I671280

(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 I671280 B

(45)公告日： 中華民國 108 (2019) 年 09 月 11 日

(21)申請案號：104111944 (22)申請日： 中華民國 104 (2015) 年 04 月 14 日

(51)Int. Cl.： *C07C15/38 (2006.01)* *C07C255/50 (2006.01)*
H01L51/54 (2006.01) *H05B33/12 (2006.01)*

(30)優先權：2014/04/16 歐洲專利局 14001391.3

(71)申請人：德商麥克專利有限公司 (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)；梅爾 賽巴斯汀 MEYER, SEBASTIAN (DE)

(74)代理人：林志剛

(56)參考文獻：

TW 200914576A

審查人員：黃凱煜

申請專利範圍項數：8 項 圖式數：0 共 80 頁

(54)名稱

電子裝置用之材料

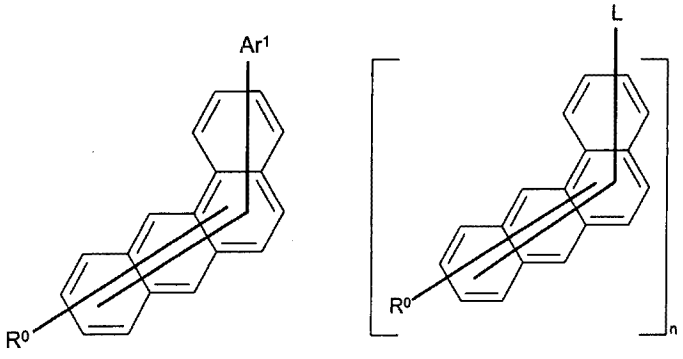
(57)摘要

本申請案關於式(I)或(II)之經取代的苯並蒽化合物。本申請案此外關於一種包含該苯並蒽化合物之電子裝置。

The present application relates to a substituted benzanthracene compound of a formula (I) or (II). The application furthermore relates to an electronic device which comprises the said benzanthracene compound.

特徵化學式：

式(I)(II)



式(I) 式(II)

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)

電子裝置用之材料

Materials for electronic devices

【技術領域】

本申請案關於一種包含經取代的苯並蒽化合物之電子裝置。

根據本發明之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理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。

必需進一步改良關於電子裝置的性能數據，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。對於某些應用而言，可用的水溶性化合物也是重要的。特別是在發藍光之 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。

達成該等改良的一個重要出發點為選擇電子裝置之發光層中用作基質的化合物，較佳與螢光發光體化合物組

合。

發光層中之基質（或基質化合物或基質材料），就本申請案之目的而言，意指存在於電子裝置之發光層中但不是發光體化合物（即，不參與或不顯著參與發光層的發光）的化合物。

發光體化合物對應地意指在電子裝置的操作時發光的發光層之化合物。根據本申請案之術語螢光發光體包括其中從單重態發生發光之化合物。

多種化合物在先前技術中揭示作為使用於發光層中之基質化合物。其實例為在 2-、6-、9-和 10-位置具有芳基取代基之蒽，如（例如）WO 2007/110129 中所述，雙蒽化合物，如（例如）WO 2007/065678 中所述，或在 9-和 10-位置具有彼此不同的取代基之蒽化合物，如（例如）EP 1 553154 中所述。

先前技術此外描述用於此用途的具有某取代模式之苯並蒽化合物，例如在 WO 2008/145239 中。其中所揭示之苯並蒽化合物的特徵在於彼等在位置 2、3、4、5 或 6 中之一者帶有芳基或雜芳基 ，且除此以外沒有另外的取代基，尤其是在位置 7 和 12 沒有取代基。

雖然 WO 2008/145239 中所揭示之化合物具有非常好的性質，然而，仍然持續需要改良。在此特別感興趣的是開發有利於深藍色色坐標的發光及/或電子裝置的更長壽命之新穎化合物。此外，某些應用相當感興趣的是具有在一般有機溶劑中（特別是在用於製造電子裝置之印刷方法

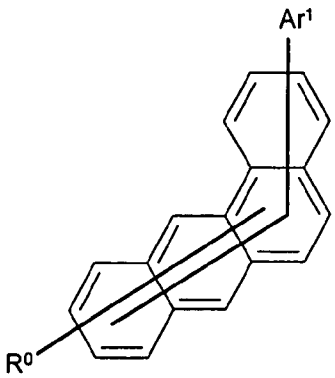
或旋轉塗佈方法中所採用的溶劑中）之改良溶解度的可用化合物。

也感興趣的是可充當從先前技術得知的化合物之替代品的新穎化合物。該等化合物之理想用途不局限於用作基質，且還包括用作（例如）電子傳輸材料、電洞傳輸材料或發光體。

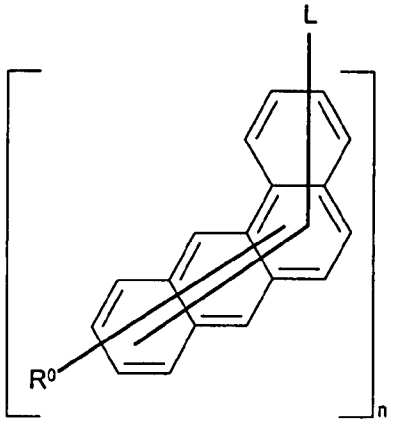
【發明內容】

在研究用於電子裝置中之新穎化合物中，出乎意料地現已發現：具有下式（I）或（II）的界定取代模式之苯並蒽化合物特別適合用於電子應用裝置。特別是，彼等達到具有深藍色色坐標的發光、提供具有長壽命之 OLED 和提供具有在有機溶劑中之良好溶解度的的化合物之上述技術目的之一或多者（較佳全部）。

本發明因此關於一種式（I）或（II）之化合物，



式(I)



式(II),

其中下列適用於所出現的符號：

Ar^1 選自具有 6 至 40 個芳族環原子之芳族環系統（其可

經一或多個 R^2 基團取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取代）；

R^0 為 $C(=O)R^3$、CN、$Si(R^3)_3$、$P(=O)(R^3)_2$、OR^3、$S(=O)R^3$、$S(=O)_2R^3$、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-R^3C=CR^3-$、$-C\equiv C-$、$Si(R^3)_2$、C=O、$C=NR^3$、$-C(=O)O-$、$-C(=O)NR^3-$、NR^3、$P(=O)(R^3)$、-O-、-S-、SO 或 SO_2 置換）；R^0 基團可連接至 R^1 基團且可形成環；

L 為選自下列之 n 價基團：具有 6 至 40 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取代）、或選自具有 5 至 40 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取代）；或 L 為化學鍵，其中 n 則等於 2；

R^1、R^2 在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、$C(=O)R^3$、CN、$Si(R^3)_3$、$N(R^3)_2$、$P(=O)(R^3)_2$、OR^3、$S(=O)R^3$、$S(=O)_2R^3$、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-R^3C=CR^3-$

、-C≡C-、$Si(R^3)_2$、C=O、C=NR^3、-C(=O)O-、-C(=O)NR^3-、NR^3、P(=O)(R^3)、-O-、-S-、SO 或 SO_2 置換）、或具有 6 至 40 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）；二或多個 R^1 或 R^2 基團可彼此連接且可形成環；

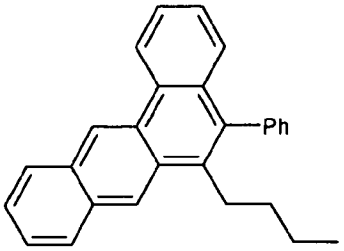
R^3 在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、C(=O)R^4、CN、$Si(R^4)_3$、$N(R^4)_2$、P(=O)(R^4)$_2$、OR^4、S(=O)R^4、$S(=O)_2R^4$、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基（其中上述基團可各自經一或多個 R^4 基團取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經-R^4C=CR^4-、-C≡C-、$Si(R^4)_2$、C=O、C=NR^4、-C(=O)O-、-C(=O)NR^4-、NR^4、P(=O)(R^4)、-O-、-S-、SO 或 SO_2 置換）、或具有 6 至 40 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^4 基團取代）；或具有 5 至 40 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^4 基團取代）；其中二或多個 R^3 基團可彼此連接且可形成環；

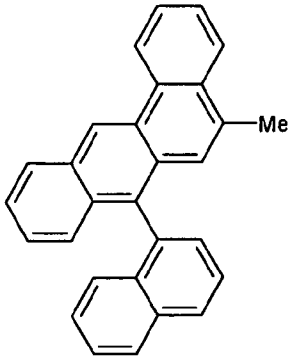
R^4 在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、CN 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂族、芳族或雜芳族有機基團，其中此外一或多個 H 原子可經 D、F 或 CN 置換；二或多個 R^4 取代基可彼此連接且可形成環；

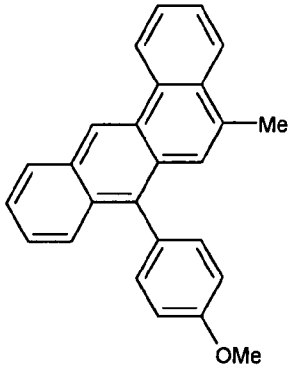
n 等於 2、3、4、5 或 6；

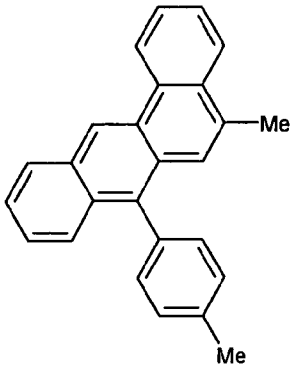
其中式（I）或（II）之化合物於各個指示為未經取代的位置可含有 R^1 基團；及

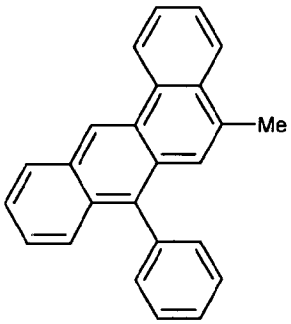
其中排除下列化合物：

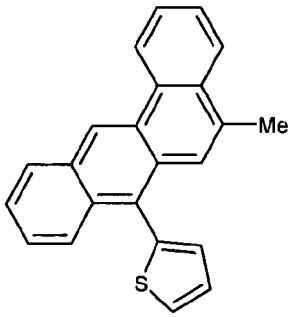


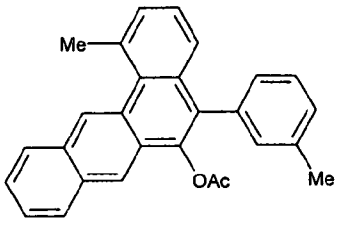


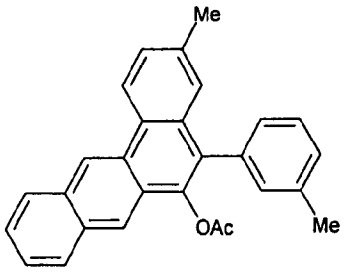


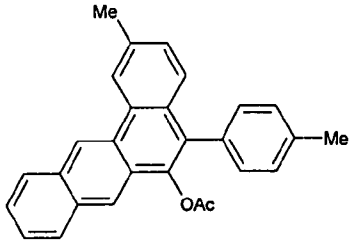


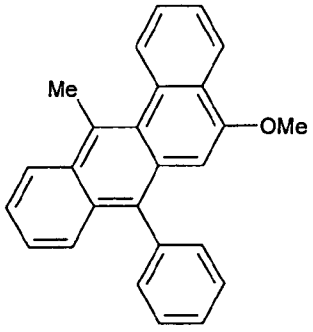






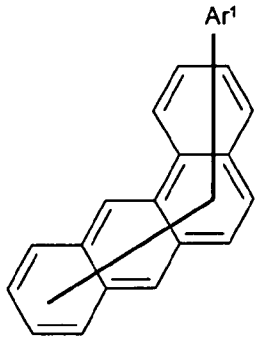






。

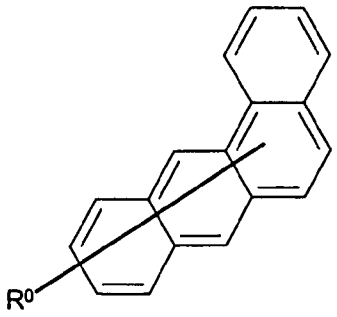
下列的圖形表示法：



表示 Ar^1 基團鍵結於苯並蒽中之選自位置 1 至 12 的任何所要位置。

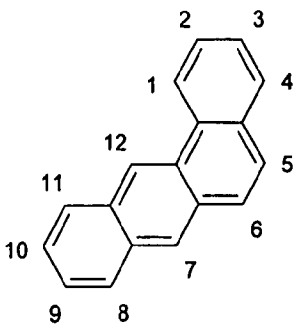
其適用於式（II）之基團 L 的表示法中。

下列的圖形表示法：



表示 R^0 基團鍵結於苯並蒽中之選自位置 5、6、7、8、9、10、11 或 12 的位置。

在本申請案中，使用下列苯並蒽結構之位置的編號：



。

芳基就本發明之意義而言含有 6 至 60 個芳族環原子；雜芳基就本發明之意義而言含有 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。所述者表示基本定義。若在本發明說明中指示其他較佳選擇，例如有關所存在之芳族環原子或雜原子的數目，則這些適用。

芳基或雜芳基在此意指簡單的芳族環（即苯），或簡單的雜芳族環（例如吡啶、嘧啶或噻吩），或縮合（稠合（annellated））芳族或雜芳族多環（例如萘、菲、喹啉或咔唑）。縮合（稠合）芳族或雜芳族多環就本申請案的意義而言由二或多個簡單的芳族或雜芳族環彼此縮合而組成。

在各情況中可經上述基團取代且可經由任何所要位置連接至芳族或雜芳族環系統之芳基或雜芳基特別意指衍生自下列之基團：苯、萘、蒽、菲、芘、二氫芘、䓛（chrysene）、苝、1,2-苯並苊（fluoranthene）、苯並蒽、苯並菲、稠四苯、稠五苯、苯並芘、呋喃、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、噻吩、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、吡咯、吲哚、異吲哚、咔唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯並-5,6-喹啉、苯並-6,7-喹啉、苯並-7,8-喹啉、啡噻吩、啡噁吩、吡唑、吲唑、咪唑、苯並咪唑、萘並咪唑（naphthimidazole）、菲並咪唑（phenanthrimidazole）、吡啶並咪唑（pyridimidazole）、吡吩並咪唑（pyrazinimidazole）、喹噁啉並咪唑（quinoxalinimidazole）、

噁唑、苯並噁唑、萘並噁唑（naphthoxazole）、蒽並噁唑（anthroxazole）、菲並噁唑（phenanthroxazole）、異噁唑、1,2-噻唑、1,3-噻唑、苯並噻唑、嗒吡、苯並嗒吡、嘧啶、苯並嘧啶、喹噁啉、吡吡、啡吡、喃啶、氮雜咔唑、苯並咔啉、啡啉、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯並三唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,2,3-噻二唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二唑、1,3,5-三吡、1,2,4-三吡、1,2,3-三吡、四唑、1,2,4,5-四吡、1,2,3,4-四吡、1,2,3,5-四吡、嘌呤、蝶啶、吲呻及苯並噻二唑。

芳族環系統就本發明之意義而言在其環系統中含有 6 至 60 個 C 原子。雜芳族環系統就本發明之意義而言含有 5 至 60 個芳族環原子，其中至少一個為雜原子。雜原子較佳地選自 N、O 及/或 S。芳族或雜芳族環系統就本發明之意義而言意指不一定只含有芳基或雜芳基，而是其中可以非芳族單元（較佳為少於 10%非 H 之原子）（諸如，例如 sp^3-混成之 C、Si、N 或 O 原子、sp^2-混成之 C 或 N 原子或 sp-混成之 C 原子）另外連接多個芳基或雜芳基的系統。因此，例如系統諸如 9,9'-螺雙芴、9,9'-二芳基芴、三芳基胺、二芳基醚、二苯乙烯、等等就本發明之意義而言亦意欲為芳族環系統，如為其中二或多個芳基例如以直鏈或環狀烷基、烯基或炔基或以矽基連接之系統。此外，其中二或多個芳基或雜芳基係經由單鍵彼此連接之系統就本發明之意義而言亦為芳族或雜芳族環系統，諸如，例如

聯苯、聯三苯或二苯基三吡之系統。

在各情況中亦可經如上述定義之基團取代且可經由任何所要位置連接至芳族或雜芳族基團之具有 5-60 個芳族環原子的芳族或雜芳族環系統特別意指衍生自下列之基團：苯、萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、䓛、苝、1,2-苯並苊、稠四苯、稠五苯、苯並芘、聯苯、伸聯苯（biphenylene）、聯三苯（terphenyl）、伸聯三苯（terphenylene）、聯四苯（quaterphenyl）、茀、螺聯茀、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茚並茀、三聚茚（truxene）、異三聚茚（isotruxene）、螺三聚茚、螺異三聚茚、呋喃、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、噻吩、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、吡咯、吲哚、異吲哚、咔唑、吲哚並咔唑、茚並咔唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯並-5,6-喹啉、苯並-6,7-喹啉、苯並-7,8-喹啉、啡噻吡、啡噁吡、吡唑、吲唑、咪唑、苯並咪唑、萘並咪唑（naphthimidazole）、菲並咪唑（phenanthrimidazole）、吡啶並咪唑（pyridimidazole）、吡吡並咪唑（pyrazinimidazole）、喹噁啉並咪唑（quinoxalinimidazole）、噁唑、苯並噁唑、萘並噁唑（naphthoxazole）、蒽並噁唑（anthroxazole）、菲並噁唑（phenanthroxazole）、異噁唑、1,2-噻唑、1,3-噻唑、苯並噻唑、嗒吡、苯並嗒吡、嘧啶、苯並嘧啶、喹噁啉、1,5-二氮雜蒽、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、吡吡、啡吡、啡噁吡、啡噻吡、熒紅環

（fluorubin）、吲啶、氮雜咔唑、苯並咔啉、啡啉、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯並三唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,2,3-噻二唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二唑、1,3,5-三吩、1,2,4-三吩、1,2,3-三吩、四唑、1,2,4,5-四吩、1,2,3,4-四吩、1,2,3,5-四吩、嘌呤、喋啶、吲咔和苯並噻二唑或這些基團的組合。

就本發明的目的而言，具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或具有 2 至 40 個 C 原子之烯基或炔基，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）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。

就本申請案之目的而言，二或多個基團彼此可形成環之規劃特別意指：二個基團彼此以一化學鍵連接。然而，此外，上述規劃也意指：在其中二個基團之一表示氫的情況中，第二基團係鍵結於氫原子所鍵結之位置，且形成一環。

就式（I）之化合物而言，Ar^1 基團較佳不存在於位置 7。式（I）或（II）此外較佳的是沒有選自芳族或雜芳族環系統之 R^1 基團存在於位置 7。式（I）或（II）最佳的是選自 H 和 D 且較佳為 H 之任一 R^1 基團存在於位置 7 或基團 R^0 存在於位置 7。R^0 基團所指示之較佳實施態樣在此適用。

式（I）化合物除了苯並蒽骨架之外，較佳含有至少一種縮合芳基，較佳至少一種具有 14 至 18 個芳族環原子之縮合芳基。縮合芳基可隨意的地存在為 Ar^1、R^1、R^2、R^3 或 R^4 基團，較佳作為 Ar^1 或 R^2 基團。根據其出現作為

式（I）中之 Ar^1、R^1、R^2、R^3 或 R^4 基團，如相關基團允許，其可經取代。例如，若其存在為 Ar^1 基團，則其可經一或多個 R^2 基團取代。

Ar^1 基團較佳係存在於苯並蒽中之選自位置 1、2、3、4、5、6、8、9、10、11、12 的位置，特佳於選自位置 2、3、4、5、6、8、9、10、11 的位置，非常特佳於選自位置 2、3、4、5、6、8、11 的位置，甚至更佳於選自位置 2、3、4、5、6 的位置，和最佳於選自位置 4 和 5 的位置。

L 基團較佳係存在於苯並蒽中之選自位置 1、2、3、4、5、6、8、9、10、11、12 的位置，特佳於選自位置 2、3、4、5、6、8、9、10、11 的位置，非常特佳於選自位置 2、3、4、5、6、8、11 的位置，甚至更佳於選自位置 2、3、4、5、6 的位置，和最佳於選自位置 4 和 5 的位置。

R^0 基團較佳係存在於苯並蒽中之選自位置 7、8、9、10、11、12 的位置，特佳於選自位置 7 和 12 的位置，非常特佳於位置 7 的位置。

式（I）或（II）之化合物較佳含有不超過三個 R^1 基團，特佳不超過二個 R^1 基團，非常特佳精確一個或沒有 R^1 基團，和最佳沒有 R^1 基團。

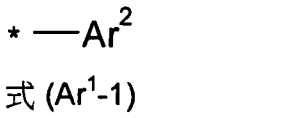
Ar^1 較佳係選自具有 6 至 30 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取代），和具有 5 至 30 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取

代）。Ar^1 特佳係在每次出現時相同或不同地選自具有 6 至 25 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取代）。Ar^1 特佳係選自由下列所組成之群組：苯、萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、茀、苊、1,2-苯並苊、稠四苯、稠五苯、苯並芘、聯苯、聯三苯、聯四苯、茚、螺聯茚、呋喃、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、噻吩、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、吲哚、異吲哚、咔唑、吲哚並咔唑、茚並咔唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯並咪唑、嘧啶、吡咑和三咑，其中該等基團可各自經一或多個 R^2 基團取代。

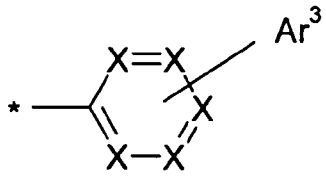
較佳者為 R^2 基團，（其鍵結至基團 Ar^1，且選自 H、D、F、CN、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基和具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代））、和選自具有 6 至 24 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）、和選自具有 5 至 24 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）。具有 6 至 24 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）、和具有 5 至 24 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）。在此較佳係選自由下列所組成之群組：苯、萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、茀、苊、1,2-苯並苊、稠四苯、稠五苯、苯並芘、聯苯、聯三苯、聯四苯、茚、螺聯茚、呋喃、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、噻吩、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯

並噻吩、吲哚、異吲哚、咔唑、吲哚並咔唑、茚並咔唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯並咪唑、嘧啶、吡哄和三哄，其中該等基團可各自經一或多個 R^3 基團取代。

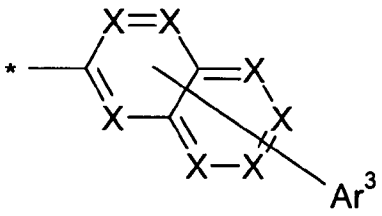
基團 Ar^1 之較佳實施態樣符合下式（Ar^1-1）至（Ar^1-6）：



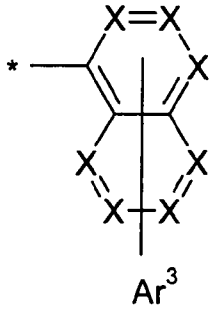
式 (Ar^1-1)



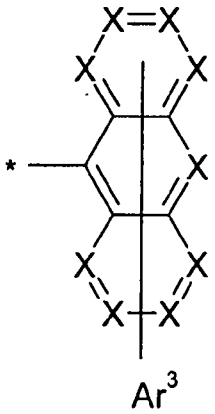
式 (Ar^1-2)



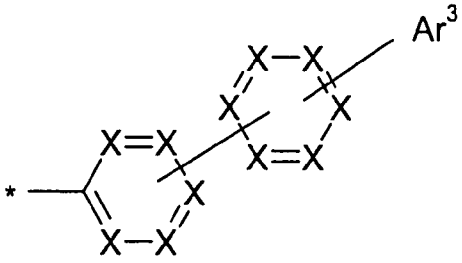
式 (Ar^1-3)



式 (Ar^1-4)



式 (Ar^1-5)



式 (Ar^1-6)

其中：

X　在每次出現時相同或不同地係選自包含下列之基團：

N、CR^2和C，其中若Ar^3基團係鍵結至X，X可只等於C；

Ar^2係選自具有6至30個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個R^2基團取代），和選自具有5至30個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個R^2基團取代）；

Ar^3係選自具有6至24個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個R^3基團取代），和選自具有5至24個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個R^3基團取代）；

及標有*的鍵為連接至苯並蒽單元之基團的鍵結位置。

對應於式（Ar^1-3）、（Ar^1-4）和（Ar^1-5），Ar^3基團在各情況下係鍵結至萘基衍生物或蒽基衍生物之任何所要的自由位置。就式（Ar^1-5）而言，蒽基衍生物之9-或10-位置的鍵結為較佳。

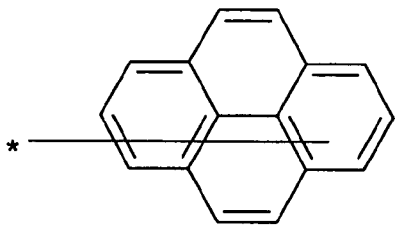
基團X較佳係選自包含CR^2和C之基團，其中若Ar^3基團係鍵結至X，X可只等於C。

Ar^2較佳係選自具有10至22個芳族環原子之縮合芳基（其可經一或多個R^2基團取代）、和選自具有9至22個芳族環原子之縮合雜芳基（其可經一或多個R^2基團取代）。Ar^2特佳係選自由下列所組成之群組：萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、䓛、苝、1,2-苯並苝、稠四苯、稠五苯、苯並芘、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、吲哚、異吲哚、咔

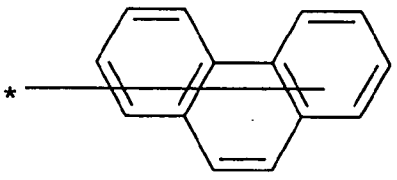
唑、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯並咪唑，其中該等基團可各自經一或多個 R^2 基團取代。Ar^2 非常特佳係選自由下列所組成之群組：萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、稞、芴、1,2-苯並芘和稠四苯，其中該等基團可各自經一或多個 R^2 基團取代。

Ar^3 較佳係選自具有 6 至 22 個芳族環原子之芳基（其可經一或多個 R^3 基團取代）、和選自具有 5 至 22 個芳族環原子之雜芳基（其可經一或多個 R^3 基團取代）。Ar^3 特佳係選自由下列所組成之群組：苯、萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、稞、芴、1,2-苯並芘、稠四苯、稠五苯、苯並芘、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、吲哚、異吲哚、咔唑、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯並咪唑，其中該等基團可各自經一或多個 R^3 基團取代。Ar^3 非常特佳係選自由下列所組成之群組：苯、萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、稞、芴、1,2-苯並芘和稠四苯，其中該等基團可各自經一或多個 R^3 基團取代。

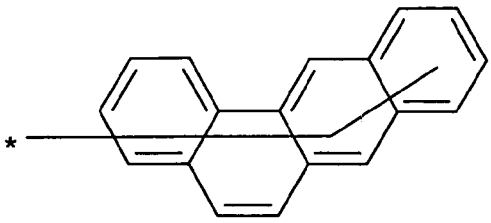
式（Ar^1-1）之 Ar^1 基團的較佳實施態樣符合下式（Ar^1-1-1）至（Ar^1-1-8）：



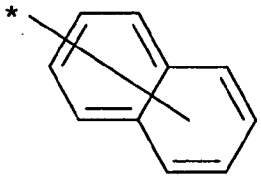
式 (Ar^1-1-1)



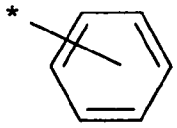
式 (Ar^1-1-2)



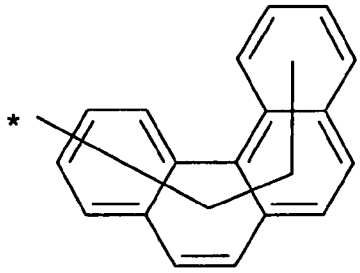
式 (Ar^1-1-3)



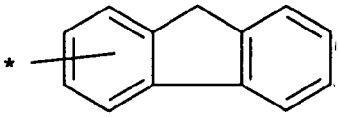
式 (Ar^1-1-4)



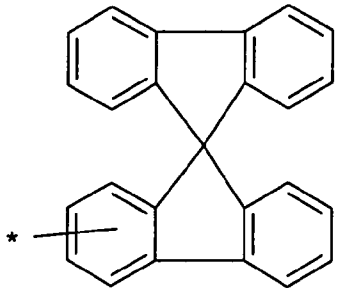
式 (Ar^1-1-5)



式 (Ar^1-1-6)



式 (Ar^1-1-7)



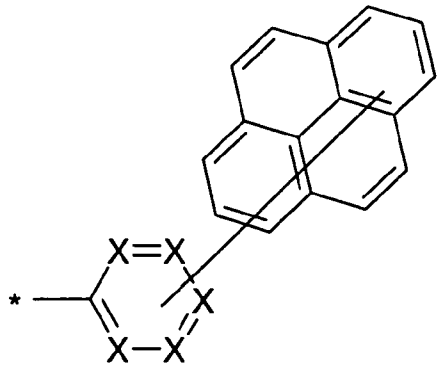
式 (Ar^1-1-8)

其中：

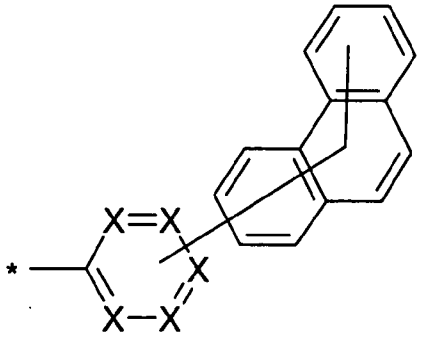
R^2 基團在各情況下可存在於自由位置；及

標有*的鍵為連接至苯並蒽單元之基團的鍵結位置。

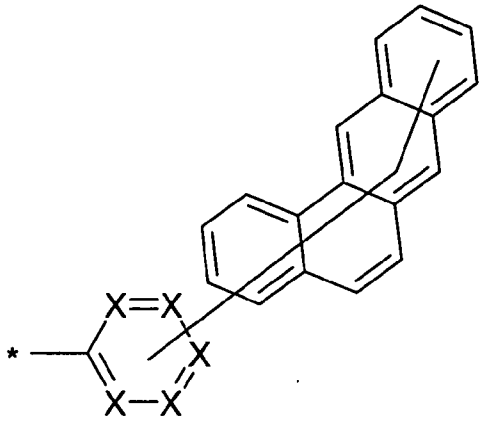
式（Ar^1-2）之 Ar^1 基團的較佳實施態樣符合下式（Ar^1-2-1）至（Ar^1-2-6）：



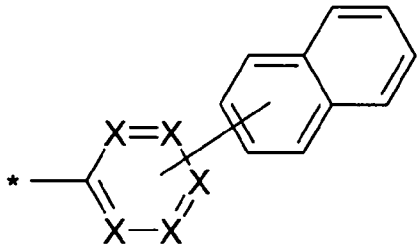
式 (Ar^1-2-1)



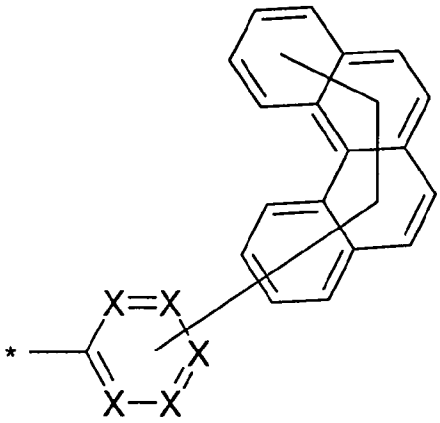
式 (Ar^1-2-2)



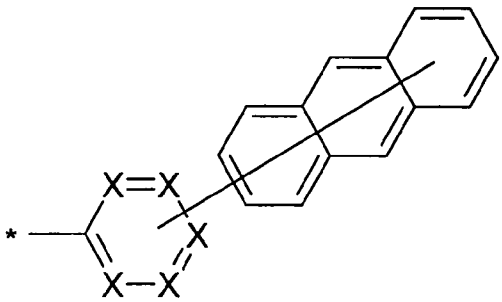
式 (Ar^1-2-3)



式 (Ar^1-2-4)



式 (Ar^1-2-5)



式 (Ar^1-2-6)

其中：

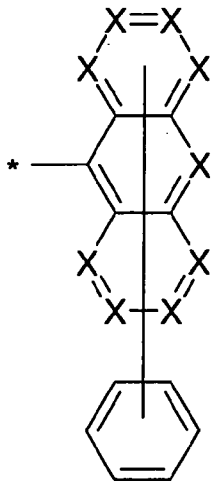
X　如上述所定義，且較佳係在每次出現時相同或不同地選自 CR^2 和 C，其中若取代基係鍵結至 X ，則 X 可

只為 C；

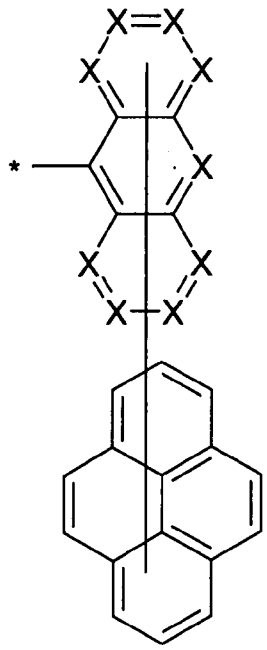
R^3 基團在各情況下可存在於自由位置；及

標有*的鍵為連接至苯並蒽單元之基團的鍵結位置。

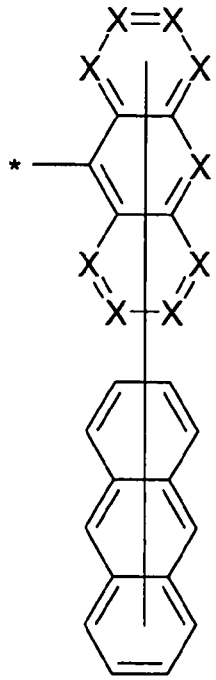
式（Ar^1-5）之 Ar^1 基團的較佳實施態樣符合下式（Ar^1-5-1）至（Ar^1-5-7）：



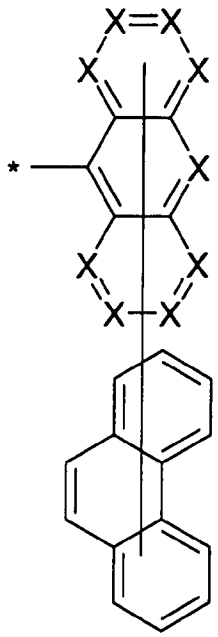
式 (Ar^1-5-1)



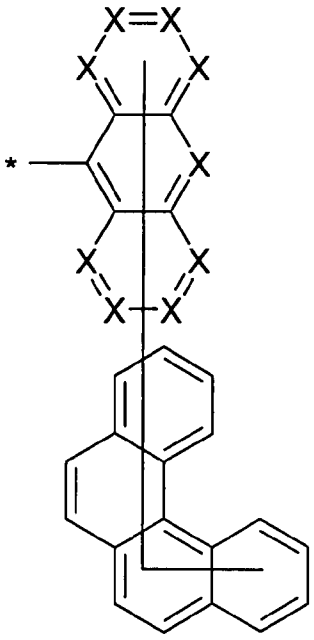
式 (Ar^1-5-2)



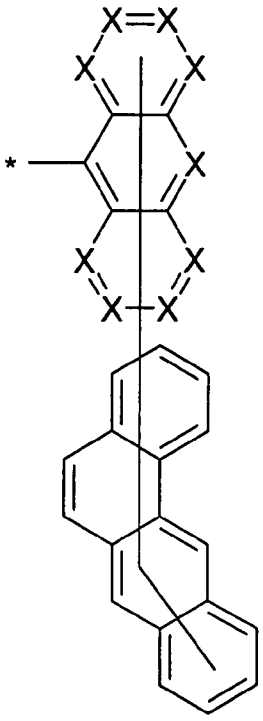
式 (Ar^1-5-3)



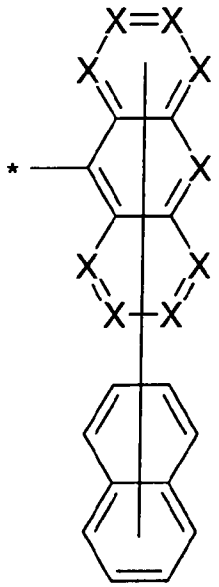
式 (Ar^1-5-4)



式 (Ar^1-5-5)



式 (Ar^1-5-6)



式 (Ar^1-5-7)

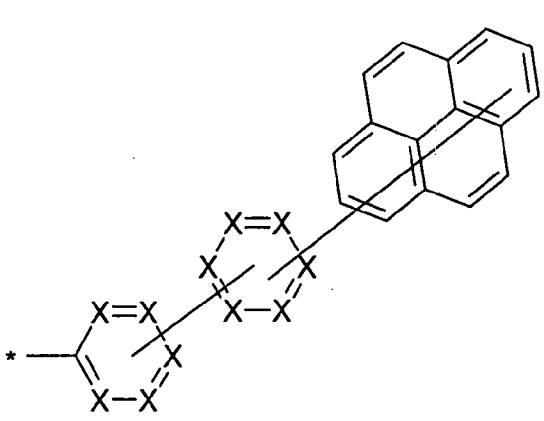
其中：

X 如上述所定義，且較佳係在每次出現時相同或不同地選自 CR^2 和 C，其中若取代基係鍵結至 X，則 X 可只為 C；

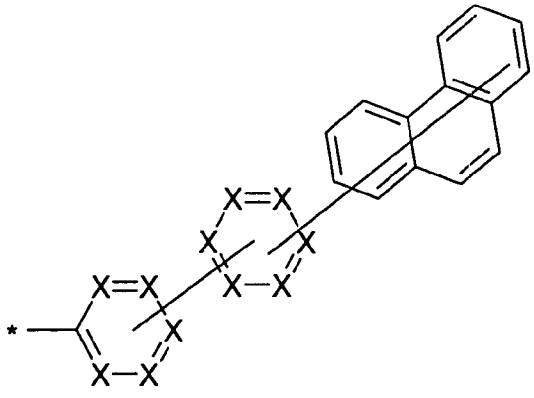
R^3 基團在各情況下可存在於自由位置；及

標有*的鍵為連接至苯並蒽單元之基團的鍵結位置。

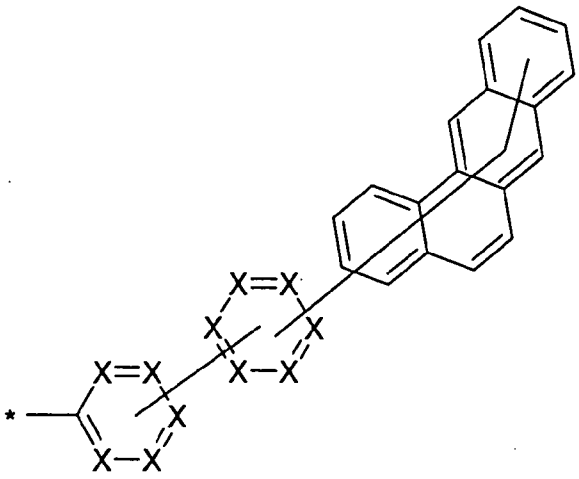
式（Ar^1-6）之基團 Ar^1 的較佳實施態樣符合下式（Ar^1-6-1）至（Ar^1-6-6）：



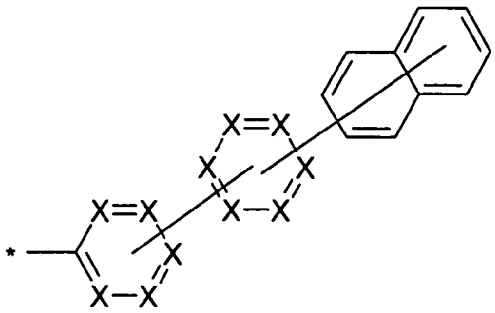
式 (Ar^1-6-1)



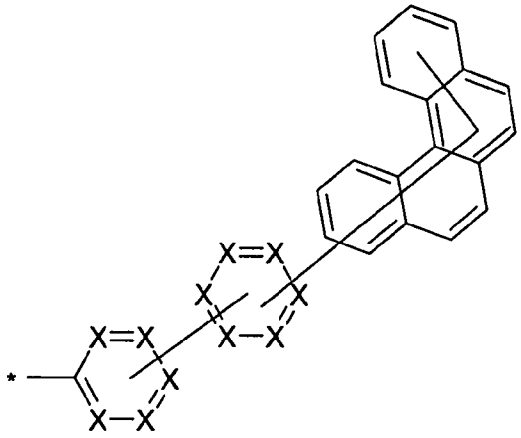
式 (Ar^1-6-2)



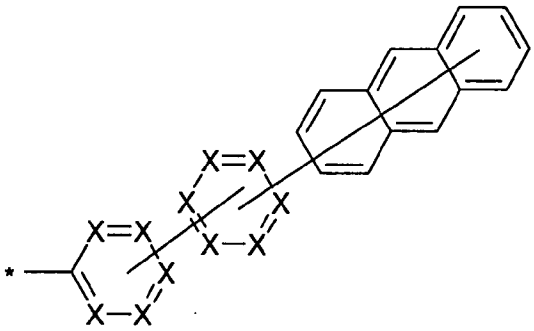
式 (Ar^1-6-3)



式 (Ar^1-6-4)



式 (Ar^1-6-5)



式 (Ar^1-6-6)

其中：

X　如上述所定義，且較佳係在每次出現時相同或不同地選自 CR^2 和 C，其中若取代基係鍵結至 X，則 X 可只為 C；

R^3 基團在各情況下可存在於自由位置；及

標有*的鍵為連接至苯並蒽單元之基團的鍵結位置。

R^0 較佳係選自 $C(=O)R^3$、CN、$Si(R^3)_3$、OR^3、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 10 個 C

原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 10 個 C 原子之烯基或炔基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代，和其中上述基團中之一或多個 CH_2 可經 $-R^3C=CR^3-$、$-C\equiv C-$、$Si(R^3)_2$、-O-或-S-置換）。R^0 特佳係選自 $Si(R^3)_3$、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基，其中上述基團可各自經一或多個基團取代 R^3。R^0 非常特佳地係選自甲基、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、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、環辛氧基和 2-乙基己氧基、三甲矽基、三乙矽基及經 $-Si(R^4)_3$ 基團取代之上述基團的衍生物。

L 較佳係選自具有 6 至 30 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取代）、或選自具有 5 至 30 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^2 基團取代），或 L 為單鍵，其中在此情況下 n 等於 2。L 特佳係選自苯、萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、䓛、苝、1,2-苯並苊、稠四苯、稠五苯、苯並芘、聯苯、聯三苯、聯四苯、芴、螺聯芴、呋喃、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、噻吩、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、

吲哚、異吲哚、咔唑、吲哚並咔唑、茚並咔唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯並咪唑、嘧啶、吡哄及三哄，其中該等基團可各自經一或多個 R^2 基團取代，或 L 為單鍵，其中在此情況下 n 等於 2。

標號 n 較佳等於 2 或 3，特佳等於 2。

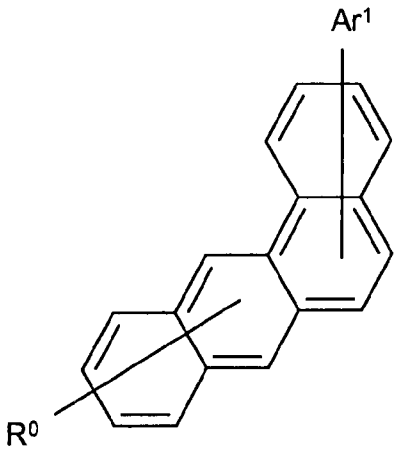
R^1 較佳係在每次出現時相同或不同地選自 H、D、F、CN、$Si(R^3)_3$、$N(R^3)_2$、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基和具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經-C≡C-、$-R^3C=CR^3-$、$Si(R^3)_2$、C=O、$C=NR^3$、$-NR^3-$、-O-、-S-、-C(=O)O-或$-C(=O)NR^3-$置換）、和具有 6 至 24 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）、和具有 5 至 24 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）。R^1 特佳係在每次出現時相同或不同地選自 H、D、F、CN、$Si(R^3)_3$、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基和具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代）。

R^2 較佳係在每次出現時相同或不同地選自 H、D、F、CN、$Si(R^3)_3$、$N(R^3)_2$、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基和具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經-C≡C-、$-R^3C=CR^3-$、$Si(R^3)_2$、C=O、$C=NR^3$、$-NR^3-$、-O-、-S-、

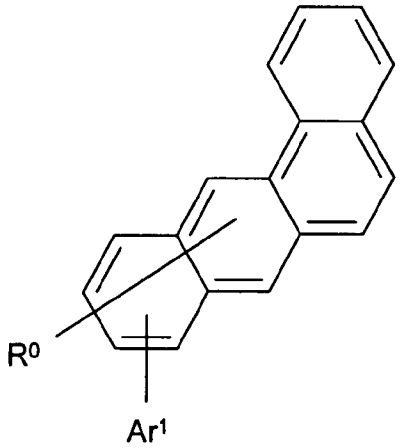
-C(=O)O-或-C(=O)NR^3-置換）、和具有 6 至 24 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代），和具有 5 至 24 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）。

R^3 較佳係在每次出現時相同或不同地選自 H、D、F、CN、$Si(R^4)_3$、$N(R^4)_2$、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基和具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基，其中上述基團可各自經一或多個 R^4 基團取代和其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經-C≡C-、$-R^4C=CR^4-$、$Si(R^4)_2$、C=O、$C=NR^4$、$-NR^4-$、-O-、-S-、-C(=O)O-或-C(=O)NR^4-置換）、和具有 6 至 24 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^4 基團取代）、和具有 5 至 24 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^4 基團取代）。

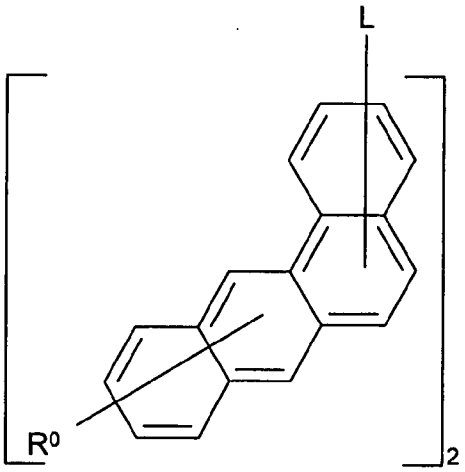
式（I）和（II）之化合物的較佳實施態樣符合式（I-1）和（I-2）及（II-1）和（II-2）



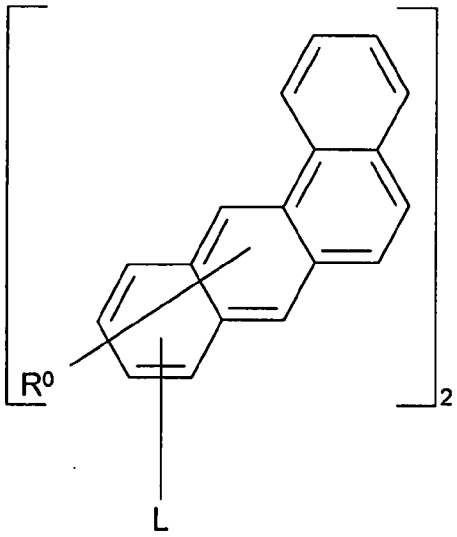
式(I-1)



式 (I-2)



式 (II-1)



式 (II-2),

其中出現之 L、R^0 和 Ar^1 基團係如上述所定義，和其中 R^1 基團，如上述所定義，在各情況下可存在於苯並蒽之中指示為未經取代的所有位置。

根據式（I-1）中之指示，式（I-1）中之 Ar^1 基團係鍵結在選自位置 1、2、3、4、5、6 的位置。在此較佳者為選自位置 2、4、5 的位置，特佳選自位置 4 和 5 的位置。

根據式（II-1）中之指示，式（II-1）中之 L 基團係鍵結在選自位置 1、2、3、4、5、6 的位置。在此較佳者為選自位置 2、4、5 的位置，特佳選自位置 4 和 5 的位置。

根據式（I-1）和（II-1）中之指示，式（I-1）和（II-1）中之 R^0 基團係鍵結在選自位置 7、8、9、10、11、12 的位置。在此較佳者為選自位置 7 和 12 的位置，特佳為位置 7。

根據式（I-2）中之指示，式（I-2）中之 Ar^1 基團係鍵結在選自位置 8、9、10、11 的位置。

根據式（II-2）中之指示，式（II-2）中之 L 基團係鍵結在選自位置 8、9、10、11 的位置。

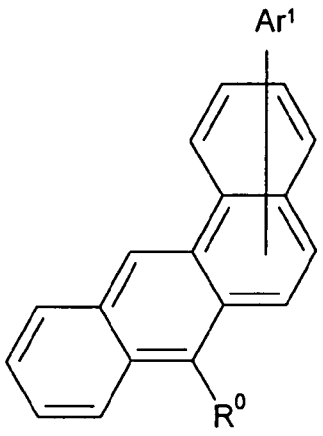
根據式（I-2）和（II-2）中之指示，式（I-2）和（II-2）中之 R^0 基團係鍵結在選自位置 7、8、9、10、11、12 的位置。在此較佳者為選自位置 7 和 12 的位置，特佳為位置 7。

L、Ar^1、R^0、R^1、R^2 和 R^3 基團之上示較佳實施態樣

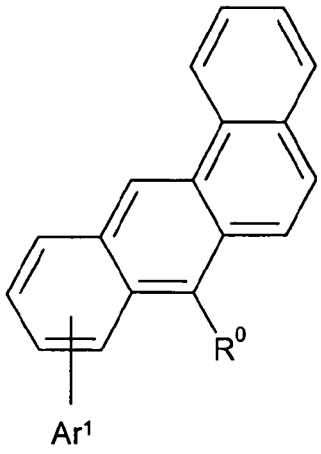
就式（I-1）、（I-2）、（II-1）和（II-2）而言同樣為較佳的。

式（I-1）、（I-2）、（II-1）和（II-2）之中，特佳者為式（I-1）。

式（I）之化合物的較佳實施態樣符合式（I-1-1）和（I-2-1）



式 (I-1-1)



式 (I-2-1),

其中出現之 R^0 和 Ar^1 基團係如上述所定義，和其中 R^1 基團，如上述所定義，在各情況下可存在於苯並蒽之中指示為未經取代的所有位置。

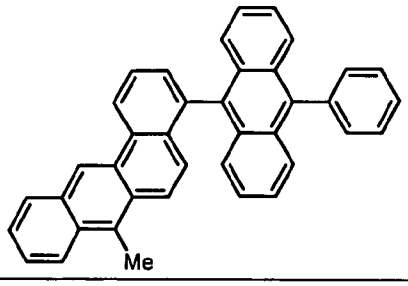
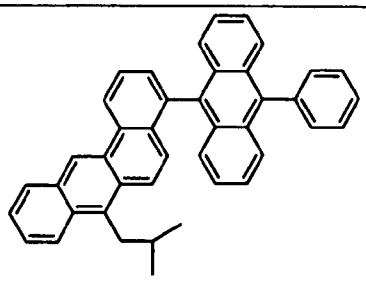
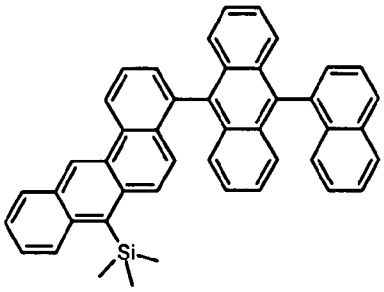
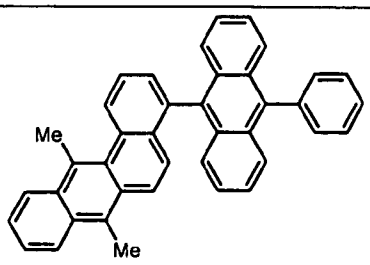
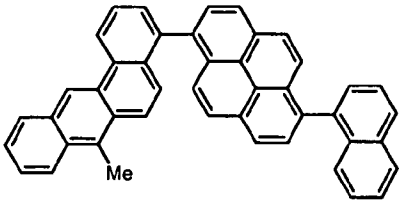
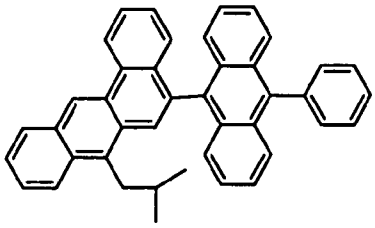
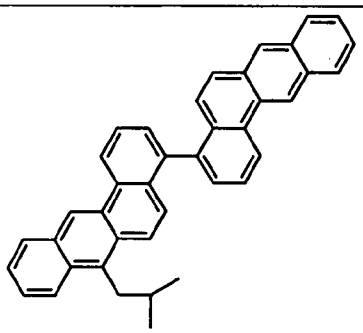
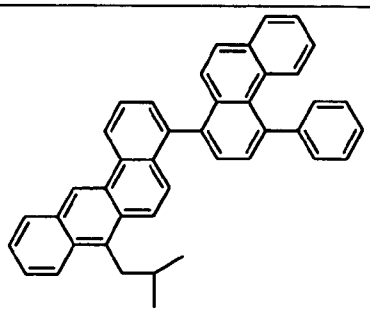
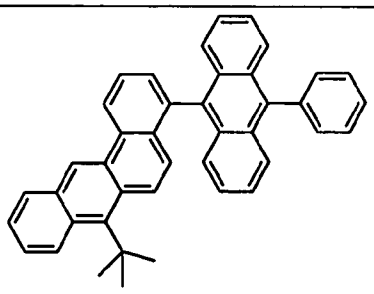
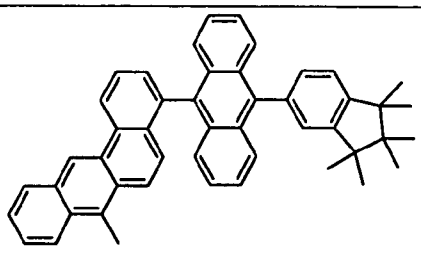
Ar^1、R^0、R^1、R^2和 R^3基團之上述較佳實施態樣就式（I-1-1）和（I-2-1）而言同樣為較佳的。

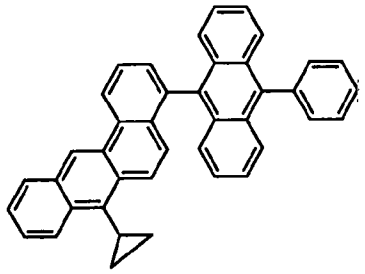
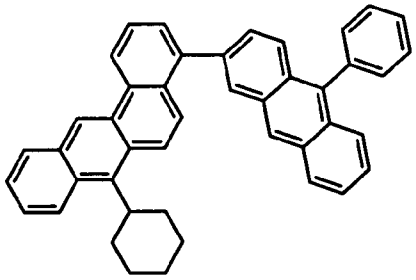
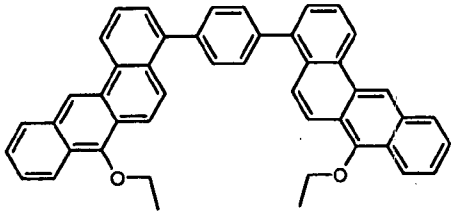
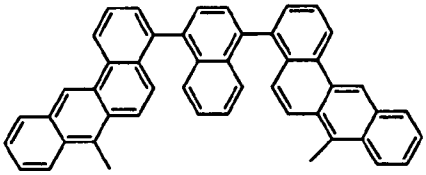
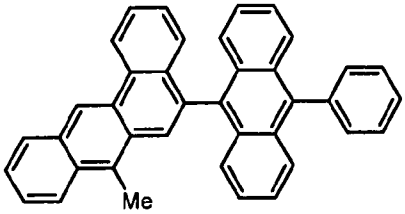
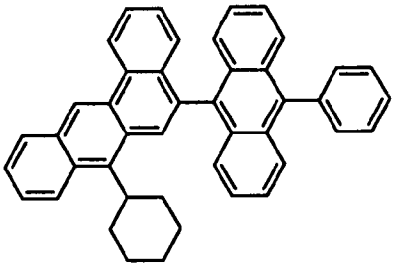
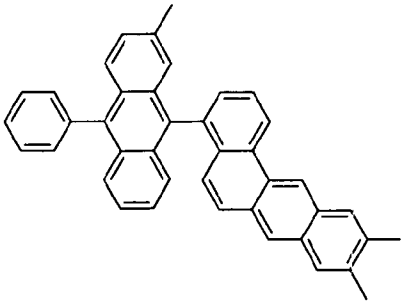
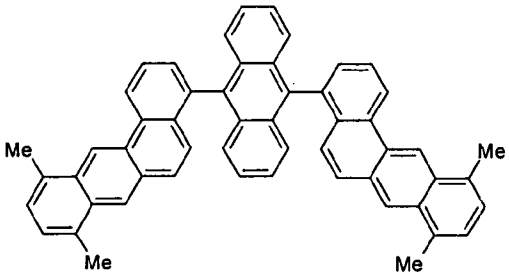
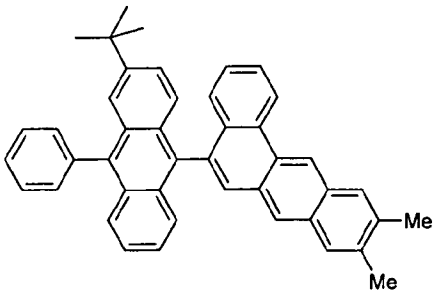
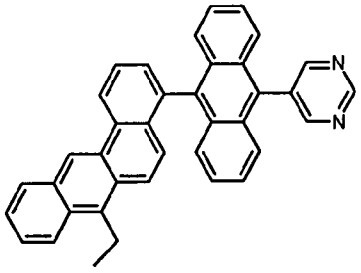
根據式（I-1-1）中之指示，式（I-1-1）中之 Ar^1基團係鍵結在選自位置 1、2、3、4、5、6 的位置。式（I-1-1）較佳為基團 Ar^1鍵結於選自位置 2、4 和 5 的位置，特佳於選自位置 4 和 5 的位置。

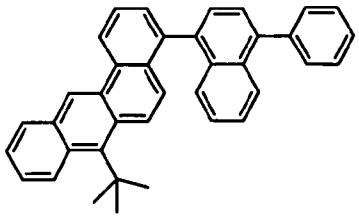
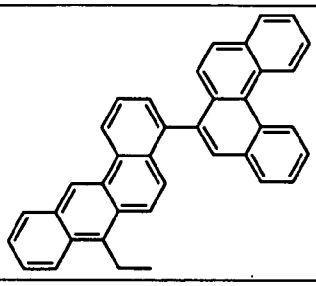
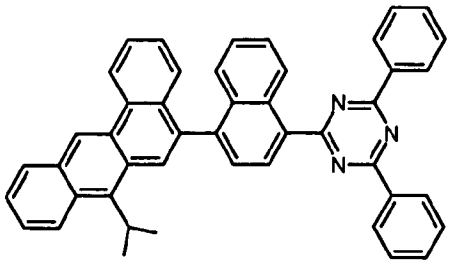
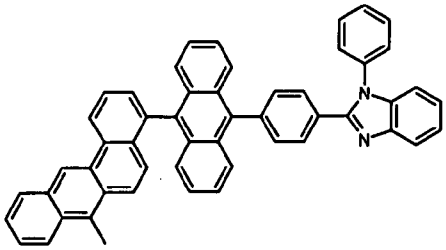
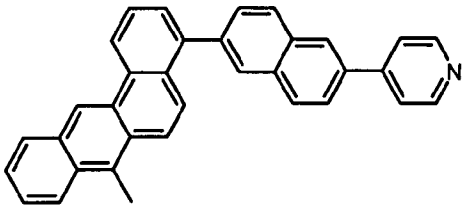
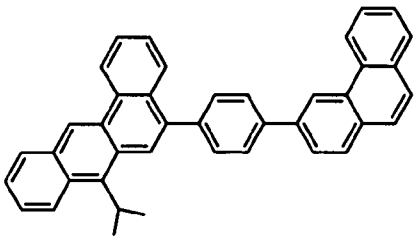
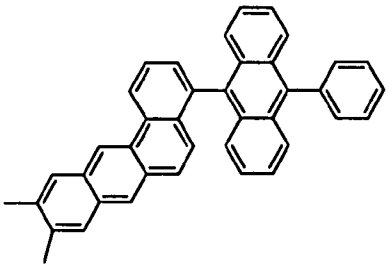
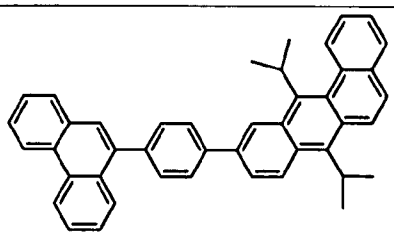
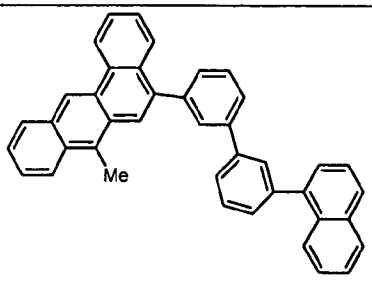
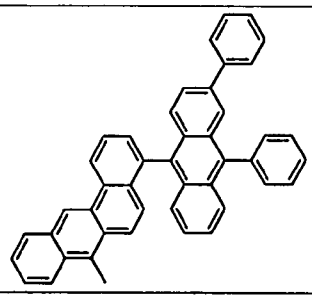
根據式（I-2-1）中之指示，式（I-2-1）中之 Ar^1基團係鍵結在選自位置 8、9、10、11 的位置。

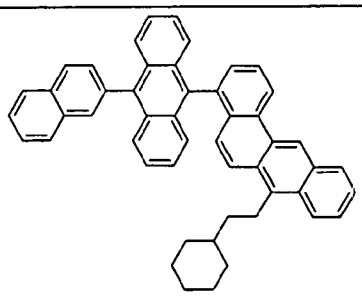
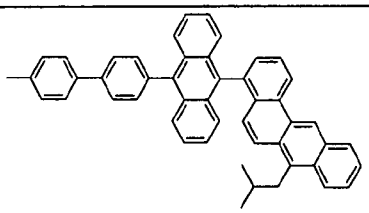
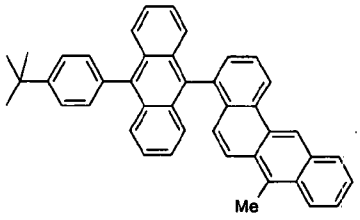
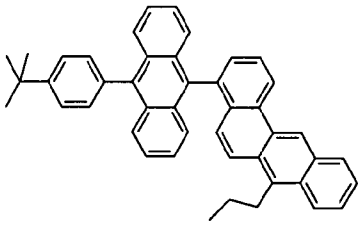
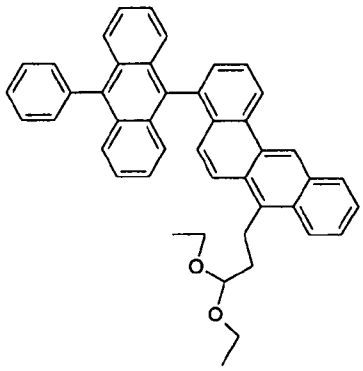
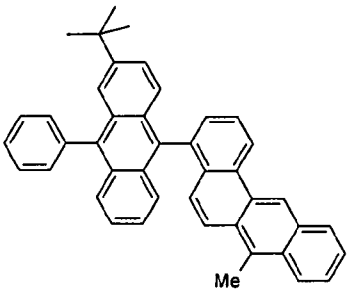
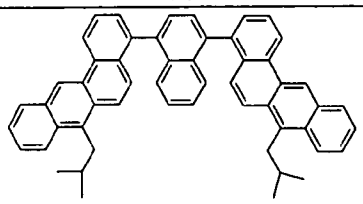
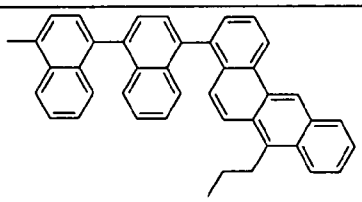
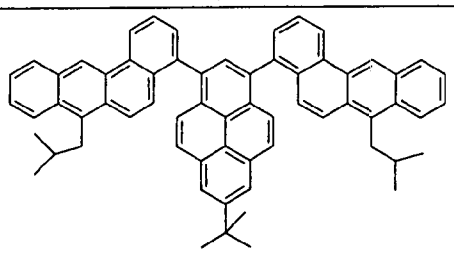
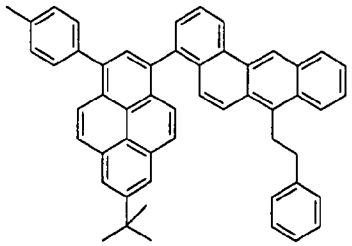
式（I-1-1）和（I-2-1）之中，特佳者為式（I-1-1）。

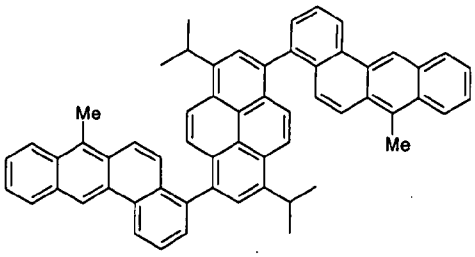
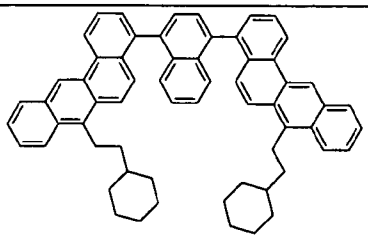
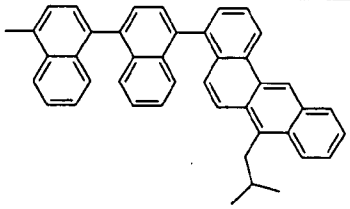
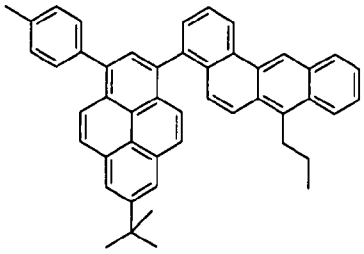
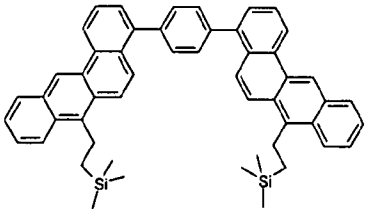
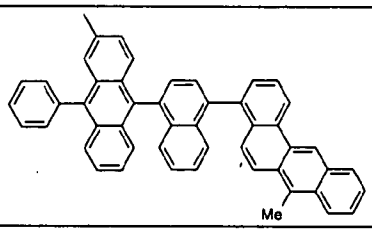
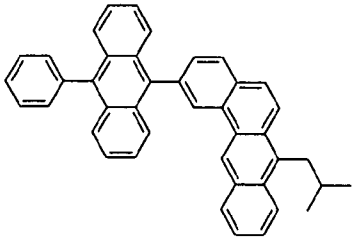
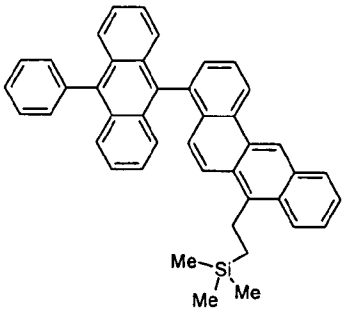
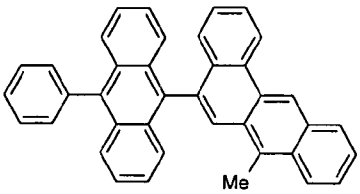
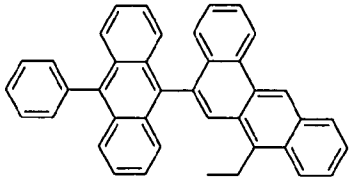
下列化合物為式（I）或（II）之化合物的實例：

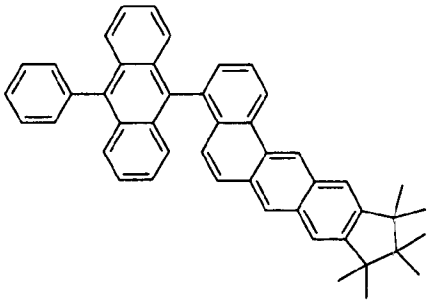
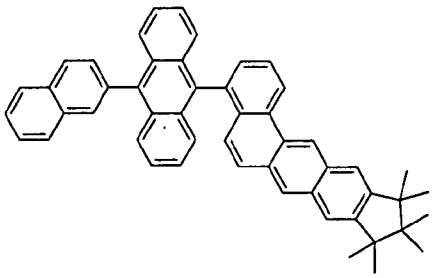
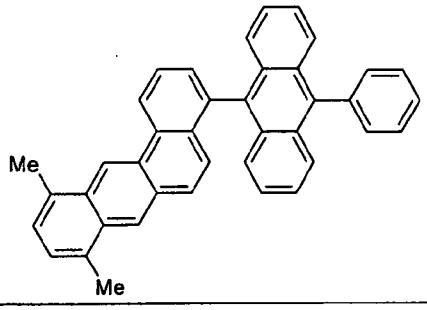
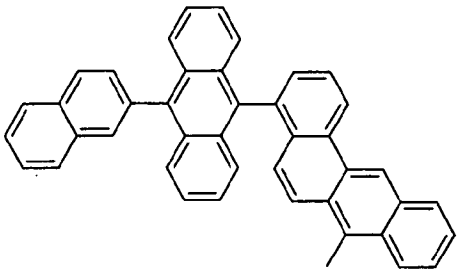
	
1	2
	
3	4
	
5	6
	
7	8
	
9	10

	
11	12
	
13	14
	
15	16
	
17	18
	
19	20

	
21	22
	
23	24
	
25	26
	
27	28
	
29	30

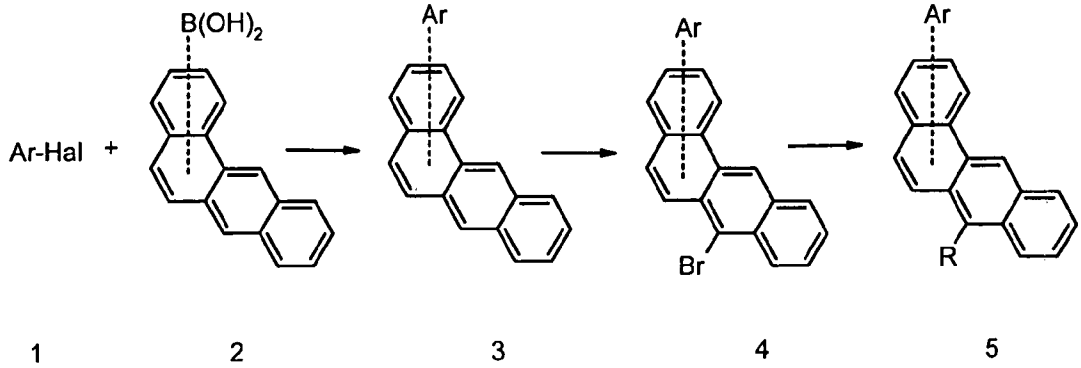
	
31	32
	
33	34
	
35	36
	
37	38
	
39	40

	
41	42
	
43	44
	
45	46
	
47	48
	
49	50

	
51	52
	
53	54

例如，根據下列反應流程（流程 1）可製備根據本發明之化合物：

流程 1



Ar：任何所欲的芳族或雜芳族環系統

Hal：鹵素原子或其它反應基

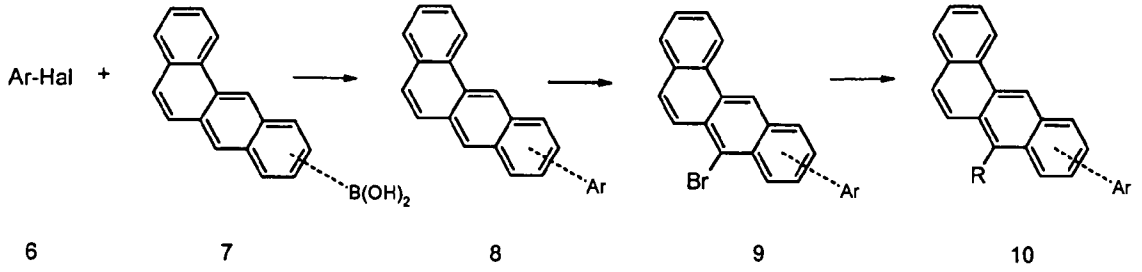
R：任何所欲的有機基團

為此，所使用之起始材料為經硼酸取代的苯並蒽衍生物 2。其中可製備該等一般結構 2 之化合物的方法係描述

於 WO 2008/145239 的實施例中。硼酸基團在此可存在於苯並蒽中之選自位置 1-6 的任何所要位置。接著進行與任何所欲之經反應性基團取代的芳族或雜芳族環系統之偶合反應。此產生一般結構 3 之化合物。此接著在 7-位置溴化，並在 7-位置引入 R 基團。R 基團較佳為隨意地經取代的烷基。

獲得根據本發明之化合物的替代合成流程，從在 8-、9-或 11-位置經芳基取代的苯並蒽衍生物開始（流程 2）。其中可製備該等化合物的方法係描述於（例如）WO 2011/012212 中。如流程 2 所述，接著在 7-位置溴化，和引入 R 基團（較佳隨意地經取代的烷基）。

流程 2

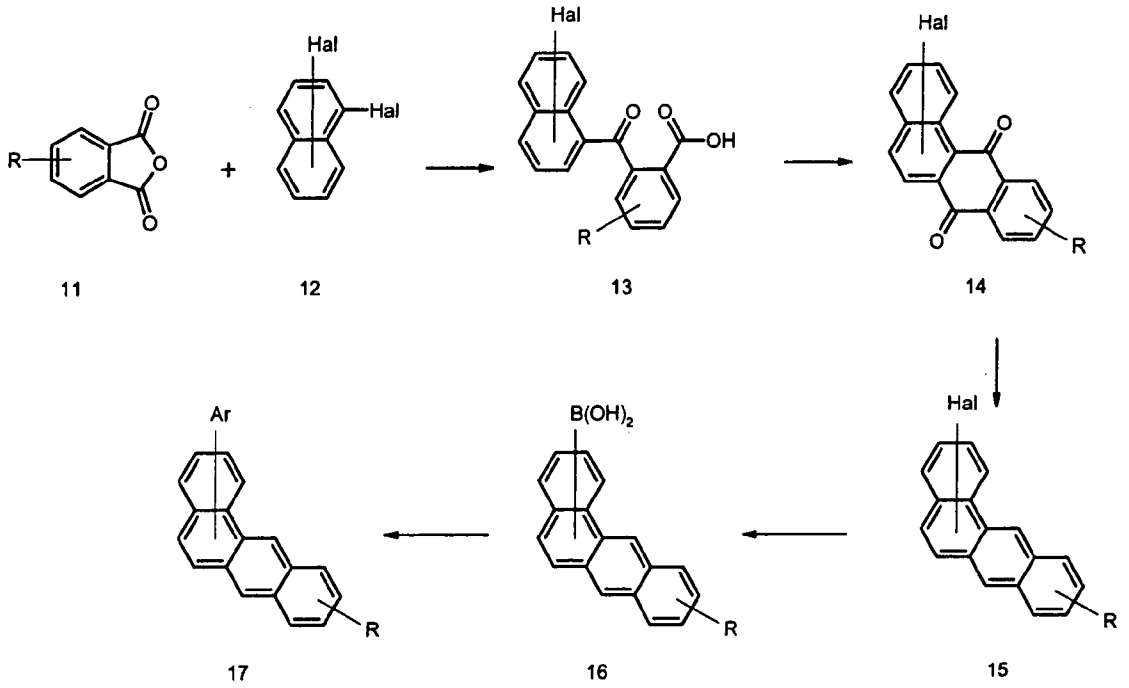


6 7 8 9 10

Ar：任何所欲的芳族或雜芳族環系統
Hal：鹵素原子或其它反應基
R：任何所欲的有機基團

用於獲得根據本發明之化合物的另一替代方法顯示於下述流程 3 中。

流程 3



Ar：任何所欲的芳族或雜芳族環系統
Hal：鹵素原子或其它反應基
R：任何所欲的有機基團

為此，首先使酞酐衍生物 11 與經取代的萘基化合物 12 反應。使所形成之化合物 13 以分子內夫里德耳-夸夫特（Friedel-Crafts）醯化作用進一步反應而產生醌化合物 14。此還原成苯並蒽化合物 15。接著在反應性基團 Hal 之位置引入硼酸官能，產生式 16 之化合物。接著經由鈴木（Suzuki）反應引入 Ar 基團，產生根據本發明之化合物 17，其在苯並蒽之位置 8-11 中的一者含有 R 基團。

本申請案因此關於一種製備式（I）或（II）之化合物的方法，其包含依下列順序的步驟 1）至 3）：

1）藉由苯並蒽衍生物和芳族或雜芳族環系統之間的偶合反應以製備經一或多個芳族或雜芳族環系統取代之苯並蒽

化合物；

2）苯並蒽之鹵化，較佳溴化；

3）在鹵化（較佳溴化）位置引入取代基。

在此方法中，在步驟 2）中鹵化（較佳溴化）較佳發生在苯並蒽的位置 7。此外較佳的是：步驟 1）中藉由偶合反應引入之芳族或雜芳族環系統存在於苯並蒽上之選自位置 1 至 6 的位置。

本申請案此外關於一種製備式（I）或（II）之化合物的方法，其包含依所指示之順序的下列步驟：

I）從萘基衍生物和酞酐製備經取代的苯並蒽衍生物；

II）令該經取代的苯並蒽衍生物與芳族或雜芳族環系統進行偶合反應。

步驟 I）較佳包括醯化反應、分子內夫里德耳-夸夫特醯化作用和醌衍生物的還原作用。苯並蒽衍生物的取代基較佳存在於苯並蒽之選自位置 8-11 的位置。步驟 II）中的偶合反應較佳地在苯並蒽之選自位置 1-6 的位置進行，特佳在選自位置 4 和 5 的位置進行。

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的寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物之單體。適當反應性脫離基為（例如）溴、碘、氯、硼酸、硼酸酯、胺、分別具有終端 C-C 雙鍵或 C-C 三鍵之烯基或炔基、環氧乙烷、環氧丙烷、進行環加成作用（例如 1,3-偶極環加成作用）之基團（諸如（例如）二烯或疊氮化物）、羧

酸衍生物、醇類和矽烷。

本發明因此另外關於包含一或多種式（I）或（II）之化合物的寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中連接至聚合物、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）或（II）中的任何所要位置。視式（I）或（II）之化合物的連接而定，該化合物為寡聚物或聚合物的側鏈之組分或主鏈的組分。寡聚物就本發明的意義而言意指由至少 3 個單體單元建構之化合物。聚合物就本發明的意義而言意指由至少十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、支鏈或樹枝狀。在以直鏈方式連接之結構中，式（I）或（II）之單元可彼此直接連接或經由二價基團（例如經由經取代或未經取代的伸烷基、經由雜原子或經由二價芳族或雜芳族基團）彼此連接。在支鏈及樹枝狀結構中，例如，三個或多個式（I）或（II）之單元可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）連接，以形成支鏈或樹枝狀寡聚物或聚合物。

與上述關於式（I）或（II）化合物相同的較佳選擇適用於寡聚物、樹枝狀聚合物及聚合物中的式（I）或（II）之重複單元。

為了製備寡聚物或聚合物，將本發明之單體進行均聚合或與其他單體進行共聚合。適合且較佳的共聚單體係選自茀（例如根據 EP 842208 或 WO 2000/22026）、螺聯茀

（例如根據 EP 707020、EP 894107 或 WO 2006/061181）、對-伸苯基（例如根據 WO 1992/18552）、咔唑（例如根據 WO 2004/070772 或 WO 2004/113468）、噻吩（例如根據 EP 1028136）、二氫菲（例如根據 WO 2005/014689 或 WO 2007/006383）、順式-反式-茚并芴（例如根據 WO 2004/041901 或 WO 2004/113412）、酮（例如根據 WO 2005/040302）、菲（例如根據 WO 2005/104264 或 WO 2007/017066），亦或多個此等單元。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，特別是以三芳基胺為主者。

根據本發明之聚合物和寡聚物通常藉由聚合一或多種類型之單體而製備，其中至少一種單體產生聚合物中的式（I）或（II）之重複單元。適當的聚合反應為熟習該項技術者已知的且描述於文獻中。產生 C-C 或 C-N 連接之特別適合且較佳的聚合反應如下：

（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。

其中可藉由此等方法進行聚合之方式及可接著自反應

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（例如藉由旋轉塗佈或藉由印刷方法），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。適合且較佳的溶劑為（例如）甲苯、苯甲醚、鄰-、間-或對-二甲苯、苯甲酸甲酯、均三甲苯、四氫萘、藜蘆醚、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-甲基苯並噻唑、2-苯氧基乙醇、2-吡咯啶酮、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、苯並噻唑、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、茚烷、苯甲酸甲酯、NMP、對-異丙基甲苯、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、二乙二醇二丁基醚、三乙二醇二甲基醚、二乙二醇單丁基醚、三丙二醇二甲基醚、四乙二醇二甲基醚、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。

本發明因此另外關於一種調配物，特別是一種溶液、分散液或乳液，其包含至少一種式（I）或（II）之化合物

或至少一種含有至少一種式（I）或（II）之單元的聚合物、寡聚物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。

根據本發明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。

根據本發明之化合物可以任何功能使用於有機電致發光裝置中，例如作為基質材料、作為發光材料、作為電洞傳輸材料或作為電子傳輸材料。較佳者為作為發光層（較佳螢光發光層）中之基質材料的用途，及作為有機電致發光裝置之發光層中的發光材料（較佳螢光發光材料）的用途。

本發明因此另外關於式（I）或（II）之化合物在電子裝置中之用途。電子裝置在此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（photoreceptor）、有機場淬熄裝置（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）。

本發明另外關於包含至少一種式（I）或（II）化合物的電子裝置。該電子裝置在此較佳係選自上述的裝置。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）或（II）之有機化合物。非常特佳者為一種包含陽極、陰極和至少一個包含至少一種式（I）或（II）之有機化合物的發光層之有機電致發光裝置。

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。這些層在各種情況下係選自例如一或多個電洞注入層、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 接面。

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。所有該等層並非必須存在，且可另外存在有其他層，例如相鄰於在陽極側上之發光層的電子阻擋層，或相鄰於在陰極側上之發光層的電洞阻擋層。

根據本發明之有機電致發光裝置可包含多個發光層。此等發光層在此情況下特佳地具有總計多個介於 380 nm 與 750 nm 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或黃光或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）或（II）之化合物且其中該三層呈現發藍光、綠光及橘光或紅光（基本結構參見例如 WO 2005/011013）。應注意：為了產生白光，單獨使用之發射寬波長範圍的發光體化合物亦適合於代替多個發色光之發光體化合物。根據本發明之化合物也可替代地及/或另外地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。

根據本發明之化合物特別適合於用作發光體化合物（較佳為發藍光的發光體化合物）之基質化合物或作為發光體化合物（較佳為發藍光的發光體化合物）。

較佳者為作為螢光發光體化合物之基質化合物的用途。

然而，根據本發明之化合物也可用作呈現熱活化延遲螢光（TADF）之發光體化合物的基質化合物。TADF 中之發光機制的基本原則揭示於 H. Uoyama 等人，Nature 2012,492,234 中。

若根據本發明之化合物用作基質材料，則其可與熟習該項技術者已知的任何所欲之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。

在有機電致發光裝置中之發光層包含發光化合物和基質化合物的混合物之情況下，下列適用：

在發光層的混合物中之發光化合物的比例較佳係介於 0.1 和 50.0%之間，特佳介於 0.5 和 20.0%，非常特佳介於 1.0

和 10.0%之間。對應地，基質材料或基質材料等之比例較佳係介於 50.0 和 99.9%之間，特佳介於 80.0 和 99.5%之間，非常特佳介於 90.0 和 99.0%之間。

以%表示之比例，在本申請案的情況下，若該化合物從氣相施加，意指體積%，及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發光層中之發光化合物，則其較佳與一或多種基質材料組合使用。發光化合物和基質材料之較佳比例在此係如上所示。

根據本發明之化合物此外也可用作電子傳輸層、電洞阻擋層或電子注入層中之電子傳輸化合物。為此目的，較佳的是根據本發明之化合物含有一或多個選自缺電子雜芳基之取代基，諸如，例如，三哄、嘧啶或苯並咪唑。

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材料的一般較佳種類係如下所示。

適當磷光發光化合物特別為在適當激發時發光（較佳在可見光區域內）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、鉬、鎢、銖、釕、鐵、銠、銥、鈀、鉑、銀、金或銪的化合物，特別為含有銥、鉑或銅的化合物。

就本發明之目的而言，所有的發光銥、鉑或銅錯合物被視為磷光化合物。

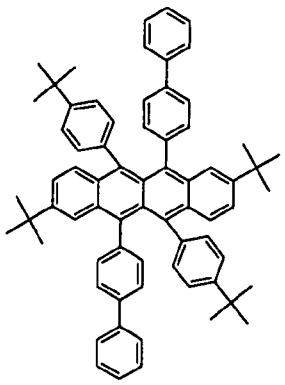
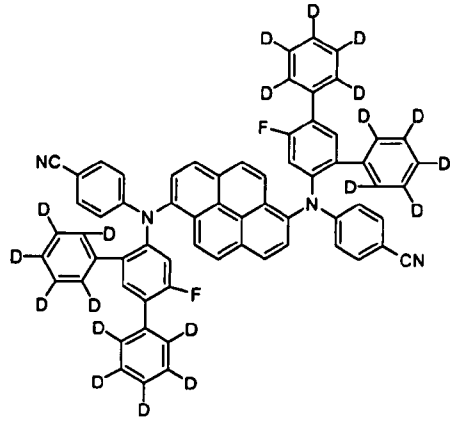
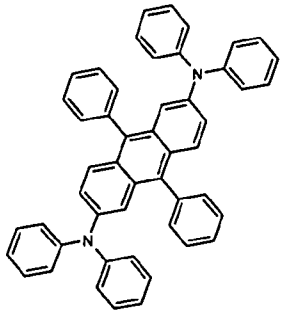
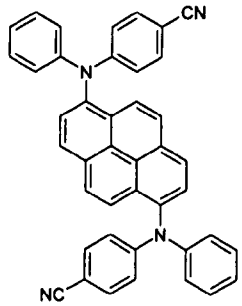
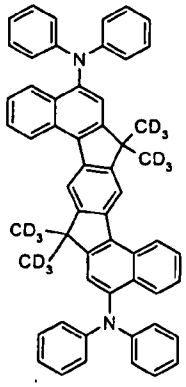
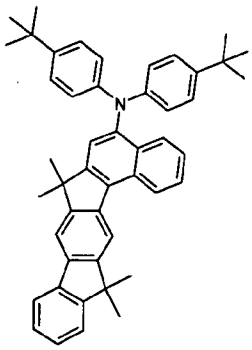
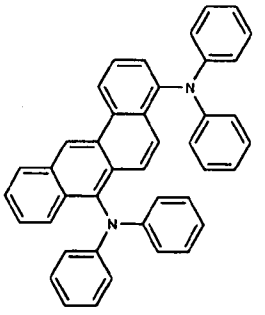
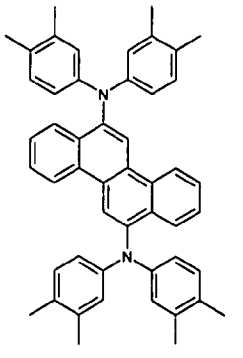
上述磷光發光化合物的實例係由申請案 WO

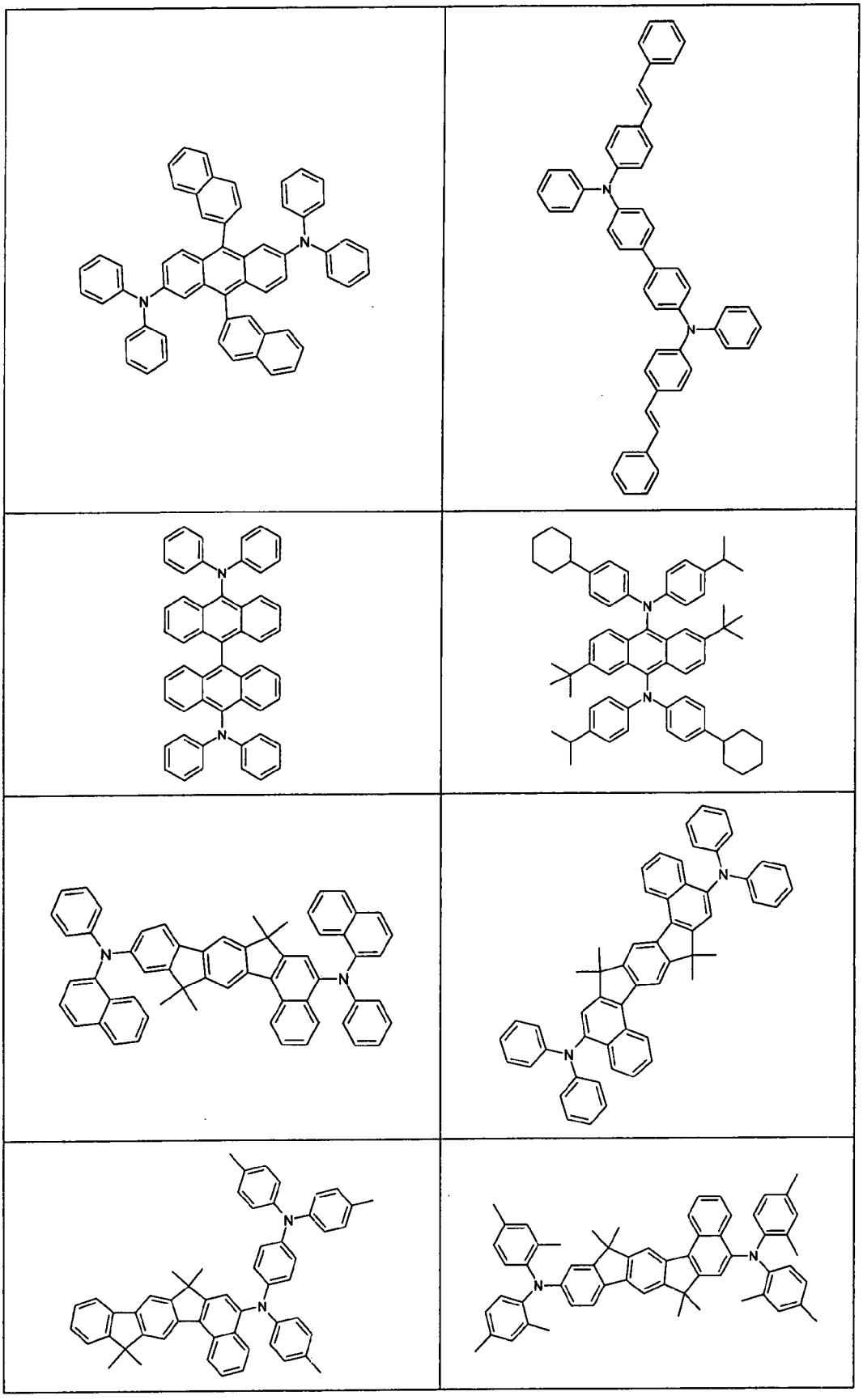
2000/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 2005/033244、WO 2005/019373 及 US 2005/0258742 揭示。通常，根據先前技術用於磷光 OLED 且為熟習有機電致發光裝置領域之技術者已知的所有磷光錯合物皆適合使用於根據本發明的裝置中。熟習該項技術者也將能夠在沒有創新步驟下將其他磷光錯合物與根據本發明之化合物組合使用於 OLED 中。

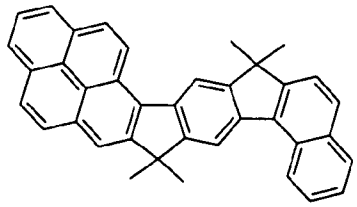
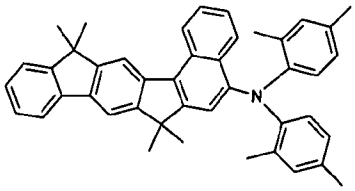
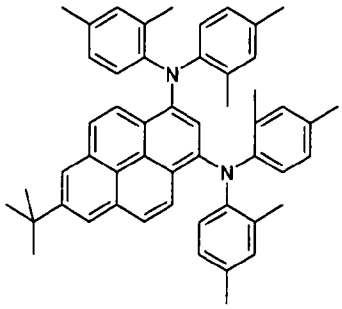
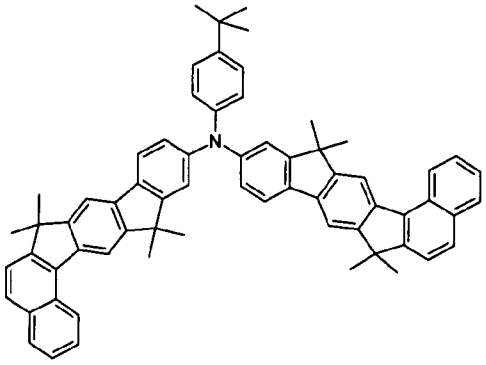
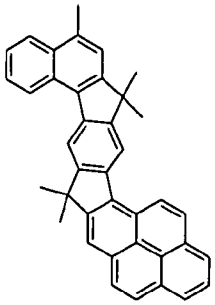
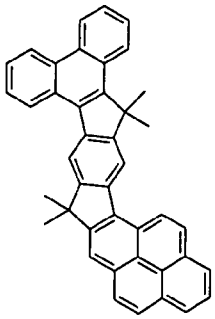
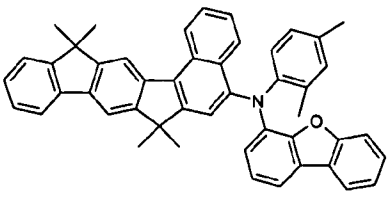
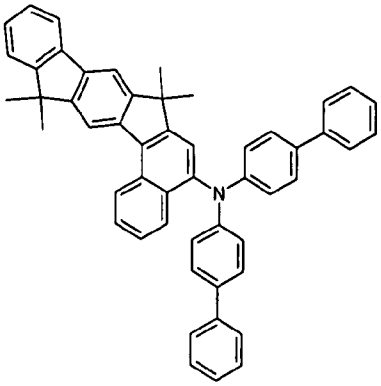
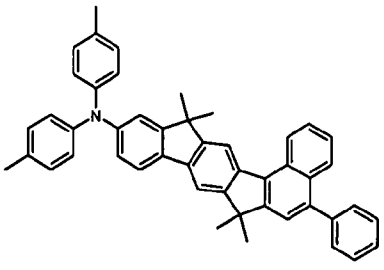
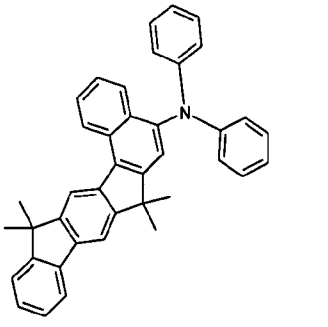
除根據本發明之化合物外，較佳螢光發光體係選自芳基胺之種類。芳基胺就本發明的意義而言意指含有三個直接鍵結至氮的經取代或未經取代的芳族或雜芳族環系統的化合物。此等芳族或雜芳族環系統中之至少一者較佳為縮合環系統，特佳具有至少 14 個芳環原子。其較佳實例為芳族蒽胺、芳族蒽二胺、芳族芘胺、芳族芘二胺、芳族茚胺或芳族茚二胺。芳族蒽胺意指其中一個二芳基胺基直接鍵結至蒽基（較佳在 9 位置）之化合物。芳族蒽二胺意指其中兩個二芳基胺基直接鍵結至蒽基（較佳在 9,10-位置）之化合物。芳族芘胺、芘二胺、茚胺及茚二胺係與其類似地定義，其中二芳基胺基較佳地在 1-位置或 1,6-位置上與芘鍵結。其他較佳發光體為茚并芴胺或茚并芴二胺（例如根據 WO 2006/108497 或 WO 2006/122630）、苯並茚并芴胺或苯並茚并芴二胺（例如根據 WO 2008/006449）、及二苯並茚并芴胺或二苯並茚并芴二胺（例如根據 WO 2007/140847）、及 WO 2010/012328 中所

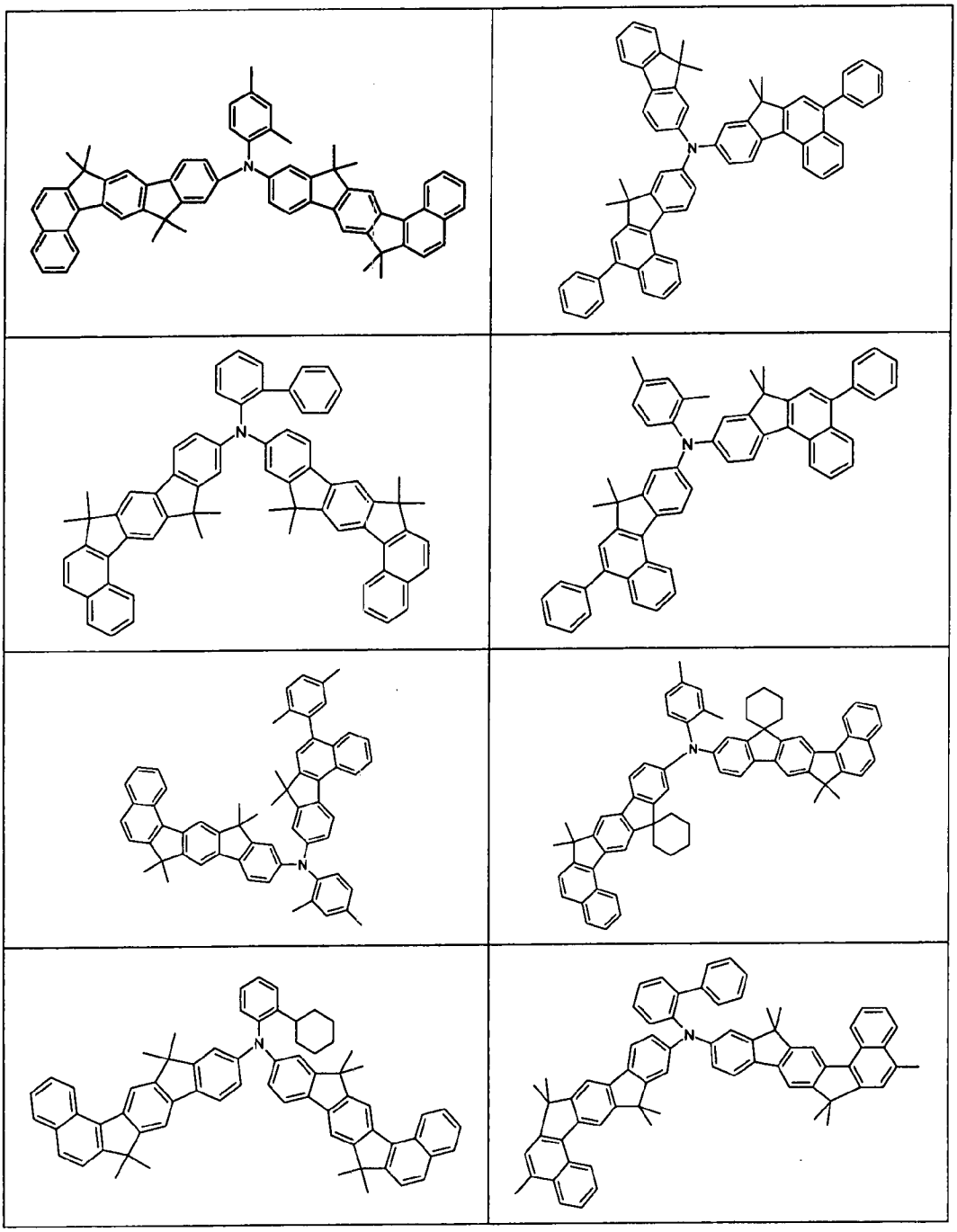
揭示之含有縮合芳基之茚并芴衍生物。較佳者同樣為 WO 2012/048780 及 WO 2013/185871 中所揭示之芘芳基胺。較佳者同樣為 WO 2014/037077 中所揭示之苯並茚并芴胺、WO 2014/106522 中所揭示之苯並芴胺和 WO 2014/111269 中所揭示之延伸茚并芴。

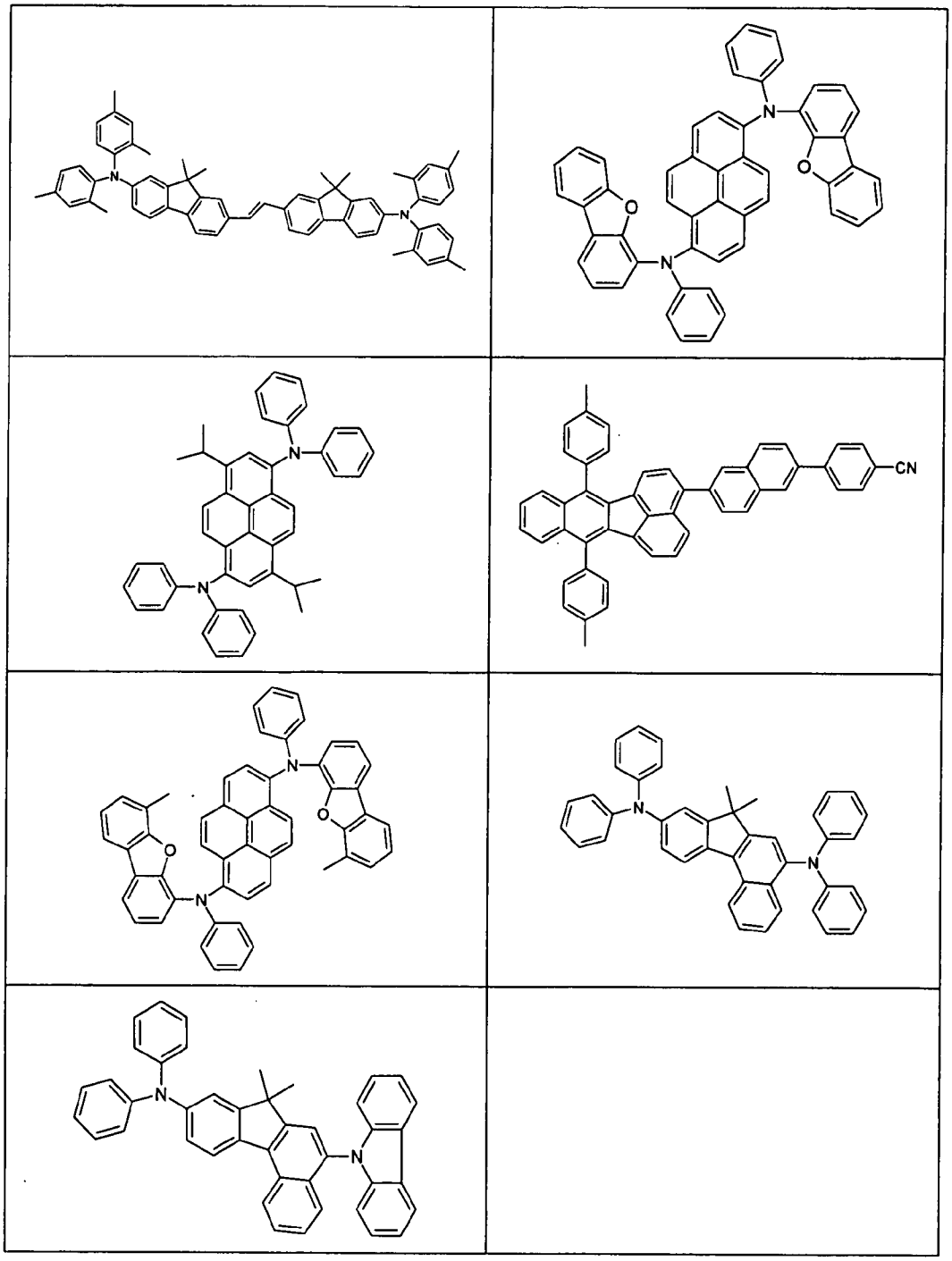
較佳螢光發光化合物係描述於下表中：







用於磷光發光化合物之較佳基質材料為芳族胺（特別是三芳基胺，例如根據 US 2005/0069729）、咔唑衍生物（例如 CBP，N,N-雙咔唑基聯苯）或根據 WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527 或 WO 2008/086851 之化合物、橋聯咔唑衍生物（例如根據 WO

2011/088877 和 WO 2011/128017）、茚並咔唑衍生物（例如根據 WO 2010/136109 和 WO 2011/000455）、氮雜咔唑衍生物（例如，根據 EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160）、吲哚並咔唑衍生物（例如根據 WO 2007/063754 或 WO 2008/056746）、酮（例如根據 WO 2004/093207 或 WO 2010/006680）、氧化膦、亞碸和碸（例如根據 WO 2005/003253）、寡聚伸苯基、雙極性基質材料（例如根據 WO 2007/137725）、矽烷（例如根據 WO 2005/111172）、氮硼雜環戊烯（azaborole）或硼酸酯（例如根據 WO 2006/117052）、三吖衍生物（例如根據 WO 2010/015306、WO 2007/063754 或 WO 2008/056746）、鋅錯合物（例如根據 EP 652273 或 WO 2009/062578）、鋁錯合物（例如 BAlq）、二氮雜矽雜環戊二烯（diazasilole）和四氮雜矽雜環戊二烯衍生物（例如根據 WO 2010/054729）、二氮磷雜環戊二烯（diazaphosphole）衍生物（例如根據 WO 2010/054730）。

除了式（I）或（II）之化合物外，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'-四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、氧化膦、亞碸、等等（例如根據 WO 2005/084081 和 WO 2005/084082）、阻轉異構物（例如根據 WO 2006/048268）、硼酸衍生物（例如根據 WO 2006/117052）或苯並蒽（例如根據 WO 2008/145239）。特佳基質材料係選自下列種類：包含萘、蒽、苯並蒽及/或芘之寡聚伸芳基或這些化合物的阻轉異構物、寡聚伸芳基伸乙烯基、酮、氧化膦和亞碸。非常特佳的基質材料係選自下列種類：包含蒽、苯並蒽、苯並菲及/或芘之寡聚伸芳基或這些化合物的阻轉異構物。寡聚伸芳基就本發明的意義而言意指一種其中至少三個芳基或伸芳基彼此鍵結之化合物。

適當電荷傳輸材料，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，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）或（II）之化合物外，可用於根據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 中所揭示之胺衍生物、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 中所揭示之胺衍生物、單苯並茚并芴胺（例如根據 WO 08/006449）、二苯並茚并芴胺

（例如根據 WO 07/140847）、螺雙芴胺（例如根據 WO 2012/034627 或 WO 2013/120577）、芴胺（例如根據 WO 2014/015937、WO 2014/015938 和 WO 2014/015935）、螺二苯並哌喃胺（例如根據 WO 2013/083216）及二氫吖啶衍生物（例如根據 WO 2012/150001）。

有機電致發光裝置之陰極較佳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、主族金屬或鑭系元素（例如 Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm、等等））之多層結構。亦適合的是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。在多層結構之情況中，除該等金屬外，也可使用具有較高功函數之其他金屬，諸如，例如 Ag 或 Al，在該情況中通常使用金屬之組合，諸如，例如 Ca/Ag、Mg/Ag 或 Ag/Ag。較佳亦可於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，但對應氧化物或碳酸鹽（例如 LiF、Li_2O、BaF_2、MgO、NaF、CsF、Cs_2CO_3、等等）亦適合。此外，喹啉酸鋰（LiQ）可使用此目的。此層之厚度較佳係介於 0.5 和 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。適合此目的者一方面為具有高氧化還原電位之金屬，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）亦可為較佳的。就一些應用而言，

至少一個電極必須為透明或部分透明，以便促進有機材料之照射（有機太陽能電池）或光之耦合輸出（OLED、O-雷射）。較佳陽極材料在此為導電性混合金屬氧化物。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。

將該裝置適當地結構化（視應用而定），配備接點且最後密封，因為在水及/或空氣存在下根據本發明之裝置的壽命縮短。

在一較佳實施態樣中，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施加一或多層，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} 毫巴之初壓力下藉由氣相沈積施加。然而，初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-氣體昇華法施加一或多層，其中該等材料係在介於 10^{-5} 毫巴與 1 巴之間的壓力下施加。此方法的一特殊例子為 OVJP（有機蒸氣噴射印刷）法，其中該等材料係經由噴嘴直接施加且因此結構化（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，其特徵在於諸如（例如）以旋轉塗佈或利用任何所欲印刷法（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）從溶液製造一或多層。

為了製造根據本發明之有機電致發光裝置，此外較佳者為從溶液施加一或多層或利用昇華法施加一或多層。

由於式（I）或（II）之化合物的良好溶解度，較佳的是含有一或多種式（I）或（II）之化合物的層係從溶液施加。此較佳為有機電致發光裝置之發光層。

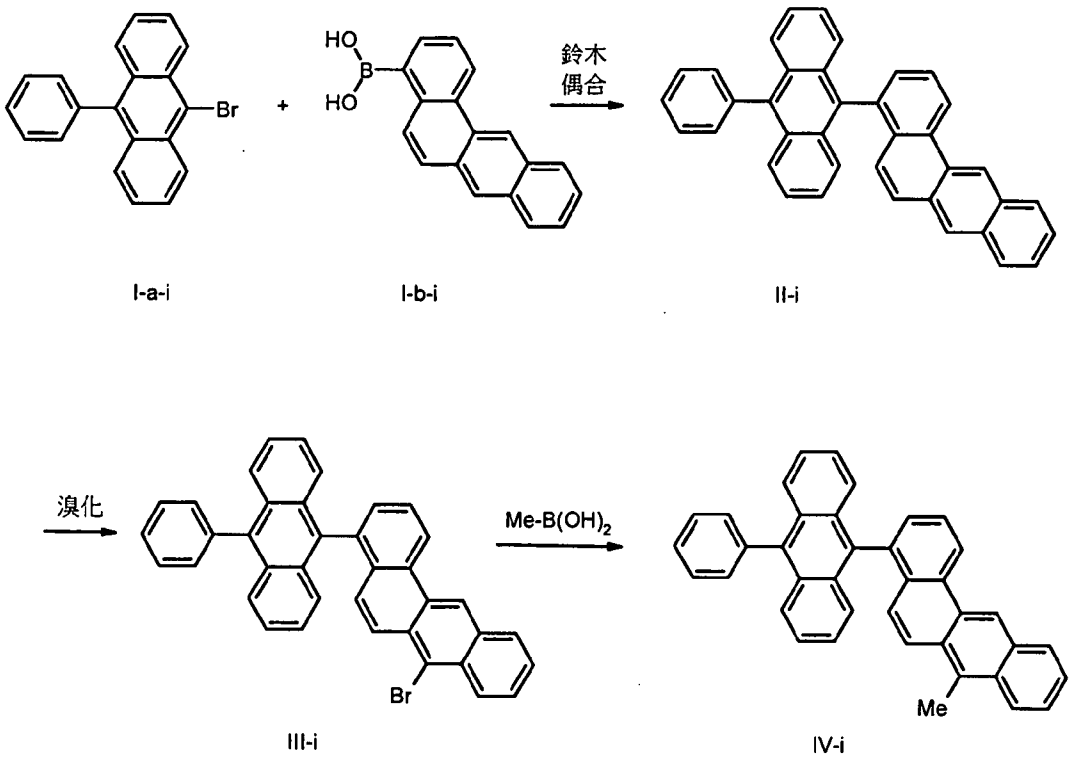
根據本發明，包含一或多種根據本發明之化合物的電子裝置可用於顯示器中、作為照明應用中之光源及作為醫學及/或美容應用（例如，光療法）中之光源。

【實施方式】

實施例

A）合成例

根據下列合成流程製備根據本發明之化合物：

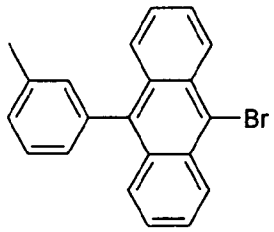
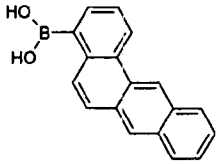
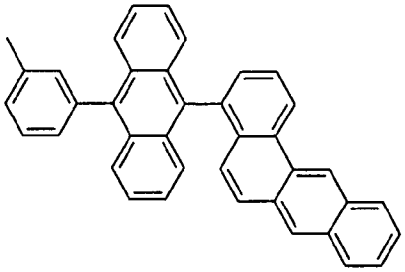
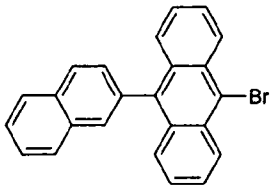
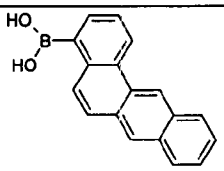
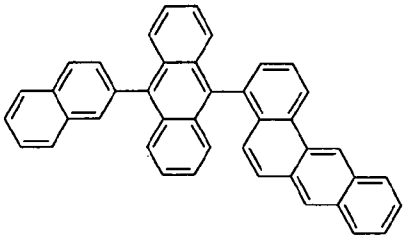
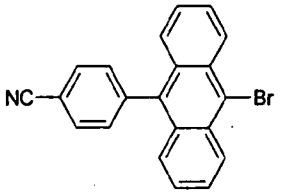
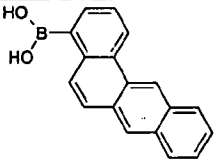
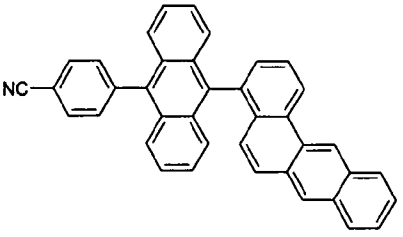
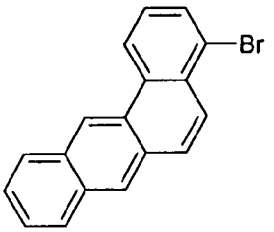
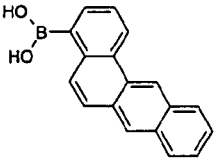
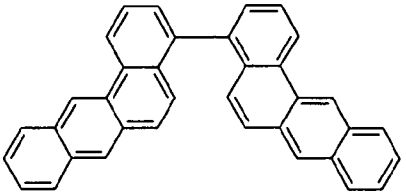


為此，首先經由苯並蒽-硼酸衍生物 I-b 和芳基溴 I-a（步驟 1）之間的鈴木偶合製備苯並蒽-芳基化合物 II。接著將化合物溴化以產生溴苯並蒽化合物 III（步驟 2）。在最後步驟 3 中，經由鈴木偶合在溴的位置引入取代基，產生根據本發明之化合物 IV。

步驟 1：

根據下列文獻步驟合成 4-（10-苯基蒽-9-基）苯並〔a〕蒽 II-i：WO 2008/145239，實施例 8。

類似地製備下列化合物：

起始材料 I-a	起始材料 I-b	產物 II	產率
			67%
			59%
			52%
			72%

步驟 2：

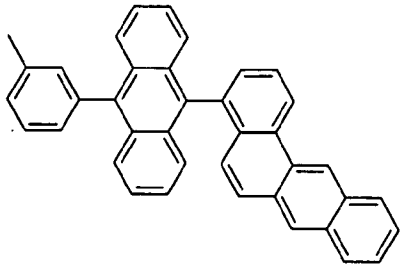
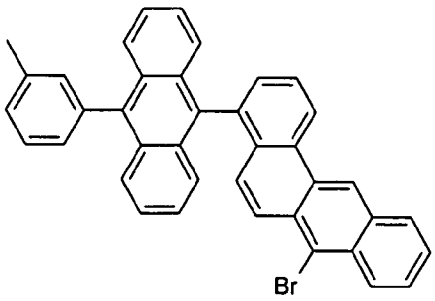
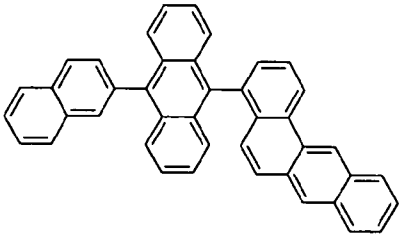
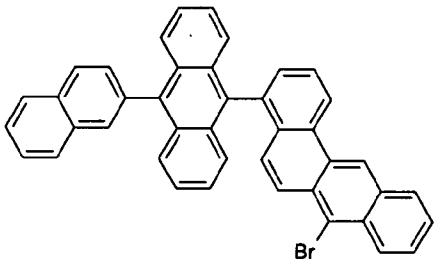
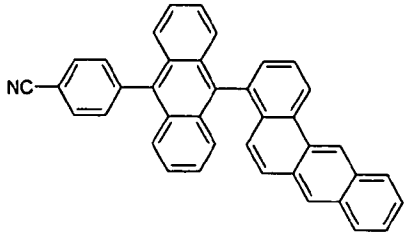
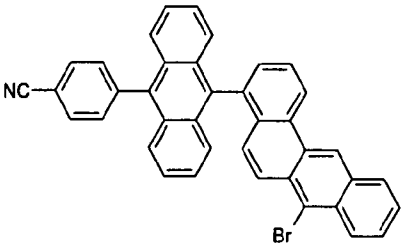
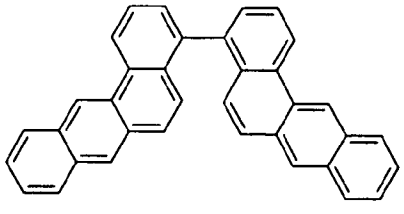
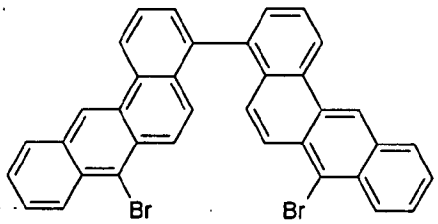
7-溴-4-（10-苯基蒽-9-基）苯並〔a〕蒽 III-i

將 1 1 的四氫呋喃加至 4-（10-苯基蒽-9-基）苯並〔a〕蒽 II-i（50 g，104.0 mmol）、*N*-溴琥珀醯亞胺（24.02 g，135 mmol）和過氧化苯甲醯基（含有 25%的水）（12.7 ml，20.8 mmol）。將該批料在回流下加熱過夜，冷卻至室溫，和用 800 ml 的氯仿和 500 ml 的 10% 硫代硫酸鈉溶液增量。相分離後，用氯仿萃取水相許多次。將合併的有機相用蒸餾水洗滌，經硫酸鎂乾燥並通過氧化鋁

過濾。將有機相蒸發。使用氯苯使殘餘物沈澱並從庚烷再結晶，產生呈淡黃色固體之化合物Ⅲ-i ：58.2 克（理論的 87%）。

作為替代方案，NBS/HBr 或溴（催化）可用作溴源。為了避免過溴化，在低溫（例如-10℃）下進行反應。

類似地製備下列化合物：

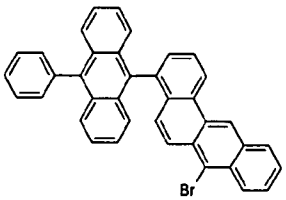
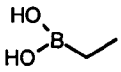
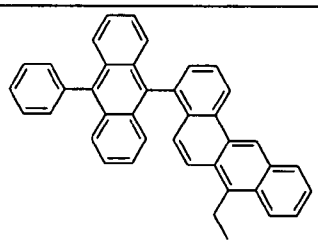
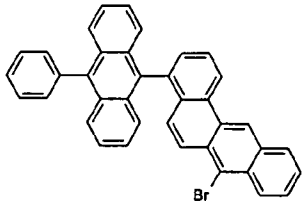
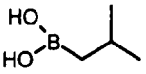
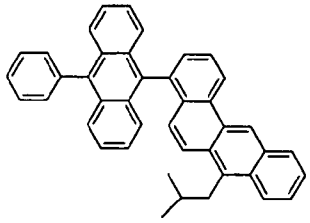
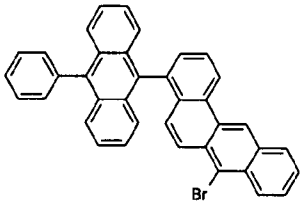
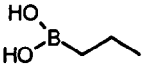
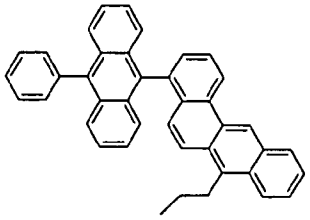
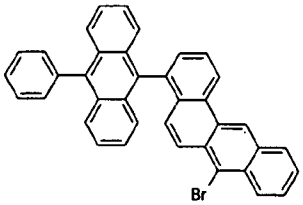
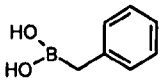
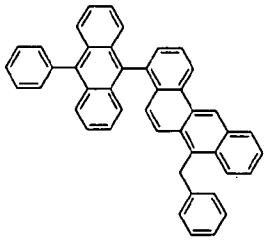
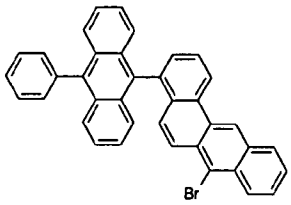
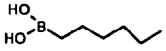
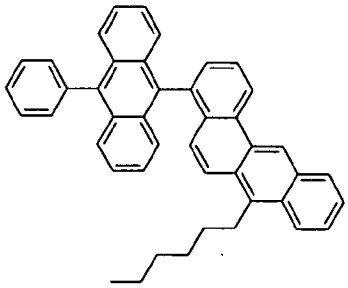
起始材料 II	產物 III	產率
		53%
		64%
		68%
		64%

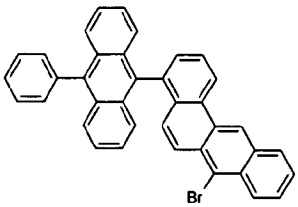
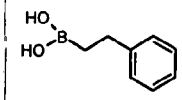
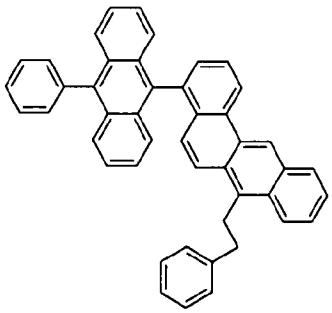
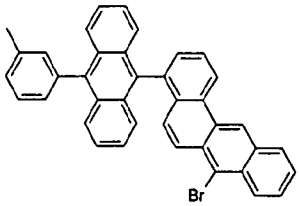
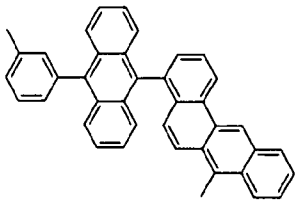
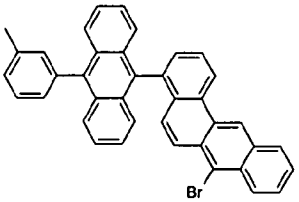
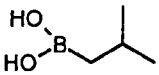
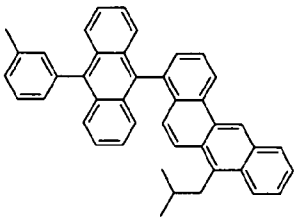
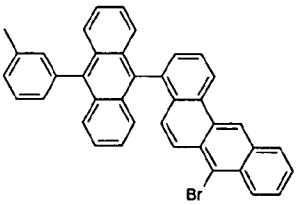
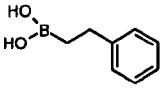
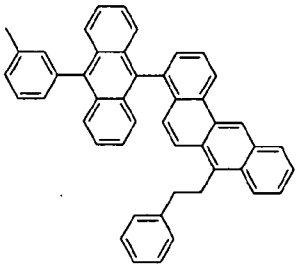
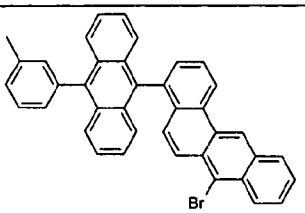
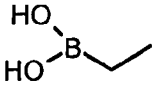
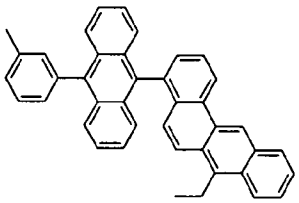
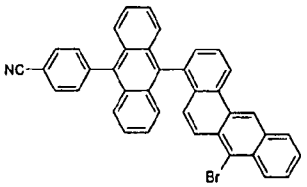
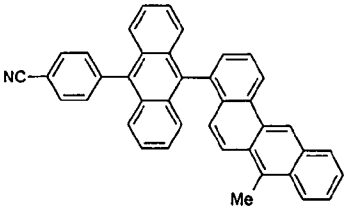
步驟 3：

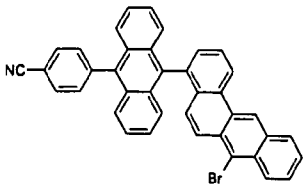
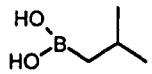
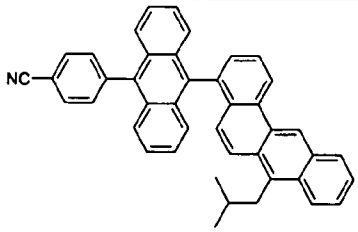
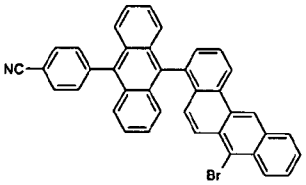
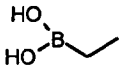
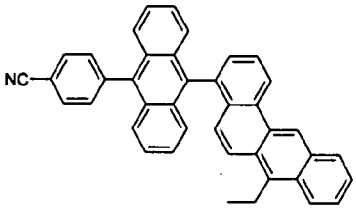
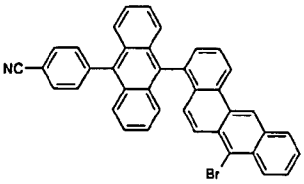
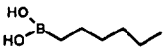
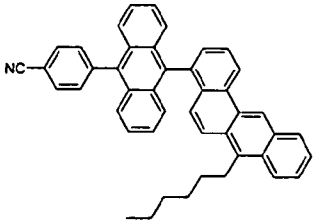
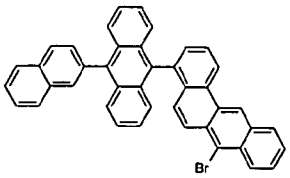
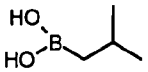
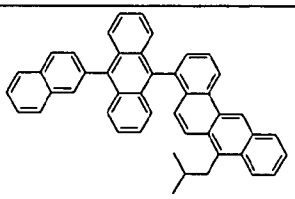
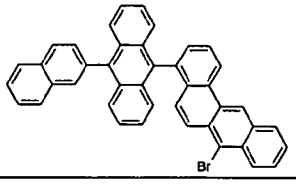
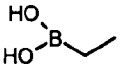
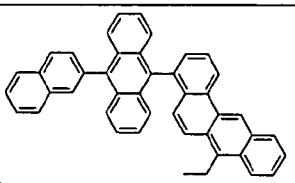
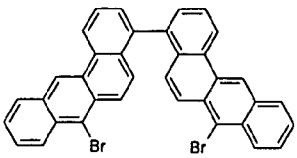
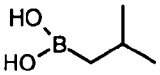
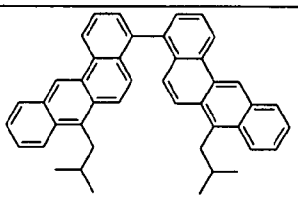
7-甲基-4-（10-苯基蒽-9-基）苯並〔a〕蒽 IV-i

將 5.47 g（97%，88.6 mmol）的甲基硼酸、25 g（44.3 mmol）的 7-溴-4-（10-苯基蒽-9-基）苯並〔a〕蒽 III-i 和 20.4 g（88.6 mmol）的 $K_3PO_4 \cdot H_2O$ 懸浮於 500 ml 的甲苯中。將 1.09 g（2.66 mmol）的二環己基（2',6'-二甲氧基聯苯-2-基）膦（S-Phos）和 0.3 g（1.33 mmol）的乙酸鈀加至此懸浮液，並將反應混合物在回流下加熱 16 h。冷卻之後，用水稀釋反應混合物，分離出有機相，用 100 ml 的水洗滌三次且隨後蒸發至乾。將粗產物通過矽膠用甲苯過濾後，將殘留之殘餘物從甲苯/庚烷再結晶。產量為 17.3 g（理論的 79%）。

類似地製備下列根據本發明之化合物 IV：

編號	起始材料 III	硼酸或硼酸酯	產物 IV	產率
1				64%
2				76%
3				69%
4				58%
5				47%

6				65%
7		$Me\text{-}B(OH)_2$		59%
8				62%
9				72%
10				74%
11		$Me\text{-}B(OH)_2$		52%

12				38%
13				47%
14				43%
15				76%
16				68%
17				73%

B）裝置例

B-1）從氣相起始之裝置例：OLED 的製備

藉由根據 WO 04/058911 的一般方法製造根據本發明之 OLED 和根據先前技術之 OLED，該方法適用於此處所述之情況（層-厚度變化、材料）。

所使用之基板為用 50 nm 厚度的結構化 ITO（氧化銦錫）塗佈之玻璃基板。具有厚度 20 nm 之 Clevios P VP A1 4083（購自 Heraeus Clevios GmbH，Leverkusen）層係藉由旋轉塗佈施加作為緩衝層。所有其餘的材料係在真空室中藉由熱氣相沈積施加。

所使用之結構 A 如下：

- 基板，
- ITO（50 nm），
- 緩衝層（20 nm），
- 電洞注入層（HTL1 95%，HIL 5%）（20 nm），
- 電洞傳輸層（HTL1）（20 nm），
- 發光層（95%的主體，5%的摻雜劑）（20 nm），
- 電子傳輸層（50%的 ETL+50%的 EIL）（30 nm），
- 電子注入層（EIL）（3 nm），
- 陰極（Al）（100 nm）。

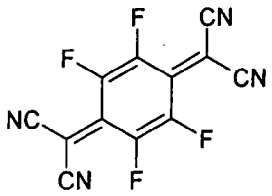
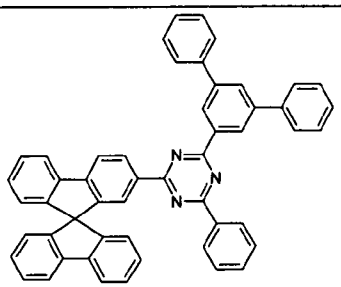
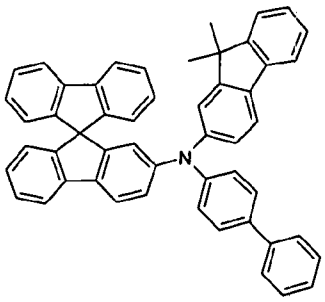
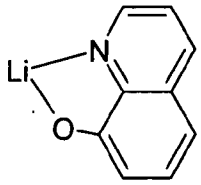
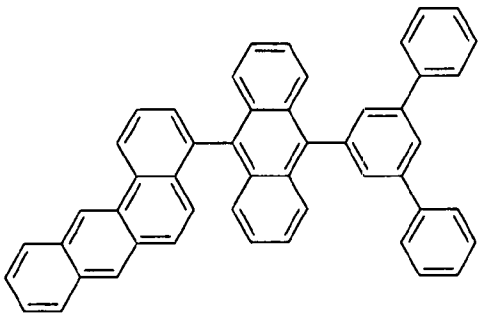
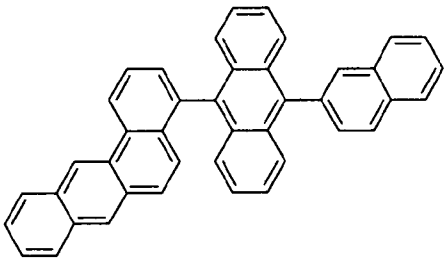
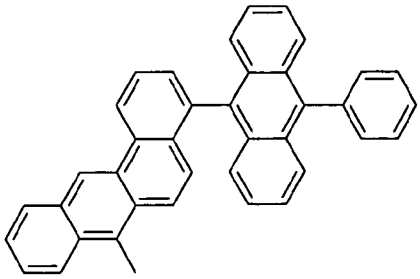
所使用之材料係顯示於表 1 中。

該發光層（EML）總是由至少一種基質材料（主體=H）及發光摻雜劑（摻雜劑=D）組成，該摻雜劑藉由共蒸發以某一體積比例與該基質材料摻混。用語諸如 H-1：D1（95%：5%）在此表示材料 H-1 係以 95%之體積比例存在於層中，和 D1 係以 5%之比例存在於層中。

OLED 係以標準方法示性。為此目的，記錄電致發光光譜，及假設 Lambert 發光特性，從電流/電壓/發光密度特徵線（IUL 特徵線）計算以發光密度為函數之電流效率

（以 cd/A 測量）及外部量子效率（EQE，以百分比測量），及最後測定組件之壽命。電致發光光譜係在 1000 cd/m²之發光密度下記錄，且由此計算 CIE 1931 x 與 y 色坐標。用語 EQE @ 1000 cd/m²表示在 1000 cd/m²之操作發光密度下的外部量子效率。壽命 LT95 @1000 cd/m²為初始發光密度已從 1000 cd/m²下降 5%所經歷之時間。各種 OLED 之所得數據係總結於表 2 中。

根據本發明之化合物特別適合作為藍色-螢光 OLED 中之基質材料（參見實施例 V1-V5 和 E6-E11）。充當比較的是兩種標準基質材料 VH-1 和 VH-2，各自包含發暗藍色螢光的摻雜劑 D1、D2 和 D3 中之一者。基質 H-1 和 H-2 顯示為根據本發明之化合物。此等同樣與摻雜劑 D1、D2 和 D3 中之一者組合使用。

表 1：所使用之材料的結構	
	
HIL	ETL
	
HTL1	EIL
	
VH-1	VH-2
	
	H-1

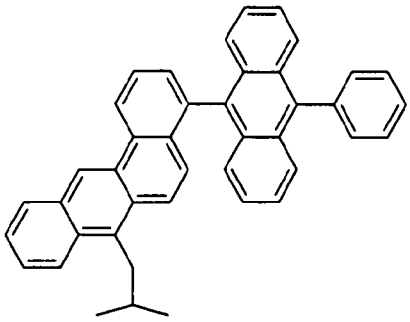
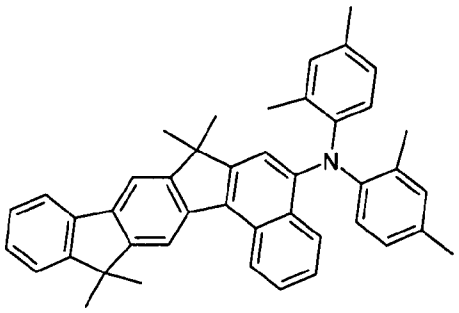
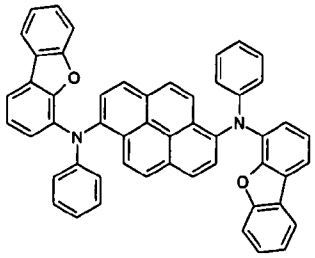
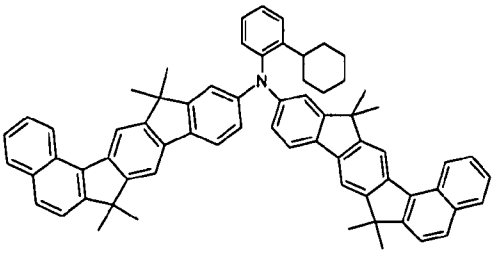
	
H-2	D1
	
D2	D3

表 2：OLED 之數據

實施例	主體	摻雜劑	*EQE @ 1000 cd/m²*	*LT95 @ 1000 cd/m²*	*CIE*	
	95%	*5%*	*%*	*[h]*	*x*	y
V1	*VH-1*	*D1*	*8.0*	*90*	0.136	0.145
V2	*VH-1*	*D2*	*7.5*	*100*	0.134	0.101
V3	*VH-1*	*D3*	*6.6*	*10*	0.142	0.086
V4	*VH-2*	*D1*	*7.9*	*100*	0.135	0.160
V5	*VH-2*	*D3*	*6.9*	*30*	0.144	0.082
E6	*H-1*	*D1*	*8.3*	*150*	*0.134*	0.147
E7	*H-1*	*D2*	*8.6*	*170*	*0.145*	0.099
E8	*H-1*	*D3*	*7.0*	*110*	*0.144*	0.084
E9	*H-2*	*D1*	*8.2*	*140*	0.137	0.141
E10	*H-2*	*D2*	*8.5*	*150*	*0.145*	0.093
E11	*H-2*	*D3*	*6.8*	*90*	*0.148*	0.076

實施例 E6 至 E11 顯示在用比較例 V1 至 V5 之比較檢查中，相較於比較材料 VH-1 和 VH-2，根據本發明之化合物 H-1 和 H-2 達到改良之外部量子效率（EQE）和增加的壽命（LT95）與可比較之深藍色發光。

B-2）從溶液處理之裝置例：OLED 的製備

以溶液為主之 OLED 的製造原則上說明於文獻中（例如，於 WO 2004/037887 和 WO 2010/097155 中）。在下列實施例中，合併二種製造方法（從氣相施加及溶液處理），使得處理高達且包括發光層係從溶液進行和後續層（電洞阻擋層 / 電子傳輸層）係藉由真空氣相沈積施加。上述一般方法為此目的係適合於在此所述之情況（層-厚度變化、材料）合併如下。

所使用之結構 B 因此如下：

- 基板，
- ITO（50 nm），
- PEDOT（20 nm），
- 電洞傳輸層（HIL2）（20 nm），
- 發光層（92%的主體，8%的摻雜劑）（60 nm），
- 電子傳輸層（ETL 50% + EIL 50%）（20 nm），
- 陰極（Al）。

所使用之基板為用 50 nm 厚度的結構化 ITO（氧化銦錫）塗佈之玻璃基板。為了較好處理，用緩衝液（PEDOT）Clevios P VP AI 4083（Heraeus Clevios GmbH, Lever-

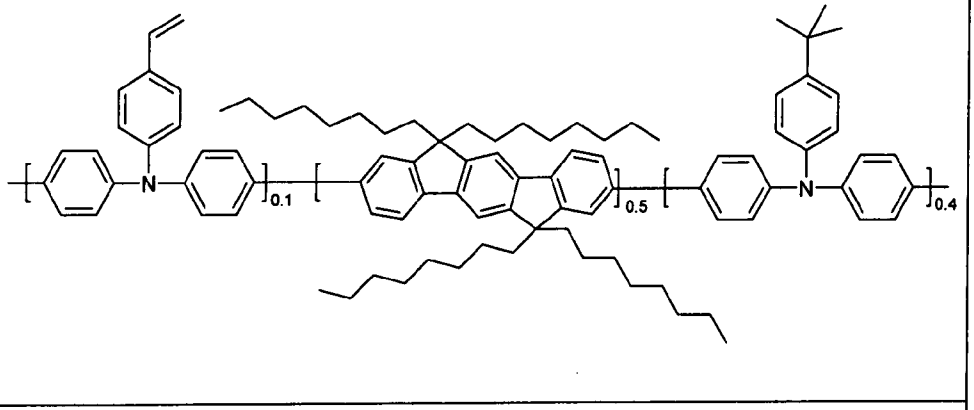
kusen）塗佈此等玻璃基板。該旋轉塗佈在空氣中從水進行。接著藉由在 180°C 下加熱 10 分鐘將該層乾燥。將電洞傳輸和發光層施加至經此方式塗佈之玻璃基板。電洞傳輸層為表 3 中所示結構之聚合物，其係根據 WO 2010/097155 合成。將聚合物溶解在甲苯中，在此，致使若欲利用旋轉塗佈達成 20 nm 之層厚度（其對裝置而言是典型的），則該等溶液典型地具有約 5 g/l 之固體含量。藉由在惰性氣體氛圍（在本例中為氬氣）中旋轉塗佈施加該等層，並藉由在 180°C 下加熱 60 分鐘乾燥。

發光層在此總是由至少一種基質材料（主體材料）和發光摻雜劑（發光體）組成。用語諸如 H-1（92%）：D1（8%）在此意指材料 H-1 係以 92%之重量比例存在於發光層中，D1 係以 8%之重量比例存在於發光層中。將用於發光層之混合物溶解在甲苯中。在此，若欲利用旋轉塗佈達成 60 nm 之層厚度（其對裝置而言是典型的），則該等溶液之典型固體含量為約 18 g/l。藉由在惰性氣體氛圍（在本例中為氬氣）中旋轉塗佈施加該等層，並藉由在 140°C 下加熱 10 分鐘乾燥。所使用之材料係顯示於表 3 中。

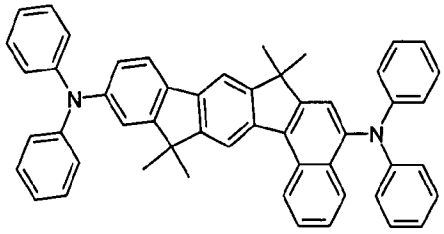
用於電子傳輸層和用於陰極之材料係在真空室中藉由熱氣相沈積施加。電子傳輸層（例如）可由一種以上的材料組成，該等材料係藉由共蒸發按某體積比例彼此混合。用語諸如 ETM：EIL（50%：50%）在此係指材料 ETM：EIL 係以各 50%之體積比例存在於層中。本例中所使用之

材料係顯示於表 1 中。

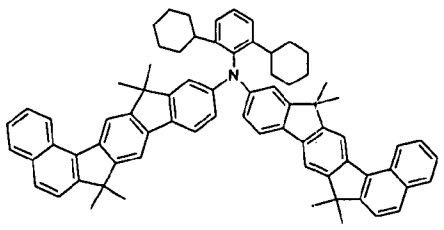
表 3：所使用之材料的結構



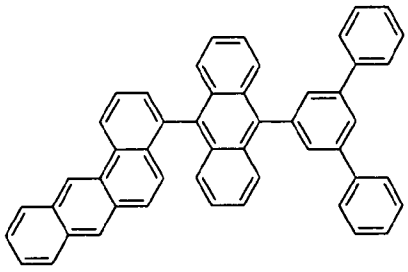
HIL2



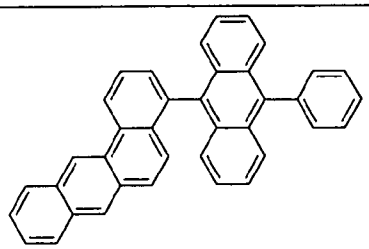
D4



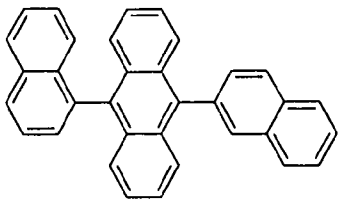
D5



VH-1



VH-3



VH-4

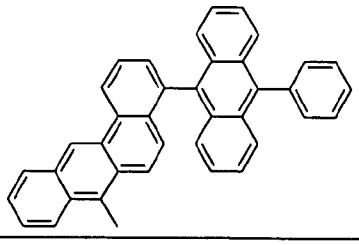
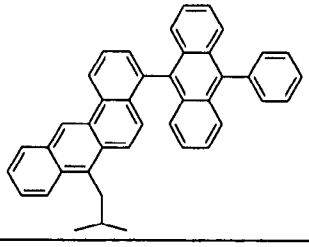
	
H-1	H-2

表 4：OLED 之數據								
實施例	主體	摻雜劑	EQE @ 1000 cd/m²	LT80 @ 10 mA/ cm²	CIE		溶解度	Tg
	92%	8%	%	[h]	x	y	g/l	°C
V6	VH-1	D4	4.8	200	0.142	0.211	70	175
V7	VH-1	D5	3.2	40	0.142	0.111	70	175
V8	VH-3	D4/D5	X	X	X	X	<1	148
V9	VH-4	D4	4.8	210	0.136	0.195	44	125
V10	VH-4	D5	3.4	50	0.145	0.119	44	125
E11	H-1	D4	5.0	280	0.137	0.201	40	152
E12	H-1	D5	3.6	80	0.147	0.125	40	152
E13	H-2	D4	4.8	300	0.135	0.197	45	143
E14	H-2	D5	3.5	90	0.146	0.120	45	143

表 4 的實例顯示根據本發明之化合物 H-1 和 H-2 作為用於摻雜劑 D4 和 D5 之主體化合物。作為比較，顯示根據先前技術 VH-1、VH-3 和 VH-4 的化合物，同樣與摻雜劑 D4 和 D5 組合。

表 4 中的結果顯示：除了改良外部量子效率之外，相較於 VH-1 且亦相較於 VH-4，可能達成顯著改良之壽命（LT80）與深藍色發光。參考材料的 VH-3 由於低溶解度

而完全不能從溶液處理（實施例 V8；X=未測定）。發現該等結構因此除了氣相沈積方法之外，也適合於溶液處理且導致極佳性能數據。

公告本

I671280

發明摘要

※申請案號：104111944

※申請日：104 年 04 月 14 日　　※IPC 分類：*C07C 15/38* (2006.01)
C07C 255/50 (2006.01)
H01L 51/54 (2006.01)
H05B 33/12 (2006.01)

【發明名稱】(中文/英文)

電子裝置用之材料

Materials for electronic devices

【中文】

本申請案關於式（I）或（II）之經取代的苯並蒽化合物。本申請案此外關於一種包含該苯並蒽化合物之電子裝置。

【英文】

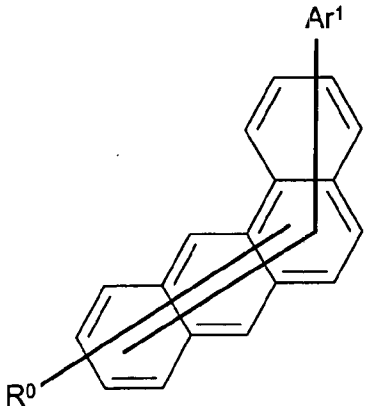
The present application relates to a substituted benzanthracene compound of a formula (I) or (II). The application furthermore relates to an electronic device which comprises the said benzanthracene compound.

【代表圖】

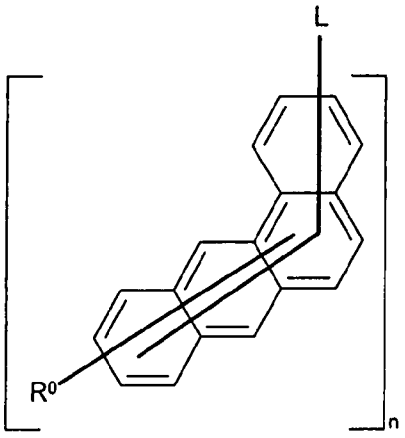
【本案指定代表圖】：無。

【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)(II)



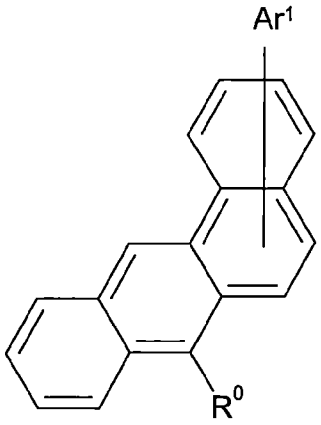
式(I)



式(II)

申請專利範圍

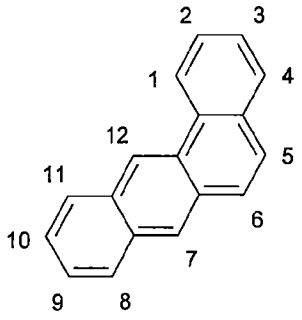
1. 一種式(I-1-1)之化合物，



式 (I-1-1)

其中下列適用於所出現的符號：

Ar^1 是具有 14 至 18 個芳族環原子之縮合芳基（其可經一或多個 R^2 基團取代），其中該 Ar^1 基團係存在於式(I-1-1)所示的苯並蒽之選自位置 4 和 5 的位置，如下所示：



；

R^0 為具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代）；

R^2 在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、$C(=O)R^3$、CN、$Si(R^3)_3$、$N(R^3)_2$、$P(=O)(R^3)_2$、OR^3、$S(=O)R^3$、

$S(=O)_2R^3$、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基（其中上述基團可各自經一或多個 R^3 基團取代且其中上述基團中之一或多個 CH_2 基團可經 $-R^3C=CR^3-$、$-C\equiv C-$、$Si(R^3)_2$、$C=O$、$C=NR^3$、$-C(=O)O-$、$-C(=O)NR^3-$、NR^3、$P(=O)(R^3)$、$-O-$、$-S-$、SO 或 SO_2 置換）、或具有 6 至 40 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^3 基團取代）；

R^3　在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、$C(=O)R^4$、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或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 20 個 C 原子之烯基或炔基（其中上述基團可各自經一或多個 R^4 基團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 6 至 40 個芳族環原子之芳族環系統（其可經一或多個 R^4 基團取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之雜芳族環系統（其可經一或多個 R^4 基團取代）；

R^4　在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、CN 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、F 或 CN 置換。

2. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中 Ar^1 係選自蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、稠、1,2-苯並芴（fluoranthene）和稠四苯(naphthacene)，其中該等基團可各自經一或多個 R^2 基團取代。

3. 一種製備根據申請專利範圍第 1 至 2 項中任一項之化合物之方法，其包含下列步驟：

A）依下列順序的步驟 1）至 3）：

1）藉由苯並蒽衍生物和芳族或雜芳族環系統之間的偶合反應以製備經一或多個芳族或雜芳族環系統取代之苯並蒽化合物；

2）苯並蒽之鹵化；

3）在經鹵化的位置引入取代基；或包含

B）依所指示之順序的步驟 I）和 II）：

I）從萘基衍生物和酞酐製備經取代的苯並蒽衍生物；

II）令該經取代的苯並蒽衍生物與芳族或雜芳族環系統進行偶合反應。

4. 一種寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其包含一或多種根據申請專利範圍第 1 至 2 項中之任一項之化合物，其中連接至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物之鍵可位於式（I-1-1）中經 R^2 或 R^3 取代之任何所要位置。

5. 一種調合物，其包含至少一種根據申請專利範圍第 1 至 2 項中任一項之化合物或至少一種根據申請專利範

圍第 4 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物及至少一種溶劑。

6. 一種電子裝置，其係選自由下列組成之群組：有機積體電路（OIC）、有機場效電晶體（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、有機感光器（photoreceptor）、有機場淬滅裝置（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 2 項中任一項之化合物或至少一種根據申請專利範圍第 4 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物。

7. 根據申請專利範圍第 6 項之電子裝置，其係選自包含陽極、陰極、發光層及隨意的另一有機層之有機電致發光裝置，其中該至少一種化合物或該至少一種寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物存在於發光層中作為基質化合物且與一或多種發光體化合物組合。

8. 一種根據申請專利範圍第 1 至 2 項中任一項之化合物或根據申請專利範圍第 4 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於電子裝置之用途。