

(21)申請案號：098117835

(22)申請日：中華民國 98 (2009) 年 05 月 27 日

(51)Int. Cl.:

C07D471/02 (2006.01)

H01L51/00 (2006.01)

(30)優先權：2008/05/30

美國

61/057,547

(71)申請人：巴地斯顏料化工廠(德國) BASF SE (DE)

德國

保利艾拉公司(美國) POLYERA CORPORATION (US)

美國

(72)發明人：法奇提 安東尼歐 FACCHETTI, ANTONIO (IT)；陳志華 CHEN, ZHIHUA (CN)；

朵茲 芙羅拉 DOETZ, FLORIAN (DE)；凱斯特勒 馬可 KASTLER, MARCEL

(DE)；馬克斯 湯平 J MARKS, TOBIN J. (US)；顏河 YAN, HE (CN)；鄭焱

ZHENG, YAN (CN)

(74)代理人：陳長文

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：42 項 圖式數：6 共 81 頁

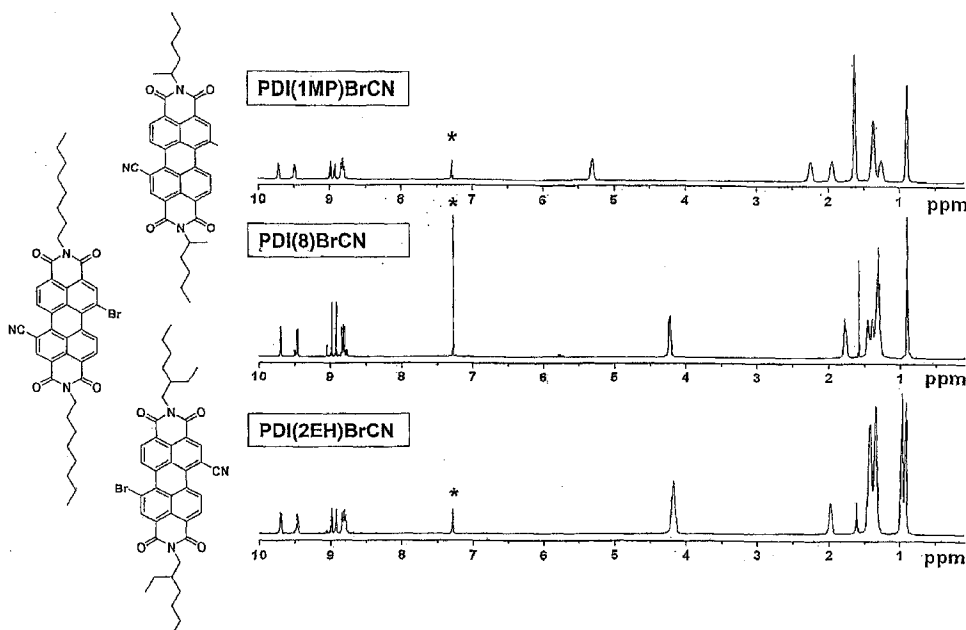
(54)名稱

以苊 (R Y L E N E) 為主之半導體材料及其製備與使用方法

RYLENE-BASED SEMICONDUCTOR MATERIALS AND METHODS OF PREPARATION AND USE THEREOF

(57)摘要

本發明揭示自多環化合物製備之新穎半導體材料。此等化合物可顯示高 n 型載子移動率及/或良好的電流調變特徵。另外，本教示之化合物可具有某些加工優勢，諸如溶液可加工性及/或在環境條件下之良好穩定性。



(21)申請案號：098117835

(22)申請日：中華民國 98 (2009) 年 05 月 27 日

(51)Int. Cl.:

C07D471/02 (2006.01)

H01L51/00 (2006.01)

(30)優先權：2008/05/30

美國

61/057,547

(71)申請人：巴地斯顏料化工廠(德國) BASF SE (DE)

德國

保利艾拉公司(美國) POLYERA CORPORATION (US)

美國

(72)發明人：法奇提 安東尼歐 FACCHETTI, ANTONIO (IT)；陳志華 CHEN, ZHIHUA (CN)；

朵茲 芙羅拉 DOETZ, FLORIAN (DE)；凱斯特勒 馬可 KASTLER, MARCEL

(DE)；馬克斯 湯平 J MARKS, TOBIN J. (US)；顏河 YAN, HE (CN)；鄭焱

ZHENG, YAN (CN)

(74)代理人：陳長文

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：42 項 圖式數：6 共 81 頁

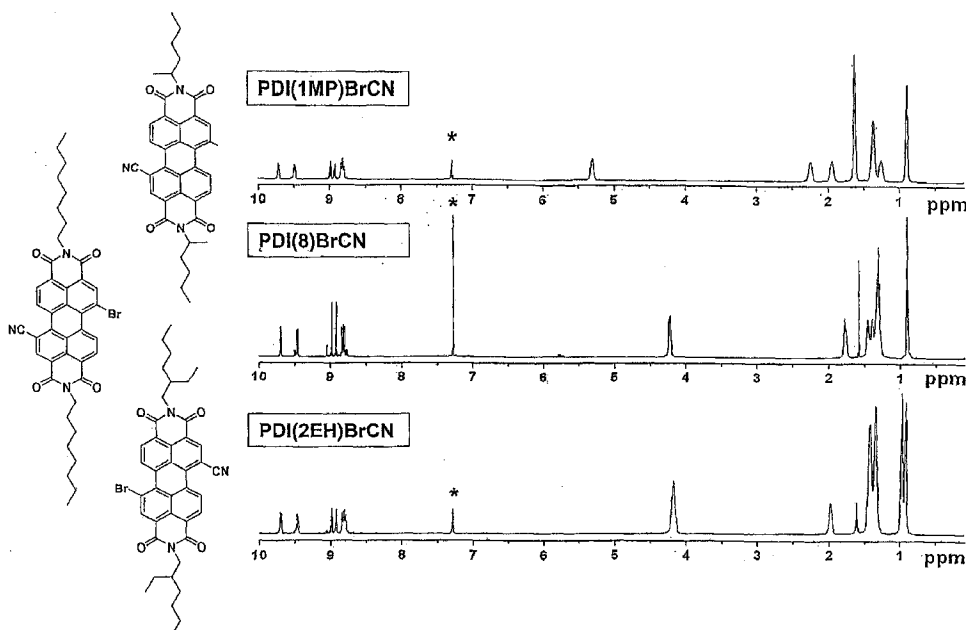
(54)名稱

以苊 (R Y L E N E) 為主之半導體材料及其製備與使用方法

RYLENE-BASED SEMICONDUCTOR MATERIALS AND METHODS OF PREPARATION AND USE THEREOF

(57)摘要

本發明揭示自多環化合物製備之新穎半導體材料。此等化合物可顯示高 n 型載子移動率及/或良好的電流調變特徵。另外，本教示之化合物可具有某些加工優勢，諸如溶液可加工性及/或在環境條件下之良好穩定性。



六、發明說明：

【先前技術】

新一代光電子器件，諸如有機薄膜電晶體(TFT)、有機發光二極體(OLED)、可印刷電路、有機光伏打器件、電容器及感應器，均係建立於有機半導體作為其活性組件(active component)之上。此等器件需要達成與其預期應用(諸如顯示器底板、射頻識別標籤、印刷感應器及光伏打裝置)相容之效能。若p型及n型半導體材料在環境條件下顯示高電荷載子移動率及穩定性，則與以無機材料為主之電子設備一樣，以有機半導體為主之器件可有效且高速地操作，且可以成本有效之方式來處理。

最有前途之有機半導體包括具有與有效電荷輸送相容且適於自電接點注入電荷之電子結構的 π 共軛小分子及聚合物。迄今為止，大多數已得到研究及優化之有機半導體為p型半導體材料，原因在於其具有增強之環境穩定性。相比之下，n型半導體限於少量分子及聚合物，其中大多數在環境條件下為非活性的。已報導一些核氰酸化蒽(core-cyanated rylene)(包括芘、蔥、萘及其類似物)在環境條件下可具活性且可顯示加工通用性。例如參看Tang, C.W. (1986), Appl. Phys. Lett., 48: 183 ; Law, K.Y. (1993), Chem. Rev., 93: 449 ; 及Forrest, R.F. (1997), Chem. Rev., 97: 1793。

儘管已將接觸及非接觸式印刷技術用於製造電子器件，但有機半導體材料在可印刷電路中之較為廣泛的應用已受

到合適調配物之不可用性的約束。舉例而言，僅當將此等材料調配於具有適當黏度之印刷介質中時才可獲得令人滿意的印刷結果。在一些情況下，因為黏合劑會對半導體材料之載子移動率產生負面影響，所以包含黏合劑並不為可行之選擇。

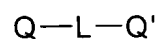
因此，此項技術需要新穎的n型有機半導體材料，尤其可在適用於各種溶液加工技術(包括(但不限於)接觸及非接觸式印刷)之具有寬黏度範圍之溶液中調配的n型有機半導體材料。

【發明內容】

鑒於前述內容，本教示提供可解決先前技術之各種缺點及不足(包括上文所概述者)之有機半導體材料及相關器件。

更具體言之，本教示提供以多環化合物(包括雙多環化合物)為主之有機半導體材料。已發現本教示之雙多環化合物可提供適於各種溶液相方法之有用電特性及寬黏度範圍。

在一態樣中，本教示提供具有式I之雙多環化合物：



其中Q、Q'及L係如本文所述。

本教示亦提供製備此等化合物及半導體材料之方法，以及包括本文所揭示之化合物及半導體材料的各種組合物、物品、結構及器件。

根據以下流程、圖式、表、說明及申請專利範圍，將更

充分地瞭解本教示之前述及其他特徵及優勢。

【實施方式】

應瞭解下述圖式僅用於說明目的。該等圖式未必成比例且並不意欲以任何方式限制本教示之範疇。

本教示提供有機半導體材料，包括化合物及組合物。本文所揭示之有機半導體材料可顯示有用之電特性且可為溶液可加工的，例如可旋塗且可印刷。另外，此等材料可視為n型半導體材料且可用以製造各種有機電子物品、結構及器件，包括場效電晶體、單極電路、互補電路、光伏打器件及發光器件。

特定言之，本教示提供多環化合物，包括雙多環化合物。此等多環化合物通常可在一或多種常用溶劑中具有某種溶解度且可在環境條件下穩定。本教示亦提供製備及使用此等化合物(包括可包括此等化合物之組合物、物品、結構及器件)之方法。

在整個申請案中，當將組合物描述為具有、包括或包含特定組份時，或當將方法描述為具有、包括或包含特定方法步驟時，預期本教示之組合物亦大體上由所述組份組成或由所述組份組成，且本教示之方法亦大體上由所述方法步驟組成或由所述方法步驟組成。

在本申請案中，當論及要素或組份包括在所述要素或組份之清單中及/或選自所述要素或組份之清單時，應瞭解該要素或組份可為所述要素或組份中之任一者且可選自由兩種或兩種以上所述要素或組份組成之群。此外，應瞭解

本文所述之組合物、裝置或方法之要素及/或特徵可在不偏離本教示之精神及範疇(本文中明確提及或隱含者)的情況下以各種方式組合。

除非另外特別規定，否則一般應將術語「包括」或「具有」之使用視為開放式且非限制性的。

除非另外特別規定，否則在本文中單數之使用包括複數(且複數之使用亦包括單數)。另外，除非另外特別規定，否則當在數量值之前使用術語「約」時，本教示亦包括特定數量值本身。如本文中所用，術語「約」係指與標稱值之 $\pm 10\%$ 變化。

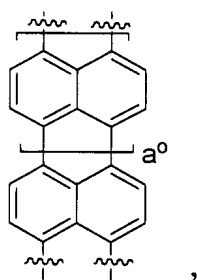
應瞭解，各步驟之順序或進行某些活動之順序並不重要，只要本教示保持可操作性即可。此外，兩個或兩個以上步驟或活動可同時進行。

如本文中所用，「溶液可加工」係指可用於各種溶液相方法中之化合物(例如雙多環化合物)、材料或組合物，該等溶液相方法包括旋塗、印刷(例如，噴墨印刷、網板印刷、移印、平版印刷、凹板印刷、柔性印刷、石版印刷及其類似方法)、噴塗、電噴霧塗布、滴鑄(drop casting)、浸塗及刮塗。

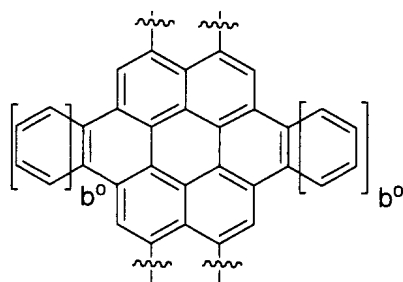
如本文中所用，「環部分」可包括一或多個(例如1-6個)碳環或雜環。在環部分為多環部分之實施例中，多環系統可包括一或多個彼此稠合(亦即共用公共鍵)及/或經由螺原子彼此連接之環。環部分可為環烷基、環雜烷基、芳基或雜芳基，且可經1-5個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所定義。

如本文中所用，「雙多環的」或「雙多環化合物」係指包括兩個藉由共價鍵或二價基團連接之多環部分的分子。雙多環化合物中之多環部分可相同或不同，且各多環部分視情況可經1-5個 R^i 基團取代，其中 R^i 係如本文中所定義。

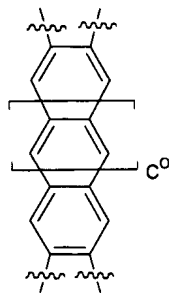
如本文中所用，「稠環」或「稠環部分」係指具有至少兩個環之多環系統，其中該等環中至少一者為芳族環且此芳族環(碳環或雜環)與至少一個其他環共用一鍵，該至少一個其他環可為芳族或非芳族環，及碳環或雜環。此等多環系統可為高度 π 共軛的且可包括多環芳族烴，諸如具有下式之芮：



其中 a° 可為在0-3之範圍內的整數；具有下式之寇 (coronene)：



其中 b° 可為在0-3之範圍內的整數；及具有下式之線性并苯 (linear acene)：



其中 c° 可為在 0-4 之範圍內的整數。稠環部分可經 1-8 個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所定義。

如本文中所用，「鹵基」或「鹵素」係指氟、氯、溴及碘。

如本文中所用，「側氧基」係指雙鍵鍵結之氧（亦即 =O）。

如本文中所用，「烷基」係指直鏈或支鏈飽和烴基。烷基之實例包括甲基 (Me)、乙基 (Et)、丙基（例如正丙基及異丙基）、丁基（例如正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基）、戊基（例如正戊基、異戊基、新戊基）及其類似基團。在各種實施例中，烷基可具有 1 至 30 個碳原子，例如 1-20 個碳原子（亦即 C_{1-20} 烷基）。在一些實施例中，烷基可具有 1 至 6 個碳原子，且可稱作「低碳烷基」。低碳烷基之實例包括甲基、乙基、丙基（例如正丙基及異丙基）及丁基（例如正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基）。在一些實施例中，烷基可經 1-5 個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所定義。烷基一般並不經另一烷基、烯基或炔基取代。

如本文中所用，「鹵烷基」係指具有一或多個鹵素取代基之烷基。在各種實施例中，鹵烷基可具有 1 至 20 個碳原子，例如 1 至 10 個碳原子（亦即 C_{1-10} 鹵烷基）。鹵烷基之實例

包括 CF_3 、 C_2F_5 、 CHF_2 、 CH_2F 、 CCl_3 、 CHCl_2 、 CH_2Cl 、 C_2Cl_5 及其類似基團。在「鹵烷基」之定義內包括全鹵烷基，亦即所有氫原子均經鹵素原子置換之烷基(例如 CF_3 及 C_2F_5)。舉例而言， C_{1-20} 鹵烷基可具有式 $-\text{C}_m\text{H}_{2m+1-t}\text{X}_t$ ，其中 X 在每次出現時為 F、Cl、Br 或 I，m 為在 1 至 20 之範圍內的整數，且 t 為在 1 至 41 之範圍內的整數，其限制條件為 t 小於或等於 $2m+1$ 。不為全鹵烷基之鹵烷基可經 1-5 個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所述定義。

如本文中所述，「烷氧基」係指 -O-烷基。烷氧基之實例包括(但不限於)甲氧基、乙氧基、丙氧基(例如，正丙氧基及異丙氧基)、第三丁氧基及其類似基團。-O-烷基中之烷基可經 1-5 個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所述定義。

如本文中所述，「烷硫基」係指 -S-烷基。烷硫基之實例包括(但不限於)甲硫基、乙硫基、丙硫基(例如，正丙硫基及異丙硫基)、第三丁硫基及其類似基團。-S-烷基中之烷基可經 1-5 個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所述定義。

如本文中所述，「芳基烷基」係指 -烷基-芳基，其中芳基烷基係經由烷基與指定化學結構共價鍵聯。芳基烷基係在 -Y- C_{6-14} 芳基之定義內，其中 Y 係如本文中所述定義。芳基烷基之實例為苯甲基(- $\text{CH}_2\text{-C}_6\text{H}_5$)。芳基烷基可視情況經取代，亦即芳基及/或烷基可如本文所揭示經取代。

如本文中所述，「烯基」係指具有一或多個碳碳雙鍵之直鏈或支鏈烷基。烯基之實例包括乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、己烯基、丁二烯基、戊二烯基、己二烯基及

其類似基團。該一或多個碳碳雙鍵可在內部(諸如在2-丁烯中)或在末端(諸如在1-丁烯中)。在各種實施例中，烯基可具有2至30個碳原子，例如2至20個碳原子(亦即C₂₋₂₀烯基)。在一些實施例中，烯基可經1-5個Rⁱ基團取代且Rⁱ係如本文中所定義。烯基一般並不經另一烯基、烷基或炔基取代。

如本文中所用，「炔基」係指具有一或多個碳-碳參鍵之直鏈或支鏈烷基。炔基之實例包括乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基及其類似基團。該一或多個碳-碳參鍵可在內部(諸如在2-丁炔中)或在末端(諸如在1-丁炔中)。在各種實施例中，炔基可具有2至30個碳原子，例如2至20個碳原子(亦即C₂₋₂₀炔基)。在一些實施例中，炔基可經1-5個Rⁱ基團取代且Rⁱ係如本文中所定義。炔基一般並不經另一炔基、烷基或烯基取代。

如本文中所用，「環烷基」係指包括環狀烷基、烯基及炔基之非芳族碳環基團。在各種實施例中，環烷基可具有3至20個碳原子，例如3至14個碳原子(亦即C₃₋₁₄環烷基)。環烷基可為單環(例如環己基)或多環(例如，含有稠環、橋環及/或螺環系統)，其中碳原子定位於環系統之內部或之外部。環烷基之任何合適環位置均可與指定化學結構共價鍵聯。環烷基之實例包括環丙基、環丁基、環戊基、環己基、環庚基、環戊烯基、環己烯基、環己二烯基、環庚三烯基、降萜基、降蒎基(norpinyl)、降萆基、金剛烷基及螺[4.5]癸基以及其同系物、異構體及其類似基團。在一些實

施例中，環烷基可經1-5個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所定義。

如本文中所用，「雜原子」係指除碳或氫外之任何元素之原子且包括(例如)氮、氧、矽、硫、磷及硒。

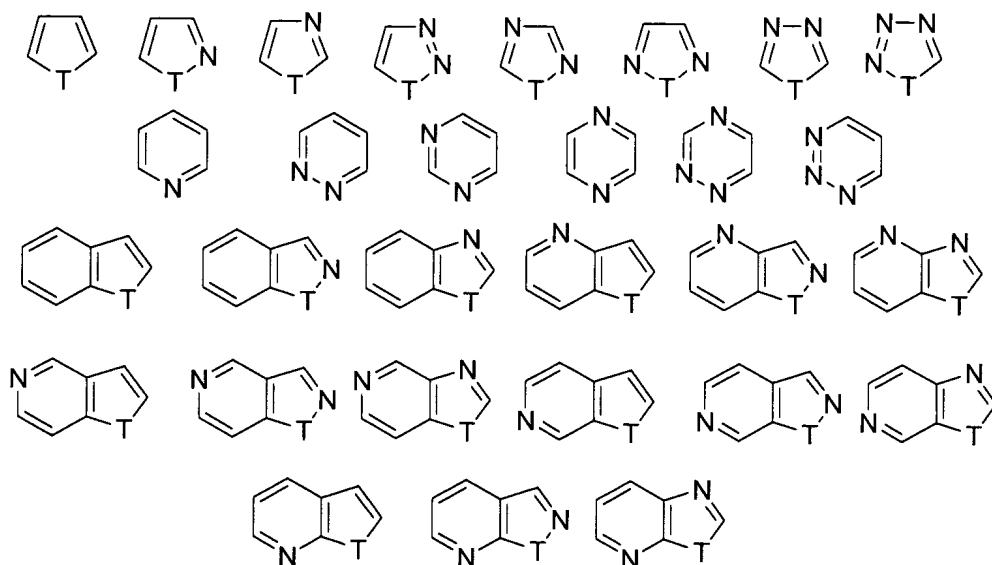
如本文中所用，「環雜烷基」係指含有至少一個選自O、S、Se、N、P及Si(例如O、S及N)之環雜原子且視情況含有一或多個雙鍵或參鍵的非芳族環烷基。環雜烷基可具有3至20個環原子，例如3至14個環原子(亦即3-14員環雜烷基)。環雜烷基環中之一或多個N、P、S或Se原子(例如N或S)可經氧化(例如，嗎啉N-氧化物、硫代嗎啉S-氧化物、硫代嗎啉S,S-二氧化物)。在一些實施例中，環雜烷基之氮或磷原子可帶有取代基，例如氫原子、烷基或如本文所述之其他取代基。環雜烷基亦可含有一或多個側氧基，諸如側氧基哌啶基、側氧基噁唑啶基、二側氧基-(1H,3H)-嘓啶基、側氧基-2(1H)-吡啶基及其類似基團。環雜烷基之實例尤其包括嗎啉基、硫代嗎啉基、哌喃基、咪唑啶基、咪唑啉基、噁唑啶基、吡啶基、吡啶基、吡啶基、吡咯啶基、吡咯啉基、四氫呋喃基、四氫噻吩基、哌啶基、哌嗪基及其類似基團。在一些實施例中，環雜烷基可經1-5個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所定義。

如本文中所用，「芳基」係指芳族單環烴環系統或多環系統，其中兩個或兩個以上芳族烴環係稠合(亦即，具有共用鍵)在一起或至少一個芳族單環烴環係與一或多個環烷基及/或環雜烷基環稠合。芳基在其環系統中可具有6至

16個碳原子(例如C₆₋₁₆芳基)，其可包括多個稠環。在一些實施例中，多環芳基可具有8到16個碳原子。芳基之任何合適環位置均可與指定化學結構共價鍵聯。僅具有芳族碳環之芳基的實例包括苯基、1-萘基(雙環)、2-萘基(雙環)、蔥基(三環)、菲基(三環)及其類似基團。至少一個芳族碳環係與一或多個環烷基及/或環雜烷基環稠合的多環系統之實例尤其包括以下之苯并衍生物：環戊烷(亦即二氫節基，其為5,6-雙環環烷基/芳族環系統)、環己烷(亦即四氫萘基，其為6,6-雙環環烷基/芳族環系統)、咪唑啉(亦即苯并咪唑啉基，其為5,6-雙環環雜烷基/芳族環系統)及哌喃(亦即吡啶基，其為6,6-雙環環雜烷基/芳族環系統)。芳基之其他實例包括苯并二噁烷基、苯并間二氧雜環戊烯基、吡基、吡啶基及其類似基團。在一些實施例中，芳基可經1-5個Rⁱ基團取代且Rⁱ係如本文中所定義。在一些實施例中，芳基可具有一或多個鹵素取代基，且可稱作「鹵芳基」。在「鹵芳基」之定義內包括全鹵烷基，亦即所有氫原子均經鹵素原子置換之芳基(例如-C₆F₅)。在某些實施例中，芳基係經另一芳基取代且可稱作聯芳基。聯芳基中之每一芳基可如本文所揭示經取代。

如本文中所用，「雜芳基」係指含有至少一個選自氧(O)、氮(N)、硫(S)、矽(Si)及硒(Se)之環雜原子的芳族單環系統，或環系統中存在之至少一個環為芳族環且含有至少一個環雜原子之多環系統。多環雜芳基包括兩個或兩個以上稠合在一起之雜芳基環，及與一或多個芳族碳環、非

芳族碳環及/或非芳族環雜烷基環稠合之單環雜芳基環。雜芳基總體上可具有(例如)5至16個環原子且含有1-5個環雜原子(亦即5-16員雜芳基)。雜芳基可與指定化學結構在產生穩定結構之任何雜原子或碳原子處連接。雜芳基環一般不含有O-O、S-S或S-O鍵。然而,雜芳基中之一或多個N或S原子可經氧化(例如,吡啶N-氧化物、噻吩S-氧化物、噻吩S,S-二氧化物)。雜芳基之實例包括(例如)下文所示之5員或6員單環及5-6雙環系統:



其中T為O、S、NH、N-烷基、N-芳基、N-(芳基烷基)(例如N-苯甲基)、SiH₂、SiH(烷基)、Si(烷基)₂、SiH(芳基烷基)、Si(芳基烷基)₂或Si(烷基)(芳基烷基)。此等雜芳基環之實例包括吡咯基、呋喃基、噻吩基、吡啶基、嘧啶基、噻嗪基、吡嗪基、三唑基、四唑基、吡唑基、咪唑基、異噻唑基、噻唑基、噻二唑基、異噁唑基、噁唑基、噁二唑基、吲哚基、異吲哚基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、喹啉基、2-甲基喹啉基、異喹啉基、喹諾啉基(quinoxalyl)、喹

唑啉基、苯并三唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、苯并異噻唑基、苯并異噁唑基、苯并噁二唑基、苯并噁唑基、吡啶基、1H-吡啶基、2H-吡啶基、吡嗪基、異苯并呋喃基、喹啉基、酞嗪基、喋啶基、嘌呤基、噁唑并吡啶基、噻唑并吡啶基、咪唑并吡啶基、呋喃并吡啶基、噻吩并吡啶基、吡啶并嘧啶基、吡啶并吡嗪基、吡啶并噻嗪基、噻吩并噻唑基、噻吩并噁唑基、噻吩并咪唑基及其類似基團。雜芳基之其他實例包括4,5,6,7-四氫吡啶基、四氫喹啉基、苯并噻吩并吡啶基、苯并呋喃并吡啶基及其類似基團。在一些實施例中，雜芳基可經1-5個 R^i 基團取代且 R^i 係如本文中所定義。

本教示之化合物可包括在本文中定義為能夠與兩個其他部分形成共價鍵之鍵聯基團的「二價基團」。舉例而言，本教示之化合物可包括二價 C_{1-20} 烷基，諸如亞甲基；二價 C_{2-20} 烯基，諸如伸乙烯基；二價 C_{2-20} 炔基，諸如伸乙炔基；二價 C_{6-14} 芳基，諸如伸苯基；二價3-14員環雜烷基，諸如伸吡咯啶基；或二價5-14員雜芳基，諸如伸噻吩基。

已測定反映取代基之所有常見類別的數百種最常見取代基之推電子或拉電子特性，加以定量並公開。推電子及拉電子特性之最常見定量係依據哈米特 σ 值(Hammett σ value)。氫具有零哈米特 σ 值，而其他取代基具有與其拉電子或推電子特徵直接相關之呈現正增長或負增長之哈米特 σ 值。具有負哈米特 σ 值之取代基視為推電子的，而具有正哈米特 σ 值之取代基視為拉電子的。參看Lange's Handbook

of Chemistry, 第12版, McGraw Hill, 1979, 表3-12, 第3-134至3-138頁, 其列出大量常見取代基的哈米特 σ 值且以引用的方式併入本文中。應瞭解術語「接受電子之基團 (electron-accepting group)」在本文中可與「電子受體」及「拉電子基」同義地使用。詳言之, 「拉電子基」(「EWG」)或「接受電子之基團」或「電子受體」係指若佔據分子中之相同位置則比氫原子更多地向自身拉電子之官能基。拉電子基之實例包括(但不限於)鹵素或鹵基(例如 F、Cl、Br、I)、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{NC}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{OR}^0$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SR}^0$ 、 $-\text{S}(\text{R}^0)_2^+$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHR}^0$ 、 $-\text{NR}^0_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^0)_3^+$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^0$ 、 $-\text{SO}_3\text{R}^0$ 、 $-\text{SO}_2\text{NHR}^0$ 、 $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^0)_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{COR}^0$ 、 $-\text{COOR}^0$ 、 $-\text{CONHR}^0$ 、 $-\text{CON}(\text{R}^0)_2$ 、 C_{1-10} 鹵烷基、 C_{6-14} 芳基及5-14員雜芳基; 其中 R^0 為 C_{1-10} 烷基、 C_{2-10} 烯基、 C_{2-10} 炔基、 C_{1-10} 鹵烷基、 C_{1-10} 烷氧基、 C_{6-14} 芳基、 C_{3-14} 環烷基、3-14員環雜烷基及5-14員雜芳基, 其中每一者可視情況經1-5個 R^i 取代且 R^i 係如本文中所定義。

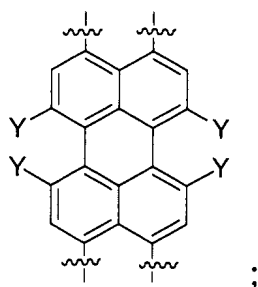
在本說明書中各處, 化合物之取代基係以群形式或以範圍形式揭示。本說明書尤其意欲包括此等群及範圍之成員之每一個別子組合。舉例而言, 術語「 C_{1-6} 烷基」尤其意欲個別地揭示 C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_5 、 C_6 、 $\text{C}_1\text{-C}_6$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_3$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_2$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_6$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_4$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_3$ 、 $\text{C}_3\text{-C}_6$ 、 $\text{C}_3\text{-C}_5$ 、 $\text{C}_3\text{-C}_4$ 、 $\text{C}_4\text{-C}_6$ 、 $\text{C}_4\text{-C}_5$ 及 $\text{C}_5\text{-C}_6$ 烷基。舉其他實例而言, 在0至40之範圍內的整數尤其意欲個別地揭示0、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及40，且在1至20之範圍內的整數尤其意欲個別地揭示1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19及20。其他實例包括短語「視情況經1-5個取代基取代」尤其意欲個別地揭示可包括以下之化學基團：0、1、2、3、4、5、0-5、0-4、0-3、0-2、0-1、1-5、1-4、1-3、1-2、2-5、2-4、2-3、3-5、3-4及4-5個取代基。

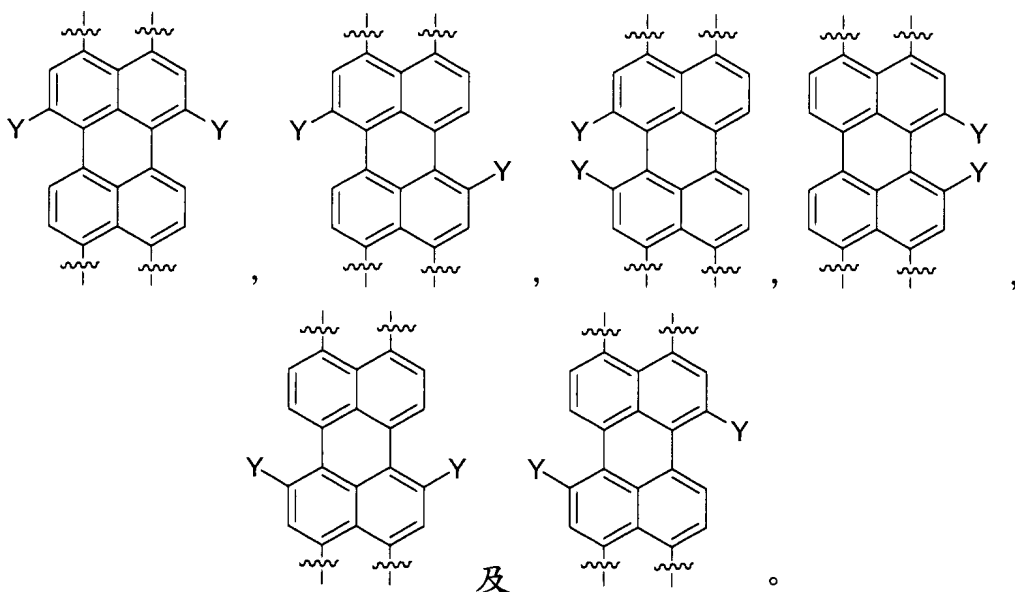
本文所述之化合物可含有不對稱原子(亦稱作對掌性中心)且一些化合物可含有兩個或兩個以上不對稱原子或中心，其可因此產生光學異構體(對映異構體)及非對映異構體(幾何異構體)。本教示包括此等光學異構體及非對映異構體，包括其各別經拆分之對映異構純或非對映異構純異構體(例如，(+)或(-)立體異構體)及其外消旋混合物，以及對映異構體與非對映異構體之其他混合物。在一些實施例中，光學異構體可藉由熟習此項技術者已知之標準程序以富集對映異構體或對映異構純之形式獲得，該等標準程序包括(例如)對掌性分離、非對映異構鹽形成、動力學拆分及不對稱合成。本教示亦涵蓋含有烯基部分之化合物(例如烯烴及亞胺)之順式及反式異構體。亦應瞭解，本教示之化合物涵蓋所有可能之純形式之區位異構體及其混合物。可能(例如)使用熟習此項技術者已知之標準分離程序，例如管柱層析、薄層層析、模擬移動床層析及高效液

相層析，來分離此等異構體。然而，可與使用本教示之各個別區位異構體類似地使用區位異構體之混合物。

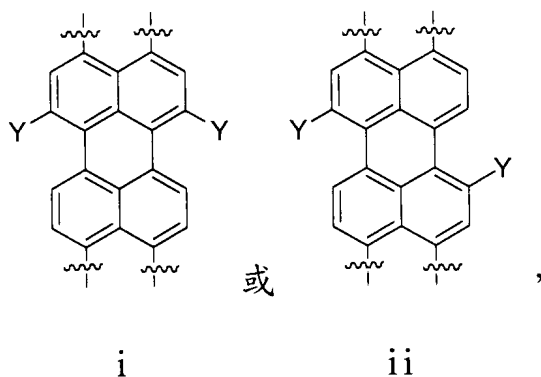
舉例而言，本教示之以芘為主之化合物可包括純形式或混合物形式之任何芘衍生物，其中該等芘衍生物可經1、2、3、4、5、6、7或8個取代基取代。芘衍生物尤其可包括具有以下部分之化合物：



其中Y在每次出現時可為H、拉電子基或脫離基；其中拉電子基及脫離基係如本文中所定義。在各種實施例中，兩個Y基團可為H且其他兩個Y基團可獨立地為拉電子基或脫離基。因此，在兩個Y基團為H且其他兩個獨立地為拉電子基或脫離基之實施例中，本教示之化合物可具有具下式之區位異構體：



在某些實施例中，本教示之化合物可包括具有式i或式ii之化合物：



或其混合物，其中Y可獨立地為拉電子基或脫離基，例如鹵素(例如Br)或CN。在特定實施例中，Y可為R^a，其中R^a係如本文中所定義。此外，除非另外特別規定，否則尤其預期一種區位異構體之描述包括任何其他區位異構體及任何區位異構體混合物。因此，舉例而言，使用式i化合物包括式ii化合物(且使用式ii化合物包括式i化合物)及式i與式ii化合物之混合物。

如本文中所用，「脫離基」(「LG」)係指可由於(例如)取代或消除反應而置換為穩定物質之帶電或不帶電原子(或原子團)。脫離基之實例包括(但不限於)鹵素(例如Cl、Br、I)、疊氮化物(N₃)、硫氰酸酯基(SCN)、硝基(NO₂)、氰酸酯基(CN)、水(H₂O)、氨(NH₃)及磺酸酯基(OSO₂-R，其中R可為C₁₋₁₀烷基或C₆₋₁₄芳基，其各自視情況經1-4個獨立地選自C₁₋₁₀烷基及拉電子基之基團取代)，諸如甲苯磺酸酯基(tosylate/toluenesulfonate，OT)、甲磺酸酯基(mesylate/methanesulfonate，OM)、溴苯磺酸酯基(對溴苯磺酸酯基，OB)、硝基苯磺酸酯基(4-硝基苯磺酸酯基，

ON)及三氟甲磺酸酯基(triflate/trifluoromethanesulfonate, OTf)。

如本文中所用，「p型半導體材料」或「p型半導體」係指具有電洞作為主要載流子之半導體材料。在一些實施例中，當將p型半導體材料沈積於基板上時，其可提供超過約 10^{-5} cm²/Vs之電洞移動率。在場效器件之情況下，p型半導體亦可顯示大於約10之電流開/關比。

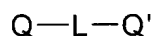
如本文中所用，「n型半導體材料」或「n型半導體」係指具有電子作為主要載流子之半導體材料。在一些實施例中，當將n型半導體材料沈積於基板上時，其可提供超過約 10^{-5} cm²/Vs之電子移動率。在場效器件之情況下，n型半導體亦可顯示大於約10之電流開/關比。

如本文中所用，「場效移動率」係指對電荷載子(例如，在p型半導體材料之情況下為電洞(或正電荷單元)，且在n型半導體材料之情況下為電子)在電場之影響下移動穿過材料之速度的量度。

如本文中所用，當化合物暴露於環境條件(例如，空氣、環境溫度及濕度)一段時間時，該化合物之載子移動率或還原電位保持在約其初始量測值，此時可將化合物視為「環境穩定」或「在環境條件下穩定」的。舉例而言，若化合物在暴露於環境條件(包括空氣、濕度及溫度)3天、5天或10天時間之後，其載子移動率或還原電位自其初始值變化不大於20%或不大於10%，則可將該化合物描述為環境穩定的。

在本申請案中各處，溫度均係以範圍形式揭示。本說明書尤其意欲包括在此等範圍內之較窄溫度範圍，以及包含此等溫度範圍之最高及最低溫度。

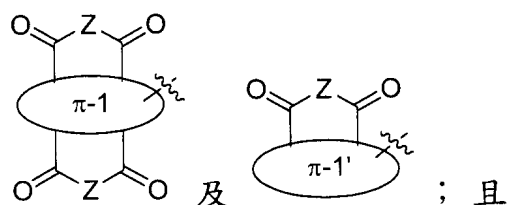
在一態樣中，本教示提供具有式I之雙多環化合物：



I

其中：

Q及Q'獨立地選自：



L具有式A-B-A'或B-A-B'；

其中 $\pi-1$ 及 $\pi-1'$ 獨立地為視情況經1-8個 R^a 基團取代之多環部分；

Z在每次出現時係選自 a) O、b) S、c) NR^b 、d) C(O)，及 e) CR^cR^d ；

A及A'獨立地選自 a) 二價 C_{1-20} 烷基、b) 二價 C_{2-20} 烯基、c) 二價 C_{2-20} 炔基、d) 二價 C_{1-20} 鹵烷基、e) 二價 C_{1-20} 烷氧基，及f) 共價鍵，其中a)-e)中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代；

B及B'獨立地選自 a) -O-、b) -S-、c) $-NR^e-$ 、d) $-C(O)-$ 、e) $-C(O)O-$ 、f) $-OC(O)-$ 、g) $-C(O)NR^e-$ 、h) $-NR^eC(O)-$ 、i) 二價 C_{3-14} 環烷基、j) 二價 C_{6-14} 芳基、k) 二價3-14員環雜

烷基、l) 二價 5-14 員雜芳基，及 m) 共價鍵，其中 i)-l) 中每一者各視情況經 1-4 個 R^i 基團取代；

R^a 在每次出現時為 a) 鹵素、b) $-\text{CN}$ 、c) $-\text{NO}_2$ 、d) $-\text{OR}^f$ 、e) $-\text{SR}^f$ 、f) $-\text{NR}^g\text{R}^h$ 、g) $-\text{N}(\text{O})\text{R}^g\text{R}^h$ 、h) $-\text{S}(\text{O})_m\text{R}^g$ 、i) $-\text{S}(\text{O})_m\text{OR}^g$ 、j) $-\text{S}(\text{O})_m\text{NR}^g\text{R}^h$ 、k) $-\text{C}(\text{O})\text{R}^g$ 、l) $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^f$ 、m) $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、n) $-\text{C}(\text{S})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、o) $-\text{SiH}_3$ 、p) $-\text{SiH}(\text{C}_{1-20}\text{烷基})_2$ 、q) $-\text{SiH}_2(\text{C}_{1-20}\text{烷基})$ 、r) $-\text{Si}(\text{C}_{1-20}\text{烷基})_3$ 、s) C_{1-20} 烷基、t) C_{2-20} 烯基、u) C_{2-20} 炔基、v) C_{1-20} 鹵烷基、w) $-\text{Y}-\text{C}_{3-14}$ 環烷基、x) $-\text{Y}-\text{C}_{6-14}$ 芳基、y) $-\text{Y}-3-14$ 員環雜烷基或 z) $-\text{Y}-5-14$ 員雜芳基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 C_{3-14} 環烷基、 C_{6-14} 芳基、3-14 員環雜烷基及 5-14 員雜芳基中每一者各視情況經 1-4 個 R^i 基團取代；

R^b 在每次出現時為 a) H 、b) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q\text{H}$ 、c) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q-\text{CH}_3$ 、d) $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^f$ 、e) $-\text{C}(\text{O})\text{R}^g$ 、f) $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、g) $-\text{C}(\text{S})\text{OR}^f$ 、h) $-\text{C}(\text{S})\text{R}^g$ 、i) $-\text{C}(\text{S})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、j) $-\text{S}(\text{O})_m\text{R}^g$ 、k) $-\text{S}(\text{O})_m\text{OR}^g$ 、l) C_{1-20} 烷基、m) C_{2-20} 烯基、n) C_{2-20} 炔基、o) C_{1-20} 烷氧基、p) $-\text{Y}-\text{C}_{3-14}$ 環烷基、q) $-\text{Y}-\text{C}_{6-14}$ 芳基、r) $-\text{Y}-3-14$ 員環雜烷基，或 s) $-\text{Y}-5-14$ 員雜芳基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{3-14} 環烷基、 C_{6-14} 芳基、3-14 員環雜烷基及 5-14 員雜芳基中每一者各視情況經 1-4 個 R^i 基團取代；

R^c 及 R^d 在每次出現時獨立地為 a) H 、b) 鹵素、c) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q\text{H}$ 、d) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q-\text{CH}_3$ 、e) C_{1-20} 烷氧基、

f) C_{1-20} 烷基、g) C_{2-20} 烯基、h) C_{2-20} 炔基、i) $-Y-C_{3-14}$ 環烷基、j) $-Y-C_{6-14}$ 芳基、k) $-Y-3-14$ 員環雜烷基，或l) $-Y-5-14$ 員雜芳基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 C_{3-14} 環烷基、 C_{6-14} 芳基、3-14員環雜烷基及5-14員雜芳基中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代；

R^e 在每次出現時為a) H、b) C_{1-6} 烷基、c) C_{6-14} 芳基，或d) $-C_{1-6}$ 烷基- C_{6-14} 芳基，其中 C_{1-6} 烷基及 C_{6-14} 芳基中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代；

R^f 在每次出現時為a) H、b) $-C(O)R^g$ 、c) $-C(O)NR^gR^h$ 、d) $-C(S)R^g$ 、e) $-C(S)NR^gR^h$ 、f) C_{1-20} 烷基、g) C_{2-20} 烯基、h) C_{2-20} 炔基、i) C_{3-14} 環烷基、j) C_{6-14} 芳基、k) 3-14員環雜烷基，或l) 5-14員雜芳基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 C_{3-14} 環烷基、 C_{6-14} 芳基、3-14員環雜烷基及5-14員雜芳基中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代；

R^g 及 R^h 在每次出現時獨立地為a) H、b) $-OH$ 、c) $-SH$ 、d) $-S(O)_2OH$ 、e) $-C(O)OH$ 、f) $-C(O)NH_2$ 、g) $-C(S)NH_2$ 、h) $-OC_{1-10}$ 烷基、i) $-C(O)-C_{1-20}$ 烷基、j) $-C(O)-OC_{1-20}$ 烷基、k) $-C(S)N(C_{1-20}烷基)_2$ 、l) $-C(S)NH-C_{1-20}$ 烷基、m) $-C(O)NH-C_{1-20}$ 烷基、n) $-C(O)N(C_{1-20}烷基)_2$ 、o) $-S(O)_m-C_{1-20}$ 烷基、p) $-S(O)_m-OC_{1-20}$ 烷基、q) C_{1-20} 烷基、r) C_{2-20} 烯基、s) C_{2-20} 炔基、t) C_{1-20} 烷氧基、u) C_{3-14} 環烷基、v) C_{6-14} 芳基、w) 3-14員環雜烷基，或x) 5-14員雜芳基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔

基、 C_{3-14} 環烷基、 C_{6-14} 芳基、3-14員環雜烷基及5-14員雜芳基中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代；

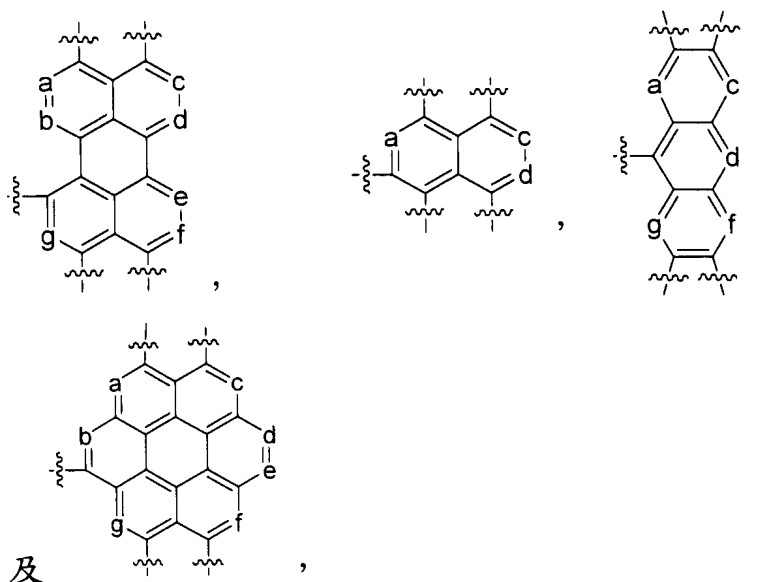
R^i 在每次出現時為 a) 鹵素、b) $-CN$ 、c) $-NO_2$ 、d) 側氧基、e) $-OH$ 、f) $-NH_2$ 、g) $-NH(C_{1-20} \text{烷基})$ 、h) $-N(C_{1-20} \text{烷基})_2$ 、i) $-N(C_{1-20} \text{烷基})-C_{6-14} \text{芳基}$ 、j) $-N(C_{6-14} \text{芳基})_2$ 、k) $-S(O)_mH$ 、l) $-S(O)_m-C_{1-20} \text{烷基}$ 、m) $-S(O)_2OH$ 、n) $-S(O)_m-OC_{1-20} \text{烷基}$ 、o) $-S(O)_m-OC_{6-14} \text{芳基}$ 、p) $-CHO$ 、q) $-C(O)-C_{1-20} \text{烷基}$ 、r) $-C(O)-C_{6-14} \text{芳基}$ 、s) $-C(O)OH$ 、t) $-C(O)-OC_{1-20} \text{烷基}$ 、u) $-C(O)-OC_{6-14} \text{芳基}$ 、v) $-C(O)NH_2$ 、w) $-C(O)NH-C_{1-20} \text{烷基}$ 、x) $-C(O)N(C_{1-20} \text{烷基})_2$ 、y) $-C(O)NH-C_{6-14} \text{芳基}$ 、z) $-C(O)N(C_{1-20} \text{烷基})-C_{6-14} \text{芳基}$ 、aa) $-C(O)N(C_{6-14} \text{芳基})_2$ 、ab) $-C(S)NH_2$ 、ac) $-C(S)NH-C_{1-20} \text{烷基}$ 、ad) $-C(S)N(C_{1-20} \text{烷基})_2$ 、ae) $-C(S)N(C_{6-14} \text{芳基})_2$ 、af) $-C(S)N(C_{1-20} \text{烷基})-C_{6-14} \text{芳基}$ 、ag) $-C(S)NH-C_{6-14} \text{芳基}$ 、ah) $-S(O)_mNH_2$ 、ai) $-S(O)_mNH(C_{1-20} \text{烷基})$ 、aj) $-S(O)_mN(C_{1-20} \text{烷基})_2$ 、ak) $-S(O)_mNH(C_{6-14} \text{芳基})$ 、al) $-S(O)_mN(C_{1-20} \text{烷基})-C_{6-14} \text{芳基}$ 、am) $-S(O)_mN(C_{6-14} \text{芳基})_2$ 、an) $-SiH_3$ 、ao) $-SiH(C_{1-20} \text{烷基})_2$ 、ap) $-SiH_2(C_{1-20} \text{烷基})$ 、ar) $-Si(C_{1-20} \text{烷基})_3$ 、as) $C_{1-20} \text{烷基}$ 、at) $C_{2-20} \text{烯基}$ 、au) $C_{2-20} \text{炔基}$ 、av) $C_{1-20} \text{烷氧基}$ 、aw) $C_{1-20} \text{烷硫基}$ 、ax) $C_{1-20} \text{鹵烷基}$ 、ay) $C_{3-14} \text{環烷基}$ 、az) $C_{6-14} \text{芳基}$ 、ba) 3-14員環雜烷基，或 bb) 5-14員雜芳基；

Y在每次出現時為 a) 二價 C_{1-20} 烷基、b) 二價 C_{1-20} 鹵烷基，或 c) 共價鍵；

m 在每次出現時為0、1或2；且

q 在每次出現時為在1至20之範圍內的整數。

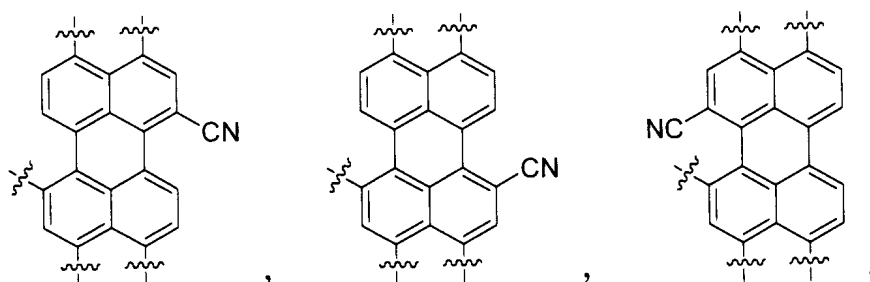
在各種實施例中， $\pi-1$ 在每次出現時可選自：

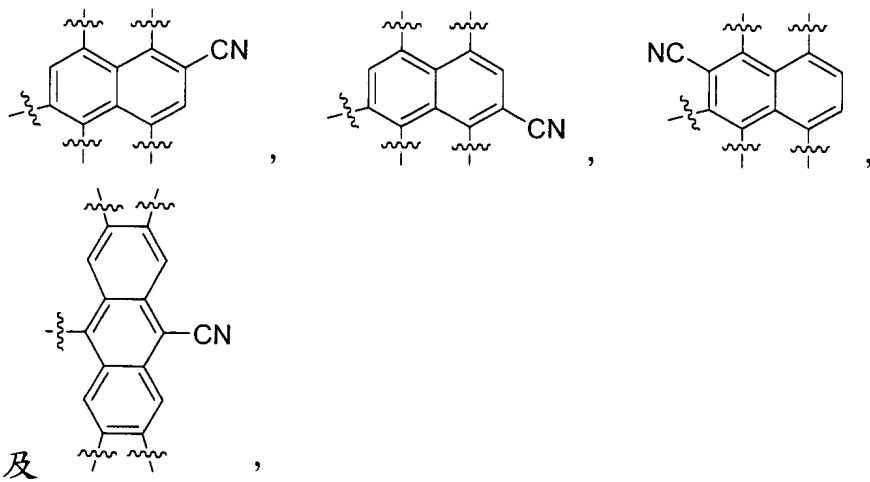


其中a、b、c、d、e、f及g如本文中所定義。

在一些實施例中，a、b、c、d、e、f及g在每次出現時獨立地為CH、CR^a、SiH、SiR^a、N或P，其中R^a係如本文中所定義。舉例而言，a、b、c、d、e、f及g在每次出現時可獨立地為CH、CR^a或N，其中R^a係如本文中所定義。在某些實施例中，a、b、c、d、e、f及g中一或多者可為N。在某些實施例中，a、b、c、d、e、f及g在每次出現時可獨立地為CH或CR^a，其中R^a係如本文中所定義。

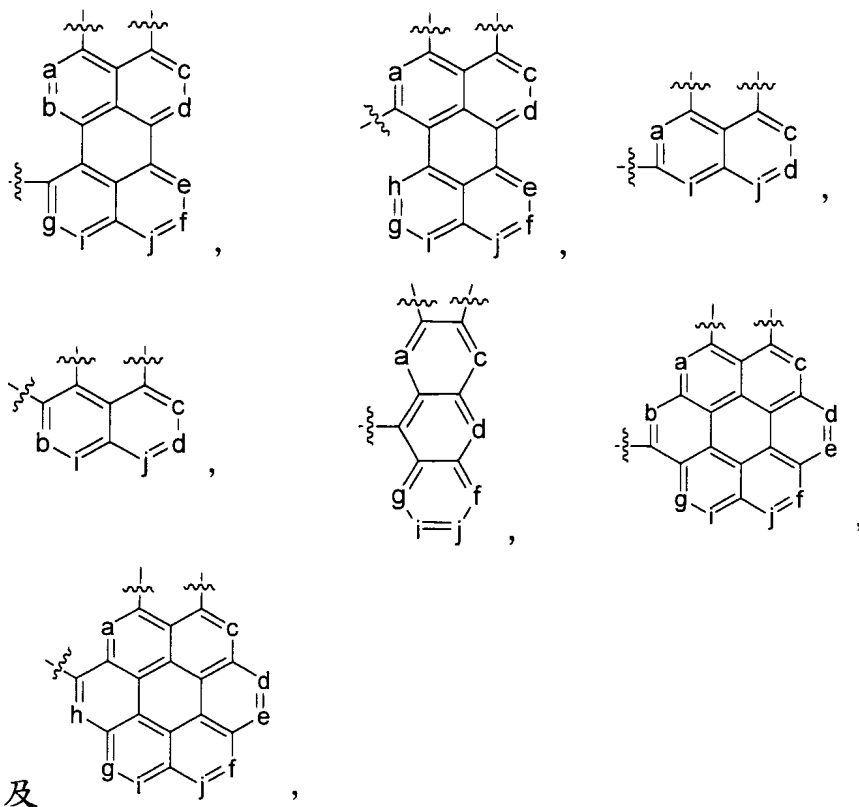
在一些實施例中， $\pi-1$ 在每次出現時可選自：





其各自視情況經 1-4 個 R^a 取代，其中 R^a 係如本文中所定義。

在各種實施例中， $\pi-1'$ 在每次出現時可選自：

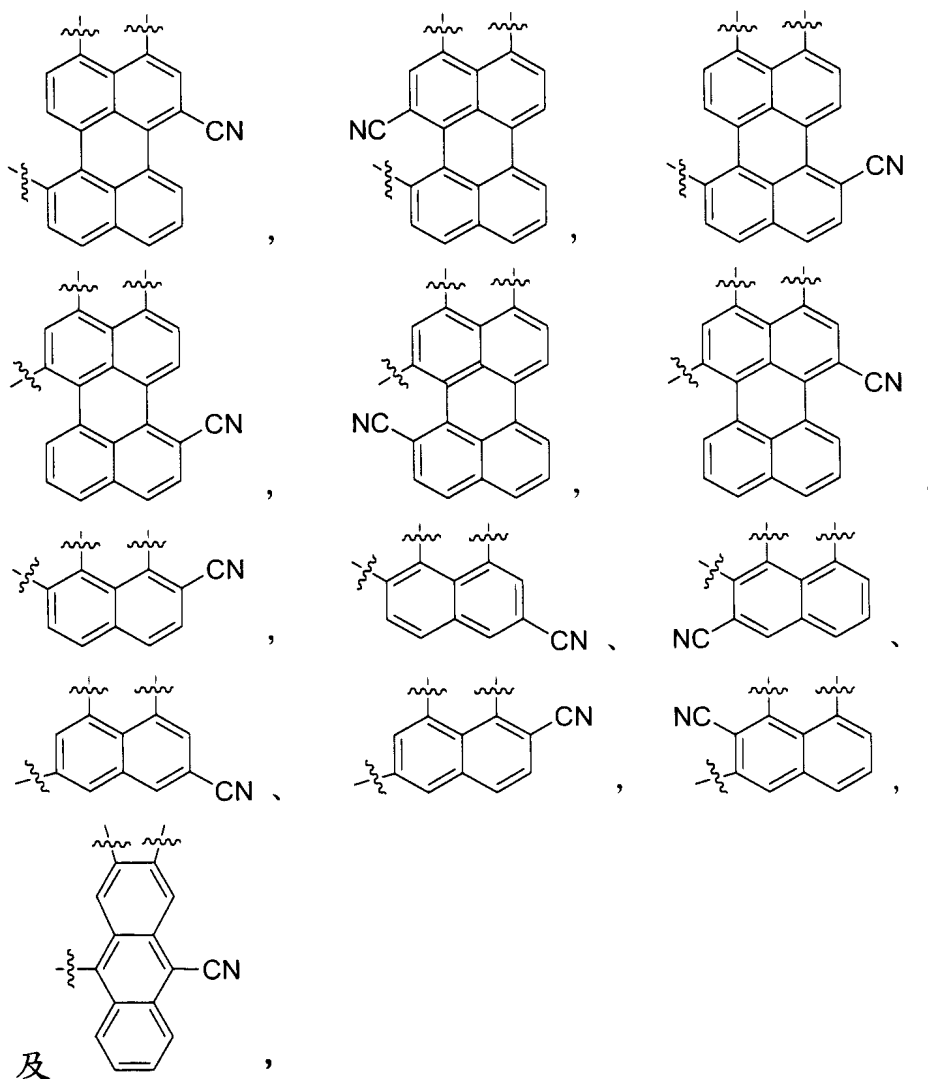


其中 a、b、c、d、e、f、g、h、i 及 j 係如本文中所定義。

在一些實施例中，a、b、c、d、e、f、g、h、i 及 j 在每次出現時獨立地為 CH、 CR^a 、SiH、 SiR^a 、N 或 P，其中 R^a 係如本文中所定義。舉例而言，a、b、c、d、e、f、g、

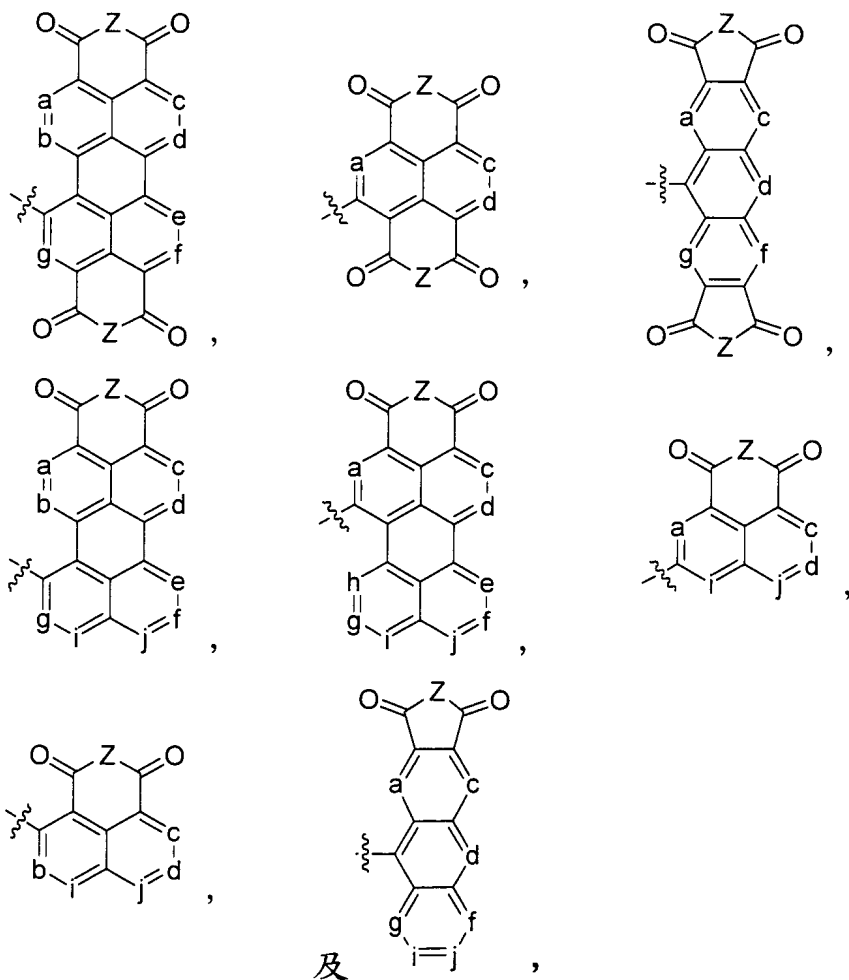
h、i及j在每次出現時可獨立地為CH、CR^a或N，其中R^a係如本文中所定義。在某些實施例中，a、b、c、d、e、f、g、h、i及j中一或多者可為N。在某些實施例中，a、b、c、d、e、f、g、i及j在每次出現時可獨立地為CH或CR^a，其中R^a係如本文中所定義。

在一些實施例中，π-1'在每次出現時可選自：

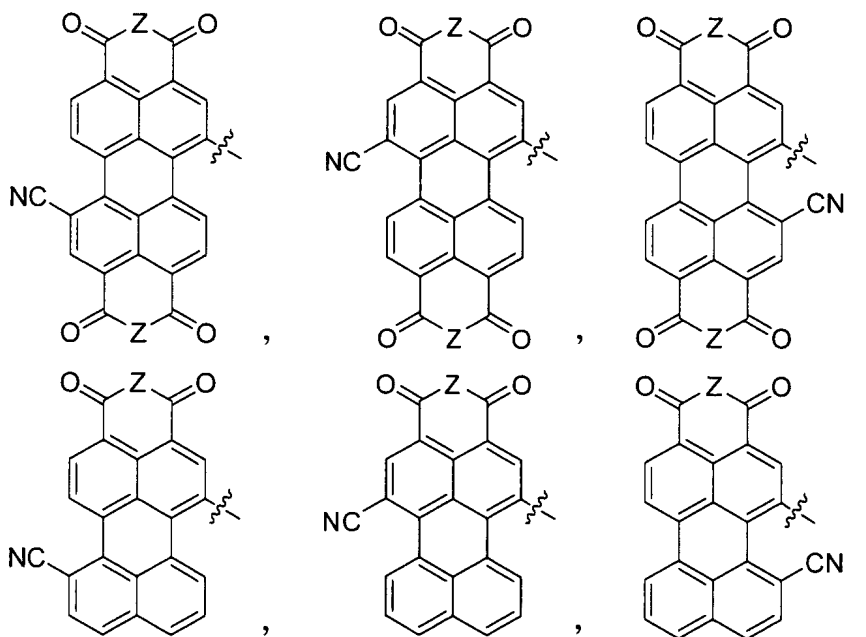


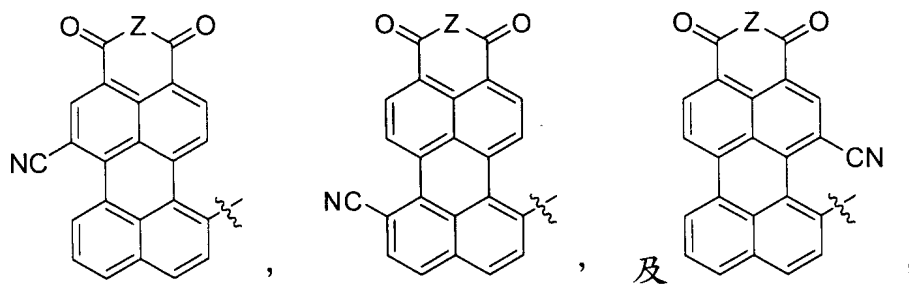
其各自視情況經1-4個R^a取代，其中R^a係如本文中所定義。

在各種實施例中，Q及Q'在每次出現時可獨立地選自：



其中 a、b、c、d、e、f、g、h、i、j 及 Z 係如本文中所定義。在一些實施例中，Q 與 Q' 可相同。在一些實施例中，Q 與 Q' 可不同。在某些實施例中，Q 及 Q' 可獨立地選自：





其中Z係如本文中所定義。

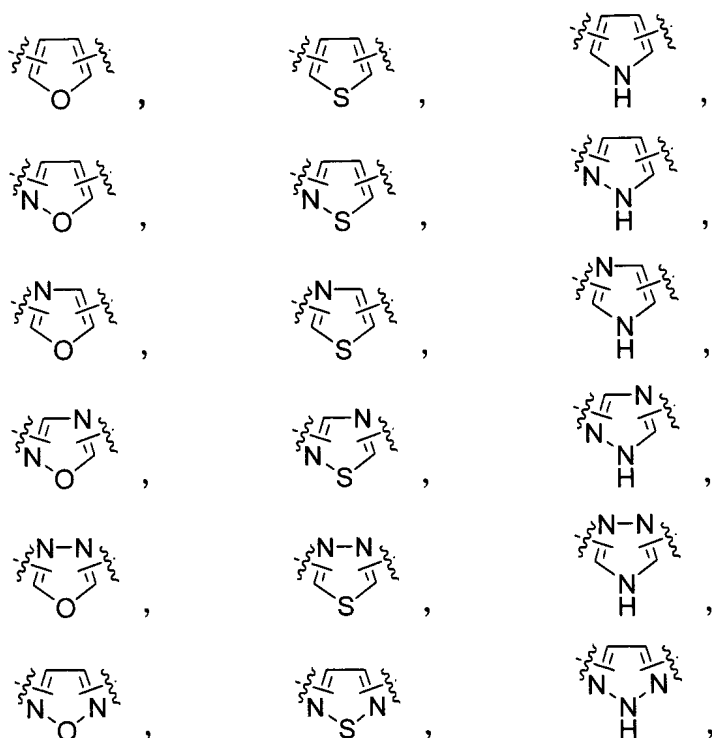
在各種實施例中，Z在每次出現時可為O、NR^b或CR^cR^d，其中R^b、R^c及R^d係如本文中所定義。舉例而言，Z在每次出現時可為O或NR^b，其中R^b係如本文中所定義。在一些實施例中，Z可為NR^b，其中R^b係如本文中所定義。在一些實施例中，Z可為O。在某些實施例中，各Z可為NR^b且R^b係如本文中所定義。

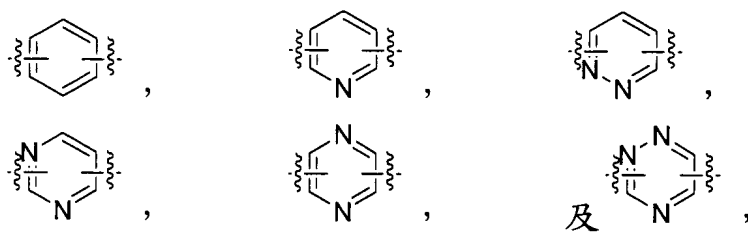
在各種實施例中，R^a在每次出現時可為鹵素、-CN、-NO₂、-OR^f、-NR^gR^h、-S(O)_mR^g、-S(O)_mOR^g、-S(O)_mNR^gR^h、-C(O)R^g、-C(O)OR^f、-C(O)NR^gR^h、C₁₋₂₀烷基、C₃₋₁₄環烷基、C₆₋₁₄芳基、3-14員環雜烷基或5-14員雜芳基，其中C₁₋₂₀烷基、C₃₋₁₄環烷基、C₆₋₁₄芳基、3-14員環雜烷基及5-14員雜芳基中每一者各視情況可經1-4個Rⁱ基團取代，其中m、R^f、R^g、R^h及Rⁱ係如本文中所定義。在一些實施例中，R^a在每次出現時可為鹵素、-CN、-NO₂、-OR^f或-NR^gR^h，其中R^f、R^g及R^h係如本文中所定義。舉例而言，R^a在每次出現時可為-CN、F、Cl、Br或I。在一些實施例中，R^a在每次出現時可為C₁₋₁₀烷基、C₃₋₁₄環烷基、C₆₋₁₄芳基、3-14員環雜烷基或5-14員雜芳基，其中各自視情況可經1-4個Rⁱ基團取代，且Rⁱ係如本文中所定義。

在各種實施例中， R^b 在每次出現時可為H、 $-(CH_2CH_2O)_qH$ 、 $-(CH_2CH_2O)_q-CH_3$ 、 $-C(O)R^g$ 、 $-C(O)NR^gR^h$ 、 $-S(O)_mR^g$ 、 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 C_{1-20} 烷氧基、 $-Y-C_{3-14}$ 環烷基、 $-Y-C_{6-14}$ 芳基、 $-Y-3-14$ 員環雜烷基或 $-Y-5-14$ 員雜芳基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{3-14} 環烷基、 C_{6-14} 芳基、 $3-14$ 員環雜烷基及 $5-14$ 員雜芳基中每一者各視情況可經1-4個 R^i 基團取代，其中 m 、 q 、 R^g 、 R^h 、 R^i 及 Y 係如本文中所定義。在一些實施例中， R^b 在每次出現時可為H、 $-(CH_2CH_2O)_qH$ 、 $-(CH_2CH_2O)_q-CH_3$ 、 $-C(O)R^g$ 、 $-C(O)NR^gR^h$ 或 $-S(O)_mR^g$ ，其中 m 、 q 、 R^g 及 R^h 係如本文中所定義。在一些實施例中， R^b 在每次出現時可選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 $-Y-C_{3-14}$ 環烷基、 $-Y-C_{6-14}$ 芳基、 $-Y-3-14$ 員環雜烷基及 $-Y-5-14$ 員雜芳基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 C_{3-14} 環烷基、 C_{6-14} 芳基、 $3-14$ 員環雜烷基及 $5-14$ 員雜芳基中每一者各視情況可經1-4個 R^i 基團取代，其中 Y 及 R^i 係如本文中所定義。在某些實施例中， R^b 在每次出現時可選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基及 C_{2-20} 炔基，其中 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基及 C_{2-20} 炔基中每一者各視情況可經1-4個 R^i 基團取代，其中 R^i 係如本文中所定義。舉例而言， R^b 在每次出現時可為視情況經1-4個 R^i 基團取代之 C_{1-20} 烷基，其中 R^i 係如本文中所定義。在特定實施例中， R^b 在每次出現時可為甲基、乙基、丙基、丁基、戊基、己基、庚基或辛基。舉例而言， R^b 在每次出現時可為己基(包括甲基戊基及其

類似基團)、庚基或辛基(包括乙基己基及其類似基團)。

在各種實施例中，B及B'可獨立地選自-O-、-S-、-NR^e-、-C(O)-、-C(O)O-、-OC(O)-、-C(O)NR^e-、-NR^eC(O)-及共價鍵，其中R^e係如本文中所定義。在各種實施例中，B及B'可獨立地選自二價C₃₋₁₄環烷基、二價C₆₋₁₄芳基、二價3-14員環雜烷基及二價5-14員雜芳基，其中二價C₃₋₁₄環烷基、二價C₆₋₁₄芳基、二價3-14員環雜烷基及二價5-14員雜芳基中每一者各視情況可經1-4個Rⁱ基團取代，其中Rⁱ係如本文中所定義。在一些實施例中，B及B'可獨立地選自二價C₆₋₁₄芳基、二價5-14員雜芳基及共價鍵，其中二價C₆₋₁₄芳基及二價5-14員雜芳基中每一者各視情況可經1-4個Rⁱ基團取代，其中Rⁱ係如本文中所定義。舉例而言，在B及B'獨立地選自二價C₆₋₁₄芳基及二價5-14員雜芳基之實施例中，二價C₆₋₁₄芳基及二價5-14員雜芳基可獨立地選自：

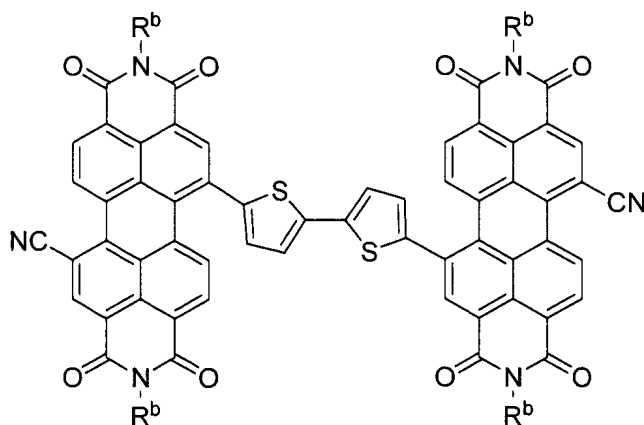


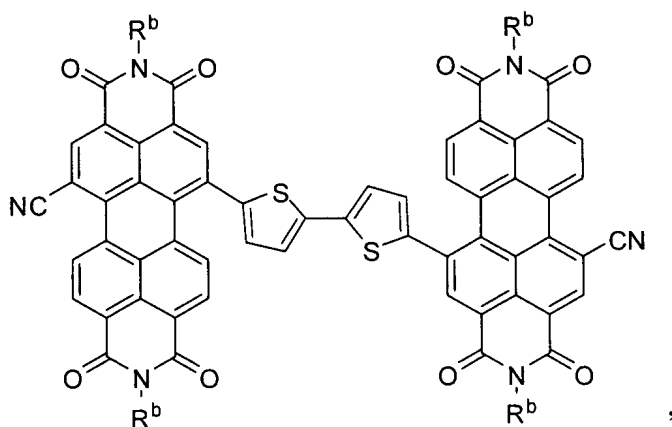
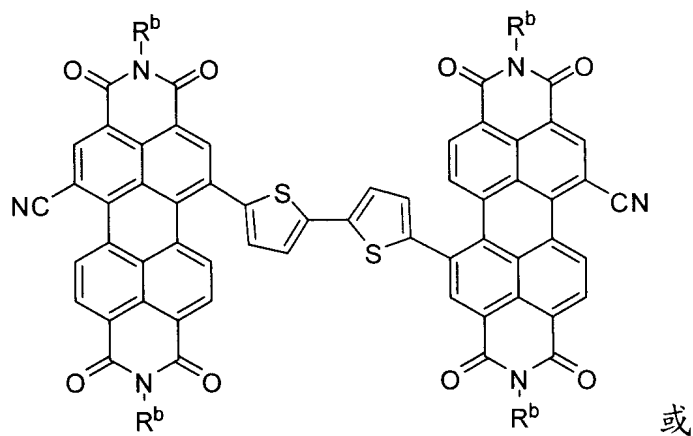


其中此等基團中每一者各視情況可與C₆₋₁₄芳基或5-14員雜芳基(包括苯基或者五員或六員雜芳基)稠合。在某些實施例中，B及B'可獨立地選自噻吩基、呋喃基、吡咯基、苯基、吡啶基、異噻唑基、噻二唑基、苯并噻吩基、苯并異噻唑基、苯并噻二唑基及吡啶基，其中每一者各視情況可經1-4個Rⁱ基團取代，其中Rⁱ係如本文中所定義。

在一些實施例中，本教示之化合物可為對稱的。在一些實施例中，本教示之化合物可為不對稱的。在不受任何特定理論約束的情況下，咸信某些化合物之對稱性可有助於此等化合物結晶。因此可使用此等化合物之對稱性調節來調整所得半導體材料之電子特性。因此，在某些實施例中，本教示之化合物可為結晶。在某些實施例中，本教示可提供具有可調電子特性之半導體材料。舉例而言，此等半導體材料之電子特性可以連續方式或以逐步方式變化。

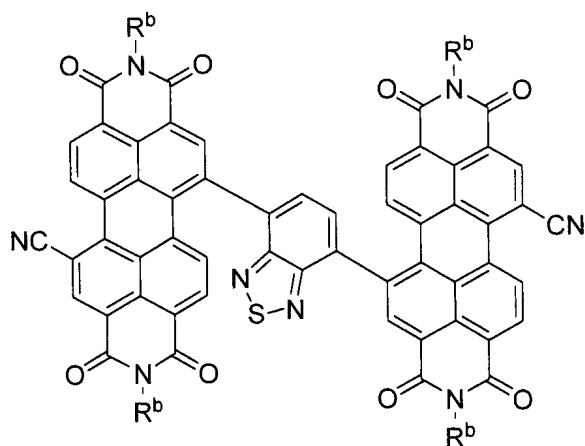
在一些實施例中，本教示之化合物可具有下式：

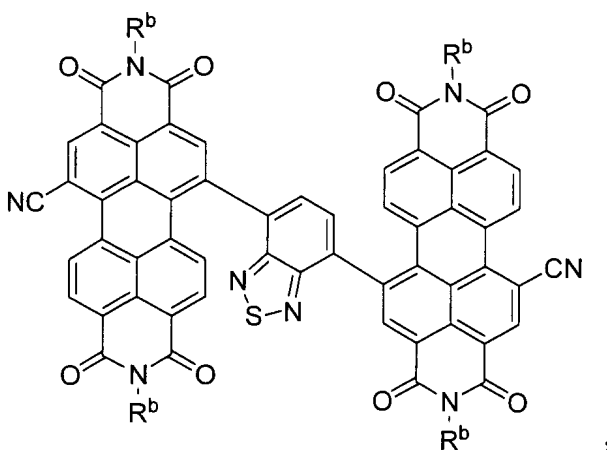
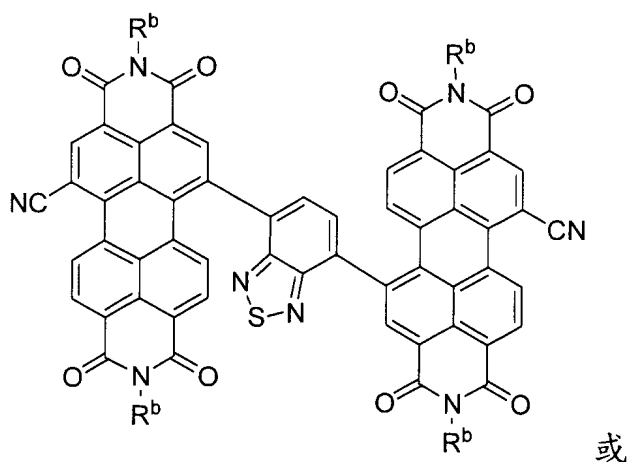




其中 R^b 係如本文中所定義。此等化合物在本文中可稱為雙(芘-二甲醯亞胺)-聯噻吩(「BPDI-BT」)。舉例而言，各 R^b 可為直鏈或支鏈烷基，諸如正辛基、乙基己基(例如2-乙基己基)或甲基戊基(例如1-甲基戊基)。

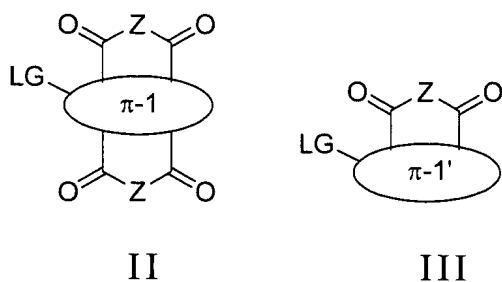
在一些實施例中，本教示之化合物可具有下式：





其中 R^b 係如本文中所定義。此等化合物在本文中可稱為雙(芘-二甲醯亞胺)-苯并噻二唑(「BPDI-BTZ」)。舉例而言，各 R^b 可為直鏈或支鏈烷基，諸如正辛基、乙基己基(例如2-乙基己基)或甲基戊基(例如1-甲基戊基)。

在另一態樣中，本教示提供製備式I化合物之方法。在各種實施例中，該方法可包括使式II或式III化合物或該兩種化合物：



經歷偶合反應，

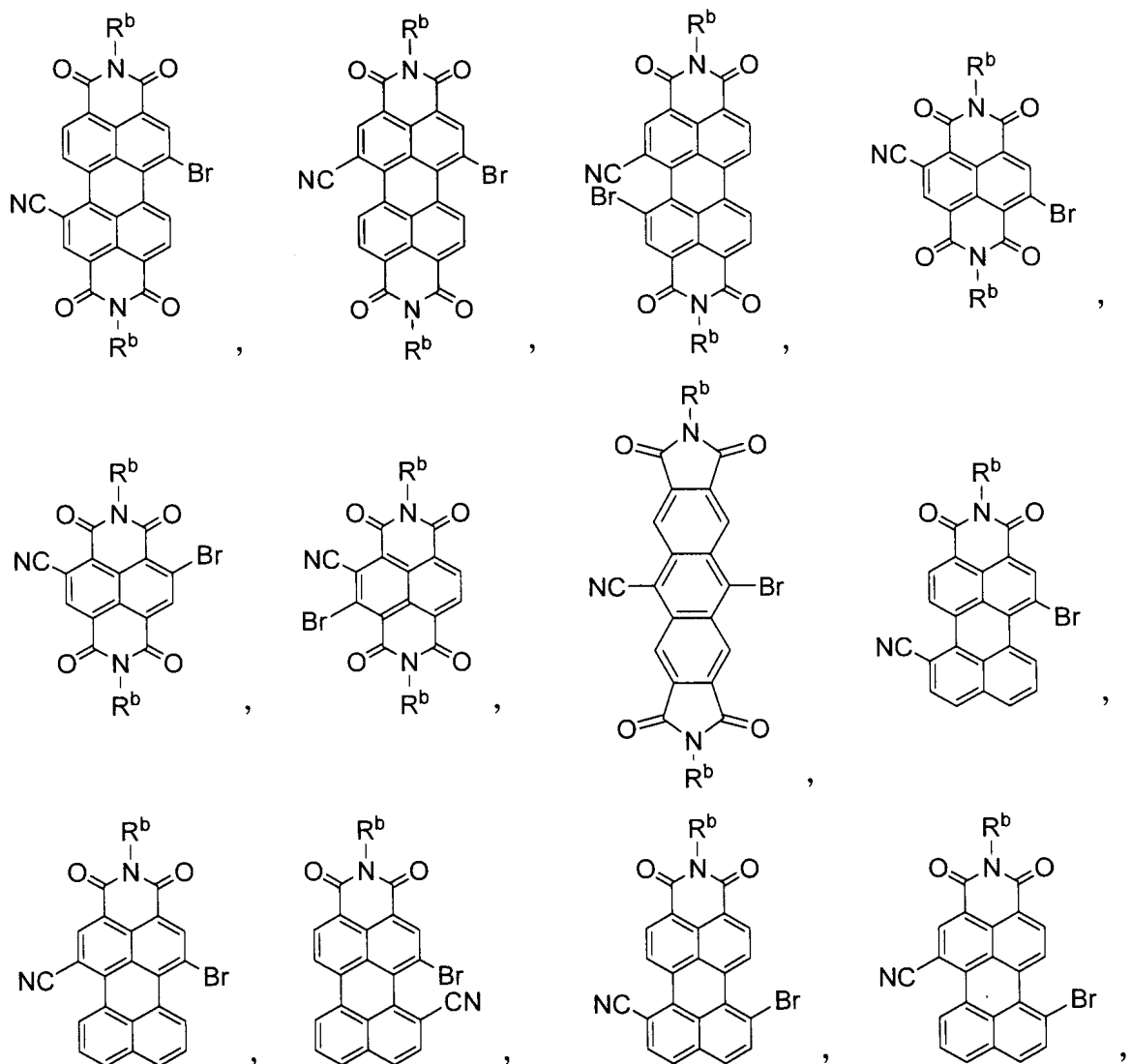
其中：

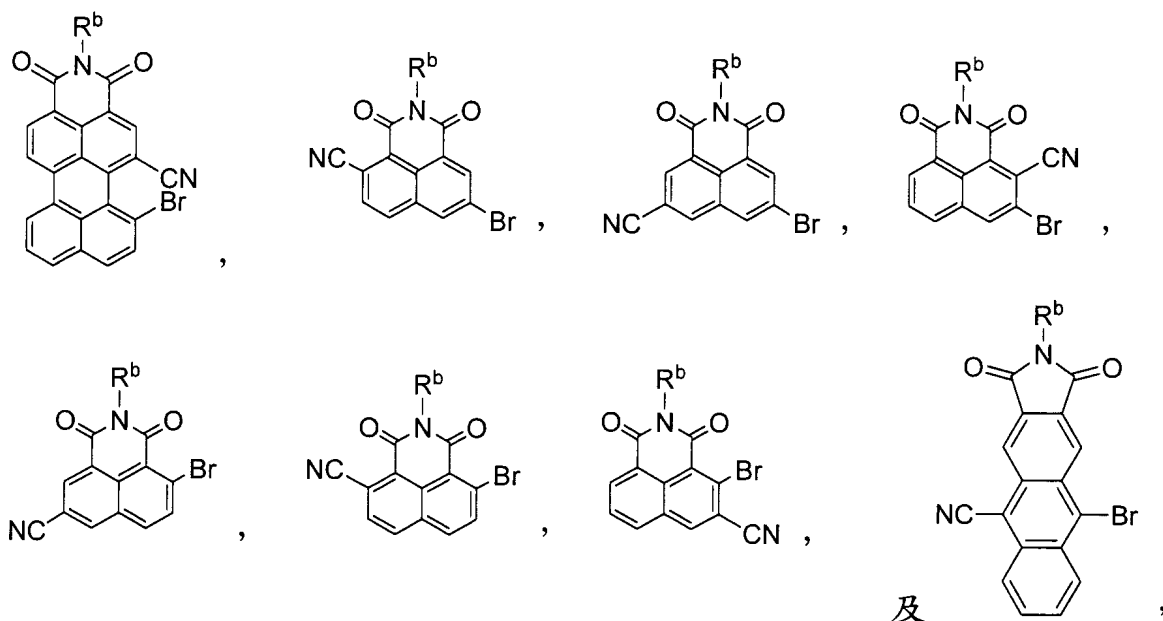
LG為脫離基；且

$\pi-1$ 、 $\pi-1'$ 及Z係如本文中所定義。

在一些實施例中，LG在每次出現時可為鹵素或疊氮化物。在某些實施例中，LG在每次出現時可為鹵素，包括Cl、Br或I。在特定實施例中，LG在每次出現時可為Br。

因此，舉例而言，式II或式III化合物可獨立地選自：





其中 R^b 係如本文中所定義。

本教示之化合物可根據流程1中概述之程序，例如使用流程3及4中所述之反應，自根據與流程2中所述類似之程序製備之化合物，或自市售起始物質、文獻中已知之化合物，或經由其他易於製備之中間物，藉由採用熟習此項技術者已知之標準合成方法及程序來製備。製備有機分子以及官能基轉化及處理之標準合成方法及程序可易於自相關科技文獻或自該領域內之標準教科書獲得。應瞭解，當給定典型或較佳加工條件(亦即反應溫度、時間、反應物之莫耳比、溶劑、壓力等)時，除非另作說明，否則亦可使用其他加工條件。最佳反應條件可隨所用特定反應物或溶劑而改變，但此等條件可由熟習此項技術者藉由常規優化程序來確定。熟習有機合成技術者將認識到，出於優化本文所述化合物之形成之目的可變化所提出之合成步驟之性質及順序。

可根據在此項技術中已知之任何合適方法來監測本文所

述之方法。舉例而言，產物形成可藉由光譜手段(諸如核磁共振波譜法(NMR，例如 ^1H 或 ^{13}C)、紅外光譜法(IR)、分光光度測定法(例如UV-可見光)、質譜分析(MS))或藉由層析(諸如高壓液相層析(HPLC)、氣相層析(GC)、凝膠滲透層析(GPC)或薄層層析(TLC))來監測。

本文所述之反應或方法可在熟習有機合成技術者可易於選擇之合適溶劑中進行。在進行反應之溫度(亦即可在溶劑之凝固溫度至溶劑之沸點溫度的範圍內之溫度)下，合適溶劑通常實質上不與反應物、中間物及/或產物反應。給定反應可在一種溶劑中或一種以上溶劑之混合物中進行。視特定反應步驟而定，可選擇用於特定反應步驟之合適溶劑。

一般可根據流程1來製備包括BPDI-BT及BPDI-BTZ之式I化合物。如流程1中所示，可使包括脫離基X之多環化合物(亦即Q-X及/或Q'-X)與鍵聯基L之前驅體(亦即Y-L-Y，其中各Y為脫離基)進行偶合反應以提供本教示之化合物。如本文中所示，「偶合」或「偶合反應」係指兩個或兩個以上分子反應以形成一種新分子之化學反應。在一些實施例中，偶合反應可在不存在催化劑之情況下發生。在一些實施例中，偶合反應可由一或多種催化劑促進。偶合反應之實例可包括卡斯特羅-史蒂芬偶合(Castro-Stephens coupling)、熊田偶合(Kumada coupling)、赫克偶合(Heck coupling)、茵頭偶合(Sonogashira coupling)、根岸偶合(Negishi coupling)、斯蒂爾偶合(Stille coupling)、鈴木偶

合(Suzuki coupling)、檜山偶合(Hiyama coupling)、保查德偶合(Buchard coupling)、福山偶合(Fukuyama coupling)及其類似偶合反應。以上名稱反應之化學討論於Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions(F. Diederich等人編, Wiley-VCH, Weinheim, 1998)(其整個揭示內容係以引用的方式併入本文中用於所有目的)中。

本教示之化合物可用以製備半導體材料(例如組合物及複合物),而該等半導體材料又可用以製造各種製品、結構及器件。在一些實施例中,併有本教示之一或多種化合物的半導體材料可顯示n型半導體活性。

因為本文所揭示之某些實施例可溶於常用溶劑中且在環境條件下穩定(「環境穩定」),所以本教示可在製造及/或使用電器件(諸如薄膜半導體、場效器件、有機發光二極體(OLED)、有機光伏打裝置、光偵測器、電容器及感應器)方面提供加工及操作優勢。如本文中所示,當至少0.1 mg化合物可溶解於1 mL溶劑中時,可認為該化合物可溶於溶劑中。常見有機溶劑之實例包括石油醚;乙腈;芳族烴,諸如苯、甲苯、二甲苯及均三甲苯;酮,諸如丙酮及甲基乙基酮;醚,諸如四氫呋喃、二噁烷、雙(2-甲氧基乙基)醚、乙醚、二異丙醚及第三丁基甲醚;醇,諸如甲醇、乙醇、丁醇及異丙醇;脂族烴,諸如己烷;酯,諸如乙酸甲酯、乙酸乙酯、甲酸甲酯、甲酸乙酯、乙酸異丙酯及乙酸丁酯;醯胺,諸如二甲基甲醯胺及二甲基乙醯胺;亞砷,諸如二甲亞砷;鹵化脂族烴及芳族烴,諸如二氯甲

烷、氯仿、二氯乙烷、氯苯、二氯苯及三氯苯；及環狀溶劑，諸如環戊酮、環己酮及2-甲基吡咯啉酮。

包括各種溶液加工技術之各種沈積技術已用於有機電子設備。舉例而言，大量印刷電子技術已集中於噴墨印刷，主要因為此技術提供對特徵位置及多層定位(multilayer registration)之較大控制。噴墨印刷為非接觸式方法，其提供不需要預成形母板(與接觸式印刷技術相比)以及數位控制墨噴射藉此提供按需噴墨印刷(drop-on-demand printing)的益處。微分配(Micro-dispensing)為另一非接觸式印刷方法。然而，接觸式印刷技術具有非常適合極快捲軸式加工(roll-to-roll processing)之優勢。例示性接觸式印刷技術包括(但不限於)網板印刷、凹板印刷、平版印刷、柔性印刷、石版印刷、移印及微接觸式印刷。如本文中所示，「印刷」包括非接觸式方法，諸如噴墨印刷、微分配及其類似方法；及接觸式方法，諸如網板印刷、凹板印刷、平版印刷、柔性印刷、石版印刷、移印、微接觸式印刷及其類似方法。其他溶液加工技術包括(例如)旋塗、滴鑄、區域澆鑄、浸塗、刮塗或噴霧。

利用本文所揭示之化合物的包括電子器件、光學器件及光電子器件(諸如場效電晶體(例如薄膜電晶體)、光伏打裝置、有機發光二極體(OLED)、互補金屬氧化物半導體(CMOS)、互補反相器、D型正反器、整流器及環形振盪器)之多種製品以及其製造方法亦在本教示之範疇內。

因此，本教示進一步提供製備半導體材料之方法。該等

方法可包括：製備包括一或多種溶解或分散於液體介質(諸如溶劑或溶劑混合物)中之本文所揭示之化合物的組合物；將該組合物沈積於基板上以提供半導體材料前驅；及加工(例如加熱)該半導體前驅體以提供包括本文所揭示之化合物的半導體材料(例如薄膜半導體)。在各種實施例中，液體介質可為有機溶劑、諸如水之無機溶劑，或其組合。在一些實施例中，組合物可另外包括一或多種獨立地選自以下各物之添加劑：清潔劑、分散劑、黏合劑、相容劑、固化劑、引發劑、保濕劑、消泡劑、濕潤劑、pH值調節劑、殺生物劑及抑菌劑。舉例而言，可包括界面活性劑及/或聚合物(例如，聚苯乙烯、聚乙烯、聚 α -甲基苯乙烯、聚異丁烯、聚丙烯、聚甲基丙烯酸甲酯及其類似物)作為分散劑、黏合劑、相容劑及/或消泡劑。在一些實施例中，沈積步驟可藉由印刷來進行，該印刷包括噴墨印刷及各種接觸式印刷技術(例如網板印刷、凹板印刷、平版印刷、移印、石版印刷、柔性印刷及微接觸式印刷)。在其他實施例中，沈積步驟可藉由旋塗、滴鑄、區域澆鑄、浸塗、刮塗或噴霧來進行。

本教示另外提供製品，諸如本文所述之各種器件，其包括具有本教示之半導體材料及基板組件及/或介電組件之複合物。基板組件可選自摻雜矽、氧化銦錫(ITO)、ITO塗布玻璃、ITO塗布聚醯亞胺或其他塑膠、單獨或塗布於聚合物或其他基板上之鋁或其他金屬、摻雜聚噻吩及其類似物。介電組件可自以下材料製備：諸如各種氧化物(例如

SiO₂、Al₂O₃、HfO₂)之無機介電材料、諸如各種聚合材料(例如聚碳酸酯、聚酯、聚苯乙烯、聚鹵乙烯、聚丙烯酸酯)之有機介電材料,及自組裝超晶格/自組裝奈米介電(SAS/SAND)材料(例如, Yoon, M-H.等人, PNAS, 102 (13): 4678-4682 (2005)中所述者,其整個揭示內容係以引用的方式併入本文中)以及混合有機/無機介電材料(例如,美國專利申請案第11/642,504號中所述者,其整個揭示內容係以引用的方式併入本文中)。在一些實施例中,介電組件可包括美國專利申請案第11/315,076號、第60/816,952號及第60/861,308號中所述之交聯聚合物摻合物,該等申請案中每一者之整個揭示內容係以引用的方式併入本文中。複合物亦可包括一或多個電接點。源極、汲極及閘極之合適材料包括金屬(例如Au、Al、Ni、Cu)、透明導電氧化物(例如ITO、IZO、ZITO、GZO、GIO、GITO)及導電聚合物(例如聚(3,4-伸乙二氧基噻吩)聚(苯乙烯磺酸酯)(PEDOT:PSS)、聚苯胺(PANI)、聚吡咯(PPy))。一或多種本文所述之複合物可包括在各種有機電子、光學及光電子器件(諸如有機薄膜電晶體(OTFT),尤其有機場效電晶體(OFET)以及感應器、電容器、單極電路、互補電路(例如反相電路)及其類似器件)中。

可使用本教示之化合物之其他製品為光伏打裝置或太陽能電池。本教示之化合物可顯示較寬光學吸收及/或明顯正向移動之還原電位,從而使其符合此等應用需要。因此,本文所述之化合物可在光伏打器件之設計中用作n型

半導體，該設計包括形成p-n接面之相鄰p型半導體材料。化合物可呈薄膜半導體之形式，其可沈積於基板上形成複合物。在此等器件中利用本教示之化合物係在熟習此項技術者之知識範圍內。

因此，本教示之另一態樣係關於製造併有本教示之半導體材料的有機場效電晶體之方法。本教示之半導體材料可用以製造各種類型之有機場效電晶體，包括頂閘極頂接觸式電容器結構、頂閘極底接觸式電容器結構、底閘極頂接觸式電容器結構及底閘極底接觸式電容器結構。圖5說明四種常見類型之OFET結構：頂接觸底閘極式結構(a)、底接觸底閘極式結構(b)、底接觸頂閘極式結構(c)及頂接觸頂閘極式結構(d)。如圖5中所示，OFET可包括介電層(例如，在圖5a、5b、5c及5d中分別展示為8、8'、8"及8''')、半導體層(例如，在圖5a、5b、5c及5d中分別展示為6、6'、6"及6''')、閘極接觸(例如，在圖5a、5b、5c及5d中分別展示為10、10'、10"及10''')、基板(例如，在圖5a、5b、5c及5d中分別展示為12、12'、12"及12''')，以及源極及汲極接觸(例如，在圖5a、5b、5c及5d中分別展示為2、2'、2"、2'''; 4、4'、4"及4''')。

在某些實施例中，可用本發明之化合物，在摻雜矽基板上，使用SiO₂作為介電質以頂接觸式幾何結構來製造OTFT器件。在特定實施例中，併有至少一種本教示之化合物的活性半導體層可在室溫下或在高溫下沈積。在其他實施例中，併有至少一種本教示之化合物的活性半導體層

可藉由如本文所述之旋塗或印刷來塗覆。對於頂接觸式器件而言，可在膜頂部上使用蔽蔭遮罩將金屬接觸圖案化。

提供以下實例以進一步說明且有助於瞭解本教示且不意欲以任何方式限制本發明。

除非另作說明，否則所有試劑均自商業來源購得且未經進一步純化便使用。無水四氫呋喃(THF)係自Na/二苯甲酮蒸餾得到。除非另作說明，否則使用習知希萊克技術(Schlenk technique)且在N₂下進行反應。實例1-4描述本教示之某些化合物及相關中間物之製備。表徵資料在一些情況下係藉由¹H NMR、¹³C NMR、元素分析及/或電子電離/電噴霧電離(EI/ESI)質譜提供。NMR光譜係記錄於Varian Unity Plus 500光譜儀(¹H, 500 MHz; ¹³C, 125 MHz)上。電噴霧質譜係以Thermo Finnegan型LCQ Advantage質譜儀進行。

實例1：製備5,5'-雙[N,N'-雙(1-甲基戊基)-1-氰基芘-3,4:9,10-雙(二甲醯亞胺)-7-基]-2,2'-聯噻吩(BPDI(1MP)-BT)

步驟1. 製備N,N'-雙(1-甲基戊基)-1-溴-7-氰基芘-3,4:9,10-雙(二甲醯亞胺)(PDI(1MP)BrCN)。

將N,N'-雙(1-甲基戊基)-1,7-二溴芘-3,4:9,10-雙(二甲醯亞胺)(PDI(1MP)-Br₂, 1.01 g, 1.41 mmol)及氰化銅(I)(CuCN)(0.13 g, 1.45 mmol)於二甲基甲醯胺(20 mL)中之混合物在150°C下攪拌2小時。在冷卻至室溫之後，將甲醇(40 mL)添加至反應混合物中且藉由過濾收集沈澱且以

甲醇洗滌。藉由使用氯仿:己烷(梯度:2:1至4:1(v/v))之混合物的矽膠管柱層析來純化此粗產物(0.88 g), 得到作為產物之暗紅色固體(0.26 g, 0.39 mmol, 產率27.7%)。

^1H NMR (CDCl_3 , 500 MHz): δ 9.69 (d, 1H, $J=8.0$ Hz), 9.46 (d, 1H, $J=8.0$ Hz), 8.97 (s, 1H), 8.91(s, 1H), 8.77-8.23 (m, 2H), 5.27-5.30 (m, 2H), 2.23 (s, br, 2H), 1.93 (s, br, 2H), 1.58-1.61 (m, 6H), 1.10-1.20 (m, 8H), 0.88 (s, br, 6H); 元素分析(計算值C, 67.07; H, 4.87; N, 6.34): 實驗值C, 67.47; H, 5.09; N, 6.42。

步驟2. 製備BPDI(1MP)-BT。

在氮氣下, 將PDI(1MP)BrCN(305 mg, 0.46 mmol)、5,5'-雙(三甲基錫烷基)-2,2'-聯噻吩(110 mg, 0.22 mmol)及二氯雙(三苯膦)鈀(II)($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$)(8.1 mg, 0.012 mmol)於無水甲苯(20 mL)中之混合物在90°C下攪拌40小時。在冷卻至室溫之後, 添加氟化鉀(1.5 g)於水(3 mL)中之溶液, 且將所得混合物在室溫下再攪拌2小時。以氯仿(100 mL \times 2)萃取反應混合物且合併有機層, 以水洗滌, 經無水硫酸鈉乾燥, 且濃縮。藉由矽膠管柱層析(二氯甲烷:乙酸乙酯, 梯度100:1至100:3, v/v)純化殘餘物, 得到作為產物之深色固體(221 mg, 0.17 mmol, 產率74.4%)。

^1H NMR (CDCl_3 , 500 MHz): δ 9.44-9.48 (m, 2H), 8.74-8.89 (m, 2H), 8.73-8.80 (m, 4H), 8.45-8.51 (m, 4H), 7.25-7.30 (m, 4H), 5.19-5.40 (m, 4H), 2.05-2.28 (m, 4H), 1.90-1.98 (m, 4H), 1.52-1.64 (m, 12H), 1.20-1.40 (m, 16H),

0.85-0.98 (m, 12H)；元素分析(計算值 C, 74.07; 5.15; N, 6.32)：實驗值 C, 74.12; H, 5.24; N, 6.18。

實例 2：製備 5,5'-雙[N,N'-雙辛基-1-氰基芘-3,4:9,10-雙(二甲醯亞胺)-7-基]-2,2'-聯噻吩(BPDI(8)-BT)

步驟 1. 製備 N,N'-雙辛基-1-溴-7-氰基芘-3,4:9,10-雙(二甲醯亞胺)(PDI(8)BrCN)。

將 N,N'-雙辛基-1,7-二溴-芘-3,4:9,10-雙(二甲醯亞胺)(PDI8-Br₂, 2.15 g, 2.78 mmol)及 CuCN(0.25 g, 2.79 mmol)於二甲基甲醯胺(50 mL)中之混合物在 150°C 下攪拌 2 小時。在冷卻至室溫之後，將甲醇(50 mL)添加至反應混合物中且藉由過濾收集沈澱且以甲醇洗滌。藉由矽膠管柱層析(氯仿：己烷，2:1至 4:1，v/v)純化此粗產物(1.81 g)，得到作為產物之暗紅色固體(0.44 g, 0.61 mmol, 產率 22.0%)。

¹H NMR (CDCl₃, 500 MHz): δ 9.68 (d, 1H, J=8.0 Hz), 9.45 (d, 1H, J=8.0 Hz), 8.97 (s, 1H), 8.91(s, 1H), 8.82 (d, 1H, J=8.0 Hz), 8.80 (d, 1H, J=8.0 Hz), 4.19-4.23 (m, 4H), 1.74-1.78 (m, 4H), 1.25-1.45 (m, 20H), 0.89 (t, 6H, J=7.0 Hz)；元素分析(計算值 C, 68.52; H, 5.61; N, 5.85)：實驗值 C, 68.72; H, 5.68; N, 5.81。

步驟 2. 製備 BPDI(8)-BT。

在氮氣下，將 PDI(8)BrCN(341 mg, 0.47 mmol)、5,5'-雙(三甲基錫烷基)-2,2'-聯噻吩(116 mg, 0.24 mmol)及 Pd(PPh₃)₂Cl₂(7.1 mg, 0.010 mmol)於無水甲苯(25 mL)中之

混合物在 90°C 下攪拌 44 小時。在冷卻至室溫之後，添加氯化鉀 (1.5 g) 於水 (3 mL) 中之溶液，且將所得混合物在室溫下再攪拌 2 小時。以氯仿 (100 mL×2) 萃取反應混合物且合併有機層，以水洗滌，經無水硫酸鈉乾燥，且濃縮。藉由矽膠管柱層析 (二氯甲烷：乙酸乙酯，100:1 至 100:3, v/v) 純化殘餘物，得到作為產物之深色固體 (240 mg, 0.17 mmol, 產率 70.2%)。

^1H NMR (CDCl_3 , 500 MHz): δ 9.46-9.52 (m, 2H), 8.89-8.90 (m, 2H), 8.75-8.80 (m, 4H), 8.42-8.52 (m, 4H), 7.25-7.30 (m, 4H), 4.13-4.23 (m, 8H), 1.71-1.80 (m, 8H), 1.20-1.48 (m, 40H), 0.85-0.92 (m, 12H); 元素分析 (計算值 C, 74.97; H, 5.87; N, 5.83): 實驗值 C, 74.89; H, 6.01; N, 5.54。

實例 3: 製備 5,5'-雙 [N,N'-雙 (2-乙基己基)-1-氰基芘-3,4:9,10-雙 (二甲醯亞胺)-7-基]-2,2'-聯噻吩 (BPDI(2EH)-BT)

步驟 1. 製備 N,N'-雙 (2-乙基己基)-1-溴-7-氰基芘-3,4:9,10-雙 (二甲醯亞胺) (PDI(2EH)BrCN)。

將 N,N'-雙 (2-乙基己基)-1,7-二溴-芘-3,4:9,10-雙 (二甲醯亞胺) (PDI2EH-Br₂, 1.94 g, 2.51 mmol) 及 CuCN (0.23 g, 2.57 mmol) 於二甲基甲醯胺 (45 mL) 中之混合物在 150°C 下攪拌 2 小時。在冷卻至室溫之後，將甲醇 (50 mL) 添加至反應混合物中且接著藉由過濾收集沈澱且以甲醇洗滌。藉由矽膠管柱層析 (氯仿：己烷，2:1 至 4:1, v/v) 純化此粗產物

(1.66 g)，得到作為產物之暗紅色固體(0.38 g，0.53 mmol，產率21.1%)。

^1H NMR (CDCl_3 , 500 MHz): δ 9.68 (d, 1H, $J=8.0$ Hz), 9.44 (d, 1H, $J=8.0$ Hz), 8.97 (s, 1H), 8.90 (s, 1H), 8.81 (d, 1H, $J=8.5$ Hz), 8.78 (d, 1H, $J=8.0$ Hz), 4.13-4.18 (m, 4H), 1.96 (s, br, 2H), 1.10-1.50 (m, 16H), 0.90-1.00 (m, 12H); 元素分析(計算值 C, 68.52; H, 5.61; N, 5.85): 實驗值 C, 68.60, H, 5.53; N, 5.84。

步驟2. 製備BPDI(2EH)-BT。

在氮氣下，將PDI(2EH)BrCN(324 mg，0.45 mmol)、5,5'-雙(三甲基錫烷基)-2,2'-聯噻吩(110 mg，0.23 mmol)及Pd(PPh_3) $_2$ Cl $_2$ (6.4 mg，0.009 mmol)於無水甲苯(20 mL)中之混合物在90°C下攪拌44小時。在冷卻至室溫之後，添加氟化鉀(1.5 g)於水(3 mL)中之溶液，且將所得混合物在室溫下再攪拌2小時。以氯仿(100 mL \times 2)萃取反應混合物且合併有機層，以水洗滌，經無水硫酸鈉乾燥，且濃縮。藉由矽膠管柱層析(二氯甲烷:乙酸乙酯，100:1至100:3，v/v)純化殘餘物，得到作為產物之深色固體(272 mg，0.19 mmol，產率83.7%)。

^1H NMR (CDCl_3 , 500 MHz): δ 9.45-9.48 (m, 2H), 8.90 (s, 2H), 8.74-8.81 (m, 4H), 8.46-8.52 (m, 4H), 7.25-7.30 (m, 4H), 4.05-4.19 (m, 8H), 1.94-2.00 (m, 4H), 1.25-1.41 (m, 32H), 0.85-0.98 (m, 24H); 元素分析(計算值 C, 74.97; H, 5.87; N, 5.83): 實驗值 C, 75.34; H, 6.04; N, 5.60。

實例 4：製備 5,5'-雙 [N,N'-雙 (1-甲基戊基)-1-氰基芘-3,4:9,10-雙 (二甲醯亞胺)-7-基]-4,7-苯并噻二唑 (BPDI(1MP)-BTZ)

在 Ar 下，將苯并噻二唑二酮酸酯 (38 mg, 0.098 mmol)、PDI1MPBrCN (0.13 g, 0.19 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (13 mg, 0.011 mmol)、碳酸鉀水溶液 (2 M, 4.5 mL)、三辛基甲基氯化銨 (aliquat 336) (20 mg) 及無水甲苯 (6 mL) 之混合物在 105°C 下攪拌 44 h。在冷卻至室溫之後，以 CHCl₃ (50 mL×2) 萃取反應混合物。以水洗滌經合併之有機層，經無水 Na₂SO₄ 乾燥，且在旋轉式蒸發器上濃縮。藉由以 CH₂Cl₂ (緩慢增至 CH₂Cl₂ : 乙酸乙酯 = 100:5, v/v) 作為溶離劑進行之矽膠管柱層析純化所得殘餘物，得到作為產物之橙/紅色固體 (4.0 mg, 0.0031 mmol, 產率 3.2%)。

¹H NMR (CDCl₃, 500 MHz): δ 9.78 (d, 2H, J=8 Hz), 8.89 (s, 2H), 8.71-8.82 (m, 10H), 5.25-5.34 (m, 4H), 2.18-2.28 (m, 4H), 1.90-2.00 (m, 4H), 1.58-1.68 (m, 12H), 1.20-1.40 (m, 16H), 0.86-0.92 (m, 12H)。

實例 5：熱特性

藉由差示掃描熱量測定 (圖 4) 檢查某些雙多環化合物 (例如二聚芘) 之熱特性。對於 BPDI(1MP)-BT，吸熱與放熱為可逆的且易於再現，指示熔融及再結晶過程。對於其他化合物而言，觀察到不可逆之熱過程。

實例 6：溶解度

所有單溴單氰基芘及二聚芘均足夠可溶以用於在諸如氣

仿、二甲苯、DCB及苯甲醚之習知有機溶劑中之處理。表1展示本教示之某些化合物在DCB中在60°C下之溶解度資料。

實例7：電晶體器件之製造及表徵

使用本教示之化合物作為半導體層來製造底閘極頂接觸OFET。將具有300 nm熱生長氧化物之特優級n摻雜矽晶圓(100)(Process Specialties Inc.)用作器件基板。將其以水、甲醇及丙酮沖洗，隨後進行薄膜澱積。藉由在室溫下在密閉容器中在氮氣下將矽晶圓暴露於六甲基二矽氮烷(HMDS)蒸氣隔夜來進行Si/SiO₂表面之三甲基矽烷基官能化。單溴單氟基芘之薄膜係藉由氣相沈積及旋塗來製備，且二聚芘之薄膜係僅藉由旋塗來製備。不同溶劑及溶劑混合物可用於半導體膜沈積。閘極區係藉由歐姆接觸與Si基板建立連接，且金源極及汲極接觸係藉由經由蔽蔭遮罩氣相沈積於半導體層上來製備。

所有電量測均在環境氛圍中進行。為允許與其他有機FET比較，藉由標準場效電晶體等式計算移動率(μ)。在傳統金屬-絕緣體-半導體FET(MISFET)中， I_{DS} 相對於 V_{DS} 之曲線在不同 V_G (其中 I_{DS} 為源極-汲極飽和電流， V_{DS} 為源極與汲極之間的電位，且 V_G 為閘極電壓)下通常為線性且飽和狀態。在大 V_{DS} 下，電流飽和且由下式給出：

$$(I_{DS})_{飽和} = (WC_i/2L)\mu(V_G - V_t)^2 \quad (1)$$

其中L及W分別為器件通道長度及寬度， C_i 為氧化物絕緣體之電容(對於約300 nm SiO₂而言為約10 nF/cm²)，且 V_t 為

臨限電壓。移動率(μ)係在飽和狀態下藉由重新整理等式(1)來計算：

$$\mu_{\text{飽和}} = (2I_{\text{DS}}L) / [WC_i(V_G - V_t)^2] \quad (2)$$

臨限電壓(V_t)可以 V_G 相對於 $(I_{\text{DS}})^{1/2}$ (在 $V_{\text{SD}} = -100$ V下)之圖的線性部分之X軸截距估算。

表2展示以單溴單氰基芘製造之某些OFET的器件特徵(包括場效移動率及電流開/關比)。當在環境條件中測試各器件時，所有半導體均顯示n通道(電子)輸送。

表3展示以二聚芘製造之某些OFET的器件特徵(包括場效移動率及電流開/關比)。當在環境條件中測試各器件時，所有半導體均顯示n通道(電子)輸送。觀察到所測試之二聚芘提供具有出乎意料之寬範圍之黏度的溶液，其有助於器件製造過程。

本教示涵蓋不脫離其精神或基本特徵之其他特定形式之實施例。因此前述實施例在所有方面均應視為說明性的而非對本文所述之本教示的限制。由此本發明之範疇係由隨附申請專利範圍而非前述說明指定，且其中意欲包含在申請專利範圍之等效物的含義及範圍內之所有變化。

【圖式簡單說明】

流程1展示製備本教示之化合物的通用合成流程；

流程2展示製備本教示之某些化合物(例如PDIBrCN)之例示性方法；

流程3展示製備本教示之某些化合物(例如BPDI-BT)之例示性方法；

流程4展示製備本教示之實施例(例如BPDI-BTZ)之例示性方法；

圖1展示本教示之一些實施例(例如 CDCl_3 中之PDIBrCN)之NMR光譜；

圖2展示本教示之一些實施例(例如 $\text{CDCl}_2\text{CDCl}_2$ 中之BPDI-BT)之NMR光譜；

圖3展示本教示之實施例(亦即 CDCl_3 中之BPDI-BTZ)之NMR光譜；

圖4展示本教示之一些實施例的差示掃描熱量測定(DSC)曲線；

圖5說明有機場效電晶體之不同構型；

圖6展示利用根據本教示之某些底閘極頂接觸式(bottom-gate top-contact)有機場效電晶體在環境條件下獲得之代表性輸出圖；

表1提供本教示之某些化合物在二氯苯中在 60°C 下之溶解度；

表2比較如在空氣中量測之某些底閘極頂接觸式OFET之器件特徵。此等OFET包括由本教示之化合物構成的半導體層。該等半導體層係自 CHCl_3 溶液真空沈積(頂部)或旋塗(底部)於經十八基三氯矽烷(OTS)處理之 SiO_2 基板上；及

表3比較某些底閘極頂接觸式OFET之器件特徵，該等OFET中每一者包括由本教示之化合物構成之半導體層。該等半導體層係由 $\text{CHCl}_3/\text{DCB}(98:2 \text{ w/w})$ 溶液旋塗於經OTS處理之 SiO_2 基板上。

【主要元件符號說明】

2、2'、2"、2'"	源極接觸
4、4'、4"、4'"	汲極接觸
6、6'、6"、6'"	半導體層
8、8'、8"、8'"	介電層
10、10'、10"、10'"	閘極接觸
12、12'、12"、12'"	基板

發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※ 申請案號： 98117835

※ 申請日： 98.5.27

※IPC 分類：H01L 51/00 (2006.01)
C07D 471/02 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

以芮(RYLENE)為主之半導體材料及其製備與使用方法

RYLENE-BASED SEMICONDUCTOR MATERIALS AND METHODS
OF PREPARATION AND USE THEREOF

二、中文發明摘要：

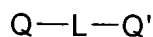
本發明揭示自多環化合物製備之新穎半導體材料。此等化合物可顯示高n型載子移動率及/或良好的電流調變特徵。另外，本教示之化合物可具有某些加工優勢，諸如溶液可加工性及/或在環境條件下之良好穩定性。

三、英文發明摘要：

Disclosed are new semiconductor materials prepared from polycyclic compounds. Such compounds can exhibit high n-type carrier mobility and/or good current modulation characteristics. In addition, the compounds of the present teachings can possess certain processing advantages such as solution-processability and/or good stability at ambient conditions.

七、申請專利範圍：

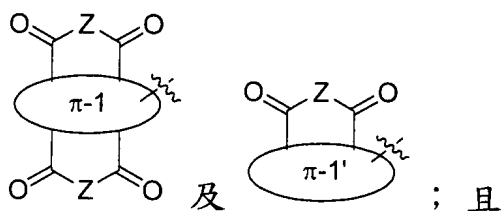
1. 一種具有式I之化合物：



I

其中：

Q及Q'獨立地選自：



L具有式A-B-A'或B-A-B'；

其中 $\pi-1$ 及 $\pi-1'$ 獨立地為視情況經1-8個 R^a 基團取代之多環部分；

Z在每次出現時係選自 a) O、b) S、c) NR^b 、d) $C(O)$ 及 e) CR^cR^d ；

A及A'獨立地選自 a) 二價 C_{1-20} 烷基、b) 二價 C_{2-20} 烯基、c) 二價 C_{2-20} 炔基、d) 二價 C_{1-20} 鹵烷基、e) 二價 C_{1-20} 烷氧基及f) 共價鍵，其中a)-e)中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代；

B及B'獨立地選自 a) -O-、b) -S-、c) $-NR^e-$ 、d) $-C(O)-$ 、e) $-C(O)O-$ 、f) $-OC(O)-$ 、g) $-C(O)NR^e-$ 、h) $-NR^eC(O)-$ 、i) 二價 C_{3-14} 環烷基、j) 二價 C_{6-14} 芳基、k) 二價3-14員環雜烷基、l) 二價5-14員雜芳基及m) 共價鍵，其中i)-l)中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代；

R^a 在每次出現時為 a) 鹵素、b) $-CN$ 、c) $-NO_2$ 、d) $-OR^f$ 、

e) $-\text{SR}^f$ 、f) $-\text{NR}^g\text{R}^h$ 、g) $-\text{N}(\text{O})\text{R}^g\text{R}^h$ 、h) $-\text{S}(\text{O})_m\text{R}^g$ 、i) $-\text{S}(\text{O})_m\text{OR}^g$ 、j) $-\text{S}(\text{O})_m\text{NR}^g\text{R}^h$ 、k) $-\text{C}(\text{O})\text{R}^g$ 、l) $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^f$ 、m) $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、n) $-\text{C}(\text{S})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、o) $-\text{SiH}_3$ 、p) $-\text{SiH}(\text{C}_{1-20}\text{烷基})_2$ 、q) $-\text{SiH}_2(\text{C}_{1-20}\text{烷基})$ 、r) $-\text{Si}(\text{C}_{1-20}\text{烷基})_3$ 、s) $\text{C}_{1-20}\text{烷基}$ 、t) $\text{C}_{2-20}\text{烯基}$ 、u) $\text{C}_{2-20}\text{炔基}$ 、v) $\text{C}_{1-20}\text{鹵烷基}$ 、w) $-\text{Y}-\text{C}_{3-14}\text{環烷基}$ 、x) $-\text{Y}-\text{C}_{6-14}\text{芳基}$ 、y) $-\text{Y}-3-14\text{員環雜烷基}$ 或z) $-\text{Y}-5-14\text{員雜芳基}$ ，其中該 $\text{C}_{1-20}\text{烷基}$ 、該 $\text{C}_{2-20}\text{烯基}$ 、該 $\text{C}_{2-20}\text{炔基}$ 、該 $\text{C}_{3-14}\text{環烷基}$ 、該 $\text{C}_{6-14}\text{芳基}$ 、該 $3-14\text{員環雜烷基}$ 及該 $5-14\text{員雜芳基}$ 中每一者各視情況經 $1-4$ 個 R^i 基團取代；

R^b 在每次出現時為 a) H 、b) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q\text{H}$ 、c) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q-\text{CH}_3$ 、d) $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^f$ 、e) $-\text{C}(\text{O})\text{R}^g$ 、f) $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、g) $-\text{C}(\text{S})\text{OR}^f$ 、h) $-\text{C}(\text{S})\text{R}^g$ 、i) $-\text{C}(\text{S})\text{NR}^g\text{R}^h$ 、j) $-\text{S}(\text{O})_m\text{R}^g$ 、k) $-\text{S}(\text{O})_m\text{OR}^g$ 、l) $\text{C}_{1-20}\text{烷基}$ 、m) $\text{C}_{2-20}\text{烯基}$ 、n) $\text{C}_{2-20}\text{炔基}$ 、o) $\text{C}_{1-20}\text{烷氧基}$ 、p) $-\text{Y}-\text{C}_{3-14}\text{環烷基}$ 、q) $-\text{Y}-\text{C}_{6-14}\text{芳基}$ 、r) $-\text{Y}-3-14\text{員環雜烷基}$ 或s) $-\text{Y}-5-14\text{員雜芳基}$ ，其中該 $\text{C}_{1-20}\text{烷基}$ 、該 $\text{C}_{2-20}\text{烯基}$ 、該 $\text{C}_{2-20}\text{炔基}$ 、該 $\text{C}_{1-20}\text{烷氧基}$ 、該 $\text{C}_{3-14}\text{環烷基}$ 、該 $\text{C}_{6-14}\text{芳基}$ 、該 $3-14\text{員環雜烷基}$ 及該 $5-14\text{員雜芳基}$ 中每一者各視情況經 $1-4$ 個 R^i 基團取代；

R^c 及 R^d 在每次出現時獨立地為 a) H 、b) 鹵素、c) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q\text{H}$ 、d) $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q-\text{CH}_3$ 、e) $\text{C}_{1-20}\text{烷氧基}$ 、f) $\text{C}_{1-20}\text{烷基}$ 、g) $\text{C}_{2-20}\text{烯基}$ 、h) $\text{C}_{2-20}\text{炔基}$ 、i) $-\text{Y}-\text{C}_{3-14}\text{環烷基}$ 、j) $-\text{Y}-\text{C}_{6-14}\text{芳基}$ 、k) $-\text{Y}-3-14\text{員環雜烷基}$

或 l) -Y-5-14 員雜芳基，其中該 C₁₋₂₀ 烷基、該 C₂₋₂₀ 烯基、該 C₂₋₂₀ 炔基、該 C₃₋₁₄ 環烷基、該 C₆₋₁₄ 芳基、該 3-14 員環雜烷基及該 5-14 員雜芳基中每一者各視情況經 1-4 個 Rⁱ 基團取代；

R^e 在每次出現時為 a) H、b) C₁₋₆ 烷基、c) C₆₋₁₄ 芳基或 d) -C₁₋₆ 烷基-C₆₋₁₄ 芳基，其中該等 C₁₋₆ 烷基及該等 C₆₋₁₄ 芳基中每一者各視情況經 1-4 個 Rⁱ 基團取代；

R^f 在每次出現時為 a) H、b) -C(O)R^g、c) -C(O)NR^gR^h、d) -C(S)R^g、e) -C(S)NR^gR^h、f) C₁₋₂₀ 烷基、g) C₂₋₂₀ 烯基、h) C₂₋₂₀ 炔基、i) C₃₋₁₄ 環烷基、j) C₆₋₁₄ 芳基、k) 3-14 員環雜烷基或 l) 5-14 員雜芳基，其中該 C₁₋₂₀ 烷基、該 C₂₋₂₀ 烯基、該 C₂₋₂₀ 炔基、該 C₃₋₁₄ 環烷基、該 C₆₋₁₄ 芳基、該 3-14 員環雜烷基及該 5-14 員雜芳基中每一者各視情況經 1-4 個 Rⁱ 基團取代；

R^g 及 R^h 在每次出現時獨立地為 a) H、b) -OH、c) -SH、d) -S(O)₂OH、e) -C(O)OH、f) -C(O)NH₂、g) -C(S)NH₂、h) -OC₁₋₁₀ 烷基、i) -C(O)-C₁₋₂₀ 烷基、j) -C(O)-OC₁₋₂₀ 烷基、k) -C(S)N(C₁₋₂₀ 烷基)₂、l) -C(S)NH-C₁₋₂₀ 烷基、m) -C(O)NH-C₁₋₂₀ 烷基、n) -C(O)N(C₁₋₂₀ 烷基)₂、o) -S(O)_m-C₁₋₂₀ 烷基、p) -S(O)_m-OC₁₋₂₀ 烷基、q) C₁₋₂₀ 烷基、r) C₂₋₂₀ 烯基、s) C₂₋₂₀ 炔基、t) C₁₋₂₀ 烷氧基、u) C₃₋₁₄ 環烷基、v) C₆₋₁₄ 芳基、w) 3-14 員環雜烷基或 x) 5-14 員雜芳基，其中該等 C₁₋₂₀ 烷基、該 C₂₋₂₀ 烯基、該 C₂₋₂₀ 炔基、該 C₃₋₁₄ 環烷基、該 C₆₋₁₄ 芳基、該 3-14 員環雜烷

基及該5-14員雜芳基中每一者各視情況經1-4個Rⁱ基團取代；

Rⁱ在每次出現時為 a) 鹵素、 b) -CN、 c) -NO₂、 d) 側氧基、 e) -OH、 f) -NH₂、 g) -NH(C₁₋₂₀烷基)、 h) -N(C₁₋₂₀烷基)₂、 i) -N(C₁₋₂₀烷基)-C₆₋₁₄芳基、 j) -N(C₆₋₁₄芳基)₂、 k) -S(O)_mH、 l) -S(O)_m-C₁₋₂₀烷基、 m) -S(O)₂OH、 n) -S(O)_m-OC₁₋₂₀烷基、 o) -S(O)_m-OC₆₋₁₄芳基、 p) -CHO、 q) -C(O)-C₁₋₂₀烷基、 r) -C(O)-C₆₋₁₄芳基、 s) -C(O)OH、 t) -C(O)-OC₁₋₂₀烷基、 u) -C(O)-OC₆₋₁₄芳基、 v) -C(O)NH₂、 w) -C(O)NH-C₁₋₂₀烷基、 x) -C(O)N(C₁₋₂₀烷基)₂、 y) -C(O)NH-C₆₋₁₄芳基、 z) -C(O)N(C₁₋₂₀烷基)-C₆₋₁₄芳基、 aa) -C(O)N(C₆₋₁₄芳基)₂、 ab) -C(S)NH₂、 ac) -C(S)NH-C₁₋₂₀烷基、 ad) -C(S)N(C₁₋₂₀烷基)₂、 ae) -C(S)N(C₆₋₁₄芳基)₂、 af) -C(S)N(C₁₋₂₀烷基)-C₆₋₁₄芳基、 ag) -C(S)NH-C₆₋₁₄芳基、 ah) -S(O)_mNH₂、 ai) -S(O)_mNH(C₁₋₂₀烷基)、 aj) -S(O)_mN(C₁₋₂₀烷基)₂、 ak) -S(O)_mNH(C₆₋₁₄芳基)、 al) -S(O)_mN(C₁₋₂₀烷基)-C₆₋₁₄芳基、 am) -S(O)_mN(C₆₋₁₄芳基)₂、 an) -SiH₃、 ao) -SiH(C₁₋₂₀烷基)₂、 ap) -SiH₂(C₁₋₂₀烷基)、 ar) -Si(C₁₋₂₀烷基)₃、 as) C₁₋₂₀烷基、 at) C₂₋₂₀烯基、 au) C₂₋₂₀炔基、 av) C₁₋₂₀烷氧基、 aw) C₁₋₂₀烷基硫基、 ax) C₁₋₂₀鹵烷基、 ay) C₃₋₁₄環烷基、 az) C₆₋₁₄芳基、 ba) 3-14員環雜烷基或 bb) 5-14員雜芳基；

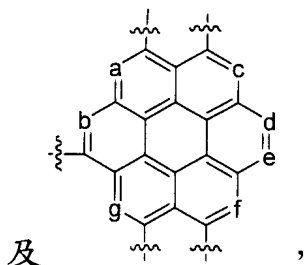
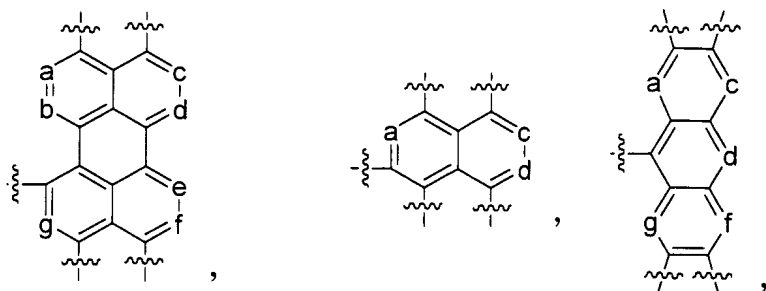
Y在每次出現時為 a) 二價C₁₋₂₀烷基、 b) 二價C₁₋₂₀鹵烷基

或 c) 共價鍵；

m 在每次出現時為 0、1 或 2；且

q 在每次出現時為在 1 至 20 之範圍內的整數。

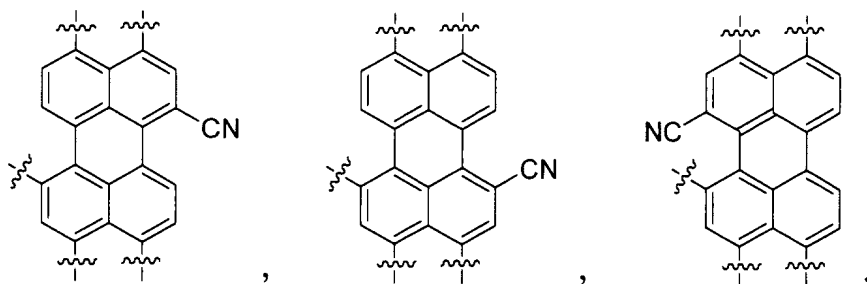
2. 如請求項 1 之化合物，其中 $\pi-1$ 在每次出現時係選自：

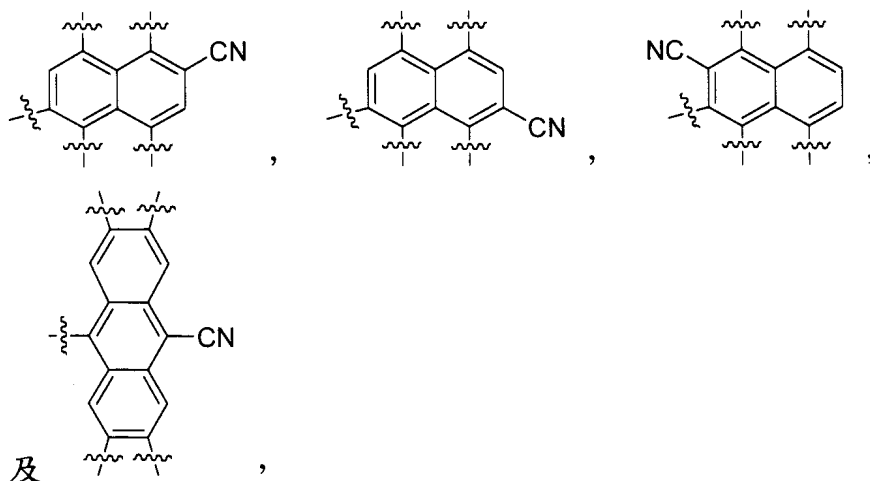


其中 a、b、c、d、e、f 及 g 在每次出現時獨立地為 CH、 CR^a 、SiH、 SiR^a 、N 或 P，其中 R^a 係如請求項 1 中所定義。

3. 如請求項 2 之化合物，其中 a、b、c、d、e、f 及 g 在每次出現時獨立地為 CH 或 CR^a ，其中 R^a 在每次出現時為 -CN、F、Cl、Br 或 I。

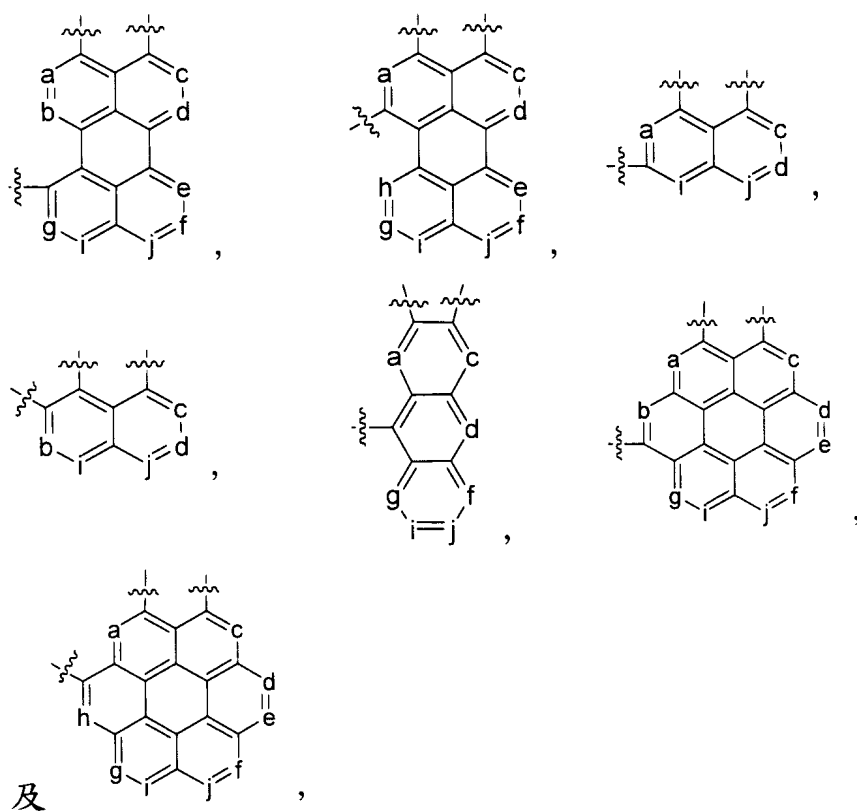
4. 如請求項 1 至 3 中任一項之化合物，其中 $\pi-1$ 在每次出現時係選自：





其各自視情況經1-4個 R^a 取代，其中 R^a 係如請求項1中所定義。

5. 如請求項1之化合物，其中 π -1'在每次出現時係選自：

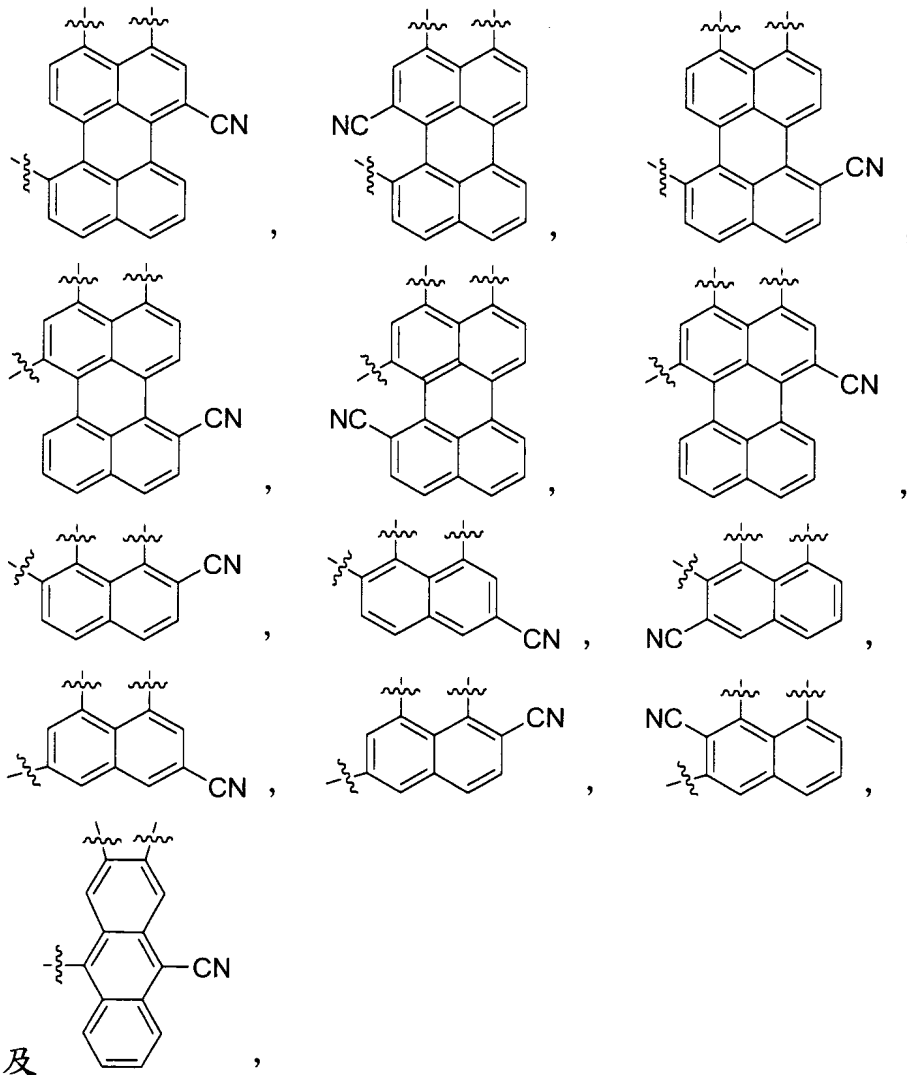


其中a、b、c、d、e、f、g、h、i及j在每次出現時獨立地為CH、 CR^a 、SiH、 SiR^a 、N或P，其中 R^a 係如請求項1中所定義。

6. 如請求項5之化合物，其中a、b、c、d、e、f、g、i及j在

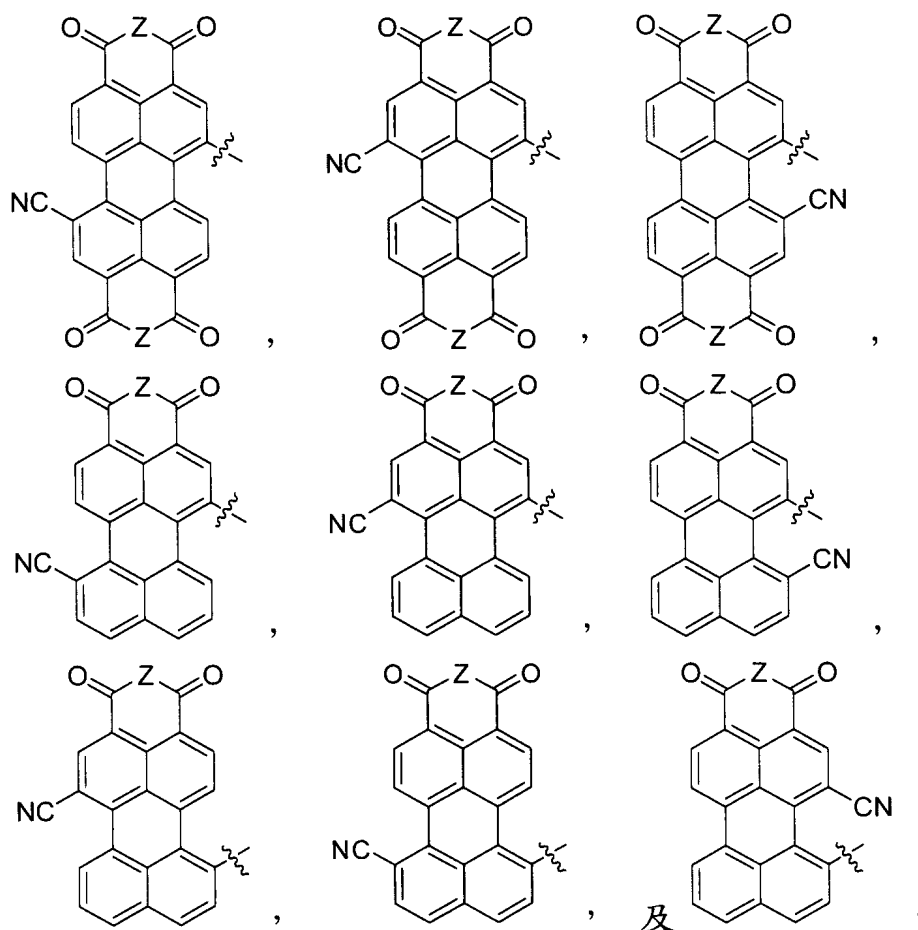
每次出現時獨立地為CH或CR^a，其中R^a在每次出現時為
-CN、F、Cl、Br或I。

7. 如請求項1至6中任一項之化合物，其中π-1'在每次出現時係選自：



其各自視情況經1-4個R^a取代，其中R^a係如請求項1中所定義。

8. 如請求項1至7中任一項之化合物，其中Q與Q'相同且選自：

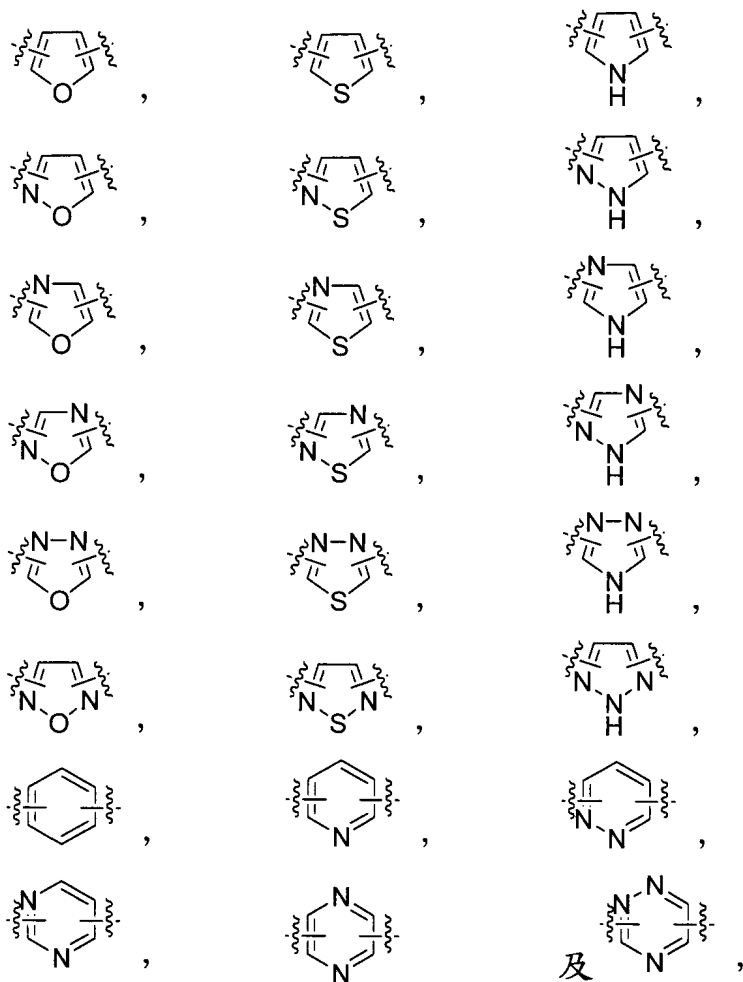


其中Z係如請求項1中所定義。

9. 如請求項1至8中任一項之化合物，其中各Z為 NR^b 且 R^b 係如請求項1中所定義。
10. 如請求項9之化合物，其中 R^b 係選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、 $-\text{Y}-\text{C}_{3-14}$ 環烷基、 $-\text{Y}-\text{C}_{6-14}$ 芳基、 $-\text{Y}-3-14$ 員環雜烷基及 $-\text{Y}-5-14$ 員雜芳基，其中該 C_{1-20} 烷基、該 C_{2-20} 烯基、該 C_{2-20} 炔基、該 C_{3-14} 環烷基、該 C_{6-14} 芳基、該3-14員環雜烷基及該5-14員雜芳基中每一者各視情況經1-4個 R^i 基團取代，其中Y及 R^i 係如請求項1中所定義。
11. 如請求項1至10中任一項之化合物，其中B及B'獨立地選自二價 C_{6-14} 芳基、二價5-14員雜芳基及共價鍵，其中該二價 C_{6-14} 芳基及該二價5-14員雜芳基中每一者各視情況

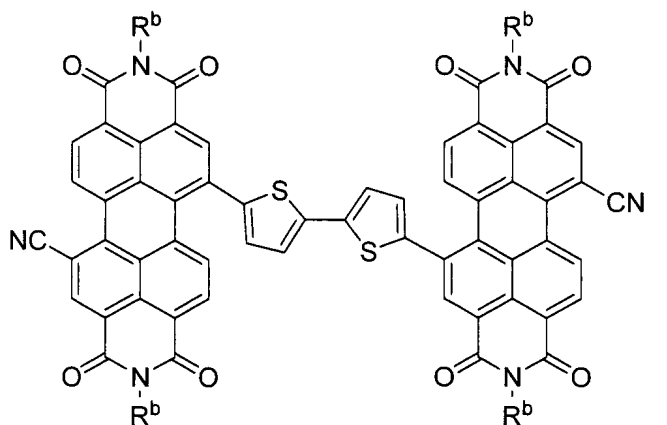
經 1-4 個 R^i 基團取代，其中 R^i 係如請求項 1 中所定義。

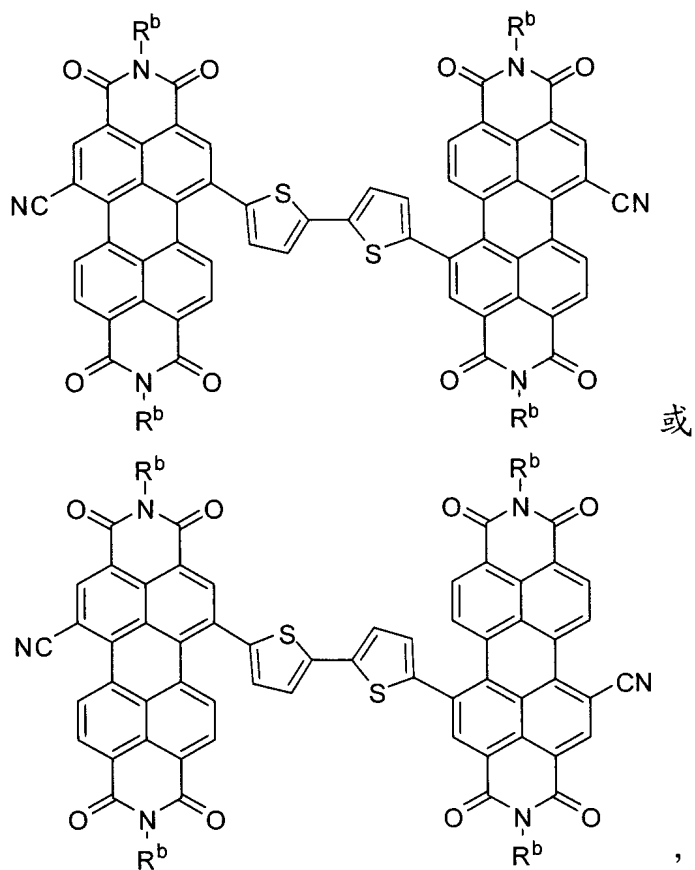
12. 如請求項 11 之化合物，其中該二價 C_{6-14} 芳基及該二價 5-14 員雜芳基獨立地選自：



其各自視情況與苯基或者五員或六員雜芳基稠合。

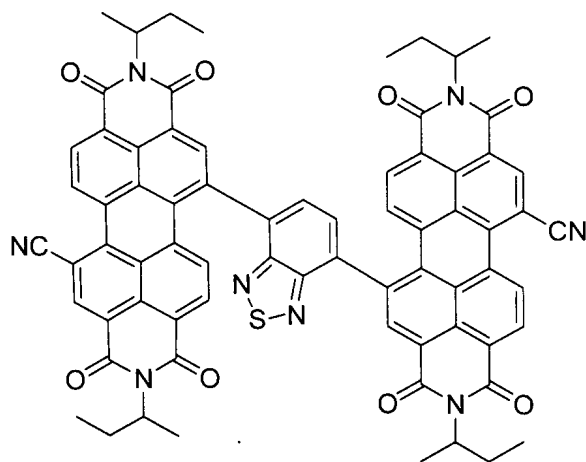
13. 如請求項 1 至 12 中任一項之化合物，該化合物具有下式：



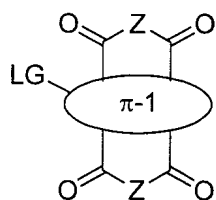


其中 R^b 在每次出現時為己基、庚基或辛基。

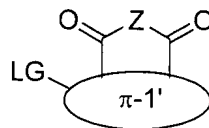
14. 如請求項1至12中任一項之化合物，該化合物具有下式：



15. 一種製備如請求項1之化合物的方法，該方法包含使式II
或式III化合物或兩者：



II



III

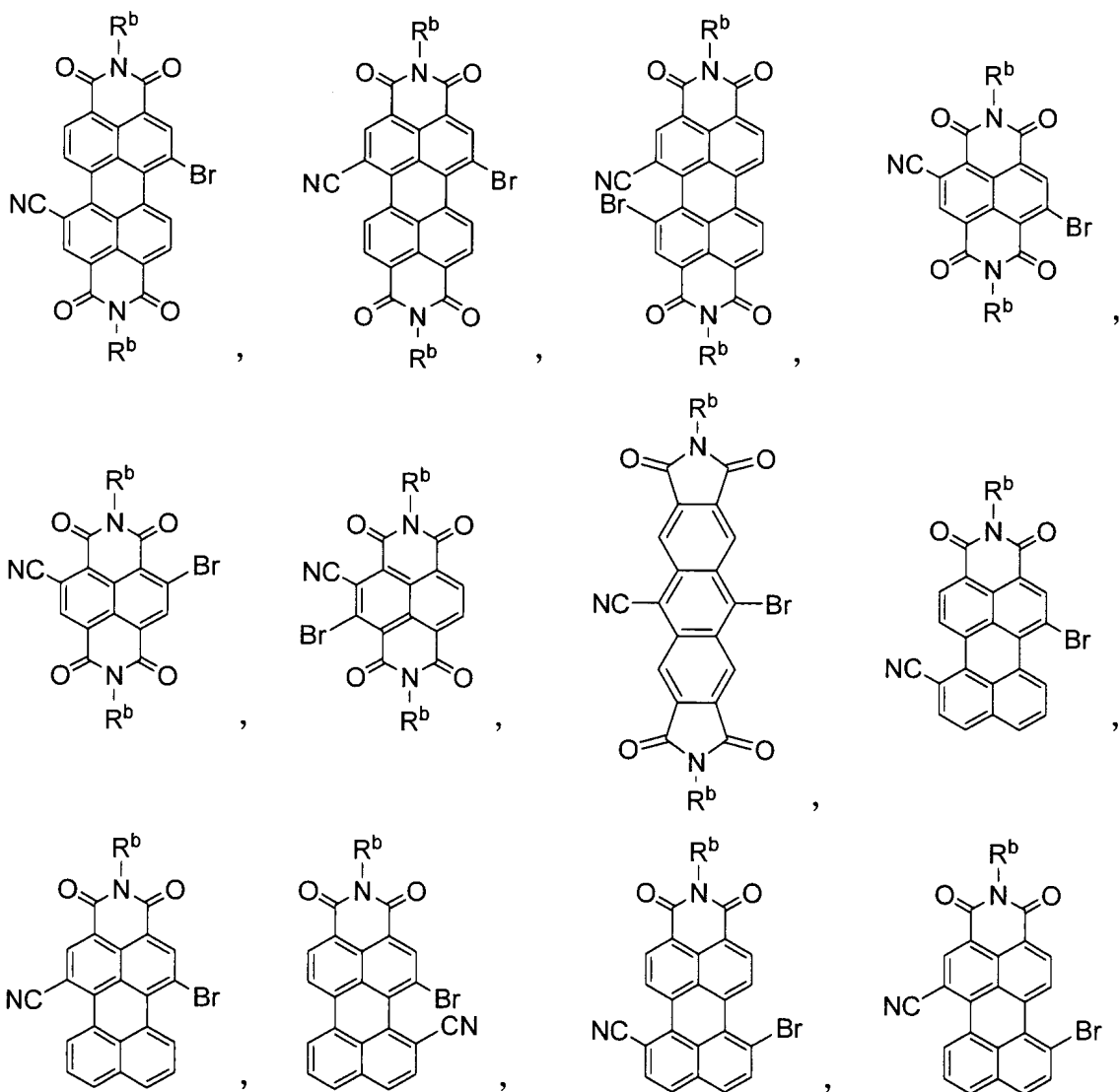
經歷偶合反應，

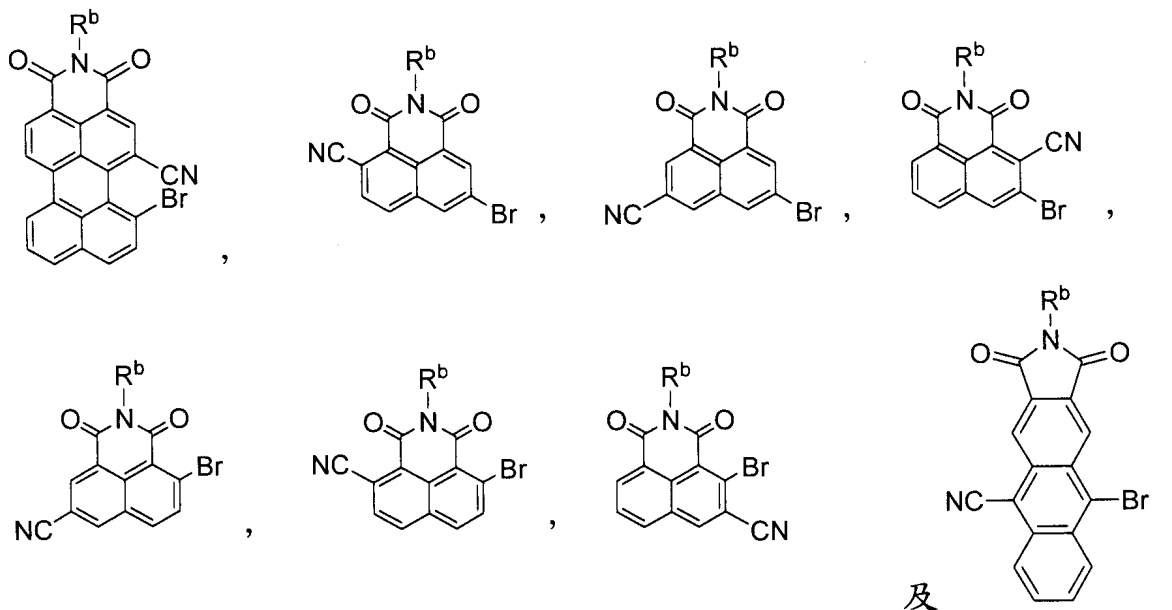
其中：

LG為脫離基；且

$\pi-1$ 、 $\pi-1'$ 及Z係如請求項1中所定義。

16. 如請求項15之方法，其中該式II或式III化合物係選自：





其中 R^b 係如請求項1中所定義。

17. 如請求項15或16之方法，其中該偶合反應係選自卡斯特羅-史蒂芬偶合 (Castro-Stephens coupling)、熊田偶合 (Kumada coupling)、赫克偶合 (Heck coupling)、茵頭偶合 (Sonogashira coupling)、根岸偶合 (Negishi coupling)、斯蒂爾偶合 (Stille coupling)、鈴木偶合 (Suzuki coupling)、檜山偶合 (Hiyama coupling)、布赫瓦爾德偶合 (Buchwald coupling) 及福山偶合 (Fukuyama coupling)。
18. 如請求項15至17中任一項之方法，其中該偶合反應為與式U-L-U'之化合物進行的斯蒂爾偶合反應，在該式U-L-U'中，U及U'獨立地為有機錫烷基。
19. 一種組合物，其包含一或多種溶解或分散於液體介質中之如請求項1至14中任一項之化合物。
20. 如請求項19之組合物，其中該組合物包含該一或多種如請求項1至14中任一項之化合物的兩種或兩種以上區位

異構體。

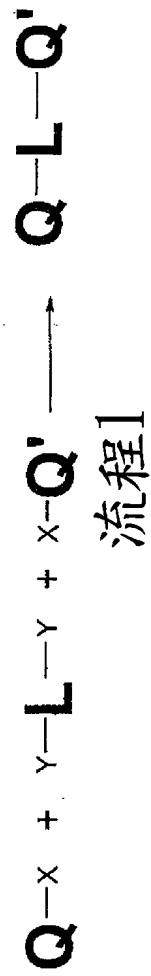
21. 如請求項19或20之組合物，其中該液體介質包含水或有機溶劑。
22. 如請求項19至21中任一項之組合物，該組合物另外包含一或多種添加劑。
23. 如請求項22之組合物，其中該一或多種添加劑獨立地選自清潔劑、分散劑、黏合劑、相容劑、固化劑、引發劑、保濕劑、消泡劑、濕潤劑、pH值調節劑、殺生物劑及抑菌劑。
24. 一種製品，其包含一或多種如請求項1至14中任一項之化合物。
25. 如請求項24之製品，其中該製品包含如請求項1至14中任一項之化合物的兩種或兩種以上區位異構體。
26. 如請求項24或25之製品，該製品係選自電子器件、光學器件及光電子器件。
27. 一種薄膜半導體，其包含一或多種如請求項1至14中任一項之化合物。
28. 如請求項27之薄膜半導體，其中該薄膜半導體包含如請求項1至14中任一項之化合物的兩種或兩種以上區位異構體。
29. 一種複合物，其包含基板及沈積於該基板上之如請求項27或28之薄膜半導體。
30. 一種場效電晶體器件，其包含如請求項27或28之薄膜半導體。

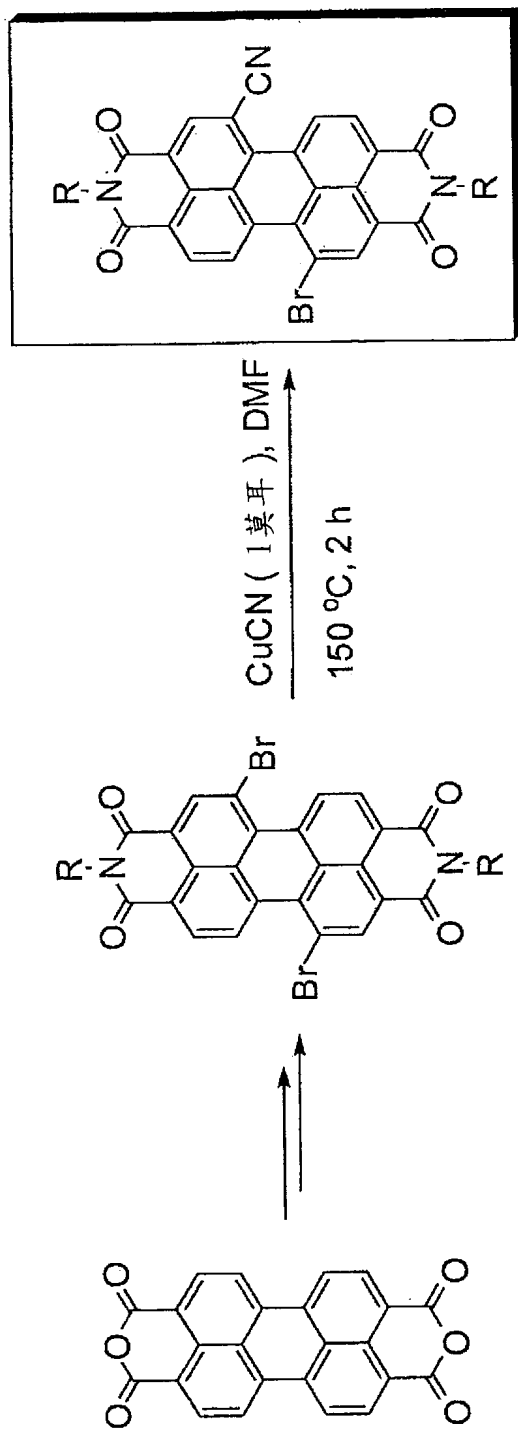
31. 一種場效電晶體器件，其包含如請求項29之複合物。
32. 如請求項30或31之場效電晶體器件，該場效電晶體器件包含介電材料，其中該介電材料包含有機介電材料、無機介電材料或混合有機/無機介電材料。
33. 一種光伏打器件，其包含如請求項27或28之薄膜半導體。
34. 一種光伏打器件，其包含如請求項29之複合物。
35. 一種光伏打器件，其包含活性層，該活性層包含兩種或兩種以上類型之半導體材料，其中該兩種或兩種以上類型之半導體材料中至少一者包含一或多種如請求項1至14中任一項之化合物。
36. 如請求項35之光伏打器件，其中該兩種或兩種以上類型之半導體材料中至少一者包含如請求項1至14中任一項之化合物的一或多種區位異構體。
37. 如請求項35之光伏打器件，該光伏打器件包含包括該兩種或兩種以上類型之半導體材料的混合物。
38. 如請求項35之光伏打器件，該光伏打器件包含兩層或兩層以上半導體材料，其各自包含該兩種或兩種以上類型之半導體材料中之一者。
39. 一種有機發光二極體器件，其包含如請求項27或28之薄膜半導體。
40. 一種有機發光二極體器件，其包含如請求項29之複合物。
41. 一種製造製品之方法，該方法包含將如請求項19至23中

任一項之組合物沈積於基板上。

42. 如請求項41之方法，其中沈積該組合物包含印刷、旋塗、滴鑄、區域澆鑄、浸塗、刮塗及噴霧中至少一者。

八、圖式：





PDI(8)BrCN, R = 辛基, 產率: 22-25%

EA: 計算值: C: 68.52, H: 5.61, N: 5.85. 實驗值: C: 68.84, H: 5.65, N: 5.79.

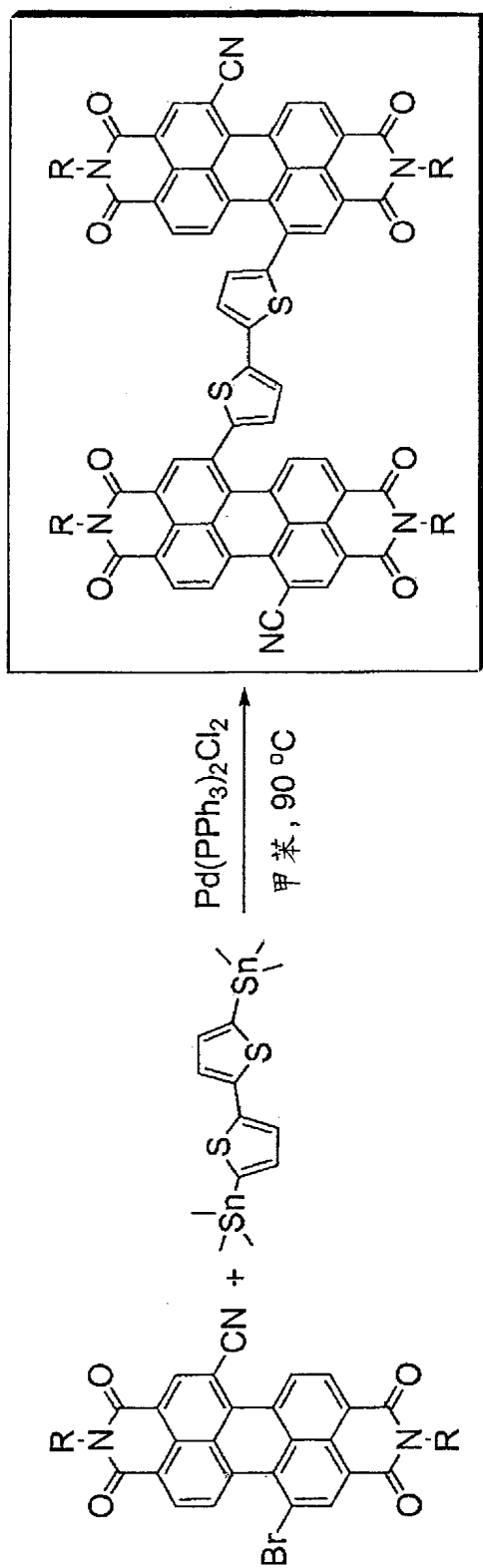
PDI(2EH)BrCN, R = 2-乙基己基, 產率: 20-21%

EA: 計算值: C: 68.52, H: 5.61, N: 5.85. 實驗值: C: 68.60, H: 5.53, N: 5.84.

PDI(1MP)BrCN, R = 1-甲基戊基, 產率: 18-29%

EA: 計算值: C: 67.07, H: 4.87, N: 6.34. 實驗值: C: 67.47, H: 5.09, N: 6.42.

流程2



所分離之呈深色固體狀之化合物：

BPDI(8)-BT, R = 辛基, 產率: 70%

EA: 計算值: C: 74.97, H: 5.87, N: 5.83. 實驗值: C: 74.89, H: 6.01, N: 5.54.

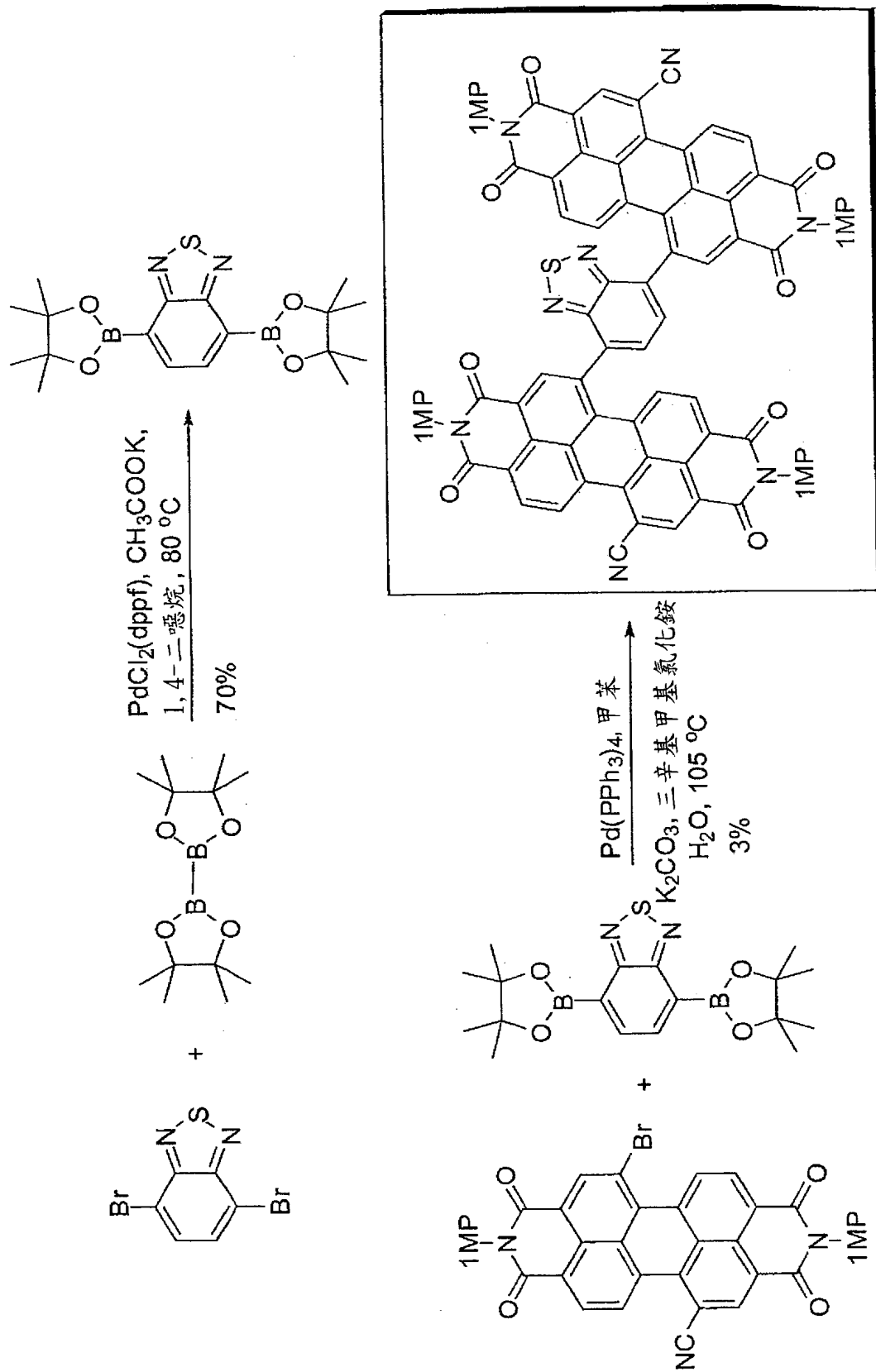
BPDI(2EH)-BT, R = 2-乙基己基, 產率: 84%

EA: 計算值: C: 74.07, H: 5.15, N: 6.32. 實驗值: C: 74.12, H: 5.24, N: 6.18.

BPDI(1MP)-BT, R = 1-甲基戊基, 產率: 74%

EA: 計算值: C: 74.97, H: 5.87, N: 5.83. 實驗值: C: 75.34, H: 6.04, N: 5.60.

流程3



流程4

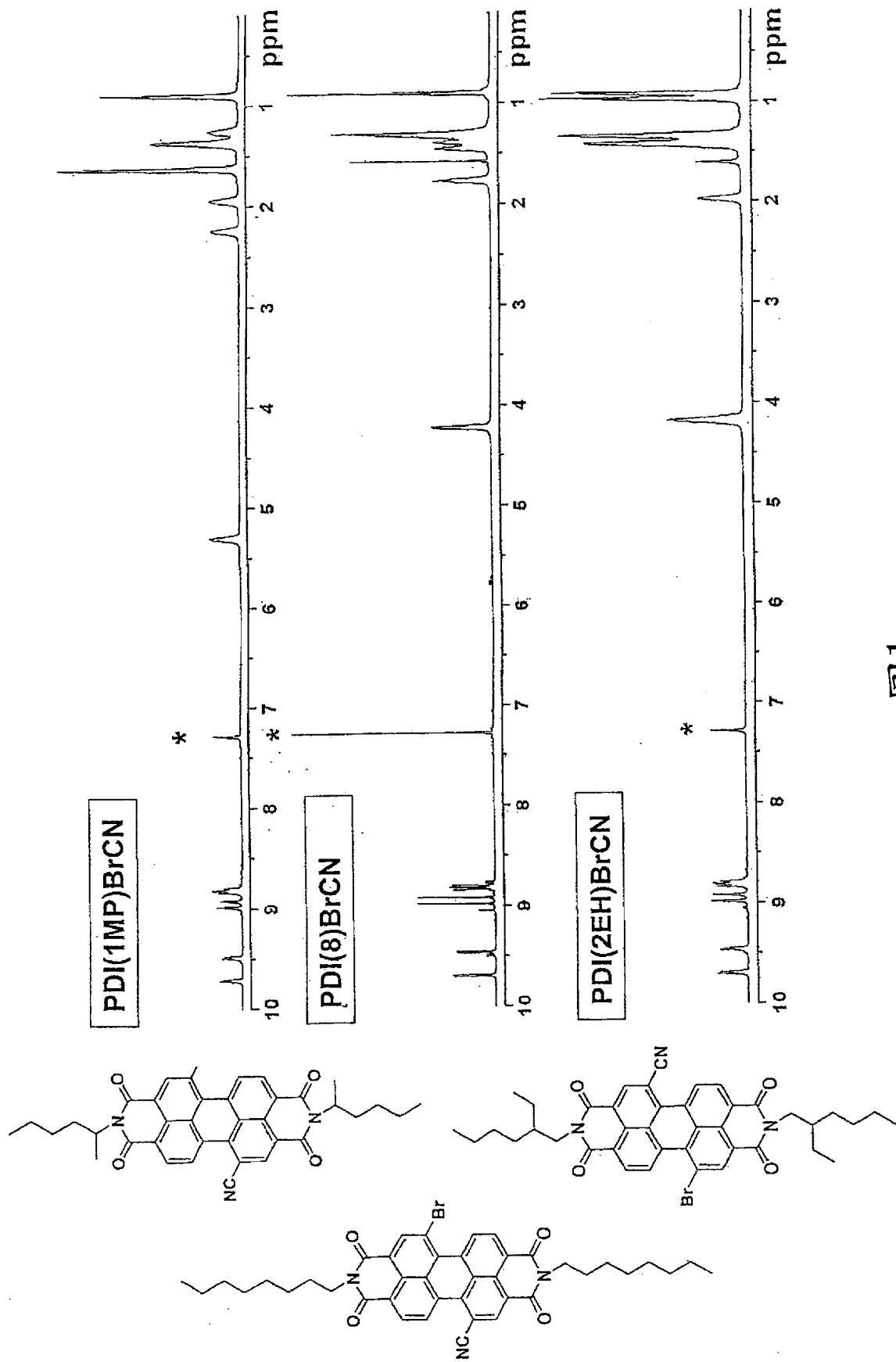


圖1

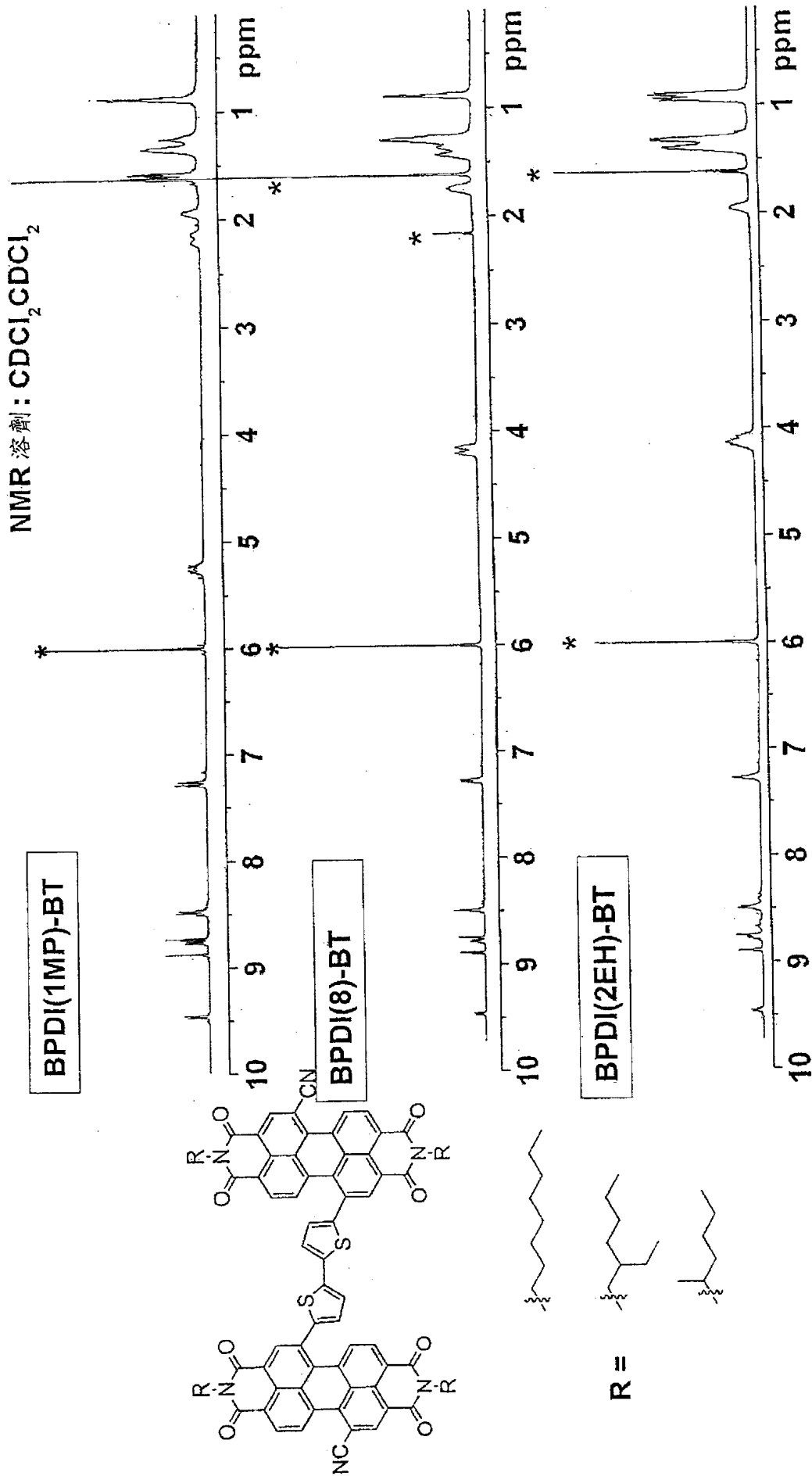


圖2

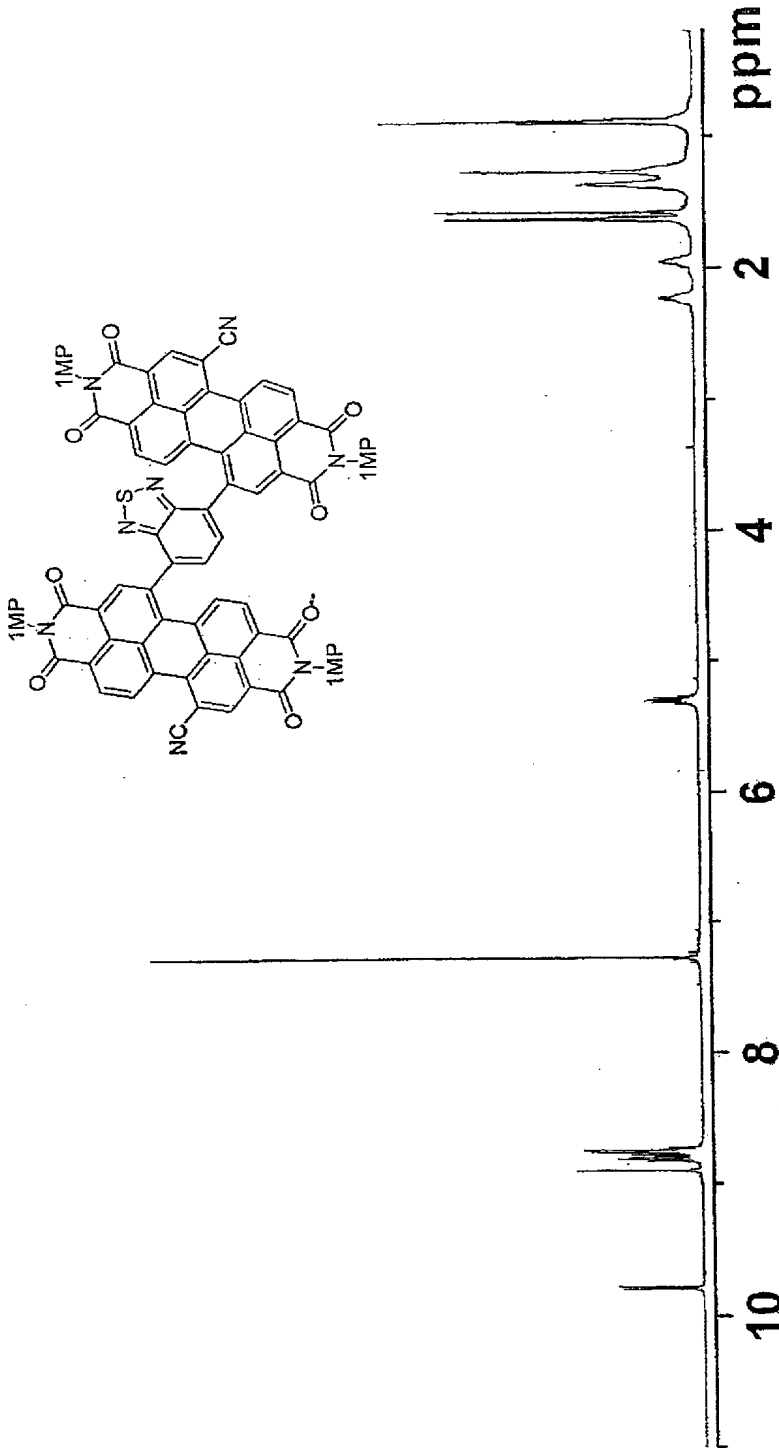


圖3

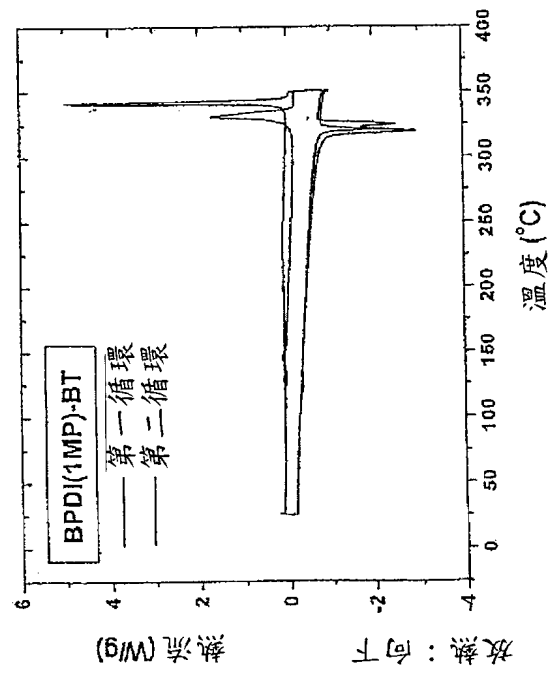
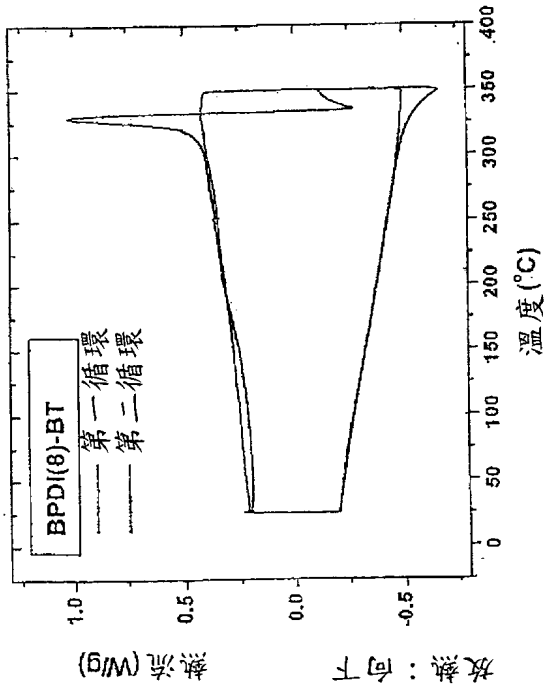
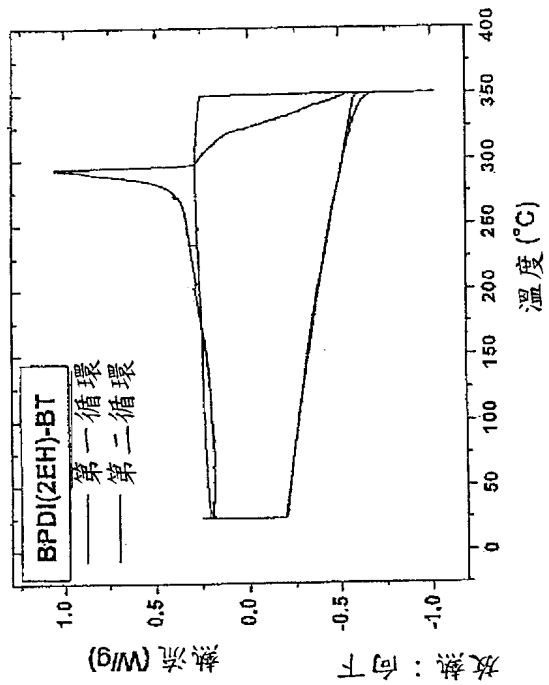


圖4

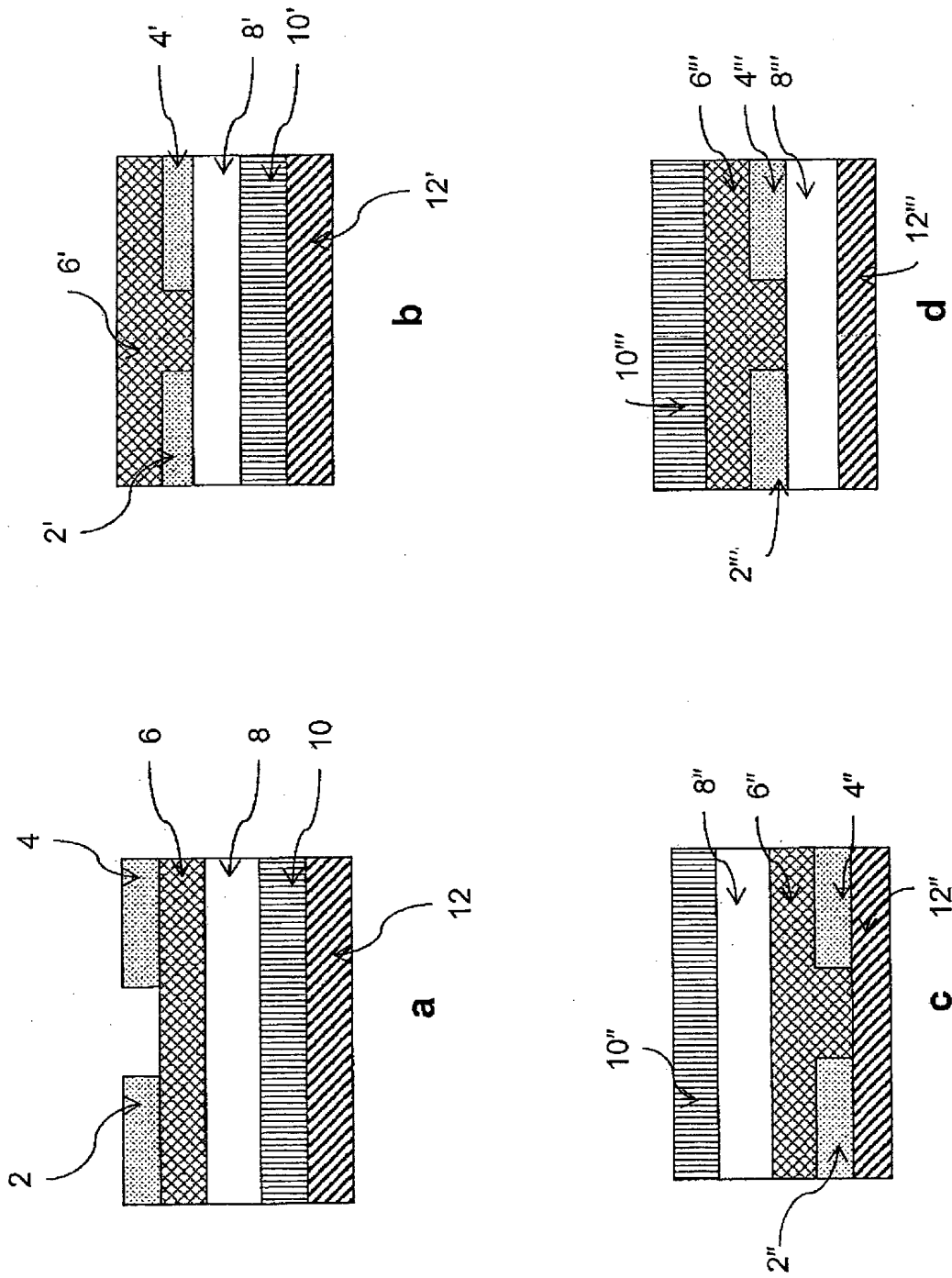
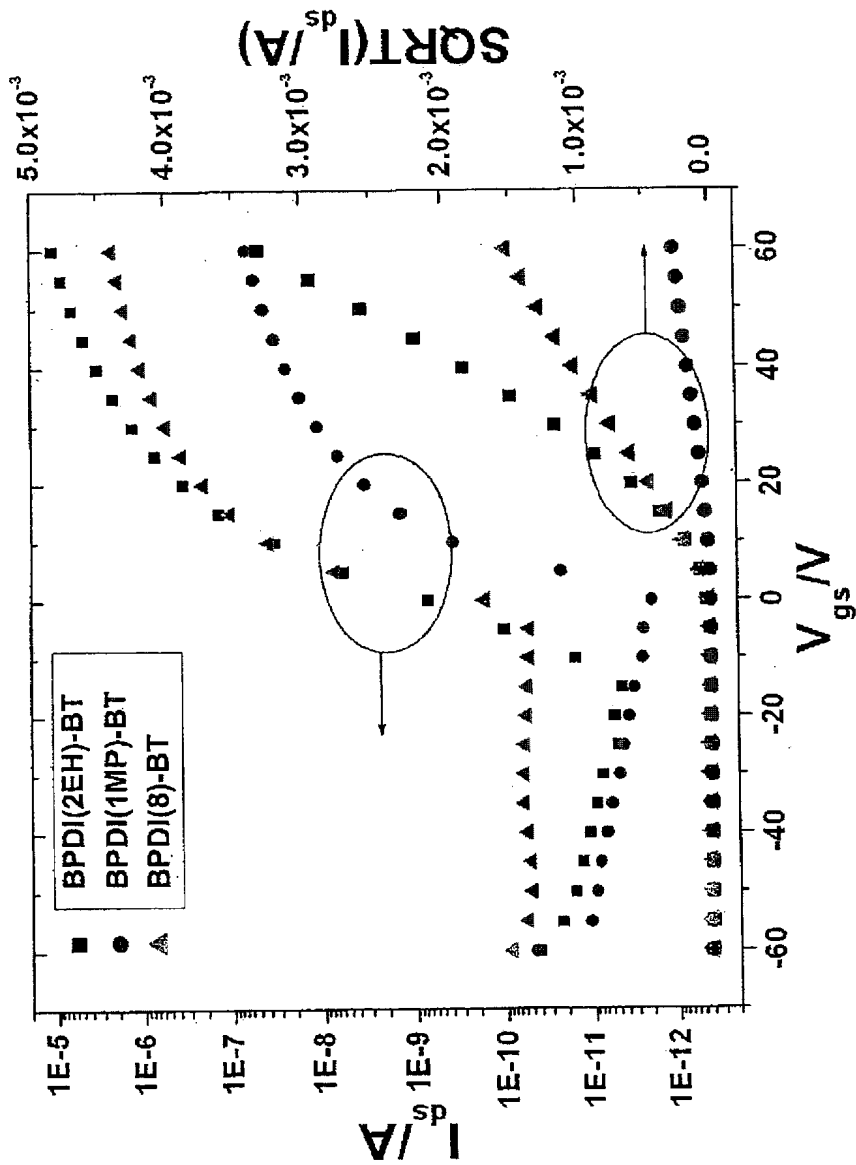


圖5



器件測試：底閘極頂接觸式；由在 $CHCl_3/DCB$ 中之溶液（98:2，w/w）
（8 mg/mL）旋塗於經OTS處理之 SiO_2 基板上的膜

圖6

樣本	溶解度 (mg/mL)
BPDI(2EH)-BT	5.5
BPDI(1MP)-BT	33.9
BPDI(8)-BT	7.8

如與相應PDIR-CN₂相比較之在二氯苯 (DCB) (60°C)
中之溶解度測試的概括

表I

真空沈積

真空沈積 (在空氣中量測) - 經OTS處理之SiO ₂			
樣本	移動率 (cm ² /Vs)	開/關	開/關 (0 V)
PDI(8)BrCN	1.78E-02	1.8E+05	1.6E+05
PDI(2EH)BrCN	3.03E-03	7.6E+03	6.7E+03
PDI(1MP)BrCN	8.78E-04	1.7E+04	1.7E+04

底閘極頂接觸式器件；由真空沈積於經OTS處理之SiO₂基板 (110°C) 上而製備之膜

溶液加工

旋塗 (在空氣中量測) - 經OTS處理之SiO ₂			
樣本	移動率 (cm ² /Vs)	開/關	開/關 (0 V)
PDI(8)BrCN	1.10E-04	2.8E+03	2.8E+03
PDI(2EH)BrCN	3.90E-04	1.3E+04	1.3E+04
PDI(1MP)BrCN	5.13E-03	1.1E+04	1.1E+04

底閘極頂接觸式器件；由CHCl₃溶液 (8 mg/mL) 旋塗於經OTS處理之SiO₂基板上的膜

表2

樣本	移動率 (cm^2/Vs)	開/關	V^{Th} (V)
BPD(2EH)-BT	0.05	2.4E+6	-15
BPD(1MP)-BT	2.6E-4	3.3E+4	0
BPD(8)-BT	8.7E-3	2.4E+4	-5

器件測試：底閘極頂接觸式；由在 CHCl_3/DCB 中之溶液
(98:2, w/w) (8 mg/mL) 旋塗於經OTS處理之 SiO_2
基板上的膜

表3

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第 (1) 圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

(無元件符號說明)

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

Q—L—Q'

I