



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I606996 B

(45)公告日：中華民國 106 (2017) 年 12 月 01 日

(21)申請案號：103115810

(22)申請日：中華民國 103 (2014) 年 05 月 02 日

(51)Int. Cl. :	<i>C07C13/62 (2006.01)</i>	<i>C07C13/72 (2006.01)</i>
	<i>C07C211/61 (2006.01)</i>	<i>C07C22/08 (2006.01)</i>
	<i>C07C25/13 (2006.01)</i>	<i>C07C25/22 (2006.01)</i>
	<i>C07C255/50 (2006.01)</i>	<i>C07C255/52 (2006.01)</i>
	<i>C07D209/86 (2006.01)</i>	<i>C07D307/91 (2006.01)</i>
	<i>C07D311/80 (2006.01)</i>	<i>C07D401/10 (2006.01)</i>
	<i>C07D403/10 (2006.01)</i>	<i>C07D407/10 (2006.01)</i>
	<i>C07D407/12 (2006.01)</i>	<i>C07D407/14 (2006.01)</i>
	<i>C07F7/08 (2006.01)</i>	<i>C09K11/06 (2006.01)</i>
	<i>H01L51/50 (2006.01)</i>	<i>H01L51/00 (2006.01)</i>

(30)優先權：2013/10/14 歐洲專利局 13004921.6

(71)申請人：麥克專利有限公司(德國) MERCK PATENT GMBH (DE)
德國

(72)發明人：海爾 荷葛 HEIL, HOLGER (DE)；羅瑞蓋茲 雷拉依沙貝爾 RODRIGUEZ, LARA-ISABEL (ES)；伯克哈特 彼特 BURKHART, BEATE (DE)；達熙 艾曼達 DARSY, AMANDINE (FR)

(74)代理人：林志剛

(56)參考文獻：

CN 101490207AA

審查人員：王宗偉

申請專利範圍項數：17 項 圖式數：0 共 112 頁

(54)名稱

用於電子裝置之材料

MATERIALS FOR ELECTRONIC DEVICES

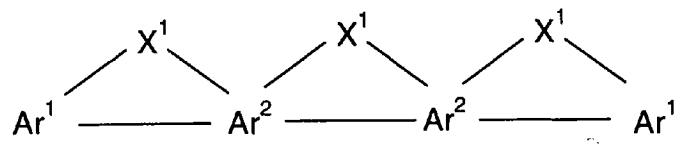
(57)摘要

本案關於具有苯并茚并芴基本結構之化合物及其於電子裝置(特別是有機電致發光裝置)之用途。

The present application relates to compounds having a benzindeno-fluorene basic structure and to the use thereof in electronic devices, in particular in organic electroluminescent devices.

特徵化學式：

式(I)



式(I)

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

【發明名稱】(中文/英文)

用於電子裝置之材料

Materials for electronic devices

【技術領域】

本案關於一種下式(I)之化合物及其於電子裝置(特別是有機電子裝置(OLED))之用途。本發明亦關於包含式(I)之化合物之電子裝置的某些具體實例，及製備式(I)之化合物之方法。

根據本發明，術語電子裝置通常意指包含有機材料之電子裝置。其較佳意指 OLED。

【先前技術】

OLED 之一般構造及功能原則為熟習該項技術者已知且描述(特別是)於 US 4539507、US 5151629、EP 0676461 及 WO 1998/27136 中。

關於電子裝置的性能數據必需進一步改良，特別是考慮到廣泛的商業用途，例如在顯示器中或作為光源。在此方面特別重要的是電子裝置的壽命、效率和操作電壓以及所達成的色值。特別是在發藍光 OLED 的情況下，可能改良關於裝置的壽命和發光所達成的色值。

達成上述改良的一個重要出發點為選擇電子裝置中所

採用的發光化合物。在先前技術中，多種化合物(特別是具有茛并茞基本結構之芳基胺)係記載作為發藍光之化合物。其實例為苯并茛并茞胺，例如根據 WO 2008/006449 和 WO 2007/140847。

作為用於發光層之不發光的化合物(基質化合物)，先前技術特別揭露蔥化合物，如例如 WO 2008/145239 和 WO 2009/100925 中所述。再者，苯并茛并茞(benzindenofluorene)化合物被揭示用於此用途，例如於上述申請案 WO 2008/006449 和 WO 2007/140847 中。

先前技術亦特別說明具有茛并茞基本結構之化合物作為用於電洞傳輸或電洞注入層的化合物，例如於 WO 2006/108497、WO 2006/122630、和 WO 2009/141026 中。

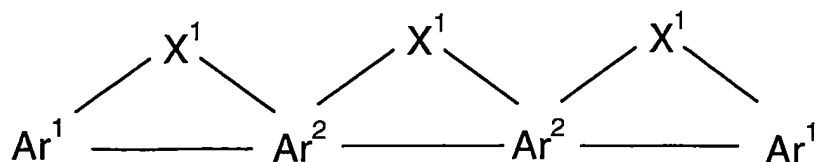
然而，對於使用於電子裝置之新穎化合物仍有需求。特別地，對於可達成電子裝置的極佳性能數據之化合物的需求。在此應強調特別低的操作電壓、長壽命、高功率效率和發光的適當色坐標。

在使用於電子裝置之新穎化合物的研究中，現已意外地發現：具有雙茛并茞(bisindenofluorene)基本結構之式(I)化合物非常適合使用於電子裝置。

這些化合物較佳具有一或多種選自低操作電壓、長壽命、高功率效率和發光的適當色坐標之性質。特別地，彼等使用於發光層時，能夠達成極佳壽命，以及所發出之光的深藍色色坐標。

【發明內容】

本發明因此關於一種式(I)之化合物，



式(I)，

其中：

Ar^1 在每次出現時相同或不同地為具有 6 至 18 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代；

Ar^2 在每次出現時相同或不同地為具有 6 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代；

X^1 在每次出現時相同或不同地為 BR^3 、 $C(R^3)_2$ 、 $-C(R^3)_2-C(R^3)_2-$ 、 $-C(R^3)_2-O-$ 、 $-C(R^3)_2-S-$ 、 $-R^3C=CR^3-$ 、 $-R^3C=N-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $-Si(R^3)_2-Si(R^3)_2-$ 、 $C=O$ 、 O 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 NR^3 、 PR^3 或 $P(=O)R^3$ ；

R^1 、 R^2 、 R^3 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C(=O)R^4$ 、 CN 、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、 $P(=O)(R^4)_2$ 、 OR^4 、 $S(=O)R^4$ 、 $S(=O)_2R^4$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基基團或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基基團或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基基團，其中上述基團各自可經一或多個基團

R^4 取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、 NR^4 、 $P(=O)(R^4)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 或 SO_2 置換，或具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個基團 R^4 取代，其中二或多個基團 R^3 可彼此連接且可形成環；

R^4 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C(=O)R^5$ 、 CN 、 $Si(R^5)_3$ 、 $N(R^5)_2$ 、 $P(=O)(R^5)_2$ 、 OR^5 、 $S(=O)R^5$ 、 $S(=O)_2R^5$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基基團或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基基團或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基基團，其中上述基團各自可經一或多個基團 R^5 取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-R^5C=CR^5-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^5$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^5-$ 、 NR^5 、 $P(=O)(R^5)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 或 SO_2 置換，或具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個基團 R^5 取代，其中二或多個基團 R^4 可彼此連接且可形成環；

R^5 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂族、芳族或雜芳族有機基團，其中，此外，一或多個 H 原子可經 D 或 F 置換；二或多個取代基 R^5 在此可彼此連接且可形成環；

其中二個基團 Ar^1 中之至少一者必須含有 10 或更多個芳族環原子；及

其中，如果二個基團 Ar^1 中之一者為苯基基團，則兩個基團 Ar^1 中之另一者必須不含超過 14 個芳族環原子。

關於式(I)，至相鄰基團 Ar^1 或 Ar^2 和至基團 X^1 之鍵可各分別存在於基團 Ar^2 或 Ar^1 之任何所要位置。特別地，式(I)的描述並不意味著該基團 X^1 必須存在於彼此之順式位置。基團 X^1 可存在於彼此之順式或反式位置。

就本發明的意義而言，芳基基團含有 6 至 60 個芳族環原子；就本發明的意義而言，雜芳基基團含有 5 至 60 個芳族環原子，其中至少一者為雜原子。雜原子較佳地選自 N、O 及 S。此表示基本定義。如果在本發明說明中指示其他較佳選擇，例如有關芳族環原子或雜原子的存在數目，這些適用。

芳基基團或雜芳基基團在此意指簡單芳族環，也就是苯，或簡單雜芳族環，例如吡啶、嘧啶或噻吩，或縮合(環合(annellated))芳族或雜芳族多環，例如萘、菲、喹啉或咔唑。就本申請案的意義而言，縮合(環合)芳族或雜芳族多環由二或多個彼此縮合之簡單芳族或雜芳族環組成。

在各情況下可被上述基團取代且可經由任何所要位置連結於芳族或雜芳族環系統之芳基或雜芳基基團特別是意指衍生自下列之基團：苯、萘、蒽、菲、芘、二氫芘、蒽(chrysene)、芘、丙二烯合芘(fluoranthene)、苯并蒽、苯并菲、稠四苯、稠五苯、苯并芘、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、呋喃、吡啶、喹啉、

9,9'-二芳基萸、三芳基胺、二芳基醚、二苯乙烯等等，就本發明的意義而言亦意欲為芳族環系統，以及其中二或多個芳基基團以例如直鏈或環狀烷基、烯基或炔基或以矽基連接之系統。再者，其中二或多個芳基或雜芳基基團係經由單鍵彼此連結之系統，就本發明的意義而言亦為芳族或雜芳族環系統，諸如，例如系統諸如聯苯、聯三苯或二苯基三吡。

具有 5-60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情形下亦可經如上述定義之基團取代且可經由任何所要位置連結於芳族或雜芳族基團)特別意指衍生自下列之基團：苯、萘、蒽、苯并蒽、菲、苯并菲、芘、蒽(chrysene)、芘、丙二烯合萸(fluoranthene)、稠四苯、稠五苯、苯并芘、聯苯、聯伸二苯(biphenylene)、聯三苯(terphenyl)、聯伸三苯(terphenylene)、聯四苯(quaterphenyl)、萸、螺雙萸、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛并萸、三茛并苯(truxene)、異三茛并苯(isotruxene)、螺三茛并苯、螺異三并苯茛(spiroisotruxene)、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、咪唑、吡啶并咪唑、茛并咪唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻吡、啡噻吡、吡啶、咪唑、咪唑、苯并咪唑、萘并咪唑(naphthimidazole)、菲并咪唑(phenanthrimidazole)、吡啶并咪唑(pyridimidazole)、

吡 咩 并 咪 唑 (pyrazinimidazole)、喹 喹 啉 并 咪 唑 (quinoxalinimidazole)、喹 唑、苯 并 喹 唑、萘 并 喹 唑 (naphthoxazole)、蔥 并 喹 唑 (anthroxazole)、菲 并 喹 唑 (phenanthroxazole)、異 喹 唑、1,2-噻 唑、1,3-噻 唑、苯 并 噻 唑、嗒 咩、苯 并 嗒 咩、嘧 啶、苯 并 嘧 啶、喹 喹 啉、1,5-二 氮 雜 蔥、2,7-二 氮 雜 芘、2,3-二 氮 雜 芘、1,6-二 氮 雜 芘、1,8-二 氮 雜 芘、4,5-二 氮 雜 芘、4,5,9,10-四 氮 雜 芘、吡 咩、啡 咩、啡 喹 咩、啡 噻 咩、熒 紅 環 (fluorubin)、嘹 啶、氮 雜 卞 唑、苯 并 卞 咩、啡 咩、1,2,3-三 唑、1,2,4-三 唑、苯 并 三 唑、1,2,3-喹 二 唑、1,2,4-喹 二 唑、1,2,5-喹 二 唑、1,3,4-喹 二 唑、1,2,3-噻 二 唑、1,2,4-噻 二 唑、1,2,5-噻 二 唑、1,3,4-噻 二 唑、1,3,5-三 咩、1,2,4-三 咩、1,2,3-三 咩、四 唑、1,2,4,5-四 咩、1,2,3,4-四 咩、1,2,3,5-四 咩、喋 呤、喋 啶、吡 啉 及 苯 并 噻 二 唑，或 這 些 基 團 的 組 合。

為 了 本 發 明 之 目 的，具 有 1 至 40 個 C 原 子 之 直 鏈 烷 基 基 團 或 具 有 3 至 40 個 C 原 子 之 支 鏈 或 環 狀 烷 基 基 團 或 具 有 2 至 40 個 C 原 子 之 烯 基 或 炔 基 基 團，其 中，此 外，個 別 H 原 子 或 CH_2 基 團 可 經 在 該 等 基 團 定 義 下 之 上 述 基 團 取 代，較 佳 意 指 基 團：甲 基、乙 基、正 丙 基、異 丙 基、正 丁 基、異 丁 基、第 二 丁 基、第 三 丁 基、2-甲 基 丁 基、正 戊 基、第 二 戊 基、環 戊 基、新 戊 基、正 己 基、環 己 基、新 己 基、正 庚 基、環 庚 基、正 辛 基、環 辛 基、2-乙 基 己 基、三 氟 甲 基、五 氟 乙 基、2,2,2-三 氟 乙 基、乙 烯 基、丙 烯 基、丁 烯 基、戊 烯 基、環 戊 烯 基、己 烯 基、環 己 烯 基、庚

烯基、環庚烯基、辛烯基、環辛烯基、乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基或辛炔基。具有 1 至 40 個 C 原子之烷氧基或烷硫基(thioalkyl)基團較佳意指甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、異丁氧基、第二丁氧基、第三丁氧基、正戊氧基、第二戊氧基、2-甲基丁氧基、正己氧基、環己氧基、正庚氧基、環庚氧基、正辛氧基、環辛氧基、2-乙基己氧基、五氟乙氧基、2,2,2-三氟乙氧基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、異丙硫基、正丁硫基、異丁硫基、第二丁硫基、第三丁硫基、正戊硫基、第二戊硫基、正己硫基、環己硫基、正庚硫基、環庚硫基、正辛硫基、環辛硫基、2-乙基己硫基、三氟甲硫基、五氟乙硫基、2,2,2-三氟乙硫基、乙烯硫基、丙烯硫基、丁烯硫基、戊烯硫基、環戊烯硫基、己烯硫基、環己烯硫基、庚烯硫基、環庚烯硫基、辛烯硫基、環辛烯硫基、乙炔硫基、丙炔硫基、丁炔硫基、戊炔硫基、己炔硫基、庚炔硫基或辛炔硫基。

二或多個基團彼此可形成環之式，就本申請案之目的，意欲意指(尤其是)二個基團彼此以化學鍵連接。再者，然而，上述式也意欲意指：在其中二個基團中之一者意是氫的情況下，第二基團係鍵結至氫原子鍵結的位置，並形成環。

從基團 Ar^2 至相鄰基團 Ar^1 或 Ar^2 的鍵較佳各存在於彼此之對位。

Ar^1 較佳在每次出現時係相同或不同地選自具有 6 至

14 個芳族環原子，特佳 6 至 10 個芳族環原子之芳基基團或雜芳基基團，其中 Ar^1 在各情況下可經一或多個基團 R^1 取代。

Ar^1 較佳在每次出現時係相同或不同地選自具有 6 至 14 個芳族環原子，特佳 6 至 10 個芳族環原子之芳基基團，其中 Ar^1 在各情況下可經一或多個基團 R^1 取代。

基團 Ar^2 較佳為苯基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代。

根據一特佳具體實例，基團 Ar^1 為萘基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代，且基團 Ar^2 為苯基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代。

根據另一特佳具體實例，二個基團 Ar^1 中之一者為苯基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代，且兩個基團 Ar^1 中之另一者為萘基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代，且基團 Ar^2 為苯基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代。

較佳的是 X^1 在每次出現時係相同或不同地選自 $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$ 、 $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 O 、 S 、 $\text{S}=\text{O}$ 、 SO_2 及 NR^3 ，特佳 $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 O 、 S 及 NR^3 ，非常特佳 $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 。

R^1 和 R^2 較佳在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 CN 、 $\text{Si}(\text{R}^4)_3$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基基團或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基基團，其中上述基團各自可經一或多個基團 R^4 取代

且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{R}^4\text{C}=\text{CR}^4-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^4)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $-\text{NR}^4-$ 、 $-\text{O}-$ 或 $-\text{S}-$ 置換，或具有 5 至 20 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個基團 R^4 取代。

R^2 特佳等於 H 或 D，特佳等於 H。

R^3 較佳在每次出現時相同或不同地為 F、CN、 $\text{Si}(\text{R}^4)_3$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基基團或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基基團，其中上述基團各自可經一或多個基團 R^4 取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{R}^4\text{C}=\text{CR}^4-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^4)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $-\text{NR}^4-$ 、 $-\text{O}-$ 或 $-\text{S}-$ 置換，或具有 5 至 20 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個基團 R^4 取代，其中二或多個基團 R^3 可彼此連接且可形成環。

根據一較佳具體實例，構成表示 $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 或 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 之基團 X^1 的二個基團 R^3 彼此形成環，致使形成螺化合物。在此較佳形成五-或六-員環。再者，在此情況下較佳的是基團 R^3 表示烷基基團，以使螺環烷基環(特佳為螺環己烷環或螺環戊烷環)形成。

R^4 較佳在每次出現時相同或不同地為 F、CN、 $\text{Si}(\text{R}^5)_3$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基基團或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基基團，其中上述基團各自可經一或多個基團 R^5 取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5-$ 、

$\text{Si}(\text{R}^5)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $-\text{NR}^5-$ 、 $-\text{O}-$ 或 $-\text{S}-$ 置換，或具有 5 至 20 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個基團 R^5 取代，其中二或多個基團 R^4 可彼此連接且可形成環。

根據本發明之一較佳具體實例，式(I)中之所有基團 R^1 和 R^2 等於 H 或 D，特佳等於 H。

根據本發明之另一較佳具體實例，一或多個基團 R^1 等於 CN，特佳明確為二個基團 R^1 等於 CN。

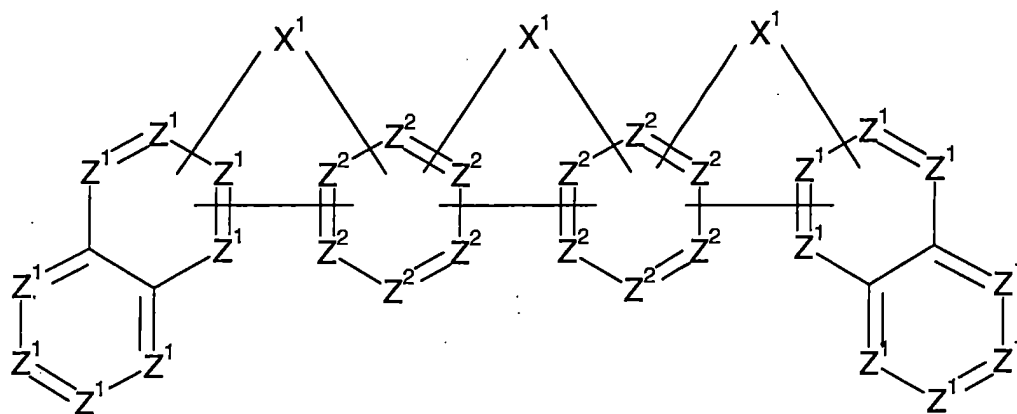
根據本發明之另一較佳具體實例，一或多個基團 R^1 等於具有 6 至 20 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個基團 R^4 取代，特佳明確為二個基團 R^1 等於具有 6 至 20 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個基團 R^4 取代。

根據一特佳具體實例， R^1 為苯并茛并萘基團，特佳為單苯并茛并萘基團，其在各情況下可經基團 R^4 取代。

根據本發明之另一較佳具體實例，基團 R^1 和 R^2 中沒有一個為式 $\text{N}(\text{R}^4)_2$ 之基團。在此情況下，基團 X^1 較佳不等於 NR^3 ，基團 X^1 在此情況下特佳等於 $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 。

根據本發明之另一較佳具體實例，一或多個基團 R^1 等於 $\text{N}(\text{R}^4)_2$ ，特佳明確為二個基團 R^1 等於 $\text{N}(\text{R}^4)_2$ 。

化合物之一較佳具體實例符合式(I-1)



式 (I-1) ,

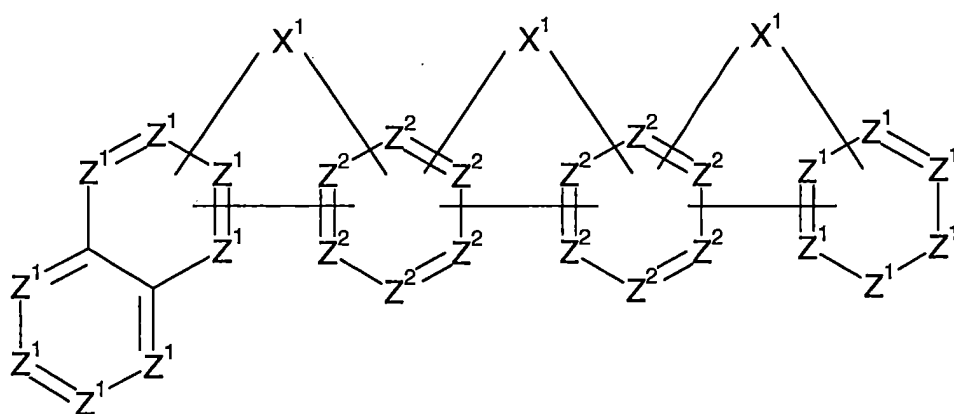
其中 :

Z^1 在每次出現時相同或不同地為 CR^1 或 N , 其中若有基團被鍵結 , 則 Z^1 等於 C ;

Z^2 在每次出現時相同或不同地為 CR^2 或 N , 其中若有基團被鍵結 , 則 Z^2 等於 C ; 及

基團 X^1 如上述所定義。

化合物之另一較佳具體實例符合式 (I-2)



式 (I-2) ,

其中 :

Z^1 在每次出現時相同或不同地為 CR^1 或 N ，其中若有基團被鍵結，則 Z^1 等於 C ；

Z^2 在每次出現時相同或不同地為 CR^2 或 N ，其中若有基團被鍵結，則 Z^2 等於 C ；及

基團 X^1 如上述所定義。

關於式(I-1)和(I-2)，至基團 X^1 的鍵及在芳族環之間的鍵各自可存在於芳族環之任何所要位置，在個別芳族環之間的鍵也是。特別是，式(I-1)和(I-2)之描述並不意味著該基團 X^1 必須存在於彼此的順式位置。基團 X^1 可存在於彼此之順式-或反式-位置。

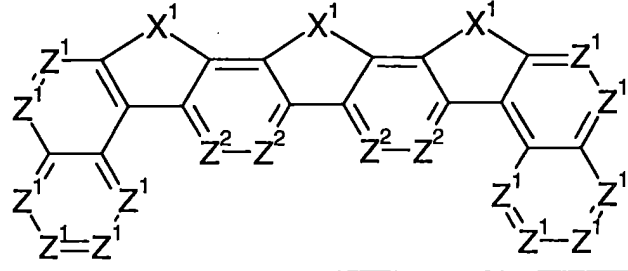
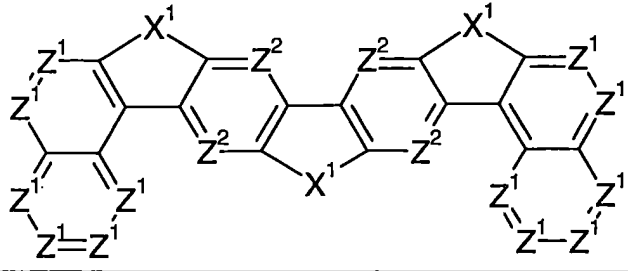
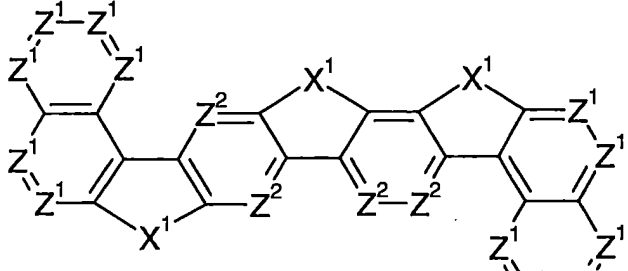
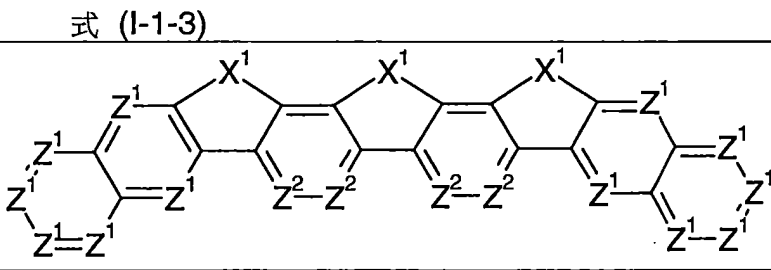
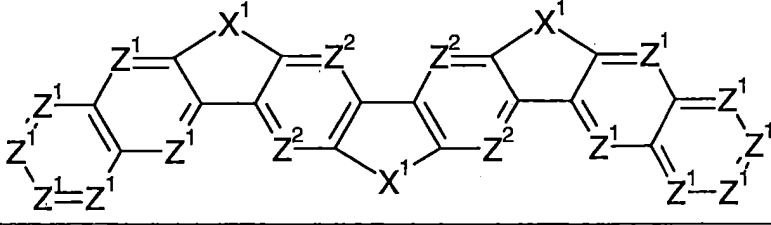
較佳的是每個芳族環最多二個基團 Z^1 等於 N ，特佳的是每個芳族環最多一個基團 Z^1 等於 N ，且非常特佳的是芳族環中沒有基團 Z^1 等於 N 。

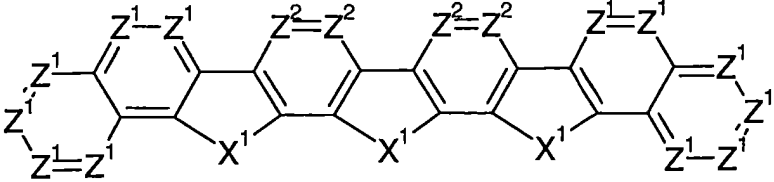
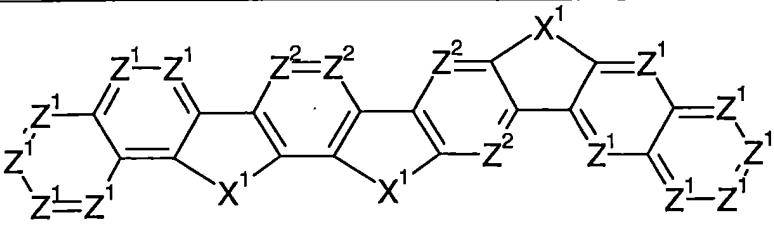
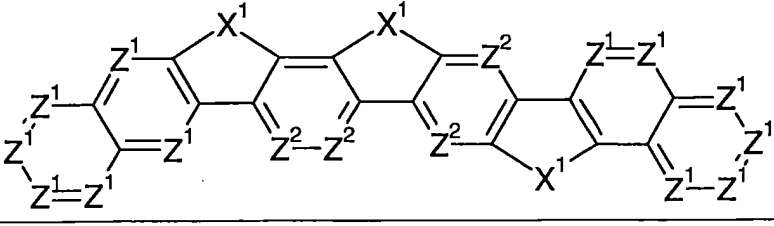
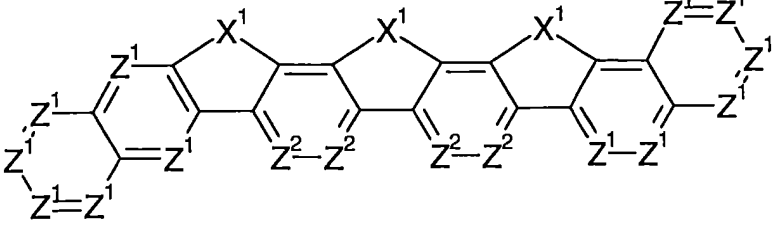
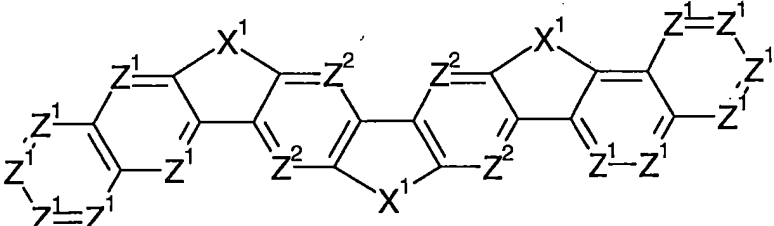
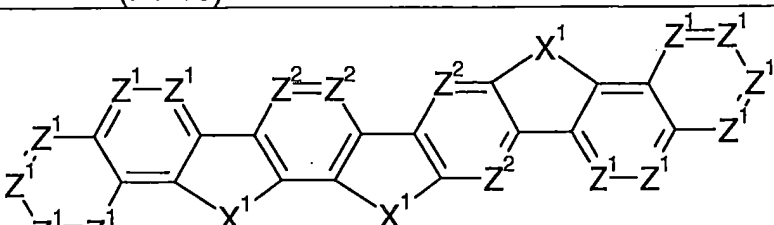
一般較佳為 Z^1 等於 CR^1 。

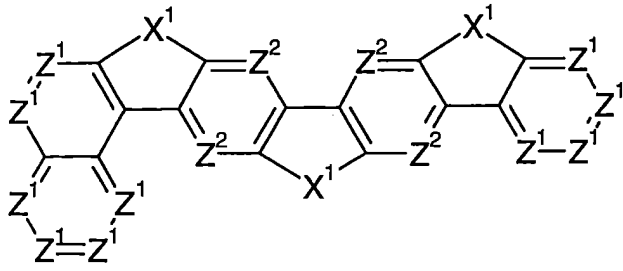
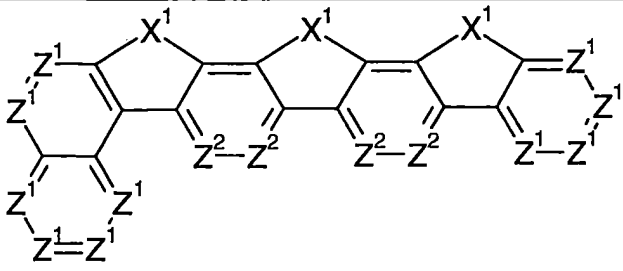
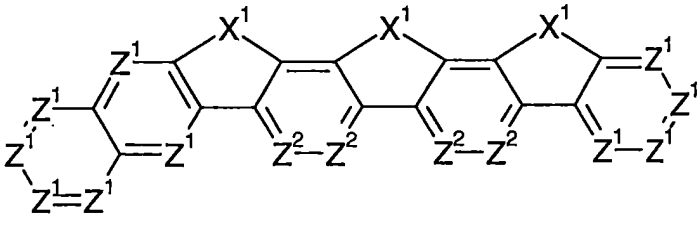
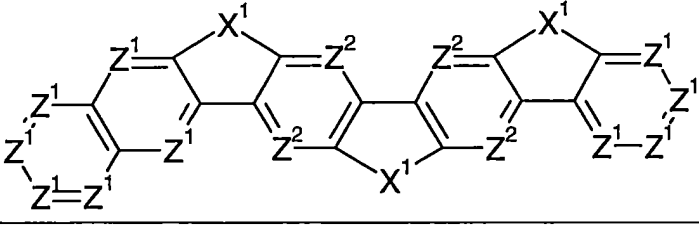
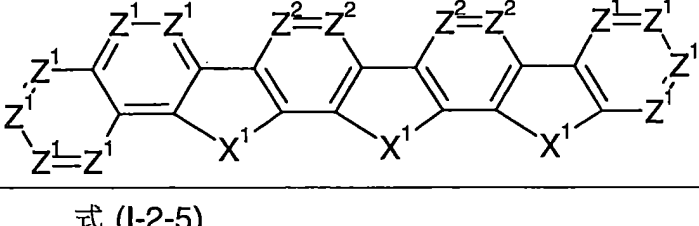
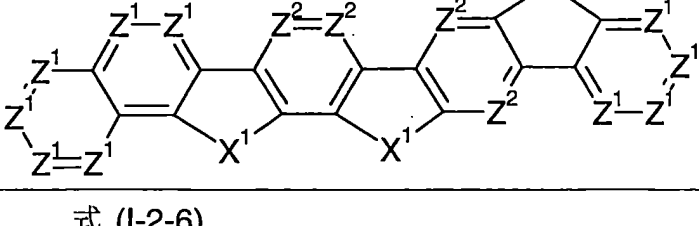
較佳的是每個芳族環最多二個基團 Z^2 等於 N ，特佳的是每個芳族環最多一個基團 Z^2 等於 N ，且非常特佳的是芳族環中沒有基團 Z^2 等於 N 。

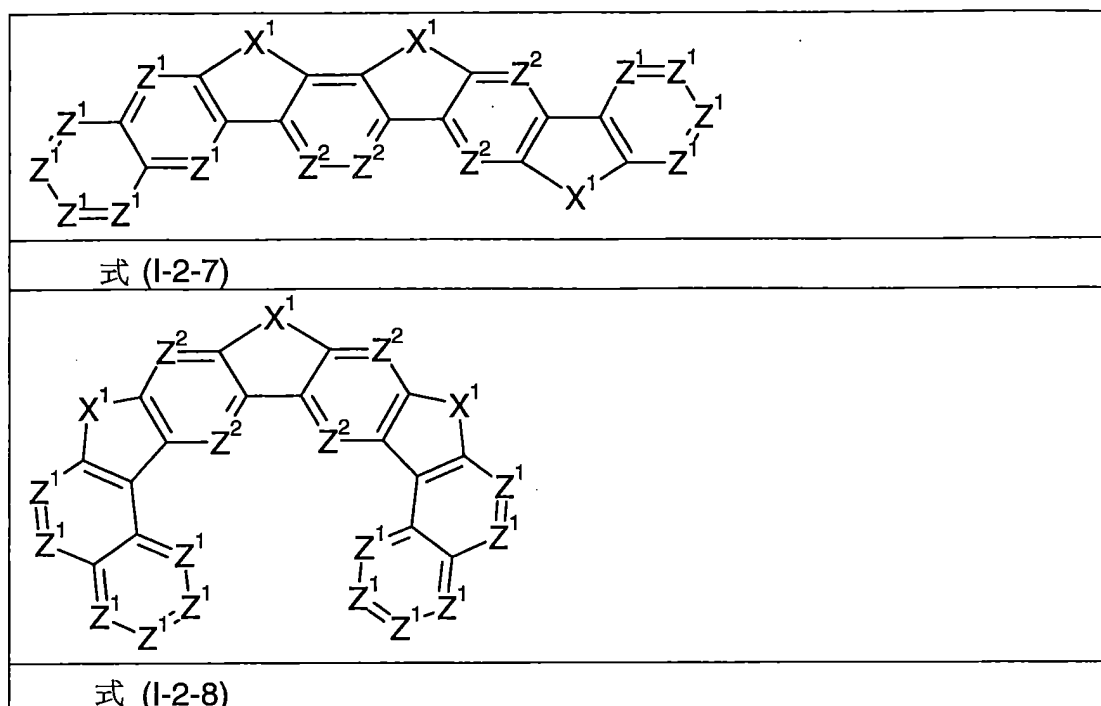
一般較佳為 Z^2 等於 CR^2 。

式(I-1)之較佳具體實例符合下式(I-1-1)至(I-1-11)和(I-2-1)至(I-2-8)


式 (I-1-1)

式 (I-1-2)

式 (I-1-3)

式 (I-1-4)

式 (I-1-5)


式 (I-1-6)

式 (I-1-7)

式 (I-1-8)

式 (I-1-9)

式 (I-1-10)

式 (I-1-11)


式 (1-2-1)

式 (1-2-2)

式 (1-2-3)

式 (1-2-4)

式 (1-2-5)

式 (1-2-6)



其中：

Z^1 在每次出現時相同或不同地為 CR^1 或 N；

Z^2 在每次出現時相同或不同地為 CR^2 或 N；及

基團 X^1 如上述所定義。

對於基團 Z^1 、 Z^2 和 X^1 特別的是，上示較佳具體實例對於上式也為較佳。

在式 (I-1-1) 至 (I-1-11) 和 (I-2-1) 至 (I-2-8) 中特佳的是 Z^1 等於 CR^1 ， Z^2 等於 CR^2 ，及 X^1 等於 $C(R^3)_2$ 。

式 (I-1-1) 至 (I-1-11) 和 (I-2-1) 至 (I-2-8) 中，式 (I-1-2)、(I-2-1) 和 (I-2-8) 為特佳，式 (I-1-2) 為最佳。

式 (I) 化合物較佳符合式 (I-1-2-1) 和 (I-2-1-1) 之一者。



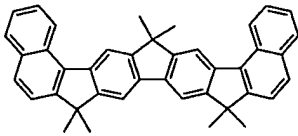
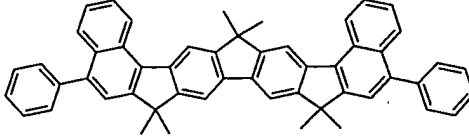
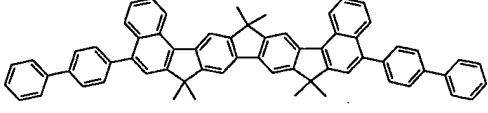
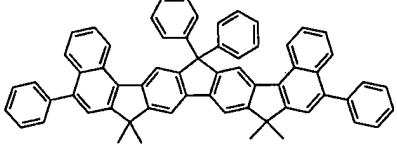
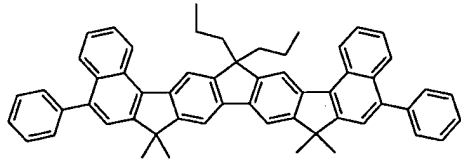
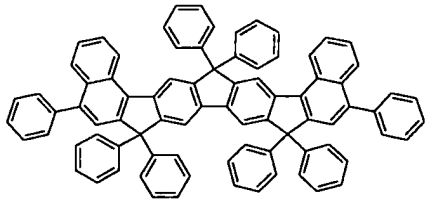
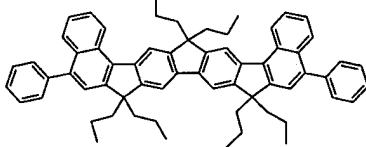
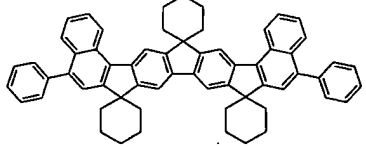
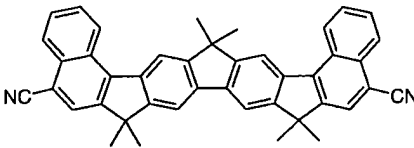
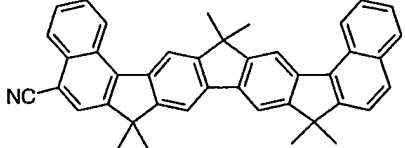
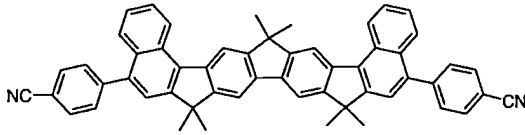
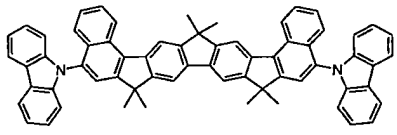
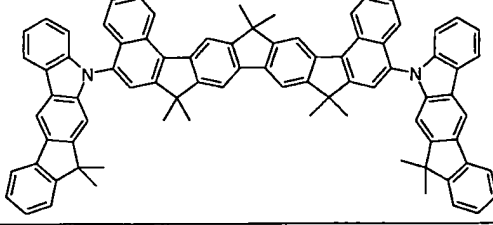
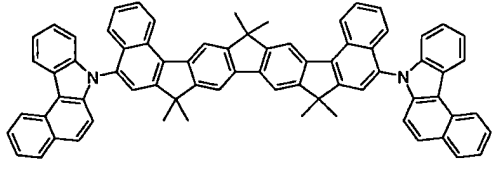
	基本結構	X ¹ (左)	X ¹ (中間)	X ¹ (右)
1	式 (i-1-1)	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂
2	”	”	-C(R ³) ₂ -C(R ³) ₂ -	”
3	”	”	-C(R ³) ₂ -O-	”
4	”	”	Si(R ³) ₂	”
5	”	”	O	”
6	”	”	S	”
7	”	”	NR ³	”
8	式 (i-1-2)	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂
9	”	”	-C(R ³) ₂ -C(R ³) ₂ -	”
10	”	”	-C(R ³) ₂ -O-	”
11	”	”	Si(R ³) ₂	”
12	”	”	O	”
13	”	”	S	”
14	”	”	NR ³	”
15	式 (i-1-3)	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂
16	”	”	-C(R ³) ₂ -C(R ³) ₂ -	”
17	”	”	-C(R ³) ₂ -O-	”
18	”	”	Si(R ³) ₂	”
19	”	”	O	”
20	”	”	S	”
21	”	”	NR ³	”
22	式 (i-1-4)	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂
23	”	”	-C(R ³) ₂ -C(R ³) ₂ -	”
24	”	”	-C(R ³) ₂ -O-	”
25	”	”	Si(R ³) ₂	”
26	”	”	O	”
27	”	”	S	”
28	”	”	NR ³	”
29	式 (i-1-5)	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂	C(R ³) ₂
30	”	”	-C(R ³) ₂ -C(R ³) ₂ -	”

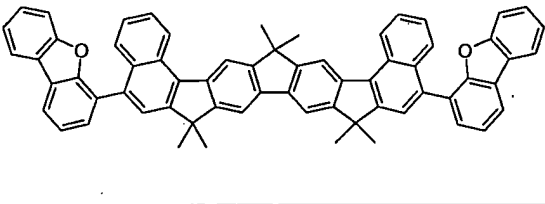
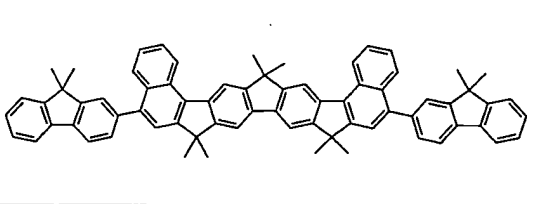
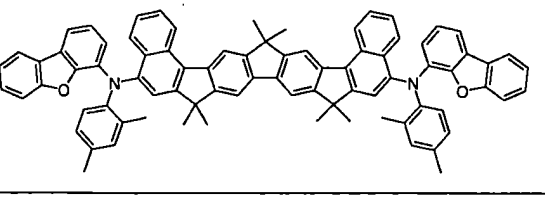
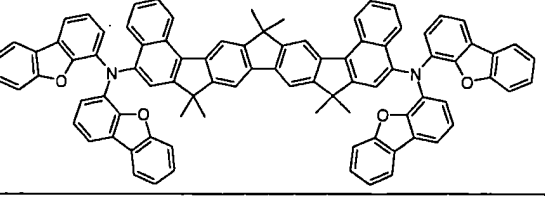
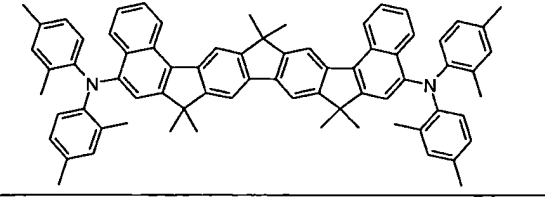
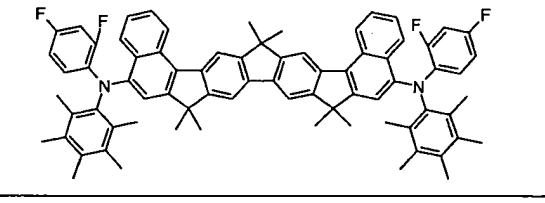
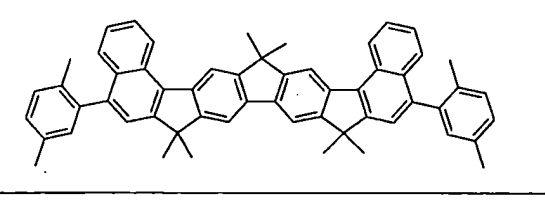
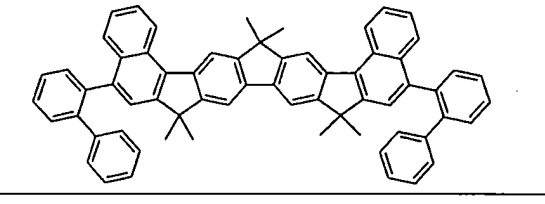
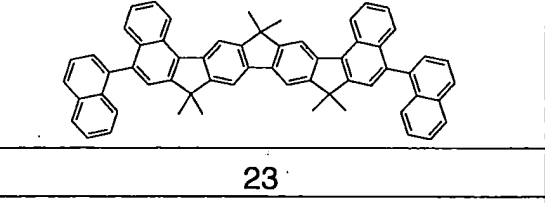
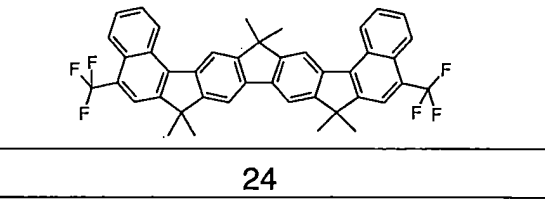
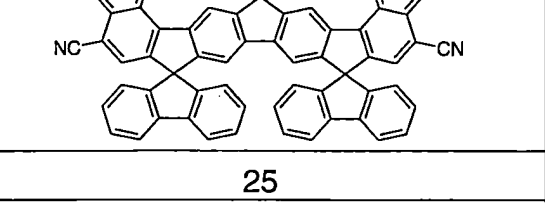
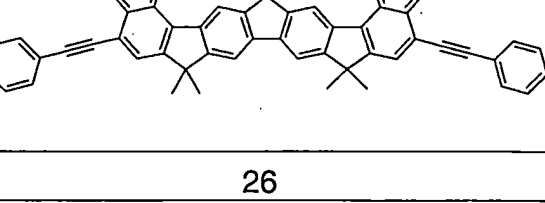
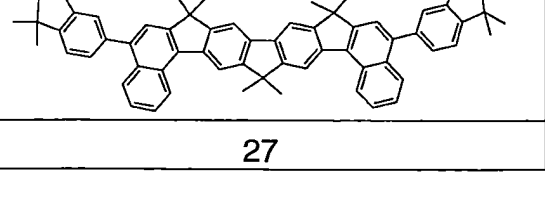
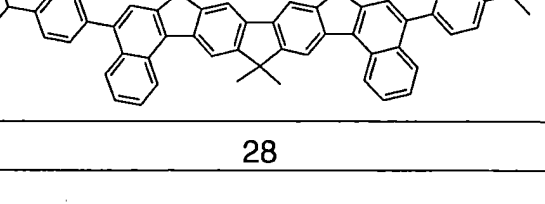
31	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
32	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
33	"	"	O	"
34	"	"	S	"
35	"	"	NR^3	"
36	式 (i-1-6)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
37	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
38	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
39	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
40	"	"	O	"
41	"	"	S	"
42	"	"	NR^3	"
43	式 (i-1-7)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
44	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
45	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
46	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
47	"	"	O	"
48	"	"	S	"
49	"	"	NR^3	"
50	式 (i-1-8)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
51	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
52	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
53	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
54	"	"	O	"
55	"	"	S	"
56	"	"	NR^3	"
57	式 (i-1-9)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
58	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
59	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
60	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
61	"	"	O	"
62	"	"	S	"
63	"	"	NR^3	"
64	式 (i-1-10)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
65	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"

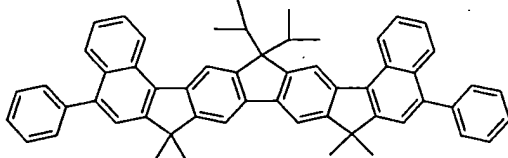
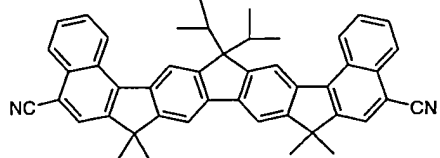
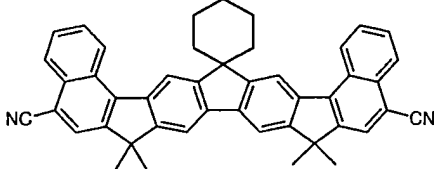
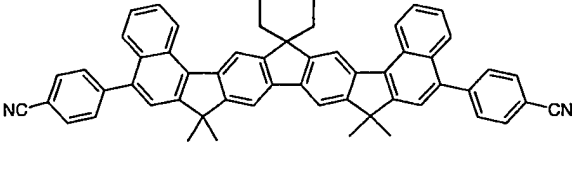
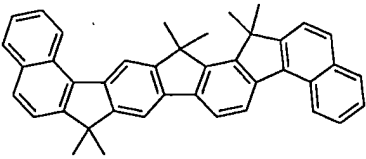
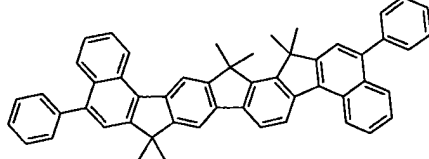
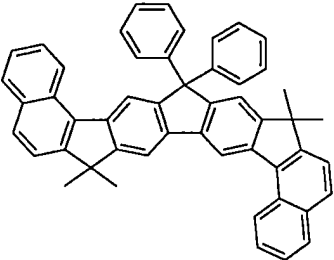
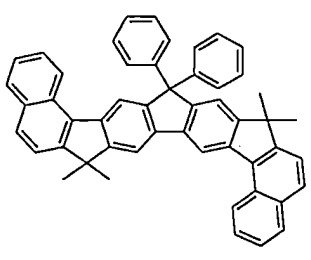
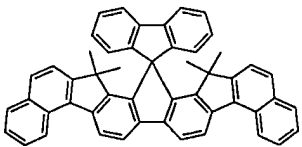
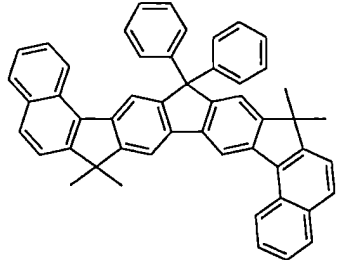
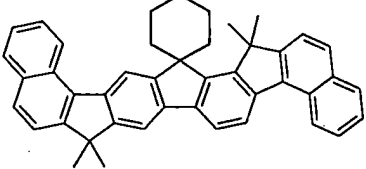
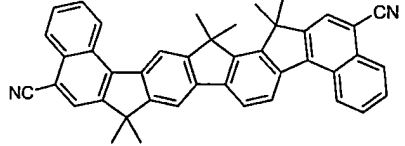
66	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
67	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
68	"	"	O	"
69	"	"	S	"
70	"	"	NR^3	"
71	式 (i-1-11)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
72	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
73	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
74	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
75	"	"	O	"
76	"	"	S	"
77	"	"	NR^3	"
78	式 (i-2-1)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
79	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
80	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
81	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
82	"	"	O	"
83	"	"	S	"
84	"	"	NR^3	"
85	式 (i-2-2)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
86	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
87	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
88	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
89	"	"	O	"
90	"	"	S	"
91	"	"	NR^3	"
92	式 (i-2-3)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
93	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"
94	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-O-}$	"
95	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
96	"	"	O	"
97	"	"	S	"
98	"	"	NR^3	"
99	式 (i-2-4)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
100	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2\text{-C}(\text{R}^3)_2\text{-}$	"

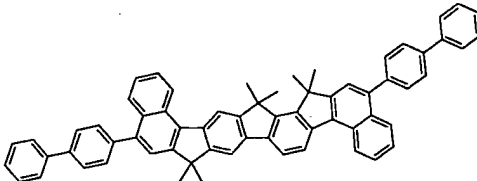
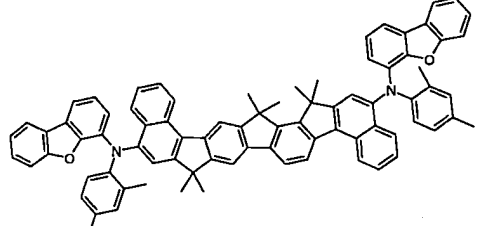
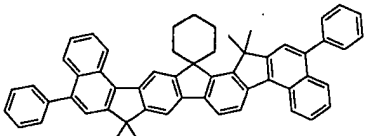
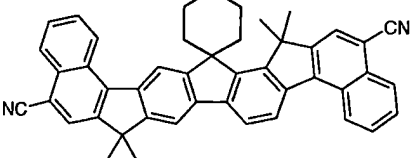
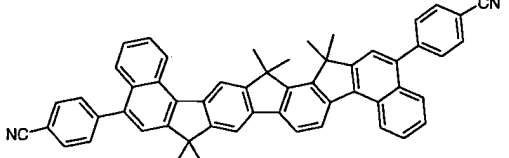
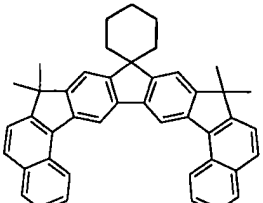
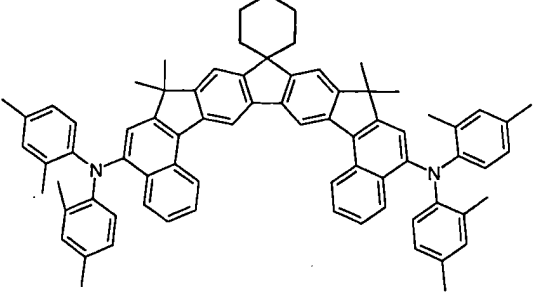
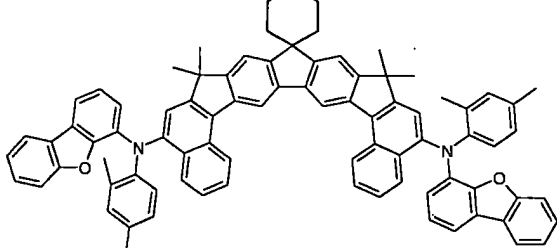
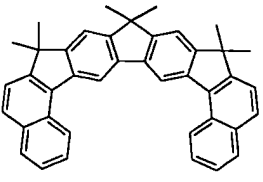
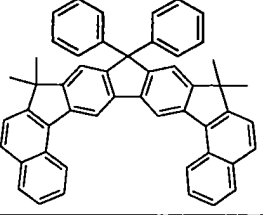
101	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$	"
102	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
103	"	"	O	"
104	"	"	S	"
105	"	"	NR^3	"
106	式 (i-2-5)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
107	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2-$	"
108	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$	"
109	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
110	"	"	O	"
111	"	"	S	"
112	"	"	NR^3	"
113	式 (i-2-6)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
114	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2-$	"
115	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$	"
116	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
117	"	"	O	"
118	"	"	S	"
119	"	"	NR^3	"
120	式 (i-2-7)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
121	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2-$	"
122	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$	"
123	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
124	"	"	O	"
125	"	"	S	"
126	"	"	NR^3	"
127	式 (i-2-8)	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$	$\text{C}(\text{R}^3)_2$
128	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2-$	"
129	"	"	$-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$	"
130	"	"	$\text{Si}(\text{R}^3)_2$	"
131	"	"	O	"
132	"	"	S	"
133	"	"	NR^3	"

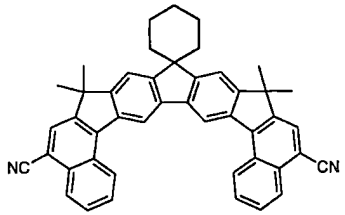
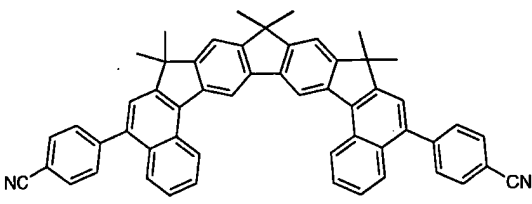
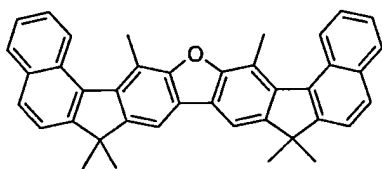
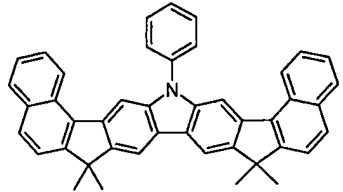
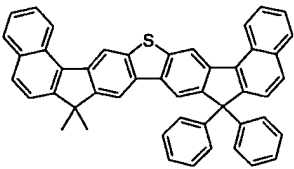
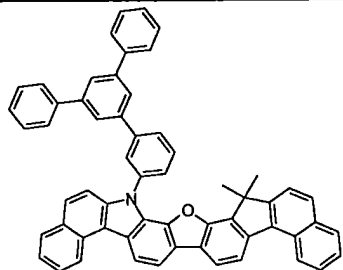
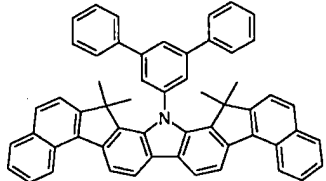
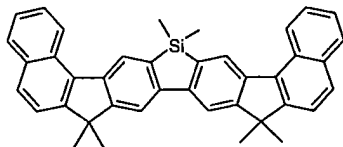
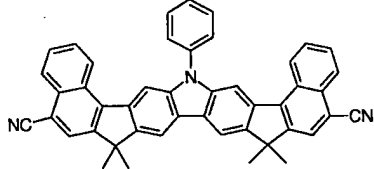
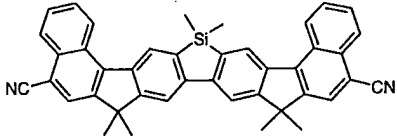
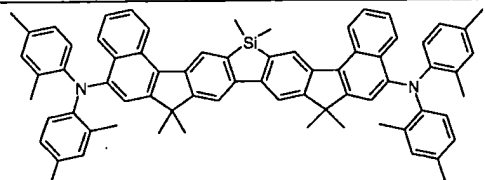
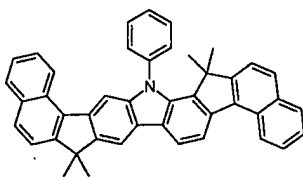
下列化合物為式(I)之化合物的實例：

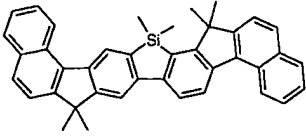
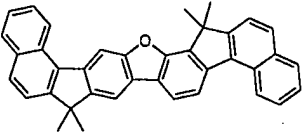
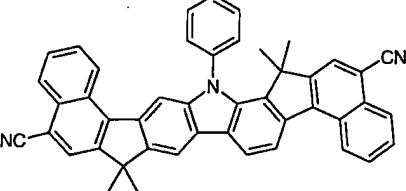
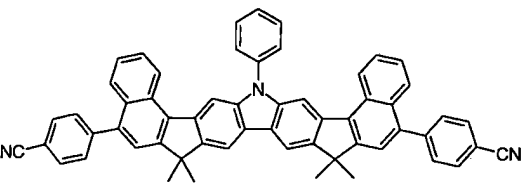
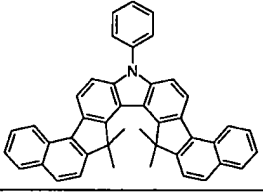
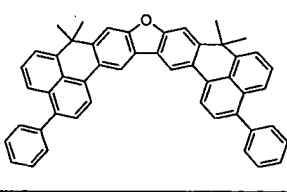
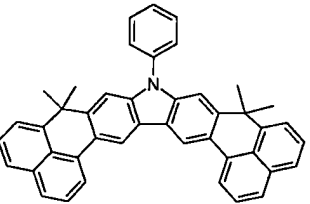
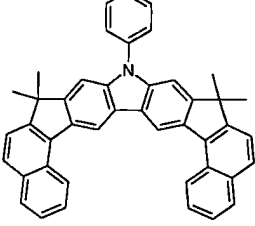
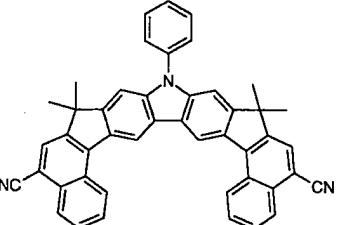
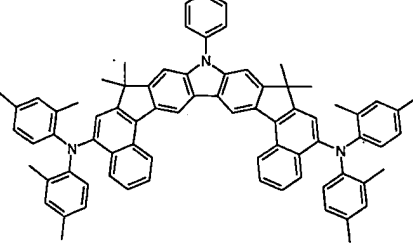
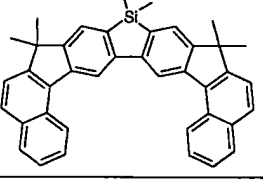
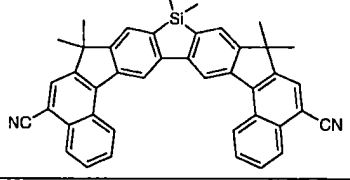
	
1	2
	
3	4
	
5	6
	
7	8
	
9	10
	
11	12
	
13	14

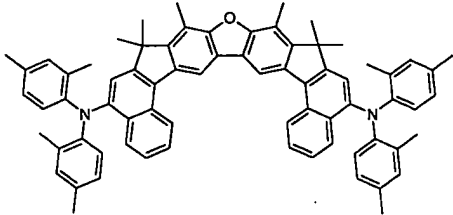
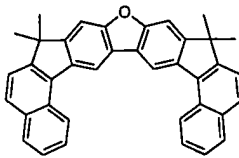
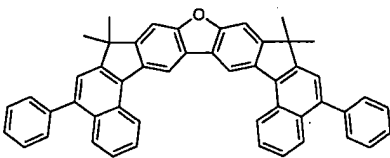
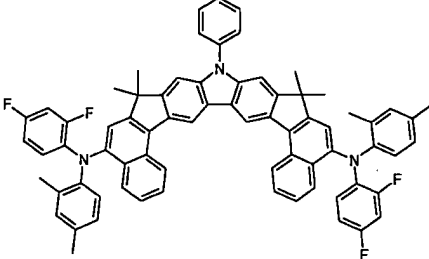
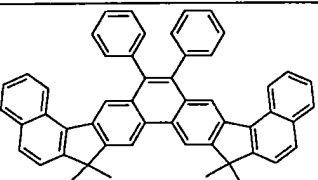
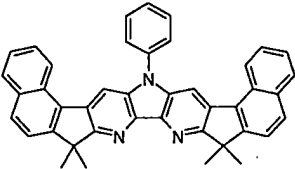
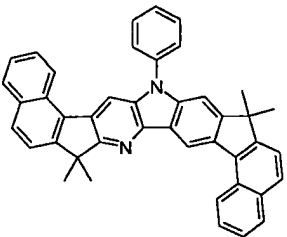
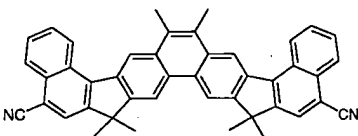
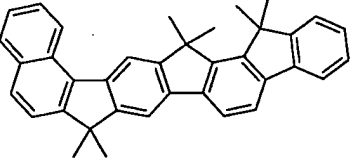
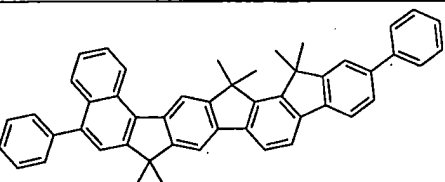
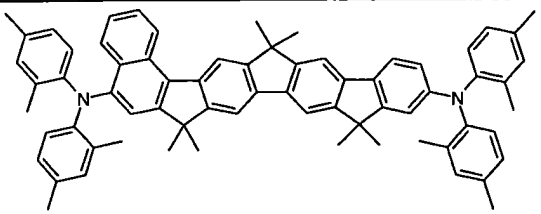
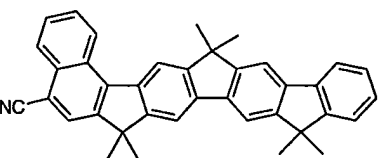
	
15	16
	
17	18
	
19	20
	
21	22
	
23	24
	
25	26
	
27	28

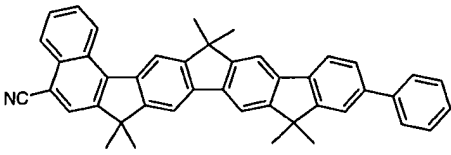
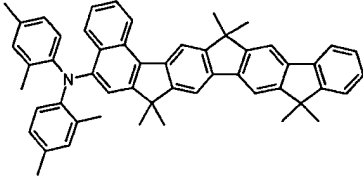
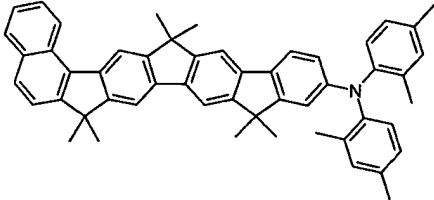
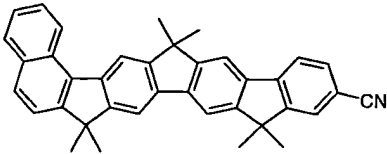
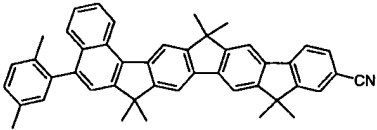
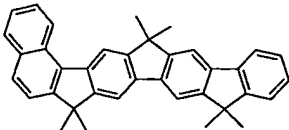
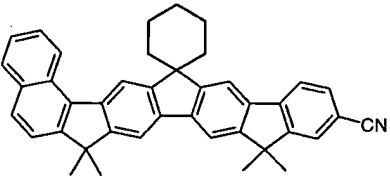
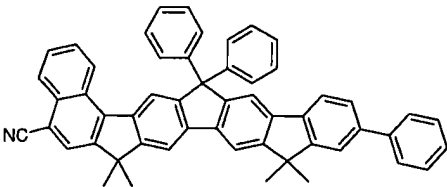
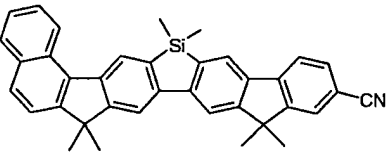
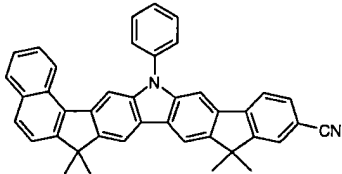
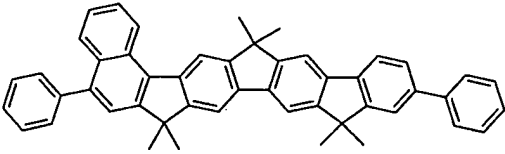
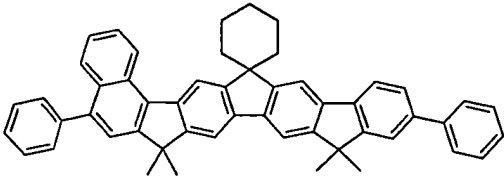
	
29	30
	
31	32
	
33	34
	
35	36
	
37	38
	
39	40

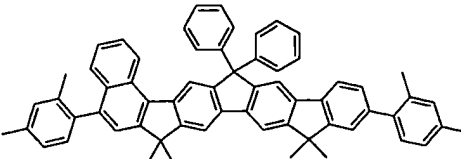
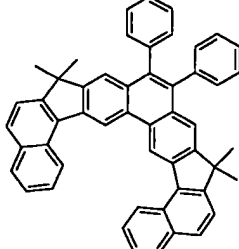
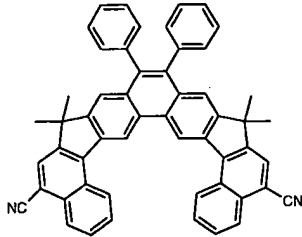
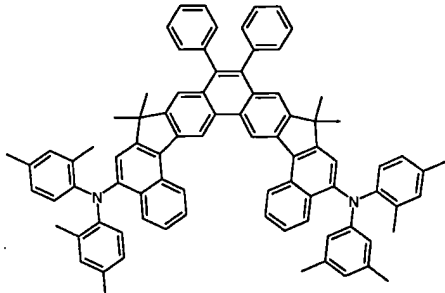
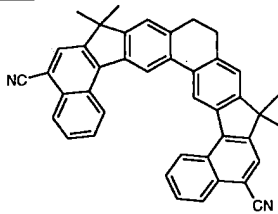
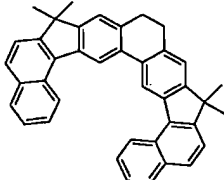
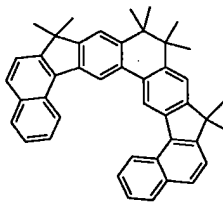
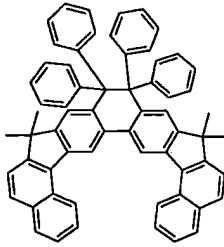
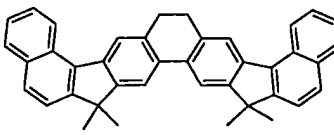
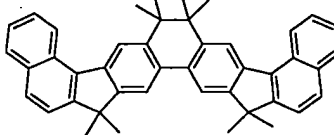
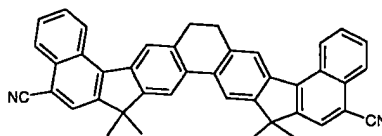
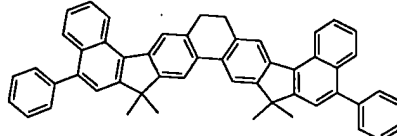
	
41	42
	
43	44
	
45	46
	
47	48
	
49	50

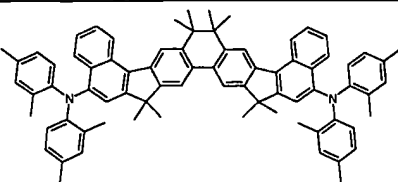
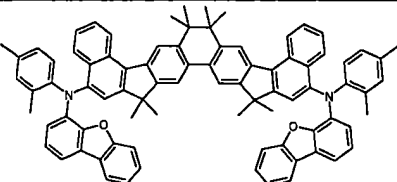
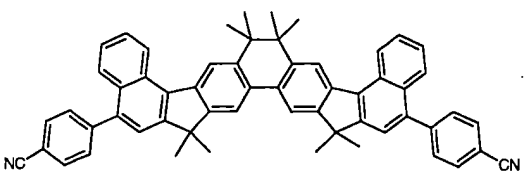
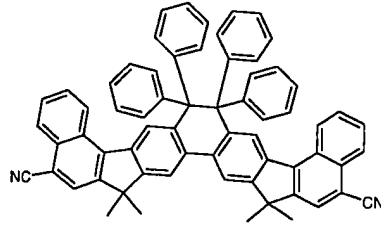
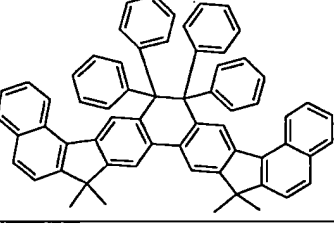
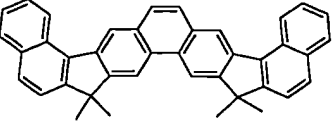
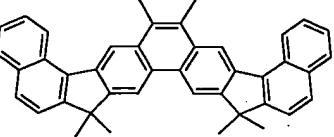
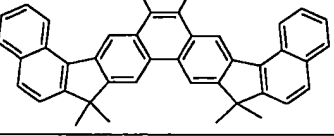
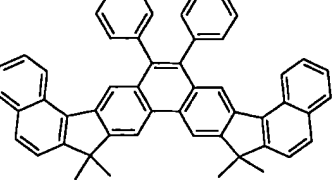
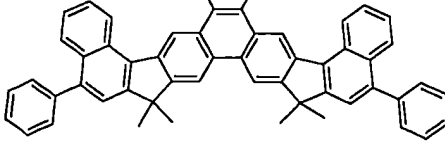
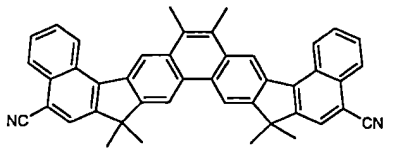
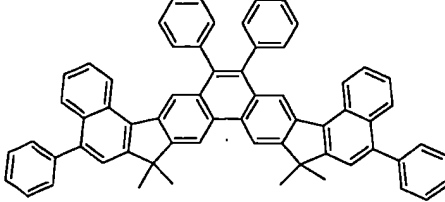
	
51	52
	
53	54
	
55	56
	
57	58
	
59	60
	
61	62

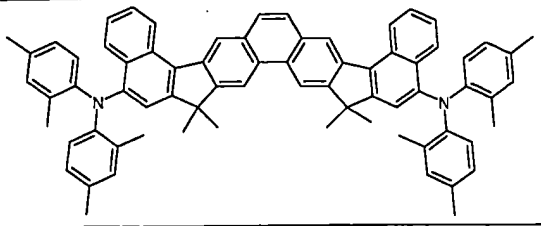
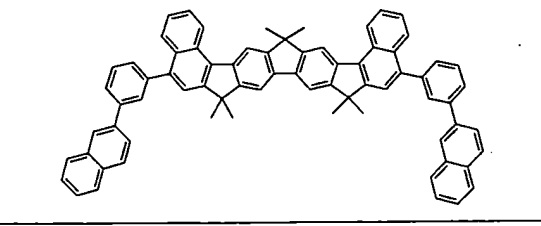
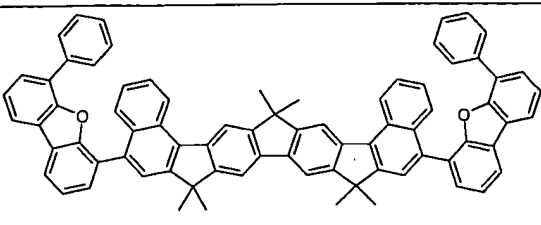
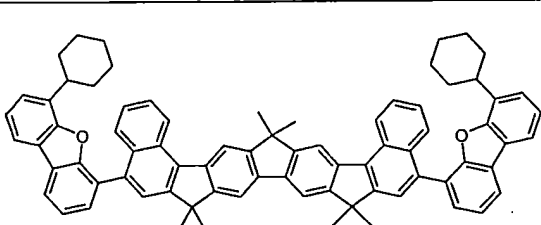
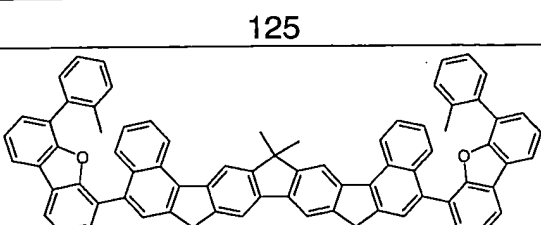
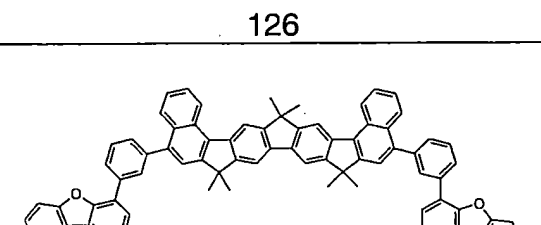
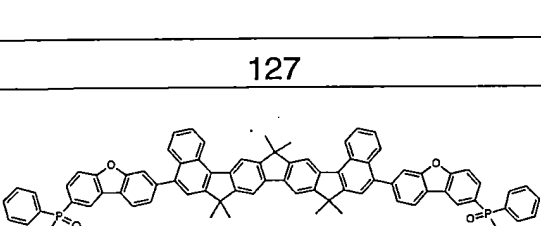
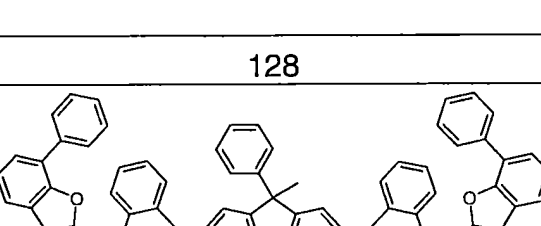
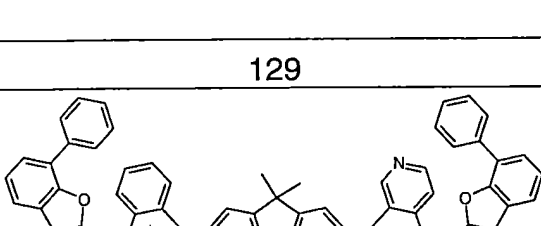
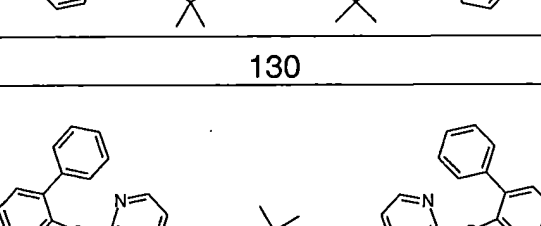
	
63	64
	
65	66
	
67	68
	
69	70
	
71	72
	
73	74

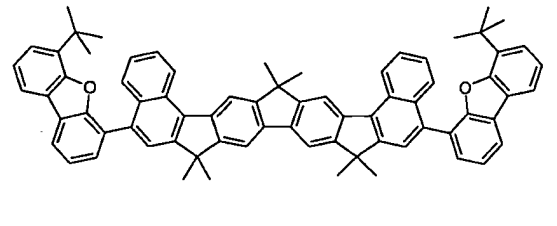
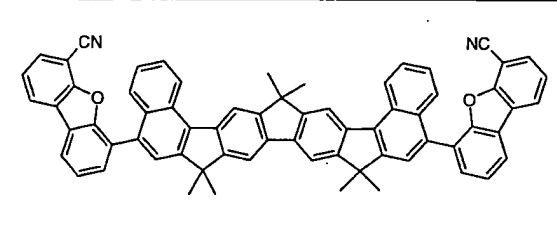
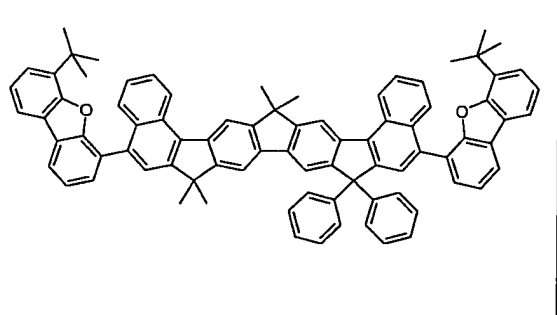
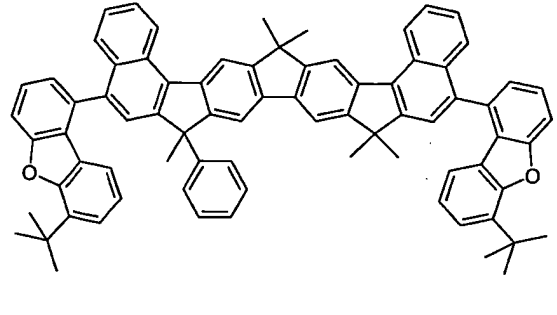
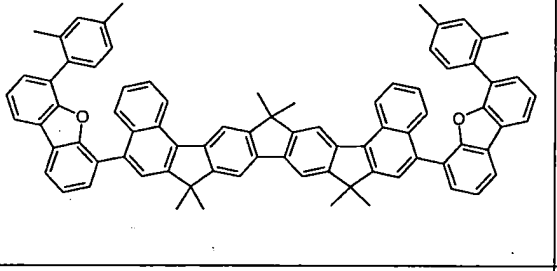
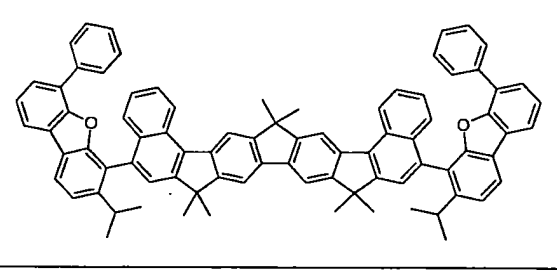
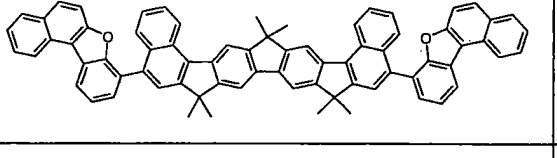
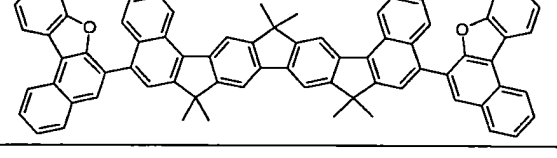
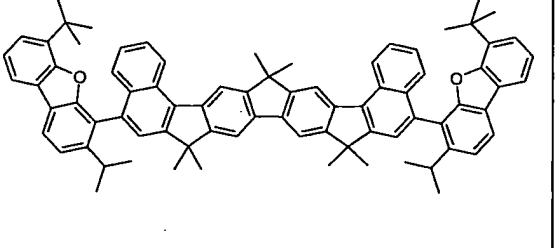
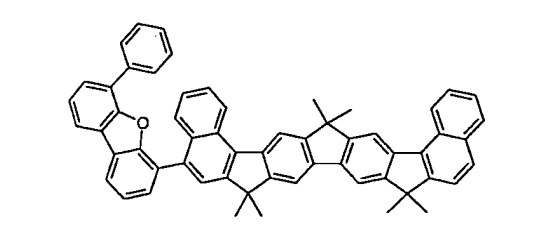
	
75	76
	
77	78
	
79	80
	
81	82
	
83	84
	
85	86

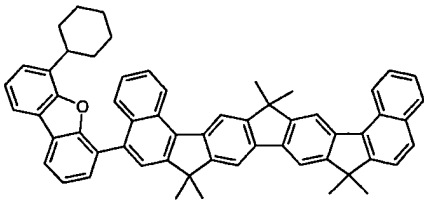
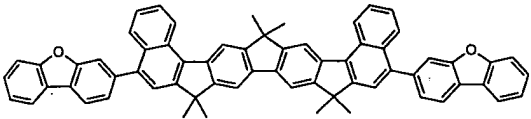
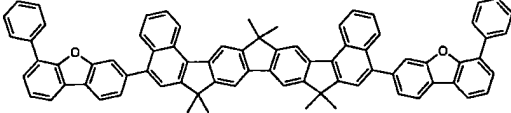
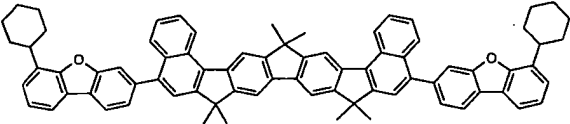
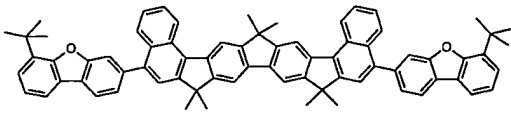
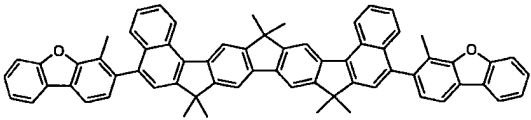
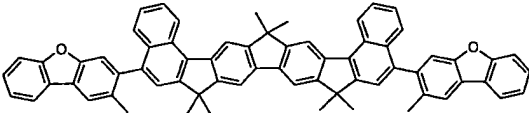
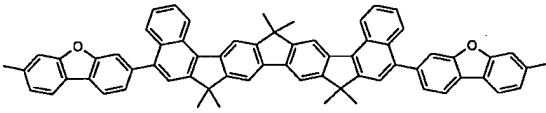
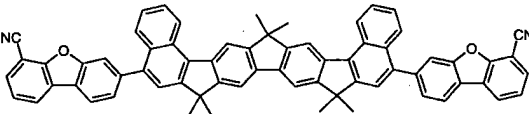
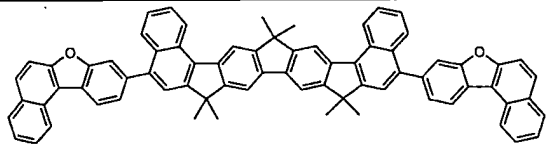
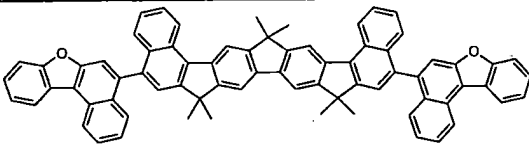
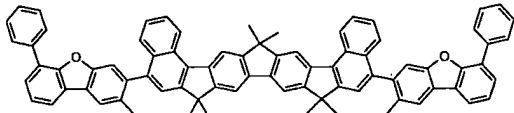
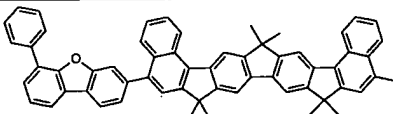
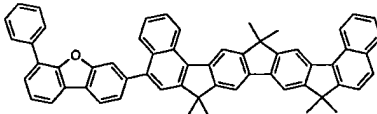
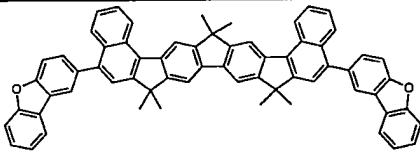
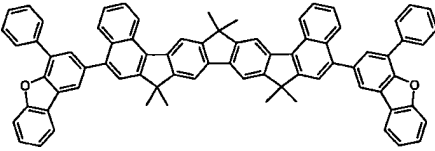
	
87	88
	
89	90
	
91	92
	
93	94
	
95	96
	
97	98

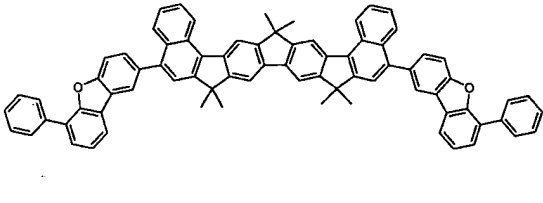
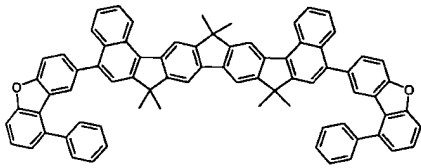
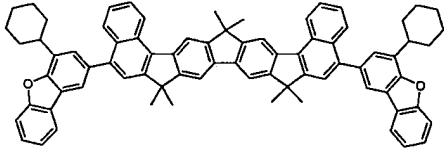
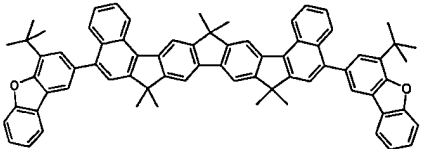
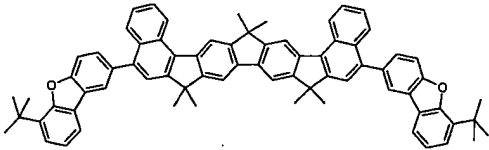
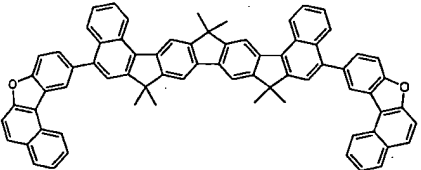
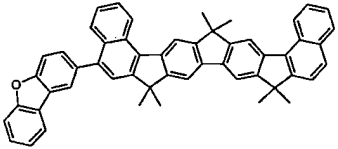
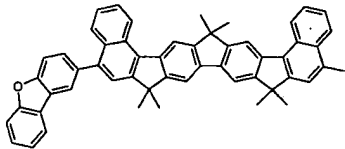
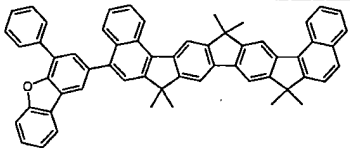
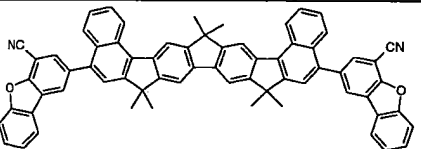
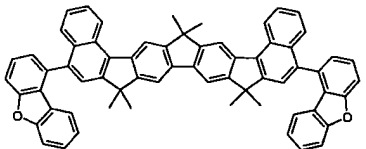
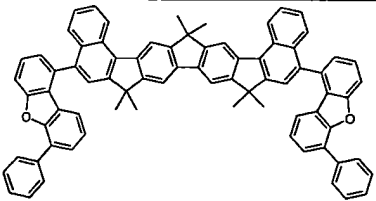
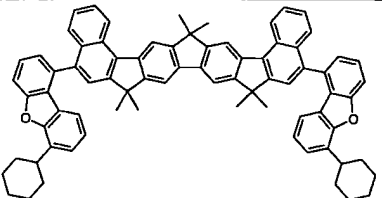
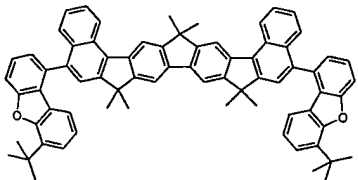
	
99	100
	
101	102
	
103	104
	
105	106
	
107	108
	
109	110

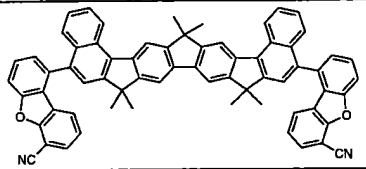
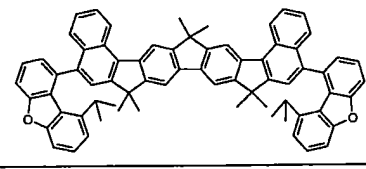
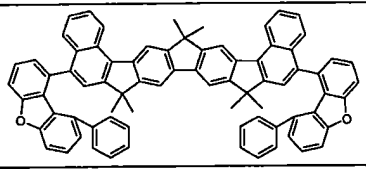
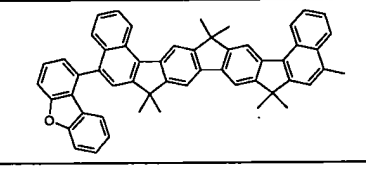
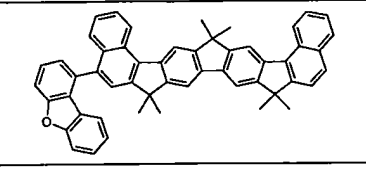
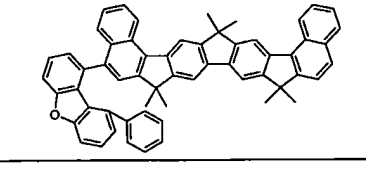
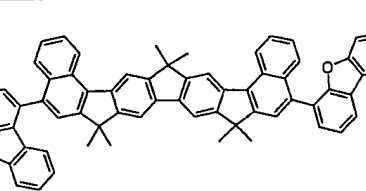
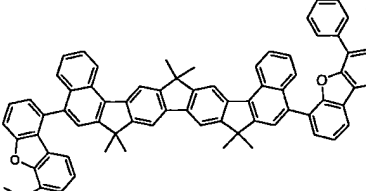
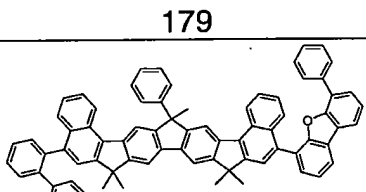
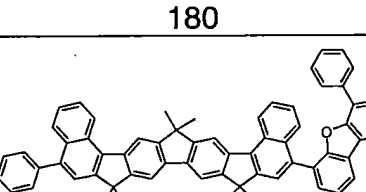
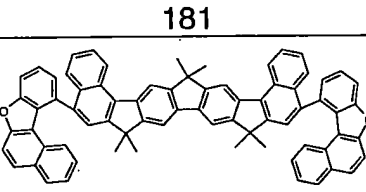
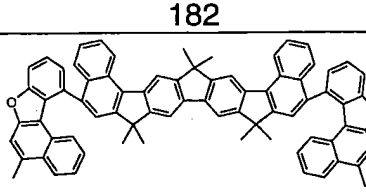
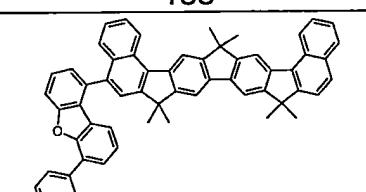
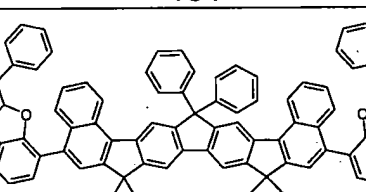
	
111	112
	
113	114
	
115	116
	
117	118
	
119	120
	
121	122

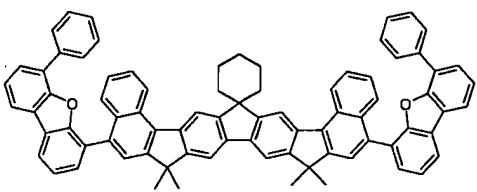
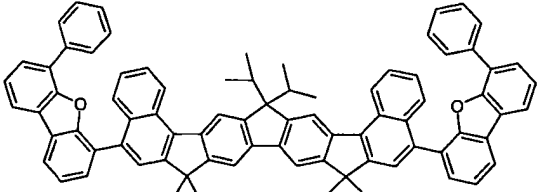
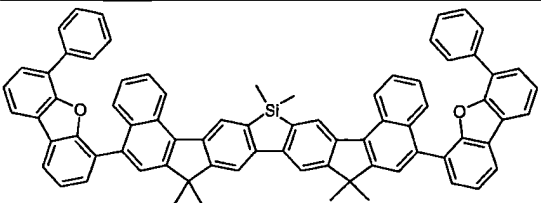
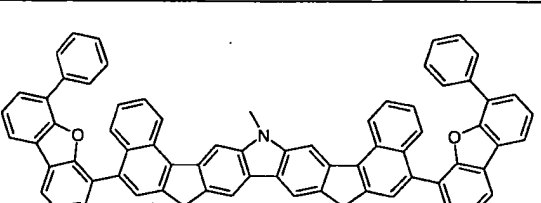
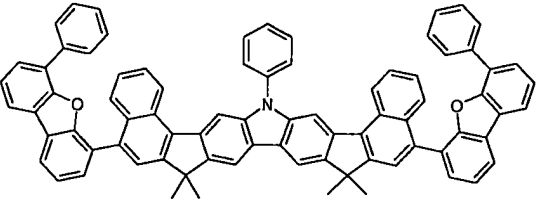
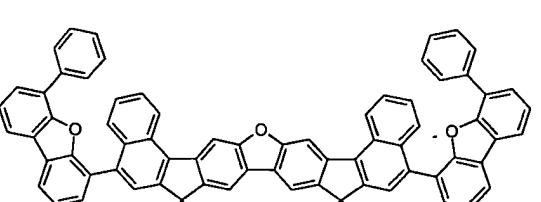
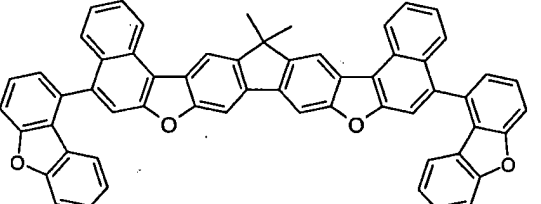
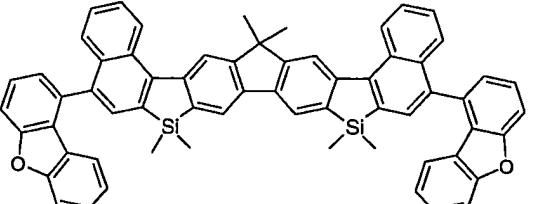
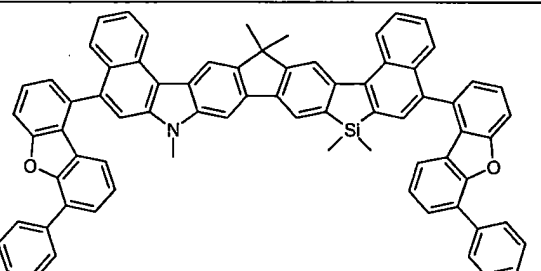
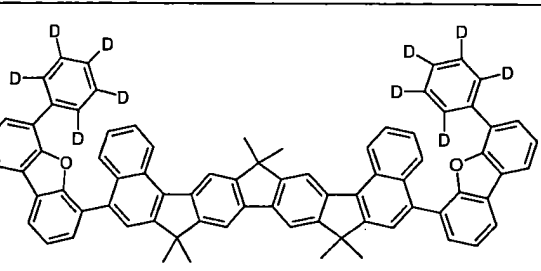
	
123	124
	
125	126
	
127	128
	
129	130
	
131	132

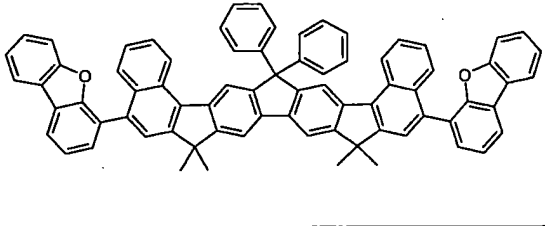
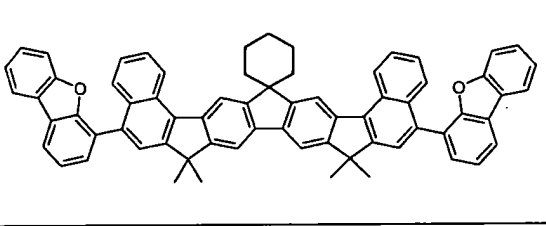
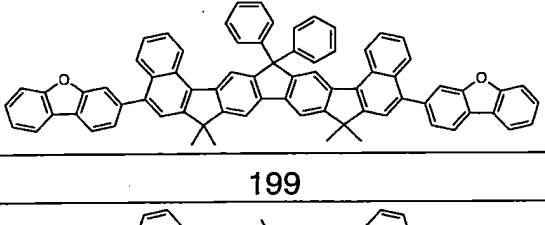
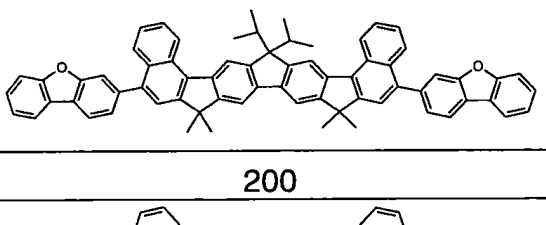
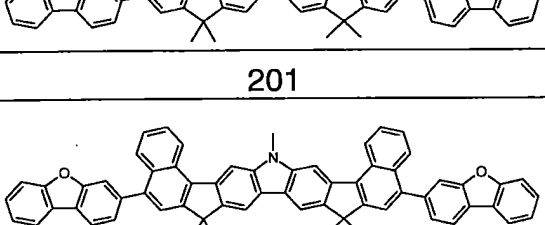
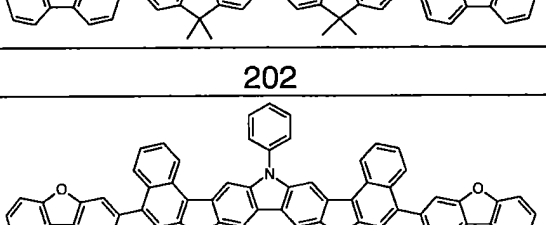
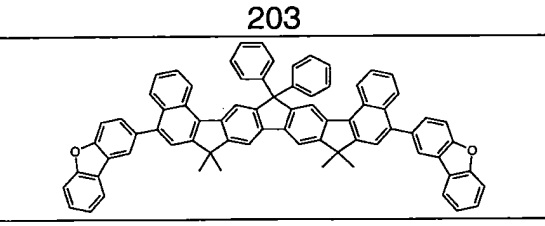
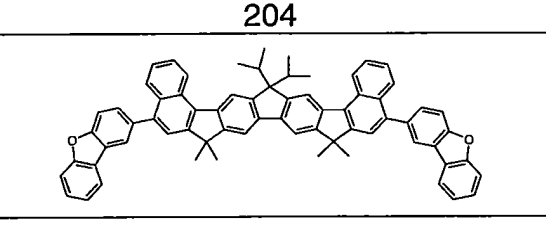
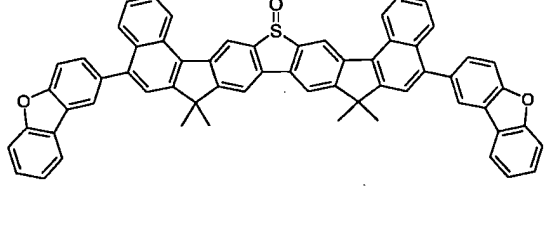
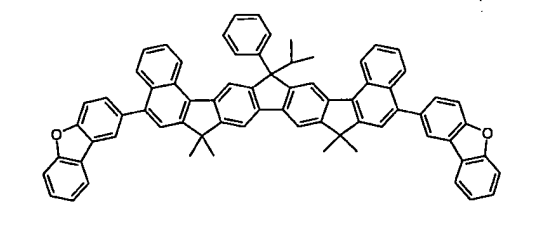
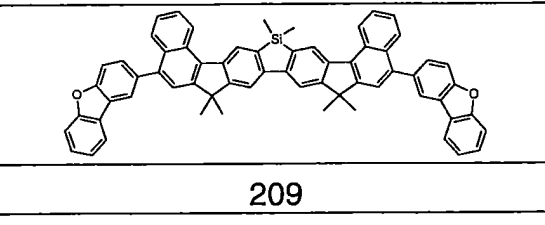
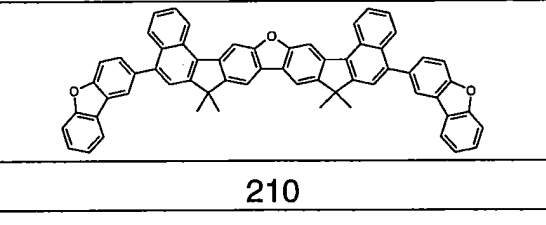
	
133	134
	
135	136
	
137	138
	
139	140
	
141	142

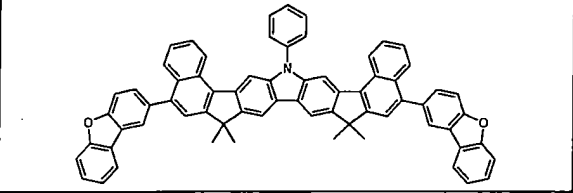
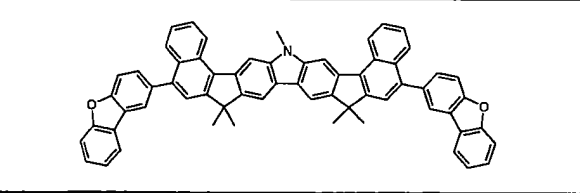
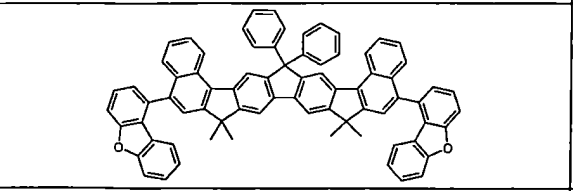
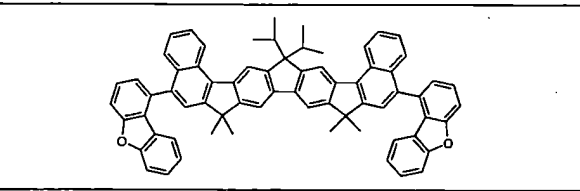
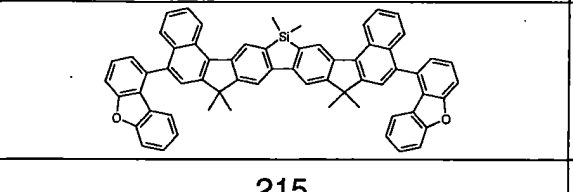
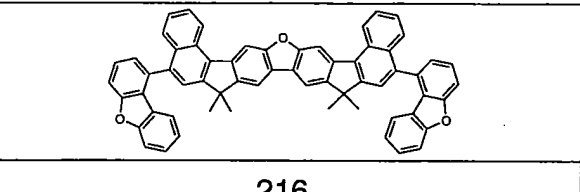
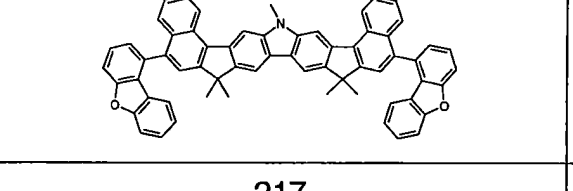
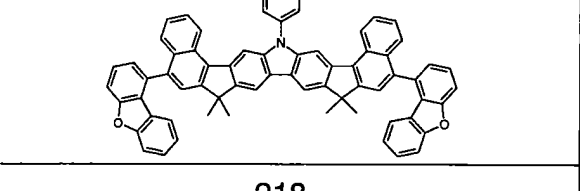
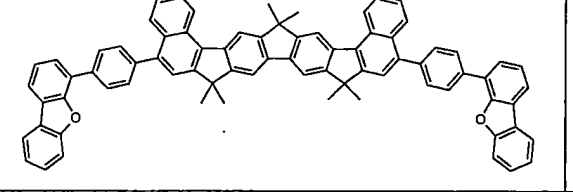
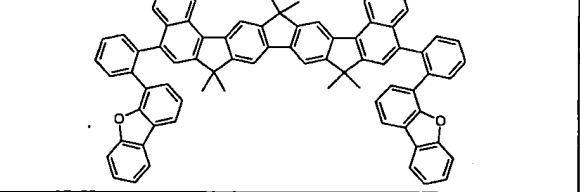
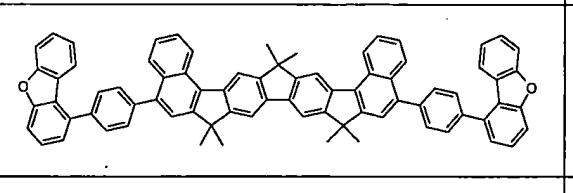
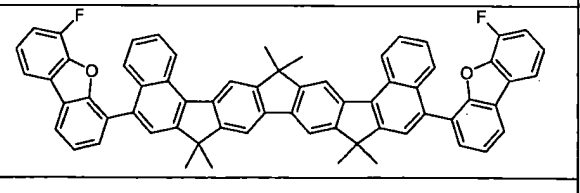
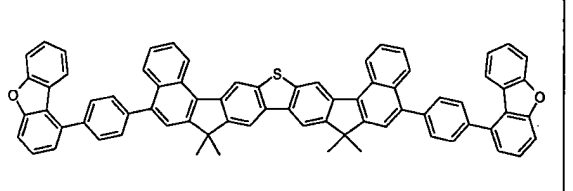
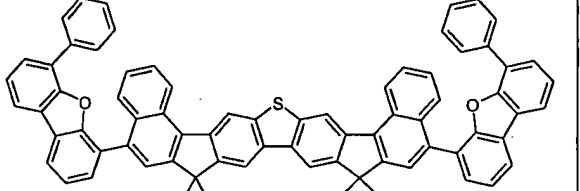
	
143	144
	
145	146
	
147	148
	
149	150
	
151	152
	
153	154
	
155	156
	
157	158

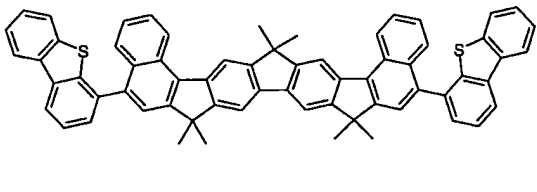
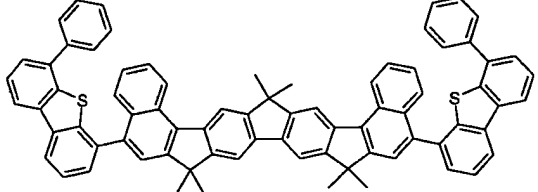
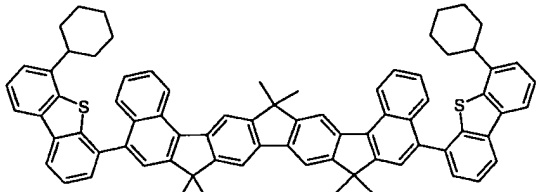
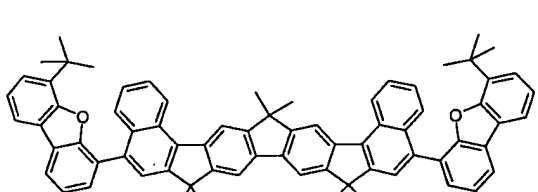
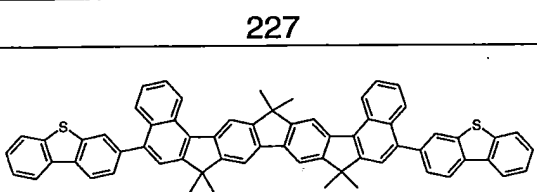
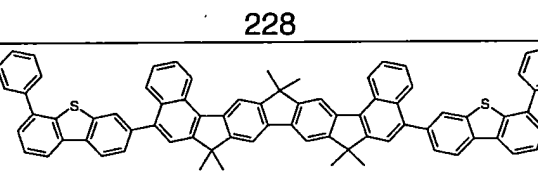
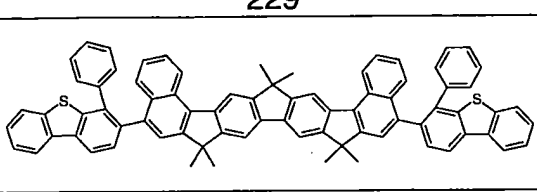
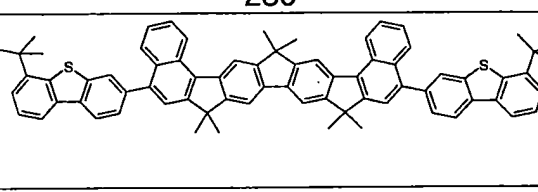
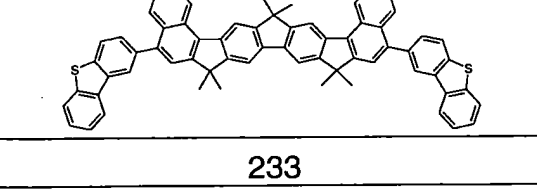
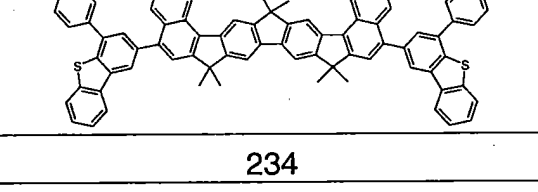
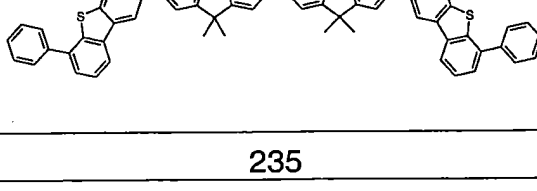
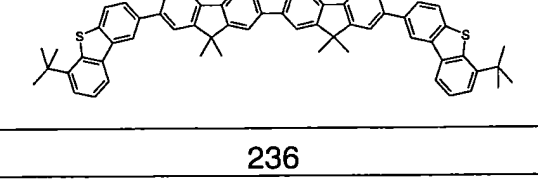
	
159	160
	
161	162
	
163	164
	
165	166
	
167	168
	
169	170
	
171	172

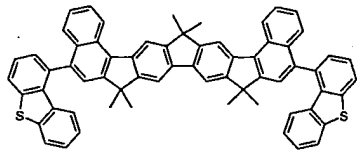
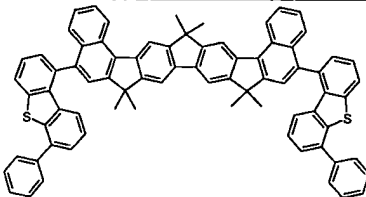
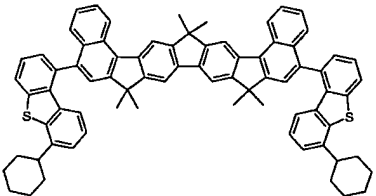
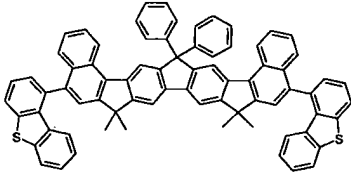
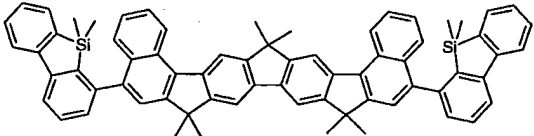
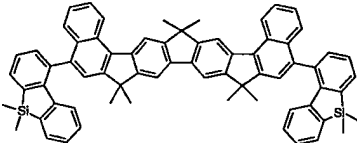
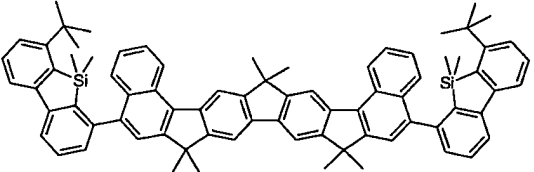
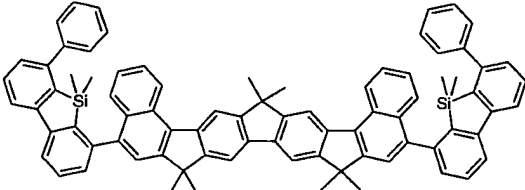
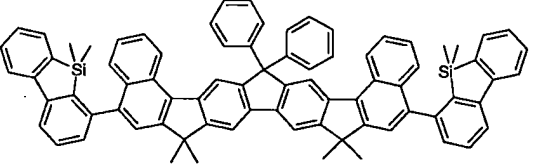
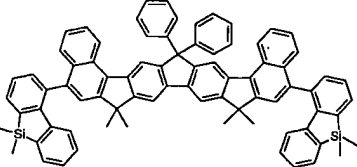
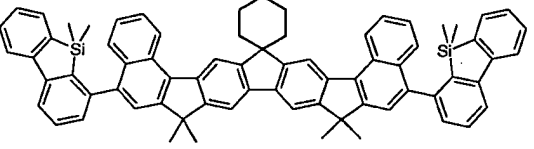
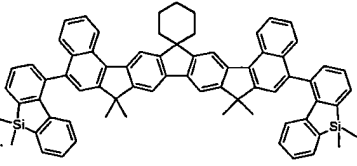
 173	 174
 175	 176
 177	 178
 179	 180
 181	 182
 183	 184
 185	 186

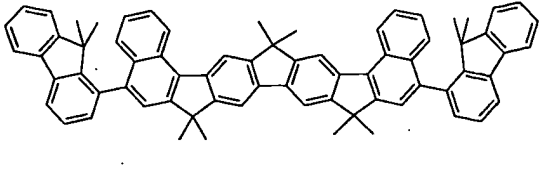
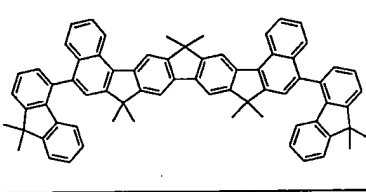
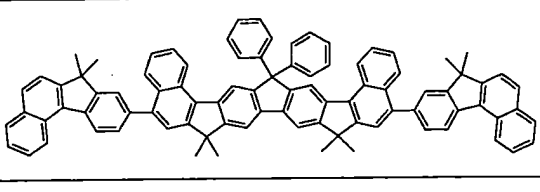
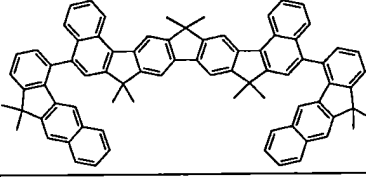
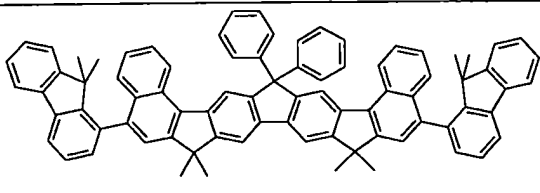
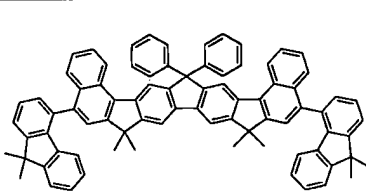
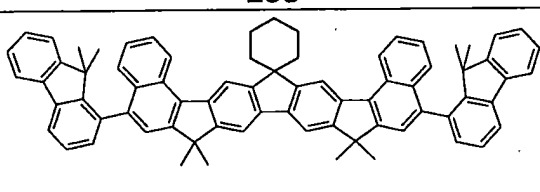
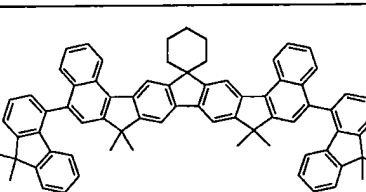
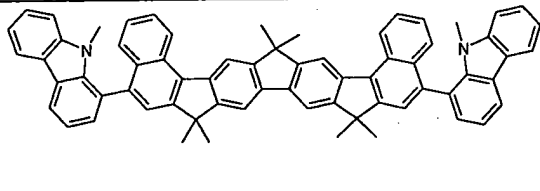
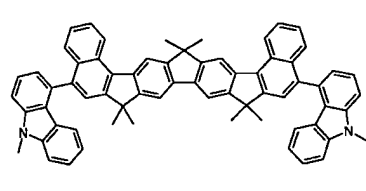
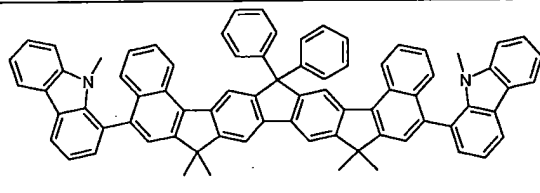
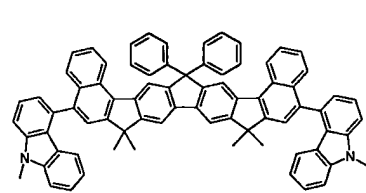
	
187	188
	
189	190
	
191	192
	
193	194
	
195	196

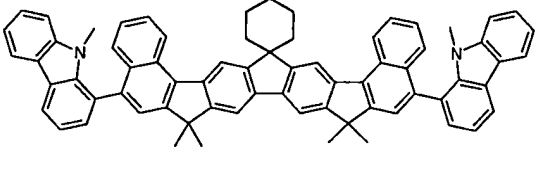
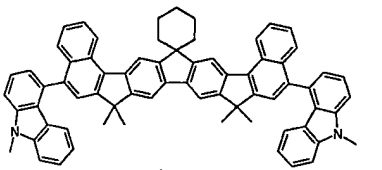
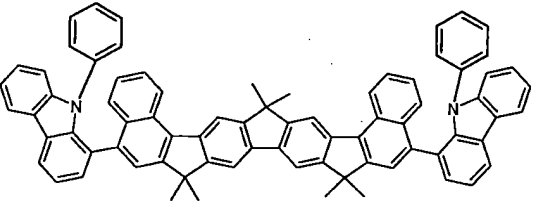
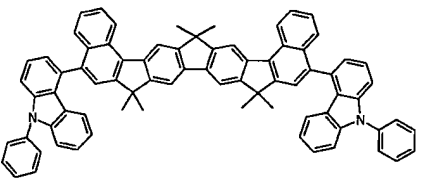
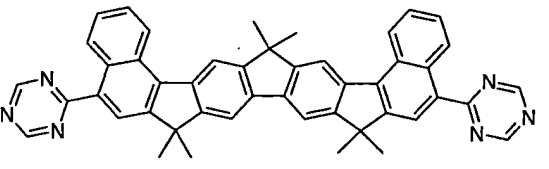
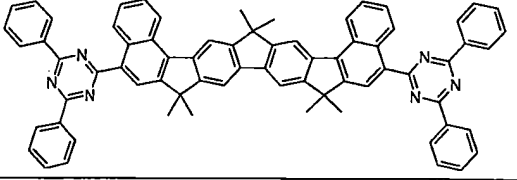
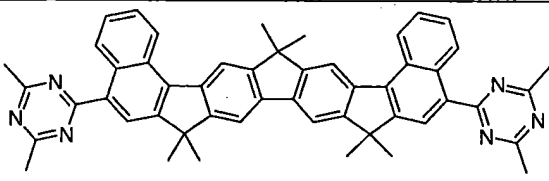
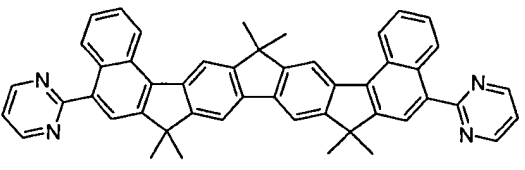
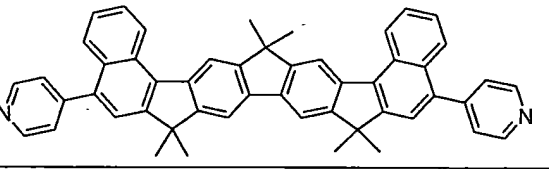
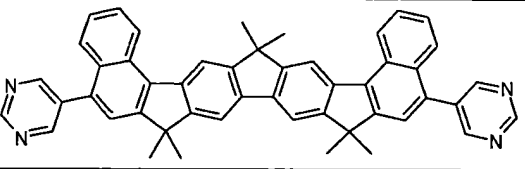
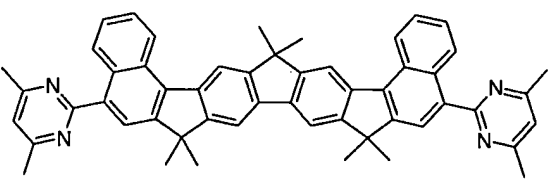
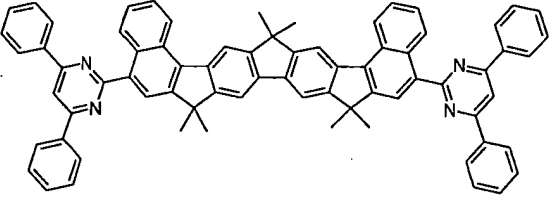
	
197	198
	
199	200
	
201	202
	
203	204
	
205	206
	
207	208
	
209	210

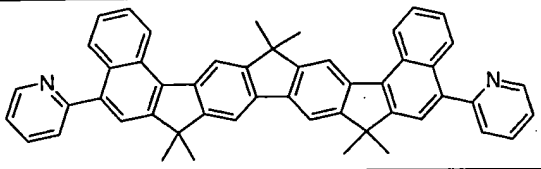
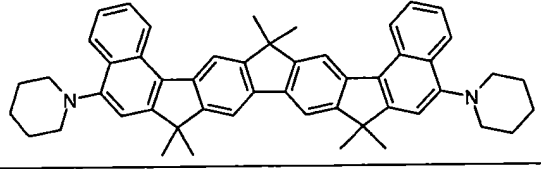
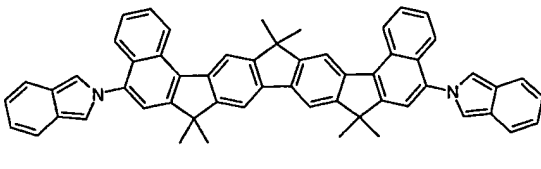
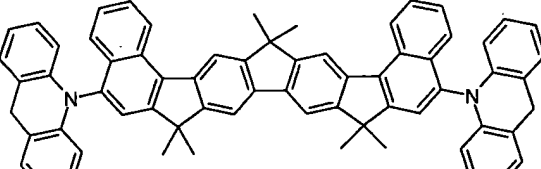
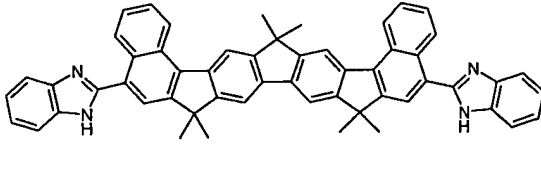
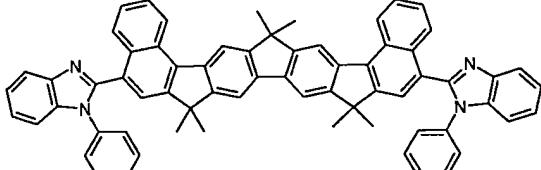
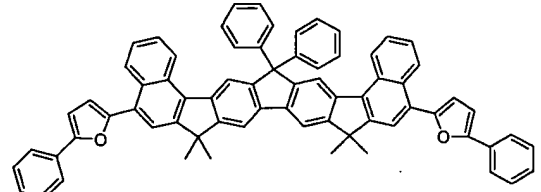
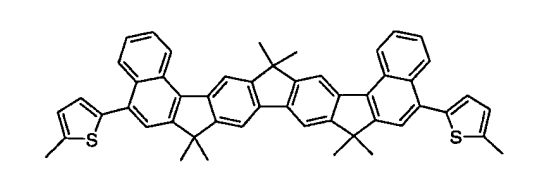
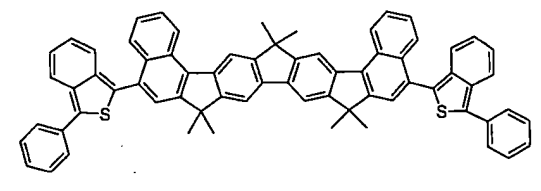
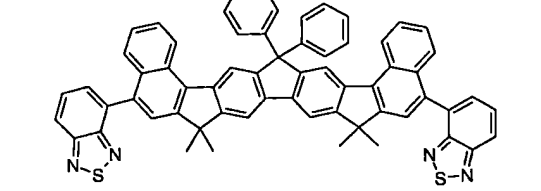
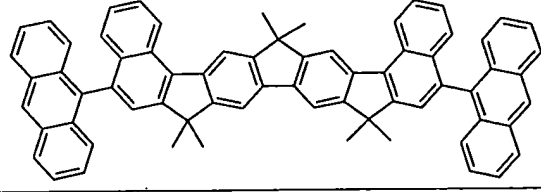
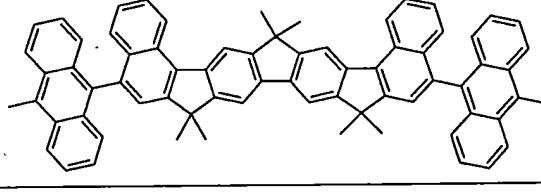
	
211	212
	
213	214
	
215	216
	
217	218
	
219	220
	
221	222
	
223	224

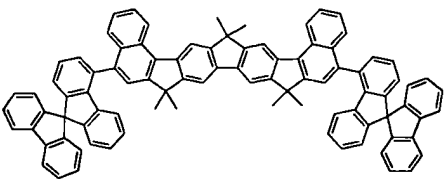
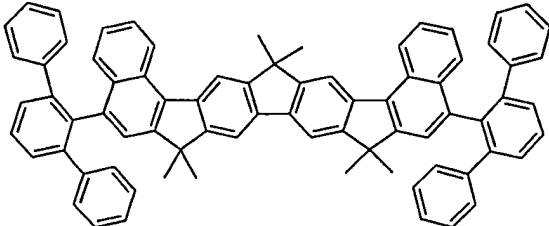
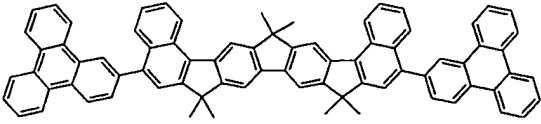
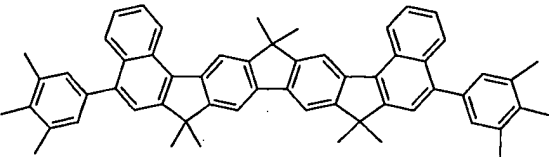
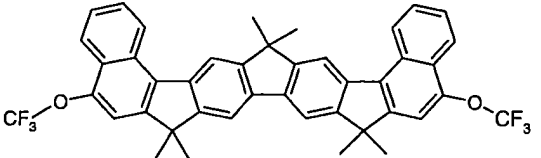
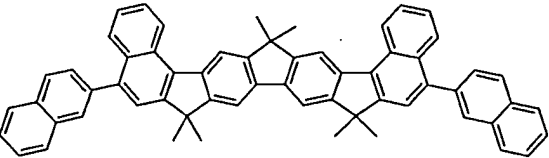
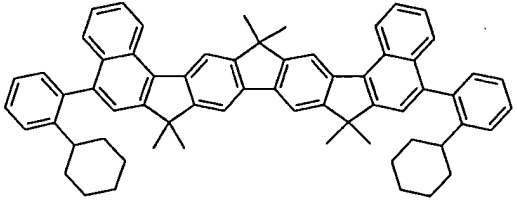
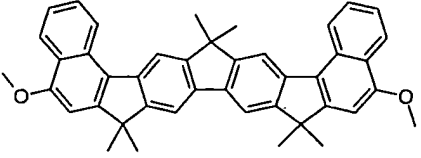
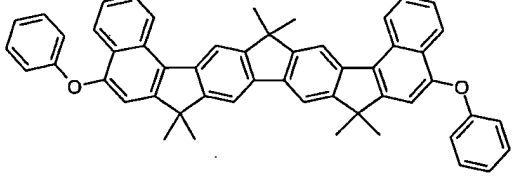
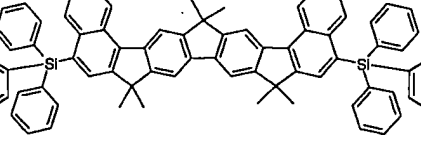
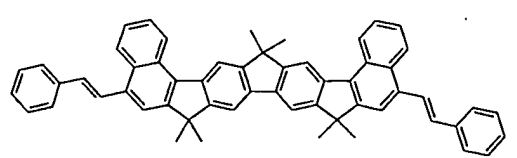
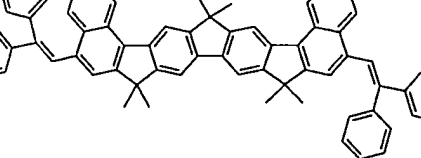
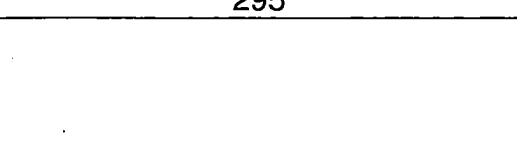
	
225	226
	
227	228
	
229	230
	
231	232
	
233	234
	
235	236

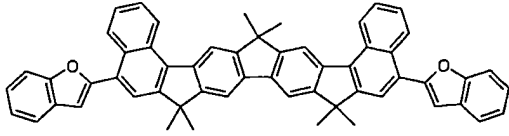
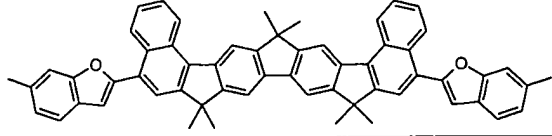
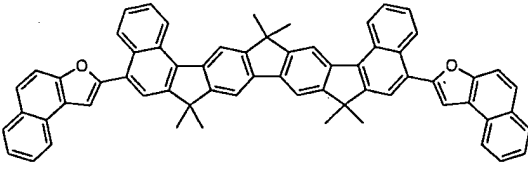
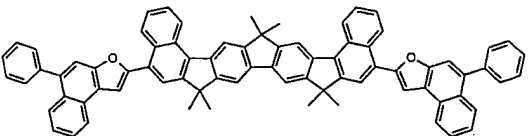
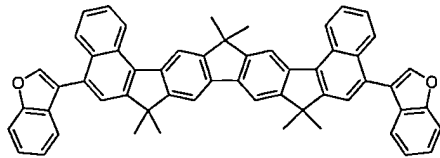
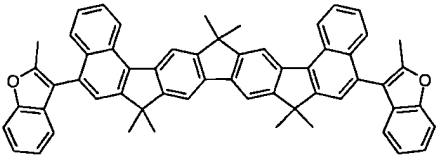
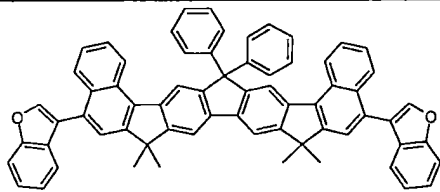
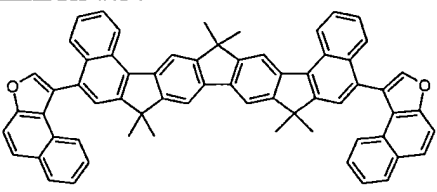
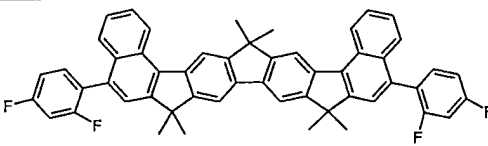
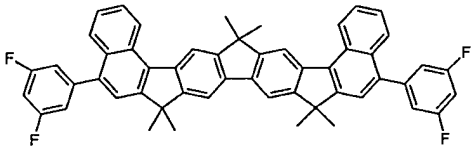
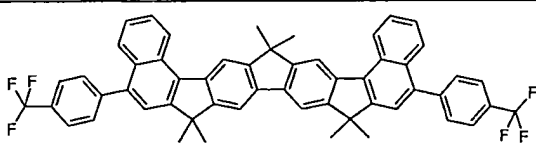
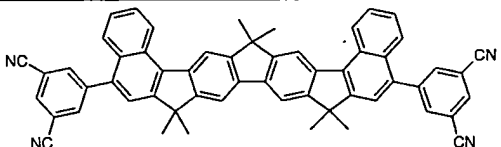
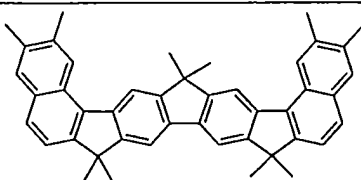
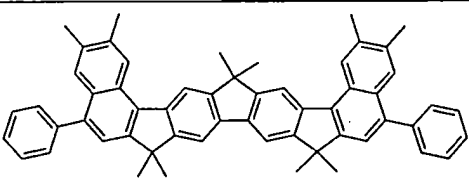
	
237	238
	
239	240
	
241	242
	
243	244
	
245	246
	
247	248

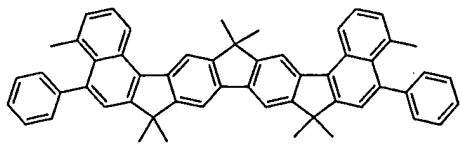
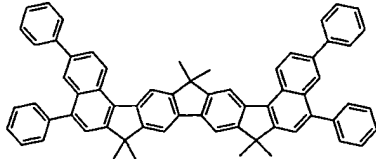
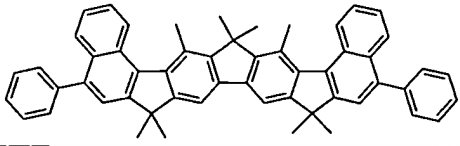
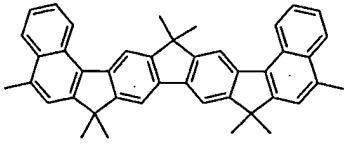
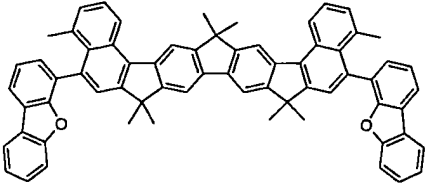
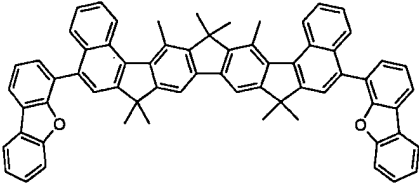
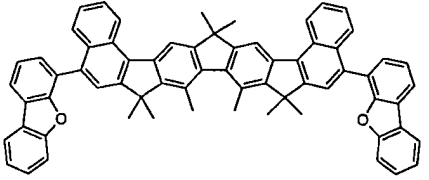
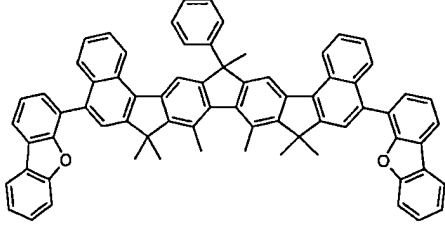
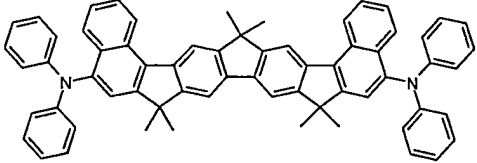
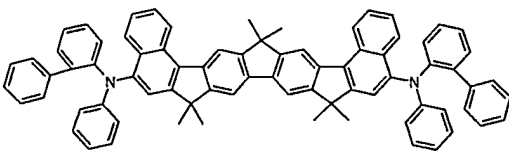
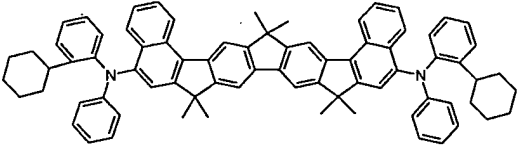
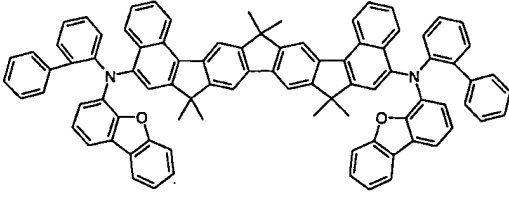
	
249	250
	
251	252
	
253	254
	
255	256
	
257	258
	
259	260

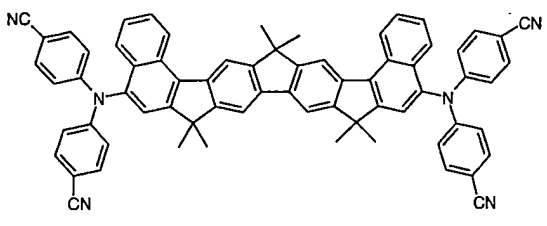
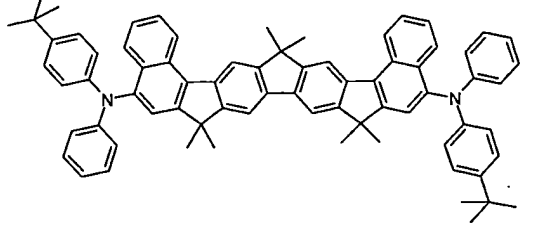
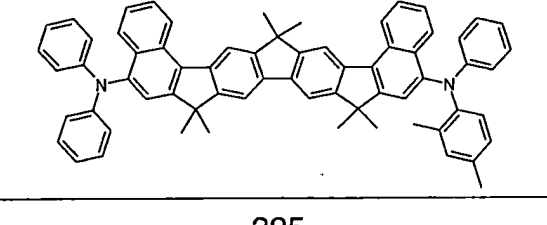
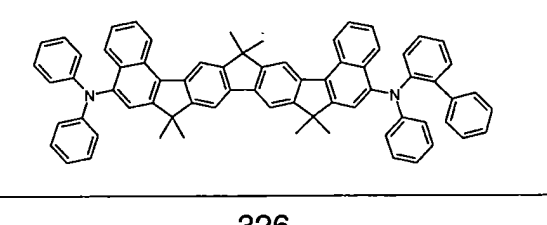
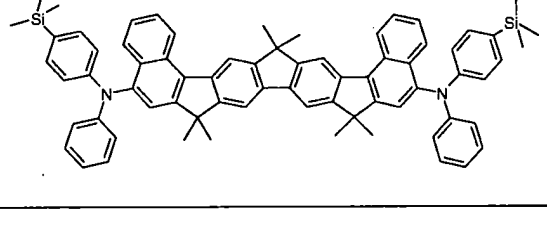
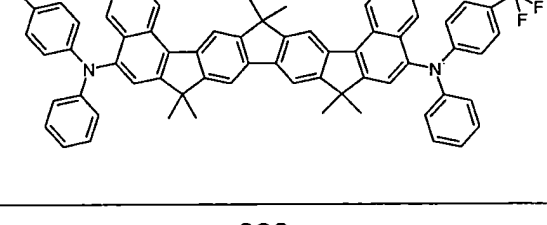
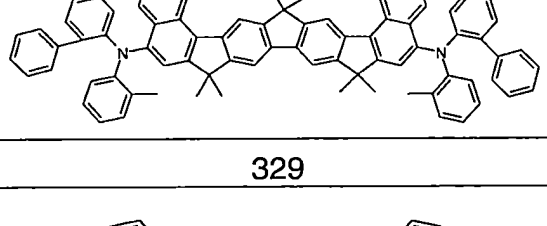
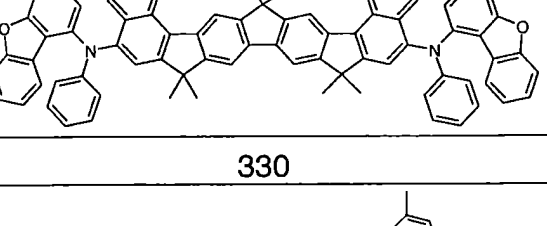
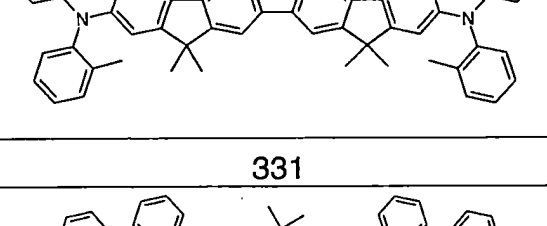
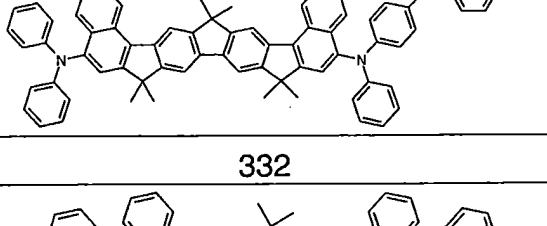
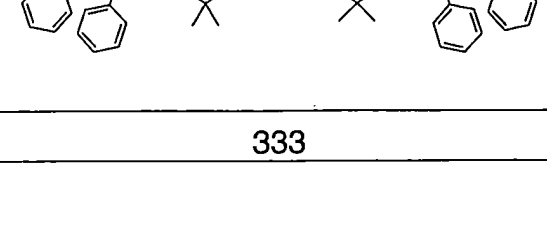
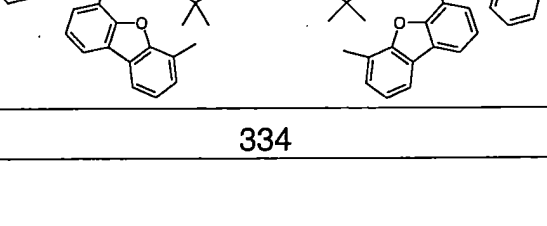
	
261	262
	
263	264
	
265	266
	
267	268
	
269	270
	
271	272

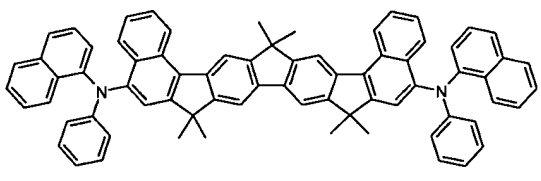
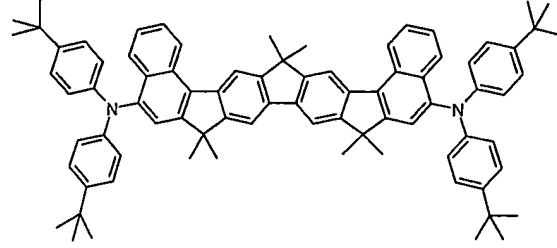
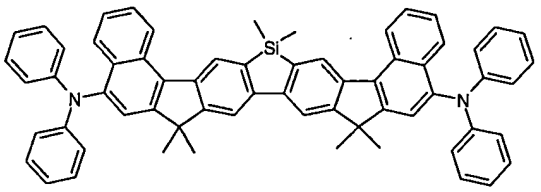
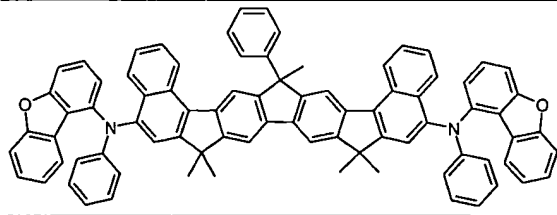
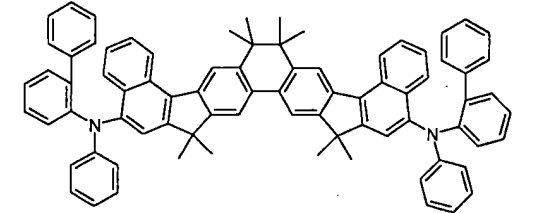
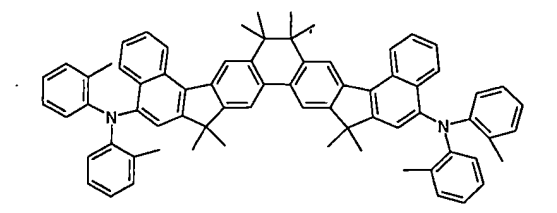
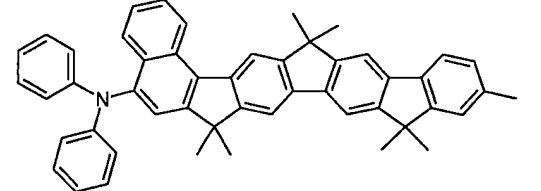
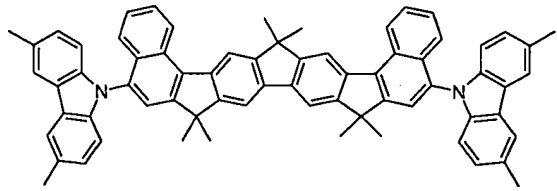
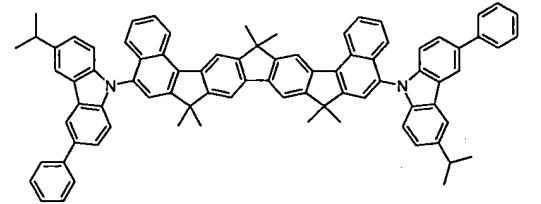
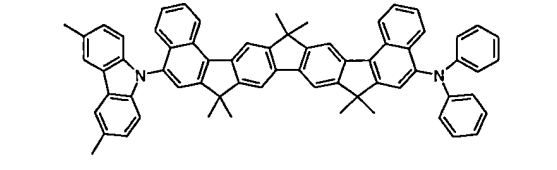
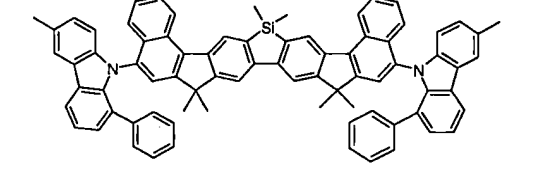
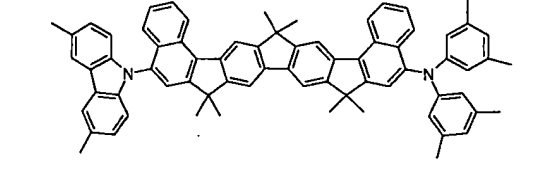
	
273	274
	
275	276
	
277	278
	
279	280
	
281	282
	
283	284

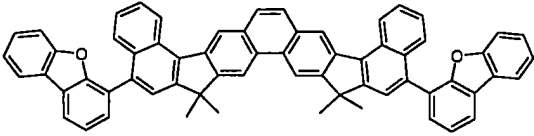
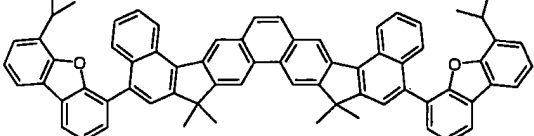
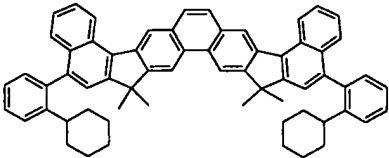
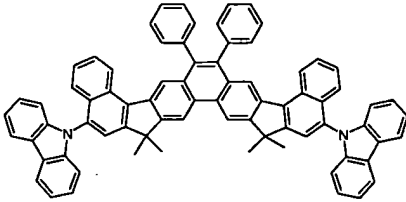
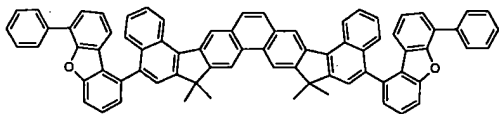
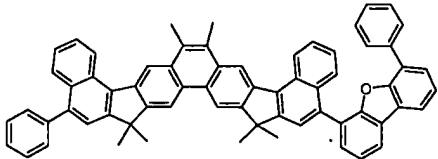
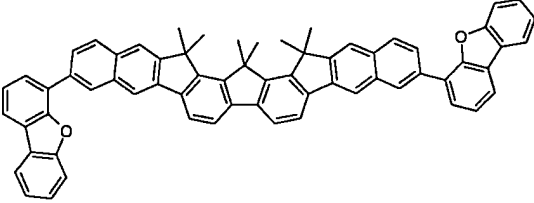
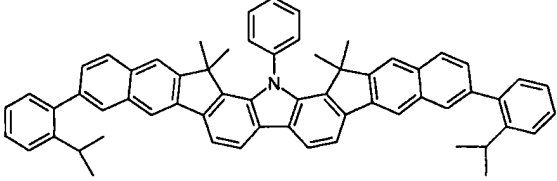
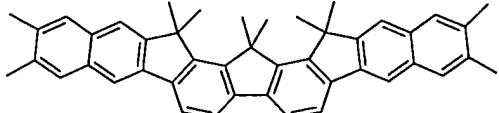
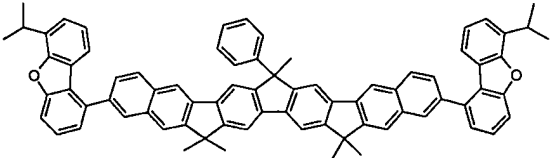
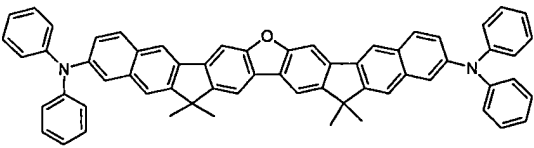
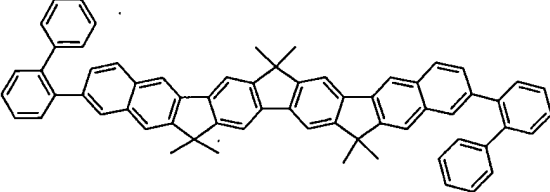
	
285	286
	
287	288
	
289	289
	
290	290
	
291	291
	
292	292
	
293	293
	
294	294
	
295	295
296	296

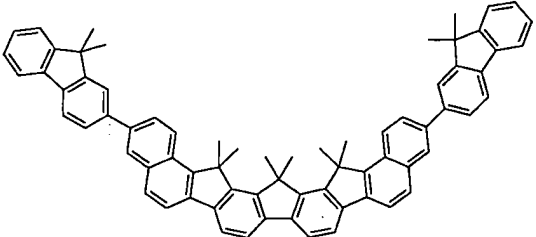
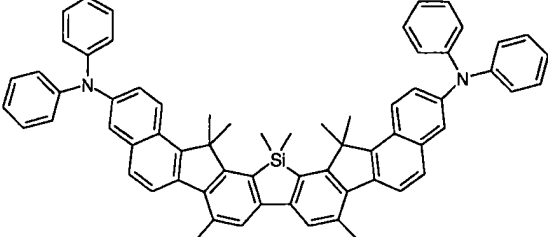
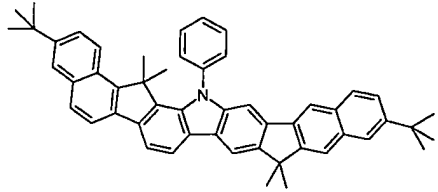
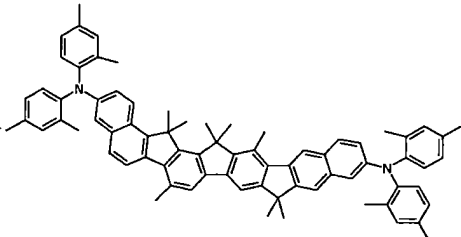
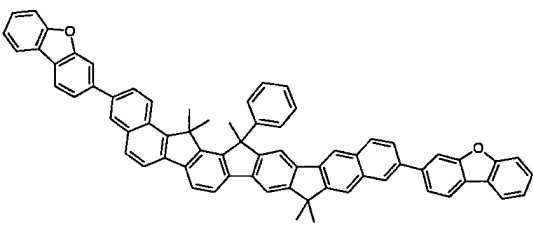
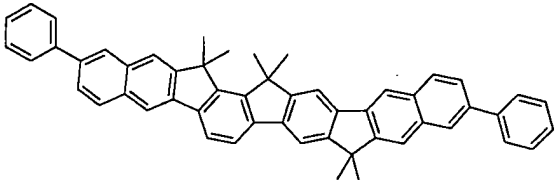
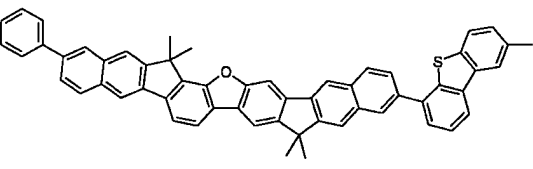
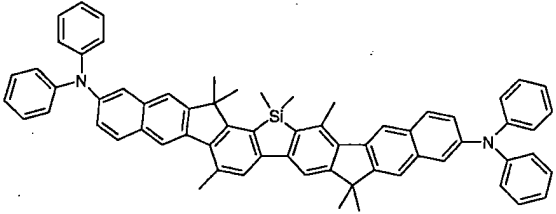
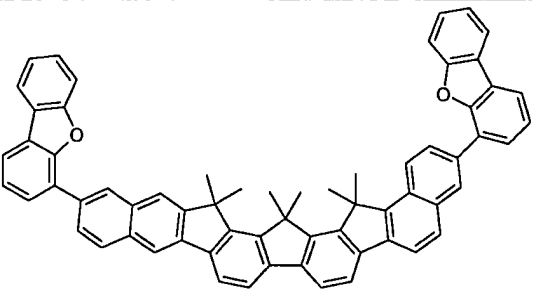
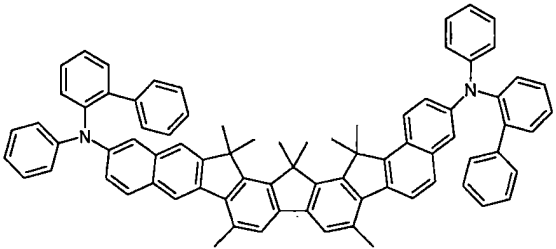
	
297	298
	
299	300
	
301	302
	
303	304
	
305	306
	
307	308
	
309	310

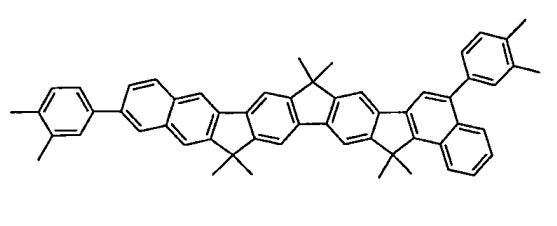
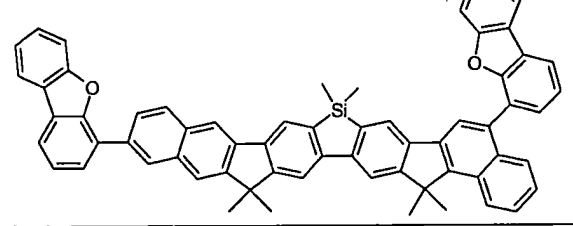
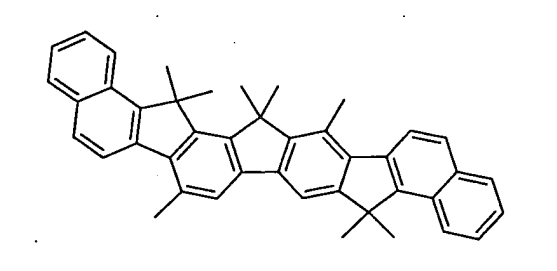
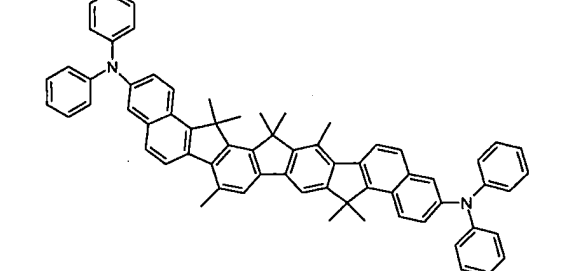
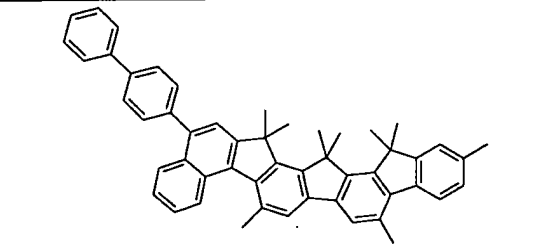
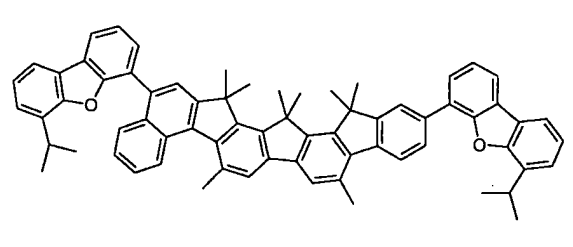
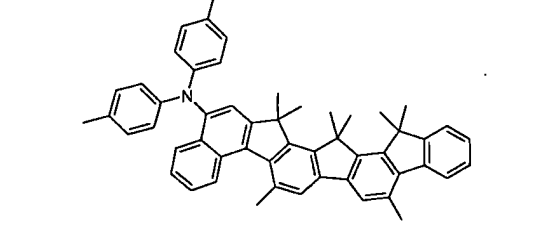
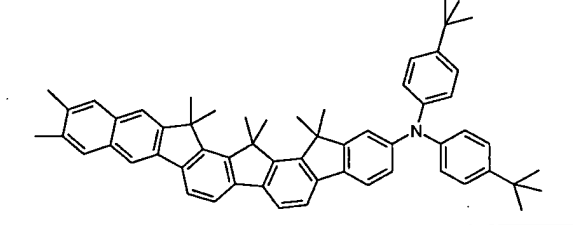
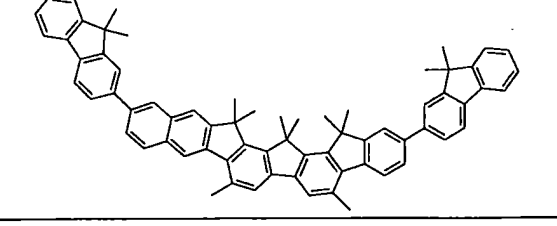
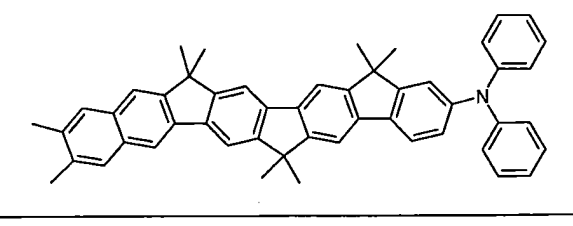
	
311	312
	
313	314
	
315	316
	
317	318
	
319	320
	
321	322

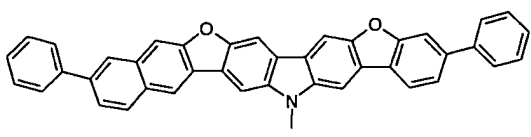
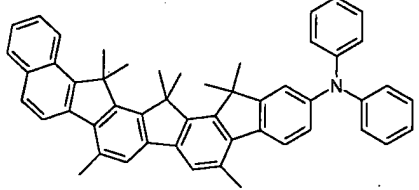
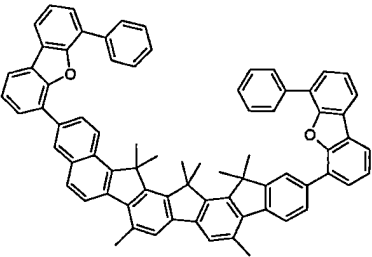
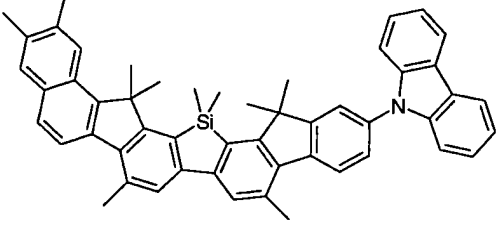
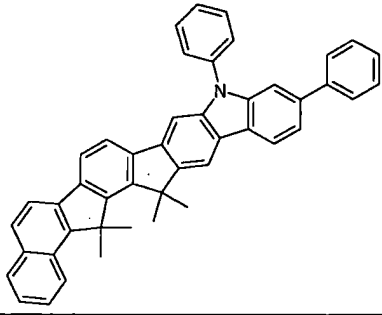
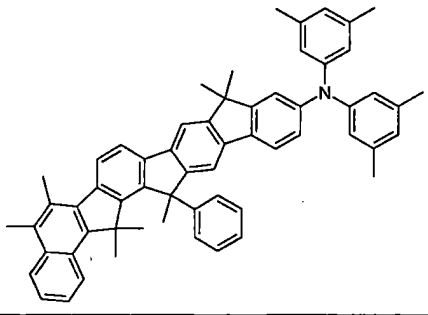
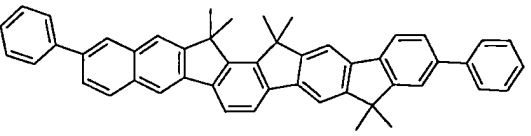
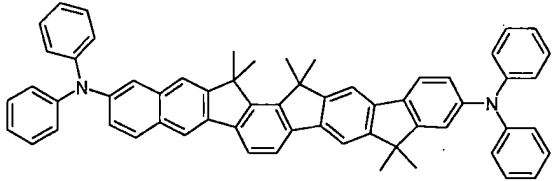
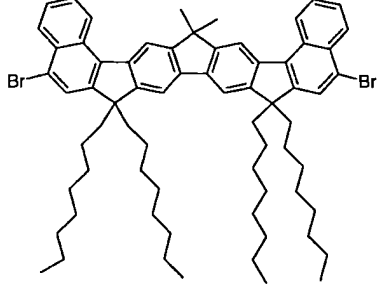
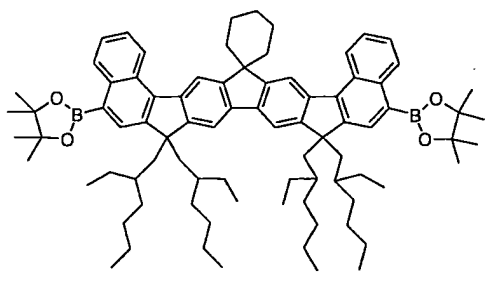
	
323	324
	
325	326
	
327	328
	
329	330
	
331	332
	
333	334

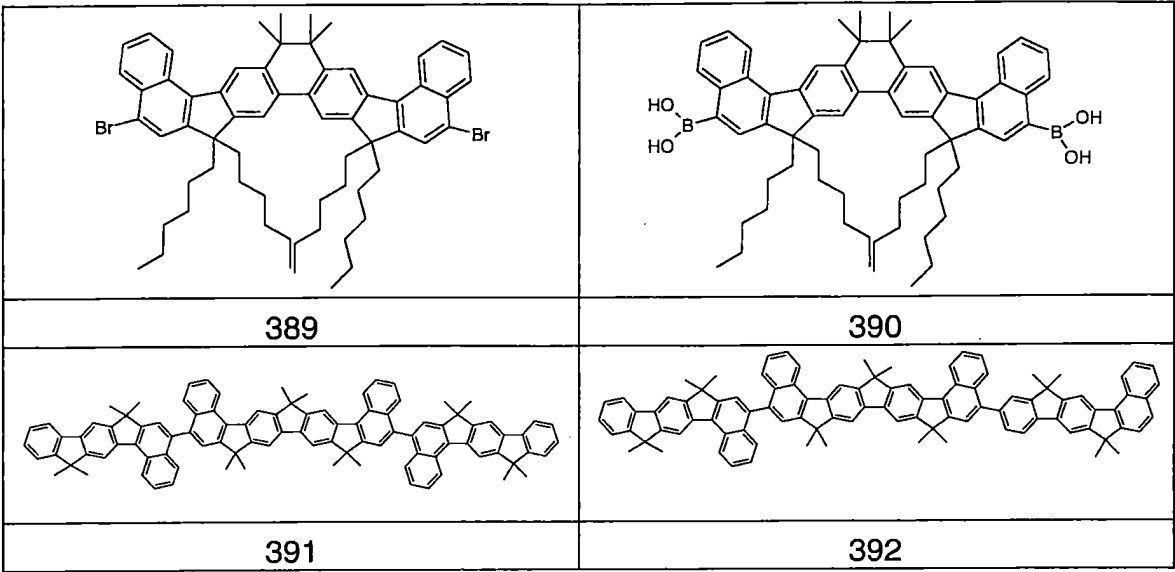
	
335	336
	
337	338
	
339	340
	
341	342
	
343	344
	
345	346

	
347	348
	
349	350
	
351	352
	
353	354
	
355	356
	
357	358

	
359	360
	
361	362
	
363	364
	
365	366
	
367	368

	
369	370
	
371	372
	
373	374
	
375	376
	
377	378

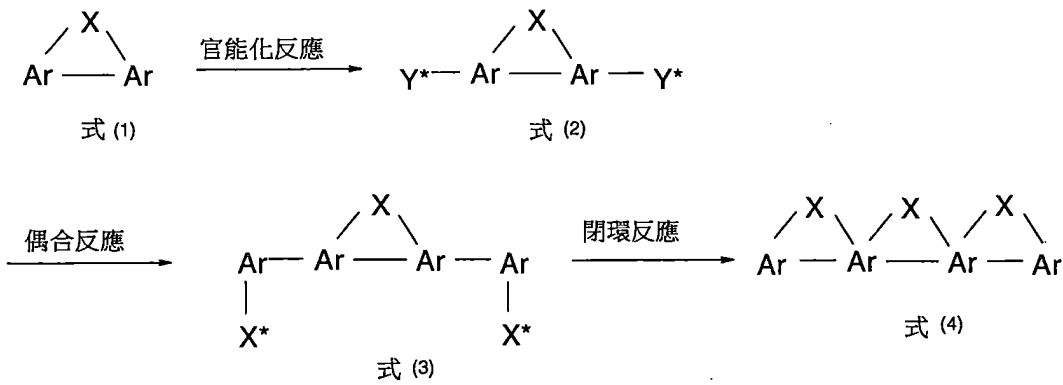
	
379	380
	
381	382
	
383	384
	
385	386
	
387	388



式(I)之化合物可藉由有機化學的已知方法或反應步驟製備。

製備式(I)之化合物之較佳方法係顯示如下(流程 1)：

流程 1

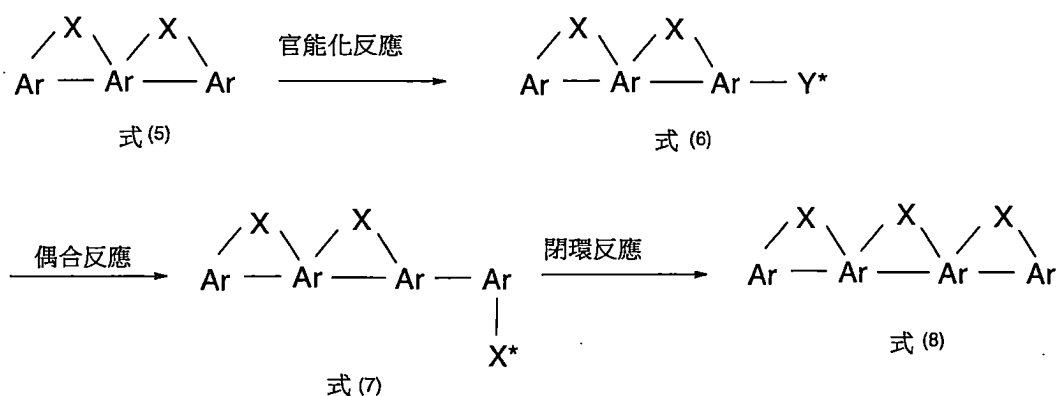


- Ar：芳族或雜芳族基團
- X：橋聯基團(bridging group)
- X*：橋聯基團之前驅基團
- Y*：反應性基團，例如 Cl、Br、I

為此目的，藉由例如溴化，或藉由溴化及後續硼化，將反應性基團引進起始化合物(式(I))中，其在許多情況下為市售。雙偶合反應(例如鈴木(Suzuki)偶合反應)接著進行，利用該偶合反應引入二個另外的芳族基團。此等另外的芳族基團含有官能基 X^* ，其能夠進行閉環與形成橋聯基團 X 。閉環反應之後，獲得式(I)之化合物(流程 1 中之式(4))，其可隨意地進一步官能化。

或者，如流程 2 中所示，起始材料可為已含二個橋聯基團 X 的化合物(流程 2 中之式(5))。製備該等化合物之方法為熟習該項技術者已知的，例如從 WO 2008/006449。進一步的步驟對應於該等於流程 1 的情況中所示者。

流程 2



Ar：芳族或雜芳族基團

X：橋聯基團

X^* ：橋聯基團之前驅基團

Y^* ：反應性基團，例如 Cl、Br、I

上述圖示之方法的細節可從實施例獲得。

熟習該項技術者將能夠從以上圖示之方法偏離，或修改彼等，以得到式(I)之化合物，如果此為需要的。此在熟習該項技術者一般能力範圍內進行。

本案因此係關於製備式(I)之化合物之方法，其特徵在於其包含至少一種金屬催化之偶合反應及至少一種閉環反應。

金屬催化之偶合反應在此較佳係過渡金屬催化之偶合反應，特佳是鈴木(Suzuki)反應。

上述根據本發明之化合物，特別是經反應性脫離基(諸如溴、碘、氯、硼酸或硼酸酯)取代之化合物可用作製備對應寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物之單體。適合的反應性脫離基為例如溴、碘、氯、硼酸、硼酸酯、胺、分別含有終端 C-C 雙鍵或 C-C 三鍵之烯基或炔基基團、氧呋(oxirane)、氧咀(oxetane)、進行環加成反應(例如 1,3-偶極環加成反應)之基團，諸如(例如)二烯或疊氮化物、羧酸衍生物、醇類和矽烷。

本發明因此又係關於包含一或多種式(I)之化合物之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中至聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物之鍵可位於經 R^1 、 R^2 或 R^3 取代之式(I)中的任何所要位置處。視式(I)之化合物之連結而定，該化合物為寡聚物或聚合物的側鏈之一部分或主鏈的一部分。就本發明的意義而言寡聚物意指從至少 3 個單體單元建構之化合物。就本發明的意義而言聚合物意指從至少 10 個單體

單元建構之化合物。根據本發明之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物可為共軛、部分共軛或非共軛。根據本發明之寡聚物或聚合物可為直鏈、具支鏈或樹枝狀。在以直鏈方式連結之結構中，式(I)單元可彼此直接連結或經由二價基團(例如經由經取代或未經取代之伸烷基、經由雜原子或經由二價芳族或雜芳族基團)彼此連結。在支鏈及樹枝狀結構中，三個或更多個式(I)單元可例如經由三價或多價基團(例如經由三價或多價芳族或雜芳族基團)連結，以產生支鏈或樹枝狀寡聚物或聚合物。

與上述針對式(I)化合物相同之較佳選項適用於寡聚物、樹枝狀聚合物及聚合物中的式(I)之重複單元。

為了製備寡聚物或聚合物，將根據本發明之單體進行均聚或與其他單體進行共聚。適合且較佳的共聚單體係選自萸(例如根據 EP 842208 或 WO 00/22026)、螺雙萸(例如根據 EP 707020、EP 894107 或 WO 06/061181)、對-伸苯基(例如根據 WO 1992/18552)、呔啞(例如根據 WO 04/070772 或 WO 2004/113468)、噻吩(例如根據 EP 1028136)、二氫萸(例如根據 WO 2005/014689 或 WO 2007/006383)、順式-及反式-茛并萸(例如根據 WO 2004/041901 或 WO 2004/113412)、酮(例如根據 WO 2005/040302)、萸(例如根據 WO 2005/104264 或 WO 2007/017066)亦或複數種此等單元。聚合物、寡聚物及樹枝狀聚合物通常亦含有其他單元，例如發光(螢光或磷光)單元，諸如，例如乙烯基三芳基胺(例如根據 WO

2007/068325) 或 磷 光 金 屬 錯 合 物 (例 如 根 據 WO 2006/003000) 及 / 或 電 荷 傳 輸 單 元 , 特 別 是 彼 等 以 三 芳 基 胺 為 主 者 。

根據本發明之聚合物、寡聚物及樹枝狀聚合物具有有利特性，特別是長使用壽命、高效率及良好色坐標。

通常藉由一或多種類型之單體的聚合來製備根據本發明之聚合物及寡聚物，其中至少一種單體產生聚合物中重複出現的式(I)單元。適合的聚合反應為熟習此項技術者已知且描述於文獻中。產生 C-C 或 C-N 鍵之尤其適合且較佳之聚合反應為以下反應：

- (A) 鈴木(SUZUKI)聚合；
- (B) 山本(YAMAMOTO)聚合；
- (C) 施蒂勒(STILLE)聚合；及
- (D) 哈特維希-布赫瓦爾德(HARTWIG-BUCHWALD)聚合。

可藉由此等方法進行聚合之方式及可隨後自反應介質分離聚合物且進行純化之方式為熟習此項技術者已知且詳細描述於文獻中，例如於 WO 2003/048225、WO 2004/037887 及 WO 2004/037887 中。

為了從液相處理根據本發明之化合物，藉由例如旋塗或藉由印刷方法，需要根據本發明之化合物的調配物。此等調配物可為例如溶液、分散液或乳液。為此目的，較佳可為使用兩或多種溶劑之混合物。適合且較佳之溶劑為例如甲苯；苯甲醚；鄰、間或對二甲苯；苯甲酸甲酯；菜

(mesitylene)；四氫萘；藜蘆素(veratrol)；THF；甲基-THF；THP；氯苯；二噁烷；苯氧基甲苯，特別是3-苯氧基甲苯；(-)-葑酮；1,2,3,5-四甲基苯；1,2,4,5-四甲基苯；1-甲基萘；2-甲基苯并噻唑；2-苯氧基乙醇；2-吡咯啉酮；3-甲基苯甲醚；4-甲基苯甲醚；3,4-二甲基苯甲醚；3,5-二甲基苯甲醚；苯乙酮； α -萜品醇；苯并噻唑；苯甲酸丁酯；異丙苯；環己醇；環己酮；環己基苯；十氫萘；十二烷基苯；苯甲酸乙酯；二氫茚；苯甲酸甲酯；NMP；對異丙甲苯；苯基乙基醚；1,4-二異丙基苯；二苄基醚；二乙二醇丁基甲基醚；三乙二醇丁基甲基醚；二乙二醇二丁醚；三乙二醇二甲醚；二乙二醇單丁醚；三丙二醇二甲醚；四乙二醇二甲醚；2-異丙基萘；戊基苯；己基苯；庚基苯；辛基苯；1,1-雙(3,4-二甲基苯基)乙烷或此等溶劑之混合物。

本發明因此另關於調配物，特別是一種溶液、分散液或乳液，其包含至少一種式(I)之化合物或至少一種含有至少一式(I)之單元的聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物，及至少一種溶劑，較佳為有機溶劑。其中可製備此類型之溶液的方式為熟習此項技術者已知且描述於例如 WO 2002/072714、WO 2003/019694 及其中所引用之文獻中。

式(I)之化合物適合使用於電子裝置，特別是有機電致發光裝置(OLED)中。視取代作用而定，化合物可用於不同功能及層中。

式(I)之化合物可用在有機電致發光裝置中任何功能，

例如作為電洞傳輸材料、作為基質材料、作為發光材料、或作為電子傳輸材料。

本發明因此另關於式(I)之化合物在電子裝置中之用途。此處之電子裝置較佳係選自由下列所組成之群組：有機積體電路(OIC)、有機場效應電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機發光電晶體(OLET)、有機太陽能電池(OSC)、有機光學偵測器、有機感光體(organic photoreceptor)、有機場淬熄裝置(organic field-quench devices)(OFQD)、有機發光電化學電池(OLEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及特佳有機電致發光裝置(OLED)。

本發明另關於包含至少一種式(I)之化合物的電子裝置。該電子裝置較佳係選自上述裝置。特佳者為包含陽極、陰極及至少一個發光層之有機電致發光裝置，其特徵在於至少一個有機層包含至少一種式(I)之化合物。

除陰極、陽極及發光層之外，有機電致發光裝置亦可包含其他層。此等在各種情況下係選自例如一或多種電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、電子傳輸層、電子注入層、電子阻擋層、激子阻擋層、間層、電荷產生層(IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer)及/或有機或無機 p/n 界面。

有機電致發光裝置之層的順序較佳如下：陽極-電洞注入層-電洞傳輸層-發光層-電子傳輸層-電子注入層-陰

極。並非所有該等層必須存在，且可另外存在其他層，例如相鄰於發光層之陽極側之電子阻擋層，或相鄰於發光層之陰極側的電洞阻擋層。

根據本發明之有機電致發光裝置可包含複數個發光層。在此情況下，此等發光層特佳地總計具有複數個介於 380 奈米與 750 奈米之間的最大發光值，整體上導致發白光，亦即能夠發螢光或發磷光且發藍光、綠光、黃光、橘光或紅光的各種發光化合物係使用於發光層中。特佳者為三層系統，即具有三個發光層之系統，其中該等層中之至少一者較佳包括至少一種式(I)之化合物且其中該三層呈現藍色、綠色、黃色、橘色光或紅色發光(基本結構參見例如 WO 2005/011013)。應注意，為了產生白光，單獨使用在寬波長範圍發光之發射體化合物替代複數個發有色光之發射體化合物亦可為合適的。可選地及/或另外地，根據本發明之化合物也可存在於此類型的有機電致發光裝置之電洞傳輸層或另一層中。各種發光層可彼此直接相鄰，或彼等可以非發光層彼此分離。根據本發明之一較佳具體實例，發白光 OLED 為所謂的串接(tandem)式 OLED，即二或多個完整 OLED 層順序存在 OLED 中，其中 OLED 層順序在各情況下包含電洞傳輸層、發光層和電子傳輸層，彼等各以電荷產生層彼此分離。

較佳的是式(I)之化合物被使用於發光層中。式(I)之化合物特別適合於用作發光層中之發光化合物或作為基質材料。

根據本發明之化合物特別適合於用作發藍光之發光體化合物或作為發藍光之發光體化合物的基質化合物。

若根據本發明之化合物用作 OLED 的發光層中之基質材料，則較佳的是取代基 R^1 、 R^2 和 R^3 中沒有一個選自與式(I)之基本結構共軛的基團，特別是取代基 R^1 、 R^2 和 R^3 中沒有一個選自氰基基團、芳基胺基基團或芳基或雜芳基基團。在使用根據本發明之化合物作為基質材料的情況中， R^1 和 R^2 特佳係選自 H、D、F 和具有 1 至 10 個 C 原子之烷基基團，特佳選自 H 和 D， R^1 和 R^2 非常特佳等於 H。

若根據本發明之化合物用作 OLED 的發光層中之發光體化合物，則較佳的是一或多個取代基 R^1 、 R^2 和 R^3 係選自與式(I)之基本結構共軛的基團，例如氰基基團，芳基胺基基團或芳基或雜芳基基團。

若根據本發明之化合物用作發光層中之發光化合物，則較佳的是其與一或多種基質材料組合使用。基質材料在此意指存在於發光層中，較佳作為主成分，且其在裝置操作時不發光之材料。

發光化合物在發光層的混合物中之比例係介於 0.1 和 50.0%之間，較佳介於 0.5 和 20.0%，特佳介於 1.0 和 10.0%之間。對應地，基質材料或基質材料等之比例係介於 50.0 和 99.9%之間，較佳介於 80.0 和 99.5%之間，特佳介於 90.0 和 99.0%之間。

以 % 描述的比例，就本案之目的而言，若該化合物從

氣相施加，意指體積%，而若該化合物從溶液施加，意指重量%。

若根據本發明之化合物用作基質材料，則其可與所有已知的發光化合物組合使用。較佳的是與下示較佳發光化合物，特別是下示較佳螢光化合物組合使用。

若式(I)之化合物用作為於發光層中與磷光發光體組合之基質材料，則磷光發光體較佳係選自下示磷光發光體之具體實例。在此情況下，一或多種其他基質材料亦較佳存在於發光層中。

此類型之所謂混合基質系統較佳地包含二或三種不同的基質材料，特佳兩種不同的基質材料。兩種材料中之一者在此較佳為具有電洞傳輸性質之材料而另一材料為具有電子傳輸性質之材料。式(I)之化合物較佳表示具有電洞傳輸性質之材料。

然而，所要之混合基質成分的電子傳輸和電洞傳輸性質也可主要地或完全地組合於單一混合基質成分，其中其他混合基質成分滿足其他功能。兩種不同的基質材料在此可以 1：50 至 1：1，較佳地 1：20 至 1：1，特佳地 1：10 至 1：1 和非常特佳地 1：4 至 1：1 之比率存在。混合基質系統較佳係使用於磷光有機電致發光裝置中。關於混合基質系統之更明確的資料特別是提供於申請案 WO 2010/108579 中。

可與根據本發明之化合物組合用作混合基質系統之基質成分的特別適合之基質材料係選自用於磷光發光化合物

之下示較佳基質材料或用於螢光發光化合物之較佳基質材料，取決於使用於混合基質系統中的發光化合物之類型。

根據本發明之化合物也可使用於非發光層之層，例如，作為電洞注入或電洞傳輸層或電子阻擋層中之電洞傳輸材料。

若將式(I)之化合物用作例如電洞傳輸層、電洞注入層或電子阻擋層中之電洞傳輸材料，則該化合物可以純材料形式(亦即以 100%之比例)用於電洞傳輸層中，或其可與一或多種其他化合物組合使用。根據一較佳具體實例，包含式(I)之化合物之有機層可額外包含一或多種 p 型摻雜物。根據本發明，所使用之較佳 p 型摻雜物為能夠氧化混合物中之一或多種其他化合物的有機電子受體化合物。

p 型摻雜物之特佳具體實例為揭示於 WO 2011/073149、EP 1968131、EP 2276085、EP 2213662、EP 1722602、EP 2045848、DE 102007031220、US 8044390、US 8057712、WO 2009/003455、WO 2010/094378、WO 2011/120709、US 2010/0096600 及 WO 2012/095143 中之化合物。

在此情況下另較佳的是電子裝置在陽極和發光層之間具有多個電洞傳輸層。可能出現的情況是：這些層全部包含式(I)之化合物，或只有其個別層包含式(I)之化合物。

若式(I)之化合物被用作電洞傳輸材料，較佳的是：其具有大的 HOMO 和 LUMO 間能階差。此外較佳的是：不含胺基基團作為取代基。此外較佳的是：芳族環上絕對不

含取代基，即 R^1 和 R^2 等於 H 或 D，特佳等於 H。

式(I)之化合物亦可用作電子傳輸層、電洞阻擋層或電子注入層中之電子傳輸化合物。為此目的較佳的是式(I)之化合物含有一或多個選自缺電子雜芳基基團之取代基，諸如，例如，三吡啶、嘧啶或苯并咪唑。

用作根據本發明之有機電致發光裝置中的對應功能材料之一般較佳材料種類係如下所示。

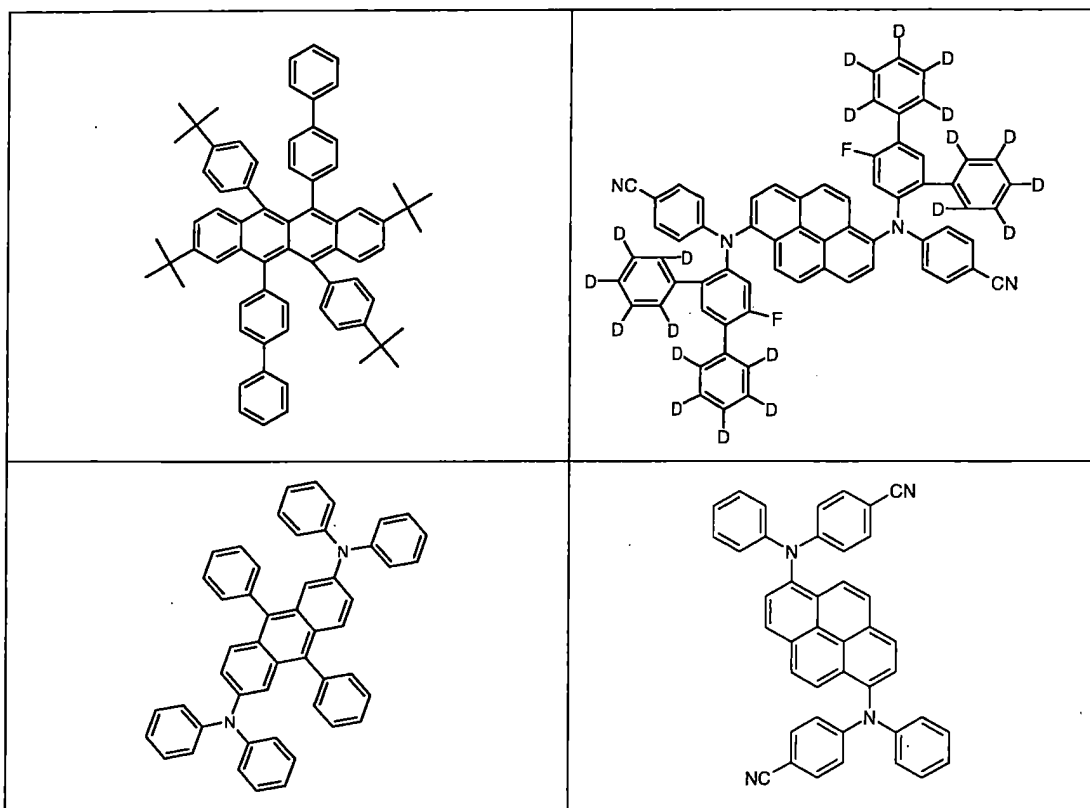
適合之磷光發光化合物特別為在適當激發時較佳在可見光區域內發光且另外含有至少一種具有原子序大於 20(較佳為大於 38 且少於 84，特佳為大於 56 且少於 80) 的原子之化合物。所使用之磷光發光化合物較佳為含有銅、鋁、鎢、銻、鈦、鐵、鎳、銻、鈾、鉑、銀、金或鎘的化合物，特別為含有銻、鉑或銅的化合物。

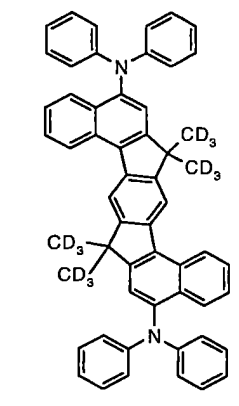
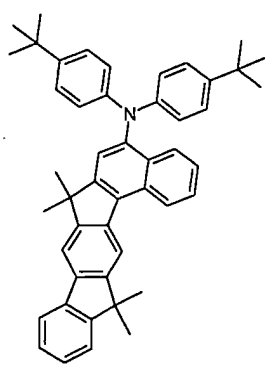
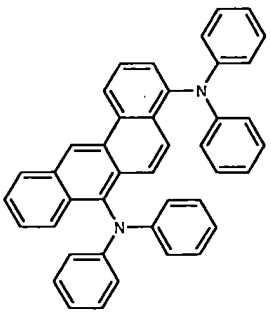
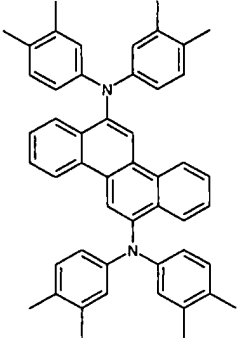
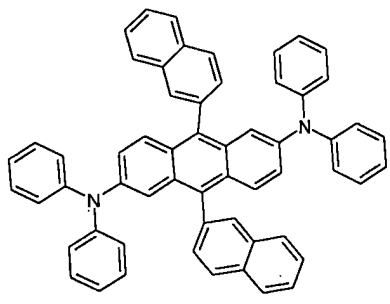
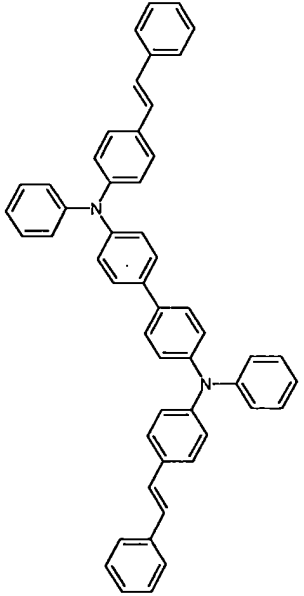
就本發明之意義而言，所有的發光銻、鉑或銅錯合物被視為磷光化合物。

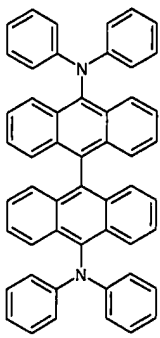
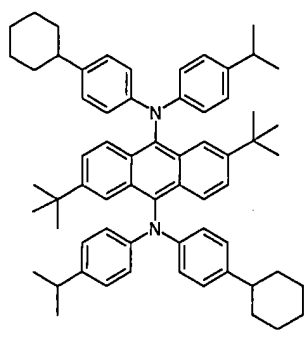
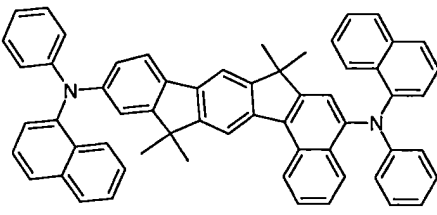
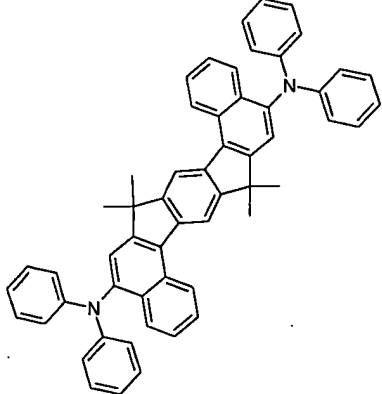
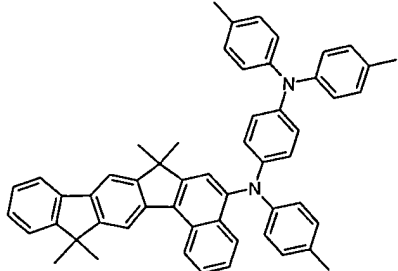
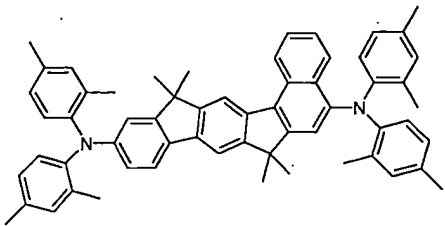
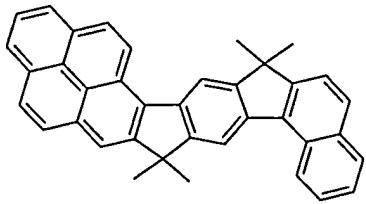
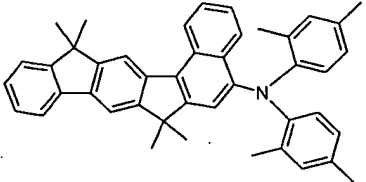
上述發磷光化合物的實例係由申請案 WO 2000/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 2005/033244、WO 2005/019373 及 US 2005/0258742 揭示。通常，根據先前技術用於磷光 OLED 且為熟習有機電致發光裝置領域之技術者已知的所有磷光錯合物皆適合使用於根據本發明的裝置。熟習該項技術者也將能夠在毋需創造性勞動下將其他磷光錯合物與根據本發明之化合物組合使用於 OLED 中。

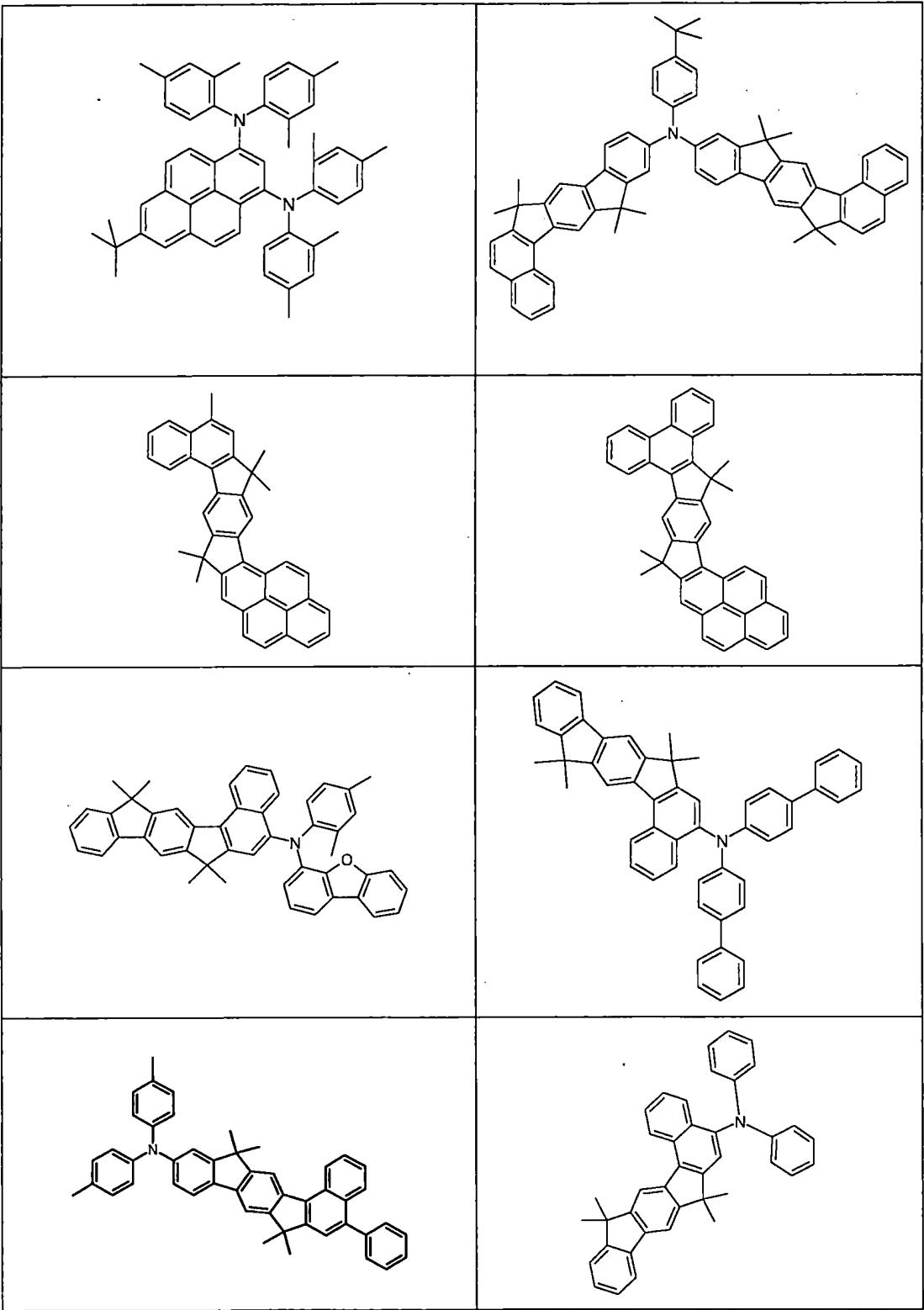
除根據本發明之化合物外，較佳螢光發射體係選自芳基胺之種類。就本發明的意義而言，芳基胺意指含有三個直接鍵結至氮之經取代或未經取代之芳族或雜芳族環系統的化合物。此等芳族或雜芳族環系統中之至少一者較佳為縮合環系統，特佳為具有至少 14 個芳族環原子。其較佳實例為芳族蔥胺、芳族蔥二胺、芳族芘胺、芳族芘二胺、芳族茚胺或芳族茚二胺。芳族蔥胺意指其中一個二芳基胺基直接鍵結(較佳在 9 位置上)至蔥基之化合物。芳族蔥二胺意指其中兩個二芳基胺基直接鍵結(較佳在 9,10-位置上)至蔥基之化合物。芳族芘胺、芘二胺、茚胺及茚二胺係與其類似地定義，其中二芳基胺基較佳地在 1-位置或 1,6-位置上與芘鍵結。其他較佳發射體為茚并芘胺或茚并芘二胺，例如根據 WO 2006/108497 或 WO 2006/122630；苯并茚并芘胺或苯并茚并芘二胺，例如根據 WO 2008/006449；及二苯并茚并芘胺或二苯并茚并芘二胺，例如根據 WO 2007/140847；及 WO 2010/012328 中揭示之含有縮合芳基之茚并芘衍生物。較佳者同樣為 WO 2012/048780 及 WO 2013/185871 中揭示之芘芳基胺。較佳者同樣為 WO 2014/037077 中揭示之苯并茚并芘胺；尚未公開之 EP 13000012.8 中揭示之苯并芘胺和尚未公開之 EP13004921.6 中揭示之茚并芘。

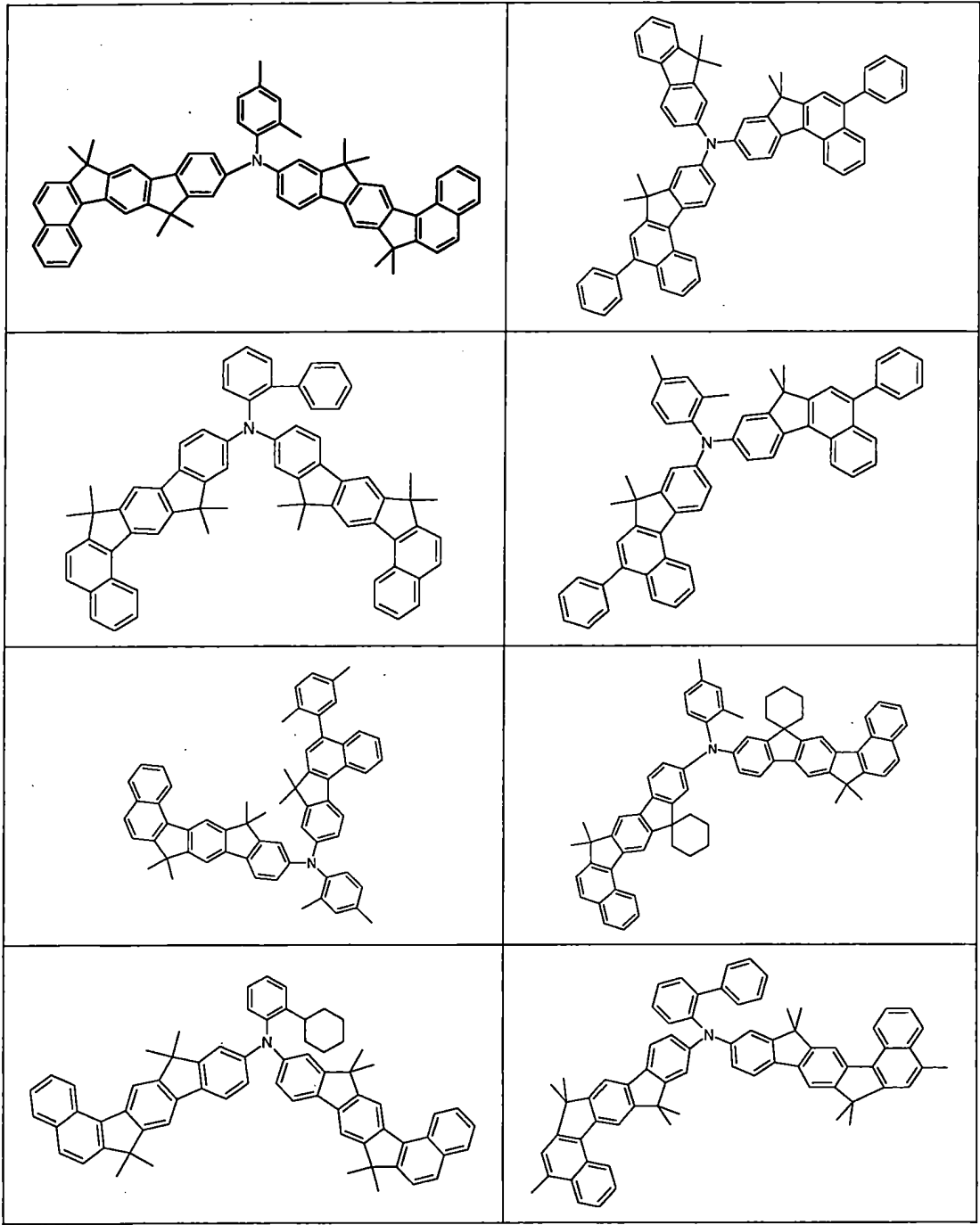
較佳螢光發光化合物係描述於下表中：

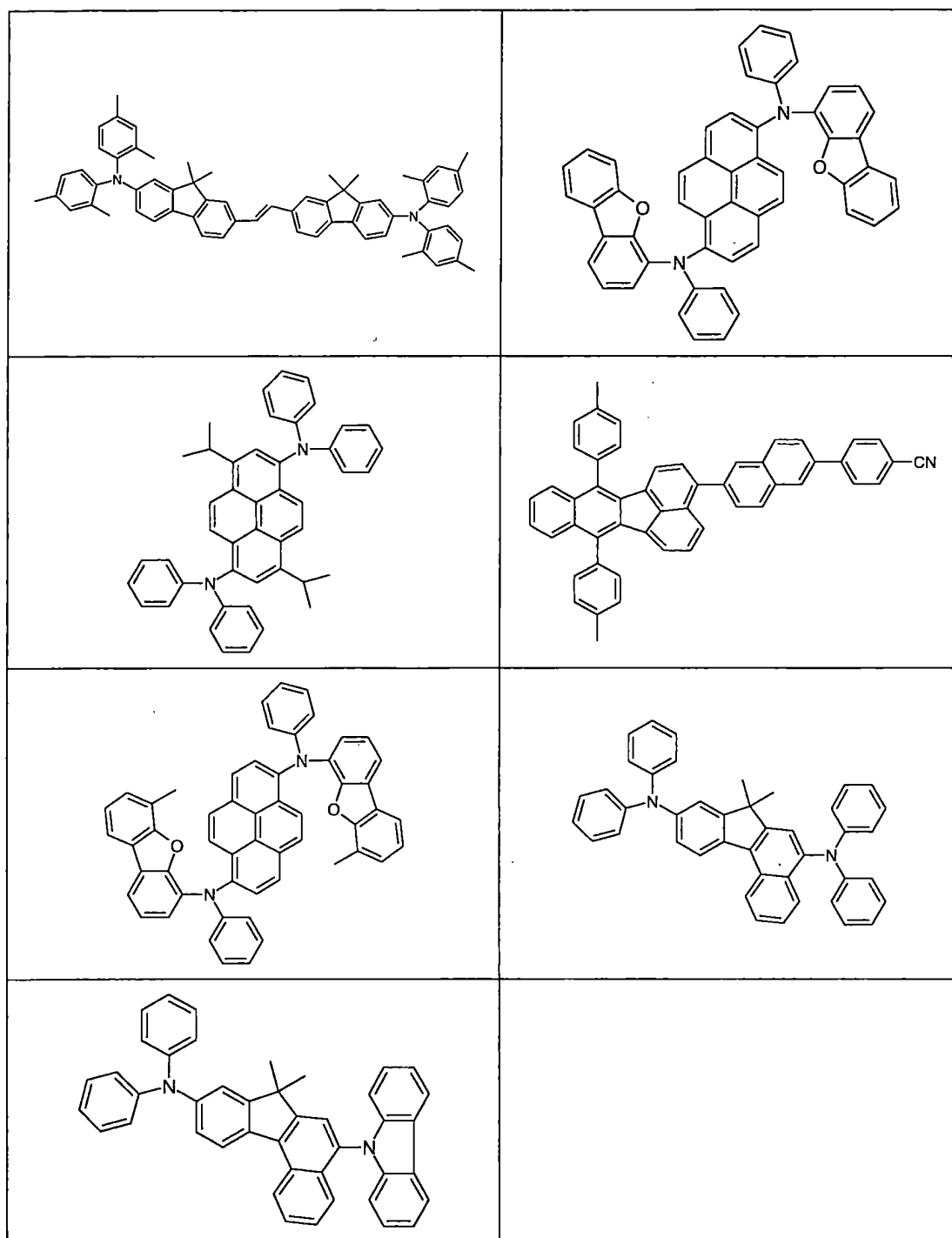




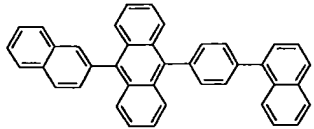
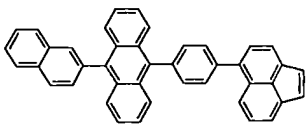
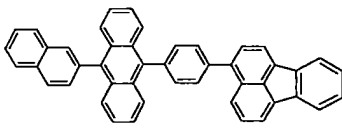
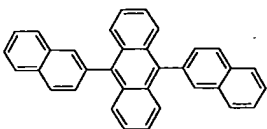
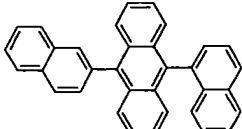
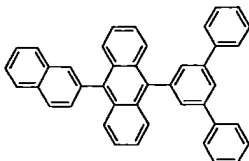
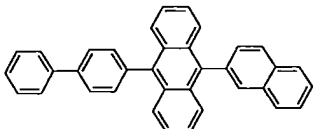
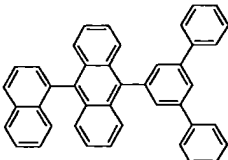
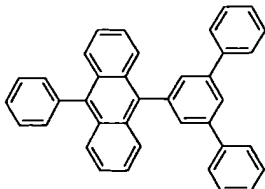


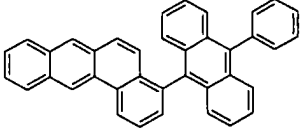
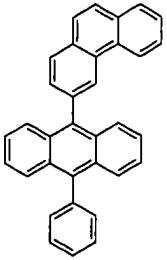
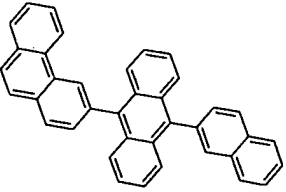
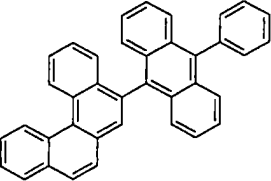
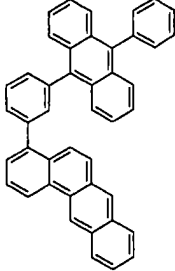
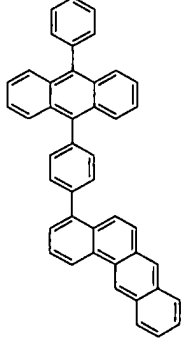
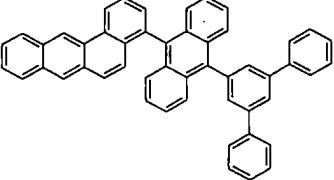
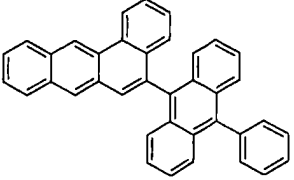
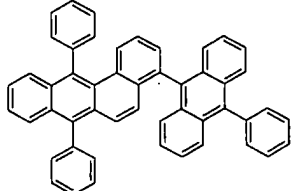
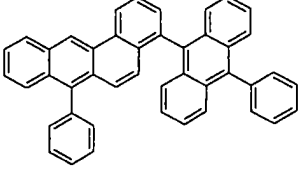
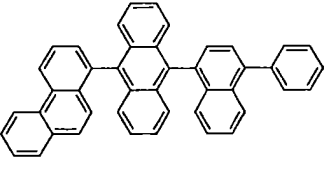
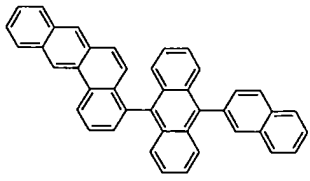
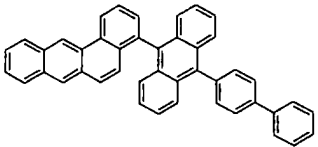
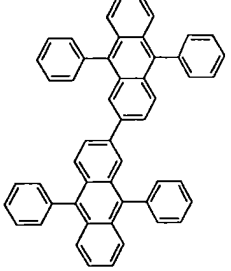
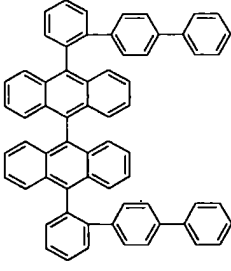
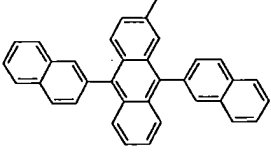
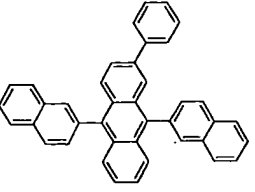
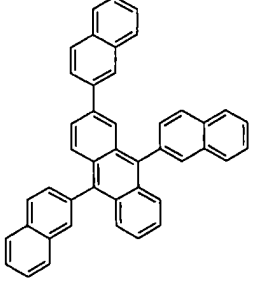


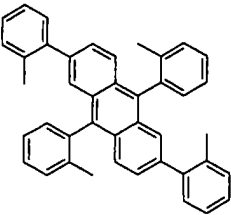
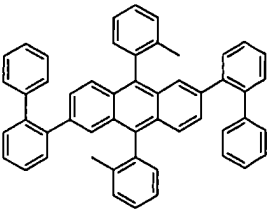
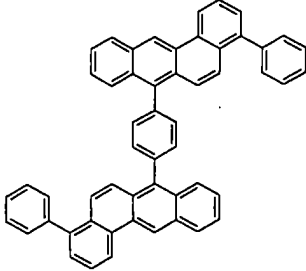
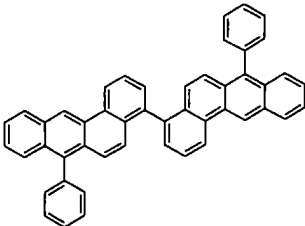
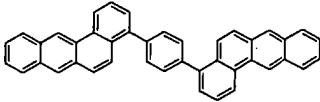
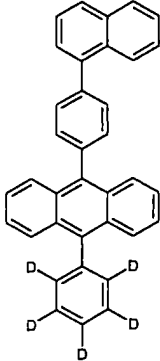
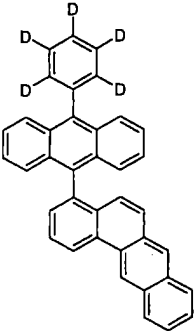
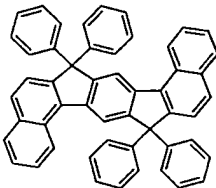
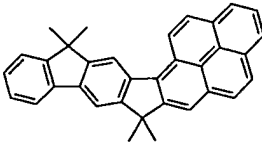
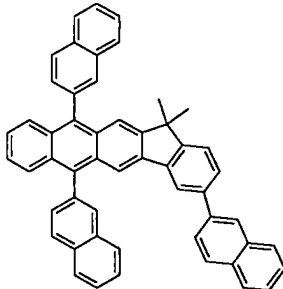
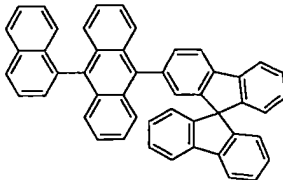
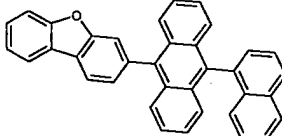
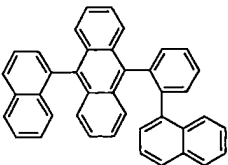
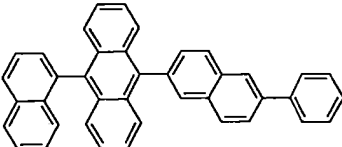
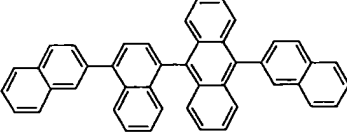
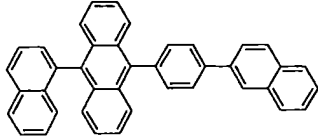
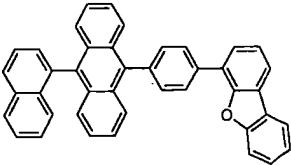
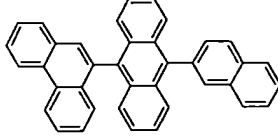
與螢光發光化合物組合使用之較佳基質材料係選自以下種類：寡聚伸芳基(oligoarylene)(例如根據 EP 676461 之 2,2',7,7'-肆苯基螺雙芴或二萘基蒽)，特別是含有縮合芳族基團之寡聚伸芳基、寡聚伸芳基伸乙烯基

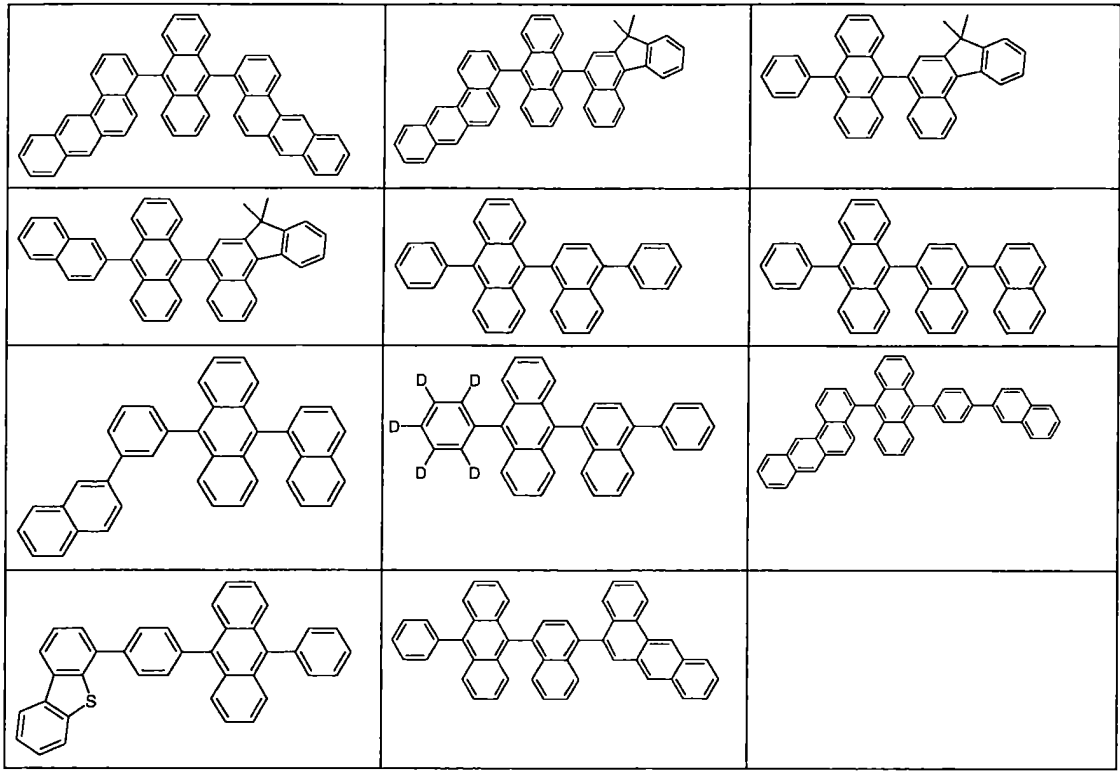
(oligoarylenevinylene)(例如根據 EP 676461 之 DPVBi 或螺-DPVBi)、多牙 (polypodal) 金屬錯合物 (例如根據 WO 2004/081017)、電洞傳導化合物 (例如根據 WO 2004/058911)、電子傳導化合物，特別是酮、膦氧化物、亞磺等等 (例如根據 WO 2005/084081 和 WO 2005/084082)、構型異構物(例如根據 WO 2006/048268)、硼酸衍生物(例如根據 WO 2006/117052)或苯并蒽(例如根據 WO 2008/145239)。特佳基質材料係選自以下種類：包含萘、蒽、苯并蒽及/或芘之寡聚伸芳基或這些化合物的構型異構物、寡聚伸芳基伸乙烯基、酮、膦氧化物和亞磺。非常特佳基質材料係選自以下種類：包含蒽、苯并蒽、苯并菲及/或芘之寡聚伸芳基或這些化合物的構型異構物。就本發明的意義而言，寡聚伸芳基意欲意指其中至少三個芳基或伸芳基彼此鍵結之化合物。

與式(I)之化合物組合使用於發光層之特佳基質材料係描述於下表中：



適當電荷傳輸材料，如可使用於根據本發明之有機電致發光裝置的電洞注入層或電洞傳輸層或電子阻擋層或於電子傳輸層中者為例如在 Y. Shirota 等人之 Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010 中所揭示之化合物或根據先前技術使用於該等層中之其他材料。

除式(I)之化合物之外，可用於本發明之電致發光裝置中之電洞傳輸、電洞注入或電子阻擋層中之較佳電洞傳輸材料的實例為茚并芴胺衍生物(例如根據 WO 06/122630 或 WO 06/100896)、EP 1661888 中揭示之胺衍生物、六氮雜聯伸三苯衍生物(例如根據 WO 01/049806)、含有縮合芳族環之胺衍生物(例如根據 US 5,061,569)、WO 95/09147 中揭示之胺衍生物、單苯并茚并芴胺(例如根據 WO 08/006449)、二苯并茚并芴胺(例如根據 WO 07/140847)、

螺雙萘胺(例如根據 WO 2012/034627 或 WO 2013/120577)、萘胺(例如根據尚未公開之申請案 EP 12005369.9、EP 12005370.7 及 EP 12005371.5)、螺二苯并哌喃胺(例如根據 WO 2013/083216)及二氫吡啶衍生物(例如根據 WO 2012/150001)。

有機電致發光裝置之陰極較佳地包含具有低功函數之金屬、金屬合金或包含各種金屬(諸如, 例如鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑄系元素(例如, Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm 等等))的多層化結構。亦適當者為包含鹼金屬或鹼土金屬和銀之合金, 例如包含鎂和銀之合金。在多層化結構的情況下, 除了該等金屬以外, 亦可使用其他具有較高功函數的金屬(諸如, 例如 Ag 或 Al), 在該情況下通常使用金屬的組合(諸如, 例如 Ca/Ag、Mg/Ag 或 Ag/Ag)。較佳者亦可為在金屬陰極與有機半導體之間引入具有高介電常數之材料的薄間層。適合於此目的者為例如鹼金屬氟化物或鹼土金屬氟化物, 而亦為對應之氧化物或碳酸鹽(例如 LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃ 等等)。此外, 喹啉酸鋰(LiQ)亦可使用於此目的。此層的層厚度較佳為介於 0.5 與 5 nm 之間。

陽極較佳包含具有高功函數之材料。陽極較佳具有相對於真空為大於 4.5 eV 之功函數。適合於此目的者一方面為具有高還原氧化電位之金屬, 諸如, 例如 Ag、Pt 或 Au。另一方面, 金屬/金屬氧化物電極(例如, Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x)亦可為較佳者。就一些應用而言,

電極中之至少一者必須為透明或部分透明，以便促進有機材料的照射(有機太陽能電池)或光線的耦合輸出(OLED、O-雷射)。較佳陽極材料在此為導電性混合型金屬氧化物。特佳者為氧化銦錫(ITO)或氧化銦鋅(IZO)。此外較佳者為導電性摻雜型有機材料，特別為導電性摻雜型聚合物。

將該裝置適當地(視應用而定)結構化，配備有接點且最終密封，因為在水及/或空氣的存在下使根據本發明之裝置的壽命縮短。

在一較佳具體實例中，根據本發明之有機電致發光裝置其特徵在於利用昇華方法塗布一或多層，其中該等材料係於真空昇華單元中在低於 10^{-5} 毫巴(較佳低於 10^{-6} 毫巴)之起始壓力下藉由氣相沈積施用。然而，起始壓力在此也可能甚至更低，例如低於 10^{-7} 毫巴。

同樣較佳者為一種有機電致發光裝置，其特徵在於利用 OVPD(有機蒸氣相沈積)法或輔以載體-氣體昇華法塗覆一或多層，其中該等材料係在介於 10^{-5} 毫巴與 1 巴之間的壓力下施用。此方法的一特殊實例為 OVJP(有機蒸氣噴射印刷)法，其中該等材料係經由噴嘴直接施用且因此結構化(例如，M. S. Arnold 等人之 Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301)。

此外較佳者為一種有機電致發光裝置，其特徵在於從溶液製造一或多層，諸如藉由旋塗或利用任何所要印刷法，諸如，例如網版印刷、快乾印刷、噴嘴印刷或平版印

刷，但是特佳為 LITI(光誘導熱成像、熱轉移印刷)或噴墨印刷。為此目的，可溶性之式(I)之化合物是必要的。高溶解度可經由化合物的適當取代來達成。

為了製造根據本發明之有機電致發光裝置，亦較佳者為從溶液施用一或多層或利用昇華法施用一或多層。

根據本發明，包含一或多種根據本發明之化合物的電子裝置可用於顯示器中、作為照明應用中之光源及作為醫學及/或美容應用(例如，光療法)中之光源。

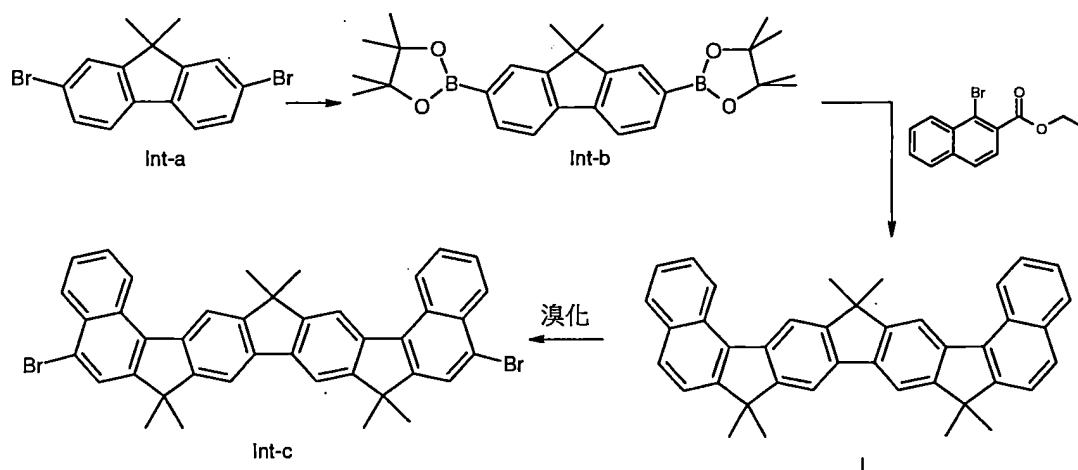
【實施方式】

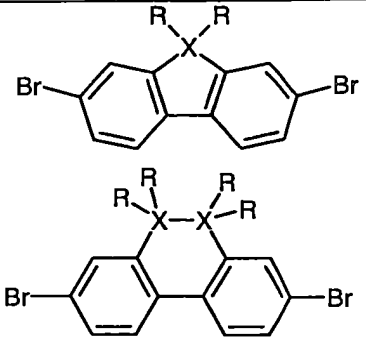
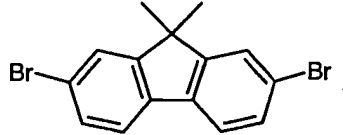
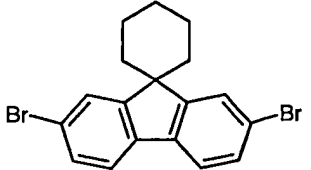
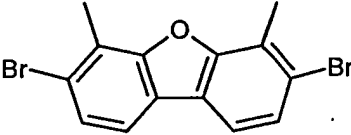
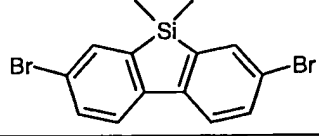
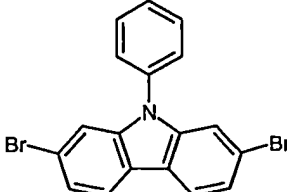
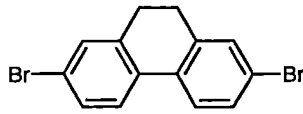
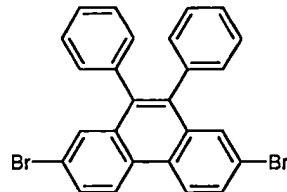
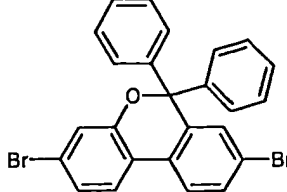
實施例

A) 合成例

A-1) 變型 I

步驟係根據下列一般流程：

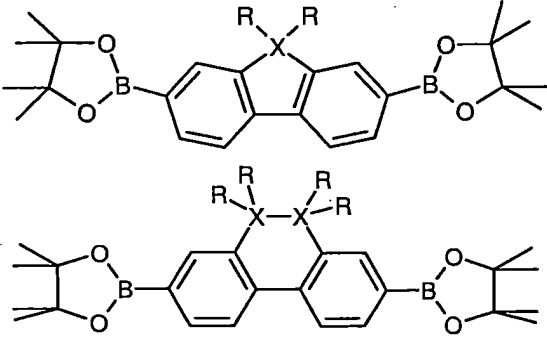
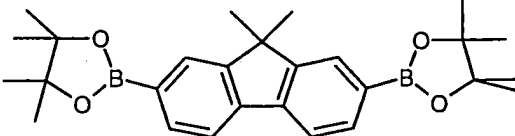
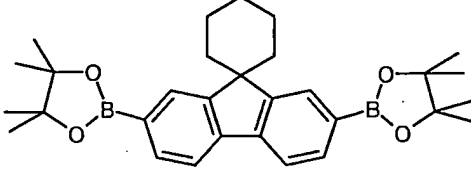
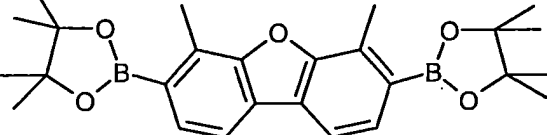


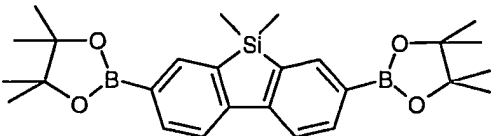
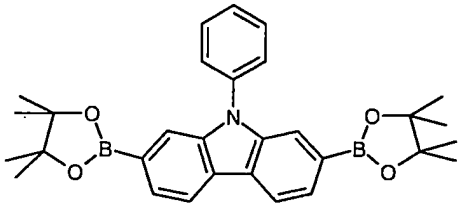
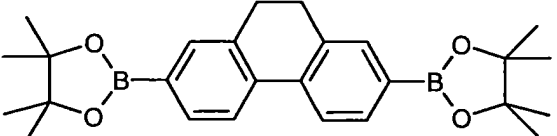
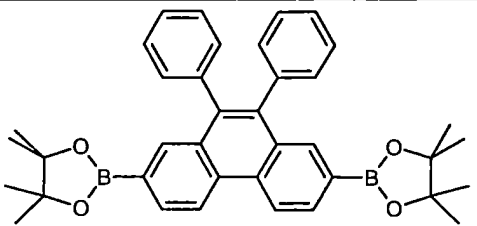
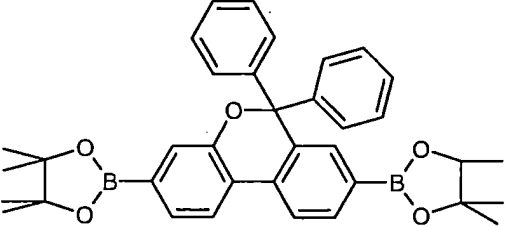
化合物		合成/産率
Int-a1		市售
Int-a2		市售
Int-a3		Bioorg. & Med. Chem. Lett., 2012, 22, 5108-5113
Int-a4		Tetrahedron 2001, 57, 10047-10053
Int-a5		Synthesis 2003, 16, 2470-2472
Int-a6		J. Mat. Chem. 2009, 19, 4148-4156
Int-a7		Org. Lett. 2008, 10, 773-776
Int-a8		WO 2012/60283 A1

化合物 Int-b

將 2,7-二溴-9,9-二甲基-9H-芴(130 g, 369 mmol)、雙(頻哪醇根基)二硼烷(bis(pinacolato)-diborane)(225 g, 886 mmol)和乙酸鉀(217 g, 2.22 mol)懸浮在 1.4 l 的二噁烷中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加 PdCl₂(dppf)-CH₂Cl₂(15 g, 18 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱 4h。將混合物過濾並用二噁烷洗滌。粗製產物過濾之後，將殘留之殘餘物在 Soxhlet 萃取器中用 THF 萃取，然後過濾。產率為 137 g (理論的 83%)，呈灰色固體。純度 > 95% (在 CDCl₃ 中之 NMR)。

類似地製備下列化合物：

化合物		產率
Int-b1		83%
Int-b2		80%
Int-b3		50%

Int-b4		75%
Int-b5		85%
Int-b6		90%
Int-b7		80%
Int-b8		70%

化合物 I

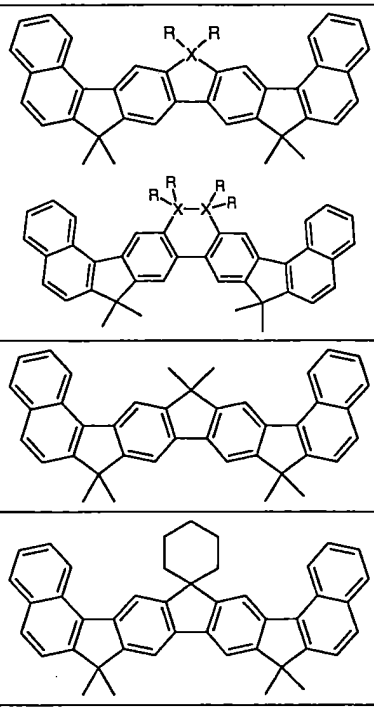
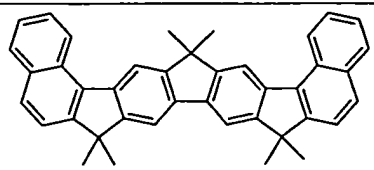
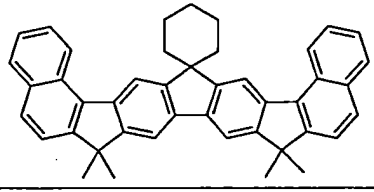
將 2,7-雙頻哪醇根基-9,9-二甲基-9H-芴(137 g, 307 mmol)、1-溴-萘-2-甲酸(173 g, 620 mmol)和磷酸三鉀一水合物(283 g, 1.23 mol)懸浮在水/甲苯/二噁烷混合物(1 : 1 : 1, 1.5 l)中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加三(鄰-甲苯基)膦(22.4 g, 73 mmol)和乙酸鈮(II)(2.76 g, 12.3 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱 5.5 h。將各相分離，並用甲苯洗滌水相。將有機相經過 Na₂SO₄ 乾燥並在旋轉蒸發器中蒸發。將混合物通過矽膠和 AlO_x 用甲苯過濾並在旋轉蒸發器中蒸發。將黃色油在真空乾燥

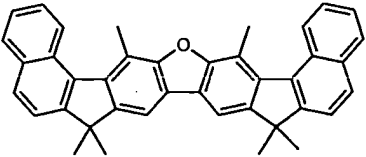
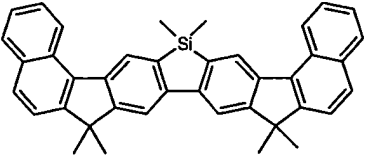
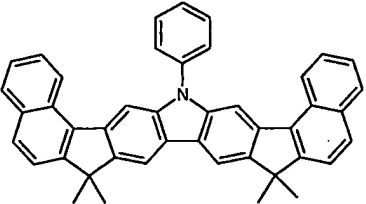
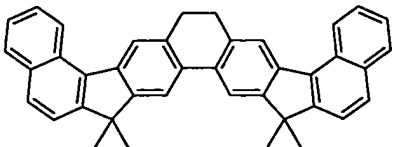
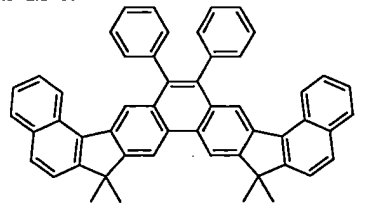
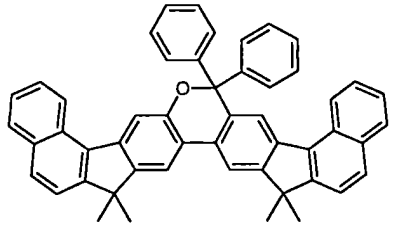
櫥中乾燥且不純化。

將在 500 ml 的 THF 中之黃色油滴加至三氯化銻 (III)(166 g, 670 mmol)和 500 ml 的 THF 之混合物。將反應混合物在室溫下攪拌 1 h, 然後冷卻至 0°C。在此溫度下滴加氯化甲鎂(813 ml, 在 THF 中之 3M)。將反應混合物攪拌過夜。將 500 ml 的水加至該批料, 然後將其用 THF 過濾。將母液的相分離。將有機相經過 Na₂SO₄ 乾燥並在旋轉蒸發器中蒸發。將黃色油在真空乾燥櫥中乾燥且不進一步純化。

將黃色油和多磷酸(446 g, 4.56 mol)懸浮在 1 l 的二氯甲烷中。慢慢地滴加甲磺酸(296 ml, 4.56 mol)。將反應混合物攪拌 1 h。添加 700 ml 的乙醇。過濾批料, 且將殘留之殘餘物從甲苯再結晶。產率為 109 g (理論的 68%), 呈黃色固體。純度 99.7% (HPLC)。

類似地製備下列化合物：

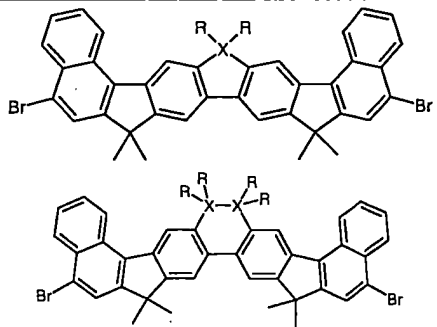
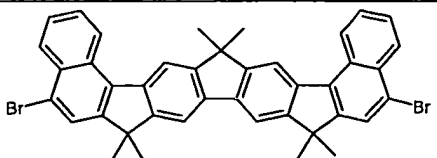
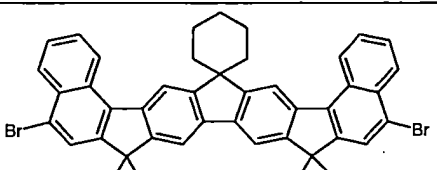
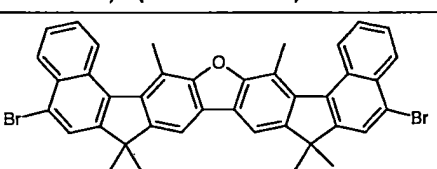
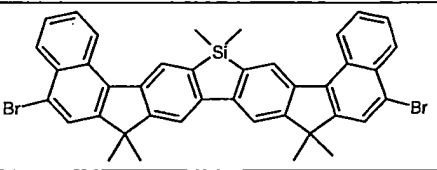
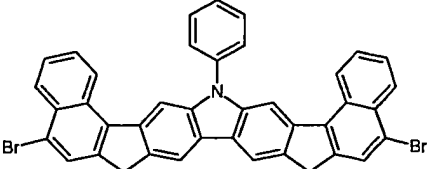
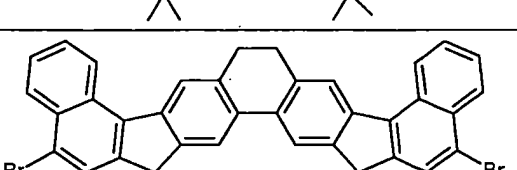
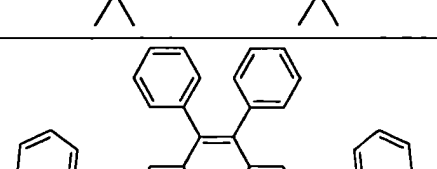
化合物		產率
1a		68%
1b		70%

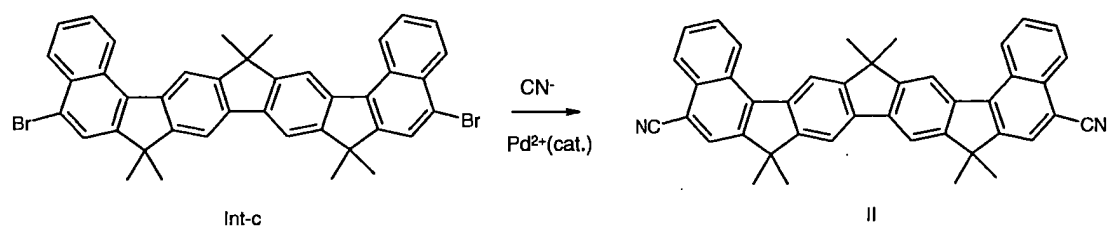
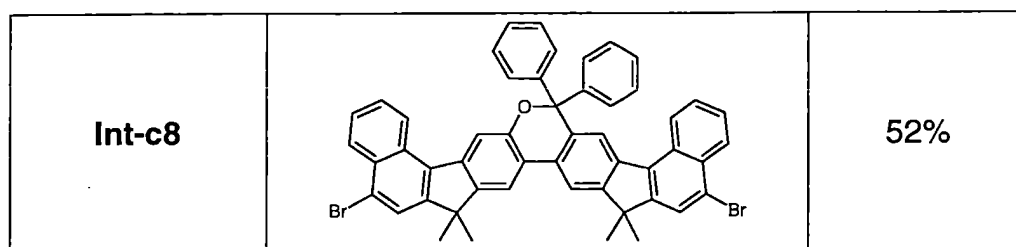
lc		80%
ld		59%
le		52%
lf		64%
lg		45%
lh		48%

化合物 Int-c

將 Ia (80 g，152 mmol)溶解在 500 ml 的 DCM 中。在 0°C 下滴加在 300 ml DCM 中的 Br₂ (16 ml，311 mmol)。將反應混合物在室溫下攪拌過夜。添加 20 ml 的硫代硫酸鈉溶液，並將混合物攪拌 15 min。用乙醇過濾批料。將殘留之殘餘物從甲苯再結晶三次。產率為 60 g(理論的 57%)，呈灰色固體。純度 96.3% (HPLC)。

類似地製備下列化合物：

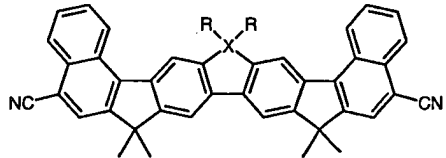
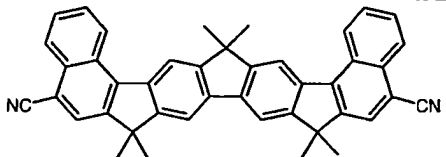
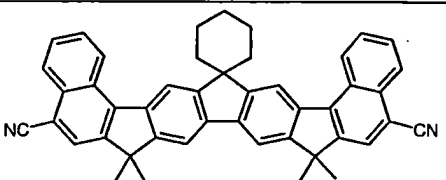
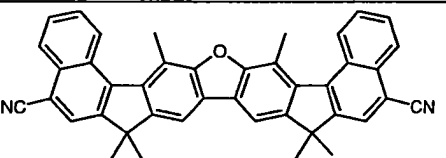
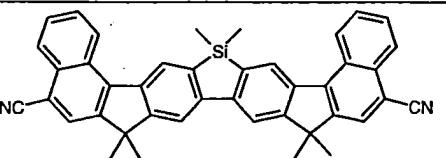
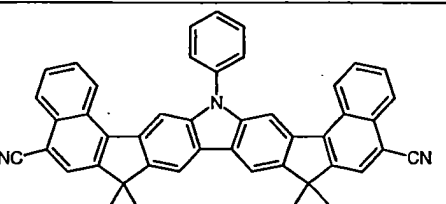
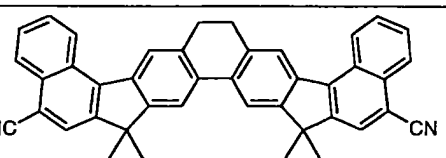
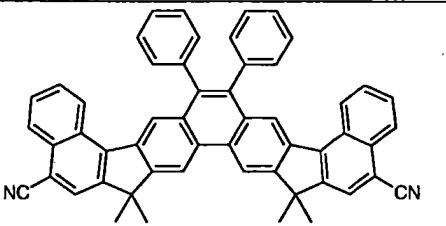
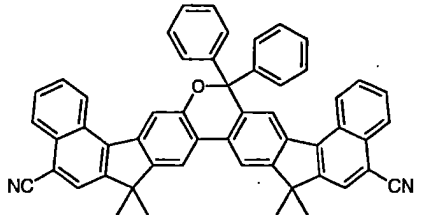
化合物		産率
Int-c1		57%
Int-c2		65%
Int-c3		58%
Int-c4		50%
Int-c5		65%
Int-c6		69%
Int-c7		48%

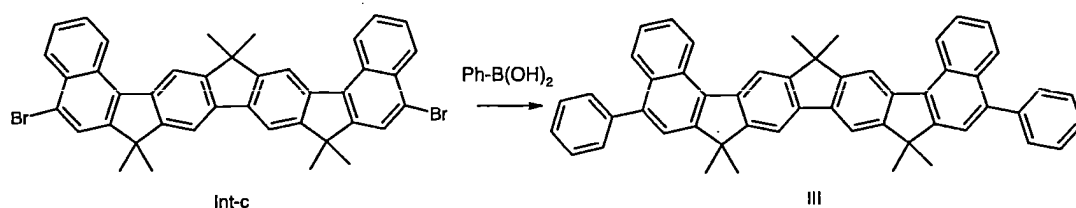


化合物 II

將 Int-c (17 g, 24 mmol)、K₄[Fe(CN)₆]*3H₂O(10.5 g, 24 mmol)和碳酸鈉(7.9 g, 75 mmol)懸浮在 400 ml 的 DMF 中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加 S-Phos (816 mg, 2 mmol)和乙酸鈹(II)(223 mg, 1 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱過夜。將反應混合物冷卻，然後在旋轉蒸發器中蒸發。將所得固體在 Soxhlet 萃取器中在氧化鋁上用甲苯萃取，然後從氯仿再結晶 7x。產率為 2.5 g(理論的 17.5%)，呈灰色固體。純度 99.9% (HPLC)。

類似地製備下列化合物：

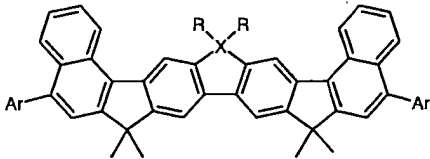
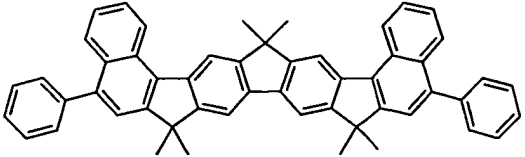
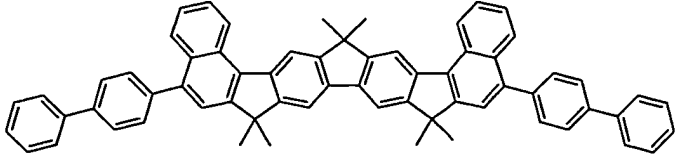
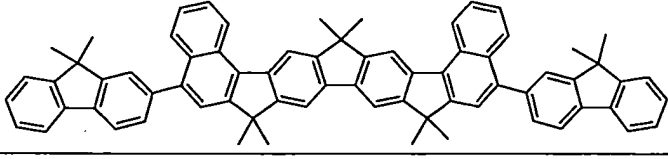
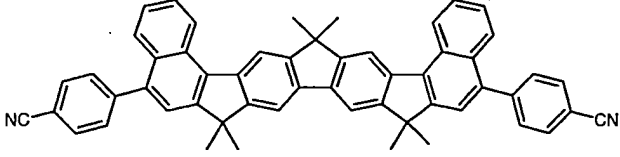
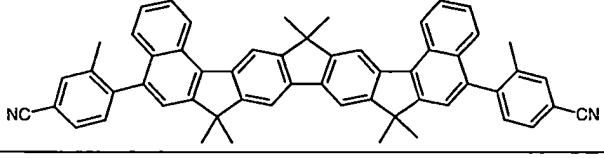
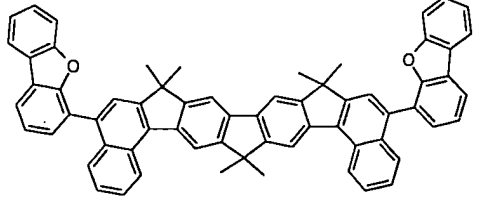
化合物		産率
IIa		17.5%
IIb		26%
IIc		10%
IId		11%
IIe		8%
IIf		21%
IIg		8%
IIh		10%

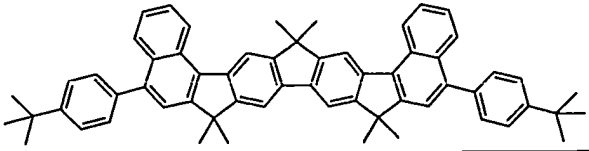
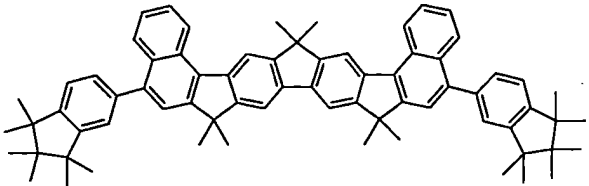
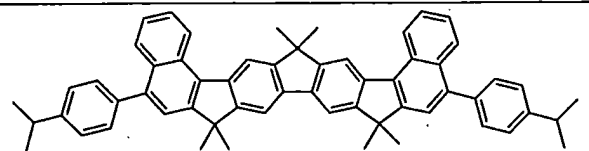
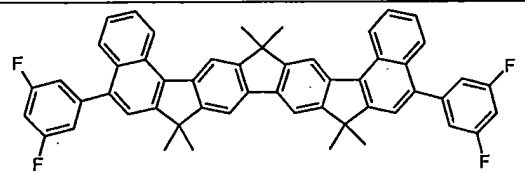
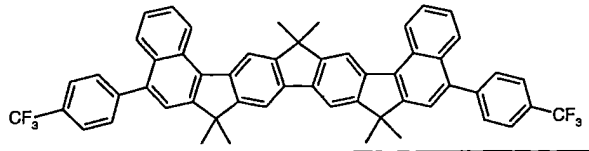
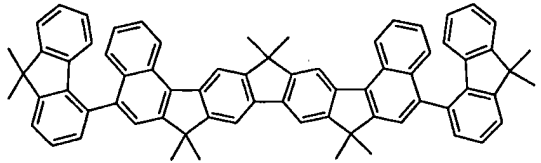
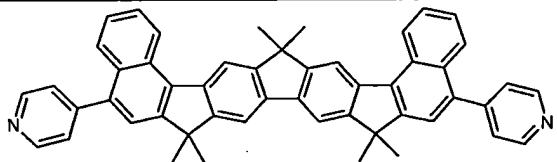
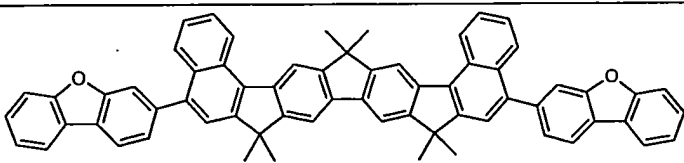
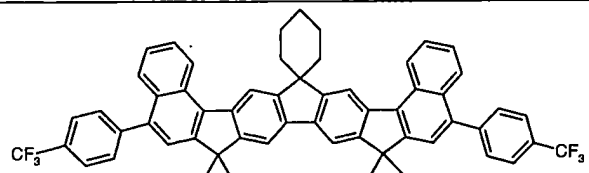
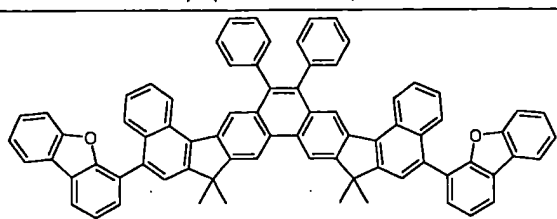


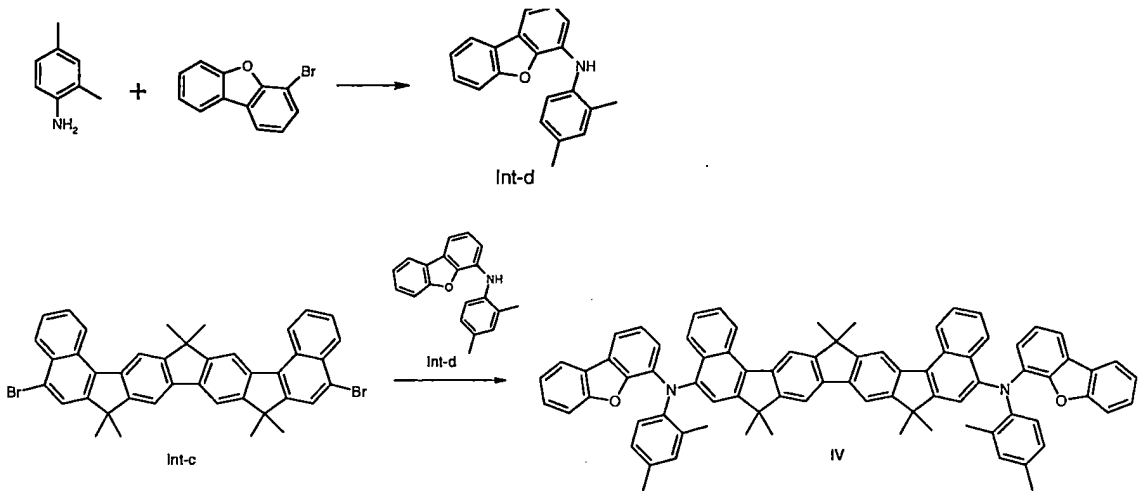
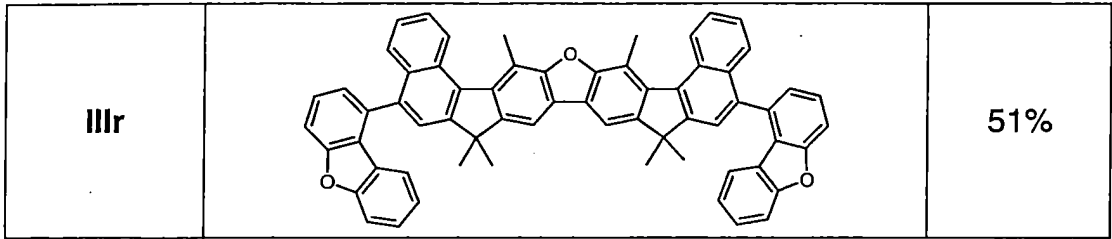
化合物 III

將 Int-c (800 mg, 1.5 mmol)、苯硼酸 (342 mg, 3 mmol) 和磷酸三鉀一水合物 (1.08 g, 4.7 mmol) 懸浮在水/甲苯/二噁烷混合物 (1 : 1 : 1, 6 ml) 中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加三(鄰-甲苯基)膦 (43 mg, 0.14 mmol) 和乙酸鈹(II) (10 mg, 0.05 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱過夜。將各相分離，並將水相用甲苯洗滌。將有機相經過 Na_2SO_4 乾燥並在旋轉蒸發器中蒸發。將混合物通過矽膠和 AlOx 用甲苯過濾並在旋轉蒸發器中蒸發。將固體從甲苯再結晶。產率為 505 mg (理論的 64%)，呈黃色固體。純度 99% (HPLC)。

類似地製備下列化合物：

化合物		産率
IIIa		64%
IIIb		42%
IIIc		59%
IIId		5%
IIIe		12%
IIIf		26%

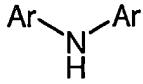
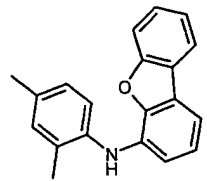
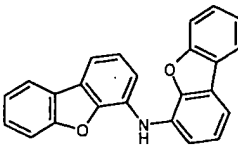
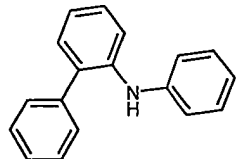
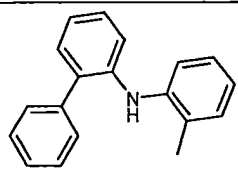
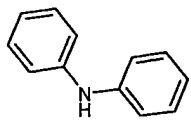
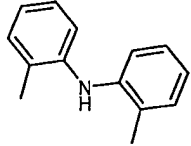
IIIg		46%
IIIh		8%
IIIi		12%
IIIj		83%
IIIk		21%
IIIl		28%
IIIm		25%
III n		15%
IIIo		78%
IIIq		18%



化合物 Int-d

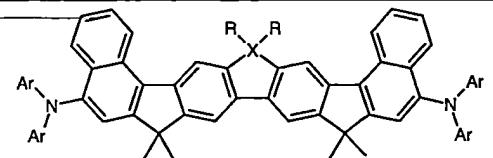
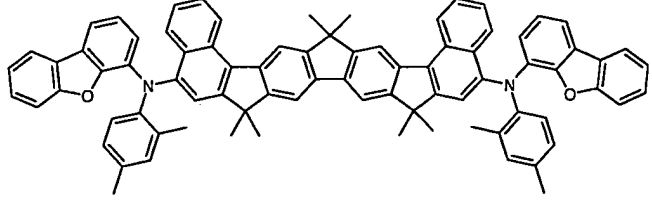
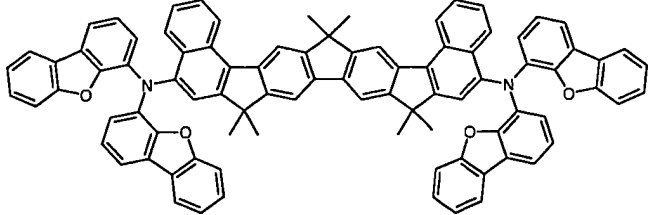
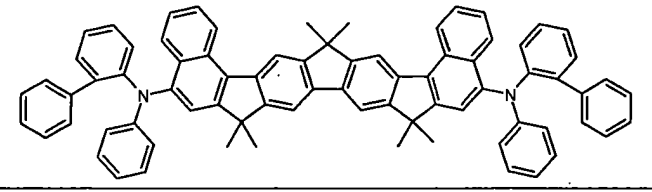
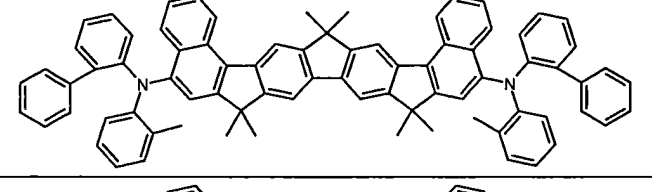
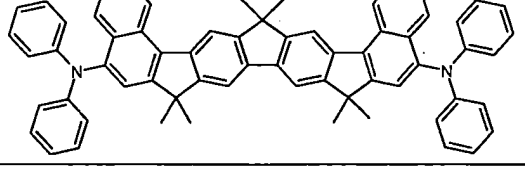
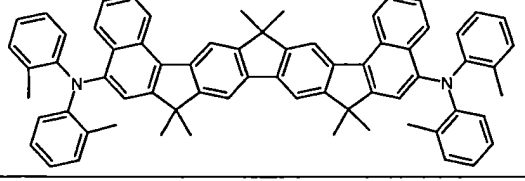
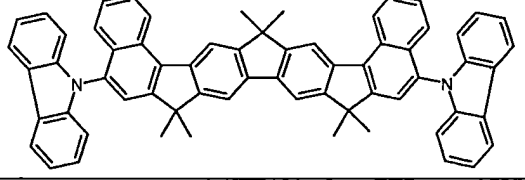
將 2,4-二甲基苯胺(1.12 ml, 8.9 mmol)、4-溴二苯并呋喃(2 g, 8.1 mmol)和第三-丁醇鈉(1.9 g, 20 mmol)懸浮在 150 ml 的甲苯中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加 PdCl₂(dppf)-CH₂Cl₂(132 mg, 162 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱過夜。將混合物通過矽膠和 AlO_x 用甲苯過濾並在旋轉蒸發器中蒸發。將油經過矽膠管柱用庚烷純化。產率為 1.9 g (理論的 82%)，淡棕色油狀物。純度 94% (HPLC)。

類似地製備下列化合物：

化合物		產率
Int-d1		82%
Int-d2		30%
Int-d3		80%
Int-d4		85%
Int-d5		90%
Int-d6		88%

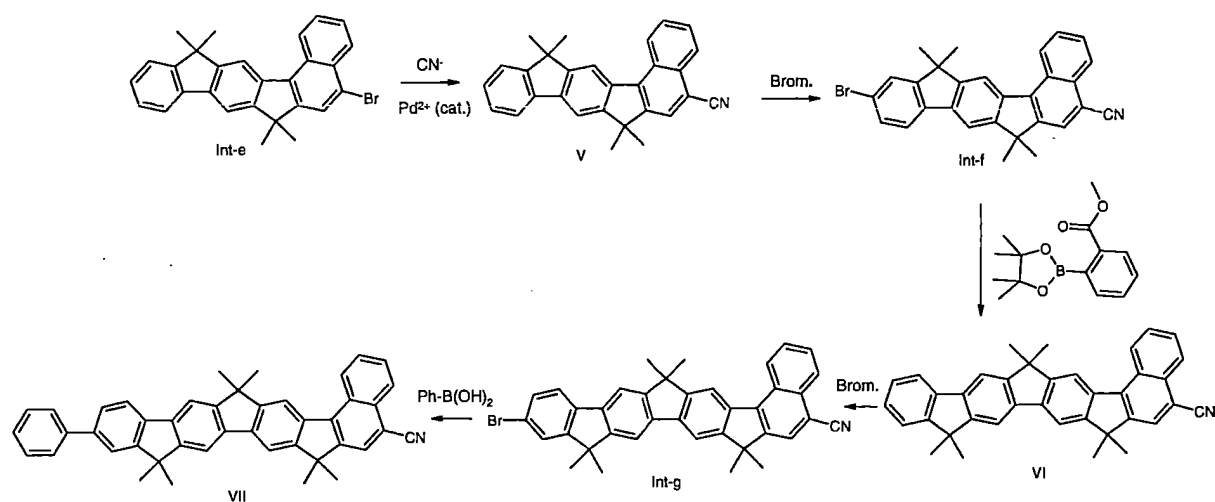
化合物 IVa 和 IVb

將 Int-c(1 g , 1.46 mmol)、二苯并呋喃化合物(903 mg , 3.14 mmol)和第三-丁醇鈉(421 mg , 4.38 mmol)懸浮在 40 ml 的甲苯中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加三-第三-丁基磷(117 μl , 在甲苯中之 1M)和乙酸鈹(II)(48 mg , 0.06 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱 4h。將混合物通過矽膠和 AlOx 用甲苯過濾並在旋轉蒸發器中蒸發。將產物從甲苯再結晶三次。產率為 200 mg (理論的 13%)，呈淡棕色油狀物。純度 96.7% (HPLC)。

化合物		產率
IVa		13%
IVb		16%
IVc		8%
IVd		12%
IVe		80%
IVf		8%
IVg		10%

A-2) 變型 II

步驟係根據下列一般流程：



化合物 V

將 Int-e (10 g, 20 mmol)、 $K_4[Fe(CN)_6] \cdot 3H_2O$ (4.3 g, 10 mmol) 和碳酸鈉 (3.3 g, 31 mmol) 懸浮在 150 ml 的 DMF 中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加 S-Phos (336 mg, 0.82 mmol) 和乙酸鈮 (II) (92 mg, 0.41 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱過夜。將反應混合物冷卻，然後在旋轉蒸發器中蒸發。所得固體在 Soxhlet 萃取器中在氧化鋁上用甲苯萃取，然後從氯仿再結晶 7x。產率為 5.3 g (理論的 67%，呈黃色固體。純度 99.6% (HPLC))。

化合物 Int-f

將化合物 V (3 g, 7.7 mmol) 溶解在 25 ml 的 DCM 中。在 0°C 下滴加在 25 ml DCM 中的 Br_2 (394 μ l, 7.7 mmol)。將反應混合物在室溫下攪拌過夜。添加 10 ml 的硫代硫酸鈉溶液，並將混合物攪拌 15 min。用乙醇過濾批料。將殘留之殘餘物從庚烷/甲苯 1:1 再結晶三次。產率為 1.7 g (理論的 44%)，呈黃色固體。純度 94%

(HPLC)。

化合物 VI

將化合物 Int-f (1 g, 2.2 mmol)、1-溴萘-2-甲酸(649 mg, 2.5 mmol)和磷酸三鉀一水合物(1.5 g, 6.5 mmol)懸浮在水/甲苯/二噁烷混合物(1:1:1, 30 ml)中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加三(鄰-甲苯基)膦(79 mg, 0.3 mmol)和乙酸鈣(II)(9.7 mg, 0.04 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱 7 h。將各相分離，並將水相用甲苯洗滌。將有機相經過 Na_2SO_4 乾燥並在旋轉蒸發器中蒸發。將混合物通過矽膠和 AlOx 用甲苯過濾並在旋轉蒸發器中蒸發。將黃色固體在真空乾燥櫥中乾燥並且不進一步純化。

將在 20 ml 的 THF 中之黃色固體滴加至三氯化銻(III)(600 mg, 2.37 mmol)和 20 ml 的 THF 的混合物。將反應混合物在室溫下攪拌 1 h，然後冷卻至 0°C 。在此溫度下滴加氯化甲鎂(1.25 ml, 在 THF 中之 3M)。將反應混合物攪拌過夜。將 20 ml 的水加至該批料，然後將其用 THF 過濾。將母液的相分離。將有機相經過 Na_2SO_4 乾燥並在旋轉蒸發器中蒸發。將黃色固體在真空乾燥櫥中乾燥且不純化。

將黃色固體和多磷酸(2.1 g, 21.5 mol)懸浮在 30 ml 的二氯甲烷中。慢慢地滴加甲磺酸(1.4 ml, 21.5 mol)。將反應混合物攪拌 1 h。添加 30 ml 的乙醇。過濾該批料，

並將殘留之殘餘物從甲苯再結晶。產率為 809 mg (理論的 75%)，呈黃色固體。純度 97% (HPLC)。

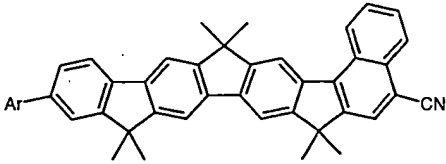
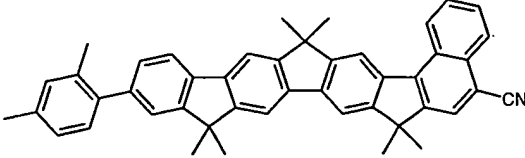
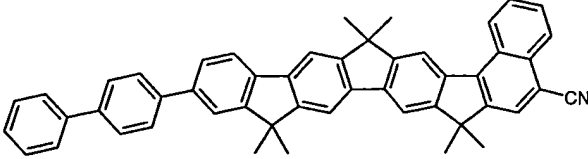
化合物 Int-g

將化合物 VI(809 mg, 1.6 mmol)溶解在 25 ml 的 DCM 中。在 0°C 下滴加在 25 ml 的 DCM 中之 Br₂ (83 µl, 1.6 mmol)。將反應混合物在室溫下攪拌過夜。添加 10 ml 的硫代硫酸鈉溶液，並將混合物攪拌 15 min。用乙醇過濾該批料。將殘留之殘餘物從庚烷/甲苯 1:1 再結晶三次。產率為 790 mg (理論的 85%)，呈黃色固體。純度 96% (HPLC)。

化合物 VII

將 Int-g (790 mg, 1.3 mmol)、苯硼酸(342 mg, 3 mmol)和磷酸三鉀一水合物(1.08 g, 4.7 mmol)懸浮在水/甲苯/二噁烷混合物(1:1:1, 6 ml)中。將溶液脫氣並用氫飽和。然後添加三(鄰-甲苯基)膦(43 mg, 0.14 mmol)和乙酸鈣(II) (10 mg, 0.05 mmol)。將反應混合物在保護性氛圍下於沸騰加熱過夜。將各相分離，並將水相用甲苯洗滌。將有機相經過 Na₂SO₄ 乾燥並在旋轉蒸發器中蒸發。將混合物通過矽膠和 AlO_x 用甲苯過濾並在旋轉蒸發器中蒸發。將固體從甲苯再結晶。產率為 675 mg (理論的 73%)，呈黃色固體。純度 97% (HPLC)。

類似地製備下列化合物：

化合物		產率
VIIa		55%
VIIb		69%

B) 裝置實例：OLED 之製造

藉由根據 WO 04/058911 的一般方法製造本發明之 OLED 及根據先前技術之 OLED，該方法適合於本文中描述的情況(層-厚度變化、材料)。

在以下實例中提出各種 OLED 之數據(參見表 1 至 3)。所使用之基板為已用 50 nm 厚度的結構化 ITO(氧化銦錫)塗佈之玻璃基板。OLED 原則上具有下列的層結構：基板/電洞注入層 1(95% 的 HTL1 + 5%的 HIL，20 nm)/電洞傳輸層(HTL，厚度示於表 1 中)/發光層(EML，20 nm)/電子傳輸層(ETL，20 nm)/電子注入層(EIL，3 nm)和最後為陰極。陰極係由具有 100 nm 厚度的鋁層所形成。厚度 20 奈米之 Clevios P VP A1 4083(購自 Heraeus Clevios GmbH，Leverkusen)層係藉由旋塗施加以作為緩衝層。所有其餘的材料係在真空室中藉由熱蒸氣沈積施加。OLED 的結構顯示於表 1 中。所使用之材料係顯示於表 3 中。

該發光層(EML)總是由至少一種基質材料(主體材料(host)=H)及發光化合物(摻雜劑=D)構成，該摻雜劑藉由共蒸發以某一體積比例與該基質材料摻混。詞句諸如 H1：D1(97%：3%)在此表示材料 H1 係以 97%之體積比例存在於層中，和 D1 係以 3%之比例存在於層中。

OLED 係以標準方法定性。為此目的，記錄電致發光光譜、電流效率(以 cd/A 測量)、及假定為 Lambert 發光特性之為發光密度之函數之外部量子效率(EQE，以百分比測量)係從電流/電壓/發光密度特徵線(IUL 特徵線)計算，及最後測定組件之壽命。電致發光光譜係在 1000 cd/m^2 之發光密度下記錄，且從此計算 CIE 1931 x 與 y 色坐標。詞句 EQE @ 1000 cd/m^2 表示在 1000 cd/m^2 之操作發光密度下的外部量子效率。壽命 LT95 @ 1000 cd/m^2 為初始發光密度已從 1000 cd/m^2 下降 5%所經歷之時間。將各種 OLED 的所得數據總結於表 2 中。

根據本發明之化合物作為螢光 OLED 中的發光體之用途

根據本發明之化合物 D3、D4、D5、D6、D7、D8、D9、D10、D11 和 D12 可個別用作 OLED 之發光層中的發光體(結構參見表 3)。發光層中所使用之基質材料在此為化合物 V-H2。所得 OLED 為 E4 至 E6 及 E9 至 E15。彼等在深藍色發光之情況下，呈現非常良好的壽命(表 2)。相較於從先前技術得知的發光體材料(V-D1 和 V-D2，參照 V1 至 V3)，壽命顯著改良，具恆定量子效率。

特別是與材料 V-D1 之比較顯示：與從先前技術得知的茛并萘基本結構比較，根據本發明之雙茛并萘基本結構達成改良。

根據本發明之化合物作為螢光 OLED 中的基質材料之用途

實例 E7，其中根據本發明之化合物 H3 係用作基質材料，在深藍色發光之情況下，同樣呈現良好壽命和量子效率(表 2)。這證實：根據本發明之化合物作為發光層中之基質材料的良好適合性。

根據本發明之化合物作為 OLED 中的電洞傳輸材料之用途

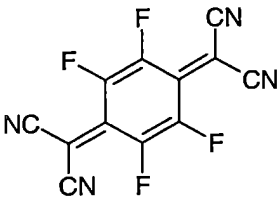
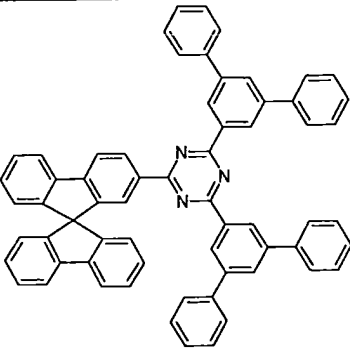
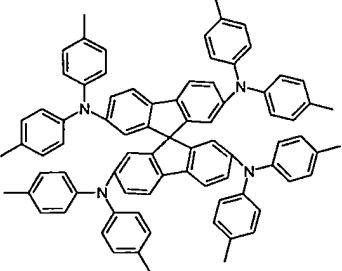
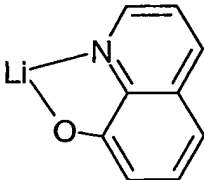
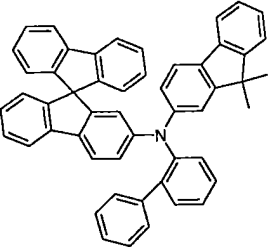
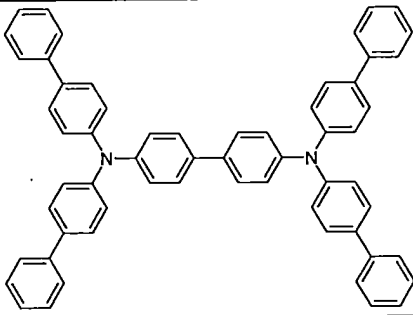
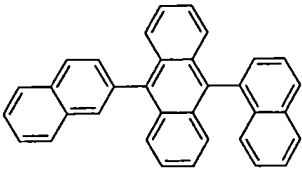
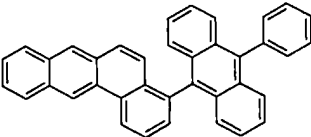
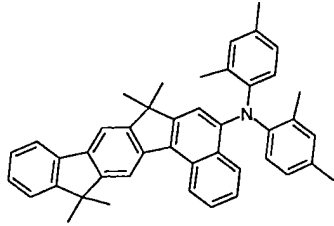
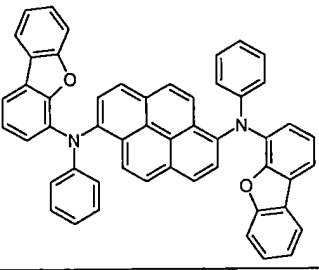
實例 E8，其中根據本發明之化合物 H3 係用作電洞傳輸層中之電洞傳輸材料，在深藍色發光之情況下，同樣呈現良好壽命和量子效率（表 2）。這證實：根據本發明之化合物作為電洞傳輸化合物的良好適合性。

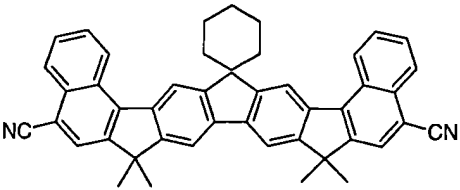
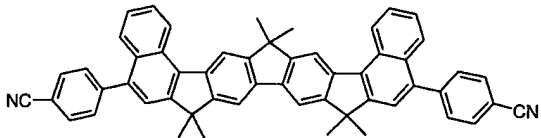
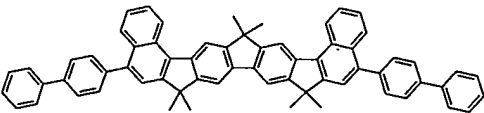
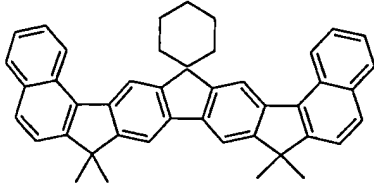
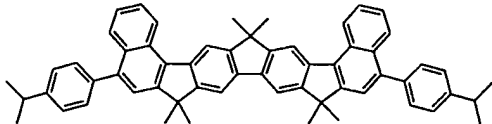
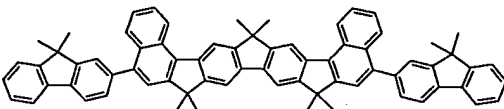
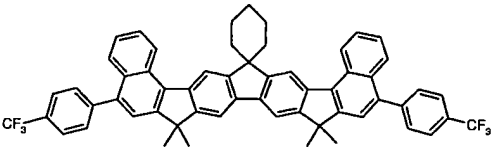
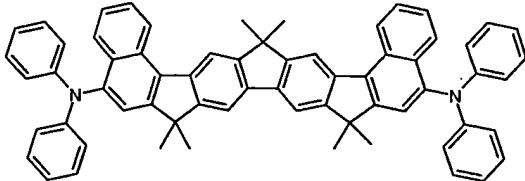
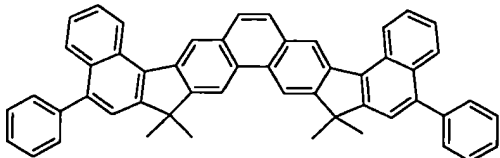
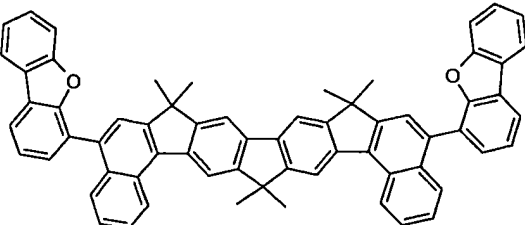
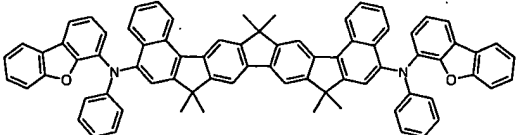
表1：OLED之結構

實例	HTL	EML
	材料厚度/nm	材料
V1	HTL3 195nm	V-H1(97%):V-D1(3%)
V2	HTL3 195nm	V-H2(97%):V-D1(3%)
V3	HTL3 195nm	V-H2(97%):V-D2(3%)
E4	HTL3 195nm	V-H2(97%):D3(3%)
E5	HTL3 195nm	V-H2(97%):D4(3%)
E6	HTL3 195nm	V-H2(97%):D5(3%)
E7	HTL2 20nm	H3(95%):D3(1%)
E8	D3 20nm	V-H2(95%)V-D2(5%)
E9	HTL3 195nm	V-H2(97%):D6(3%)
E10	HTL3 195nm	V-H2(97%):D7(3%)
E11	HTL3 195nm	V-H2(97%):D8(3%)
E12	HTL3 195nm	V-H2(97%):D9(3%)
E13	HTL3 195nm	V-H2(97%):D10(3%)
E14	HTL3 195nm	V-H2(97%):D11(3%)
E15	HTL3 195nm	V-H2(97%):D12(3%)

表2：OLED之數據

實例	<i>EQE</i> @ <i>1000 cd/m²</i>	<i>LT95</i> @ <i>1000 cd/m²</i>	<i>CIE</i>	
	%	[h]	x	y
V1	7.5	90	0.13	0.13
V2	7.8	110	0.13	0.14
V3	7.9	90	0.13	0.10
E4	7.4	350	0.14	0.11
E5	7.6	320	0.14	0.14
E6	6.9	150	0.14	0.13
E7	6.9	120	0.13	0.13
E8	7.3	140	0.13	0.14
E9	7.0	140	0.14	0.11
E10	7.2	370	0.14	0.14
E11	7.8	140	0.13	0.10
E12	7.6	280	0.14	0.25
E13	7.5	270	0.13	0.09
E14	7.3	280	0.14	0.11
E15	7.8	350	0.14	0.26

表3：所使用之材料的結構	
	
HIL	ETL
	
HTL1	EIL
	
HTL2	HTL3
	
V-H1	V-H2
	
V-D1	V-D2

	
D3	D4
	
D5	H3
	
D6	D7
	
D8	D9
	
D10	D11
	
D12	

發明摘要

※申請案號：103115810

※申請日：103 年 05 月 02 日

※IPC 分類：

【發明名稱】(中文/英文)

用於電子裝置之材料

Materials for electronic devices

C07C13/62(2006.01)
C07C13/72(2006.01)
C07C211/61(2006.01)
C07C22/08(2006.01)
C07C25/13(2006.01)
C07C25/22(2006.01)
C07C255/50(2006.01)
C07C255/52(2006.01)
C07D209/86(2006.01)
C07D307/91(2006.01)
C07D311/80(2006.01)
C07D401/10(2006.01)
C07D403/10(2006.01)
C07D407/10(2006.01)
C07D407/12(2006.01)
C07D407/14(2006.01)
C07F7/08(2006.01)
C09K11/06(2006.01)
H01L51/50(2006.01)
H01L51/00(2006.01)

【中文】

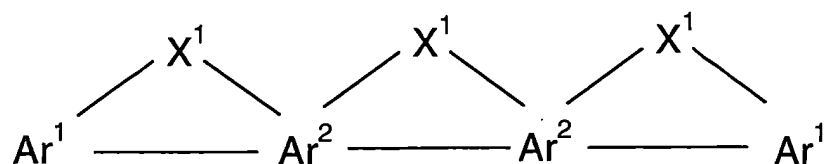
本案關於具有苯并茛并茛基本結構之化合物及其於電子裝置(特別是有機電致發光裝置)之用途。

【英文】

The present application relates to compounds having a benzindeno-fluorene basic structure and to the use thereof in electronic devices, in particular in organic electroluminescent devices.

申請專利範圍

1. 一種式(I)之化合物，



式(I)，

其中：

Ar^1 在每次出現時相同或不同地為具有 6 至 18 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代；

Ar^2 在每次出現時相同或不同地為具有 6 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代；

X^1 在每次出現時相同或不同地為 BR^3 、 $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{C}(\text{R}^3)_2-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{O}-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-\text{S}-$ 、 $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$ 、 $-\text{R}^3\text{C}=\text{N}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^3)_2-\text{Si}(\text{R}^3)_2-$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 O 、 S 、 $\text{S}=\text{O}$ 、 SO_2 、 NR^3 、 PR^3 或 $\text{P}(=\text{O})\text{R}^3$ ；

R^1 、 R^2 、 R^3 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^4$ 、 CN 、 $\text{Si}(\text{R}^4)_3$ 、 $\text{N}(\text{R}^4)_2$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^4)_2$ 、 OR^4 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^4$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^4$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基基團或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基基團或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基基團，其中上述基團各自可經一或多個基團 R^4 取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經

$-R^4C=CR^4-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、 NR^4 、 $P(=O)(R^4)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 或 SO_2 置換，或具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個基團 R^4 取代，其中二或多個基團 R^3 可彼此連接且可形成環；

R^4 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C(=O)R^5$ 、 CN 、 $Si(R^5)_3$ 、 $N(R^5)_2$ 、 $P(=O)(R^5)_2$ 、 OR^5 、 $S(=O)R^5$ 、 $S(=O)_2R^5$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基基團或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基基團或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基基團，其中上述基團各自可經一或多個基團 R^5 取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-R^5C=CR^5-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^5$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^5-$ 、 NR^5 、 $P(=O)(R^5)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 或 SO_2 置換，或具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個基團 R^5 取代，其中二或多個基團 R^4 可彼此連接且可形成環；

R^5 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂族、芳族或雜芳族有機基團，其中，此外，一或多個 H 原子可經 D 或 F 置換；二或多個取代基 R^5 在此可彼此連接且可形成環；

其中二個基團 Ar^1 中之至少一者必須含有 10 或更多個芳族環原子；及

其中，如果二個基團 Ar^1 中之一者為苯基基團，則兩

個基團 Ar^1 中之另一者必須不含超過 14 個芳族環原子。

2. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中，從基團 Ar^2 至相鄰基團 Ar^1 或 Ar^2 之鏈係各存在於彼此之對位。

3. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中，基團 Ar^1 在每次出現時係相同或不同地選自：具有 6 至 14 個芳族環原子之芳基基團或雜芳基基團，其各自可經一或多個基團 R^1 取代。

4. 根據申請專利範圍第 3 項之化合物，其中，基團 Ar^1 在每次出現時係選自：具有 6 至 10 個芳族環原子之芳基基團或雜芳基基團，其各自可經一或多個基團 R^1 取代。

5. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中，基團 Ar^2 為苯基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代。

6. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中，基團 Ar^1 為萘基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代，及基團 Ar^2 為苯基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代。

7. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中，二個基團 Ar^1 中之一者為苯基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代，及兩個基團 Ar^1 中之另一者為萘基基團，其可經一或多個基團 R^1 取代，及基團 Ar^2 為苯基基團，其可經一或多個基團 R^2 取代。

8. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中， X^1 在每次出現時係相同或不同地選自： $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 $-\text{C}(\text{R}^3)_2-$

$C(R^3)_2-$ 、 $-C(R^3)_2-O-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 O 、 S 及 NR^3 。

9. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中， X^1 等於 $C(R^3)_2$ 。

10. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中， R^2 等於 H 或 D 。

11. 一種寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其含有一或多種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物，其中，至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物之鍵可位在經 R^1 、 R^2 或 R^3 取代之式(I)中的任何所要之位置。

12. 一種調配物，其包含至少一種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物，或至少一種根據申請專利範圍第 11 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，及至少一種溶劑。

13. 一種電子裝置，其係選自由下列所組成之群組：有機積體電路(OIC)、有機場效應電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機發光電晶體(OLET)、有機太陽能電池(OSC)、有機光學偵測器、有機感光體(organic photoreceptor)、有機場淬熄裝置(organic field-quench device)(OFQD)、有機發光電化學電池(OLEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機電致發光裝置(OLED)，其包含至少一種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物，或至少一種根據申請專利範圍第 11 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物。

14. 根據申請專利範圍第 13 項之電子裝置，其係選

自包含陰極、陽極和至少一個有機層之有機電致發光裝置，其中，該至少一個有機層包含至少一種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物，或至少一種根據申請專利範圍第 11 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物。

15. 根據申請專利範圍第 14 項之電子裝置，其中，根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物或根據申請專利範圍第 11 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物係存在作為電洞傳輸層中之電洞傳輸材料、作為發光層中之發光化合物或作為發光層中之基質化合物。

16. 一種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物或根據申請專利範圍第 11 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物之用途，係用在電子裝置。

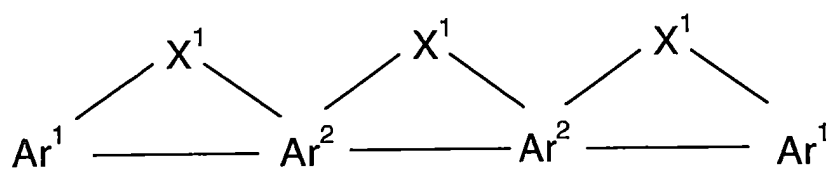
17. 一種用於製備根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物的方法，其特徵在於其包含至少一種金屬催化的偶合反應及至少一種閉環反應。

【代表圖】

【本案指定代表圖】：無

【本代表圖之符號簡單說明】：無

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：式(I)



式(I)