I678364

(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 I678364 B**

(45)公告日： 中華民國 108 (2019) 年 12 月 01 日

(21)申請案號：105130865 (22)申請日： 中華民國 105 (2016) 年 09 月 23 日

(51)Int. Cl.： ***C07D251/12 (2006.01)*** ***C07D401/10 (2006.01)***
C07D401/12 (2006.01) ***C07D403/10 (2006.01)***
C07D403/12 (2006.01) ***C09K11/06 (2006.01)***
H01L51/50 (2006.01)

(30)優先權：2015/09/24 南韓 10-2015-0135775

(71)申請人：南韓商ＬＧ化學股份有限公司 (南韓) LG CHEM, LTD. (KR)
南韓

(72)發明人：鄭珉祐 JUNG, MIN WOO (KR) ；李東勳 LEE, DONG HOON (KR) ；許瀞午 HUH, JUNGOH (KR)

(74)代理人：葉璟宗；鄭婷文；詹富閔

(56)參考文獻：

US 6821643B1 WO 2014/106524A2

WO 2015/009076A1

審查人員：魏鳳鳳

申請專利範圍項數：22 項 圖式數：4 共 86 頁

(54)名稱

化合物及含有該化合物的有機發光裝置

(57)摘要

本發明是關於一種化合物及包含所述化合物之有機發光裝置。

The present specification relates to a compound and an organic light emitting device including the same.

指定代表圖：

符號簡單說明：

1・・・基板

2・・・正電極

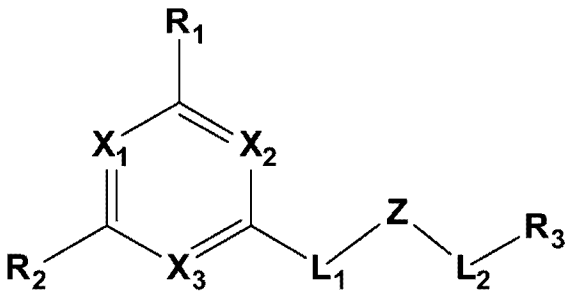
3・・・發光層

4・・・負電極



【圖1】

特徵化學式：



專利案號：105130865

公告本

申請日：105/09/23

I678364

IPC分類：C07D 251/12 (2006.01)
C07D 401/10 (2006.01)
C07D 401/12 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01)
C07D 403/12 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

【發明摘要】

【中文發明名稱】化合物及含有該化合物的有機發光裝置

【英文發明名稱】COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE COMPRISING THE SAME

【中文】本發明是關於一種化合物及包含所述化合物之有機發光裝置。

【英文】The present specification relates to a compound and an organic light emitting device including the same.

【指定代表圖】圖1。

【代表圖之符號簡單說明】

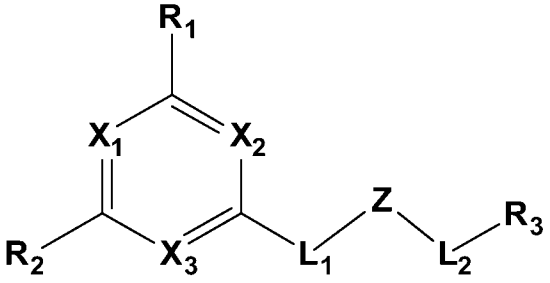
1：基板

2：正電極

3：發光層

4：負電極

【特徵化學式】



【發明說明書】

【中文發明名稱】化合物及含有該化合物的有機發光裝置

【英文發明名稱】COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE COMPRISING THE SAME

【技術領域】

【0001】 本發明主張 2015 年 9 月 24 日在韓國智慧財產局(Korean Intellectual Property Office) 申請之韓國專利申請案第 10-2015-0135775 號之優先權及權益，其全部內容以引用的方式併入本文中。

【0002】 本發明是關於一種化合物及包含所述化合物之有機發光裝置。

【先前技術】

【0003】 有機電子裝置之代表性實例包含有機發光裝置。通常，有機發光現象是指藉由使用有機材料將電能轉化成光能之現象。使用有機發光現象之有機發光裝置通常具有包含正電極、負電極及插入於其間之有機材料層的結構。此處，有機材料層可具有由不同材料構成之多層結構，以改良諸多情形下有機發光裝置之效率及穩定性，且例如可由電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、電子注入層以及其類似層構成。在有機發光裝置之結構中，若在兩個電極之間施加電壓，則電洞自正電極注入有機材料層中且電子自負電極注入有機材料層中，且當所注入之電洞與電子彼此

相遇時，形成激子，且在激子再次降低至基態時發出光。

【0004】 不斷地需要開發用於前述有機發光裝置之新穎材料。

[引用清單]

【0005】 [專利文件]

韓國專利第 10-1417285 號

【發明內容】

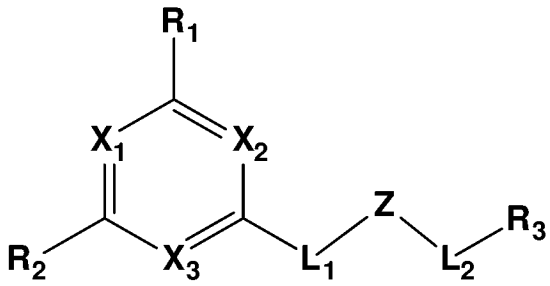
【0006】 [技術問題]

已進行本發明以致力於提供化合物及含有所述化合物之有機發光裝置。

[技術方案]

【0007】 本發明之一例示性實施例提供一種由以下化學式 1 表示之化合物。

[化學式 1]



【0008】 在化學式 1 中，

X_1 至 X_3 中之至少一者為 N，且所述 X_1 至 X_3 中之至少一者的其他者彼此相同或不同，且各獨立地為 N 或 CR，

R 為氫；氘；鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之芳基或經取代或未經取代之雜芳基，所述雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者，

Z 為 O、S、Se 或 Te，

L_1 為直接鍵；經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之伸雜芳基，所述伸雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者，

L_2 為經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之伸雜芳基，所述伸雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者，

R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且各獨立地為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之雜芳基，所述雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者，且

R_3 為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之矽烷基；經取代或未經取代之硼基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之芳烷基；經取代或未經取代之芳烯基；經取代或未經取代之芳基；經取代或未經取代之烷基芳基；經取代或未經取代之芳基膦基；經取代或未經取代之膦氧化物基團；經取代或未經取代之胺基；經取代或未經取代之烷胺基；經取代或未經取代之芳胺基；或經取代或未經取代之雜芳基，所述雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0009】 此外，本發明之一例示性實施例提供一種有機電子裝置，包含：第一電極；經設置以面向第一電極之第二電極；以及一或多個設置於第一電極與第二電極之間的有機材料層，其中有機材料層之一或多個層包含上述化合物。

[有利作用]

【0010】 本說明書中所述之化合物可用作有機發光裝置之有機材

料層的材料。根據至少一個例示性實施例之化合物可改良有機發光裝置中之效率、獲得低驅動電壓及/或改良使用期限特徵。詳言之，本說明書中所述之化合物可用作電洞注入、電洞傳輸、電洞注入及傳輸、發光、電子傳輸或電子注入的材料。

【圖式簡單說明】

【0011】

圖 1 說明有機發光裝置之一實例，其中基板（1）、正電極（2）、發光層（3）及負電極（4）依序堆疊。

圖 2 說明有機發光裝置之一實例，其由基板（1）、正電極（2）、電洞注入層（5）、電洞傳輸層（6）、發光層（7）、電子傳輸層（8）及負電極（4）構成。

圖 3 為說明化合物 2 之 MS 資料值之圖。

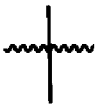
圖 4 為說明化合物 3 之 MS 資料值之圖。

【實施方式】

【0012】 在下文中，將更詳細地描述本發明。

【0013】 本說明書之一例示性實施例提供由化學式 1 表示之化合物。

【0014】 根據本發明之一例示性實施例，由化學式 1 表示之化合物具有核心結構，因此其優點為各核心之特徵經最大化以經由切斷特徵與共軛（各 Z 之元素所具有）之作用而使使用期限達最大。此外，由化學式 1 表示之化合物之對稱形式的特徵為相較於化合物之不對稱形式 Tg 提高，穩定性增加且發光效率及效能提高。

【0015】 在本說明書中， 意謂連接於另一取代基的鍵。

【0016】 在本說明書中，下文將描述取代基之實例，但不限於此。

【0017】 術語「取代」意謂鍵結於化合物碳原子的氫原子改變為另一取代基，且待取代之位置不受限制，只要所述位置為氫原子經取代之位置，亦即取代基可取代之位置，且當兩者或大於兩者的氫原子經取代時，兩個或多於兩個取代基可彼此相同或不同。

【0018】 在本說明書中，術語「經取代或未經取代」意謂經一個或兩個或多於兩個由以下基團組成之族群中選出的取代基取代：氘；鹵基；氰基；腈基；硝基；醯胺基；胺基；矽烷基；硼基；羥基；羰基；烷基；環烷基；烯基；烷氧基；芳氧基；烷基硫醇基；芳基硫醇基；芳基；芳烷基；芳烯基；烷基芳基；雜芳基；胺基；烷胺基；芳烷胺基；雜芳胺基；芳胺基；磷醯基；芳基膦基；膦氧化物基團；或包含 N、O、S、Se 及 Si 原子中之一或多者的雜芳基，或者經與例示性取代基中之兩個或多於兩個取代基連接的取代基取代或無取代基。舉例而言，「與兩個或多於兩個取代基連接之取代基」可為聯苯基。亦即，聯苯基亦可為芳基，且可解釋為與兩個苯基連接之取代基。聯苯基意謂與兩個芳基連接之取代基，但「與兩個或多於兩個取代基連接之取代基」亦可為與兩個或多於兩個不同取代基連接之取代基。舉例而言，「與兩個或多於兩個取代基連接之取代基」可為經吡啶基取代之苯基，其為與吡啶基及苯基連接之取代基；或經喹啉基取代之苯基，其為與喹啉基及苯基連接之取代基；或經氰基取代之苯基，其為與氰基及苯基連接之取代基。

【0019】 在本說明書中，鹵基之實例包含氟、氯、溴或碘。

【0020】 在本說明書中，矽烷基之特定實例包含三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、第三丁基二甲基矽烷基、乙烯基二甲基矽烷基、丙基二甲基矽烷基、三苯基矽烷基、二苯基矽烷基、苯基矽烷基以及其類似基團，但不限於此。

【0021】 在本說明書中，硼基之特定實例包含三甲基硼基、三乙基硼基、第三丁基二甲基硼基、三苯基硼基、苯基硼基以及其類似基團，但不限於此。

【0022】 在本說明書中，烷基可為直鏈或分支鏈的，且其碳原子數目不受特別限制，但較佳為 1 至 50。其特定實例包含甲基、乙基、丙基、正丙基、異丙基、丁基、正丁基、異丁基、第三丁基、第二丁基、1-甲基-丁基、1-乙基-丁基、戊基、正戊基、異戊基、新戊基、第三戊基、己基、正己基、1-甲基戊基、2-甲基戊基、4-甲基-2-戊基、3,3-二甲基丁基、2-乙基丁基、庚基、正庚基、1-甲基己基、環戊基甲基、環己基甲基、辛基、正辛基、第三辛基、1-甲基庚基、2-乙基己基、2-丙基戊基、正壬基、2,2-二甲基庚基、1-乙基-丙基、1,1-二甲基-丙基、異己基、2-甲基戊基、4-甲基己基、5-甲基己基以及其類似基團，但不限於此。

【0023】 在本說明書中，環烷基不受特別限制，但較佳具有 3 至 30 個碳原子，且其特定實例包含環丙基、環丁基、環戊基、3-甲基環戊基、2,3-二甲基環戊基、環己基、3-甲基環己基、4-甲基環己基、2,3-二甲基環己基、3,4,5-三甲基環己基、4-第三丁基環己基、環庚基、環辛基以及其類似基團，但不限於此。

【0024】 在本說明書中，磷醯基包含 P(=O)且為與 P 原子直接連接成一個基團之取代基，且由-P(=O)$R_{102}R_{103}$ 表示，且 R_{102} 與 R_{103} 彼

此相同或不同，且可各獨立地為由以下基團中之至少一者構成的取代基：氫；氘；鹵基；烷基；烯基；烷氧基；環烷基；芳基；以及雜環基。舉例而言，磷醯基具有芳基作為取代產物之情形之特定實例包含二苯基磷醯基、苯基聯苯磷醯基、聯苯聯苯磷醯基、苯基聯三苯基磷醯基、聯苯聯三苯基磷醯基以及其類似基團，但不限於此。

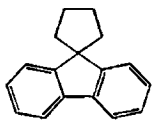
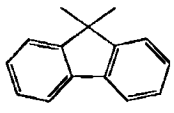
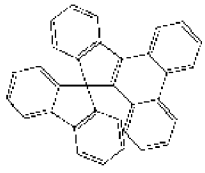
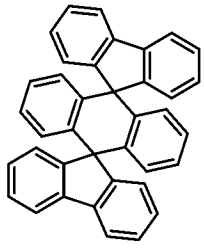
【0025】 在本說明書中，膦氧化物基團之特定實例包含二苯基膦氧化物基團、二萘基膦氧化物以及其類似基團，但不限於此。

【0026】 在本說明書中，芳基不受特別限制，但較佳具有 6 至 30 個碳原子，且芳基可為單環或多環芳基。

【0027】 當芳基為單環芳基時，其碳原子數目不受特別限制，但較佳為 6 至 30。單環芳基之特定實例包含苯基、聯苯基、聯三苯基以及其類似基團，但不限於此。

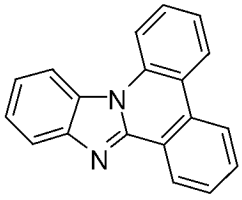
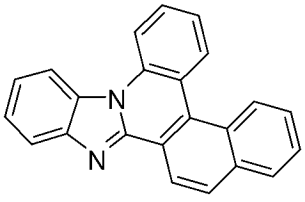
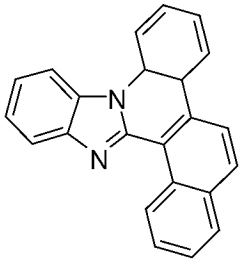
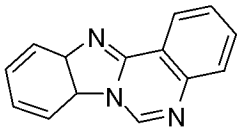
【0028】 當芳基為多環芳基時，其碳原子數目不受特別限制，但較佳為 10 至 30。多環芳基之特定實例包含萘基、蒽基、菲基、三苯基、苊基、芘基、屈基、茀基以及其類似基團，但不限於此。

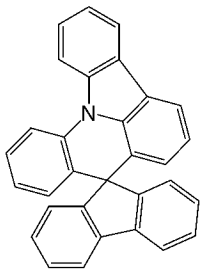
【0029】 在本說明書中，茀基可經取代，且相鄰取代基可彼此組合以形成環。

【0030】 當茀基經取代時，茀基可為  、  、  、  、  、  以及其類似基團。然而，茀基不限於此。

【0031】 在本說明書中，雜芳基包含除碳外之原子中之一或多者，亦即雜原子，且特定言之，雜原子可包含一或多個由 O、N、Se、S 以及類似原子組成之族群中選出的原子。其碳原子數目不受特別限制，但較佳為 2 至 30，且雜芳基可為單環或多環。雜環基之實例包括噻吩基、呋喃基、吡咯基、咪唑基、噻唑基、噁唑基、噁二唑基、三唑基、吡啶基、聯吡啶基、嘧啶基、三嗪基、三唑基、吖啶基、噠嗪基、吡嗪基、喹啉基、喹唑啉基、喹喏啉基、酞嗪基、吡啶并嘧啶基、吡啶并吡嗪基、吡嗪并吡嗪基、異喹啉基、吲哚基、咔唑基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、苯并咔唑基、苯并噻吩基、二苯并噻吩基、苯并呋喃基、啡啉基、噻唑基、異噁唑基、噁二唑基、噻二唑基、苯并噻唑基、二苯并呋喃基以及其類似基團，但不限於此。

【0032】 在本說明書中，稠合結構可為如下結構，其中芳族烴環與相應取代基稠合。

【0033】 苯并咪唑之稠環之實例包含 、、、以及其類似基團，但不限於此。



【0034】 吖啶之稠環之實例包含（螺[芴-9,8'-吲哚并[3,2,1-de]吖啶]）以及其類似基團，但不限於此。

【0035】 在本發明中，「相鄰」基團可意謂經直接連接於相應取代基進行取代之原子之原子取代之取代基、在空間上與相應取代基緊密地安置之取代基或經其中取代基進行取代之原子取代之另一取代基。舉例而言，在苯環中之鄰位經取代之兩個取代基及在脂環中經同一碳取代之兩個取代基可解釋為彼此「相鄰」的基團。

【0036】 在本說明書中，相鄰基團彼此組合以形成環之情形意謂相鄰基團彼此組合以形成上述 5 員至 8 員烴環或 5 員至 8 員雜環，且所述環可為單環或多環，可為脂族環、芳族環或其稠合形式，且不限於此。

【0037】 在本說明書中，胺基意謂單價胺，其中胺基（$-NH_2$）之至少一個氫原子經另一取代產物取代，且由$-NR_{100}R_{101}$表示，且 R_{100} 與 R_{101} 彼此相同或不同，且可各獨立地為由以下基團中之至少一者構成的取代基：氫；氘；鹵基；烷基；烯基；烷氧基；環烷基；芳基；以及雜環基（然而 R_{100} 及 R_{101} 中之至少一者不為氫）。舉例而言，胺基可由以下基團組成之族群中選出：$-NH_2$；單烷胺基；二烷胺基；N-烷基芳胺基；單芳胺基；二芳胺基；N-芳基雜芳胺基；N-烷基雜芳胺基；單雜芳胺基以及二雜芳胺基，且其碳原子數目不受特別限制，但較佳為 1 至 30。胺基之特定實例可包含甲胺基、二甲胺基、乙胺基、二乙胺基、苯胺基、萘胺基、聯苯胺基、蒽胺

基、9-甲基-蒽胺基、二苯胺基、二甲苯胺基、N-苯基甲苯胺基、三苯胺基、N-苯基聯苯胺基、N-苯基萘胺基、N-聯苯萘胺基、N-萘基茀基胺基、N-苯基菲胺基、N-聯苯菲胺基、N-苯基茀胺基、N-苯基聯三苯胺基、N-菲基茀基胺基、N-聯苯茀基胺基以及其類似基團，但不限於此。

【0038】 在本說明書中，烷胺基、N-芳基烷胺基、烷基硫醇基、烷基硫氧基及 N-烷基雜芳胺基中的烷基與上述烷基實例相同。特定言之，烷基硫醇基之實例包含甲基硫醇基、乙基硫醇基、第三丁基硫醇基、己基硫醇基、辛基硫醇基以及其類似基團，且烷基硫氧基之實例包含甲磺醯基、乙基硫氧基、丙基硫氧基、丁基硫氧基以及其類似基團，但不限於此。

【0039】 在本說明書中，芳胺基之實例包含經取代或未經取代之單芳胺基、經取代或未經取代之二芳胺基或經取代或未經取代之三芳胺基。芳胺基中之芳基可為單環芳基或多環芳基。包含兩個或多於兩個芳基之芳胺基可包含單環芳基、多環芳基或單環芳基與多環芳基兩者。舉例而言，芳胺基中之芳基可由上述芳基實例選出。

【0040】 在本說明書中，雜芳胺基之實例包含經取代或未經取代之單雜芳胺基、經取代或未經取代之二雜芳胺基或經取代或未經取代之三雜芳胺基。包含兩個或多於兩個雜芳基之雜芳胺基可包含單環雜芳基、多環雜芳基或單環雜芳基與多環雜芳基兩者。舉例而言，雜芳胺基中之雜芳基可由上述雜芳基實例中選出。

【0041】 在本說明書中，雜環基可為單環或多環，可為芳族環、脂族環或芳族環與脂族環之稠環，且可由雜芳基實例中選出。

【0042】 在本說明書中，伸烷基意謂烷基中存在兩個鍵結位置，亦即為二價基團。關於烷基之上述說明可適用，除了伸芳基各為二價基團以外。

【0043】 在本說明書中，伸環烷基意謂環烷基中存在兩個鍵結位置，亦即為二價基團。關於環烷基之上述說明可適用，除伸環烷基各為二價基團以外。

【0044】 在本說明書中，關於雜芳基之上述說明可適用於伸雜芳基，除二價伸雜芳基以外。

【0045】 在本發明書中，關於芳基之上述說明可適用於芳氧基、芳烷基、芳烯基及烷基芳基中之芳基。

【0046】 在本說明書中，關於烷基之上述說明可適用於芳烷基及烷基芳基中之烷基。

【0047】 在本發明中，關於芳基之上述說明可適用於伸芳基，除二價伸芳基以外。

【0048】 根據本發明之一例示性實施例，X_1 至 X_3 中之至少一者為 N。

【0049】 根據本發明之一例示性實施例，X_1 至 X_3 彼此相同或不同，且各獨立地為 N 或 CR。

【0050】 根據本發明之一例示性實施例，R 為氫、氘、鹵基、氰基、硝基、經取代或未經取代之芳基或經取代或未經取代之雜芳基，所述雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0051】 根據本發明之一例示性實施例，R 為具有 6 至 20 個碳原子之芳基。

【0052】 根據本發明之一例示性實施例，R 為經取代或未經取代

之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之聯三苯基或經取代或未經取代之萘基。

【0053】 根據本發明之一例示性實施例，R 為具有 6 至 30 個碳原子之雜芳基，其包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0054】 根據本發明之一例示性實施例，R 為氫。

【0055】 根據本發明之一例示性實施例，Z 為 O、S、Se 或 Te。

【0056】 根據本發明之一例示性實施例，Z 為 O 或 S。

【0057】 根據本發明之一例示性實施例，Z 為 O。

【0058】 根據本發明之一例示性實施例，Z 為 S。

【0059】 根據本發明之一例示性實施例，L_1 為直接鍵；或經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之伸雜芳基，所述伸雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0060】 根據本發明之一例示性實施例，L_2 為經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之伸雜芳基，所述伸雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0061】 根據本發明之一例示性實施例，L_1 或 L_2 為經取代或未經取代之具有 2 至 30 個碳原子之伸芳基。

【0062】 根據本發明之一例示性實施例，L_1 或 L_2 為經取代或未經取代之伸苯基、經取代或未經取代之伸聯苯基、經取代或未經取代之伸聯三苯基、經取代或未經取代之伸萘基、經取代或未經取代之蒽基或經取代或未經取代之伸芴基。

【0063】 根據本發明之一例示性實施例，L_1 或 L_2 為伸苯基、伸聯苯基、伸聯三苯基、伸萘基、蒽基或伸芴基。

【0064】 根據本發明之一例示性實施例，L_1 為直接鍵、伸苯基或

伸聯苯基。

【0065】 根據本發明之一例示性實施例，L_2 為伸苯基或伸聯苯基。

【0066】 根據本發明之一例示性實施例，R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且各獨立地為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之雜芳基，所述雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0067】 根據本發明之一例示性實施例，R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且各獨立地為芳基，其未經取代或經以下基團取代：鹵基、氰基、硝基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基或雜芳基，所述雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0068】 根據本發明之一例示性實施例，R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之聯三苯基、經取代或未經取代之萘基、經取代或未經取代之蒽基、經取代或未經取代之菲基、經取代或未經取代之芘基、經取代或未經取代之茀基、經取代或未經取代之屈基或經取代或未經取代之苐基。

【0069】 根據本發明之一例示性實施例，R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之萘基或經取代或未經取代之苐基。

【0070】 根據本發明之一例示性實施例，R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且為苯基、聯苯基、萘基或苐基。

【0071】 根據本發明之一例示性實施例，R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且為苯基、聯苯基或萘基。

【0072】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之矽烷基；經取代或未經取代之硼基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之芳基；經取代或未經取代之烷基芳基；經取代或未經取代之芳基膦基；經取代或未經取代之膦氧化物基團；經取代或未經取代之胺基；經取代或未經取代之烷胺基；經取代或未經取代之芳胺基；或經取代或未經取代之雜芳基，所述雜芳基包含 N、O 及 S 原子中之一或多者。

【0073】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之吡啶基、經取代或未經取代之嘧啶基、經取代或未經取代之三嗪基、經取代或未經取代之吖啶基、經取代或未經取代之喹啉基或經取代或未經取代之喹唑啉基。

【0074】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為未經取代或經苯基、聯苯基、聯三苯基或萘基取代之吡啶基；嘧啶基；未經取代或經苯基取代之三嗪基；吖啶基；喹啉基；或喹唑啉基。

【0075】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為未經取代或經吡啶基、嘧啶基或苯基取代之三嗪基，所述取代基未經取代或經吡啶基、嘧啶基或三嗪基取代。

【0076】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為未經取代或經吡啶基、嘧啶基或苯基取代之三嗪基，所述取代基未經取代或經氰基、烷基、環烷基或烷氧基取代。

【0077】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為未經取代或經吡啶基取代之三嗪基，所述取代基經甲氧基、嘧啶基或苯基取代。

【0078】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代

之咔唑基、經取代或未經取代之噻吩基、經取代或未經取代之呋喃基、經取代或未經取代之苯并咔唑基、經取代或未經取代之苯并噻吩基、經取代或未經取代之苯并呋喃基、經取代或未經取代之二苯并咔唑基、經取代或未經取代之二苯并噻吩基或經取代或未經取代之二苯并呋喃基。

【0079】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為咔唑基、噻吩基、呋喃基、苯并咔唑基、苯并噻吩基、苯并呋喃基、二苯并咔唑基、二苯并噻吩基或二苯并呋喃基。

【0080】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為苯基、聯苯基、聯三苯基、萘基經取代或未經取代之咔唑、噻吩基、呋喃基、苯并咔唑基、苯并噻吩基、苯并呋喃基、二苯并咔唑基、二苯并噻吩基或二苯并呋喃基。

【0081】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之聯三苯基、經取代或未經取代之萘基、經取代或未經取代之蒽基、經取代或未經取代之菲基、經取代或未經取代之三苯基、經取代或未經取代之芘基或經取代或未經取代之屈基或經取代或未經取代之茀基。

【0082】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為苯基、聯苯基、聯三苯基、萘基、蒽基、芘基、屈基或茀基。

【0083】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為吡啶基；嘧啶基；或未經取代或經三嗪基、喹啉基或喹唑啉基取代之苯基；聯苯基；聯三苯基；萘基；蒽基；菲基；三苯基；或茀基。

【0084】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為苯基、聯苯基、聯

三苯基、萘基、蒽基、屈基、螺聯芴、聯伸三苯或芴基，其未經取代或經苯基、聯苯基、聯三苯基或萘基取代。

【0085】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為苯基、聯苯基、聯三苯基或萘基，其經氰基取代或未經取代。

【0086】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為苯基、聯苯基、聯三苯基或萘基，其經苯甲腈取代或未經取代。

【0087】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之膦氧化物基團。

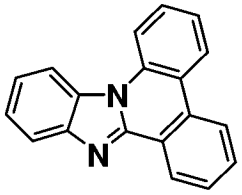
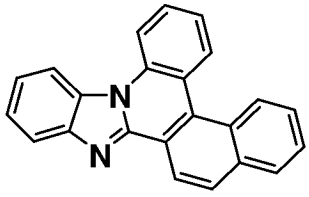
【0088】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為膦氧化物基團，其經苯基、聯苯基或萘基取代或未經取代。

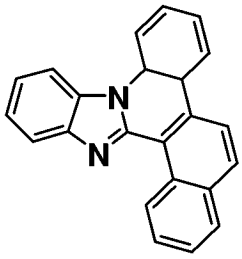
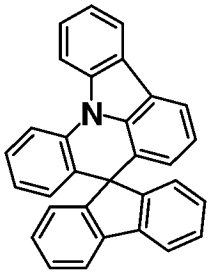
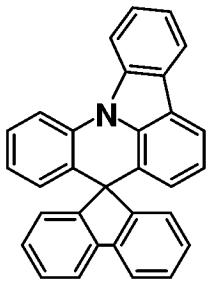
【0089】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為噁二唑基或噻二唑基，其經苯基、聯苯基或萘基取代或未經取代。

【0090】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之四苯基矽烷基。

【0091】 根據本發明之例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之四苯基甲烷。

【0092】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之二苯并矽羅。

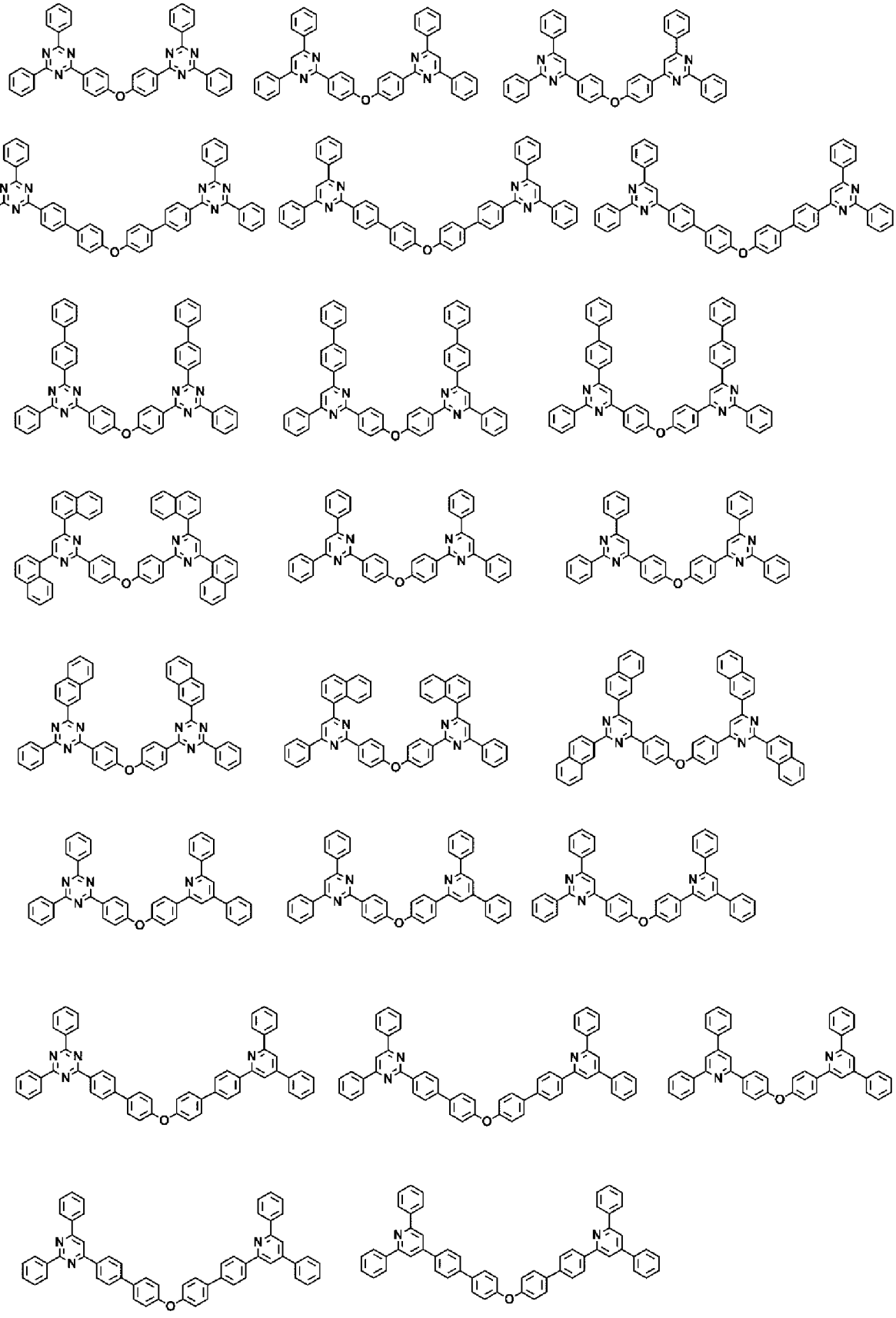
【0093】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之、經取代或未經取代之、經取代或

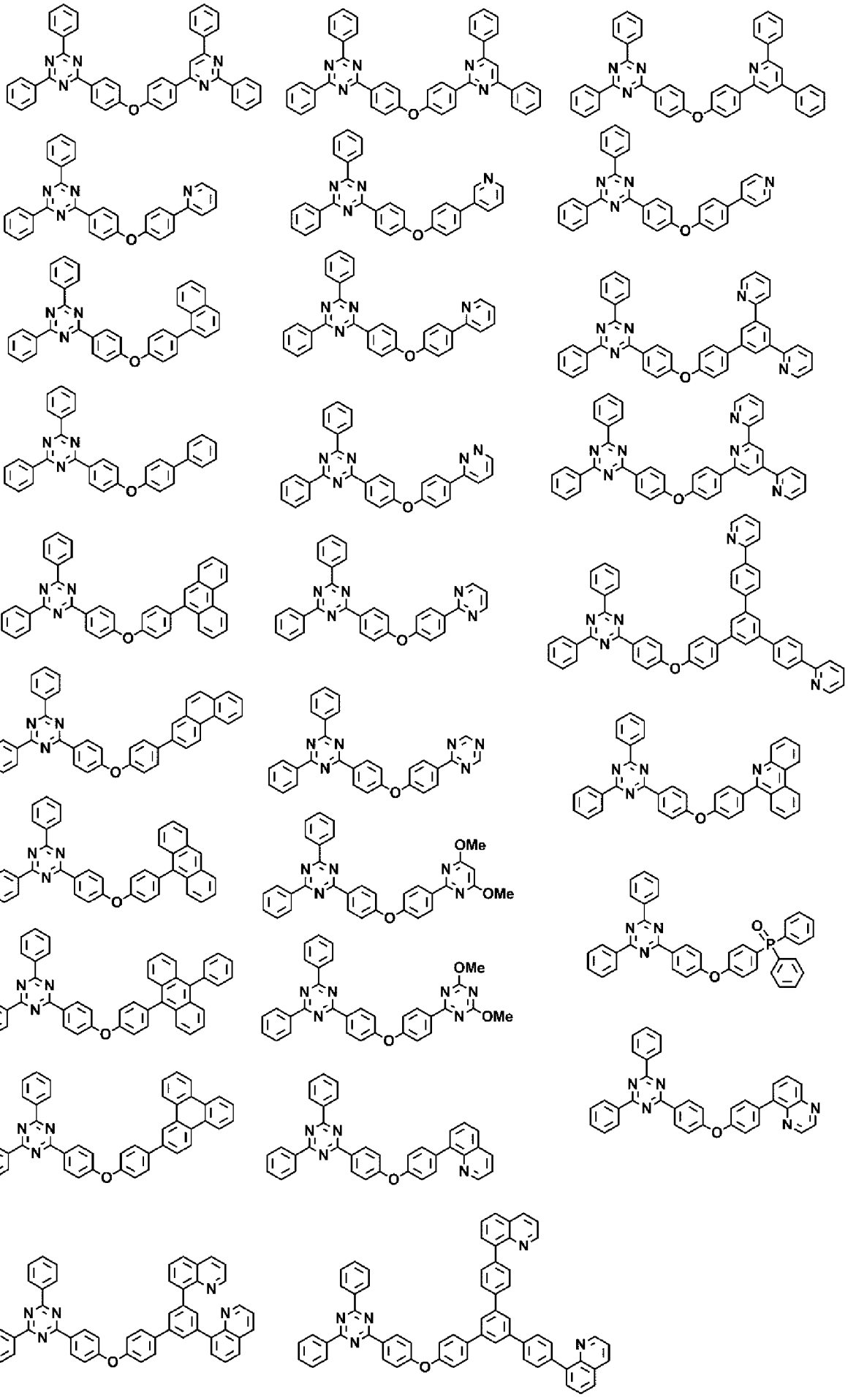
未經取代之  、經取代或未經取代之  或經取代或未經取代之  。

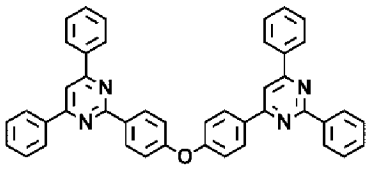
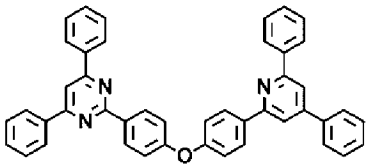
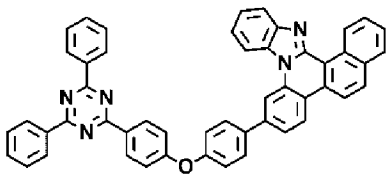
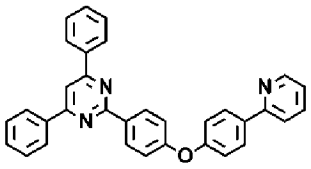
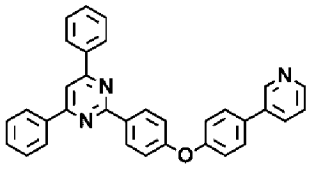
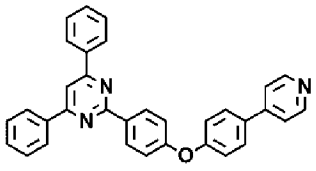
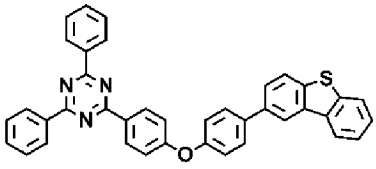
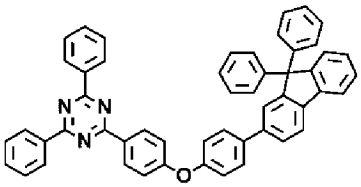
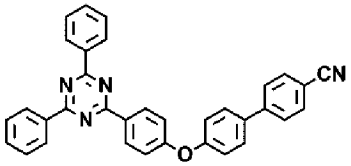
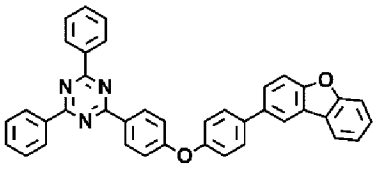
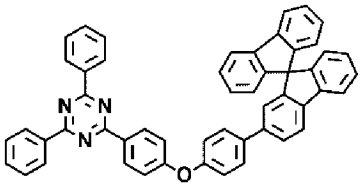
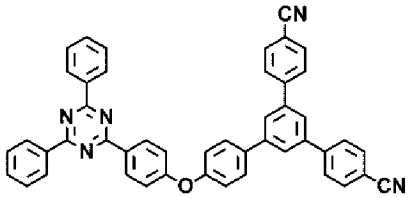
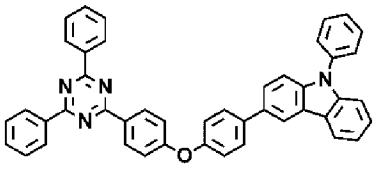
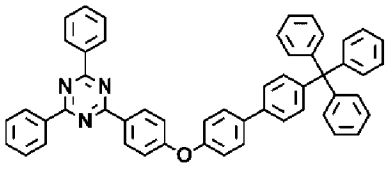
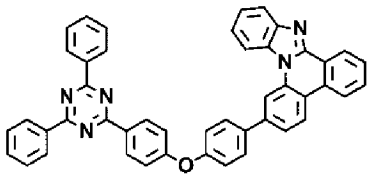
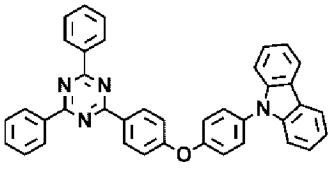
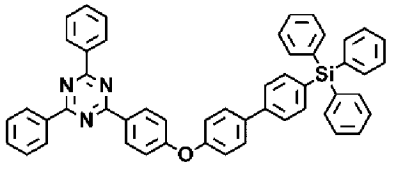
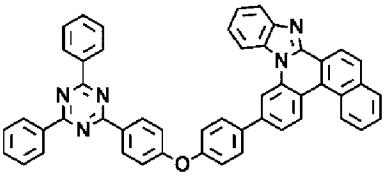
【0094】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之螺聯茀。

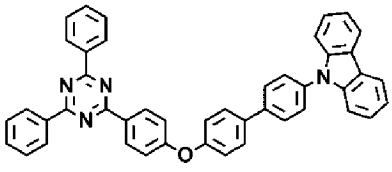
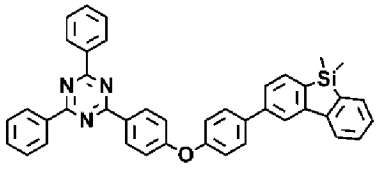
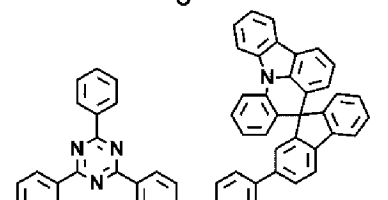
【0095】 根據本發明之一例示性實施例，R_3 為經取代或未經取代之吖啶。

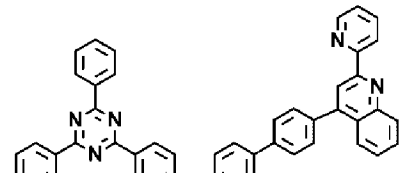
【0096】 根據本發明之一例示性實施例，化學式 1 可由以下結構表示，但不限於此。

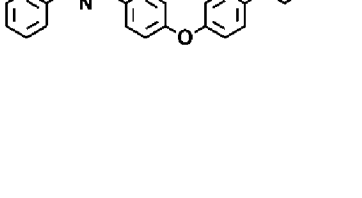


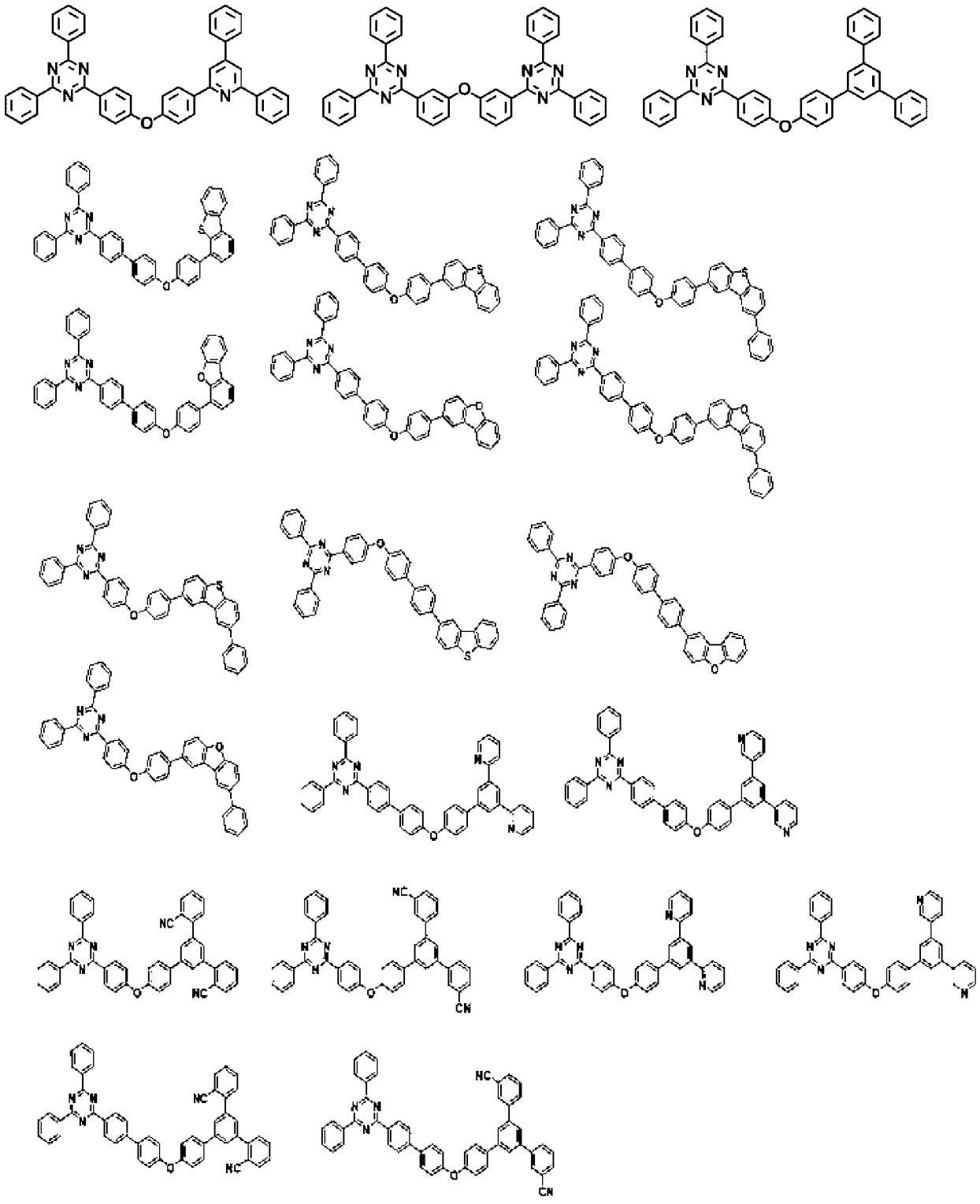


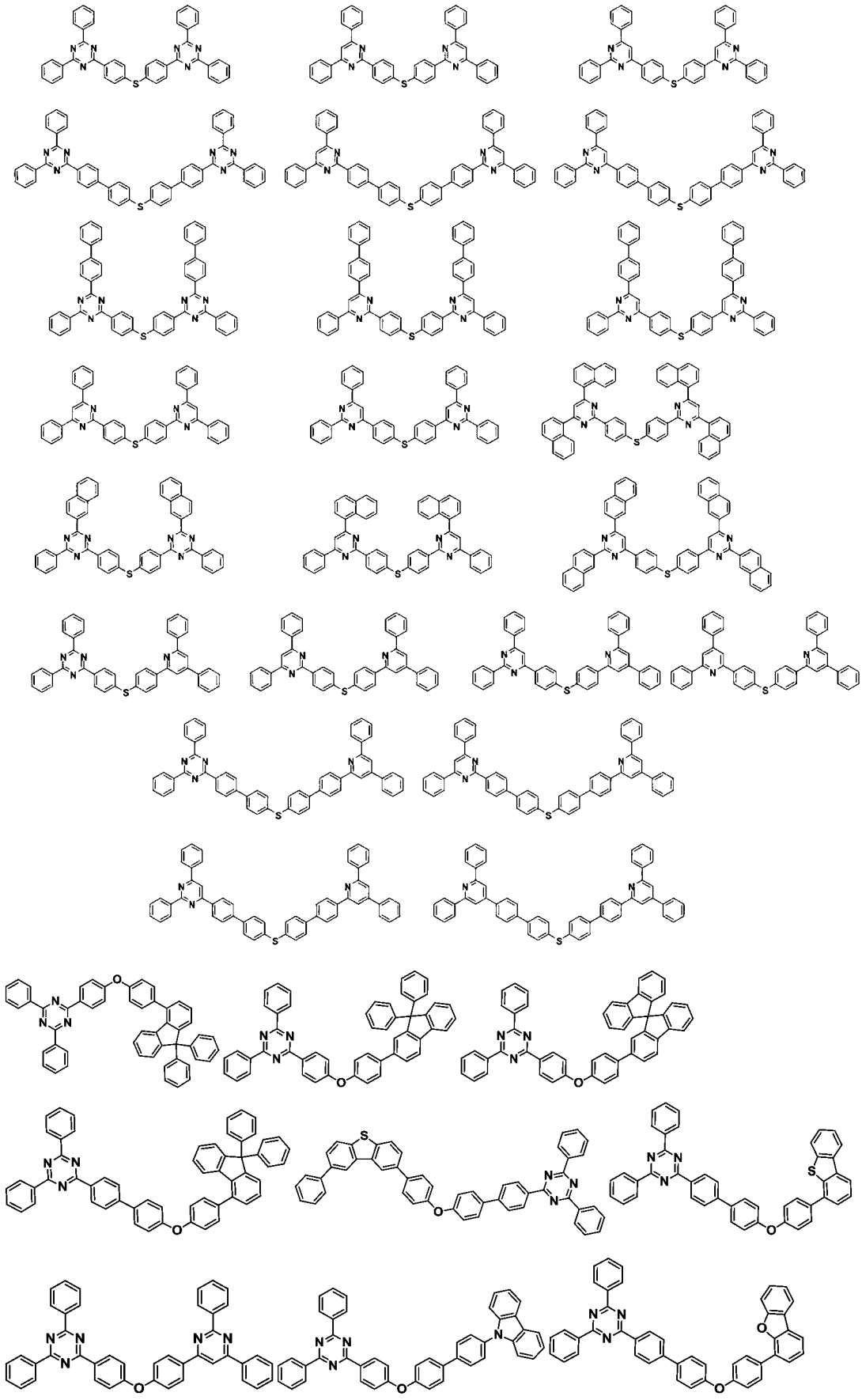



















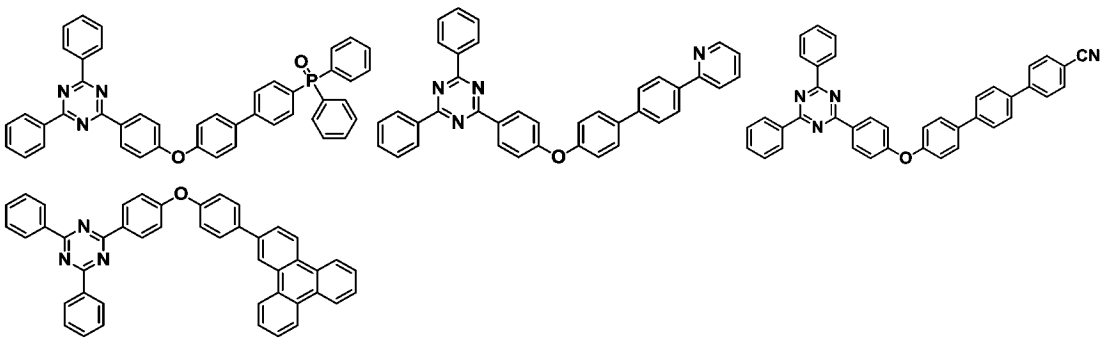














【0097】 由化學式 1 表示之化合物可根據下述製備實例製備。

【0098】 本發明之一例示性實施例提供一種有機電子裝置，其包含：第一電極；經設置以面向第一電極之第二電極；以及一或多個設置於第一電極與第二電極之間的有機材料層，其中有機材料層中之一或多個層包含所述化合物。

【0099】 當在本說明書中的一個元件被安置「於」另一元件「上」時，此情況不僅包含一個元件與另一元件接觸之情況，而且包含在兩個元件之間存在又一元件之情況。

【0100】 當在本說明書中的一個部件「包含」一個構成元件時，除非另外特別描述，否則此不意謂排除另一構成元件，而意謂可更包括另一構成元件。

【0101】 本發明之有機電子裝置之有機材料層亦可由單層結構構成，而且可由兩個或多於兩個有機材料層堆疊之多層結構構成。舉例而言，作為本發明有機電子裝置之代表性實例，有機發光裝置可具有如下結構，其包含電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、電子注入層以及類似層作為有機材料層。然而，有機電子裝置之結構不限於此，且可包含較少數量之有機層。

【0102】 根據本發明之一例示性實施例，有機電子裝置可由以下

裝置組成之族群中選出：有機發光裝置、有機磷光裝置、有機太陽能電池、有機光導體（organic photoconductor；OPC）以及有機電晶體。

【0103】 下文將例示有機發光裝置。

【0104】 根據本發明之一例示性實施例，有機材料層包含發光層，且發光層包含所述化合物。

【0105】 根據本發明之一例示性實施例，有機材料層包含電洞注入層或電洞傳輸層，且電洞注入層或電洞傳輸層包含所述化合物。

【0106】 在另一例示性實施例中，有機材料層包含發光層，且發光層包含所述化合物。

【0107】 根據本發明之一例示性實施例，有機材料層包含電子傳輸層或電子注入層，且電子傳輸層或電子注入層包含所述化合物。

【0108】 根據本發明之一例示性實施例，有機材料層包含電子阻斷層或電洞阻斷層，且電子阻斷層或電洞阻斷層包含所述化合物。

【0109】 根據本發明之一例示性實施例，有機發光裝置更包含一個或兩個或多於兩個由電洞注入層、電洞傳輸層、電子傳輸層、電子注入層、電子阻斷層及電洞阻斷層組成之族群中選出的層。

【0110】 在包含化學式 1 之化合物的有機材料層為電子傳輸層時，電子傳輸層可更包含 n 型摻雜劑。

【0111】 作為 n 型摻雜劑，可使用所屬領域中已知的 n 型摻雜劑，且可使用例如金屬或金屬錯合物。根據一實例，包含化學式 1 之化合物的電子傳輸層可更包含 LiQ。

【0112】 根據本發明之一例示性實施例，有機發光裝置包含：第一電極；經設置以面向第一電極之第二電極；設置於第一電極與第二

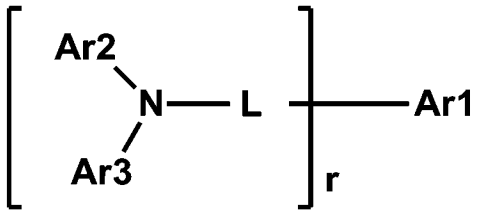
電極之間的發光層；以及設置於發光層與第一電極之間或發光層與第二電極之間的兩個或多於兩個有機材料層，其中兩個或多於兩個有機材料層中之至少一者包含所述化合物。在本申請案之一例示性實施例中，作為兩個或多於兩個有機材料層，其可由以下各者組成之族群中選出：電子傳輸層、電子注入層、同時傳輸及注入電子之層以及電洞阻斷層。

【0113】 根據本發明之一例示性實施例，有機材料層包含兩個或多於兩個電子傳輸層，且兩個或多於兩個電子傳輸層中之至少一者包含所述化合物。特定言之，根據本發明之一例示性實施例，所述化合物亦可包含在兩個或多於兩個電子傳輸層中之一個層中，且可包含在兩個或多於兩個電子傳輸層中之各層。

【0114】 另外，根據本發明之一例示性實施例，當化合物包含於兩個或多於兩個電子傳輸層中之各者中時，除所述化合物以外的其他材料可彼此相同或不同。

【0115】 在本發明之一例示性實施例中，有機材料層包含發光層，且所述發光層包含由如下化學式 A 表示之化合物。

[化學式 A]



【0116】 在化學式 A 中，

Ar1 為經取代或未經取代之單價或多價苯并茀基；經取代或未經取代之單價或多價丙二烯合茀基；經取代或未經取代之單價或多價芘基；或經取代或未經取代之單價或多價屈基，

L 為直接鍵；經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之伸雜芳基，

Ar2 與 Ar3 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之芳基；經取代或未經取代之矽烷基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之芳烷基；或經取代或未經取代之雜芳基，或可彼此組合以形成經取代或未經取代之環，

r 為 1 或大於 1 之整數，且

當 r 為 2 或大於 2 時，括弧中之取代基彼此相同或不同。

【0117】 根據本發明之一例示性實施例，有機材料層包含發光層，且所述發光層包含由化學式 A 表示之化合物作為所述發光層之摻雜劑。

【0118】 在本發明之一例示性實施例中，L 為直接鍵。

【0119】 根據本發明之一例示性實施例，r 為 2。

【0120】 在本發明之一例示性實施例中，Ar1 為經取代或未經取代之二價芘基。

【0121】 在另一例示性實施例中，Ar1 為二價芘基，其未經取代或經甲基、乙基、第三丁基或異丙基取代。

【0122】 在又一例示性實施例中，Ar1 為二價芘基。

【0123】 在本發明之一例示性實施例中，Ar2 與 Ar3 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之具有 6 至 30 個碳原子之芳基；經取代或未經取代之具有 1 至 30 個碳原子之烷基；或經取代或未經取代之具有 2 至 30 個碳原子之雜芳基。

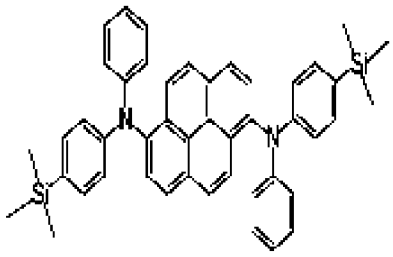
【0124】 根據本發明之一例示性實施例，Ar2 與 Ar3 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之具有 6 至 30 個碳原子之

芳基。

【0125】 根據本發明之一例示性實施例，Ar2 與 Ar3 彼此相同或不同，且各獨立地為具有 6 至 30 個碳原子之芳基，其未經取代或經矽烷基取代，所述矽烷基經烷基取代。

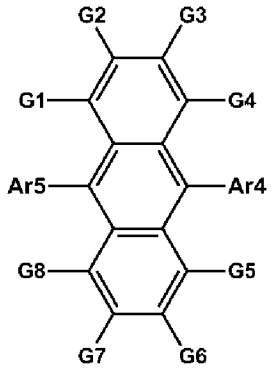
【0126】 在本發明之一例示性實施例中，Ar2 及 Ar3 為苯基，其未經取代或經三甲基矽烷基取代。

【0127】 根據本發明之一例示性實施例，化學式 A 可由以下化合物表示。



【0128】 在一例示性實施例中，有機材料層包含發光層，且所述發光層包含由以下化學式 B 表示之化合物。

[化學式 B]



【0129】 在化學式 B 中，

Ar4 與 Ar5 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之單環芳基；或經取代或未經取代之多環芳基，且

G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；經取代或未經取代之單環芳基；或經取代或未經取代之多環芳基。

【0130】 在一例示性實施例中，有機材料層包含發光層，且所述發光層包含由化學式 B 表示之化合物作為發光層之主體。

【0131】 在本發明之一例示性實施例中，Ar4 與 Ar5 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之多環芳基。

【0132】 在一例示性實施例中，Ar4 與 Ar5 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之萘基。

【0133】 在本發明之一例示性實施例中，Ar4 與 Ar5 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之 2-萘基。

【0134】 根據一例示性實施例，Ar4 及 Ar5 為 2-萘基。

【0135】 在一例示性實施例中，G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；或經取代或未經取代之多環芳基。

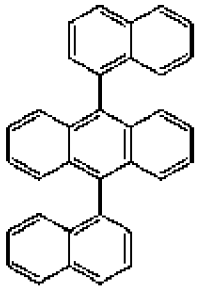
【0136】 根據一例示性實施例，G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；或經取代或未經取代之具有 6 至 30 個碳原子之多環芳基。

【0137】 在本發明之一例示性實施例中，G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；或經取代或未經取代之萘基。

【0138】 在一例示性實施例中，G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；或未經取代或經芳基取代之萘基。

【0139】 在一例示性實施例中，G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；或經 9-苯基蒽基取代之萘基。

【0140】 在本發明之一例示性實施例中，化學式 B 由以下化合物中選出。



【0141】 在一例示性實施例中，有機材料層包含發光層，且所述發光層包含由化學式 A 表示之化合物作為發光層之摻雜劑，且包含由化學式 B 表示之化合物作為發光層之主體。

【0142】 根據本發明之一例示性實施例，有機材料層更包含電洞注入層或電洞傳輸層，所述有機材料層除包含所述化合物以外，其亦包含有包含芳胺基、咔唑基或苯并咔唑基之化合物。

【0143】 在另一例示性實施例中，有機發光裝置可為具有如下結構（正常類型）之有機發光裝置，其中正電極、一或多個有機材料層及負電極依序堆疊於基板上。

【0144】 在又一例示性實施例中，有機發光裝置可為具有如下逆向結構（反向類型）的有機發光裝置，其中負電極、一或多個有機材料層及正電極依序堆疊在基板上。

【0145】 舉例而言，根據本發明之一例示性實施例之有機發光裝置的結構例示於圖 1 及圖 2 中。

【0146】 圖 1 例示有機電子裝置之結構，其中基板（1）、正電極（2）、發光層（3）及負電極（4）依序堆疊。在上述結構中，上述化合物可包含在發光層（3）中。

【0147】 圖 2 例示有機電子裝置之結構，其由基板（1）、正電極（2）、電洞注入層（5）、電洞傳輸層（6）、發光層（7）、電子傳輸層（8）及負電極（4）構成。

【0148】 在上述結構中，上述化合物可包含於電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層及電子注入層中之一或多個層中。

【0149】 除有機材料層中之一或多個層包含本申請案之化合物（亦即所述化合物）外，本發明之有機發光裝置可藉由所屬領域中已知之材料及方法製造。

【0150】 當有機發光裝置包含多個有機材料層時，所述有機材料層可由相同材料或不同材料形成。

【0151】 除有機材料層中之一或多個層包含所述化合物（亦即，由化學式 1 表示之化合物）外，本發明之有機發光裝置可藉由所屬領域中已知之材料及方法製造。

【0152】 舉例而言，本發明之有機發光裝置可藉由將第一電極、有機材料層及第二電極依序堆疊於基板上來製造。在此情況下，可藉由如下方法製造有機發光裝置：藉由使用物理氣相沈積（PVD）方法（諸如濺鍍或電子束蒸發）在基板上沈積具有導電性之金屬或金屬氧化物或其合金以形成正電極，在所述基板上形成包含電洞注入層、電洞傳輸層、發光層及電子傳輸層之有機材料層，隨後在其上沈積可用作負電極之材料。除上述方法以外，有機發光裝置可藉由在基板上依序沈積負電極材料、有機材料層及正電極材料來製造。

【0153】 此外，當製造有機發光裝置時，化學式 1 之化合物不僅可藉由真空沈積方法，而且可藉由溶液塗覆方法形成有機材料層。此處，溶液塗覆方法意謂旋塗、浸塗、刀片刮抹、噴墨印刷、絲網印刷、噴霧方法、滾塗以及其類似方法，但不限於此。

【0154】 除上述方法以外，有機發光裝置亦可藉由在基板上依序

沈積負電極材料、有機材料層及正電極材料來製造。然而，製造方法不限於此。

【0155】 根據本說明書中之一個例示性實施例，第一電極為正電極，且第二電極為負電極。

【0156】 在另一例示性實施例中，第一電極為負電極，且第二電極為正電極。

【0157】 作為正電極材料，具有大功函數之材料通常較佳，以便平穩地將電洞注入有機材料層中。可用於本發明中之正電極材料之特定實例包含：金屬，諸如釩、鉻、銅、鋅及金或其合金；金屬氧化物，諸如氧化鋅、氧化銦、氧化銦錫（indium tin oxide；ITO）及氧化銦鋅（indium zinc oxide；IZO）；金屬與氧化物之組合，諸如 ZnO：Al 或 SnO_2：Sb；導電聚合物，諸如聚(3-甲基噻吩)、聚[3,4-(伸乙基-1,2-二氧基)噻吩]（PEDOT）、聚吡咯及聚苯胺以及其類似物，但不限於此。

【0158】 作為負電極材料，具有小功函數之材料通常較佳，以便將電子平穩地注入有機材料層中。負電極材料之特定實例包含：金屬，諸如鎂、鈣、鈉、鉀、鈦、銦、釔、鋰、釕、鋁、銀、錫及鉛，或其合金；多層結構材料，諸如 LiF/Al 或 LiO_2/Al 以及其類似物，但不限於此。

【0159】 電洞注入層為自電極注入電洞之層，且電洞注入材料較佳為具有傳輸電洞之能力的化合物，因此具有在正電極注入電洞之作用以及注入電洞用於發光層或發光材料的極佳效果，防止由發光層產生之激子移動至電子注入層或電子注入材料，且形成薄膜之能力為極佳的。電洞注入材料之最高佔用分子軌域（highest

occupied molecular orbital；HOMO）較佳在正電極材料之功函數與周邊有機材料層之 HOMO 之間。電洞注入材料之特定實例包含金屬卟啉、寡噻吩、芳胺類有機材料、己腈六氮雜聯伸三苯類有機材料、喹吖啶酮類有機材料、芘類有機材料、蒽醌、聚苯胺及聚噻吩類導電聚合物以及其類似物，但不限於此。

【0160】 電洞傳輸層為接受來自電洞注入層之電洞且將電洞傳輸至發光層之層，且電洞傳輸材料宜為可接受來自正電極或電洞注入層之電洞以將電洞轉移至發光層且具有大的電洞遷移率的材料。其特定實例包含芳胺類有機材料、導電聚合物、共軛部分及非共軛部分共同存在之嵌段共聚物以及其類似物，但不限於此。

【0161】 發光材料為可分別接受來自電洞傳輸層及電子傳輸層之電洞及電子且組合電洞與電子以在可見光區域中發光之材料，且較佳為對螢光或磷光具有良好量子效率之材料。其特定實例包含：8-羥基-喹啉鋁錯合物（Alq_3）；咔唑類化合物；二聚苯乙烯基化合物；BAlq；10-羥基苯并喹啉-金屬化合物；苯并噁唑、苯并噻唑以及苯并咪唑類化合物；聚(對伸苯基伸乙烯基（PPV）類聚合物；螺環化合物；聚芴、紅螢烯以及其類似物，但不限於此。

【0162】 發光層可包含主體材料及摻雜材料。主體材料之實例包含稠合芳族環衍生物或含有雜環之化合物以及其類似物。稠合芳族環衍生物之特定實例包含蒽衍生物、茀衍生物、芘衍生物、稠五苯衍生物、菲化合物、丙二烯合芴化合物以及其類似物，且含有雜環之化合物之特定實例包含化合物、二苯并呋喃衍生物、梯型呋喃化合物、嘧啶衍生物以及其類似物，但實例不限於此。

【0163】 電子傳輸層為接受來自電子注入層之電子且將電子傳輸

至發光層之層，且電子傳輸材料宜為可良好地接受來自負電極之電子且可將電子轉移至發光層且具有大的電子遷移率的材料。其特定實例包含：8-羥基喹啉之 Al 錯合物；包含 Alq_3 之錯合物；有機基團化合物；羥基黃酮-金屬錯合物；以及其類似物，但不限於此。如根據先前技術所用，電子傳輸層可用於任何適宜陰極材料。詳言之，陰極材料之適當實例為具有低功函數之典型材料，後接有鋁層或銀層。其特定實例包含銫、鋇、鈣、鐿以及釤，在各種情況下，後接有鋁層或銀層。

【0164】 電子注入層為自電極注入電子之層，且較佳為具有傳輸電子之能力的化合物，且具有自負電極注入電子之作用及將電子注入發光層或發光材料中之極佳作用，防止由發光層產生之激子移動至電洞注入層，且形成薄膜的能力亦為極佳的。其特定實例包含芴酮、蒽醌二甲烷、二苯醌、二氧化硫代哌喃、噁唑、噁二唑、三唑、咪唑、芘四羧酸、亞芴基甲烷、蒽酮（anthrone）及其類似物以及其衍生物、金屬錯合物化合物、含氮之 5 員環衍生物以及其類似物，但不限於此。

【0165】 金屬錯合物化合物之實例包含 8-羥基喹啉根基鋰、雙(8-羥基喹啉根基)鋅、雙(8-羥基喹啉根基)銅、雙(8-羥基喹啉根基)錳、三(8-羥基喹啉根基)鋁、三(2-甲基-8-羥基喹啉根基)鋁、三(8-羥基喹啉根基)鎵、雙(10-羥基苯并[h]喹啉根基)鈹、雙(10-羥基苯并[h]喹啉根基)鋅、雙(2-甲基-8-喹啉根基)氯鎵、雙(2-甲基-8-喹啉根基)(鄰甲酚根基)鎵、雙(2-甲基-8-喹啉根基)(1-萘根基)鋁、雙(2-甲基-8-喹啉根基)(2-萘根基)鎵以及其類似物，但不限於此。

【0166】 電洞阻斷層為阻斷電洞到達負電極之層，且通常可在與

電洞注入層之相同條件下形成。其特定實例包含噁二唑衍生物或三唑衍生物、啡啉衍生物、BCP、鋁錯合物以及其類似物，但不限於此。

【0167】 根據本發明之有機電子裝置根據所用之材料可為頂部發射型、底部發射型或雙重發射型。

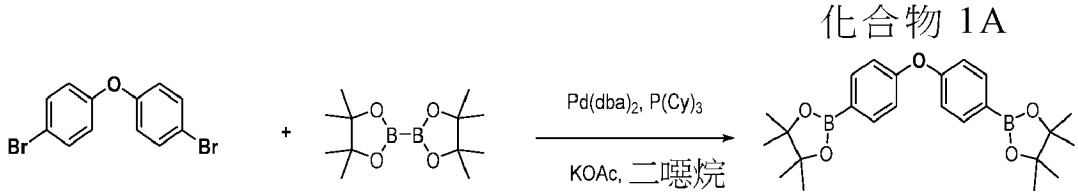
【0168】 根據本發明之一例示性實施例，除有機電子裝置以外，上述化合物可包含於有機太陽能電池或有機電晶體中。

【0169】 根據本發明之化合物可藉由類似於用於有機發光裝置、甚至包含有機磷光裝置、有機太陽能電池、有機光導體、有機電晶體以及其類似物之有機電子裝置的原理發揮作用。

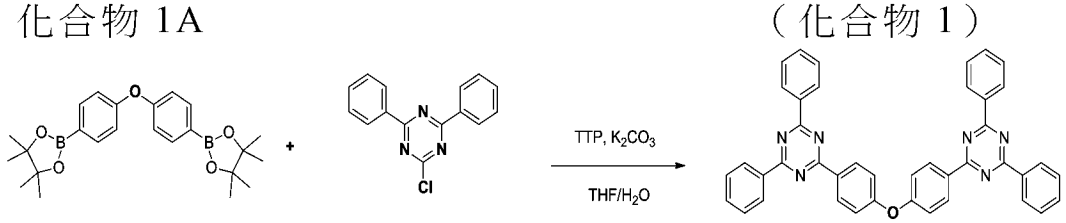
【0170】 在下文中，本發明將參考實例詳細描述以特別說明本發明。然而，根據本說明書之實例可以各種形式修改，且不應解釋為本發明之範疇限於下文詳細描述之實例。提供本說明書之實例以向於所屬領域具通常知識者更完整地說明本說明書。

<製備實例>

<合成實例 1>-製備化合物 1



化合物 1A



化合物 1A （化合物 1）

（1）製備化合物 1A

【0171】 將 4,4'-氧基(溴苯)（20.0 公克，60.98 毫莫耳）、雙(頻哪

醇根基)二硼（37.2 公克，146.34 毫莫耳）及乙酸鉀（35.9 公克，365.85 毫莫耳）在氮氣氛圍下混合，且將所得混合物添加至 200 毫升二噁烷中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（2.1 公克，3.66 毫莫耳）及三環己基膦（2.1 毫克，7.32 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 4 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用乙醇進行再結晶以製備化合物 1A（23.8 公克，93%）。4,4'-氧基(溴苯)購自 TCI 有限公司（TCI, Co., Ltd）。

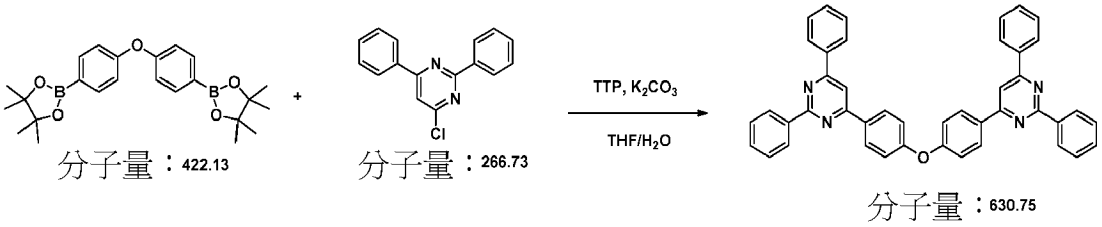
（2）製備化合物 1

【0172】 在氮氣氛圍下，將化合物 1A（23.8 公克，56.58 毫莫耳）及 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（30.2 公克，112.76 毫莫耳）置於 300 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（46.8 公克，338.28 毫莫耳）溶解於 150 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（3.9 公克，3.38 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 1（23.5 公克，66%）。2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪購自阿法埃莎公司（Alfa Aesar）。

MS: [M+H]+ = 633

<合成實例 2>-製備化合物 2

化合物 1A （化合物 2）



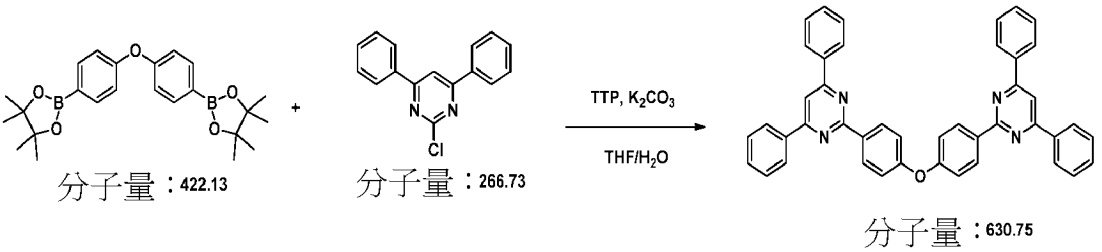
分子量：422.13 分子量：266.73 分子量：630.75

【0173】 在氮氣氛圍下將合成實例 1 中之化合物 1A（30.0 公克，71.07 毫莫耳）及 4-氯-2,6-二苯基嘧啶（37.9 g，142.14 mmol）置於 400 毫升二噁烷中，攪拌所得混合物且回流。之後，將磷酸鉀（90.5 公克，426.41 毫莫耳）溶解於 150 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（2.5 公克，4.26 毫莫耳）及三環己基膦（2.4 公克，8.52 莫耳）溶解於二噁烷中，且向其中引入所得溶液。在反應 24 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 2（34.5 公克，77%）。4-氯-2,6-二苯基嘧啶購自阿法埃莎公司。以下圖 3 為說明化合物 2 之 MS 資料值之圖。

MS: [M+H]+ = 631

<合成實例 3>-製備化合物 3

化合物 1A （化合物 3）



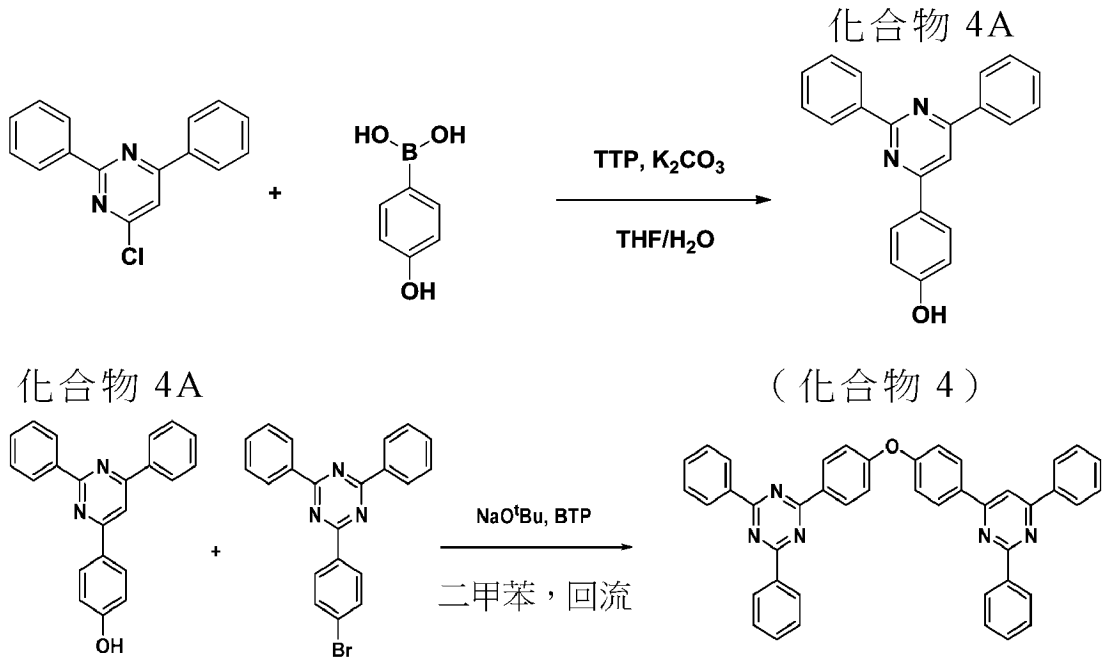
分子量：422.13 分子量：266.73 分子量：630.75

【0174】 除使用 2-氯-2,6-二苯基嘧啶替代 4-氯-2,6-二苯基嘧啶以外，以與製備合成實例 2 之化合物 2 相同之方式製備化合物 3（26.0

公克，產率 58%）。以下圖 4 為說明化合物 3 之 MS 資料值之圖。

MS: [M+H]+ = 631

<合成實例 4>-製備化合物 4



（1）製備化合物 4A

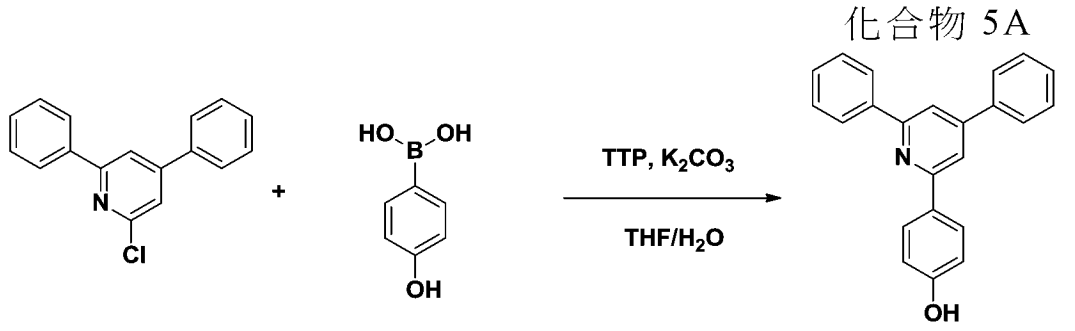
【0175】 在氮氣氛圍下，將 4-氯-2,6-二苯基嘧啶（50.0 公克，187.46 毫莫耳）及(4-羥基苯基)硼酸（31.0 公克，224.95 毫莫耳）置於 500 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（31.1 公克，224.95 毫莫耳）溶解於 100 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（6.5 公克，5.62 毫莫耳）。在反應 8 小時之後，降低混合物之溫度至常溫，分離有機層與水層，隨後在減壓下蒸餾有機層。用氯仿及水萃取有機層，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙醇再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 4A（29.2 公克，48%）。

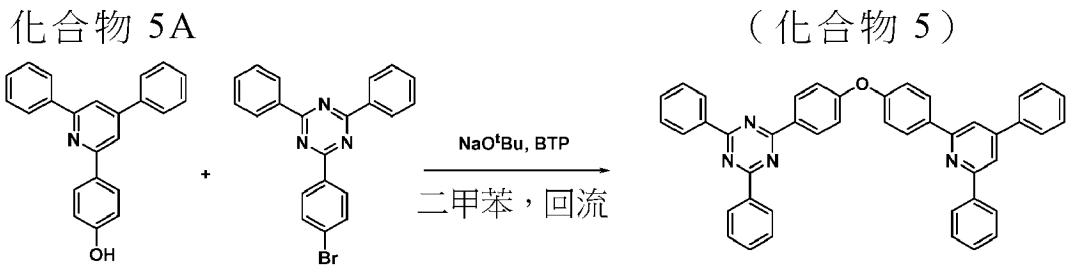
（2）製備化合物 4

【0176】 在氮氣氛圍下，將化合物 4A（29.2 公克，90.02 毫莫耳）、2-(4-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（35.0 公克，90.02 毫莫耳）及第三丁醇鈉（10.4 公克，108.02 毫莫耳）置於 300 毫升甲苯中，攪拌所得混合物且回流。之後，向其中引入雙(三-第三丁基膦)鈀（1.4 公克，2.70 毫莫耳）。在反應 8 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 4（23.3 公克，41%）。

MS: [M+H]+ = 632

<合成實例 5>-製備化合物 5





（1）製備化合物 5A

【0177】 在氮氣氛圍下，將 2-氯-4,6-二苯基吡啶（30.0 公克，112.89 毫莫耳）及(4-羥基苯基)硼酸（18.7 公克，135.47 毫莫耳）置於 300 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（18.7

公克，135.47 毫莫耳）溶解於 80 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（3.9 公克，3.39 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫，分離有機層與水層，隨後在減壓下蒸餾有機層。用氯仿及水萃取有機層，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙醇再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 5A（23.3 公克，64%）。

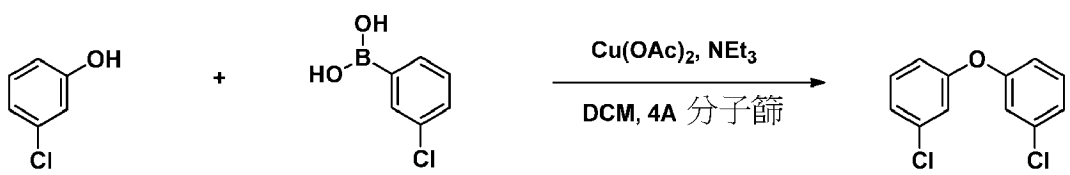
（2）製備化合物 5

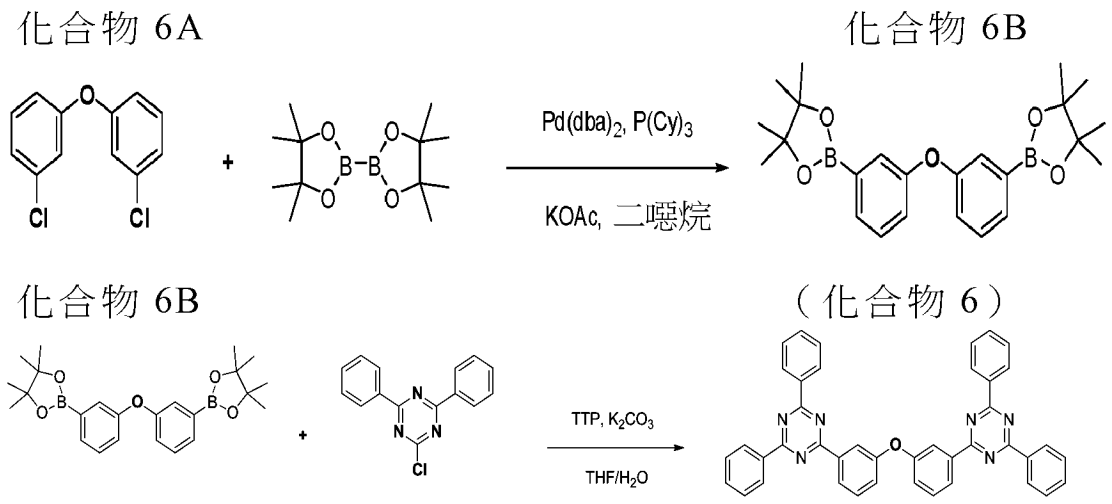
【0178】 在氮氣氛圍下，將化合物 5A（23.3 公克，72.05 毫莫耳）、2-(4-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（28.0 公克，72.05 毫莫耳）及第三丁醇鈉（8.3 公克，86.46 毫莫耳）置於 300 毫升甲苯中，攪拌所得混合物且回流。之後，向其中引入雙(三-第三丁基膦)鈀（1.1 公克，2.16 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 5（23.3 公克，41%）。

MS: [M+H]+ = 631

<合成實例 6>-製備化合物 6

化合物 6A





（1）製備化合物 6A

【0179】 在氮氣氛圍下，將 3-氯酚（50.0 公克，388.92 毫莫耳）、(3-氯苯基)硼酸（66.9 公克，408.37 毫莫耳）及三乙胺（198.2 公克，1,944.62 毫莫耳）置於 500 毫升藉由分子篩活化之二氯甲烷中且攪拌所得混合物。之後，向其中引入乙酸銅（70.6 公克，388.92 毫莫耳）。反應 12 小時後，過濾混合物。用氨水萃取濾液，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層以製備化合物 6A（84.6 公克，91%）。

（2）製備化合物 6B

【0180】 在氮氣氛圍下混合化合物 6A（50.0 公克，209.12 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（127.4 公克，501.88 毫莫耳）及乙酸鉀（123.1 公克，1,254.71 毫莫耳），且將所得混合物添加至 600 毫升二噁烷中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（7.2 公克，12.55 毫莫耳）及三環己基膦（7.0 毫克，25.09 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 12 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用

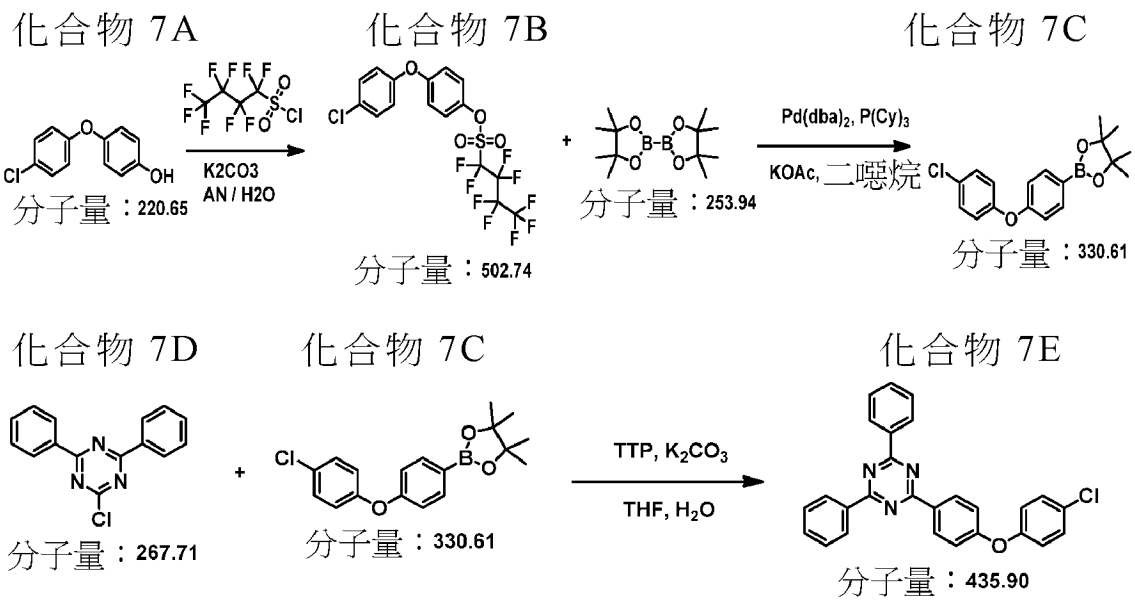
乙醇進行再結晶以製備化合物 6B（76.8 g, 87%）。

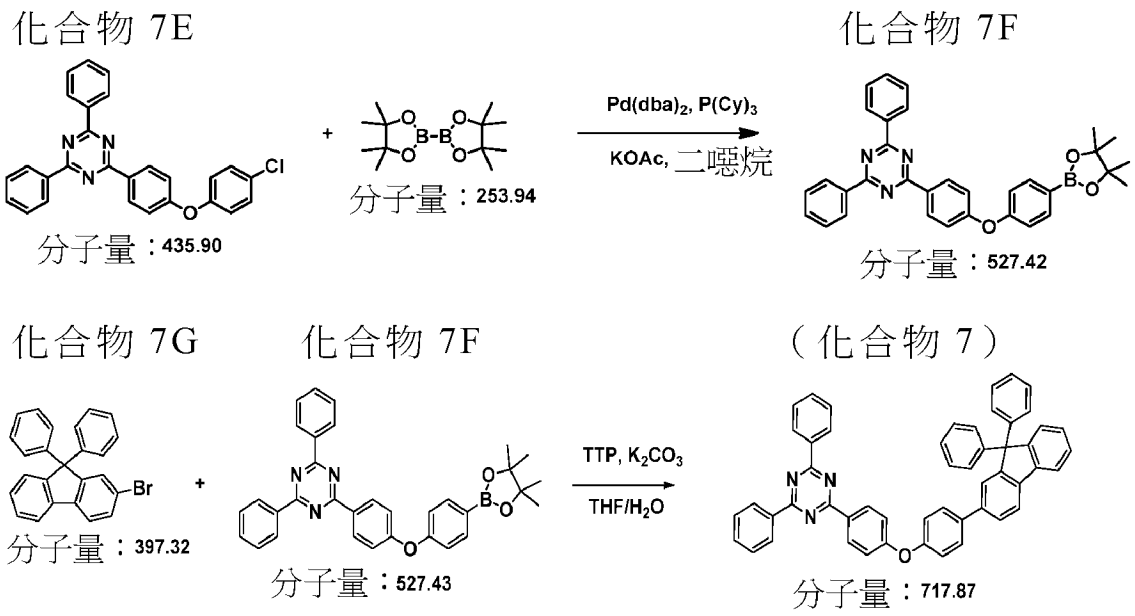
（3）製備化合物 6

【0181】 在氮氣氛圍下，將化合物 6B（20.0 公克，47.38 毫莫耳）及 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（25.4 公克，96.76 毫莫耳）置於 200 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（39.3 公克，284.27 毫莫耳）溶解於 100 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（3.3 公克，2.84 毫莫耳）。在反應 6 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 6（22.2 公克，74%）。

MS: [M+H]+ = 633

<合成實例 7>-製備化合物 7





（1）製備化合物 7B

【0182】 將 4-(4-氯苯氧基)酚（50.0 公克，226.60 毫莫耳）、1,1,2,2,3,3,4,4,4-九氟丁烷-1-磺醯氯（102.7 公克，339.90 毫莫耳）及碳酸鉀（62.6 公克，453.21 毫莫耳）置於 1,000 毫升乙腈及 300 毫升水中且攪拌所得混合物。反應 1 小時後，分離各層，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層以製備化合物 7B（108.2 公克，95%）。

（2）製備化合物 7C

【0183】 在氮氣氛圍下混合化合物 7A（113.9 公克，448.53 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（125.3 公克，494.38 毫莫耳）及乙酸鉀（132.1 公克，1,346 毫莫耳），且將所得混合物添加至 1,000 毫升四氫呋喃中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（7.2 公克，12.55 毫莫耳）及三環己基膦（7.0 毫克，25.09 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 12 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用

乙醇進行再結晶以製備化合物 7C（95.1 公克，64%）。

（3）製備化合物 7E

【0184】 在氮氣氛圍下，將化合物 7C（95.1 公克，288 毫莫耳）及 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（7D，70 公克，261 毫莫耳）置於 1,000 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（108.4 公克，784 毫莫耳）溶解於 500 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（9.7 公克，8 毫莫耳）。在反應 6 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 7E（87.8 公克，77%）。

（4）製備化合物 7F

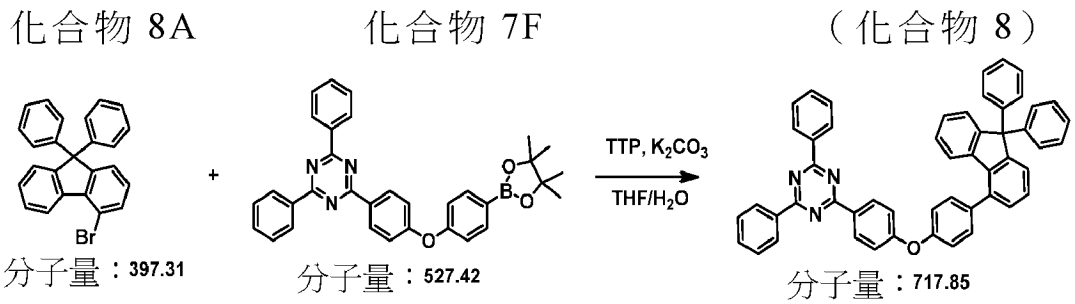
【0185】 在氮氣氛圍下混合化合物 7E（87.8 公克，201 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（56.3 公克，222 毫莫耳）及乙酸鉀（59.3 公克，604 毫莫耳），將所得混合物添加至 600 毫升四氫呋喃中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（3.5 公克，6 毫莫耳）及三環己基膦（3.4 毫克，12 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 12 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用乙醇進行再結晶以製備化合物 7F（93.5 公克，88%）。

（5）製備化合物 7

【0186】 在氮氣氛圍下，將化合物 7G（7 公克，18 毫莫耳）及化

合物 7F（10.2 公克，19 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（7.3 公克，58 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.6 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 7（7.7 公克，61%）。

<合成實例 8>-製備化合物 8

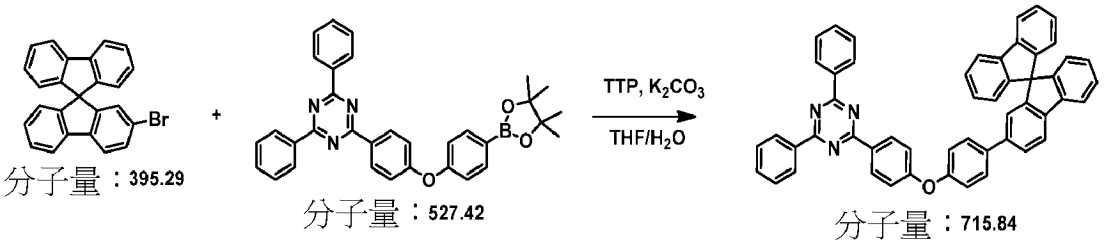


（1）製備化合物 8

【0187】 在氮氣氛圍下，將化合物 8A（7 公克，18 毫莫耳）及化合物 7F（10.2 公克，19 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（7.3 公克，58 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.6 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 8（7.5 公克，59%）。

<合成實例 9>-製備化合物 9

化合物 9A 化合物 7F （化合物 9）



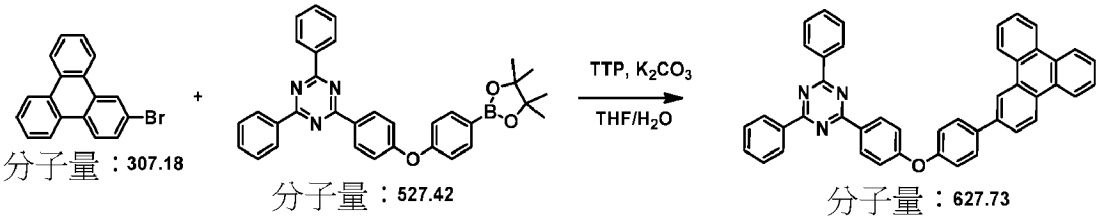
分子量：395.29 分子量：527.42 分子量：715.84

（1）製備化合物 9

【0188】 在氮氣氛圍下，將化合物 9A（7 公克，19 毫莫耳）及化合物 7F（10.3 公克，19 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（7.3 公克，53 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.6 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 9（7.2 公克，57%）。

<合成實例 10>-製備化合物 10

化合物 10A 化合物 7F （化合物 10）



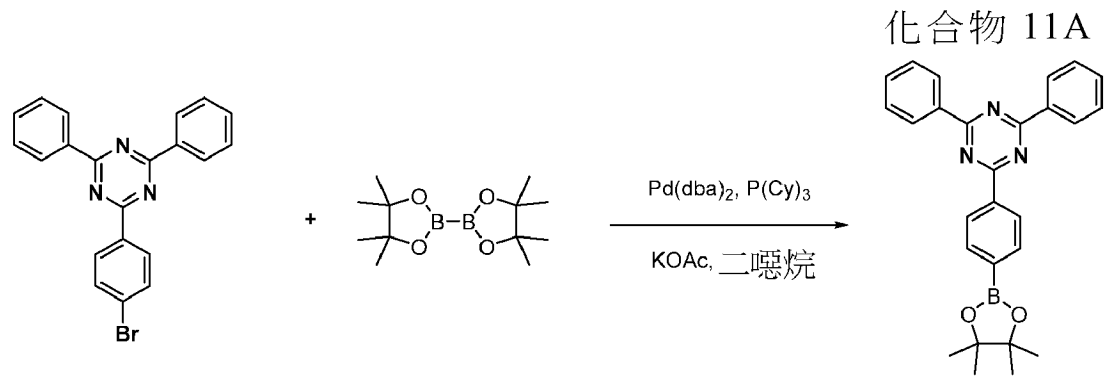
分子量：307.18 分子量：527.42 分子量：627.73

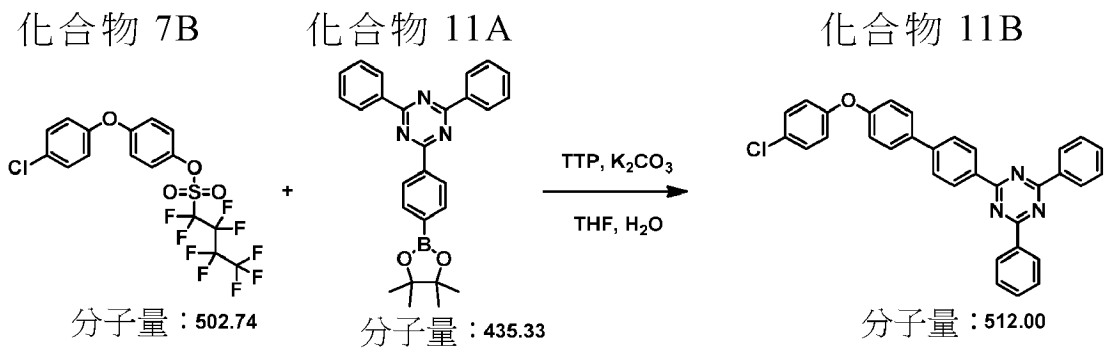
（1）製備化合物 10

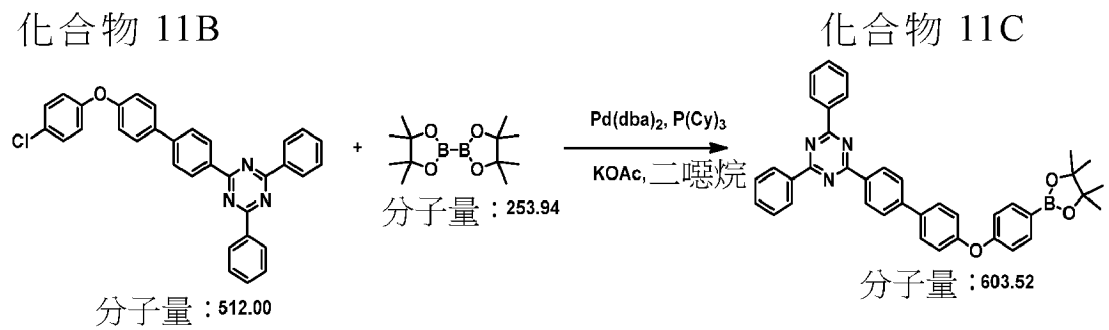
【0189】 在氮氣氛圍下，將化合物 10A（7 公克，23 毫莫耳）及化合物 7F（13.2 公克，26 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（9.4 公克，68 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨

後向其中引入四三苯基膦鈀（0.5 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 10（11.6 公克，81%）。

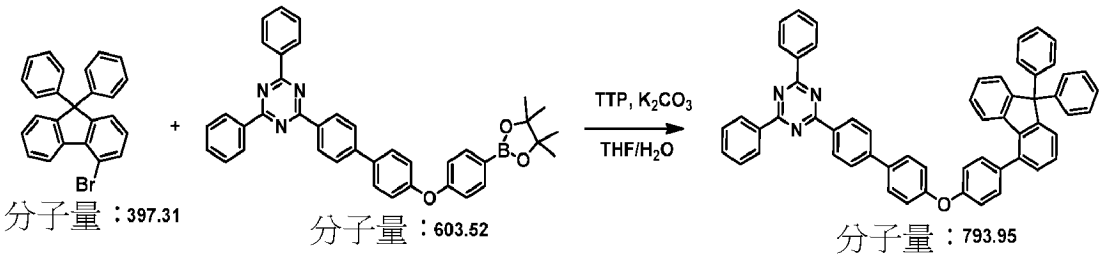
<合成實例 11>-製備化合物 11







化合物 11D 化合物 11C （化合物 11）



分子量：397.31 分子量：603.52 分子量：793.95

（1）製備化合物 11A

【0190】 在氮氣氛圍下混合 2-(4-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（20.0 公克，51.51 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（14.4 公克，56.66 毫莫耳）及乙酸鉀（15.2 公克，154.53 毫莫耳），將所得混合物添加至 300 毫升二噁烷中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（0.9 公克，1.55 毫莫耳）及三環己基膦（0.9 公克，1.55 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 4 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用乙醇進行再結晶以製備化合物 11A（20.0 公克，90%）。

（2）製備化合物 11B

【0191】 在氮氣氛圍下，將化合物 7B（21 公克，42 毫莫耳）及化合物 11A（20 公克，46 毫莫耳）置於 300 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（17.3 公克，125 毫莫耳）溶解於 100 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（1.4 公克，1 毫莫耳）。在反應 9 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，

隨後乾燥以製備化合物 11B（19.4 公克，77%）。

（3）製備化合物 11C

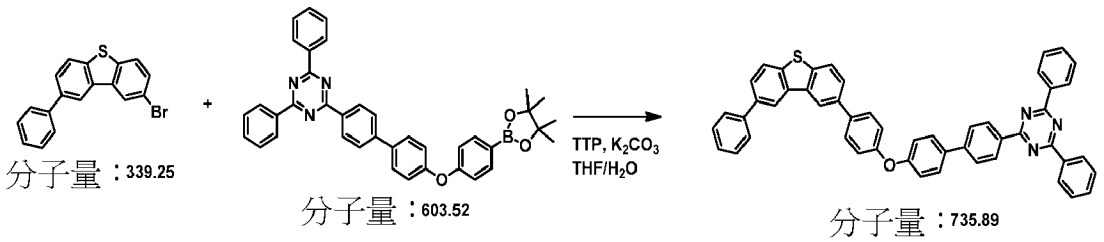
【0192】 在氮氣氛圍下混合化合物 11B（19.4 公克，38 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（10.6 公克，42 毫莫耳）及乙酸鉀（11.2 公克，114 毫莫耳），將所得混合物添加至 200 毫升四氫呋喃中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（0.7 公克，1 毫莫耳）及三環己基膦（0.7 毫克，2 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 12 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用乙醇進行再結晶以製備化合物 11C（20.8 公克，91%）。

（4）製備化合物 11

【0193】 在氮氣氛圍下，將化合物 11D（7 公克，18 毫莫耳）及化合物 11C（10.2 公克，19 毫莫耳）置於 200 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（7.3 公克，53 毫莫耳）溶解於 100 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.6 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 5 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 11（6.9 公克，49%）。

<合成實例 12>-製備化合物 12

化合物 12A 化合物 11C （化合物 12）



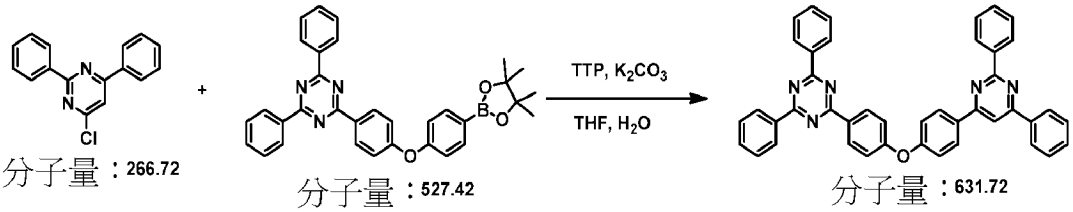
分子量：339.25 分子量：603.52 分子量：735.89

（1）製備化合物 12

【0194】 在氮氣氛圍下，將化合物 12A（10 公克，29 毫莫耳）及化合物 11C（19.6 公克，32 毫莫耳）置於 200 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（12.2 公克，88 毫莫耳）溶解於 60 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（1 公克，0.9 毫莫耳）。在反應 7 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 12（7.3 公克，37%）。

<合成實例 13>-製備化合物 13

化合物 13A 化合物 7F （化合物 13）



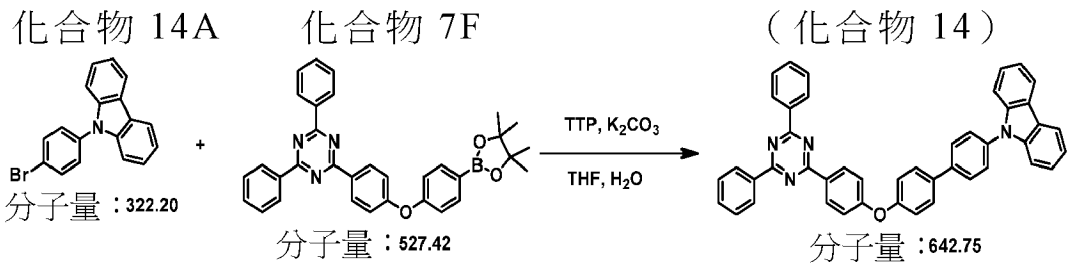
分子量：266.72 分子量：527.42 分子量：631.72

（1）製備化合物 13

【0195】 在氮氣氛圍下，將化合物 13A（7 公克，20 毫莫耳）及化合物 7F（10.3 公克，20 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（8.1 公克，59 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨

後向其中引入四三苯基膦鈀（0.7 公克，0.6 毫莫耳）。在反應 19 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 13（9.4 公克，71%）。

<合成實例 14>-製備化合物 14

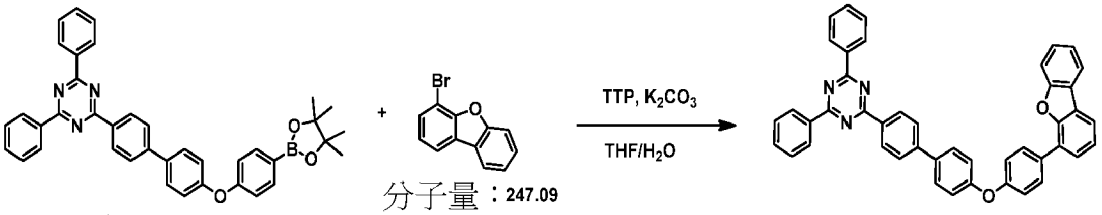


（1）製備化合物 14

【0196】 在氮氣氛圍下，將化合物 14A（7 公克，27 毫莫耳）及化合物 7F（15 公克，28 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（11.2 公克，81 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.9 公克，0.8 毫莫耳）。在反應 9 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 14（8.5 公克，54%）。

<合成實例 15>-製備化合物 15

化合物 11C 化合物 15A （化合物 15）



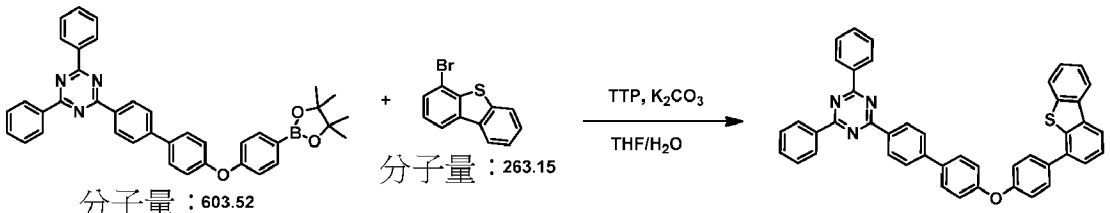
分子量：603.52 分子量：247.09 分子量：643.73

（1）製備化合物 15

【0197】 在氮氣氛圍下，將化合物 15A（4.1 公克，17 毫莫耳）及化合物 11C（10 公克，17 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（6.9 公克，50 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.6 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 11 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 15（5.0 公克，47%）。

<合成實例 16>-製備化合物 16

化合物 11C 化合物 16A （化合物 16）



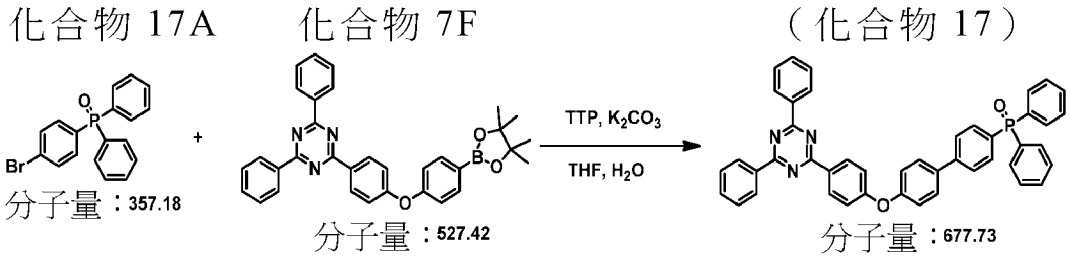
分子量：603.52 分子量：263.15 分子量：659.80

（1）製備化合物 16

【0198】 在氮氣氛圍下，將化合物 16A（4.4 公克，17 毫莫耳）及化合物 11C（10 公克，17 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（6.9 公克，50 毫莫耳）溶

解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.6 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 11 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 16（4.3 公克，39%）。

<合成實例 17>-製備化合物 17

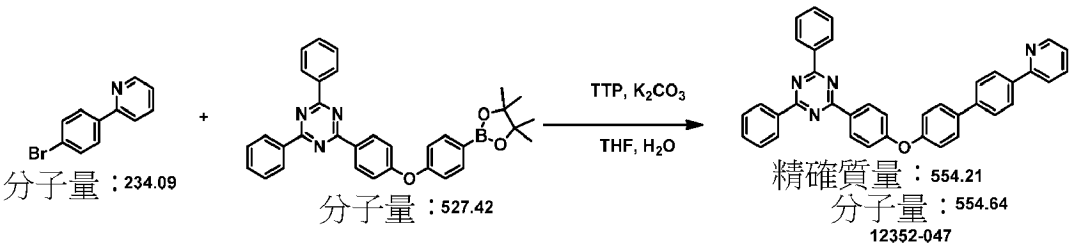


（1）製備化合物 17

【0199】 在氮氣氛圍下，將化合物 17A（5.4 公克，15 毫莫耳）及化合物 7F（8 公克，15 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（6.3 公克，45 毫莫耳）溶解於 20 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.5 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 17（6.3 公克，61%）。

<合成實例 18>-製備化合物 18

化合物 18A 化合物 7F （化合物 18）

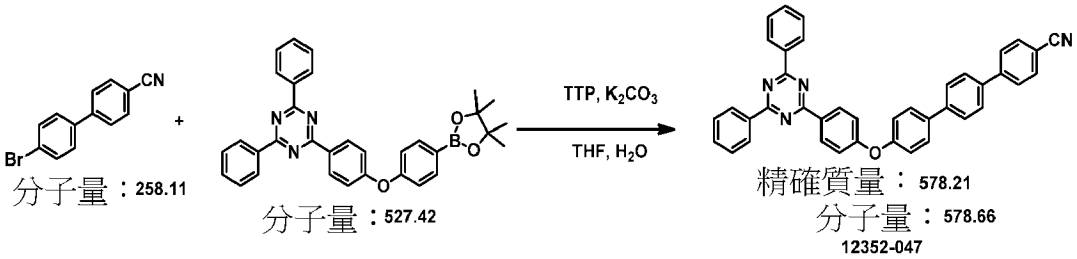


（1）製備化合物 18

【0200】 在氮氣氛圍下，將化合物 18A（6.0 公克，26 毫莫耳）及化合物 7F（14.2 公克，27 毫莫耳）置於 200 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（10.6 公克，77 毫莫耳）溶解於 50 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.9 公克，0.8 毫莫耳）。在反應 18 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 18（9.4 公克，66%）。

<合成實例 19>-製備化合物 19

化合物 19A 化合物 7F （化合物 19）

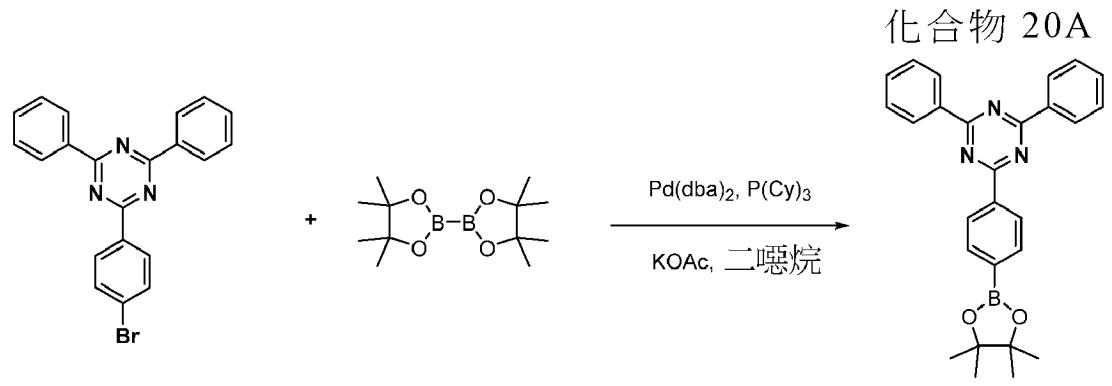


（1）製備化合物 19

【0201】 在氮氣氛圍下，將化合物 19A（7.0 公克，27 毫莫耳）及化合物 7F（15 公克，28 毫莫耳）置於 200 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（11.2 公克，82 毫莫耳）溶

解於 50 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.9 公克，0.8 毫莫耳）。在反應 18 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備化合物 19（8.0 公克，51%）。

<合成實例 20>-製備由比較實例 1 表示之化合物



（1）製備化合物 20A

【0202】 在氮氣氛圍下混合 2-(4-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（20.0 公克，51.51 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（14.4 公克，56.66 毫莫耳）及乙酸鉀（15.2 公克，154.53 毫莫耳），將所得混合物添加至 300 毫升二噁烷中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（0.9 公克，1.55 毫莫耳）及三環己基膦（0.9 公克，1.55 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 4 小時。在

反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用乙醇進行再結晶以製備化合物 20A（20.0 公克，90%）。

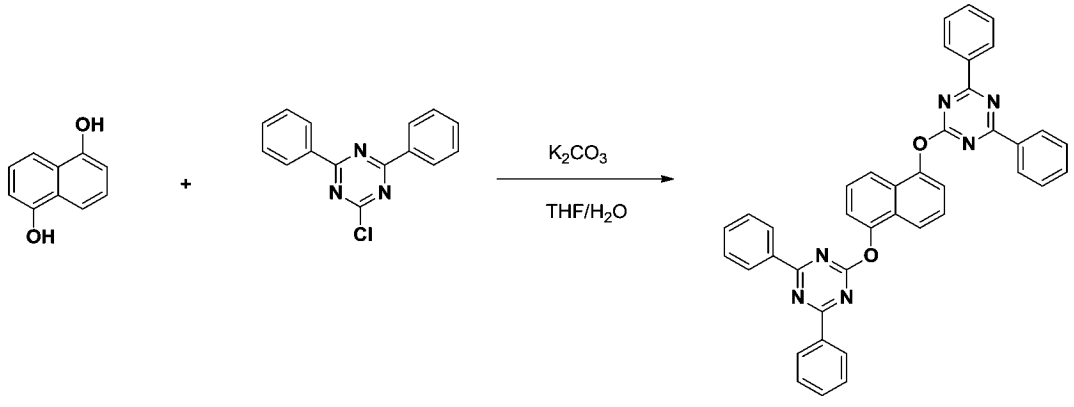
（2）製備由比較實例 1 表示之化合物

【0203】 在氮氣氛圍下，將化合物 20A（20.0 公克，47.38 毫莫耳）及 2-(4-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（17.8 公克，45.84 毫莫耳）置於 300 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（38.0 公克，275.07 毫莫耳）溶解於 100 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（3.2 公克，2.75 毫莫耳）。在反應 12 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備由比較實例 1 表示之化合物（15.6 公克，55%）。

MS: [M+H]+ = 616

<合成實例 21>-製備由比較實例 2 表示之化合物

（比較實例 2）



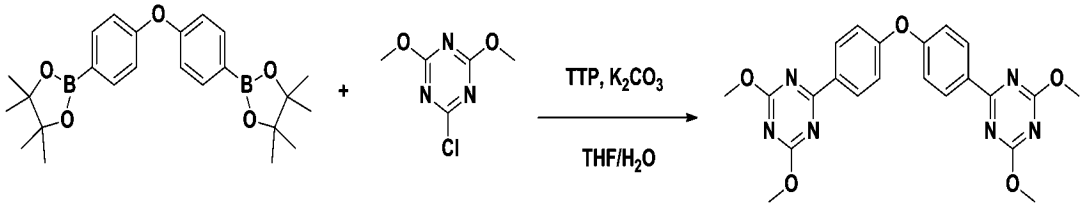
【0204】 在氮氣氛圍下，將萘-1,5-二醇（5.0 公克，31.22 毫莫耳）

及 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（18.3 公克，68.68 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（18.4 公克，187.30 毫莫耳）溶解於 50 毫升水中，隨後向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，且在反應 4 小時後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備由比較實例 2 表示之化合物（11.9 公克，61%）。

MS: [M+H]+ = 621

<合成實例 22>-製備由化合物 3 表示之化合物

化合物 1A （比較實例 3）

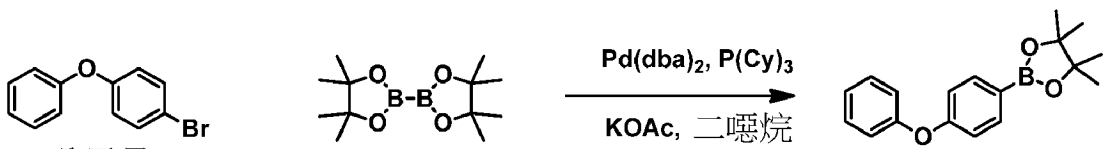


【0205】 除使用 2-氯-4,6-二甲氧基-1,3,5-三嗪替代 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪以外，由比較實例 3 表示之化合物（17.0 公克，產率 74%）以與製備合成實例 1 中之化合物 1 相同之方式製備。

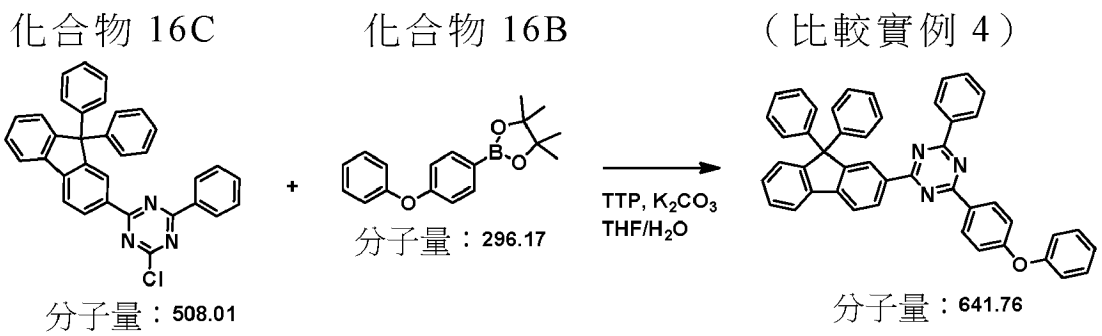
MS: [M+H]+ = 484

<合成實例 23>-製備由比較實例 4 表示之化合物

化合物 16A 化合物 16B



分子量：249.10 分子量：253.94 分子量：296.17



（1）製備化合物 16B

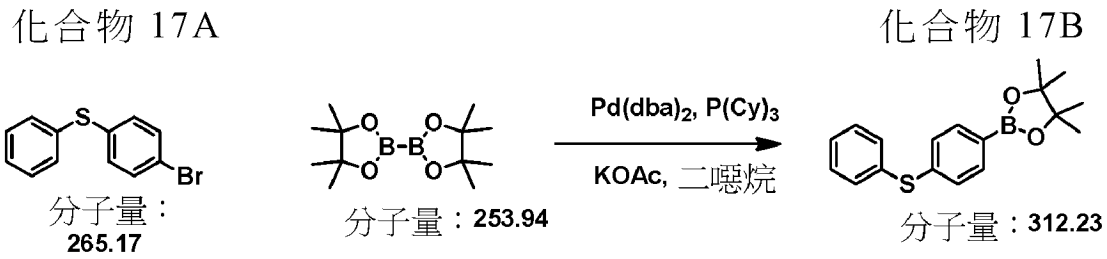
【0206】 在氮氣氛圍下混合 1-溴-4-苯氧基苯（10.0 公克，40 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（11.2 公克，44 毫莫耳）及乙酸鉀（11.8 公克，120 毫莫耳），將所得混合物添加至 100 毫升二噁烷中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（0.7 公克，1 毫莫耳）及三環己基膦（0.7 毫克，2 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 12 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用乙醇進行再結晶以製備化合物 16B（5.8 公克，49%）。

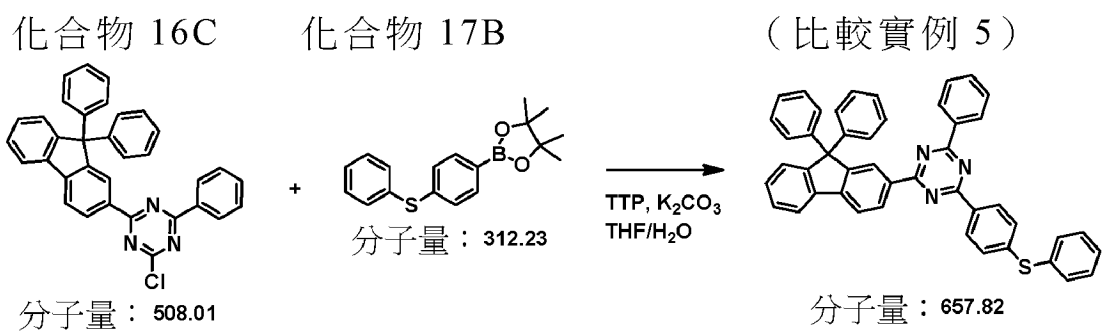
（2）製備比較實例 4

【0207】 在氮氣氛圍下，將化合物 16C（9 公克，18 毫莫耳）及化合物 16B（5.8 公克，19 毫莫耳）置於 100 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（7.3 公克，53 毫莫耳）溶解於 30 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.6 公克，0.5 毫莫耳）。在反應 7 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，

隨後乾燥以製備比較實例 4（9.6 公克，84%）。

<合成實例 24>-製備由比較實例 5 表示之化合物





（1）製備化合物 17B

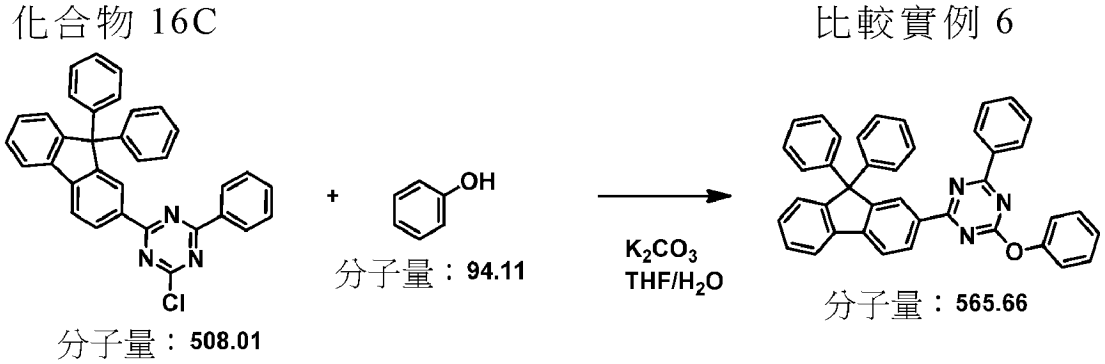
【0208】 在氮氣氛圍下混合(4-溴苯基)(苯基)硫肟（10.0 公克，37 毫莫耳）、雙(頻哪醇根基)二硼（10.5 公克，42 毫莫耳）及乙酸鉀（11.1 公克，113 毫莫耳），將所得混合物添加至 100 毫升二噁烷中且在攪拌之同時加熱。在回流下將雙(二苯亞甲基丙酮)鈀（0.7 公克，1 毫莫耳）及三環己基膦（0.7 毫克，2 毫莫耳）置於混合物中，加熱所得混合物且攪拌 12 小時。在反應終止之後，降低混合物之溫度至常溫，隨後過濾混合物。將水倒入濾液中，用氯仿進行萃取且經無水硫酸鎂乾燥有機層。在減壓下蒸餾之後，用乙醇進行再結晶以製備化合物 17B（6.5 公克，55%）。

（2）製備比較實例 5

【0209】 在氮氣氛圍下，將化合物 16C（12.5 公克，25 毫莫耳）及化合物 17B（8.5 公克，27 毫莫耳）置於 150 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（10.2 公克，74 毫莫耳）

溶解於 50 毫升水中，向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，隨後向其中引入四三苯基膦鈀（0.9 公克，0.7 毫莫耳）。在反應 11 小時之後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備比較實例 5（11.2 公克，71%）。

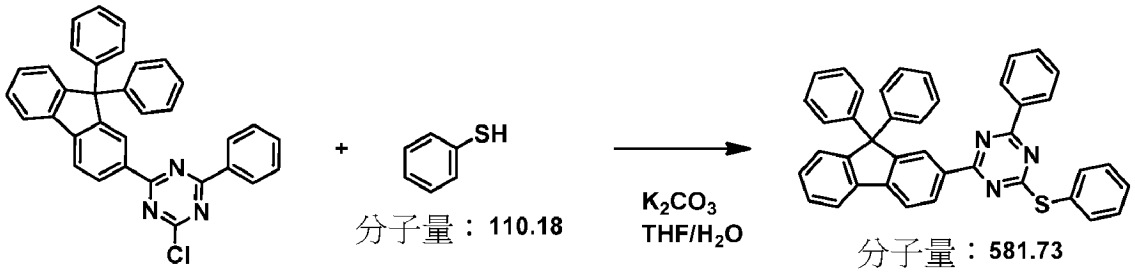
<合成實例 25>-製備由比較實例 6 表示之化合物



【0210】 在氮氣氛圍下，將化合物 16C（15 公克，30 毫莫耳）及溴酚（4.2 公克，44 毫莫耳）置於 150 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（12.2 公克，59 毫莫耳）溶解於 60 毫升水中，隨後向其中引入所得溶液，充分攪拌所得混合物，且在反應 11 小時後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備比較實例 6（12.8 公克，77%）。

<合成實例 26>-製備由比較實例 7 表示之化合物

化合物 16C 比較實例 7



分子量：508.01 分子量：110.18 分子量：581.73

【0211】 在氮氣氛圍下，將化合物 16C（15 公克，30 毫莫耳）及硫醇（4.9 公克，44 毫莫耳）置於 150 毫升四氫呋喃中，攪拌所得混合物且回流。之後，將碳酸鉀（12.2 公克，59 毫莫耳）溶解於 60 毫升水中，隨後向其中引入所得溶液，且在反應 11 小時後，降低混合物之溫度至常溫且過濾混合物。用氯仿及水萃取經過濾之物質，隨後藉由使用硫酸鎂乾燥有機層。之後，在減壓下蒸餾有機層，隨後藉由使用乙酸乙酯再結晶。過濾所產生之固體，隨後乾燥以製備比較實例 7（10.3 公克，60%）。

<實例>

<實例 1>

【0212】 將具有 1,000 埃厚度之氧化銦錫（indium tin oxide；ITO）薄塗層之玻璃基板（康寧（Corning）7059 玻璃）置於溶有分散劑之蒸餾水中，且進行超音波洗滌。使用由費歇爾公司（Fischer Co.）製造之產品作為清潔劑，且將使用由密理博公司（Millipore Co.）製造之過濾器過濾兩次之蒸餾水用作蒸餾水。ITO 經洗滌 30 分鐘之後，使用蒸餾水重複進行超音波洗滌兩次，持續 10 分鐘。在使用蒸餾水洗滌完成之後，使用異丙醇、丙酮及甲醇溶劑以此順序進行超音波洗滌，隨後進行乾燥。

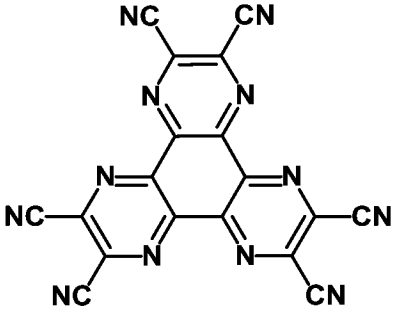
【0213】 使己腈六氮雜聯伸三苯熱真空沈積於如上述方法製備之

透明 ITO 電極上以具有 500 埃之厚度，從而形成電洞注入層。在電洞注入層上真空沈積作為傳輸電洞之材料的 HT1（400 埃），隨後真空沈積具有 300 埃厚度的主體 H1 及摻雜劑 D1 化合物作為發光層。在發光層上以 1:1 的重量比真空沈積製備實例 1 中所製備之化合物 1 及 LiQ（喹啉鋰），從而形成具有 350 埃厚度的電子注入及傳輸層。在電子注入及傳輸層上依序沈積氟化鋰（LiF）及鋁以分別具有 12 埃及 2,000 埃之厚度，從而形成負電極。有機發光裝置因此而被製造出。

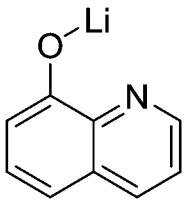
【0214】 在前述程序中，有機材料之沈積速率維持在 0.4 埃/秒至 0.7 埃/秒，負電極之氟化鋰及鋁之沈積速率分別維持在 0.3 埃/秒及 2 埃/秒，且沈積期間之真空度維持在 2×10^{-7} 托至 5×10^{-6} 托，從而製造有機發光裝置。

【0215】 已腈六氮雜聯伸三苯、LiQ、HT1 及 D1 各自之結構如下。

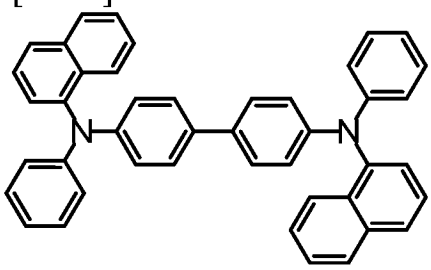
[腈六氮雜聯伸三苯]



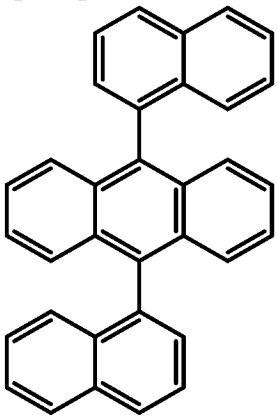
[LiQ]



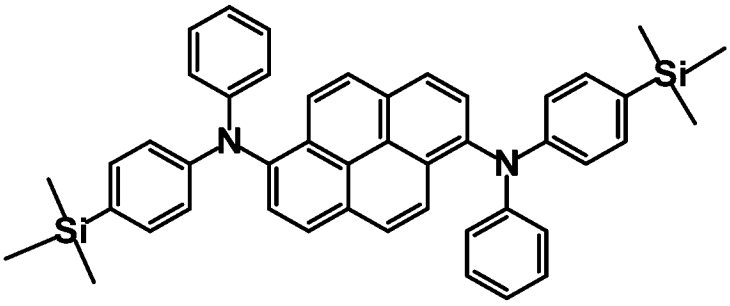
[HT1]



[H1]



[D1]



<實例 2>

【0216】 除使用化合物 2 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 3>

【0217】 除使用化合物 3 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 4>

【0218】 除使用化合物 4 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 5>

【0219】 除使用化合物 5 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 6>

【0220】 除使用化合物 6 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 7>

【0221】 除使用化合物 7 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 8>

【0222】 除使用化合物 8 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 9>

【0223】 除使用化合物 9 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 10>

【0224】 除使用化合物 10 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 11>

【0225】 除使用化合物 11 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 12>

【0226】 除使用化合物 12 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 13>

【0227】 除使用化合物 13 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 14>

【0228】 除使用化合物 14 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 15>

【0229】 除使用化合物 15 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 16>

【0230】 除使用化合物 16 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 17>

【0231】 除使用化合物 17 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 18>

【0232】 除使用化合物 18 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<實例 19>

【0233】 除使用化合物 19 替代化合物 1 作為電子傳輸層以外，以與實例 1 相同之方式進行實驗。

<比較實例 1>

【0234】 除使用比較實例 1 中之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

<比較實例 2>

【0235】 除使用比較實例 2 中之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

<比較實例 3>

【0236】 除使用比較實例 3 中之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

<比較實例 4>

【0237】 除使用比較實例 4 中之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

<比較實例 5>

【0238】 除使用比較實例 5 中之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

<比較實例 6>

【0239】 除使用比較實例 6 中之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

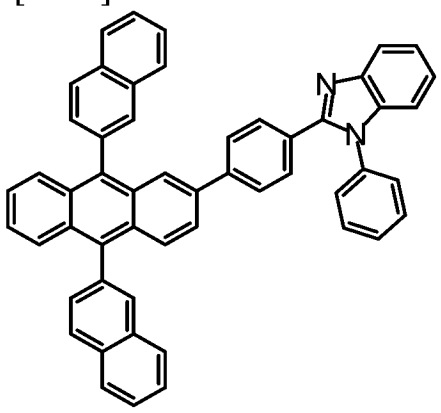
<比較實例 7>

【0240】 除使用比較實例 7 中之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

<比較實例 8>

【0241】 除使用以下 ET1 之化合物替代實驗實例 1 中之化合物 1 以外，以與實驗實例 1 相同之方式製造有機發光裝置。

[ET1]



【0242】 對於藉由如實例 1 至實例 19 及比較實例 1 至比較實例 8

中使用各化合物作為電子傳輸層材料製造的有機發光裝置，在 10 毫安/平方公分之電流密度下量測驅動電壓及發光效率，且在 20 毫安/平方公分之電流密度下量測與初始亮度相比達到 98%值之時間（LT98）。結果展示於以下表 1 中。

[表 1]

分類	化合物（電子傳輸層）	電壓（伏特）	電流效率（坎德拉/安）	色彩座標（x, y）	20 毫安/平方公分下之 LT98
實例 1	化合物 1	3.50	6.88	(0.133,0.135)	111
實例 2	化合物 2	3.61	6.51	(0.133,0.137)	120
實例 3	化合物 3	3.66	6.48	(0.134,0.133)	125
實例 4	化合物 4	3.55	7.08	(0.132,0.133)	115
實例 5	化合物 5	3.66	6.38	(0.135,0.128)	133
實例 6	化合物 6	3.42	7.05	(0.133,0.135)	100
實例 7	化合物 7	4.71	6.30	(0.133,0.133)	70
實例 8	化合物 8	4.37	6.68	(0.133,0.133)	130
實例 9	化合物 9	4.63	6.57	(0.133,0.133)	110
實例 10	化合物 10	4.35	6.50	(0.133,0.133)	130
實例 11	化合物 11	4.37	6.28	(0.133,0.133)	140
實例 12	化合物 12	4.35	6.10	(0.133,0.133)	220
實例 13	化合物 13	3.60	7.46	(0.133,0.133)	110
實例 14	化合物 14	4.10	7.16	(0.133,0.133)	150
實例 15	化合物 15	4.07	6.96	(0.133,0.133)	130
實例 16	化合物 16	3.97	7.05	(0.133,0.133)	170
實例 17	化合物 17	4.88	5.27	(0.133,0.133)	260
實例 18	化合物 18	4.32	7.1	(0.133,0.133)	155
實例 19	化合物 19	4.34	5.86	(0.133,0.133)	190
比較實例 1	比較實例 1	4.01	4.99	(0.134,0.133)	85
比較實例 2	比較實例 2	3.60	7.08	(0.137,0.126)	12
比較實例 3	比較實例 3	3.61	7.00	(0.137,0.128)	5
比較實例 4	比較實例 4	4.12	5.11	(0.135,0.129)	3
比較實例 5	比較實例 5	4.18	5.03	(0.138,0.131)	2
比較實例 6	比較實例 6	4.99	1.21	(0.135,0.133)	7
比較實例 7	比較實例 7	5.08	2.88	(0.138,0.134)	10
比較實例 8	ET1	3.98	5.77	(0.136,0.126)	80

【0243】 如由表 1 可見，當將藉由使用本發明化合物作為電子傳輸層材料製造之有機發光裝置與比較實例比較時，其效率及穩定性方面展現優良特徵。

【符號說明】

【0244】

1：基板

2：正電極

3：發光層

4：負電極

5：電洞注入層

6：電洞傳輸層

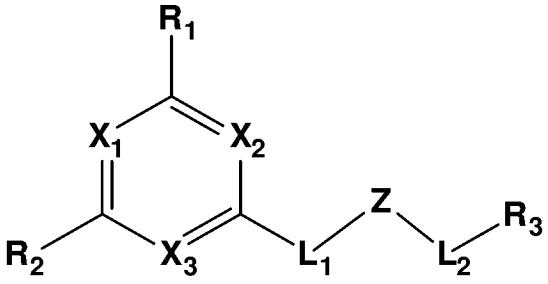
7：電子傳輸層

8：電子注入層

【發明申請專利範圍】

【第1項】 一種由以下化學式 1 表示之化合物，

[化學式 1]



在化學式 1 中，

X_1 至 X_3 中之至少一者為 N，且所述 X_1 至 X_3 中之至少一者的其他者彼此相同或不同並各獨立地為 N 或 CR，

R 為氫；氘；鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之芳基或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的雜芳基，

Z 為 O、S、Se 或 Te，

L_1 為含有單個芳族環的經取代或未經取代之伸芳基；或含有單個芳族環的經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的伸雜芳基，

L_2 為含有單個芳族環的經取代或未經取代之伸芳基；或含有單個芳族環的經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的伸雜芳基，

R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且各獨立地為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的雜芳基，且

R_3 為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之矽烷基；經取

代或未經取代之硼基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之芳基；經取代或未經取代之烷基芳基；經取代或未經取代之芳基膦基；經取代或未經取代之膦氧化物基團；經取代或未經取代之胺基；經取代或未經取代之烷胺基；經取代或未經取代之芳胺基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的雜芳基，

其中「經取代或未經取代」意謂經一個或兩個或多於兩個由以下基團組成之族群中選出的取代基取代：氘；鹵基；氰基；腈基；硝基；醯胺基；胺基；矽烷基；硼基；羥基；羰基；烷基；環烷基；烯基；烷氧基；芳氧基；烷基硫醇基；芳基硫醇基；芳基；芳烷基；芳烯基；烷基芳基；雜芳基；胺基；烷胺基；芳烷胺基；雜芳胺基；芳胺基；磷醯基；芳基膦基；膦氧化物基團；或包含 N、O、S、Se 及 Si 原子中之一或多者的雜芳基，或者經與上述取代基中之兩個或多於兩個取代基連接的取代基取代或無取代基。

【第2項】 如申請專利範圍第 1 項所述之由化學式 1 表示之化合物，其中 L_1 為經取代或未經取代之伸苯基。

【第3項】 如申請專利範圍第 1 項所述之由化學式 1 表示之化合物，其中 L_2 為經取代或未經取代之伸苯基。

【第4項】 如申請專利範圍第 1 項所述之由化學式 1 表示之化合物，其中 R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之聯三苯基、經取代或未經取代之萘基、經取代或未經取代之蒽基或經取代或未經取代之芴基。

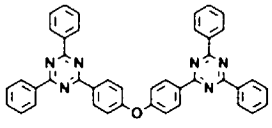
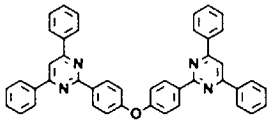
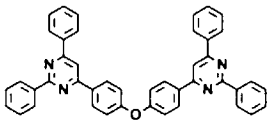
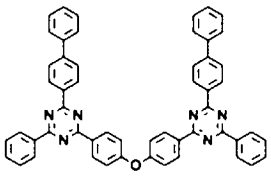
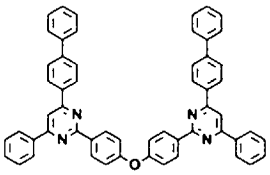
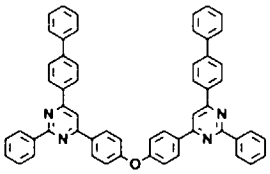
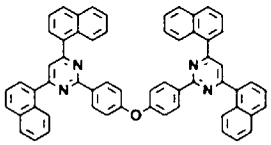
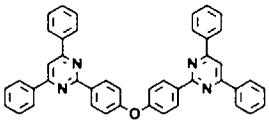
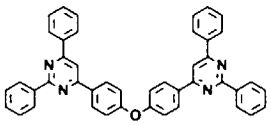
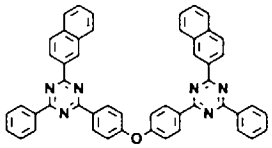
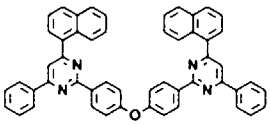
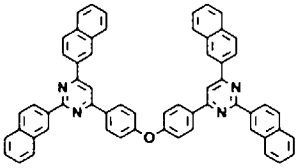
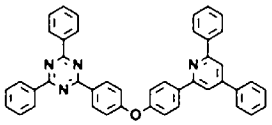
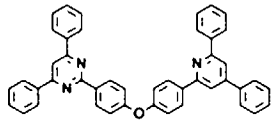
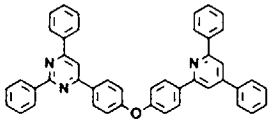
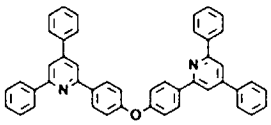
【第5項】 如申請專利範圍第 1 項所述之由化學式 1 表示之化合

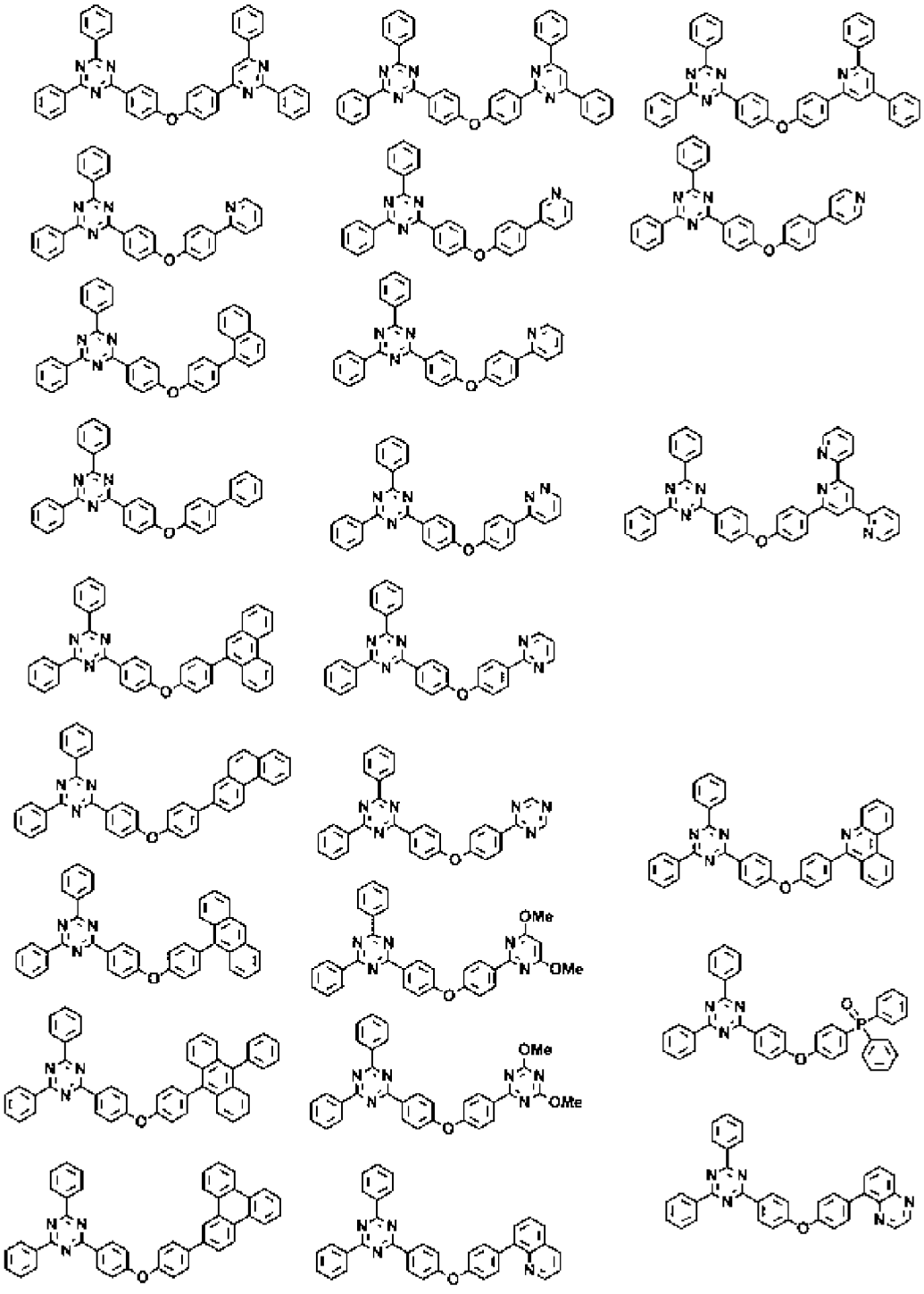
物，其中 R_3 為經取代或未經取代之吡啶基、經取代或未經取代之嘧啶基、經取代或未經取代之三嗪基、經取代或未經取代之吖啶基、經取代或未經取代之喹啉基或經取代或未經取代之喹唑啉基。

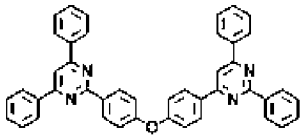
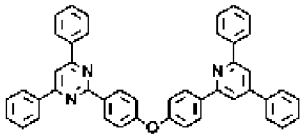
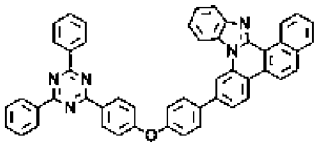
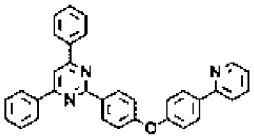
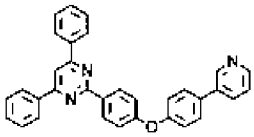
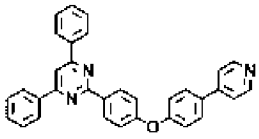
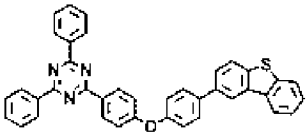
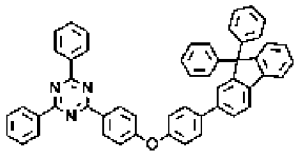
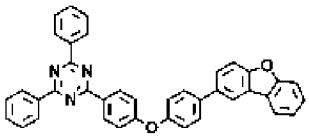
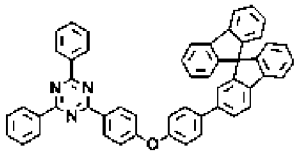
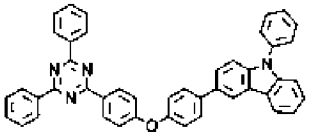
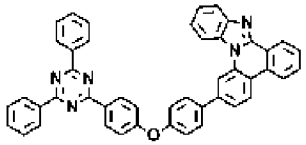
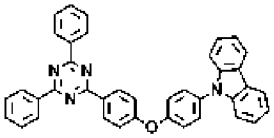
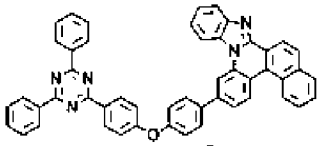
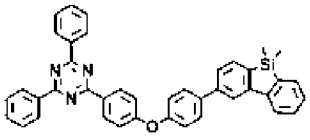
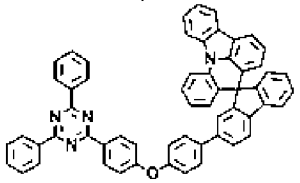
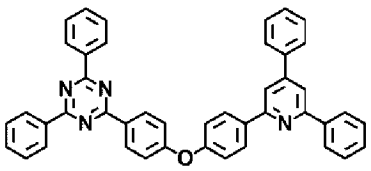
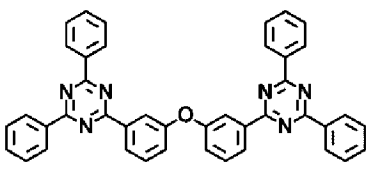
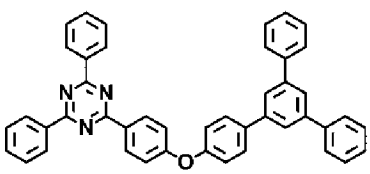
【第6項】 如申請專利範圍第 1 項所述之由化學式 1 表示之化合物，其中 R_3 為經取代或未經取代之咔唑基、經取代或未經取代之噻吩基、經取代或未經取代之呋喃基、經取代或未經取代之苯并咔唑基、經取代或未經取代之苯并噻吩基、經取代或未經取代之苯并呋喃基、經取代或未經取代之二苯并咔唑基、經取代或未經取代之二苯并噻吩基或經取代或未經取代之二苯并呋喃基。

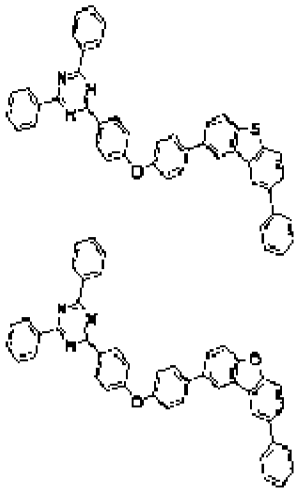
【第7項】 如申請專利範圍第 1 項所述之由化學式 1 表示之化合物，其中 R_3 為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之聯三苯基、經取代或未經取代之萘基、經取代或未經取代之蒽基、經取代或未經取代之菲基、經取代或未經取代之三苯基、經取代或未經取代之芘基、經取代或未經取代之䓛基或經取代或未經取代之茀基。

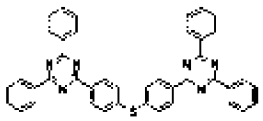
【第8項】 如申請專利範圍第 1 項所述之由化學式 1 表示之化合物，其中所述由化學式 1 表示之化合物為由以下結構式中選出的任一者：

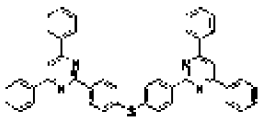

















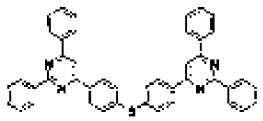


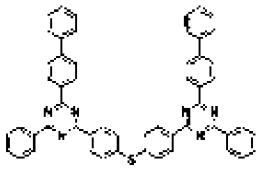




















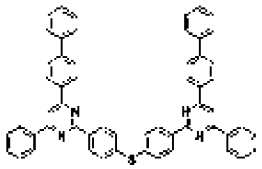


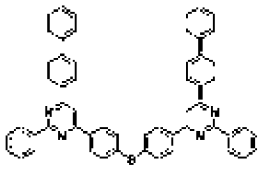


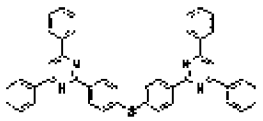


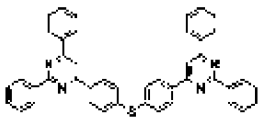


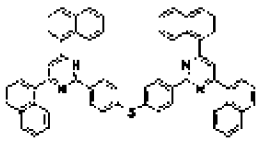


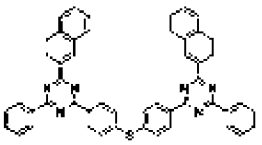


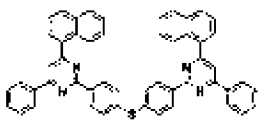


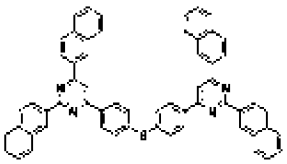


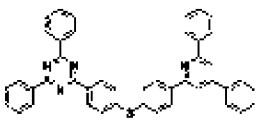


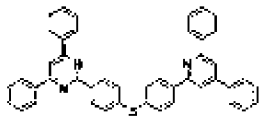




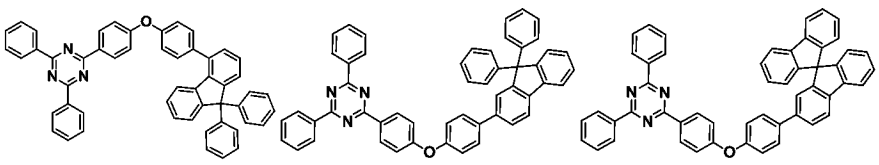


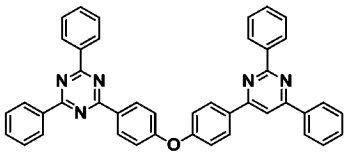


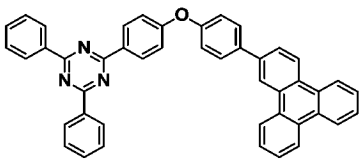








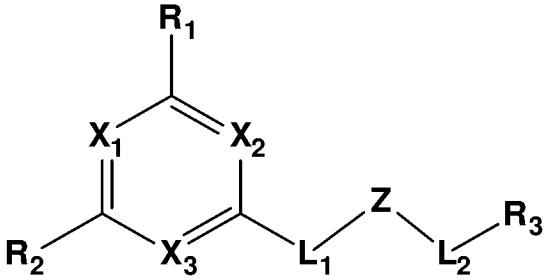




。

【第9項】 一種由以下化學式 1 表示之化合物，

[化學式 1]



在化學式 1 中，

X_1 至 X_3 中之至少一者為 N，且所述 X_1 至 X_3 中之至少一者的其他者彼此相同或不同並各獨立地為 N 或 CR，

R 為氫；氘；鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之芳基或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的雜芳基，

Z 為 O、S、Se 或 Te，

L_1 為經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的伸雜芳基，

L_2 為經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的伸雜芳基，

R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且各獨立地為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中

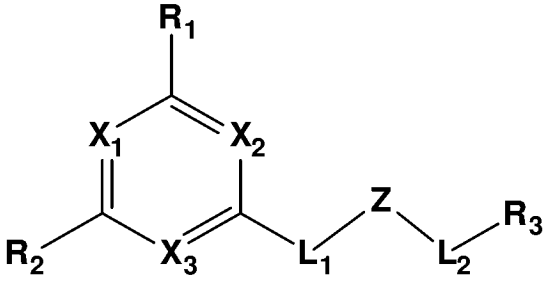
之一或多者的雜芳基，且

R_3 為經取代或未經取代之咔唑基、經取代或未經取代之噻吩基、經取代或未經取代之呋喃基、經取代或未經取代之苯并咔唑基、經取代或未經取代之苯并噻吩基、經取代或未經取代之苯并呋喃基、經取代或未經取代之二苯并咔唑基、經取代或未經取代之二苯并噻吩基或經取代或未經取代之二苯并呋喃基，

其中「經取代或未經取代」意謂經一個或兩個或多於兩個由以下基團組成之族群中選出的取代基取代：氘；鹵基；氰基；腈基；硝基；醯胺基；胺基；矽烷基；硼基；羥基；羰基；烷基；環烷基；烯基；烷氧基；芳氧基；烷基硫醇基；芳基硫醇基；芳基；芳烷基；芳烯基；烷基芳基；雜芳基；胺基；烷胺基；芳烷胺基；雜芳胺基；芳胺基；磷醯基；芳基膦基；膦氧化物基團；或包含 N、O、S、Se 及 Si 原子中之一或多者的雜芳基，或者經與上述取代基中之兩個或多於兩個取代基連接的取代基取代或無取代基。

【第10項】 一種由以下化學式 1 表示之化合物，

[化學式 1]



在化學式 1 中，

X_1 至 X_3 中之至少一者為 N，且所述 X_1 至 X_3 中之至少一者的其他者彼此相同或不同並各獨立地為 N 或 CR，

R 為氫；氘；鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之芳基或

經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的雜芳基，

Z 為 O、S、Se 或 Te，

L_1 為經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的伸雜芳基，

L_2 為經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的伸雜芳基，

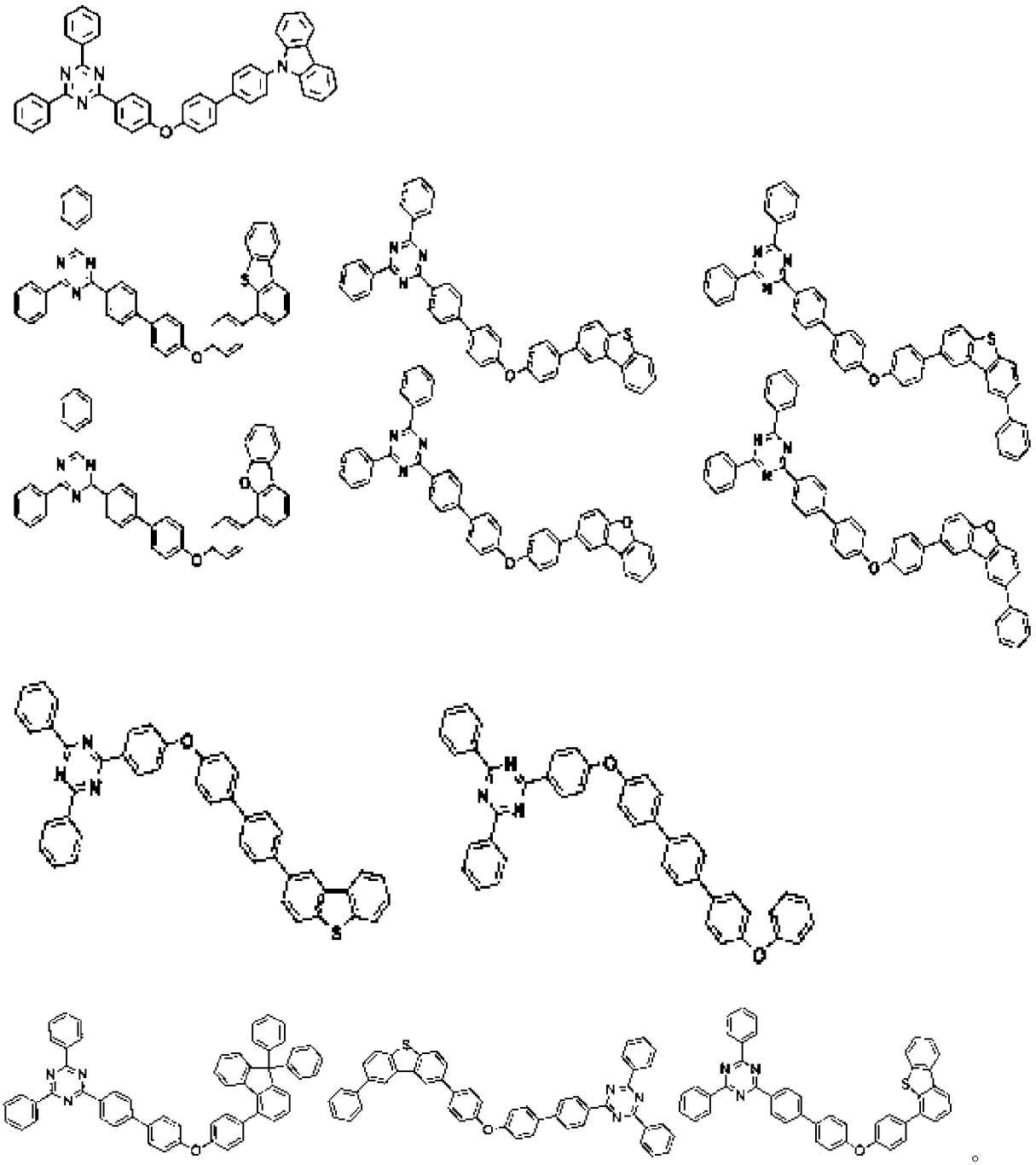
R_1 與 R_2 彼此相同或不同，且各獨立地為鹵基；氰基；硝基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之包含 N、O 及 S 原子中之一或多者的雜芳基，且

R_3 為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之聯三苯基、經取代或未經取代之萘基、經取代或未經取代之蒽基、經取代或未經取代之菲基、經取代或未經取代之三苯基、經取代或未經取代之芘基、經取代或未經取代之茀基或經取代或未經取代之苐基，

其中「經取代或未經取代」意謂經一個或兩個或多於兩個由以下基團組成之族群中選出的取代基取代：氘；鹵基；氰基；腈基；硝基；醯胺基；胺基；矽烷基；硼基；羥基；羰基；烷基；環烷基；烯基；烷氧基；芳氧基；烷基硫醇基；芳基硫醇基；芳基；芳烷基；芳烯基；烷基芳基；雜芳基；胺基；烷胺基；芳烷胺基；雜芳胺基；芳胺基；磷醯基；芳基膦基；膦氧化物基團；或包含 N、O、S、Se 及 Si 原子中之一或多者的雜芳基，或者經與上述取代基中之兩個或多於兩個取代基連接的取代基取代或無取代基。

【第11項】 如申請專利範圍第 9 項或第 10 項所述之由化學式 1

表示之化合物，其中所述由化學式 1 表示之化合物為由以下結構式中選出的任一者：



【第12項】 一種有機電子裝置，其含有：

第一電極；

第二電極，經設置以面向所述第一電極；以及

一或多個有機材料層，設置於所述第一電極與所述第二電極

之間，

其中所述一或多個有機材料層中的一或多個層含有如申請專利範圍第 1 項至第 11 項中任一項所述之由化學式 1 表示之化合物。

【第13項】 如申請專利範圍第 12 項所述之有機電子裝置，其中含有所述由化學式 1 表示之化合物之所述一或多個有機材料層為電洞注入層、電洞傳輸層或電洞注入及傳輸層。

【第14項】 如申請專利範圍第 12 項所述之有機電子裝置，其中含有所述由化學式 1 表示之化合物之所述一或多個有機材料層為電子注入層、電子傳輸層或電子注入及傳輸層。

【第15項】 如申請專利範圍第 12 項所述之有機電子裝置，其中含有所述由化學式 1 表示之化合物之所述一或多個有機材料層為發光層。

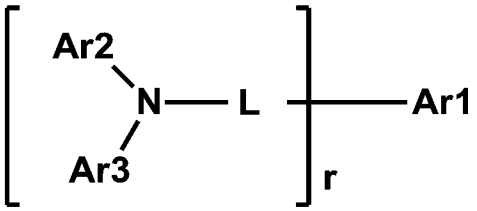
【第16項】 如申請專利範圍第 12 項所述之有機電子裝置，更含有：

一個或兩個或多於兩個由電子傳輸層、電子注入層、電子阻斷層及電洞阻斷層組成之族群中選出的層。

【第17項】 如申請專利範圍第 12 項所述之有機電子裝置，其中所述有機電子裝置由有機發光裝置、有機磷光裝置、有機太陽能電池、有機光導體（OPC）及有機電晶體組成之族群中選出。

【第18項】 如申請專利範圍第 12 項所述之有機電子裝置，其中所述一或多個有機材料層含有發光層，且所述發光層含有由以下化學式 A 表示之化合物：

[化學式 A]



在化學式 A 中，

Ar1 為經取代或未經取代之單價或多價苯并茀基；經取代或未經取代之單價或多價丙二烯合茀基；經取代或未經取代之單價或多價茚基；或經取代或未經取代之單價或多價茞基，

L 為直接鍵；經取代或未經取代之伸芳基；或經取代或未經取代之伸雜芳基，

Ar2 與 Ar3 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之芳基；經取代或未經取代之矽烷基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之芳烷基；或經取代或未經取代之雜芳基，或視情況彼此組合以形成經取代或未經取代之環，

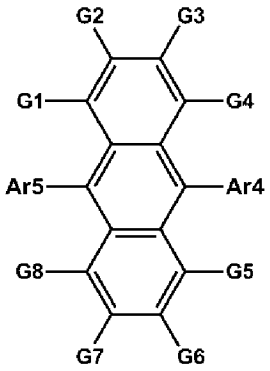
r 為 1 或大於 1 之整數，且

當 r 為 2 或大於 2 時，括弧中之取代基彼此相同或不同。

【第19項】 如申請專利範圍第 18 項所述之有機電子裝置，其中 L 為直接鍵，Ar1 為經取代或未經取代之二價茚基，Ar2 與 Ar3 彼此相同或不同且各獨立地為未經取代或經矽烷基取代的芳基，其中所述矽烷基經烷基取代，並且 r 為 2。

【第20項】 如申請專利範圍第 12 項所述之有機電子裝置，其中所述有機材料層含有發光層，且所述發光層含有由以下化學式 B 表示之化合物：

[化學式 B]



在化學式 B 中，

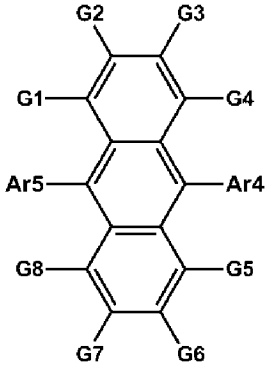
Ar4 與 Ar5 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之單環芳基；或經取代或未經取代之多環芳基，且

G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；經取代或未經取代之單環芳基；或經取代或未經取代之多環芳基。

【第21項】 如申請專利範圍第 20 項所述之有機電子裝置，其中 Ar4 及 Ar5 為 2-萘基，且 G1 至 G8 為氫。

【第22項】 如申請專利範圍第 18 項所述之有機電子裝置，其中所述發光層更含有由以下化學式 B 表示之化合物：

[化學式 B]



在化學式 B 中，

Ar4 與 Ar5 彼此相同或不同，且各獨立地為經取代或未經取代之單環芳基；或經取代或未經取代之多環芳基，且

G1 至 G8 彼此相同或不同，且各獨立地為氫；經取代或未經

取代之單環芳基；或經取代或未經取代之多環芳基。