177
有机发光器件7	有机化合物M25	BH-1	0.142,0.083	5.6	5.9	137
有机发光器件8	有机化合物M26	BH-1	0.141,0.086	5.5	5.8	136
有机发光器件9	有机化合物M96	BH-1	0.141,0.086	5.5	5.9	138
有机发光器件10	有机化合物M100	BH-1	0.142,0.088	5.7	5.9	141
有机发光器件11	有机化合物M104	BH-1	0.141,0.087	5.5	5.8	144
有机发光器件12	有机化合物M122	BH-1	0.141,0.089	5.5	5.8	139
有机发光器件13	有机化合物M128	BH-1	0.141,0.088	5.5	6.0	141
有机发光器件14	有机化合物M129	BH-1	0.141,0.089	5.5	6.0	135
有机发光器件15	有机化合物M132	BH-1	0.141,0.087	5.5	5.8	138
有机发光器件16	有机化合物M147	BH-1	0.141,0.088	5.5	5.9	139
有机发光器件17	有机化合物M162	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.0	141
有机发光器件18	有机化合物M165	BH-1	0.143,0.086	5.5	5.7	149
有机发光器件19	有机化合物M193	BH-1	0.143,0.093	5.5	5.7	148
有机发光器件20	有机化合物M210	BH-1	0.143,0.087	5.5	5.8	142
有机发光器件21	有机化合物M234	BH-1	0.143,0.087	5.5	6.4	169
有机发光器件22	有机化合物M253	BH-1	0.141,0.087	5.5	6.4	173
有机发光器件23	有机化合物M254	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.5	175
有机发光器件24	有机化合物M255	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.3	171
有机发光器件25	有机化合物M266	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.5	176
有机发光器件26	有机化合物M268	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.4	171
有机发光器件27	有机化合物M269	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.3	162
有机发光器件28	有机化合物M270	BH-1	0.141,0.087	5.5	6.3	169
有机发光器件29	有机化合物M271	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.4	175
有机发光器件30	有机化合物M274	BH-1	0.141,0.087	5.5	6.3	176
有机发光器件31	有机化合物M277	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.4	178
有机发光器件32	有机化合物M278	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.1	174
有机发光器件33	有机化合物M279	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.3	173
有机发光器件34	有机化合物M280	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.3	173
有机发光器件35	有机化合物M281	BH-1	0.141,0.087	5.5	6.2	171
有机发光器件36	有机化合物M282	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.3	171
有机发光器件37	有机化合物M283	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.2	177
有机发光器件38	有机化合物M284	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.2	179
有机发光器件39	有机化合物M285	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.1	170

有机发光器件40	有机化合物M286	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.4	173
有机发光器件41	有机化合物M287	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.3	173
有机发光器件42	有机化合物M288	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.4	175
有机发光器件43	有机化合物M289	BH-1	0.141,0.087	5.5	6.3	171
有机发光器件44	有机化合物M290	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.3	175
有机发光器件45	有机化合物M291	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.4	177
有机发光器件46	有机化合物M292	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.4	171
有机发光器件47	有机化合物M293	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.4	171
有机发光器件48	有机化合物M294	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.3	170
有机发光器件49	有机化合物M295	BH-1	0.141,0.086	5.5	6.3	172
有机发光器件50	有机化合物M296	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.3	175
有机发光器件51	有机化合物M297	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.4	171
有机发光器件52	有机化合物M298	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.2	170
有机发光器件53	有机化合物M299	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.3	171
有机发光器件54	有机化合物M300	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.2	171
有机发光器件55	有机化合物M301	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.2	170
有机发光器件56	有机化合物M302	BH-1	0.141,0.081	5.5	5.7	131
有机发光器件57	有机化合物M303	BH-1	0.141,0.085	5.5	5.8	138
有机发光器件58	有机化合物M304	BH-1	0.141,0.085	5.5	5.7	141
有机发光器件59	有机化合物M305	BH-1	0.141,0.081	5.5	6.1	171
有机发光器件60	有机化合物M306	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.3	173
有机发光器件61	有机化合物M307	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.2	175
有机发光器件62	有机化合物M308	BH-1	0.141,0.083	5.5	6.4	169
有机发光器件63	有机化合物M309	BH-1	0.141,0.085	5.5	6.3	171
有机发光器件64	有机化合物M20	BH-2	0.143,0.112	5.5	5.7	145
有机发光器件65	有机化合物M234	BH-2	0.143,0.108	5.5	5.6	139
有机发光器件66	有机化合物M20	BH-3	0.143,0.117	5.6	5.7	143
有机发光器件67	有机化合物M234	BH-3	0.143,0.119	5.6	5.9	138
对比元件1	对比化合物1	BH-1	0.152,0.135	6.0	2.9	97
对比元件2	对比化合物1	BH-2	0.154,0.138	5.8	2.5	85
对比元件3	对比化合物1	BH-3	0.157,0.167	6.0	2.6	87

由表2可知，本申请通过发光层中使用客体材料M1至客体材料M309获得的有机发光器件1至有机发光器件67相较于对比元件1至对比元件3具有更优异的色坐标；进一步的，有机发光器件1至有机发光器件63的发光效率均在5.7~6.6cd/A，表明发光效率远高于对比元件1至对比元件3的发光效率；更进一步的，有机发光器件1至有机发光器件67的亮度由1knits的初始亮度下降至初始亮度的90%所用的时间均在135~179h范围内，相较于对比元件1至对比元件3的亮度由1knits的初始亮度下降至初始亮度的90%所用的时间结果，提升幅度在50%至100%，表明有机发光器件1至有机发光器件67具有显著提升的寿命。

同时，对比例1相比，有机化合物M1至M309通过联苯环+芳环的引入使得整体分子溶解性更好，易于化合物纯化，以此提高了化合物纯度，进而提高了制成的有机发光器件的效率与寿命。

此外，有机发光器件4、5、6、21-55、59-63的发光效率都在6.4~6.6cd/A

范围内,并且寿命都在170h左右,这是因为与其它有机发光器件中的客体材料相比,整体分子共轭性更大,苯并噻吩+联苯组合的芳胺寿命效率提高明显好于苯并噻吩+苯的组合,并且增溶基团的数量更多,提高了客体材料的溶解性,并更进一步提高了有机发光器件的发光效率和寿命。

5 本申请实施例公开的有机发光器件,通过使用硼氮化合物,并且在硼氮化合物中引入联苯+苯并噻吩的芳胺使化合物整体共轭性更大的基团,改善了材料性能,提高了有机发光器件的发光效率并延长了有机发光器件的使用寿命。

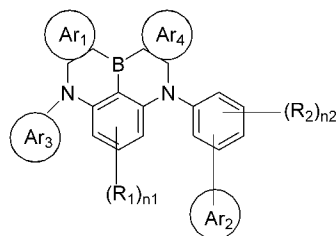
本申请实施例还公开了一种显示面板,所述显示面板包括如任一上述的有机发光器件。

10 所述显示面板还包括位于所述有机发光器件一侧的阵列基板,以及位于所述有机发光器件远离所述阵列基板的一侧并覆盖所述有机发光器件的封装层。所述显示面板还包括位于所述封装层远离所述有机发光器件一侧的偏光片层以及位于所述偏光片层远离所述有机发光器件一侧的盖板层。其中,所述偏光片层可以使用彩膜层替代,所述彩膜层可以包括多个色阻以及位于所述色阻两

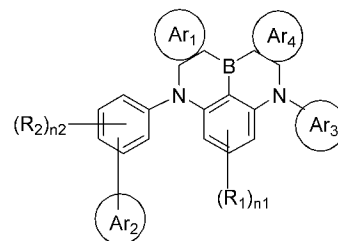
15 侧的黑色矩阵。

本申请实施例公开的显示面板,通过使用含硼氮化合物的有机发光器件,并且在硼氮化合物中引入使化合物整体共轭性更大的基团,增强了应用于有机发光器件中的材料的共轭效应,改善了材料性能,提高了显示面板的发光效率并延长了显示面板的使用寿命。

20 本申请实施例公开了一种有机化合物、有机发光器件及显示面板,该有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构:



通式(1)



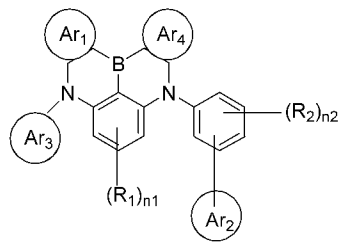
通式(2)

本申请通过在硼氮化合物中引入使化合物整体共轭性更大的基团,改善了材料性能,提高了有机发光器件的发光效率并延长了有机发光器件的使用寿命。

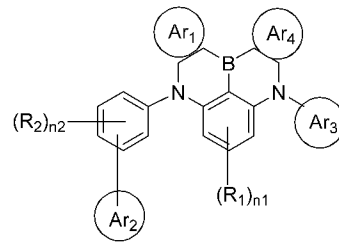
25 可以理解的是,对本领域普通技术人员来说,可以根据本申请的技术方案及其发明构思加以等同替换或改变,而所有这些改变或替换都应属于本申请所附的权利要求的保护范围。

权 利 要 求 书

1、一种有机化合物，其中，所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构：

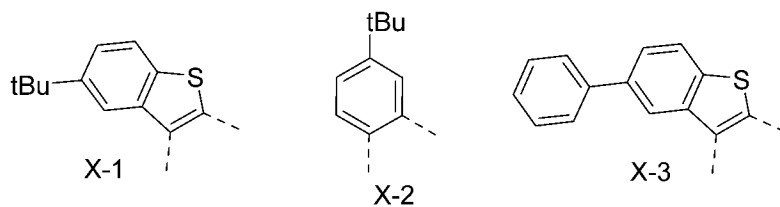


通式(1)

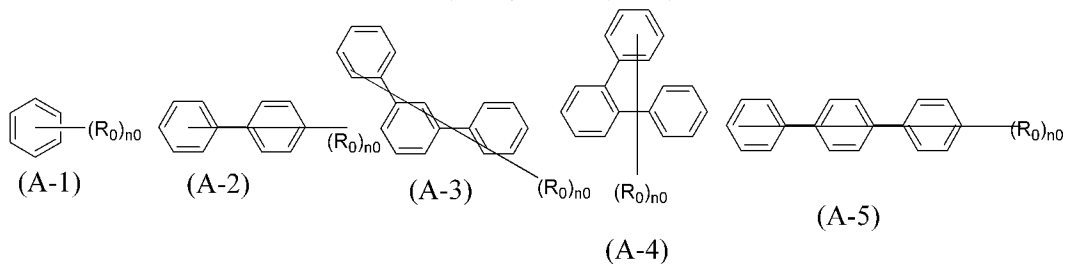


通式(2)

5 其中， Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构：



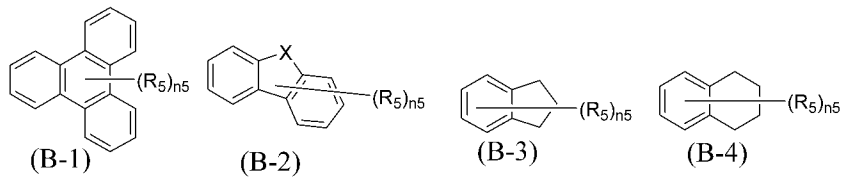
Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构：



10 当 Ar_1 选自式X-2时， Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结构；

Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子， Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上；

Ar_2 选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构：



15

X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂；

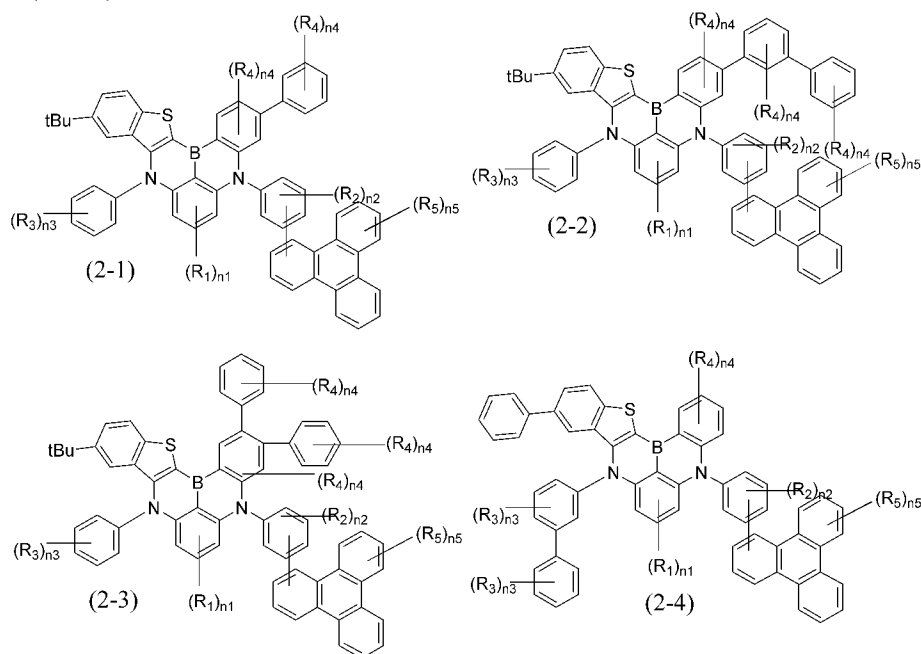
n_0 、 n_1 、 n_2 、 n_5 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数；

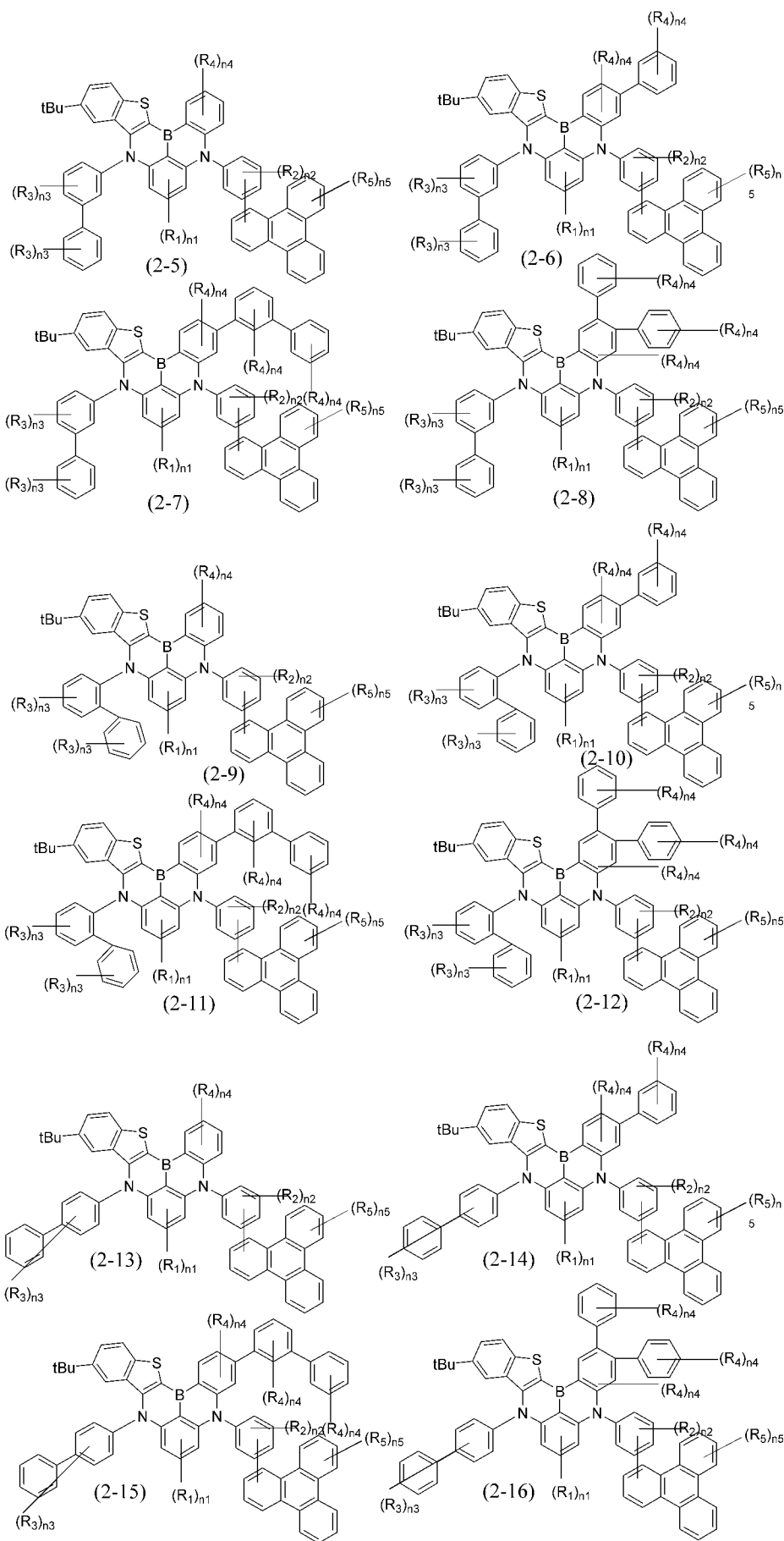
任一 R_0 、 R_1 、 R_2 或 R_5 分别独立地选自：-H、-D、具有 1 至 20 个碳原子

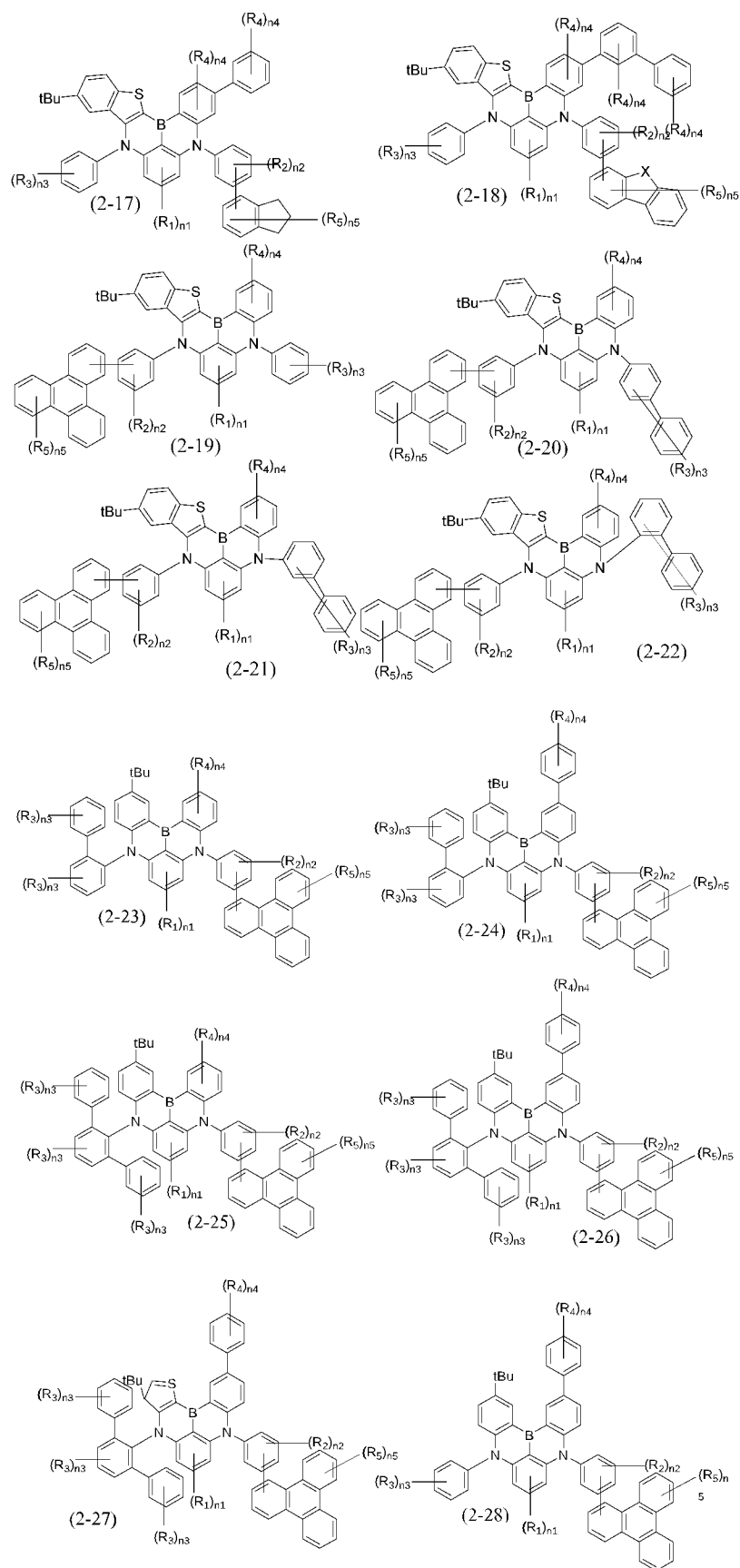
的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基；

当 n_0 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_0 相互成环或不成环；当 n_1 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_1 相互成环或不成环；当 n_2 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_2 相互成环或不成环；当 n_5 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_5 相互成环或不成环。

2、根据权利要求 1 所述的有机化合物，其中，所述有机化合物具有如通式(2-1)至通式(2-28)中任一者所示的结构：







其中，任一 R_3 、 R_4 分别独立地选自：-H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直

链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫
 代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的
 5 硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的
 烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的
 烯烷基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰
 酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的
 10 环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香
 基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子
 数为 5 至 30 的杂芳氧基；

n_3 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

当 n_3 大于或等于 2 时，相邻的两个 R₃ 相互成环或不成环；

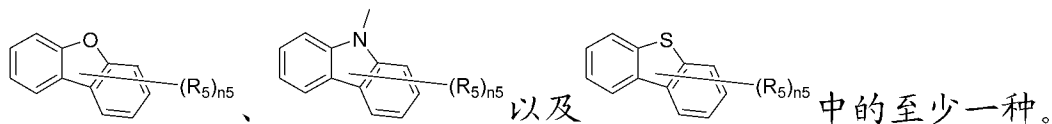
n_4 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

15 当 n_4 大于或等于 2 时，相邻的两个 R₄ 相互成环或不成环。

3、根据权利要求 2 所述的有机化合物，其中，任一 R₁、R₂、R₃、R₄ 或
 R₅ 独立地选自 -H、-D、具有 1 至 10 个碳原子的直链烷基、具有 3 至 10 个碳
 原子的支链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的环状烷基。

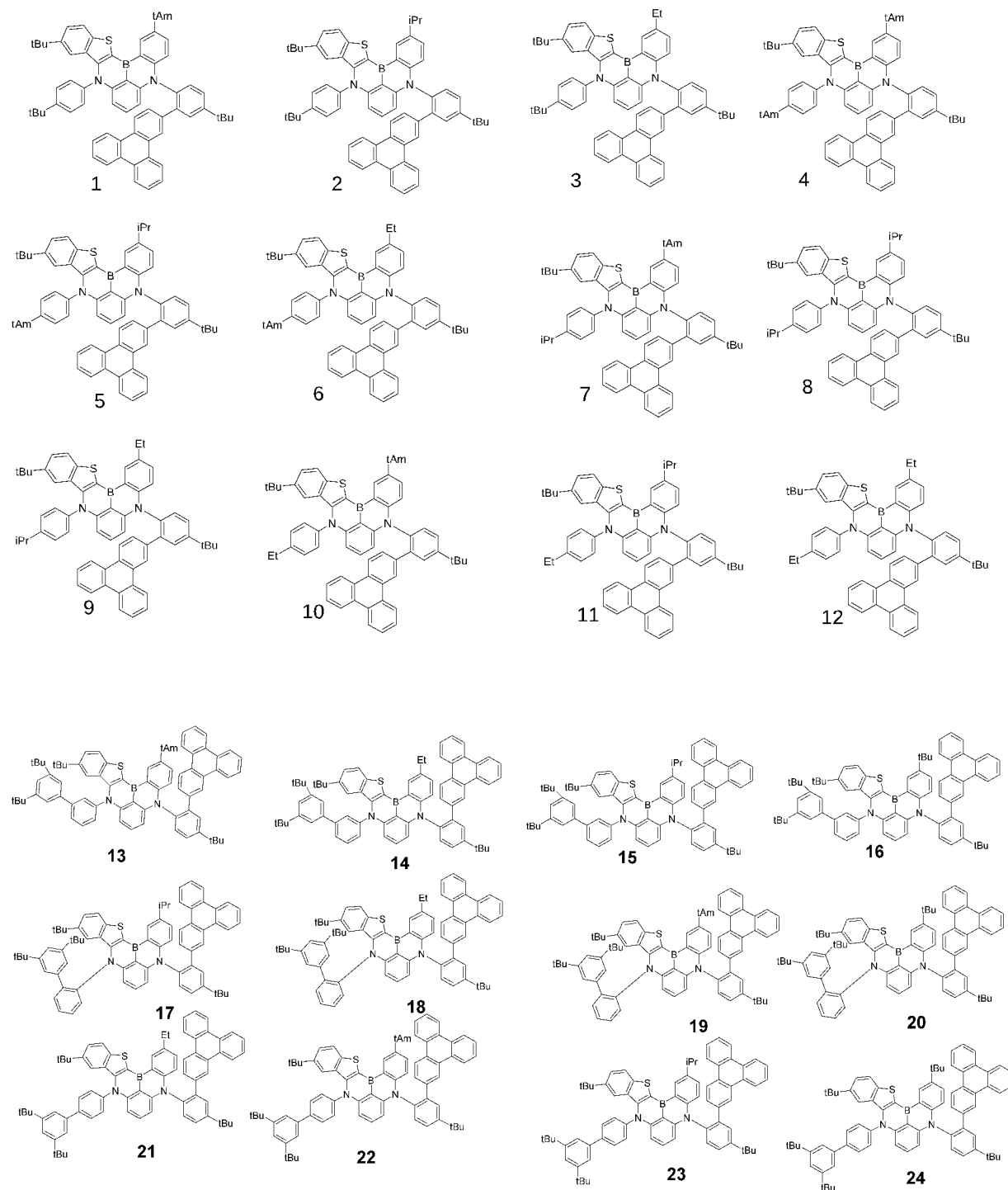
4、根据权利要求 3 所述的有机化合物，其中，任一 R₁、R₂、R₃、R₄ 或
 20 R₅ 独立地选自：-H、-D、具有 1 至 4 个碳原子的直链烷基、具有 3 至 5 个碳
 原子的支链烷基。

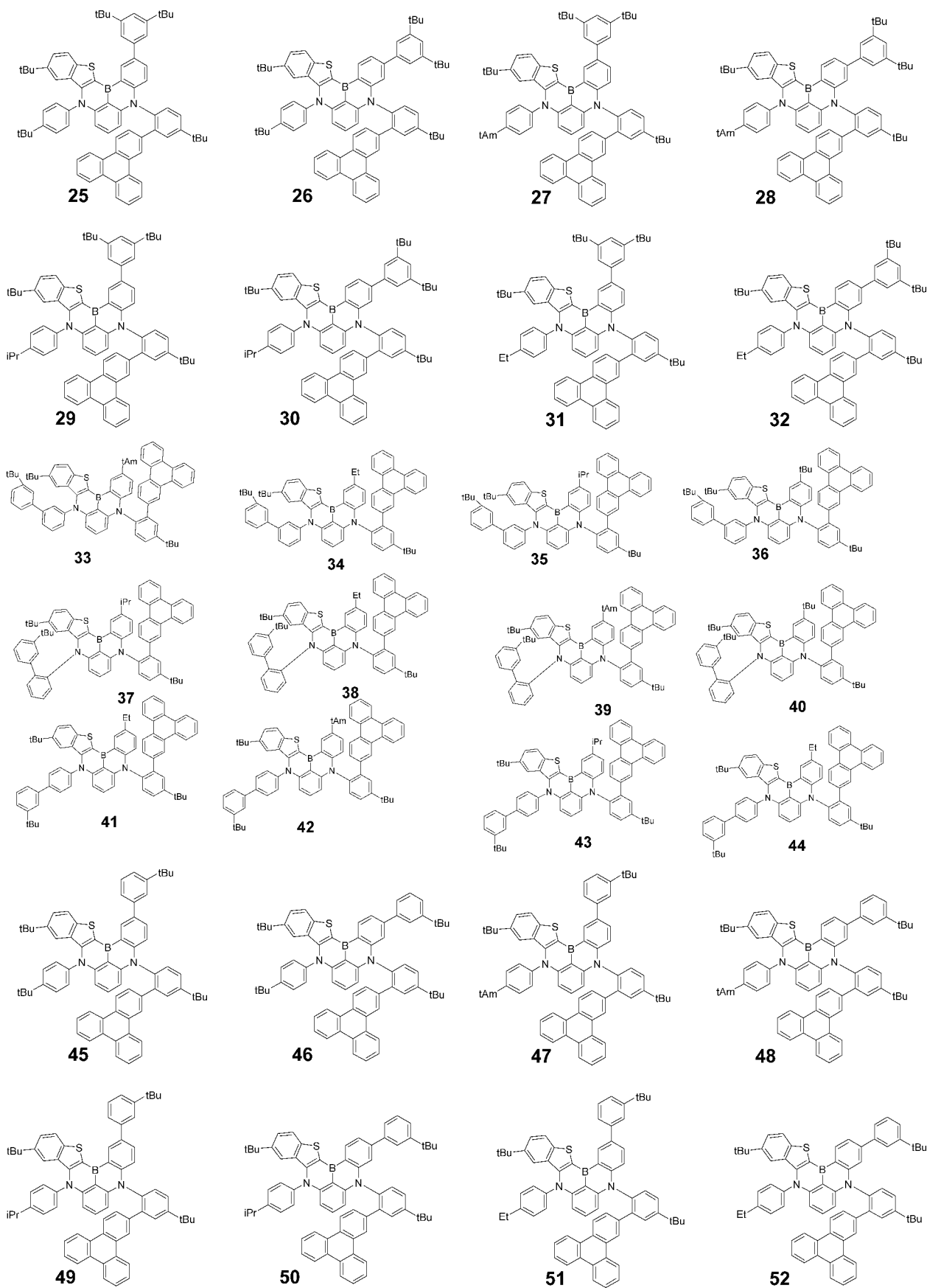
5、根据权利要求 1 所述的有机化合物，其中，当 Ar₂ 中存在所述式(B-2)
 所表示的结构时，所述式(B-2)所表示的结构选为：

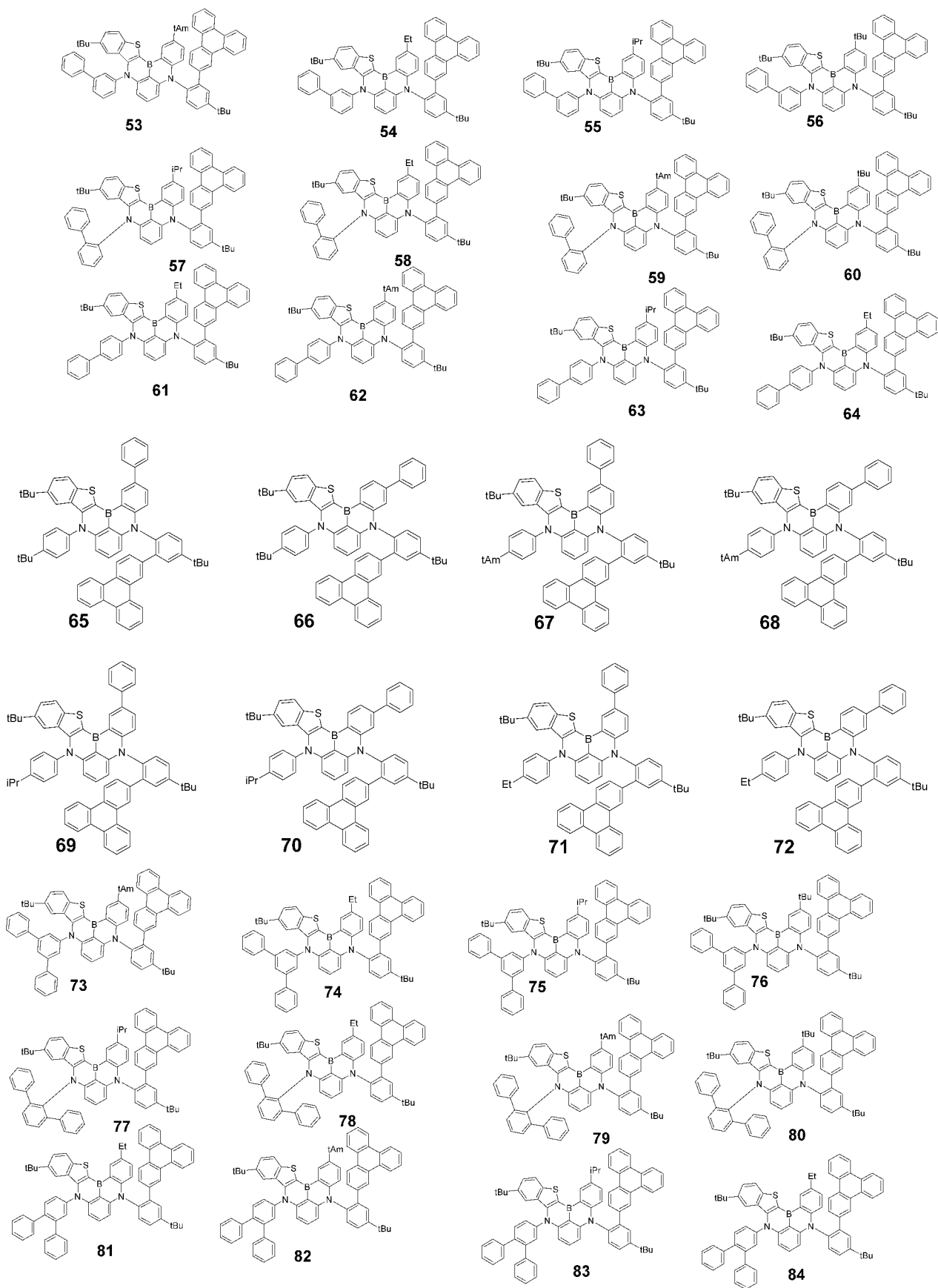


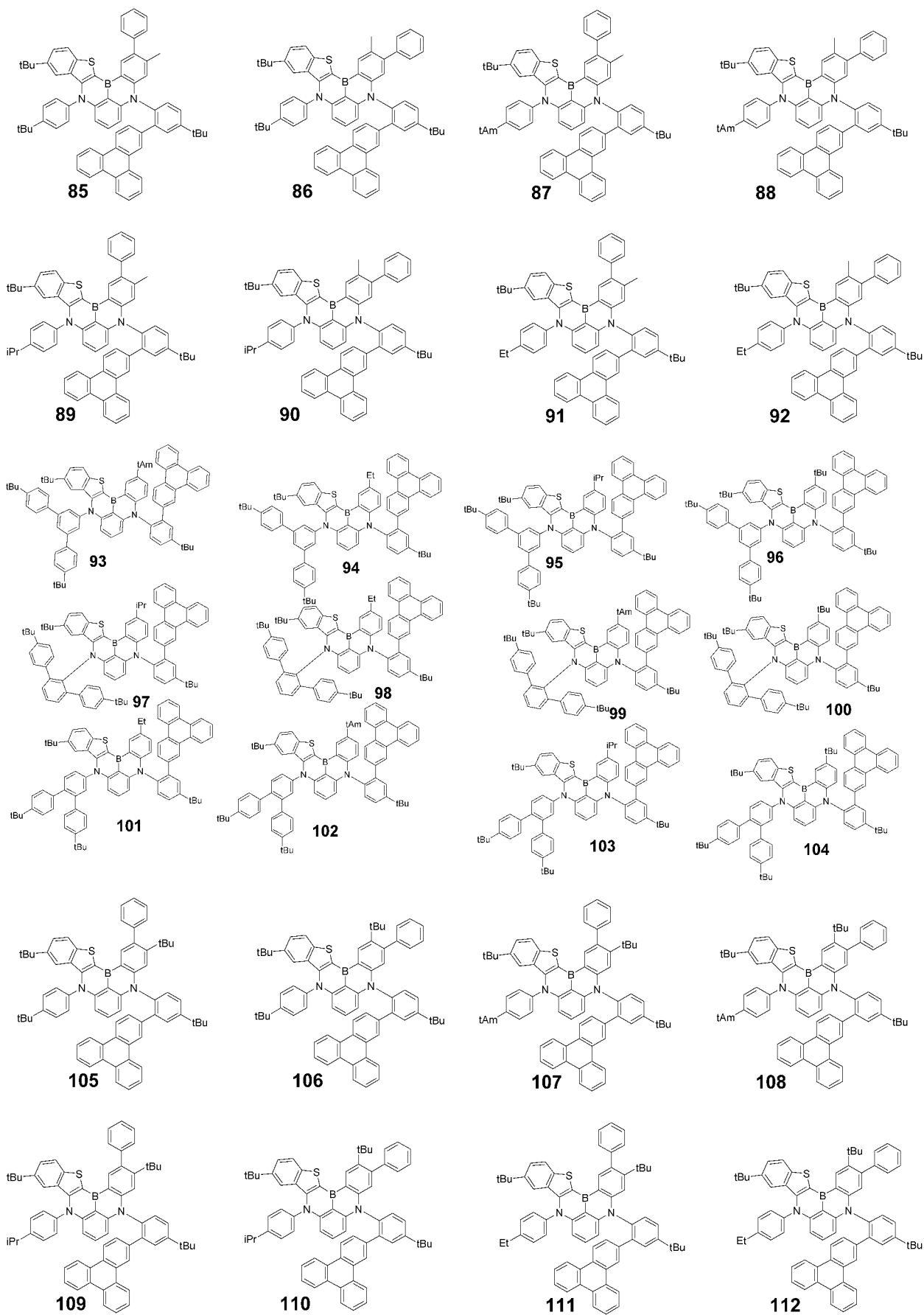
25 6、根据权利要求 1 所述的有机化合物，其中，所述有机化合物为蓝色发
 光材料。

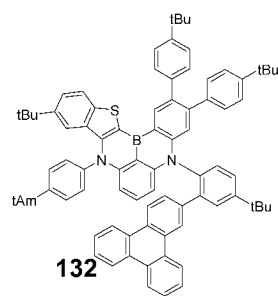
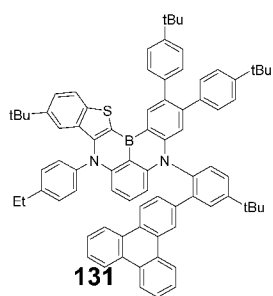
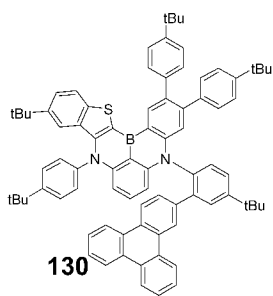
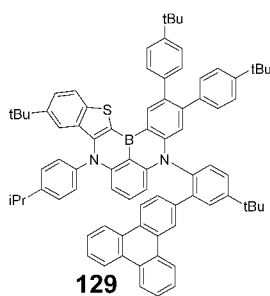
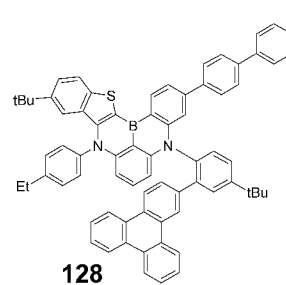
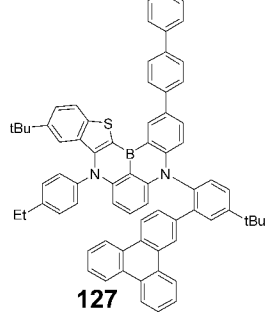
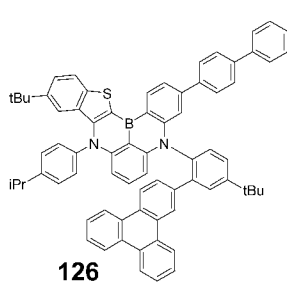
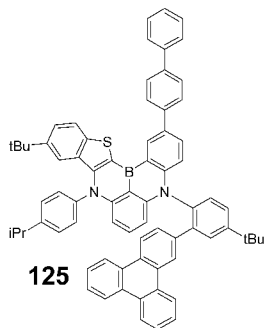
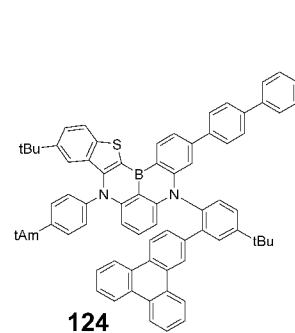
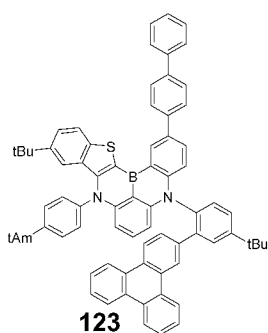
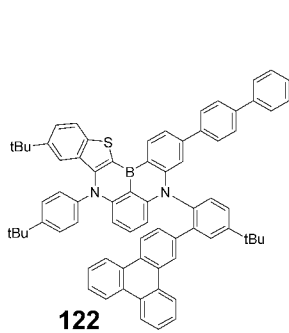
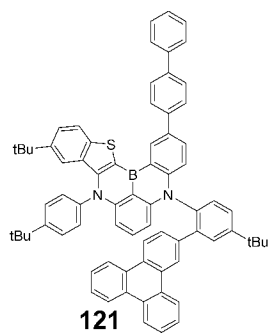
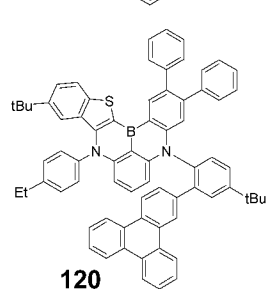
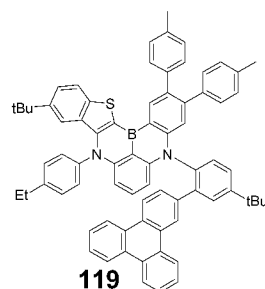
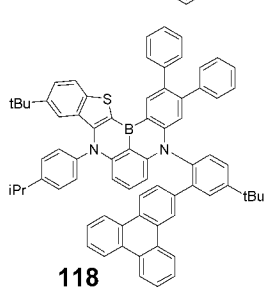
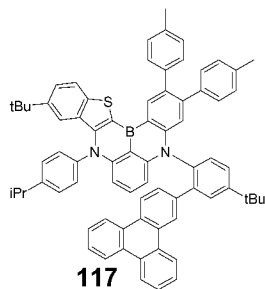
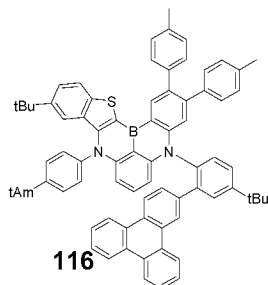
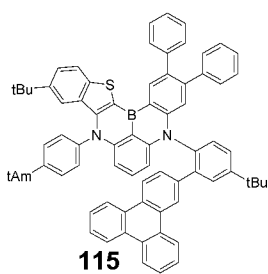
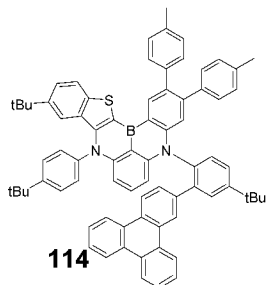
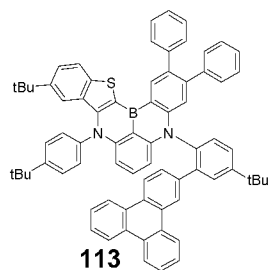
7、根据权利要求 1 所述的有机化合物，其中，所述有机化合物选自以下化合物：

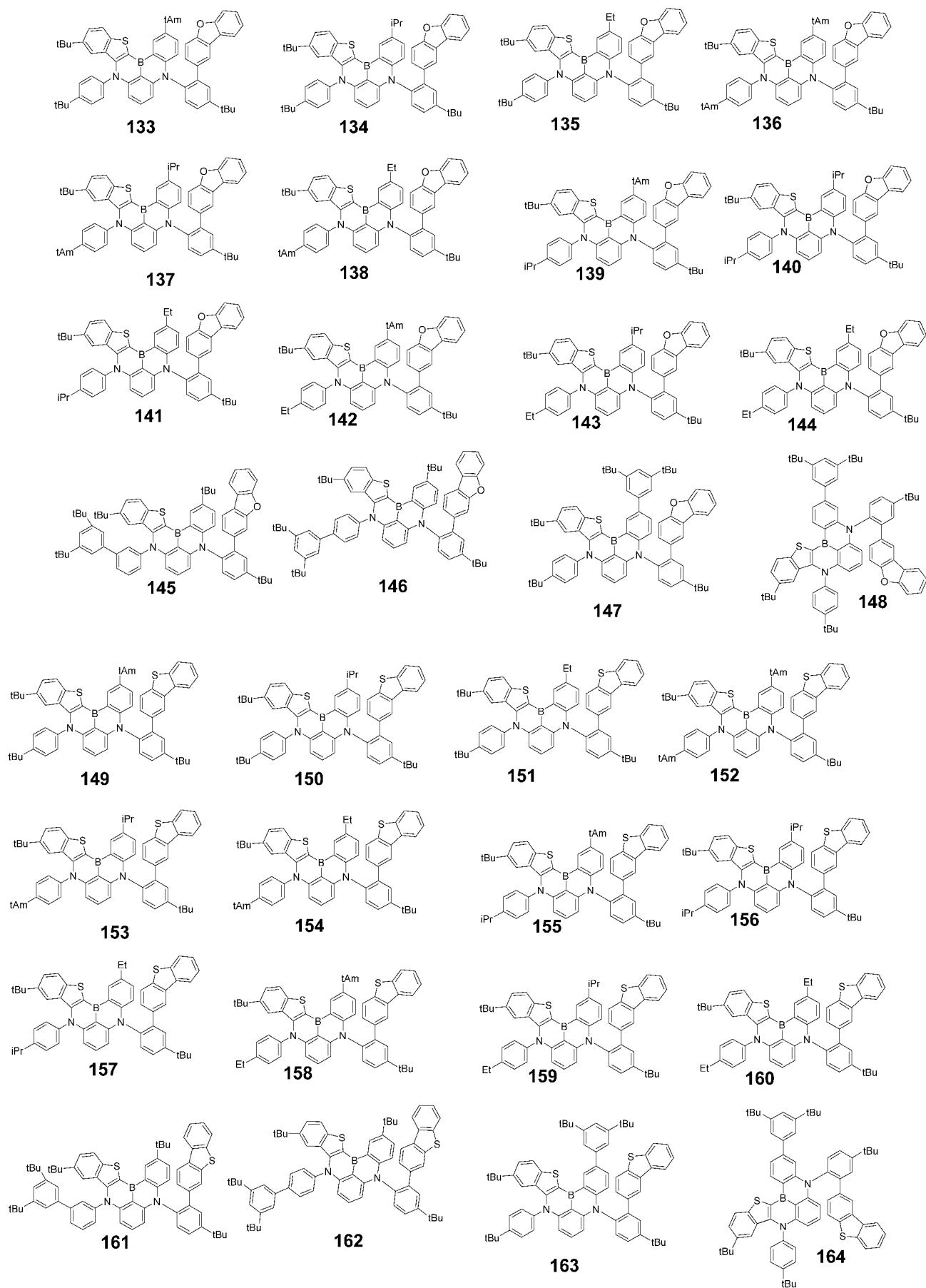


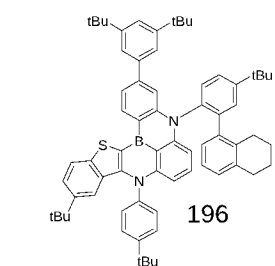
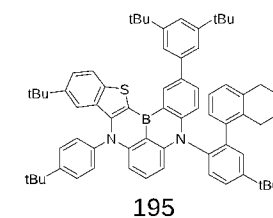
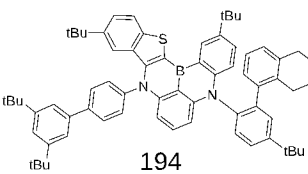
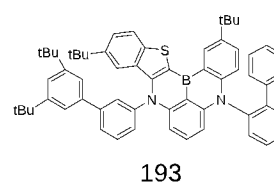
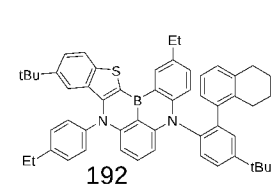
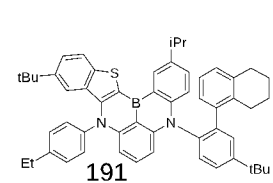
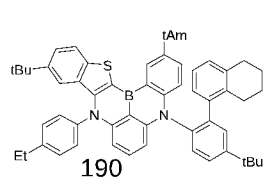
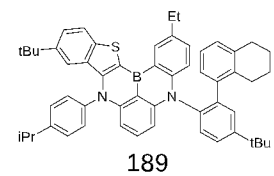
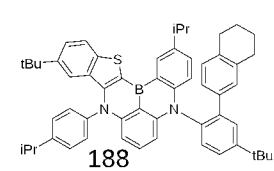
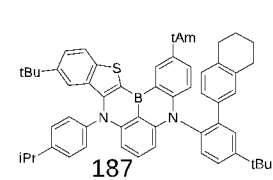
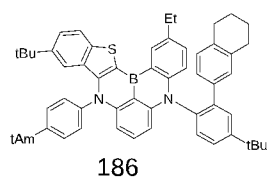
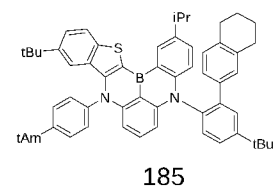
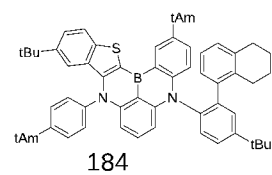
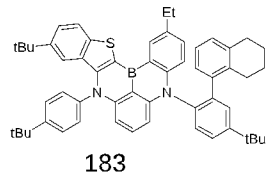
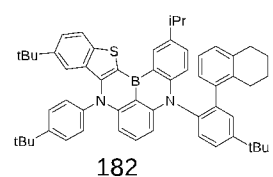
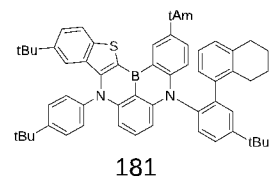
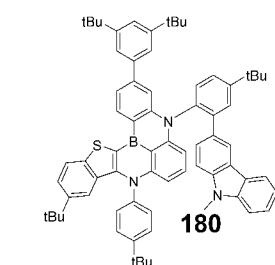
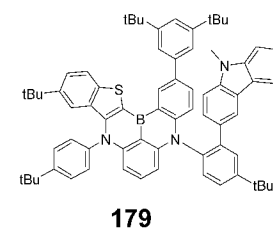
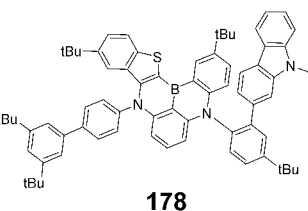
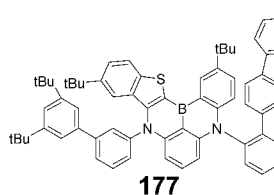
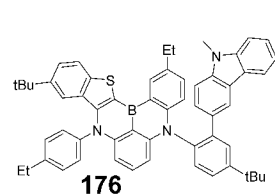
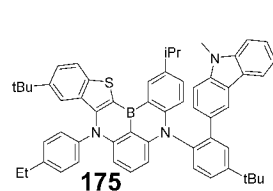
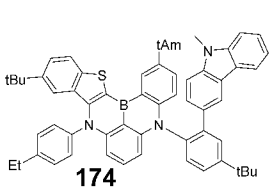
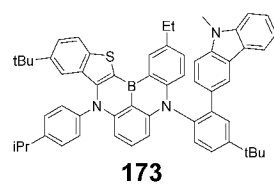
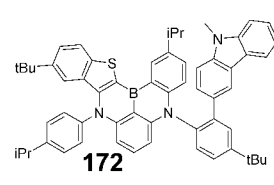
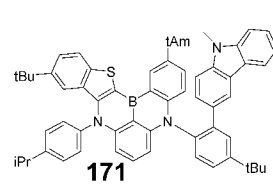
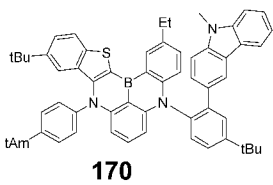
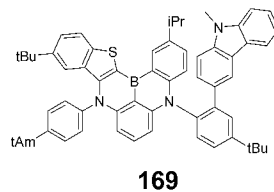
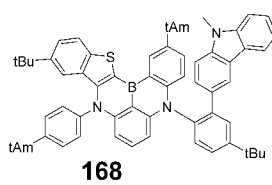
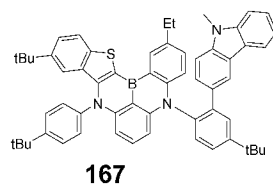
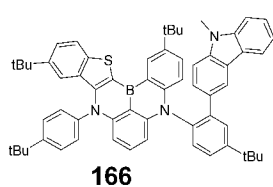
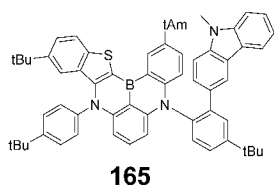


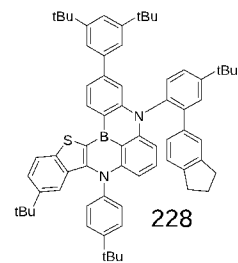
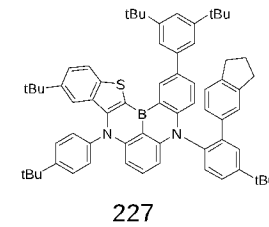
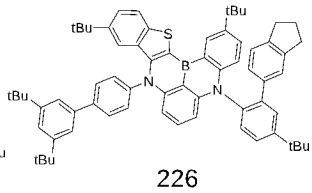
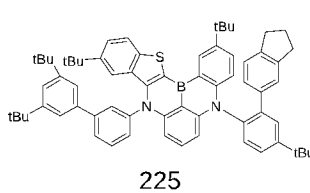
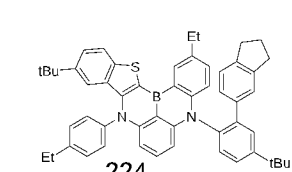
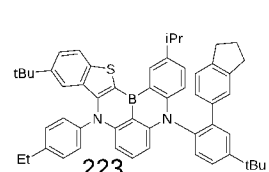
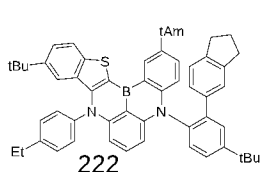
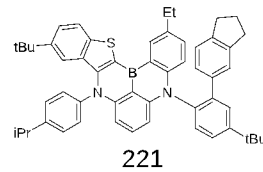
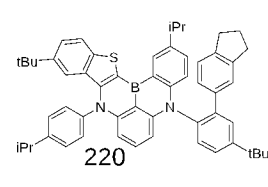
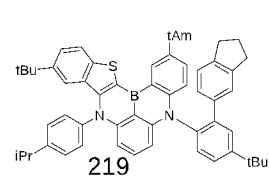
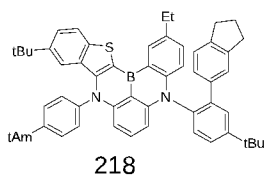
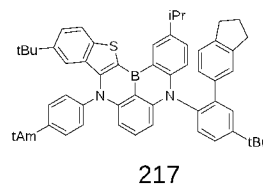
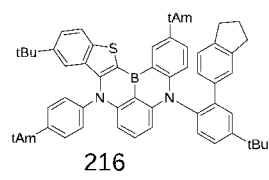
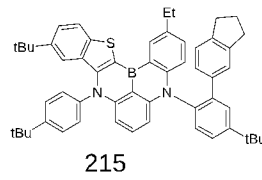
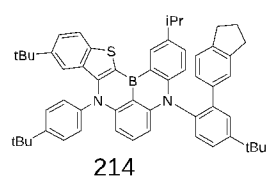
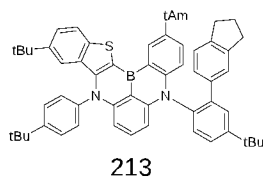
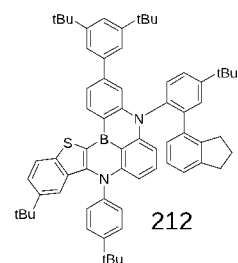
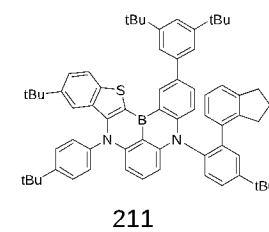
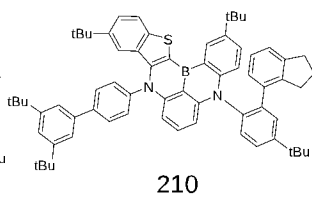
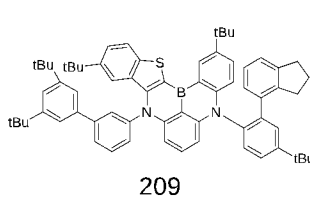
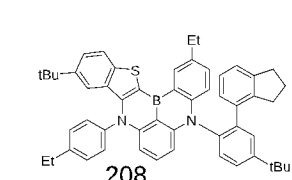
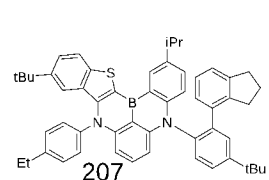
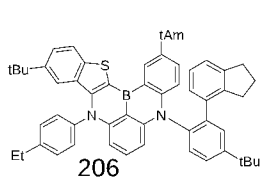
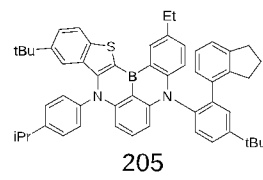
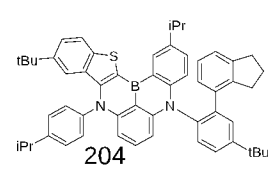
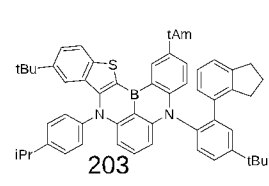
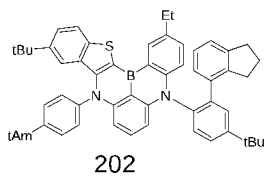
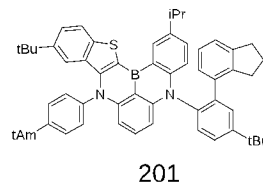
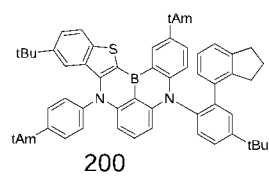
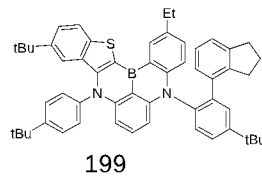
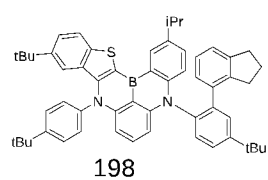
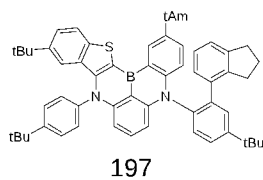


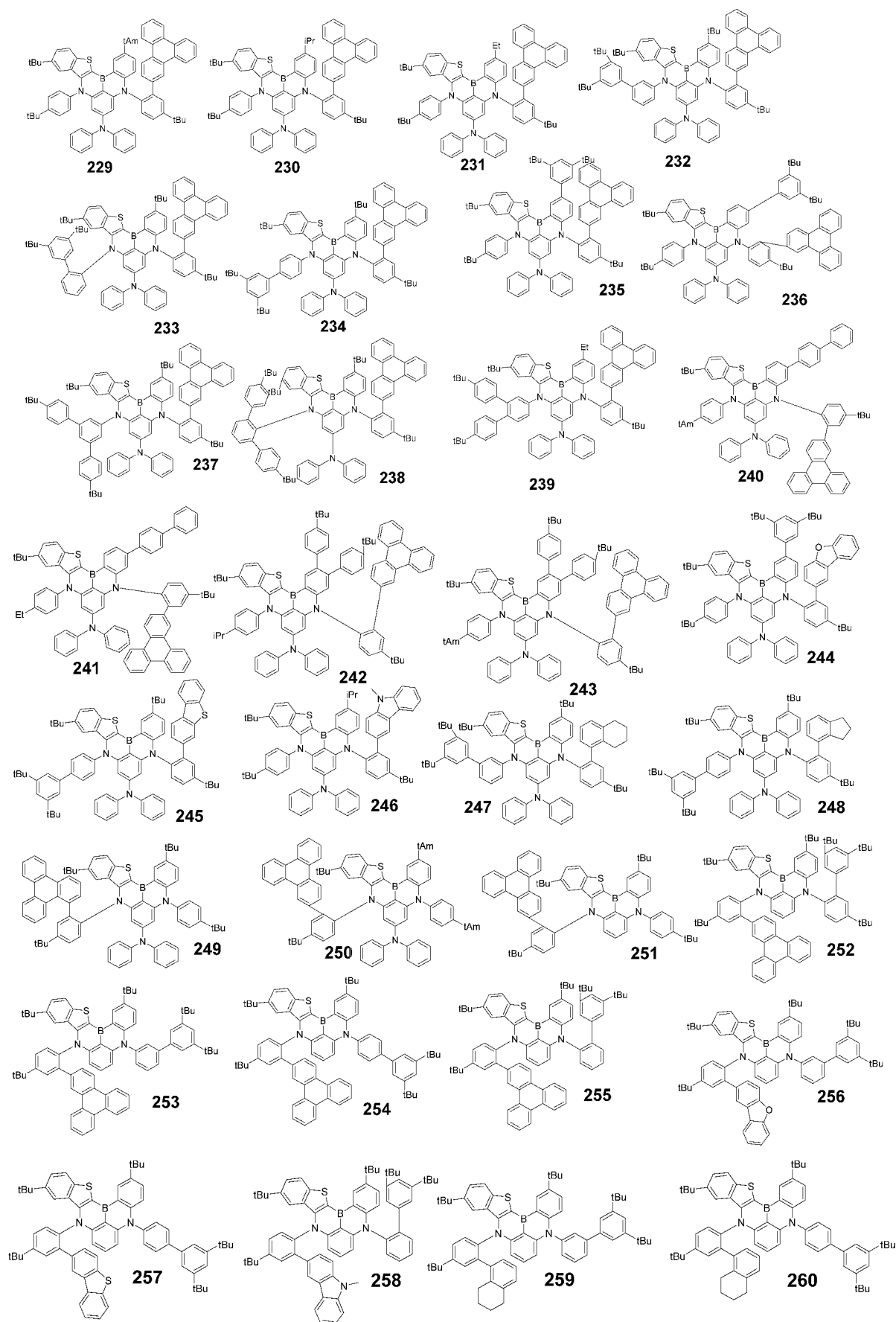


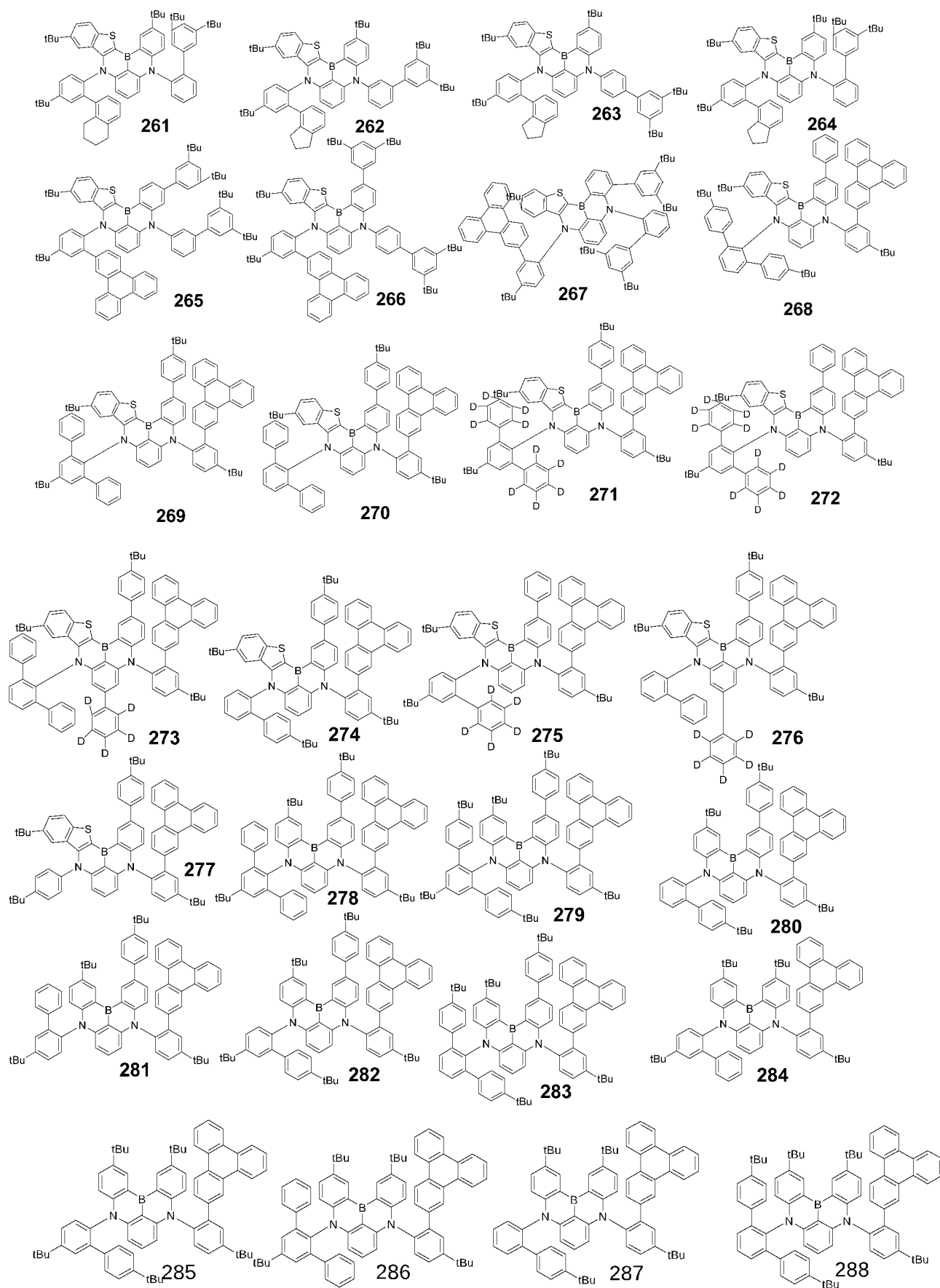


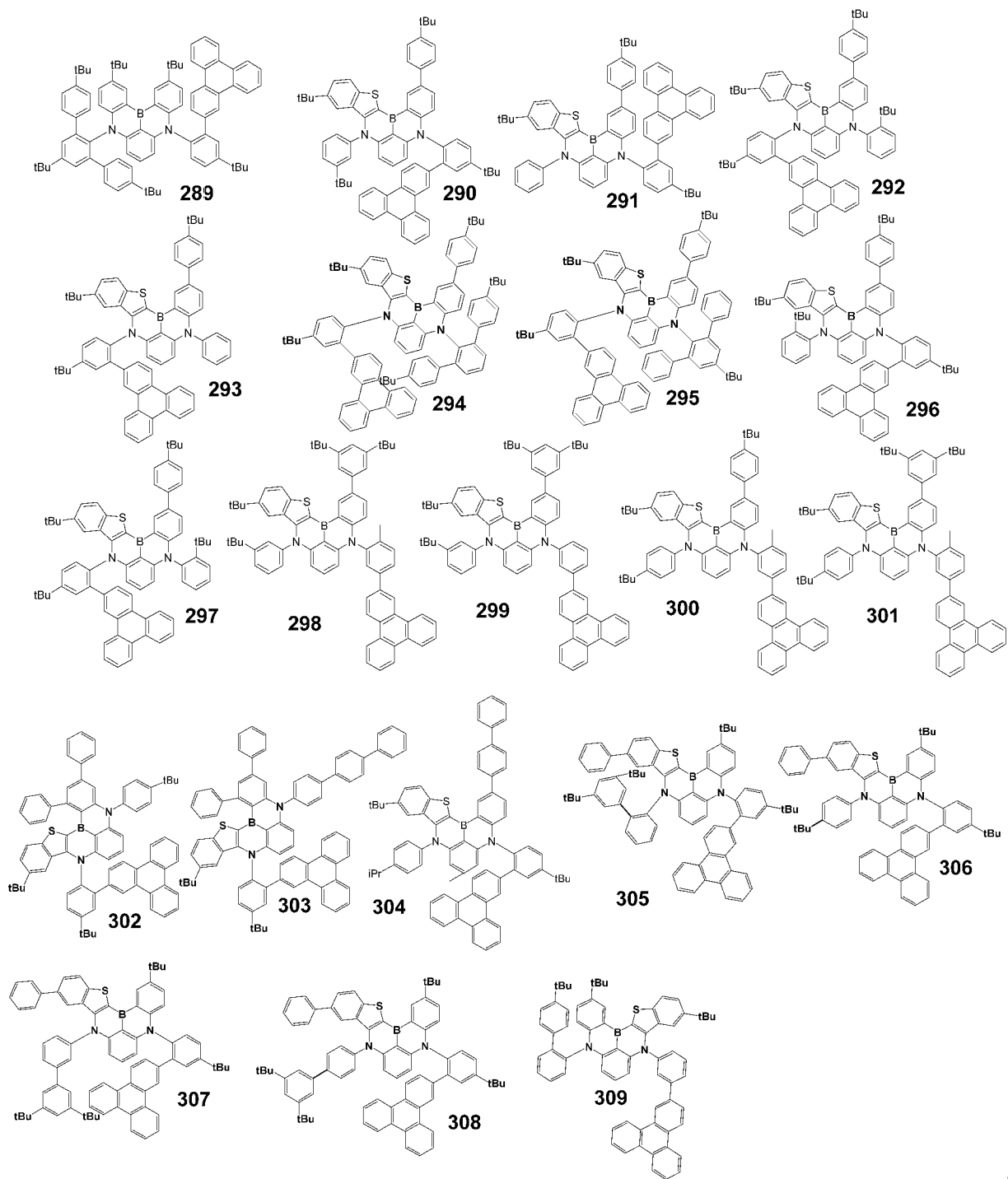




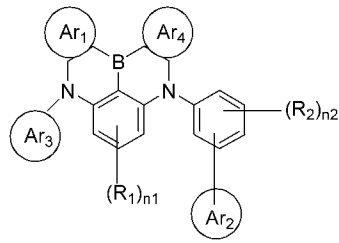




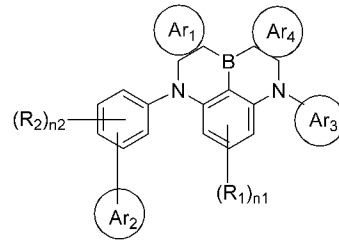




- 8、一种混合物，其中，包括有机化合物和至少一种有机功能材料，所述有机功能材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料；
- 其中，所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构：

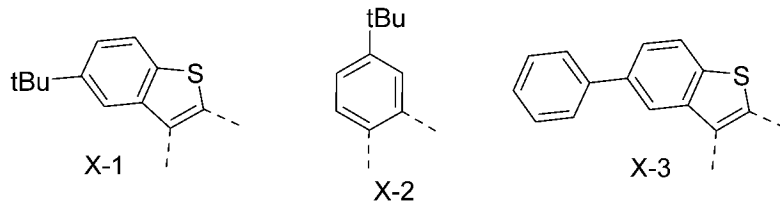


通式(1)

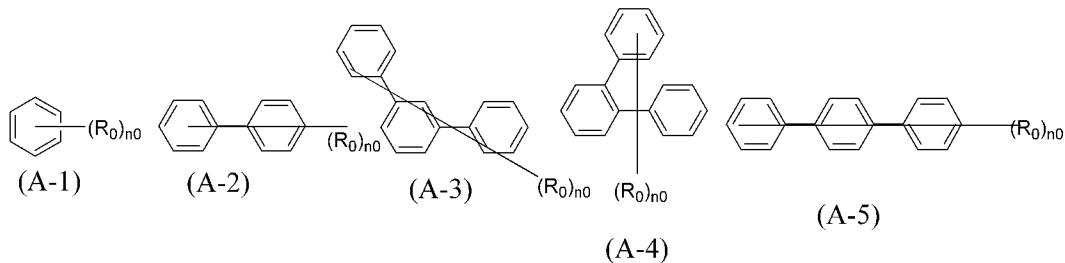


通式(2)

其中, Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构:



Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构:

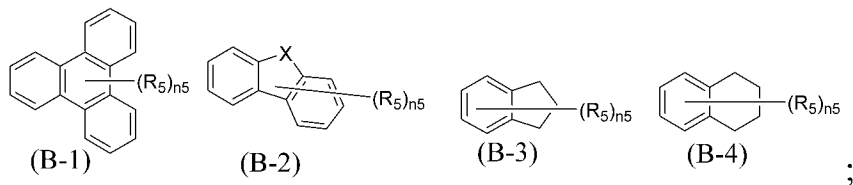


5

当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结构;

10 Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar_2 选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



;

X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

15 n_0 、 n_1 、 n_2 、 n_5 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

任一 R_0 、 R_1 、 R_2 或 R_5 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的

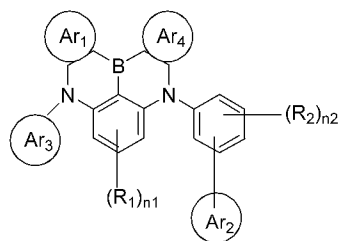
烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯炔基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、
5 硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基；

当 n_0 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_0 相互成环或不成环；当 n_1 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_1 相互成环或不成环；当 n_2 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_2 相互成环或不成环；当 n_5 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_5 相互成环或不成环。

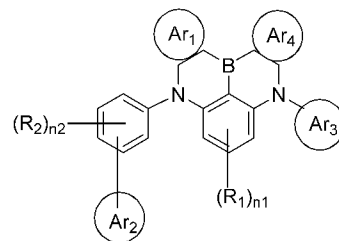
9、一种组合物，其中，包括有机化合物或混合物、及至少一种有机溶剂；

所述混合物包括所述有机化合物和至少一种有机功能材料，所述有机功能材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料；

所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构：

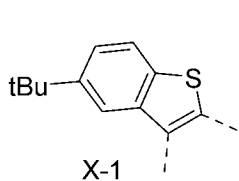


通式(1)

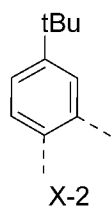


通式(2)

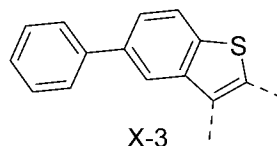
其中， Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构：



X-1

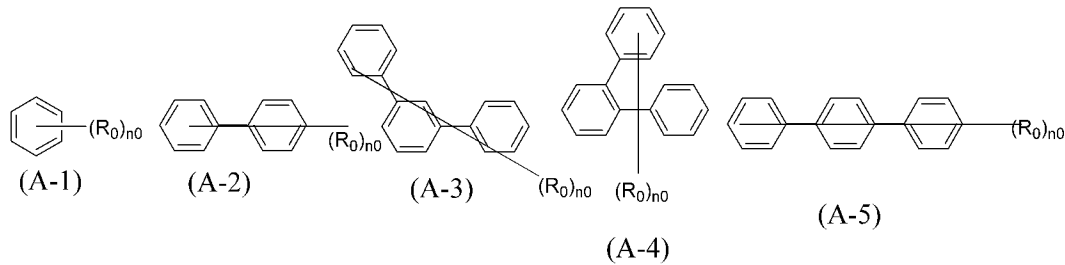


X-2



X-3

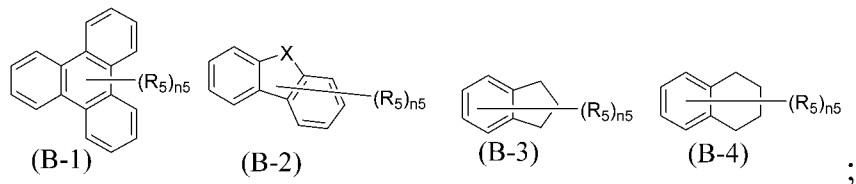
Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构：



当 Ar_1 选自式 X-2 时, Ar_4 独立地选自式 (A-2) 至式 (A-5) 中任一者所表示的结构;

- 5 Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar_2 选自式 (B-1) 至式 (B-4) 中任一者所表示的结构:



- 10 X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

n_0 、 n_1 、 n_2 、 n_5 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

- 任一 R_0 、 R_1 、 R_2 或 R_5 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯烷基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;
- 15 20 25

当 n_0 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_0 相互成环或不成环; 当 n_1 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_1 相互成环或不成环; 当 n_2 大于或等于 2 时, 相邻的两

个 R_2 相互成环或不成环; 当 n_5 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R_5 相互成环或不成环。

10、一种有机发光器件, 其中, 包括:

第一电极;

5 第二电极, 与所述第一电极相对设置; 以及

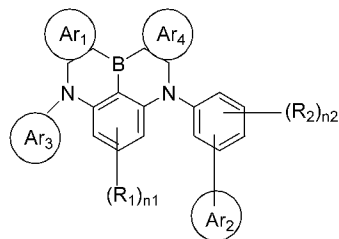
有机功能层, 位于所述第一电极与所述第二电极之间;

其中, 所述有机功能层的材料包括有机化合物中的一种或多种, 或混合物, 或由组合物制备而成;

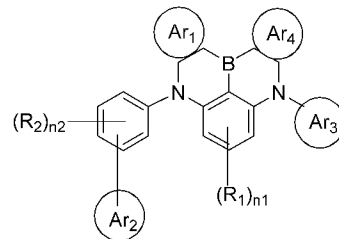
所述组合物包括所述有机化合物或所述混合物、及至少一种有机溶剂;

10 所述混合物包括所述有机化合物和至少一种有机功能材料, 所述有机功能材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料;

所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构:

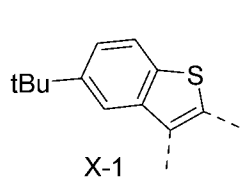


通式(1)

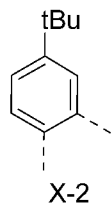


通式(2)

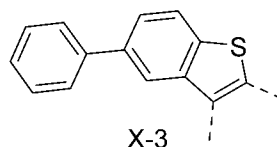
15 其中, Ar_1 独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构:



X-1

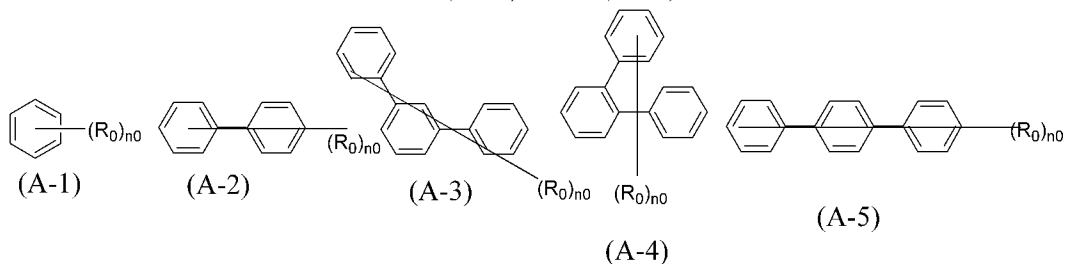


X-2



X-3

Ar_3 和 Ar_4 分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构:

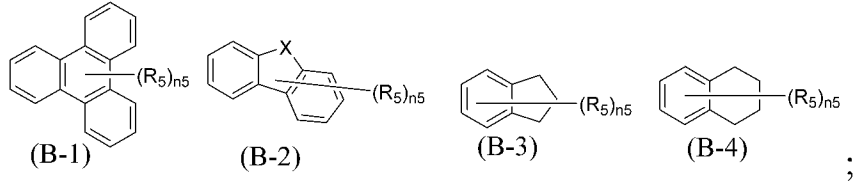


20 当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结

构;

Ar₃的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar₄的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar₂选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

n₀、n₁、n₂、n₅ 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

任一 R₀、R₁、R₂ 或 R₅ 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯烃基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;

当 n₀ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₀ 相互成环或不成环; 当 n₁ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₁ 相互成环或不成环; 当 n₂ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₂ 相互成环或不成环; 当 n₅ 大于或等于 2 时, 相邻的两个 R₅ 相互成环或不成环。

11、根据权利要求 10 所述的有机发光器件, 其中, 所述有机功能层至少包括发光层, 所述发光层包括主体材料以及客体材料, 所述客体材料为所述有机化合物中的一种或多种, 所述主体材料包括稠合芳族衍生物或杂芳族化合物。

12、根据权利要求 11 所述的有机发光器件, 其中, 所述主体材料包括蒽

衍生物、茈衍生物、萘衍生物、并五苯衍生物、菲化合物、蒽蒽化合物、咔唑衍生物、二苯并呋喃衍生物、梯子型呋喃化合物、嘧啶衍生物中的一种或一种以上。

13、根据权利要求 11 所述的有机发光器件，其中，所述主体材料与所述
5 客体材料的质量比为 99:1 至 70:30。

14、一种显示面板，其中，包括有机发光器件，所述有机发光器件包括：
第一电极；

第二电极，与所述第一电极相对设置；以及

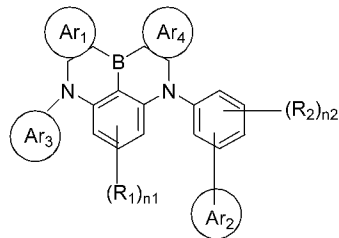
有机功能层，位于所述第一电极与所述第二电极之间；

10 其中，所述有机功能层的材料包括有机化合物中的一种或多种，或混合物，
或由组合物制备而成；

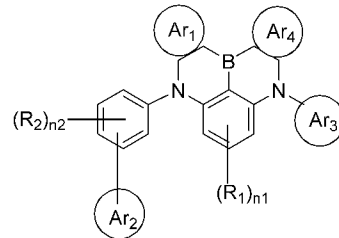
所述组合物包括所述有机化合物或所述混合物、及至少一种有机溶剂；

所述混合物包括所述有机化合物和至少一种有机功能材料，所述有机功能
材料选自空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料、电子
15 阻挡材料、空穴阻挡材料、发光材料、主体材料或有机染料；

所述有机化合物具有如通式(1)或(2)所示的结构：

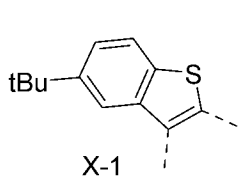


通式(1)

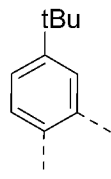


通式(2)

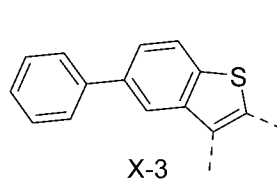
其中，Ar₁独立地选自式(X-1)至式(X-3)中任一者所表示的结构：



X-1

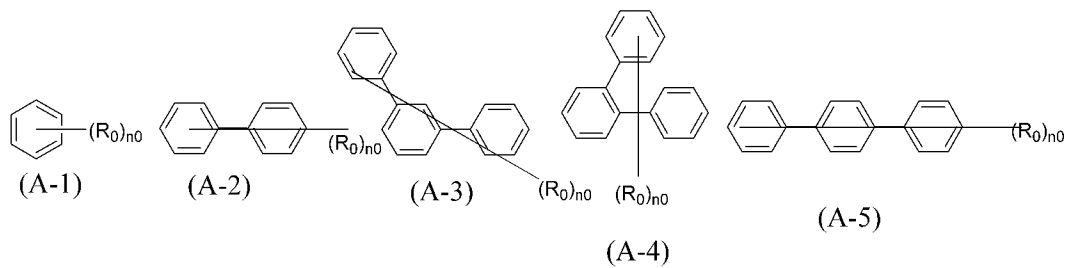


X-2



X-3

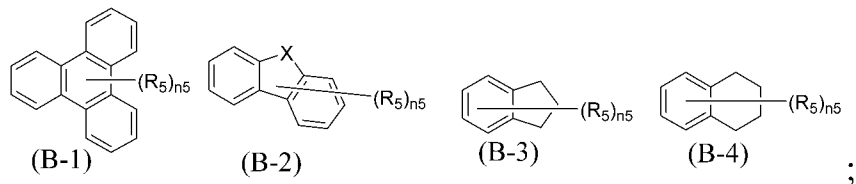
20 Ar₃和Ar₄分别独立地选自式(A-1)至式(A-5)中任一者所表示的结构：



当 Ar_1 选自式X-2时, Ar_4 独立地选自式(A-2)至式(A-5)中任一者所表示的结构;

- 5 Ar_3 的连接位点为任一苯环上的碳原子, Ar_4 的稠合位点在同一苯环中处于邻位的两个碳原子上;

Ar_2 选自式(B-1)至式(B-4)中任一者所表示的结构:



- 10 X 分别独立地选自 O, S, N-CH₃, N-Ph 或 C(CH₃)₂;

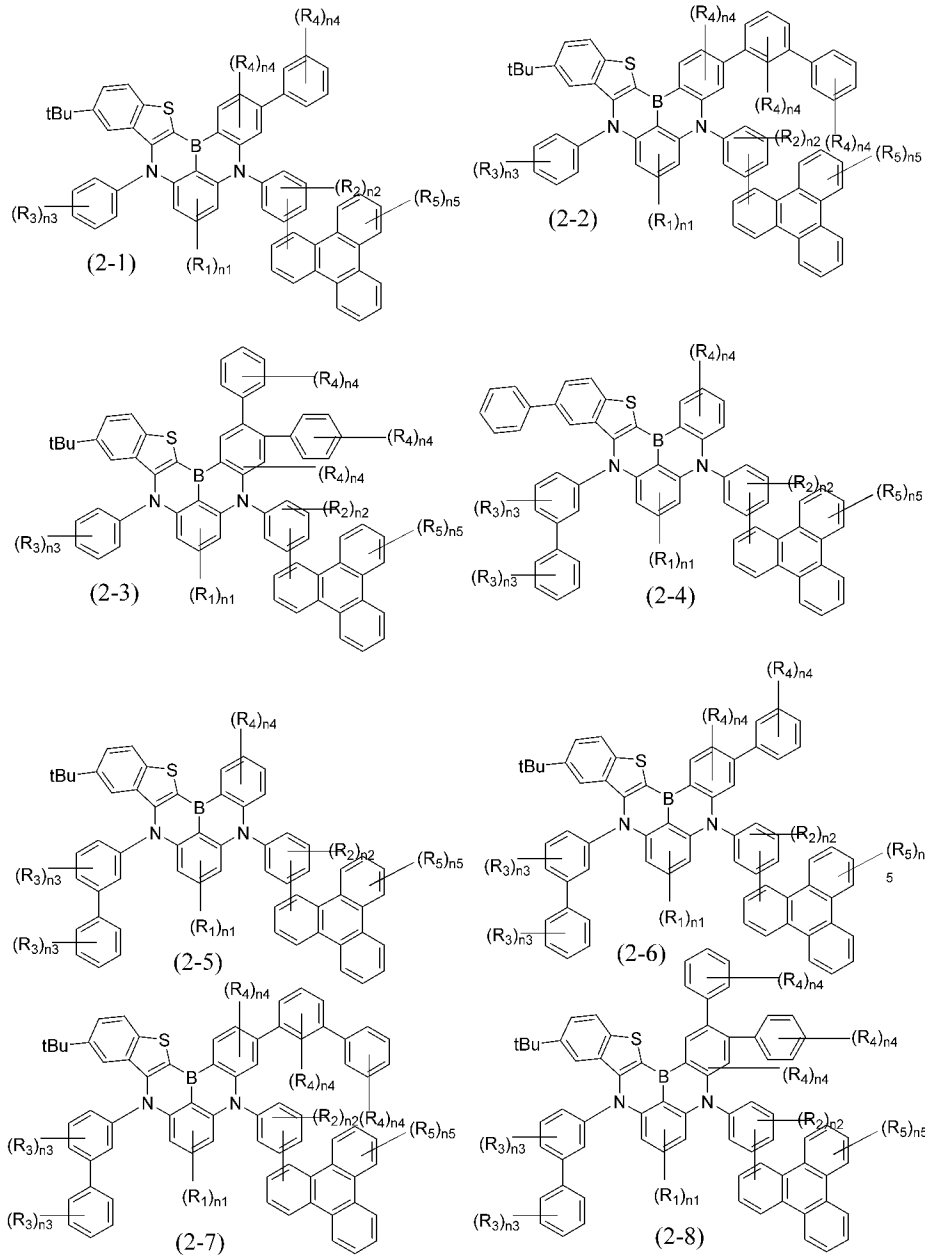
n_0 、 n_1 、 n_2 、 n_5 分别独立地选自 0-14 中的一个正整数;

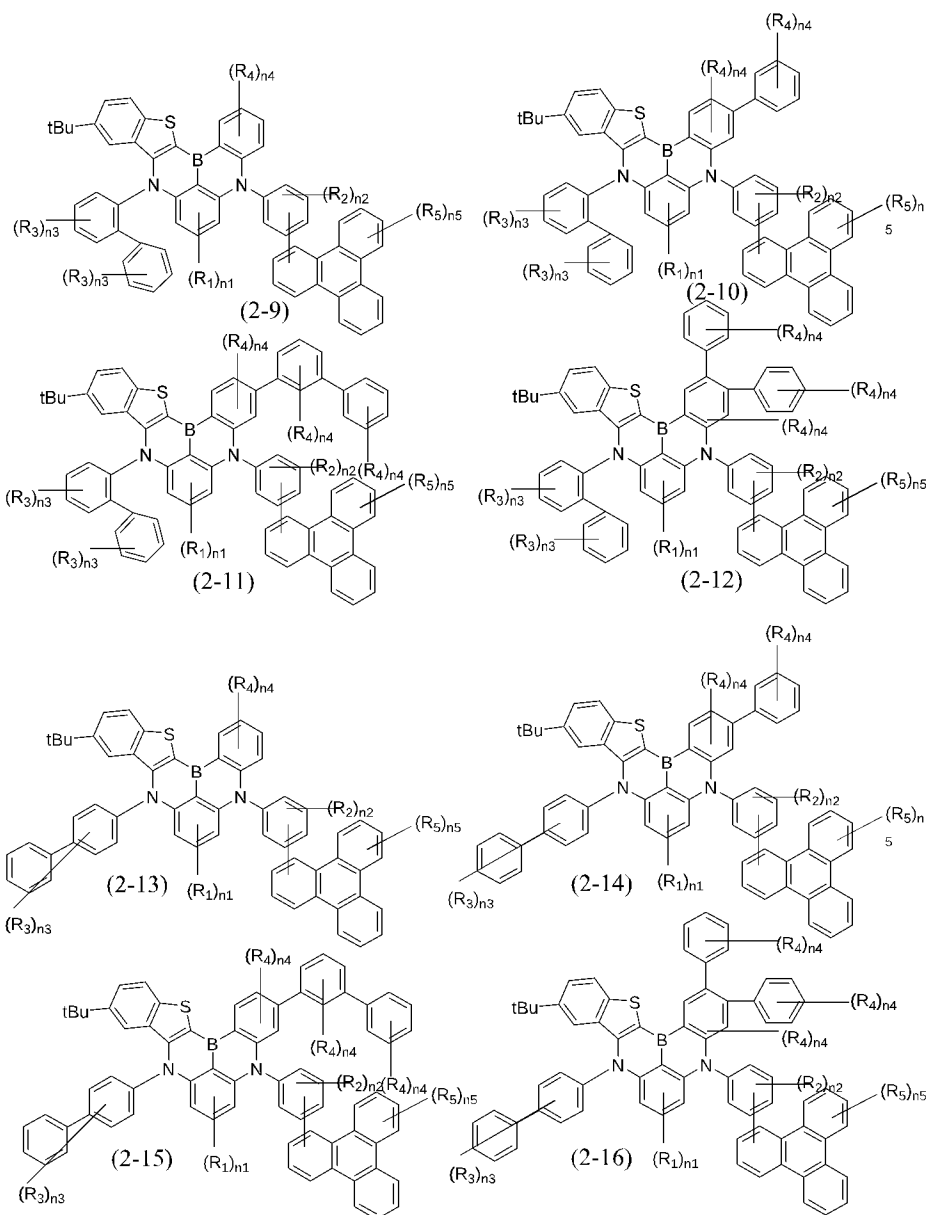
- 任一 R_0 、 R_1 、 R_2 或 R_5 分别独立地选自: -H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的烯烷基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳氧基;
- 15 20

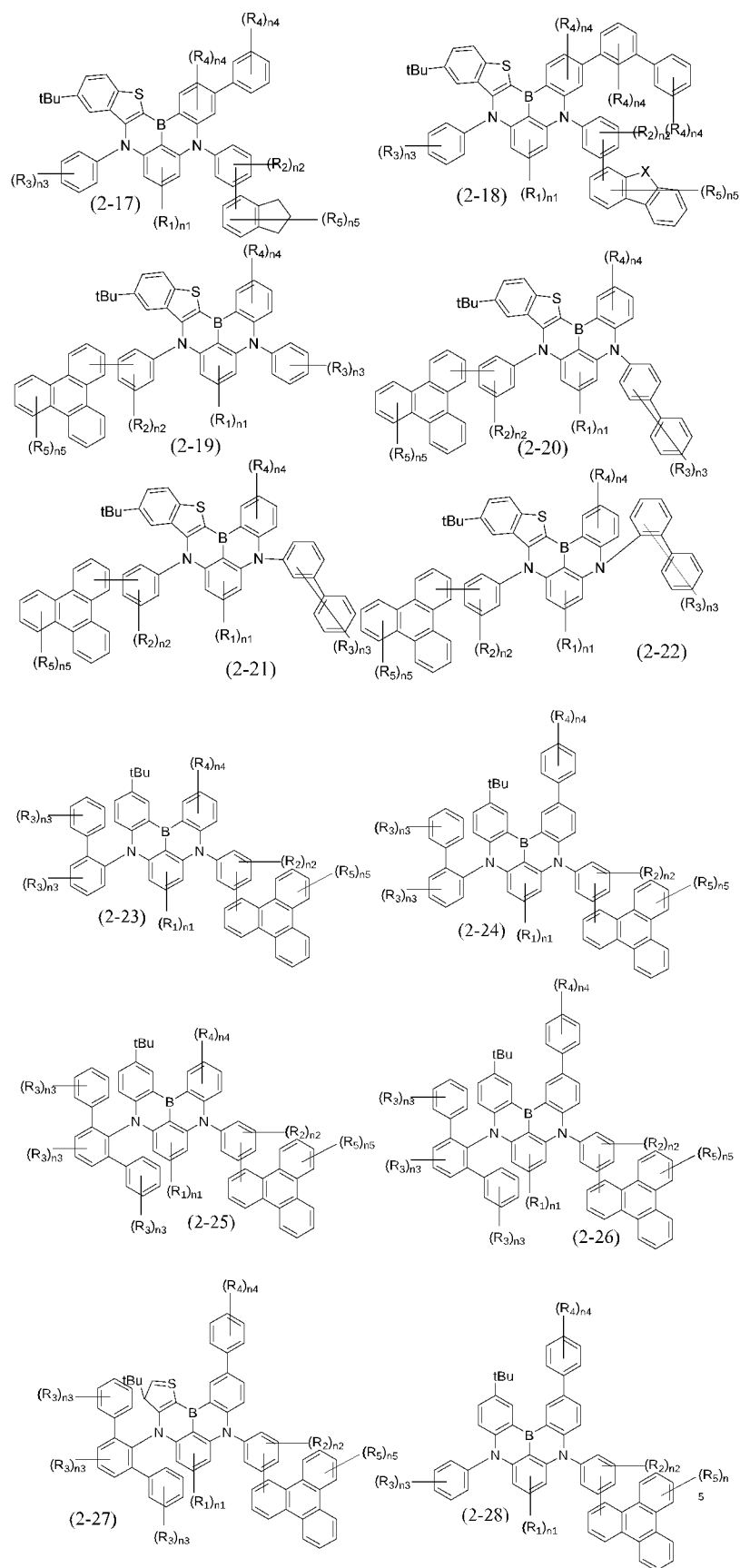
- 当 n_0 大于或等于2时, 相邻的两个 R_0 相互成环或不成环; 当 n_1 大于或等于2
25 时, 相邻的两个 R_1 相互成环或不成环; 当 n_2 大于或等于2时, 相邻的两个 R_2 相互

成环或不成环; 当 n_5 大于或等于2时, 相邻的两个 R_5 相互成环或不成环。

15、根据权利要求 14 所述的显示面板, 其中, 所述有机化合物具有如通式(2-1)至通式(2-28)中任一者所示的结构:







其中，任一 R_3 、 R_4 分别独立地选自：-H、-D、具有 1 至 20 个碳原子的直

链烷基、具有 1 至 20 个碳原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个碳原子的直链硫
 代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷基、具有 3 至 20 个碳原子的环状烷
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的烷氧
 基、具有 3 至 20 个碳原子的支链硫代烷氧基、具有 3 至 20 个碳原子的环状的
 5 硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个碳原子的酮基、具有 2 至 20 个碳原子的
 烷氧基羰基、具有 7 至 20 个碳原子的芳氧基羰基、具有 1 至 20 个碳原子的
 烯烷基、-CN、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯基、硫氰
 酸酯基、异硫氰酸酯基、羟基、硝基、-CF₃、-Cl、-Br、-F、取代或未取代的
 10 环原子数为 6 至 30 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 30 的杂芳香
 基团、取代或未取代的环原子数为 6 至 30 的芳氧基、取代或未取代的环原子
 数为 5 至 30 的杂芳氧基；

n_3 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

当 n_3 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_3 相互成环或不成环；

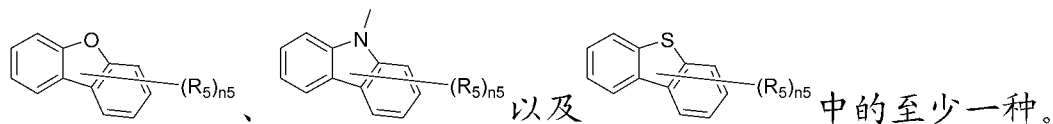
n_4 大于或者等于 0 且小于或者等于 5；

15 当 n_4 大于或等于 2 时，相邻的两个 R_4 相互成环或不成环。

16、根据权利要求 15 所述的显示面板，其中，任一 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 或 R_5
 独立地选自 -H、-D、具有 1 至 10 个碳原子的直链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的支
 链烷基、具有 3 至 10 个碳原子的环状烷基。

17、根据权利要求 16 所述的显示面板，其中，任一 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 或 R_5
 20 独立地选自：-H、-D、具有 1 至 4 个碳原子的直链烷基、具有 3 至 5 个碳原子的支
 链烷基。

18、根据权利要求 14 所述的显示面板，其中，当 Ar_2 中存在所述式(B-2)
 所表示的结构时，所述式(B-2)所表示的结构选为：



25 19、根据权利要求 14 所述的显示面板，其中，所述有机功能层至少包括发
 光层，所述发光层包括主体材料以及客体材料，所述客体材料为所述有机化合

物中的一种或多种，所述主体材料包括稠合芳族衍生物或杂芳族化合物。

20、根据权利要求19所述的显示面板，其中，所述主体材料包括蒽衍生物、芘衍生物、萘衍生物、并五苯衍生物、菲化合物、荧蒽化合物、咔唑衍生物、二苯并呋喃衍生物、梯子型呋喃化合物、嘧啶衍生物中的一种或一种以上。

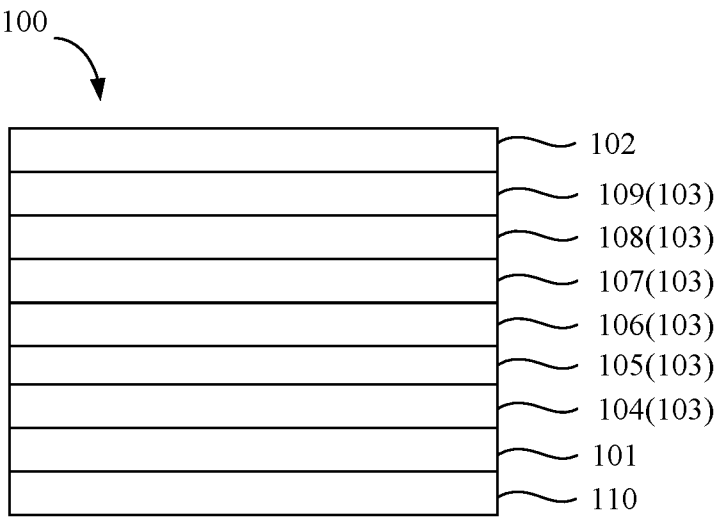
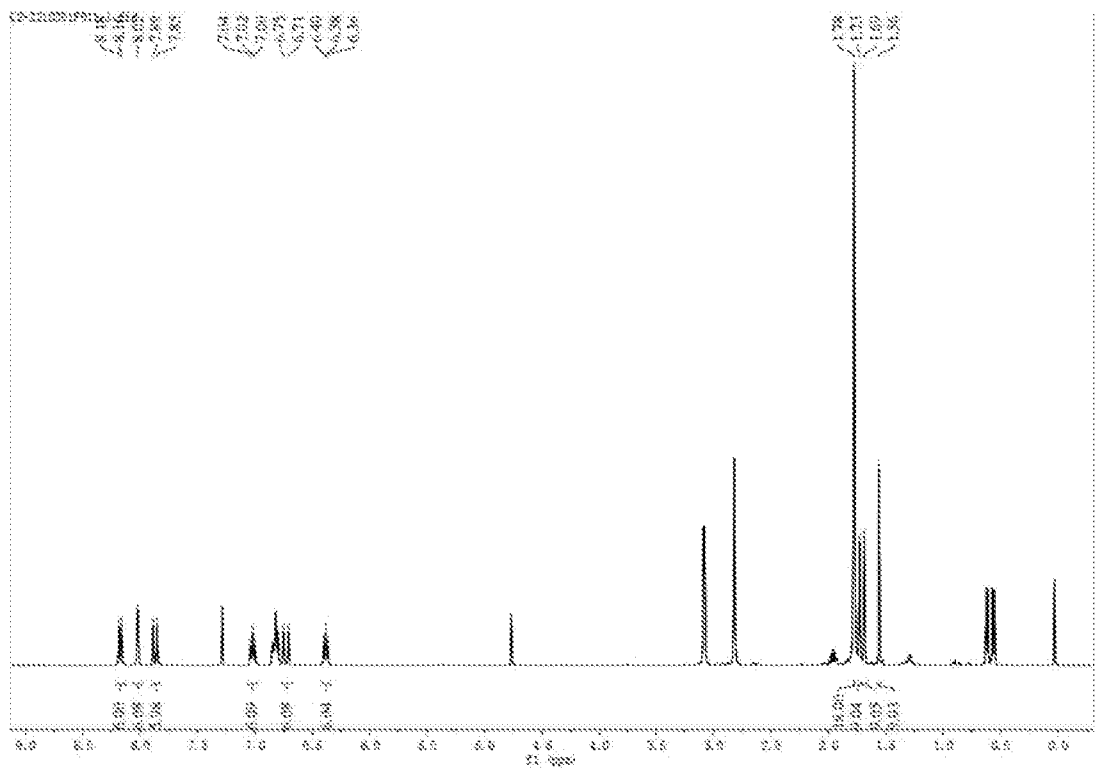


图 1



图 2



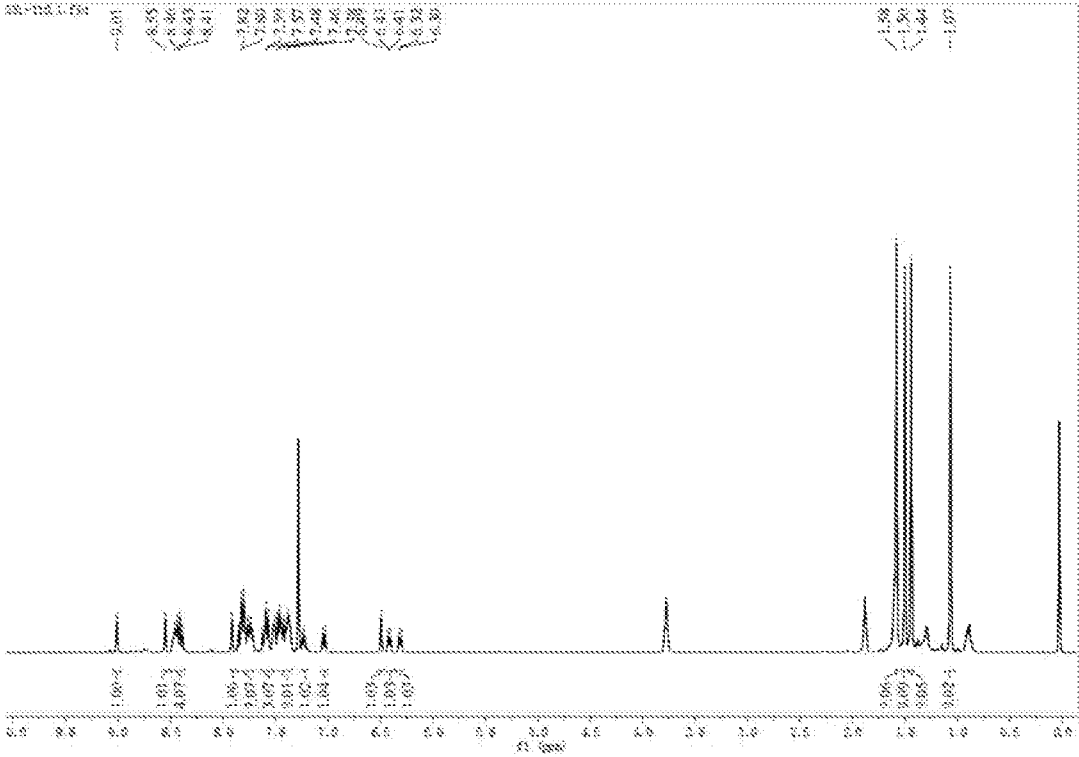


图 5

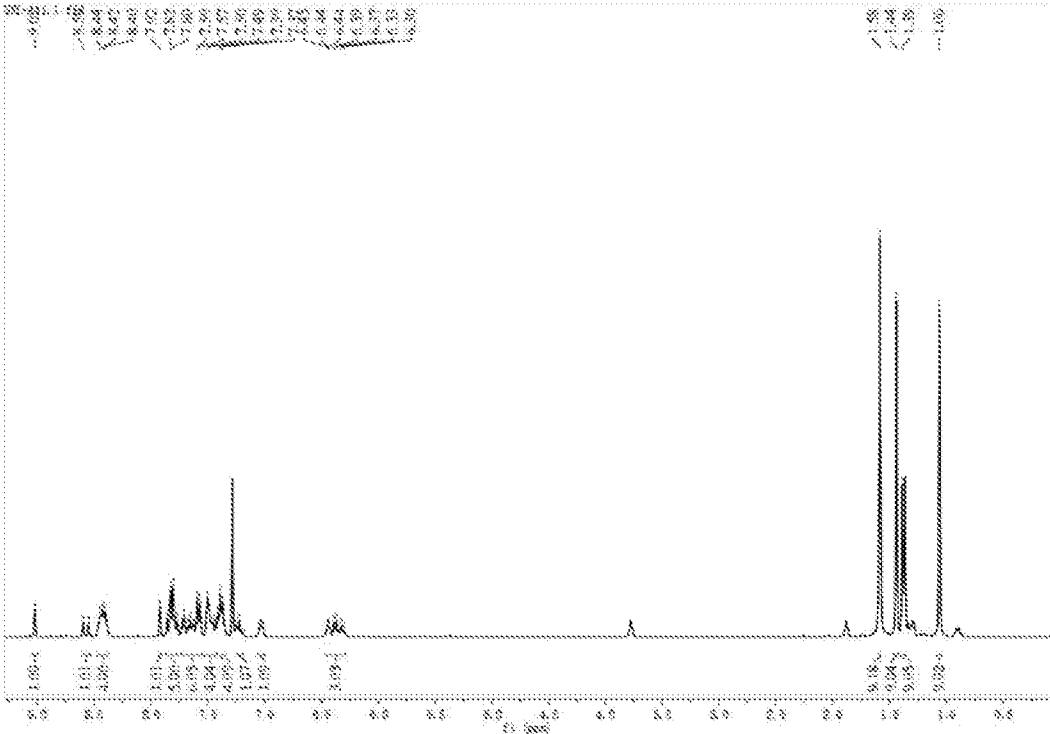


图 6

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2023/104688

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07F5/02(2006.01)i; C09K11/06(2006.01)i; H10K85/60(2023.01)i; H10K50/11(2023.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC:C07F,C09K,H10K

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CNTXT, ENTXTX, VCN, DWPI, CAPLUS(STN), REGISTRY(STN), CNKI: 发光材料, 华星光电, 热激发延迟荧光, 有机电致发光, 有机发光, OLED, TADF, light emitting, organic light emitting device, structural formula search

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CN 115724869 A (SHENZHEN CHINA STAR OPTOELECTRONICS SEMICONDUCTOR DISPLAY TECHNOLOGY CO., LTD.) 03 March 2023 (2023-03-03) paragraphs 0006-0028, 0035, 0045-0054 and 0120-0160, embodiments 5 and 21, and tables 1 and 2	1-20
X	CN 110662750 A (MATERIAL SCIENCE CO., LTD.) 07 January 2020 (2020-01-07) description, paragraphs 0015-0021, 0049-0056 and 0120-0145	1-20
X	CN 114203935 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 18 March 2022 (2022-03-18) description, paragraphs 0224-0225 and 0243-0339	1-20
A	CN 113924665 A (LG CHEMICAL LTD.) 11 January 2022 (2022-01-11) claims 1-17	1-20
A	CN 114957223 A (JIANGSU JINGRUNHONG MEASUREMENT AND CONTROL TECHNOLOGY CO., LTD. et al.) 30 August 2022 (2022-08-30) embodiment	1-20
A	CN 114989200 A (GUANGZHOU ZHUIGUANG TECHNOLOGY CO., LTD.) 02 September 2022 (2022-09-02) claims 1-10	1-20



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“D” document cited by the applicant in the international application

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

07 October 2023

Date of mailing of the international search report

13 October 2023

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration (ISA/
CN)
China No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao, Haidian District,
Beijing 100088

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/CN2023/104688

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
CN	115724869	A	03 March 2023	None			
CN	110662750	A	07 January 2020	US	2020176679	A1	04 June 2020
				KR	20180127918	A	30 November 2018
				KR	101976556	B1	09 May 2019
				JP	2020520976	A	16 July 2020
				JP	7026405	B2	28 February 2022
				WO	2018216990	A1	29 November 2018
				KR	101876763	B1	11 July 2018
CN	114203935	A	18 March 2022	US	2022093874	A1	24 March 2022
				KR	20220038199	A	28 March 2022
CN	113924665	A	11 January 2022	KR	20210067944	A	08 June 2021
				KR	102441139	B1	07 September 2022
				KR	20210067943	A	08 June 2021
				KR	102437216	B1	29 August 2022
				WO	2021107699	A1	03 June 2021
				WO	2021107699	A9	20 January 2022
				US	2022271226	A1	25 August 2022
CN	114957223	A	30 August 2022	None			
CN	114989200	A	02 September 2022	None			

A. 主题的分类		
C07F5/02(2006.01)i; C09K11/06(2006.01)i; H10K85/60(2023.01)i; H10K50/11(2023.01)i		
按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类		
B. 检索领域		
检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)		
IPC:C07F,C09K,H10K		
包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献		
在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称, 和使用的检索词(如使用))		
CNTXT,ENTXT,C,VN,DWPI,CAPLUS(STN),REGISTRY(STN),CNKI:发光材料,华星光电,热激发延迟荧光,有机电致发光,有机发光,OLED,TADF, light emitting,organic light emitting device,结构式检索		
C. 相关文件		
类 型*	引用文件, 必要时, 指明相关段落	相关的权利要求
X	CN 115724869 A (深圳市华星光电半导体显示技术有限公司) 2023年3月3日 (2023 - 03 - 03) 第0006-0028, 0035, 0045-0054, 0120-0160段, 实施例5, 21, 表1-表2	1-20
X	CN 110662750 A (材料科学有限公司) 2020年1月7日 (2020 - 01 - 07) 说明书第0015-0021, 0049-0056, 0120-0145段	1-20
X	CN 114203935 A (三星显示有限公司) 2022年3月18日 (2022 - 03 - 18) 说明书第0224-0225, 0243-0339段	1-20
A	CN 113924665 A (株式会社LG化学) 2022年1月11日 (2022 - 01 - 11) 权利要求1-17	1-20
A	CN 114957223 A (江苏精润鸿测控技术有限公司 等) 2022年8月30日 (2022 - 08 - 30) 实施例部分	1-20
A	CN 114989200 A (广州追光科技有限公司) 2022年9月2日 (2022 - 09 - 02) 权利要求1-10	1-20
☐ 其余文件在C栏的续页中列出。 ☒ 见同族专利附件。		
* 引用文件的具体类型: “A” 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件 “D” 申请人在国际申请中引证的文件 “E” 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利 “L” 可能对优先权要求构成怀疑的文件, 或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件(如具体说明的) “O” 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件 “P” 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件 “T” 在申请日或优先权日之后公布, 与申请不相抵触, 但为了理解发明之理论或原理的在后文件 “X” 特别相关的文件, 单独考虑该文件, 认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性 “Y” 特别相关的文件, 当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时, 要求保护的发明不具有创造性 “&” 同族专利的文件		
国际检索实际完成的日期		国际检索报告邮寄日期
2023年10月7日		2023年10月13日
ISA/CN的名称和邮寄地址		授权官员
中国国家知识产权局 中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088		王超
		电话号码 (+86) 010-53962337

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号

PCT/CN2023/104688

检索报告引用的专利文件			公布日 (年/月/日)	同族专利			公布日 (年/月/日)
CN	115724869	A	2023年3月3日	无			
CN	110662750	A	2020年1月7日	US	2020176679	A1	2020年6月4日
				KR	20180127918	A	2018年11月30日
				KR	101976556	B1	2019年5月9日
				JP	2020520976	A	2020年7月16日
				JP	7026405	B2	2022年2月28日
				WO	2018216990	A1	2018年11月29日
				KR	101876763	B1	2018年7月11日
CN	114203935	A	2022年3月18日	US	2022093874	A1	2022年3月24日
				KR	20220038199	A	2022年3月28日
CN	113924665	A	2022年1月11日	KR	20210067944	A	2021年6月8日
				KR	102441139	B1	2022年9月7日
				KR	20210067943	A	2021年6月8日
				KR	102437216	B1	2022年8月29日
				WO	2021107699	A1	2021年6月3日
				WO	2021107699	A9	2022年1月20日
				US	2022271226	A1	2022年8月25日
CN	114957223	A	2022年8月30日	无			
CN	114989200	A	2022年9月2日	无			