



(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 I480267 B

(45)公告日：中華民國 104 (2015) 年 04 月 11 日

(21)申請案號：099121238

(22)申請日：中華民國 99 (2010) 年 06 月 29 日

(51)Int. Cl. : C07D235/18 (2006.01)

C07D403/12 (2006.01)

C07D263/57 (2006.01)

C07D277/66 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30)優先權：2009/06/29 美國

61/221,472

(71)申請人：日東電工股份有限公司 (日本) NITTO DENKO CORPORATION (JP)

日本

(72)發明人：鄭世俊 ZHENG, SHIJUN (CN)；凱椰斯 傑森 CAYAS, JENSEN (US)；李昇 LI, SHENG (US)；望月天音 MOCHIZUKI, AMANE (JP)；蔡絃植 CHAE, HYUNSIK (KR)；哈汀 布瑞特 T HARDING, BRETT T. (US)

(74)代理人：詹銘文；葉璟宗

(56)參考文獻：

TW 200922926A

EP 0499222A1

Ziyi Ge et al., "Spin-Coated Highly Efficient Phosphorescent Organic Light-Emitting Diodes Based on Bipolar Triphenylamine-Benzimidazole Derivatives", Adv. Funct. Mater. 2008. Vol 18, pages 584-590.

審查人員：陳依微

申請專利範圍項數：23 項 圖式數：10 共 84 頁

(54)名稱

發光性芳基雜芳基化合物

EMISSIVE ARYL-HETEROARYL COMPOUNDS

(57)摘要

本文揭露式 1 表示之化合物，其中 R^1 、 Ar^1 、 X 、 Ar^2 、 Ar^3 及 Het 如本文所述。亦揭露與所述化合物相關之組成物及發光裝置。

$$R^1 - Ar^1 - X - Ar^2 - Ar^3 - Het \text{ (式 1)}$$

Disclosed herein are compounds represented by Formula 1, wherein R^1 , Ar^1 , X , Ar^2 , Ar^3 , and Het are described herein. Compositions and light-emitting devices related thereto are also disclosed.

$$R^1 - Ar^1 - X - Ar^2 - Ar^3 - Het \text{ (Formula 1)}$$



圖 1



公告本

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：99121238

C07D 23 5/18 (2006.01)

※申請日：99.6.29

※IPC 分類：C07D 403/12 (2006.01)

一、發明名稱：

C07D 263/57 (2006.01)

C07D 277/66 (2006.01)

發光性芳基雜芳基化合物

C09K 11/06 (2006.01)

EMISSIVE ARYL-HETEROARYL COMPOUNDS

H01L 51/50 (2006.01)

二、中文發明摘要：

本文揭露式 1 表示之化合物，其中 R^1 、 Ar^1 、 X 、 Ar^2 、 Ar^3 及 Het 如本文所述。亦揭露與所述化合物相關之組成物及發光裝置。

$R^1-Ar^1-X-Ar^2-Ar^3-Het$ (式 1)

三、英文發明摘要：

Disclosed herein are compounds represented by Formula 1, wherein R^1 , Ar^1 , X , Ar^2 , Ar^3 , and Het are described herein. Compositions and light-emitting devices related thereto are also disclosed.

$R^1-Ar^1-X-Ar^2-Ar^3-Het$ (Formula 1)

四、指定代表圖：

(一) 本案之指定代表圖：圖 1

(二) 本代表圖之元件符號簡單說明：

無

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：



六、發明說明：

【相關申請案的交叉引用】

本申請案主張 2009 年 6 月 29 日申請的臨時申請案第 61/221,472 號的權益，該案全文以引用的方式併入本文中。

【發明所屬之技術領域】

本發明是關於發光化合物及組成物，以及包含所述發光化合物或組成物之發光裝置。

【先前技術】

有機發光裝置已經針對平板顯示器被廣泛開發，並正迅速擴展到固態照明（solid state lighting，SSL）應用。有機發光二極體（Organic Light Emitting Diode，OLED）包括陰極、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層及陽極。OLED 裝置發光是有機（發光）層內部正電荷（電洞）與負電荷（電子）複合（recombination）引起的結果。電洞與電子在單一分子或小分子簇內組合，產生激子，其為處於激發態的分子，或在激發態結合在一起的有機分子族群。當有機分子釋放出所需能量並恢復其穩定狀態時，產生光子。視輻射過程的性質而定，發射光子的有機材料可稱為電致螢光材料（electro-fluorescent material）或電致磷光材料（electro-phosphorescent material）。因此，OLED 發光化合物可以根據其吸收初輻射並發射具所需波長的輻射的能力來選擇。舉例而言，對於藍光發射器，在 440 奈米至 490

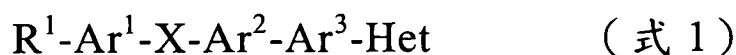
奈米之基本發射頻帶內發光可能是合乎需要的。

SSL 應用可能需要白光 OLED 裝置以使亮度超過 1,500 流明 (lm)、顯色指數 (color rendering index, CDI) 超過 70 及在 100 流明/瓦(lm/w)下的操作時間超過 100,000 小時。有許多利用 OLED 產生白光的方法，而兩種常用的方法為：使用橫向模式 (lateral patterning) 或垂直堆疊 (vertical stacking) 的三個發射器，直接組合紅光、藍光和綠光；以及部分下轉換 (partial down conversion) 藍光與黃色磷光體組合。若採用高效的化學穩定性及光穩定性藍色染料，則這兩種常用方法都可更為有效。然而，藍光發射器的穩定性不如發射其它顏色的染料。此外，只有極少數的藍光發射裝置顯示出低於 0.2 的 CIE y 值，同時仍具有可觀的效率。因此，需要開發出穩定性良好及發光效率較高的深藍色發射器，以有效降低功率消耗，並發射不同顏色。

【發明內容】

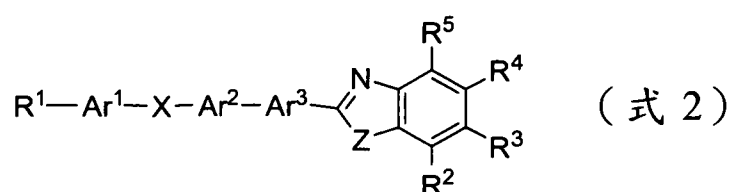
一些實施例提供適用於電子裝置（諸如使用可吸收或發射深藍色光的化合物的裝置）中的化合物。一些實施例提供包括一連串 2、3 或 4 個芳環的化合物，這些芳環可直接連接或間雜 1 或 2 個氧原子。

一些實施例提供式 1 表示的化合物：



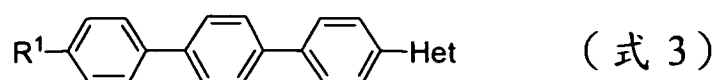
其中 R^1 是在氧原子處連接的 $C_{1-10}O_{1-4}$ 醚或 $-R^7-NR^8R^9$ ；其中 R^7 是單鍵、選擇性經取代之 C_{6-10} 芳氧基或選擇性經取代之 C_{6-10} 芳基；且 R^8 及 R^9 獨立地為選擇性經取代之 C_{6-10} 芳基，其中 R^8 與 R^9 選擇性鍵聯在一起形成包括氮 (N) 的第三環； Ar^1 及 Ar^2 獨立地為選擇性經取代之芳基；X 是 O 或單鍵； Ar^3 是選擇性經取代之芳基；或 Ar^3 是單鍵；且 Het 是選擇性經取代之雜芳基，包含 C_{6-10} 雜芳基，諸如選擇性經取代之苯並噁唑基、選擇性經取代之苯並噻唑基或選擇性經取代之苯並咪唑基。

一些實施例提供式 2 表示的化合物：



其中 R^1 、 Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 及 X 與關於式 1 所述相同；Z 獨立地為 NR^6 、O 或 S，其中 R^6 是選擇性經取代之苯基、選擇性經取代之 $-CH_2-$ 苯基或選擇性經取代之 (4-鹵苯基) 甲基；且 R^2 、 R^3 、 R^4 及 R^5 獨立地為 H、選擇性經取代之 C_{6-30} 芳基、 C_{1-10} 烷基或 C_{1-10} 烷氧基。

一些實施例提供式 3 表示的化合物：



其中 R^1 及 Het 與關於式 1 所述相同。

這些化合物可用於發光或吸收光（諸如在電磁頻譜的深藍色區中的光）的裝置中。舉例而言，一些實施例提供一種包括本文所揭露的化合物的發光裝置。

一些實施例提供一種將電位差（electric potential difference）轉換成光的方法，其包括將包括本文所述化合物之組成物暴露於電位差，由此產生光。一些實施例是關於將電位差轉換成光的裝置。這些裝置可藉由將包括本文所述化合物之組成物暴露於電位差，由此產生光，來工作。

一些實施例提供一種將光轉換成電位差的方法，其包括將包括本文所述化合物之組成物暴露於光，由此產生電位差。一些實施例是關於將光轉換成電位差的裝置。這些裝置可藉由將包括本文所述化合物之組成物暴露於光，由此產生電位差，來工作。

一些實施例提供一種發光裝置，其包括發光層，所述發光層包括本文所揭露的化合物。

這些和其它實施例將於下文進行更為詳細的描述。

【實施方式】

除非另作指示，否則當諸如烷基或芳基等化學結構特徵稱為「選擇性經取代」時，意謂所述特徵可能不具有取代基（即，未經取代）或可能具有一或多個取代基。「經取代」的特徵具有一或多個取代基。術語「取代基」具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，取

代基是鹵素，或具有 1 至 20 個碳原子、1 至 10 個碳原子，或者分子量小於約 500、約 300 或約 200。在一些實施例中，取代基具有至少一個碳原子或至少一個雜原子，且具有約 0 至 10 個碳原子及約 0 至 5 個獨立地選自 N、O、S、F、Cl、Br、I 及其組合之雜原子。在一些實施例中，各取代基由約 0 至 20 個碳原子、約 0-47 個氫原子、約 0-5 個氧原子、約 0-2 個硫原子、約 0-3 個氮原子、約 0 至 1 個矽原子、約 0 至 7 個氟原子、約 0 至 3 個氯原子、約 0 至 3 個溴原子及約 0 至 3 個碘原子組成。實例包含(但不限於)烷基、烯基、炔基、呋唑基、環烷基、環烯基、環炔基、芳基、二芳基胺基、雜芳基、雜脂環基、芳烷基、雜芳烷基、(雜脂環基)烷基、羥基、經保護羥基、烷氧基、芳氧基、醯基、酯、巰基、烷硫基、芳硫基、氰基、鹵素、羰基、硫羰基、O-胺甲醯基、N-胺甲醯基、O-硫代胺甲醯基、N-硫代胺甲醯基、C-醯胺基、N-醯胺基、S-磺醯胺基、N-磺醯胺基、C-羧基、經保護 C-羧基、O-羧基、異氰酸酯基(isocyanato)、硫氰基(thiocyanato)、異硫氰基(isothiocyanato)、硝基、矽烷基、次磺醯基(sulfenyl)、亞磺醯基、磺醯基、鹵烷基、鹵烷氧基、三鹵甲烷磺醯基、三鹵甲烷磺醯胺基及胺基，包含單取代及二取代之胺基，及其經保護衍生物。

術語「供電子取代基(electron-donating substituent)」具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，供電子取代基是鹵素，或具有約 1 至 20 個碳原子、約

1 至 10 個碳原子，或者分子量小於約 500、約 300 或約 200。在一些實施例中，供電子取代基具有至少一個碳原子或至少一個雜原子，且具有約 0 至 10 個碳原子及約 0 至 5 個獨立地選自 N、O、S 及其組合之雜原子。在一些實施例中，供電子取代基相對於其所連接之苯環是電子供體 (electron donor)。供電子取代基之一些實例可包含 (但不限於)：烷基、烯基、炔基、環烷基、環烯基、環炔基、芳基、雜芳基、雜脂環基、芳烷基、雜芳烷基、(雜脂環基)烷基、羥基、經保護羥基、烷氧基、芳氧基、O-酯、巰基、烷硫基、芳硫基、O-胺甲醯基、N-胺甲醯基、O-硫代胺甲醯基、N-硫代胺甲醯基、N-醯胺基、O-羧基、矽烷基及胺基。

術語「拉電子取代基 (electron-withdrawing substituent)」具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，拉電子取代基是鹵素，或具有約 1 至 20 個碳原子、約 1 至 10 個碳原子，或者分子量小於約 500、約 300 或約 200。在一些實施例中，拉電子取代基具有至少一個碳原子或至少一個雜原子，且具有約 0 至 10 個碳原子及約 0 至 5 個獨立地選自 N、O、S、F、Cl 及其組合之雜原子。在一些實施例中，拉電子取代基相對於其所連接之苯環是拉電子體 (electron withdrawing)。拉電子取代基之一些實例可包含 (但不限於)：醯基、C-酯、氰基、F、Cl、羰基、C-醯胺基、硫羰基、C-羧基、經保護 C-羧基、異氰酸酯基、硫氰基、異硫氰基、硝基、亞磺醯基、磺醯基、全氟烷基、三鹵甲烷磺醯基及三鹵甲烷磺醯胺基。

本文使用的術語「芳基」是指芳香環或環系統。例示性非限制性芳基為苯基、萘基等。「C_{x-y} 芳基」是指環或環系統具有 x 至 y 個碳原子之芳基。所指示的環或環系統的碳原子數不包含或不限制連接於所述環或環系統之任何取代基的碳原子數。實例包含（但不限於）選擇性經取代之苯基、選擇性經取代之萘基、選擇性經取代之蒽基、選擇性經取代之對-內伸苯基（*p*-interphenylene）、選擇性經取代之 1,4-內伸萘基（1,4-internaphthylene）及選擇性經取代之 9,10-內伸蒽基（9,10-interanthracenylene）。下文將顯示這些取代基的未經取代形式。然而，任何未連接至該分子剩餘部分的碳均可選擇性具有取代基。

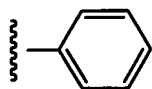
術語「雜芳基」是指在環或環系統中具有一或多個雜原子之「芳基」。「C_{x-y} 雜芳基」是指環或環系統具有 x 至 y 個碳原子之雜芳基。所指示的環或環系統的碳原子數不包含或不限制連接於所述環或環系統之任何取代基的碳原子數。「雜芳基」的實例可包含（但不限於）吡啶基、呋喃基、噻吩基、噁唑基、噻唑基、咪唑基、吡咯基、喹啉基、苯並呋喃基、苯並噻吩基、苯並噁唑基、苯並噻唑基、苯並咪唑基等。

本文使用的術語「二芳基胺基」是指包括氮原子連接至分子（例如 Ar¹）剩餘部分的部分，且所述氮原子亦直接連接至兩個選擇性經取代之芳基，術語芳基如上文所述。本文使用的「C_{x-y} 二芳基胺基」是指兩個芳環的碳原子總數在 x 至 y 的範圍內。所指示的芳環之碳原子數不包

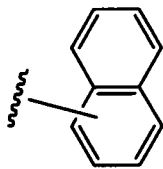
含或不限制連接於所述環或環系統之任何取代基的碳原子數。實例包含（但不限於）二苯基胺（諸如未經取代之二苯基胺或經取代之二苯基胺，例如苯基(甲基苯基)胺、二甲苯基胺）。

本文使用的術語「二芳基胺基苯氧基」是指選擇性經取代之苯氧基部分（即，選擇性經取代之-O-苯基），其中苯基具有選擇性經取代之二芳基胺基取代基。本文使用的「C_{x-y}二芳基胺基苯氧基」是指兩個芳環及苯環中的碳原子總數在 x 至 y 的範圍內。所指示的芳環之碳原子數不包含或不限制連接於所述環或環系統之任何取代基的碳原子數。實例包含（但不限於）對呋唑基苯氧基（諸如未經取代之對呋唑基苯氧基，或經 1、2、3 或 4 個甲基取代基取代的對呋唑基苯氧基等）、對-二苯基胺基苯氧基（諸如未經取代之對-二苯基胺基苯氧基，或經 1、2、3 或 4 個甲基取代基取代的對-二苯基胺基苯氧基等）。

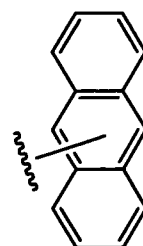
下文將指示本文使用的若干部分之名稱所對應的結構。對於任何所述部分，未連接至分子剩餘部分之任何碳原子，或任何 NH 氮，均可選擇性具有取代基。



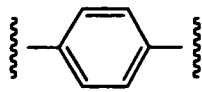
苯基



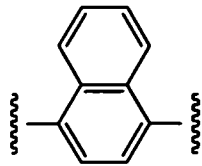
萘基



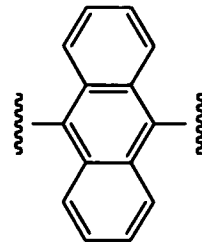
蒽基



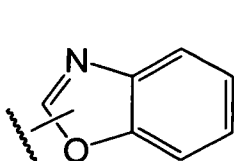
對-內伸苯基



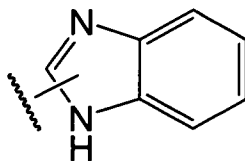
1,4-內伸萘基



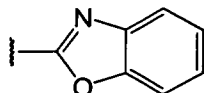
9,10-內伸蒽基



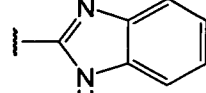
苯並噁唑基



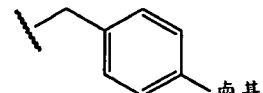
苯並咪唑基



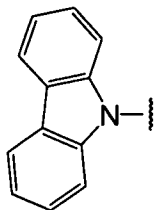
苯並噁唑-2-基



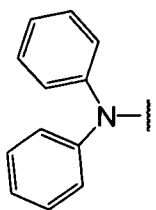
苯並咪唑-2-基



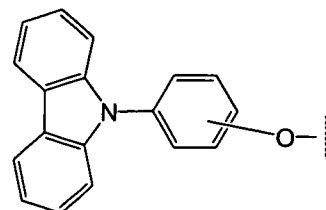
(4-鹵苯基)甲基



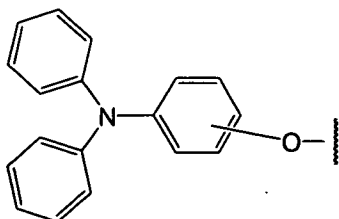
咔唑基



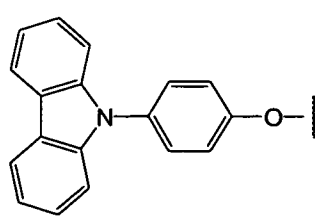
二苯基胺基



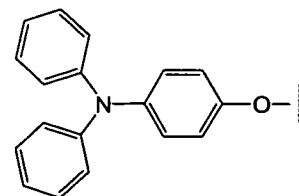
咔唑基苯氧基



二苯基胺基苯氧基



對咔唑基苯氧基



對-二苯基胺基苯氧基

本文使用的術語「烷基」是指包括碳及氫且不含雙鍵或三鍵之部分。烷基可以是線性、分枝、環狀或其組合，且含有 1 至 35 個碳原子。烷基之實例包含（但不限於）甲基、乙基、丙基、異丙基、環丙基、正丁基、異丁基、第三丁基、環丁基、戊基異構體、環戊烷、己基異構體、環

己烷及其類似基團。本文使用的術語「線性烷基」是指 $-(CH_2)_qCH_3$ ，其中 q 是 0 至 34。本文使用的術語「 C_{1-10} 烷基」是指具有 1 至 10 個碳原子之烷基，諸如甲基、乙基、丙基異構體、丁基異構體、環丁基異構體、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體、庚基異構體、環庚基異構體、辛基異構體、環辛基異構體、壬基異構體、環壬基異構體、癸基異構體、環癸基異構體等。術語「伸烷基」是「烷基」的亞類，且是指二價烷基部分，例如 $-CH_2-$ 等。

本文使用之術語「醚」是指包括碳、氫及單鍵氧（即 $-O-$ ）之部分，其限制條件為不存在 $-O-O-$ 。短語「 $C_{1-10}O_{1-4}$ 醚」是指具有 1 至 10 個碳原子及 1 至 4 個氧原子之醚。短語「在氧原子處連接」是指醚部分中連接至結構（例如 Ar^1 ）剩餘部分之原子是氧原子的情形。實例包含烷氧基、聚氧化伸烷基等。本文使用之術語「烷氧基」是指具有式 $-O-$ 烷基之醚。本文使用之術語「 C_{1-10} 烷氧基」是指烷基為上文所述之 C_{1-10} 烷基的烷氧基。術語「聚氧化伸烷基」是指包括 $-(O-伸烷基)-$ 重複單元之醚，例如 $-(OCH_2CH_2)_n-OH$ 或 $-(OCH_2CH_2)_n-OCH_3$ ，其中 n 是 1 至 4。在一些實施例中，在氧原子處連接之醚可選自由以下組成之族群：
 $-O-R^V$ 、 $-O-R^W-O-R^X$ 、 $-O-R^W-O-R^Y-O-R^X$ 或
 $-O-R^W-O-R^Y-O-R^Z-O-R^X$ ，其中 R^V 是 C_{1-10} 烷基， R^W 是 C_{2-10} 烷基， R^Y 是 C_{2-8} 烷基且 R^Z 是 C_{2-6} 烷基，且 R^X 是 H 或 C_{2-8} 烷基，其限制條件為所述醚具有 1、2、3、4、5、6、7、8、

9 或 10 個碳原子。

術語「功函數 (work function)」具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，金屬之「功函數」是指自金屬表面引出電子所需最小能量的量度。

術語「高功函數金屬」具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，「高功函數金屬」是易於注入電洞且通常功函數大於或等於 4.5 之金屬或合金。

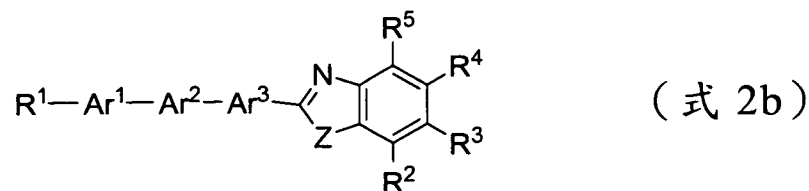
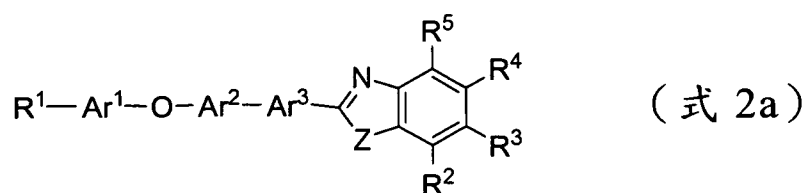
術語「低功函數金屬」具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，「低功函數金屬」是易於失去電子且通常功函數小於 4.3 之金屬或合金。

「發白光 (white light-emitting)」之表述具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，若一種材料發射白色光，則其為發白光的。在一些實施例中，白光是具有近似 CIE 色彩座標($X = 1/3$, $Y = 1/3$)之光。CIE 色彩座標($X = 1/3$, $Y = 1/3$)可以定義為消色點 (achromatic point)。X 及 Y 色彩座標可以是施加至 CIE 原色以匹配色彩的權重。有關這些術語的更為詳細的描述可見於 CIE 1971, 國際照明委員會 (International Commission on Illumination), Colorimetry: Official Recommendations of the International Commission on Illumination, Publication CIE No. 15 (E-1.3.1) 1971, Bureau Central de la CIE, Paris, 1971 以及 F. W. Billmeyer, Jr., M. Saltzman, Principles of Color Technology, 第 2 版, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1981 中，這兩篇文獻都以全文引用之方式併入本文中。顯

色指數 (color rendering index, CRI) 是指顯現各種色彩的能力，且其值的範圍為 0 至 100，其中 100 最佳。

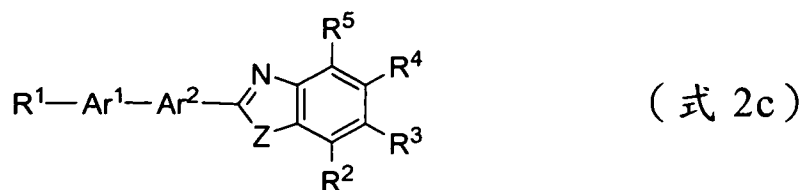
術語「發深藍色光 (deep blue emitting)」具有一般熟習此項技術者已知之一般含義。在一些實施例中，若一種材料發射深藍色光，則其為「發深藍色光」的。深藍色光是具有近似 CIE 色彩座標($X = [0.14]$, $Y = [0.08]$, CIE 1931)之光。

一些實施例提供可用作深藍色光發射器之化合物。式 1 及式 2 代表此類化合物之實例。對於式 1 及式 2，X 可以是 O 或單鍵。因此，一些實施例是關於式 1a、1b、2a 及 2b 中之一表示之化合物。

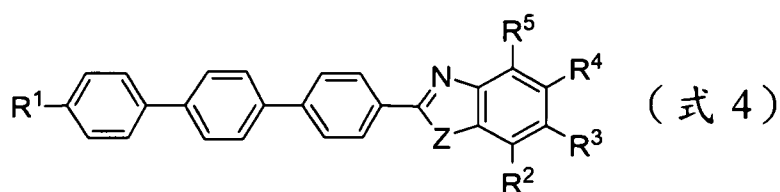


對於式 1、式 1a、式 1b、式 2、式 2a 及式 2b， Ar^3

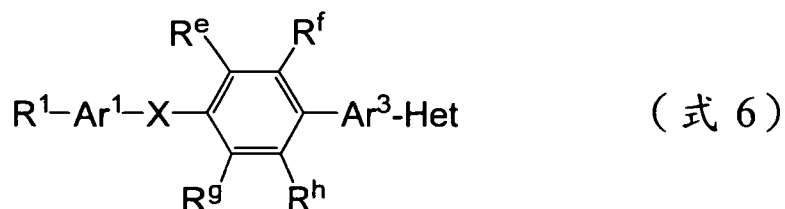
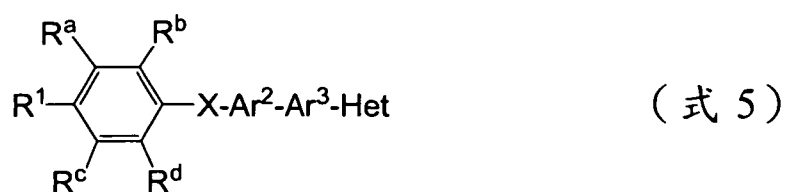
可以是選擇性經取代之 1,4-內伸芳基，或 Ar^3 可以是單鍵。
因此，一些實施例是關於式 1c 及式 2c 表示之化合物。

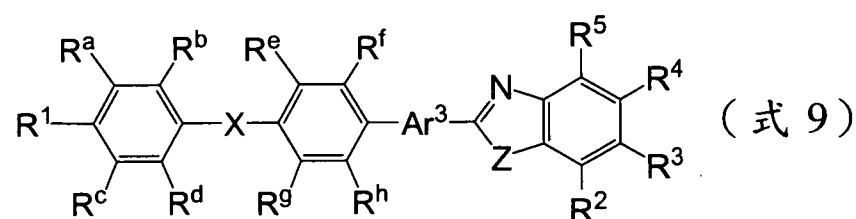
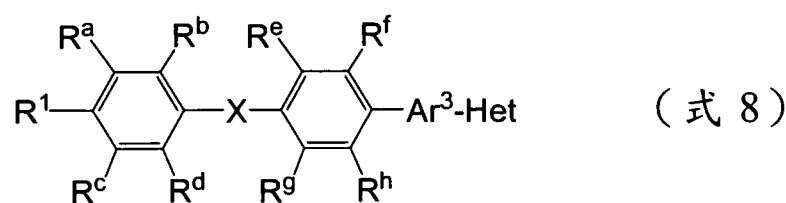
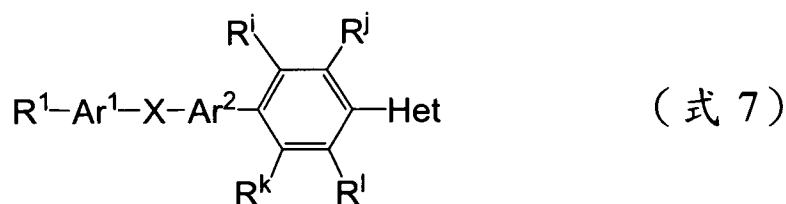


此外，一些實施例是關於式 4 表示之化合物。



一些實施例提供式 5、式 6、式 7、式 8 或式 9 表示之化合物：





對於上述任一相關式，Het 可以是選擇性經取代之雜芳基，諸如選擇性經取代之 C₆₋₁₀ 雜芳基，包含（但不限於）選擇性經取代之苯並噁唑基、選擇性經取代之苯並噻唑基、選擇性經取代之苯並咪唑基、選擇性經取代之苯並噁唑-2-基、選擇性經取代之苯並噻唑-2-基、選擇性經取代之苯並咪唑-2-基等。

對於上述任一相關式，Ar¹ 及 Ar² 可獨立地為選擇性經取代之芳基，且 Ar³ 可獨立地為選擇性經取代之芳基；或 Ar³ 可以是單鍵。Ar¹、Ar²、Ar³（若存在的話）及 Het 獨立地選擇性經取代。舉例而言，在一些實施例中，Ar¹ 可以未經取代，或可具有 1、2、3 或 4 個取代基。在一些實施例中，Ar² 可以未經取代，或可具有 1、2、3 或 4 個取代基。在一些實施例中，Ar³ 可以未經取代，或可具有 1、

2、3 或 4 個取代基。在一些實施例中，Het 可以未經取代，或可具有 1、2、3 或 4 個取代基。

Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 （若存在的話）及 Het 中任一者的部分取代基可包含（但不限於） C_{1-10} 烷基，諸如甲基、乙基、丙基異構體（例如正丙基及異丙基）、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體（例如環丁基、甲基環丙基等）、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體、庚基異構體、環庚基異構體等；烷氧基，諸如 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{OC}_5\text{H}_{11}$ 、 $-\text{OC}_6\text{H}_{13}$ 、 $-\text{OC}_7\text{H}_{15}$ 等；鹵基，諸如 F、Cl、Br、I 等； C_{1-10} 鹵烷基，包含全氟烷基，諸如 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{C}_2\text{F}_5$ 、 $-\text{C}_3\text{F}_7$ 、 $-\text{C}_4\text{F}_9$ 等； C_{1-10} 鹽基，諸如甲鹽基、乙鹽基、苯甲鹽基等；在羰基或氮原子處連接之 C_{1-10} 鹽胺，諸如 $-\text{NCOCH}_3$ 、 $-\text{CONHCH}_2$ 等；在羰基或氧原子處連接之 C_{1-10} 酯，諸如 $-\text{OCOCH}_3$ 、 $-\text{CO}_2\text{CH}_2$ 等；在氮原子或氧原子處連接之 C_{1-10} 胺基甲酸酯；氰基；氰酸酯基；異氰酸酯基；硝基等。

另外，對於上述任一相關式，在一些實施例中，Het 可包括至少一個拉電子取代基。在一些實施例中，拉電子取代基的拉電子能力比氫原子強。實例包含（但不限於）氰基、氰酸酯基、異氰酸酯基、硝基、F、Cl、全氟烷基、鹽基、在羰基處連接之酯或在羰基處連接之鹽胺。

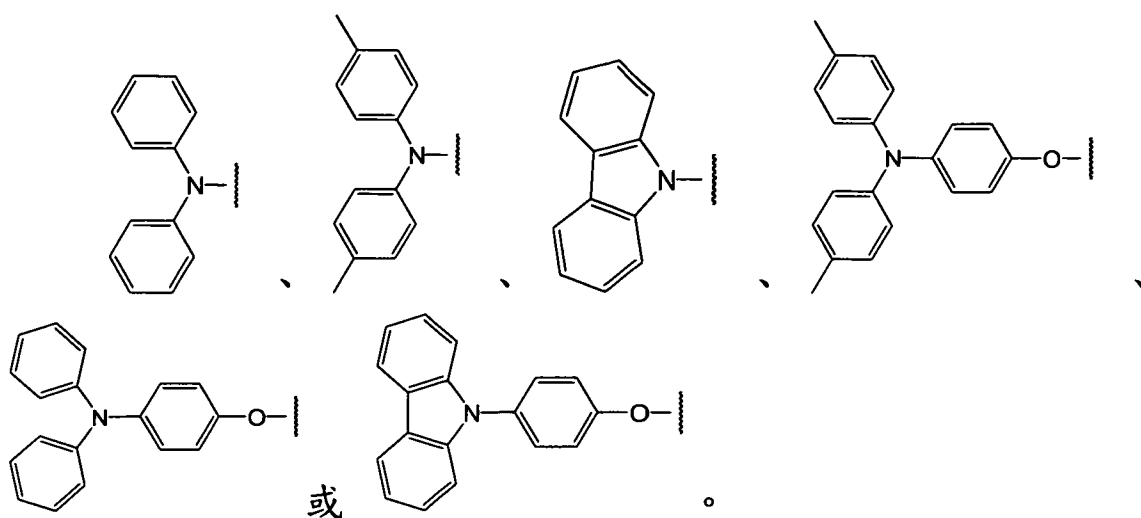
另外，對於上述任一相關式，在一些實施例中， Ar^1 可包括至少一個供電子取代基。在一些實施例中，供電子取代基的供電子能力可比氫原子強。實例包含（但不限於）

烷基；在氧原子處連接之醚，諸如烷氧基、芳氧基或聚氧化伸烷基；胺基（例如 $-\text{NR}'\text{R}''$ ，其中 R' 及 R'' 獨立地為 H 或烷基）；羥基等。

另外，對於上述任一相關式， R^1 是在氧原子處連接之 $\text{C}_{1-10}\text{O}_{1-4}$ 醚，或 $-\text{R}^7-\text{NR}^8\text{R}^9$ ；其中 R^7 是單鍵、選擇性經取代之 C_{6-10} 芳氧基或選擇性經取代之 C_{6-10} 芳基；且 R^8 及 R^9 獨立地為選擇性經取代之 C_{6-10} 芳基，其中 R^8 與 R^9 選擇性鍵聯在一起形成包括氮之第三環。在一些實施例中， R^1 、 R^7 、 R^8 及 R^9 各獨立地為未經取代的，或可具有 1、2、3、4 或 5 個取代基。在一些實施例中， R^1 、 R^7 、 R^8 及 R^9 之取代基可以是 F 、 Cl 、 $-\text{R}'$ 、 $-\text{OR}'$ 或 $-\text{NR}'\text{R}''$ ，其中 R' 及 R'' 各獨立地為 H 、選擇性經取代之苯基、 C_{1-12} 烷基或 C_{1-6} 烷基。

在一些實施例中， R^1 可以是選擇性經取代之 C_{12-30} 二芳基胺基，諸如選擇性經取代之二苯基胺基、選擇性經取代之苯基萘胺基、選擇性經取代之苯基蔥胺基等；選擇性經取代之呋唑基；或在氧原子處連接之 $\text{C}_{1-10}\text{O}_{1-4}$ 醚，諸如烷氧基（例如 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{OC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{OC}_5\text{H}_{11}$ 、 $-\text{OC}_6\text{H}_{13}$ 等）或聚氧化伸烷基（例如 $-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_2\text{OH}$ 、 $-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_2\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_3\text{OH}$ 、 $-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_3\text{OCH}_3$ 、 $-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_4\text{OH}$ 、 $-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_4\text{OCH}_3$ 等）。在一些實施例中， R^1 是經取代之 C_{12-30} 二芳基胺基、選擇性經取代之呋唑基、選擇性經取代之 C_{18-36} 二芳基胺基苯氧基、選擇性經取代之呋唑基苯氧基或在氧原子處連接之 $\text{C}_{1-10}\text{O}_{1-4}$ 醚。在一些實施例中， R^1

可以是選擇性經取代之咪唑基、選擇性經取代之二苯基胺基、選擇性經取代之咪唑基苯氧基、選擇性經取代之對咪唑基苯氧基、選擇性經取代之二苯基胺基苯氧基或選擇性經取代之對-二苯基胺基苯氧基或， C_{1-10} 烷氧基。在一些實施例中， R^1 可為甲氧基、



另外，對於上述任一相關式， R^2 、 R^3 、 R^4 及 R^5 可獨立地為任何取代基。在一些實施例中， R^2 、 R^3 、 R^4 及 R^5 可獨立地為 H；選擇性經取代之 C_{6-30} 芳基，諸如選擇性經取代之苯基； C_{1-10} 烷基，諸如甲基、乙基、丙基異構體（例如正丙基及異丙基）、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體（例如環丁基、甲基環丙基等）、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體、庚基異構體、環庚基異構體等；或 C_{1-10} 烷氧基、烷氧基，諸如 $-OCH_3$ 、 $-OC_2H_5$ 、 $-OC_3H_7$ 、 $-OC_4H_9$ 、 $-OC_5H_{11}$ 、 $-OC_6H_{13}$ 、 $-OC_7H_{15}$ 等。

另外，對於上述任一相關式， R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、

R^f 、 R^g 、 R^h 、 R^i 、 R^j 、 R^k 及 R^l 可以是任何取代基。在一些實施例中， R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、 R^i 、 R^j 、 R^k 及 R^l 可獨立地選自 C_{1-10} 烷基及鹵基。在一些實施例中， R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、 R^i 、 R^j 、 R^k 及 R^l 可獨立地選自 C_{1-3} 烷基、F 及 Cl。

另外，對於上述任一相關式，在一些實施例中， Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 （若存在的話）中至少一者可以是選擇性經取代之對-內伸苯基。在一些實施例中， Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 （若存在的話）可各獨立地為選擇性經取代之對-內伸苯基。在一些實施例中， Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 （若存在的話）可獨立地具有 0、1 或 2 個獨立地選自 C_{1-3} 烷基、F 及 Cl 之取代基。在一些實施例中， Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 （若存在的話）中至少一者可以是未經取代之對-內伸苯基。在一些實施例中， Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 （若存在的話）可各自為未經取代之對-內伸苯基。

另外，對於上述任一相關式，在一些實施例中，Z 可以是 O、S 或 NR^6 ，其中 R^6 為選擇性經取代之苯基。在一些實施例中，Z 可以是 O、S 或 NR^6 ，其中 R^6 是選擇性經取代之苯基；且 R^1 可以是選擇性經取代之二苯基胺、選擇性經取代之咪唑基、選擇性經取代之對-咪唑基苯氧基或選擇性經取代之對-二苯基胺基苯氧基。

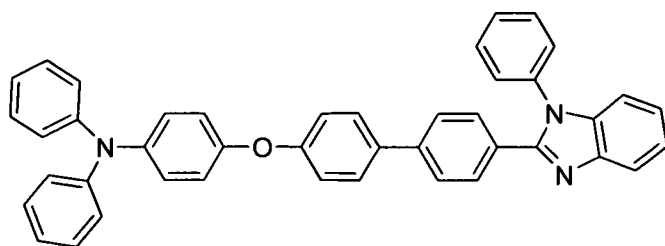
另外，對於上述任一相關式，在一些實施例中， R^1 是選擇性經取代之二苯基胺或選擇性經取代之咪唑基。

另外，對於上述任一相關式，在一些實施例中， Ar^3

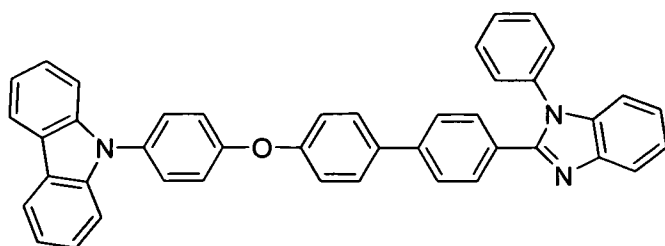
是具有 0、1 或 2 個獨立地選自 C_{1-3} 烷基、F 及 Cl 之取代基的 1,4-內伸芳基。在一些實施例中， Ar^3 是具有 0、1 或 2 個獨立地選自 C_{1-3} 烷基、F 及 Cl 之取代基的 1,4-內伸芳基；且 R^1 是選擇性經取代之二苯基胺或選擇性經取代之咪唑基。

另外，對於上述任一相關式，在一些實施例中， $-Ar^1-X-Ar^2-Ar^3-$ 不是 。

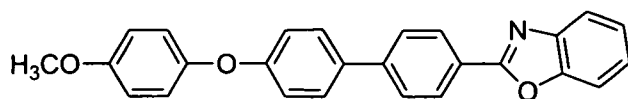
一些實施例是關於選擇性經取代之環系統 1 至 9。



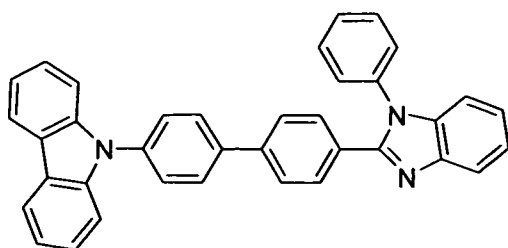
(環系統 1)



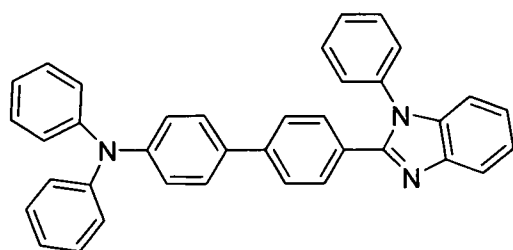
(環系統 2)



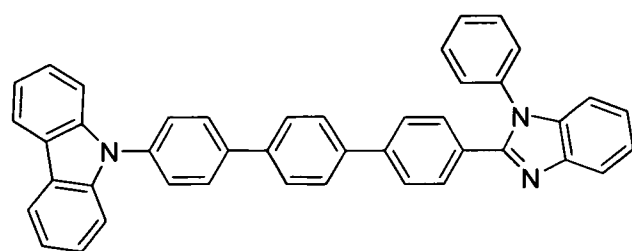
(環系統 3)



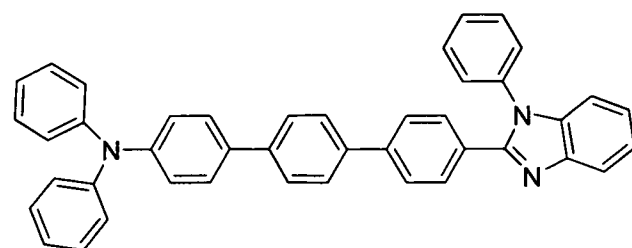
(環系統 4)



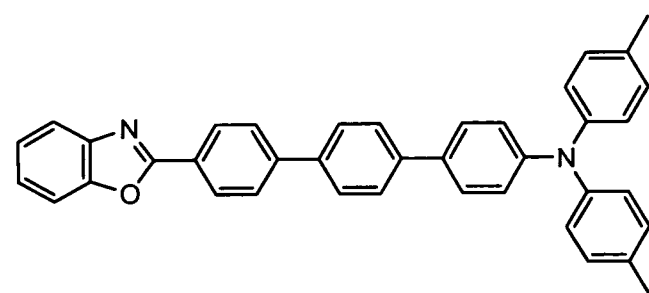
(環系統 5)



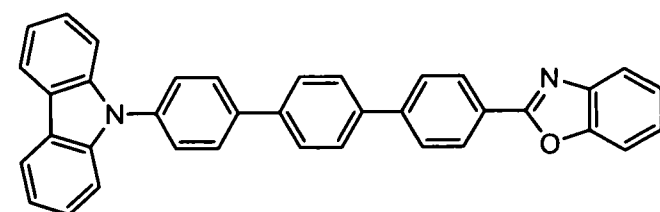
(環系統 6)



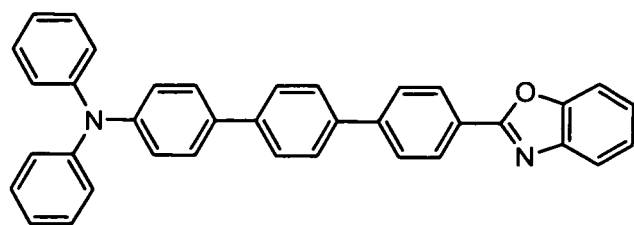
(環系統 7)



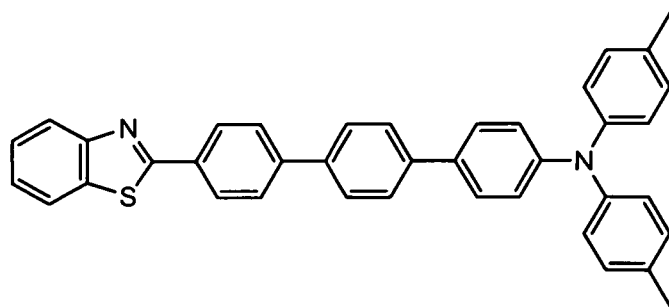
(環系統 8)



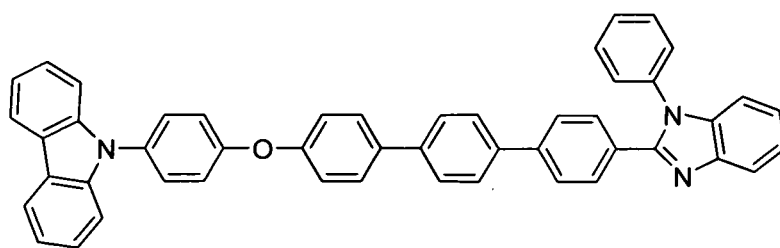
(環系統 9)



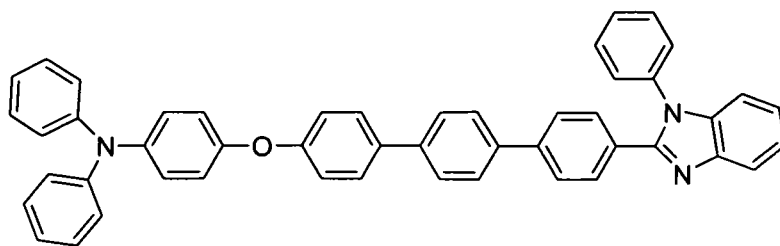
(環系統 10)



(環系統 11)



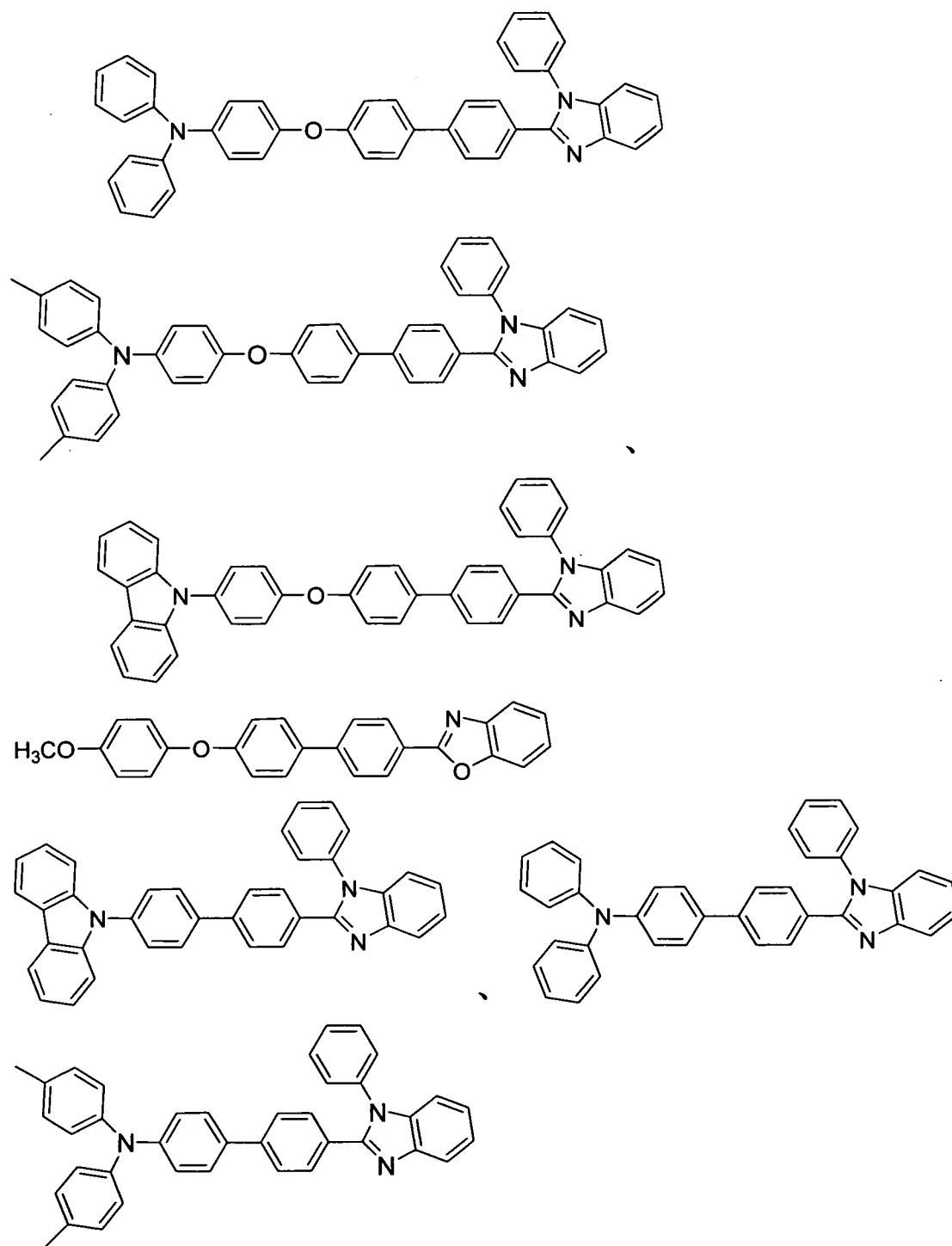
(環系統 12)

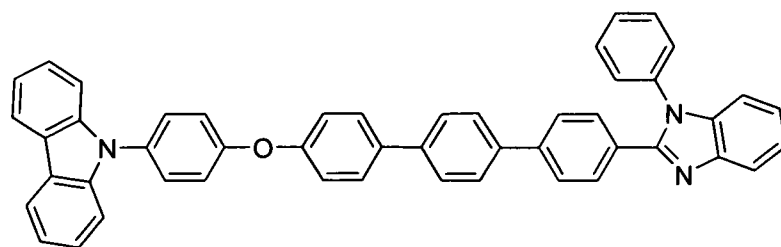
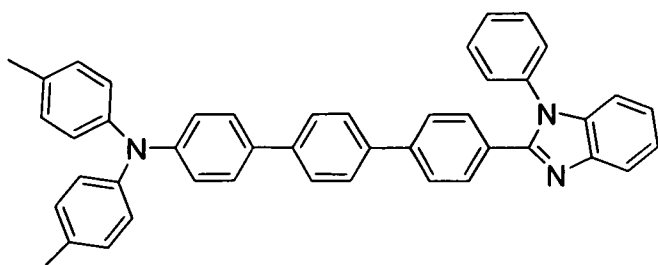
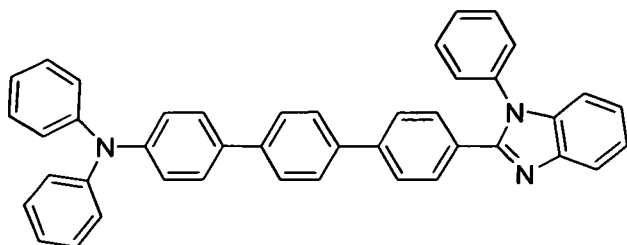
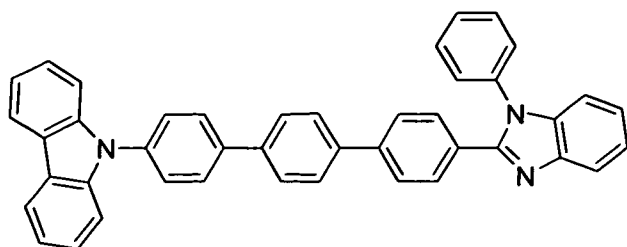


(環系統 13)

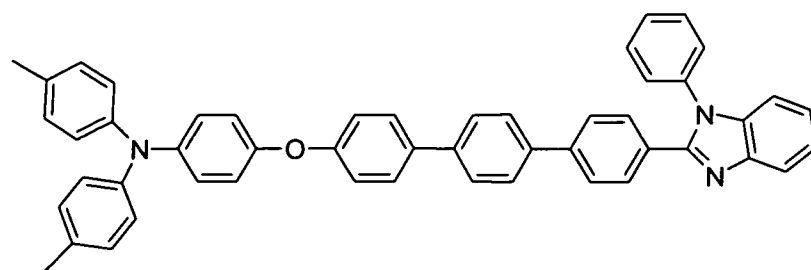
在這些實施例中，所述環系統可具有上述任何取代基，包含關於 Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 及 Het 所述者。在一些實施例中，環系統 1 至 7 可具有 0、1、2、3、4、5 或 6 個取代基。在一些實施例中，取代基獨立地選自： C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷氧基、F、Cl、Br 及 I。

一些實施例是關於選自以下之化合物：





及



本文所述化合物及組成物可以各種方式併入發光裝置中。舉例而言，一個實施例提供一種發光裝置，其包括：陽極層（例如，包括高功函數金屬之陽極層）；陰極層（例如，包括低功函數金屬之陰極層）；及位於陽極層與陰極層之間之發光層。在一些實施例中，所述裝置是配置成可將

電子自陰極轉移至發光層，且將電洞自陽極轉移至發光層。發光層包括本文所揭露之化合物及/或組成物。

陽極層可包括習知材料，諸如金屬、混合金屬、合金、金屬氧化物或混合金屬氧化物，或導電聚合物。合適金屬之實例包含第 10 族、第 11 族及第 12 族過渡金屬中的金屬。若陽極層打算為傳光的 (light-transmitting)，則可使用第 12 族、第 13 族及第 14 族金屬之混合金屬氧化物，或其合金，諸如氧化鋅、氧化錫、氧化銦鋅 (indium zinc oxide, IZO) 或氧化銦錫 (indium-tin-oxide, ITO)。陽極層可包含有機材料，諸如聚苯胺，例如「Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer」, Nature, 第 357 卷, 第 477-479 頁 (1992 年 6 月 11 日) 中所述。合適高功函數金屬之實例包含 (但不限於) 金 (Au)、鉑 (Pt)、氧化銦錫 (ITO) 或其合金。在一些實施例中，陽極層的厚度可在約 1 奈米至約 1000 奈米之範圍內。

陰極層可包含功函數低於陽極層之材料。適用於陰極層之材料的實例包含選自第 1 族鹼金屬、第 2 族金屬、第 11 族、第 12 族及第 13 族金屬者，包含稀土元素、鑰系元素及銅系元素材料，諸如鋁、銦、鈣、鋇、釷及鎂，及其組合。亦可將含鋰有機金屬化合物、氟化鋰 (LiF) 及氧化鋰 (Li₂O) 沈積於有機層與陰極層之間，以降低操作電壓。合適的低功函數金屬包含 (但不限於) 鋁 (Al)、銀 (Ag)、鎂 (Mg)、鈣 (Ca)、銅 (Cu)、鎂/銀、氟化鋰/鋁、氟化

銻 (CsF)、氟化銻/鋁或其合金。在一些實施例中，陰極層的厚度可在約 1 奈米至約 1000 奈米之範圍內。

發光組成物中本文所揭露之化合物的量可變化。在一些實施例中，發光層基本上由本文所揭露之化合物組成。在其他實施例中，發光層包括主體材料 (host material) 及至少一種本文所揭露之發光化合物。若存在主體材料，則相對於所述主體材料，發光化合物之量可以是適於產生適當發射之任何量。在一些實施例中，發光層中本文所揭露之化合物的量在所述發光層之約 1 重量%至約 100 重量%範圍內。在本文所揭露之化合物用作主體之實施例中，所述化合物可為發光層之約 80 重量%或約 90 重量%至約 99 重量%。在本文所揭露之化合物用作發光化合物之實施例中，所述化合物可為發光層之約 1 重量%至約 10 重量%，或者約 3 重量%。

發光層之厚度可變化。在一些實施例中，發光層之厚度在約 20 奈米至約 150 奈米，或約 20 奈米至約 200 奈米之範圍內。

發光層中之主體可為以下至少一者：一或多種電洞傳輸材料、一或多種電子傳輸材料，及一或多種雙極性材料，雙極性材料為熟習此項技術者所瞭解之能夠傳輸電洞及電子二者的材料。

在一些實施例中，電洞傳輸材料包括以下至少一者：芳族取代之胺，咔唑，聚乙烯基咔唑 (polyvinylcarbazole, PVK)，例如聚(9-乙基基咔唑)；N,N'-雙(3-甲基苯基)N,N'-

二 苯 基 -[1,1'- 聯 苯]-4,4'- 二 胺
 (N,N'-bis(3-methylphenyl)N,N'-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-
 -diamine, TPD) ; 聚 蒽 ; 聚 蒽 共 聚 物 ; 聚 (9,9-二-正辛基蒽
 -交替-苯並噻二唑) ; 聚 (對伸苯基) ; 聚 [2-(5-氰基-5-甲基己
 氧基)-1,4-伸苯基] ; 1,1-雙 (4-雙 (4-甲基苯基) 胺基苯基) 環己
 烷 ; 2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-啡啉 ; 3,5-雙 (4-第三丁基-
 苯基)-4-苯基 [1,2,4] 三唑 ; 3,4,5-三苯基-1,2,3-三唑 ; 4,4',4'-
 三 (N-(萘-2-基)-N-苯基胺基) 三苯胺 ; 4,4',4'-三 (3-甲基苯基
 苯 基 胺 基) 三 苯 胺
 (4,4',4'-tris(3-methylphenylphenylamino)triphenylamine ,
 MTDATA) ; 4,4'- 雙 [N-(萘基)-N-苯基-胺基] 聯 苯
 (4,4'-bis[N-(naphthyl)-N-phenyl-amino]biphenyl , α -NPD) ;
 4,4'- 雙 [N,N'-(3-甲 苯 基) 胺 基]-3,3'- 二 甲 基 聯 苯
 (4,4'-bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl ,
 HMTPD) ; 4,4'-N,N'- 二 咔 唑 - 聯 苯
 (4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl , CBP) ; 1,3-N,N'-二 咔 唑 -
 苯 (1,3-N,N'-dicarbazole-benzene , mCP) ; 聚 (9-乙 烯 基 咔
 唑) (poly(9-vinylcarbazole) , PVK) ; 聯 苯 胺 ; 伸 苯 基 二 胺 ;
 酞 菁 金 屬 錯 合 物 ; 聚 乙 炔 ; 聚 噻 吩 ; 三 苯 胺 ; 噁 二 唑 ; 銅
 酞 菁 ; N,N'N''-1,3,5- 三 咔 唑 基 苯
 (N,N'N''-1,3,5-tricarbazoloylbenzene , tCP) ; N,N'- 雙 (4-丁
 基 苯 基)-N,N'- 雙 (苯 基) 聯 苯 胺 ; 其 混 合 物 及 其 類 似 物 。

在一些實施例中，電子傳輸材料包括以下至少一者：
 2-(4- 聯 苯 基)-5-(4- 第 三 丁 基 苯 基)-1,3,4- 噁 二 唑

(2-(4-biphenyl)-5-(4-*tert*-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole , PBD) ; 1,3- 雙 (N,N- 第三丁基 - 苯基)-1,3,4- 噁二唑 (1,3-bis(N,N-t-butyl-phenyl)-1,3,4-oxadiazole , OXD-7)、1,3- 雙 [2-(2,2'- 聯吡啶 -6- 基)-1,3,4- 噁二唑 -5- 基] 苯 ; 3- 苯基 -4-(1'- 萘基)-5- 苯基 -1,2,4- 三唑 (3-phenyl-4-(1'-naphthyl)-5-phenyl-1,2,4-triazole , TAZ) ; 2,9- 二甲基 -4,7- 二苯基 - 啡啉 (浴銅靈 (bathocuproine) 或 BCP) ; 三 (8- 羥基喹啉基) 鋁 (aluminum tris(8-hydroxyquinolate) , Alq3) ; 及 1,3,5- 三 (2-N- 苯基苯並咪唑基) 苯 ; 1,3- 雙 [2-(2,2'- 聯吡啶 -6- 基)-1,3,4- 噁二唑 -5- 基] 苯

(1,3-bis[2-(2,2'-bipyridine-6-yl)-1,3,4-oxadiazole-5-yl]benzene , BPY-OXD) ; 3- 苯基 -4-(1'- 萘基)-5- 苯基 -1,2,4- 三唑 (3-phenyl-4-(1'-naphthyl)-5-phenyl-1,2,4-triazole , TAZ) 、 2,9- 二甲基 -4,7- 二苯基 - 啡啉 (浴銅靈或 BCP) ; 及 1,3,5- 三 [2-N- 苯基苯並咪唑 -z- 基] 苯 (1,3,5-tris[2-N-phenylbenzimidazol-z-yl]benzene , TPBI) 。

在一些實施例中，電子傳輸層是喹啉鋁 (Alq₃)、2-(4-聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑 (PBD)、啡啉、喹啉、1,3,5-三 [N- 苯基苯並咪唑 -z- 基] 苯 (TPBI)，或其衍生物或混合物。

在一些實施例中，裝置不包括電子傳輸層或電洞傳輸層。在一些實施例中，裝置基本上由陽極層、陰極層及發光層組成。在其他實施例中，發光裝置可進一步包括安置

於陽極層與發光層之間之電洞傳輸層。電洞傳輸層可包括至少一種電洞傳輸材料。合適的電洞傳輸材料可包含上文所列之材料，以及熟習此項技術者已知之任何其他材料。在一些實施例中，發光裝置可進一步包括安置於陰極層與發光層之間之電子傳輸層。電子傳輸層可包括至少一種電子傳輸材料。合適的電子傳輸材料可包含上文所列之材料，以及熟習此項技術者已知之任何其他材料。

必要時，發光裝置中可包含額外層。這些額外層可包含電子注入層 (electron injection layer, EIL)、電洞阻擋層 (hole blocking layer, HBL)、激子阻擋層 (exciton blocking layer, EBL) 及/或電洞注入層 (hole injection layer, HIL)。除個別層外，這些材料中有一些亦可合併成單一層。

在一些實施例中，發光裝置可在陰極層與發光層之間包含電子注入層。熟習此項技術者已知多種合適的電子注入材料。電子注入層中可包含之合適材料的實例包含（但不限於）選自以下之選擇性經取代之化合物：喹啉鋁 (Alq_3)、2-(4-聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑 (PBD)、啡啉、喹啉、1,3,5-三[N-苯基苯並咪唑-z-基]苯 (TPBI)、三嗪，8-羥基喹啉之金屬螯合物，諸如三(8-羥基喹啉)鋁，以及金屬類硫𪔐辛化合物 (metal thioxinoid compound)，諸如雙(8-喹啉硫醇基)鋅 (bis(8-quinolinethiolato) zinc)。在一些實施例中，電子注入層是喹啉鋁 (Alq_3)、2-(4-聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑 (PBD)、啡啉、喹啉、1,3,5-三[N-苯基

苯並咪唑-z-基]苯 (TPBI)，或其衍生物或組合。

在一些實施例中，裝置可包含電洞阻擋層，例如在陰極與發光層之間。熟習此項技術者已知多種可包含在電洞阻擋層中之合適的電洞阻擋材料。合適的電洞阻擋材料包含（但不限於）選自以下之選擇性經取代之化合物：浴銅靈 (BCP)、3,4,5-三苯基-1,2,4-三唑、3,5-雙(4-第三丁基-苯基)-4-苯基-[1,2,4]三唑、2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-啡啉及 1,1-雙(4-雙(4-甲基苯基)胺基苯基)-環己烷。

在一些實施例中，發光裝置可包含激子阻擋層，例如在發光層與陽極之間。在一個實施例中，包括激子阻擋層之材料的能帶隙足夠大，以實質上防止激子擴散。熟習此項技術者已知多種可包含在激子阻擋層中之合適的激子阻擋材料。可構成激子阻擋層之材料的實例包含選自以下之選擇性經取代之化合物：喹啉鋁 (Alq_3)、4,4'-雙[N-(萘基)-N-苯基-胺基]聯苯 (α -NPD)、4,4'-N,N'-二咔唑-聯苯 (CBP) 及浴銅靈 (BCP)，及能帶隙足夠大以實質上防止激子擴散的任何其他材料。

在一些實施例中，發光裝置可包含電洞注入層，例如在發光層與陽極之間。熟習此項技術者已知多種可包含在電洞注入層中之合適的電洞注入材料。例示性電洞注入材料包含選自以下之選擇性經取代之化合物：聚噻吩衍生物，諸如聚(3,4-伸乙基二氧基噻吩 (poly(3,4-ethylenedioxythiophene, PEDOT)/聚苯乙烯磺酸 (polystyrene sulphonic acid, PSS)；聯苯胺衍生物，諸如

N,N,N',N'-四苯基聯苯胺、聚(N,N'-雙(4-丁基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺)、三苯胺，或伸苯基二胺衍生物，諸如 N,N'-雙(4-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)-1,4-伸苯基二胺、4,4',4''-三(N-(萘-2-基)-N-苯基胺基)三苯胺；噁二唑衍生物，諸如 1,3-雙(5-(4-二苯基胺基)苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯；聚乙炔衍生物，諸如聚(1,2-雙-苯甲基硫基-乙炔)；及酞菁金屬錯合物衍生物，諸如銅酞菁。電洞注入材料儘管亦能夠傳輸電洞，但電洞遷移率實質上小於習知電洞傳輸材料之電洞遷移率。

熟習此項技術者將認識到，視裝置之配置而定，上述各種材料可併入若干不同層中。在一個實施例中，各層中所用材料經過選擇，以致引起發光層中電洞與電子之複合。圖 1 中示意性說明了併有本文所述各種層之裝置配置的實例。電子注入層 (EIL)、電子傳輸層 (ETL)、電洞阻擋層 (HBL)、激子阻擋層 (EBL)、電洞傳輸層 (HTL) 及電洞注入層 (HIL) 均可使用熟習此項技術者已知之方法 (例如氣相沈積)，併入發光裝置中。

可採用此項技術中已知有關其他發光組成物之方法，製備發光組成物。舉例而言，可藉由將發光化合物溶解或分散於溶劑中，並將所述化合物沈積於裝置之適當層上，製得發光組成物。所述液體可以是單相，或者可以包括一或多種其他固相或液相分散於液體內。隨後可以蒸發溶劑，或可以經由加熱或真空移除溶劑，提供發光組成物。若存在主體，則可將其連同發光裝置溶解或分散於溶劑

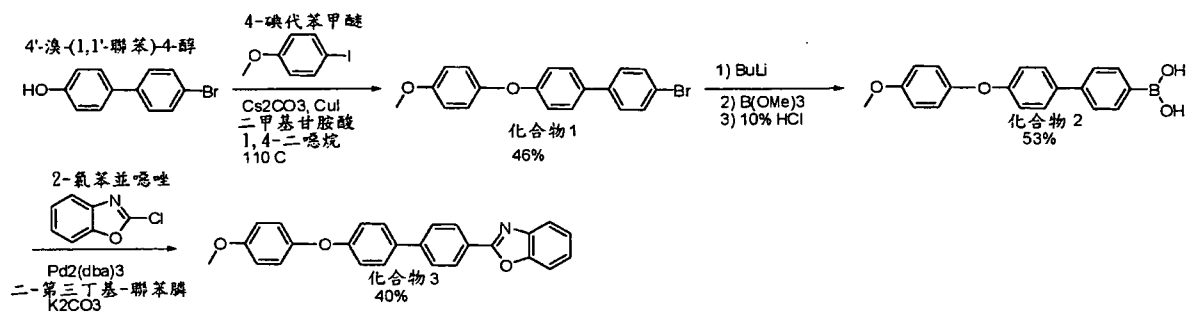
中，並加以處理，如上文所說明。或者，可將化合物添加至熔融或液體主體材料中，隨後使其凝固，提供黏稠液體或固體發光組成物。

可使用此項技術中已知之技術（如由本文所提供之指導可獲悉），製造包括本文所揭露之化合物的發光裝置。舉例而言，可以用可充當陽極之高功函數金屬（諸如 ITO）塗佈玻璃基板。圖案化陽極層後，可將包含至少一種本文所揭露之化合物的發光層沈積於所述陽極上。隨後，可將包括低功函數金屬（例如鎂:銀）之陰極層沈積（例如氣相蒸發）於發光層上。必要時，如由本文所提供之指導可獲悉的，裝置亦可包含電子傳輸/注入層、電洞阻擋層、電洞注入層、激子阻擋層及/或第二發光層，第二發光層可使用此項技術中已知之技術添加至裝置。

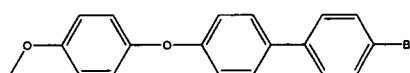
在一些實施例中，利用濕法，諸如包括噴塗、旋塗、滴落塗佈（drop casting）、噴墨印刷（inkjet printing）、網板印刷（screen printing）等中之至少一者的方法，配置發光裝置（例如 OLED）。一些實施例提供一種適於沈積於基板上的液體組成物。所述液體可以是單相，或者可以包括一或多種其他固相或液相分散於其中。所述液體通常包括發光化合物、本文所揭露之主體材料及溶劑。

實例

實例 1：通用合成方法



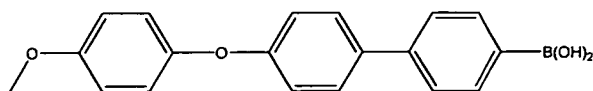
實例 1.1.1



化合物 1

利用冷凍-抽氣-解凍法 (freeze-pump-thaw method), 沖洗 4'-溴-(1,1'-聯苯)-4-醇 (10.0 公克, 40.1 毫莫耳)、4-碘代苯甲醚 (18.72 公克, 80.0 毫莫耳)、碳酸鉀 (26.1 公克, 80.2 毫莫耳)、碘化亞銅 (copper iodide) (760 毫克, 4.0 毫莫耳)、二甲基甘氨酸鹽酸鹽 (1.68 公克, 12.0 毫莫耳) 與無水 1,4-二噁烷 (50 毫升) 之混合物。將所得混合物加熱至 110°C 隔夜。冷卻後, 將所得混合物傾入乙酸乙酯 (300 毫升) 中, 並在 40°C 下攪拌 30 分鐘, 且濾出所得固體。真空乾燥濾液, 得到乳白色固體。用乙酸乙酯與甲醇之混合物洗滌所述乳白色固體, 得到純產物 (化合物 1); 6.5 公克, 46% 產率; 利用 ^1H NMR 確定。

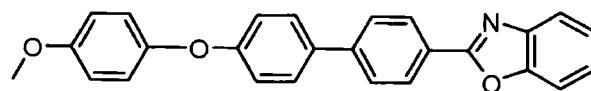
實例 1.1.2



化合物 2

將**化合物 1** (2 公克, 5.63 毫莫耳) 溶解於無水四氫呋喃 (30 毫升) 中, 並將所得溶液冷卻至 -78°C 。逐滴添加丁基鋰 (3.43 毫升 1.6 莫耳濃度的溶液, 5.5 毫莫耳), 並在 -78°C 下攪拌溶液 3 小時。緩慢添加硼酸三甲酯 (0.572 毫升, 5.5 毫莫耳), 並在室溫下攪拌所得混合物 3 小時。添加飽和氯化銨溶液 (45 毫升) (或者使用 10% 鹽酸溶液), 並在室溫下攪拌混合物隔夜。用乙酸乙酯萃取所需產物 2 次, 每次 100 毫升。真空乾燥萃取得到的有機層。利用 DCM/甲醇沈澱, 得到白色固體。過濾白色固體, 並用甲醇洗滌。乾燥濾液, 得到相對純之產物 (**化合物 2**); 1.2 公克, 53% 產率, 利用 HNMR 確定為相對純的。

實例 1.1.3

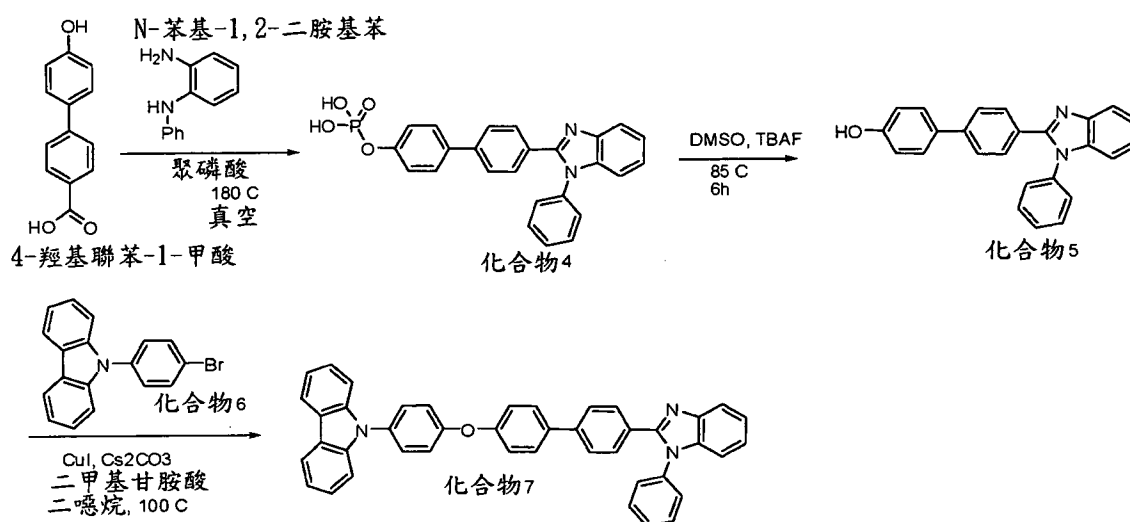


化合物3

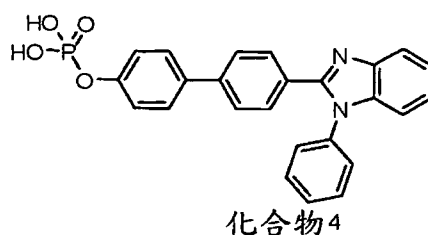
使**化合物 2** (100 毫克, 0.31 毫莫耳)、2-氯苯並噁唑 (50 毫克, 0.33 毫莫耳)、乙酸鈰 ($\text{Pd}(\text{OAc})_2$) (3.5 毫克, 0.015 毫莫耳)、二-第三丁基-聯苯膦 (9 毫克, 0.03 毫莫耳) 及氟化鉀 (KF) (54 毫克, 0.93 毫莫耳) 於 1,4-二噁烷 (5 毫升) 中之混合物脫氣, 隨後在氫氣下, 於 110°C 下加熱 36 小時。冷卻至室溫後, 將混合物傾入二氯甲烷 (100 毫

升) 中。過濾後，將濾液裝載至矽膠管柱上，並利用急驟層析法 (己烷/乙酸乙酯 10:1 至 5:1) 純化。得到白色固體狀所需產物 (40 毫克, 40%) (化合物 3)，利用 LCMS ($C_{26}H_{20}NO_3$ (M+H)-之計算值: 394; 實驗值 $m/e = 394$) 及 HNMR 確定。

實例 1.2.



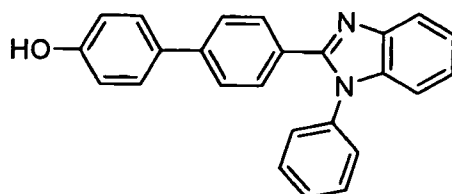
實例 1.2.1



使 4-羥基聯苯-1-甲酸 (2.14 公克, 10 毫莫耳) 及 N-苯基-1,2-二胺基苯 (1.84 公克, 10 毫莫耳) 於聚磷酸 (10 毫升) 中之混合物於真空下脫氣，隨後在 10 托 (torr) 下，於 180°C 加熱隔夜。冷卻至室溫後，將混合物傾入水中。過濾並用水洗滌，得到深色固體狀所需產物 (6.8 公克，

84%) (化合物 4)，利用 LCMS ($C_{25}H_{18}N_2O_4P$ (M-H) 之計算值：441；實驗值 m/e ：441) 確定。

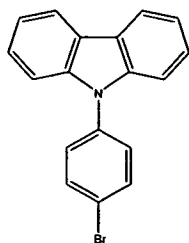
實例 1.2.2



化合物5

向化合物 4 (3.6 公克，8 毫莫耳) 於 DMSO (20 毫升) 中之溶液中添加氟化四丁基銨 (1 莫耳濃度的 THF 溶液，18 毫升)。在 85°C 下，加熱混合物 6 小時。將水 (50 毫升) 添加至熱溶液中，隨後添加 5 毫升濃鹽酸。攪拌混合物 5 分鐘，並使其冷卻至室溫。過濾並於 110°C 下真空乾燥隔夜，得到黑色固體狀所需產物 (1.6 公克，55%) (化合物 5)，利用 LCMS ($C_{25}H_{17}N_2O$ (M-H) 之計算值：361；實驗值 $m/e=361$) 確定。

實例 1.2.3

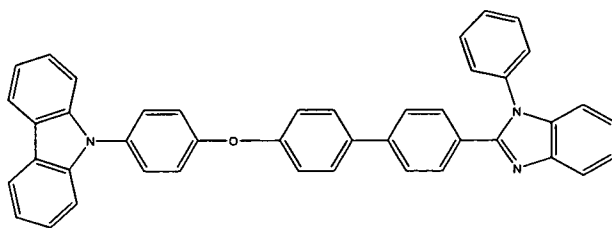


化合物 6

使咪唑 (7.0 公克，42.2 毫莫耳)、4-溴-碘苯 (17.9 公

克，63.3 毫莫耳)、銅 (13.6 公克，214 毫莫耳)、18-冠-6 (4.36 公克，16.48 毫莫耳)、碳酸鉀 (29.5 公克，214 毫莫耳) 與無水 N,N-二甲基甲醯胺 (50 毫升) 之混合物脫氣 30 分鐘。氬氣下，將混合物加熱至 150°C 隔夜。冷卻後，將混合物傾入 DCM (400 毫升) 中，隨後過濾混合物。真空濃縮濾液，並添加己烷，沈澱析出 18-冠-6，過濾。將濾液裝載至矽膠上。急驟管柱層析 (二氧化矽，100% 己烷)，並於 DCM/己烷中再沈澱，得到 9.44 公克相對純之產物 (化合物 6) (白色晶體)，70% 產率；利用 HNMR 確定。

實例 1.2.4

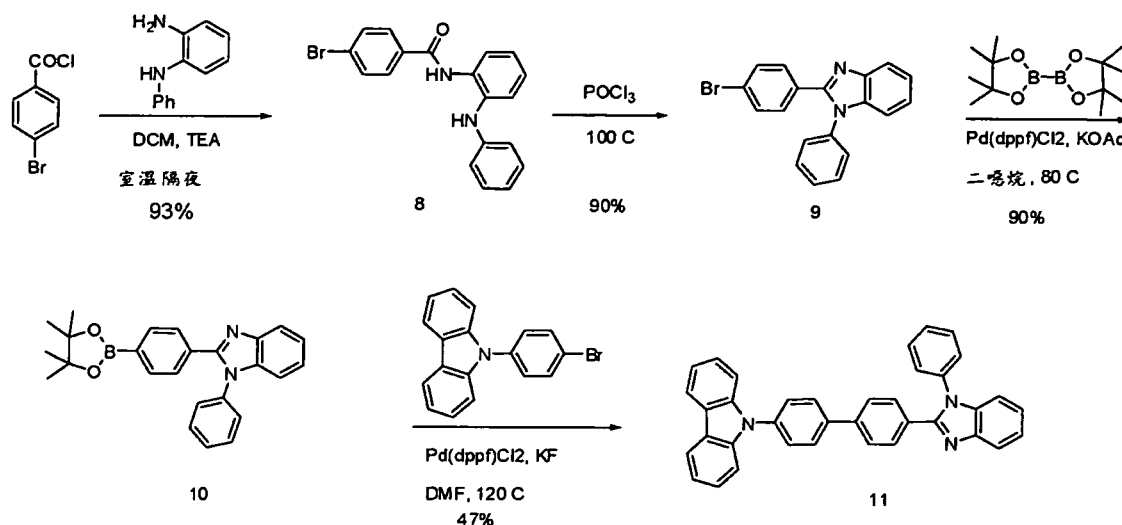


化合物 7

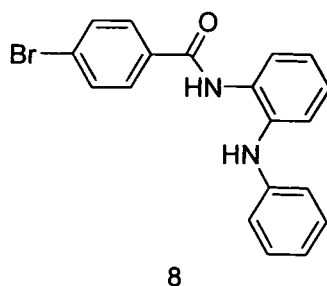
使化合物 6 (1.09 公克，3.40 毫莫耳)、化合物 5 (1.24 公克，3.42 毫莫耳)、碳酸銨 (2.23 公克，6.84 毫莫耳)、碘化亞銅 (65 毫克，.342 毫莫耳)、二甲基甘胺酸鹽酸鹽 (95 毫克，.684 毫莫耳) 與無水 1,4-二噁烷 (30 毫升) 之混合物脫氣 30 分鐘。氬氣下，將混合物加熱至 120°C 隔夜。冷卻後，將所得混合物傾入 DCM (250 毫升) 中，並過濾。將所得濾液裝載至矽膠上。所得來自急驟管柱 (二氧化矽，含 5% 至 50% 乙酸乙酯之己烷梯度) 的流出物為橙色固體。

使用 DCM 及甲醇沈澱橙色雜質。濾出雜質，並真空乾燥含產物之濾液。乾燥後，分離出 270 毫克產物（化合物 7）（淺橙色粉末，13%產率）；利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.3



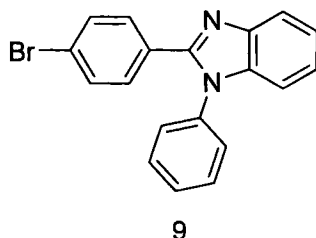
實例 1.3.1



4-溴-N-(2-(苯基胺基)苯基)苯甲醯胺 (8)：向 4-溴-苯甲醯氯（11 公克，50 毫莫耳）於無水二氯甲烷（dichloromethane，DCM）（100 毫升）中之溶液中依次緩慢添加 N-苯基苯-1,2-二胺（10.2 公克，55 毫莫耳）及三

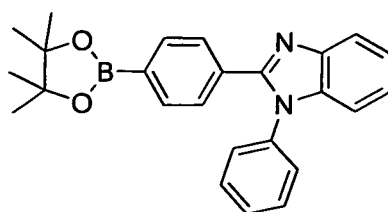
乙胺（17 毫升，122 毫莫耳）。隨後，在室溫（room temperature, r.t.）下攪拌整個混合物隔夜。隨後過濾，得到白色固體（**化合物 8**）（6.5 公克）。用水（300 毫升）處理濾液，隨後用 DCM（300 毫升）萃取 3 次。收集所得有機相，並用硫酸鎂（ MgSO_4 ）乾燥，濃縮並於 DCM/己烷中再結晶，又得到一份白色固體（**化合物 8**）（10.6 公克）。產物（**化合物 8**）總量為 17.1 公克，產率 93%。

實例 1.3.2



2-(4-溴苯基)-1-苯基-1H-苯並[d]咪唑 (9)：向鹽胺 1（9.6 公克，26 毫莫耳）於無水 1,4 二噁烷（100 毫升）中之懸浮液中緩慢添加氧氯化磷（ POCl_3 ）（9.2 毫升，100 毫莫耳）。隨後在 100°C 下整體加熱隔夜。冷卻至室溫後，在攪拌下，將混合物傾入冰（200 公克）中。過濾，隨後在 DCM/己烷中再結晶，得到淺灰色固體（**化合物 9**）（8.2 公克，90%產率）。

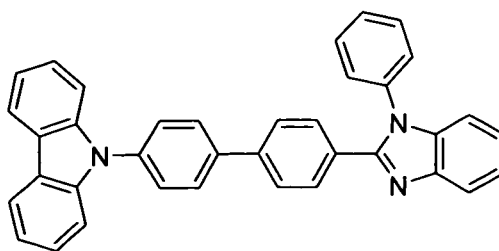
實例 1.3.3



10

1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑 (10): 氬氣下，在 80°C 加熱化合物 9 (0.70 公克，2 毫莫耳)、雙(頻哪醇基)二硼(bis(pinacolate)diborane) (0.533 公克，2.1 毫莫耳)、1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈦(Pd(dppf)Cl_2) (0.060 公克，0.08 毫莫耳) 與無水乙酸鉀 (0.393 公克，4 毫莫耳) 於 1,4-二噁烷 (20 毫升) 中之混合物隔夜。冷卻至室溫後，用乙酸乙酯 (80 毫升) 稀釋整個混合物，隨後過濾。將溶液吸附於矽膠上，隨後利用管柱層析法 (己烷/乙酸乙酯 5:1 至 3:1) 純化，得到白色固體 (化合物 10) (0.64 公克，81% 產率)。

實例 1.3.4



11

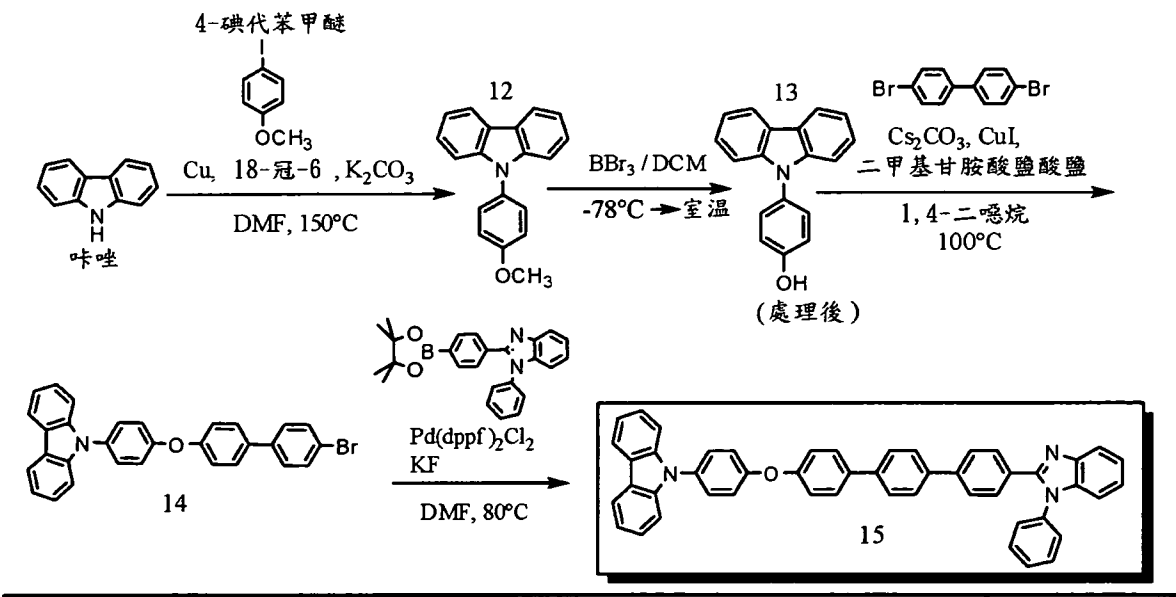
9-(4'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)聯苯-4-基)-9H-呋

唑 (11): 在氫氣下, 於 120℃ 加熱化合物 10 (1.41 公克, 3.56 毫莫耳)、9-(4-溴苯基)-9H-咔唑 (1.15 公克, 3.56 毫莫耳)、Pd(dppf)Cl₂ (100 毫克, 0.14 毫莫耳) 及 KF (0.619 公克, 10.7 毫莫耳) 於無水 DMF (20 毫升) 中之混合物隔夜。冷卻至室溫後, 添加乙酸乙酯 (200 毫升) 並整體攪拌 15 分鐘。過濾所得混合物。收集固體, 並溶解於 DCM (200 毫升) 中, 過濾, 濃縮並再結晶, 得到白色固體 (化合物 11) (550 毫克)。

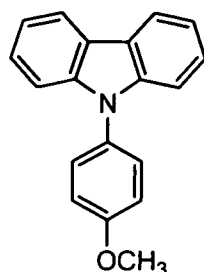
將第一次分離得到之濾液吸附於矽膠上, 隨後利用管柱層析法 (己烷/乙酸乙酯 7:1 至 3:1) 純化, 得到淺黃色固體 (化合物 11) (300 毫克)。NMR 顯示兩種固體均為所需產物 (化合物 11), 總量為 850 毫克, 產率 47%。

實例 1.4

總流程:



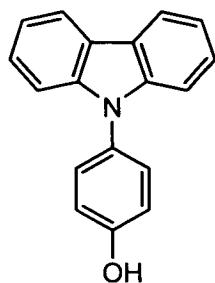
實例 1.4.1



化合物 12

9-(4-甲氧基苯基)-9H-咔唑(化合物 12):使咔唑(10.0 公克, 60.2 毫莫耳)、4-碘代苯甲醚(21.1 公克, 90.4 毫莫耳)、銅粉(28.58 公克, 450 毫莫耳)、18-冠-6(9.33 公克, 35.3 毫莫耳)及碳酸鉀(62.1 公克, 450 毫莫耳)之混合物於二甲基甲醯胺(無水, 100 毫升)中脫氣 45 分鐘。氬氣下, 將所得混合物加熱至 150°C 隔夜。冷卻後, 將混合物傾入 DCM (500 mL) 中。隨後, 濾出殘留的銅及鹽。用水洗滌所得濾液 2 次, 每次 200 毫升。收集有機層, 用硫酸鈉乾燥, 隨後裝載至矽膠上。急驟管柱層析(含 3-5% 乙酸乙酯之己烷梯度)且自 DCM/己烷再沈澱, 得到 11.71 公克(71%產率)產物(化合物 12); 利用 HNMR 確定是純的。

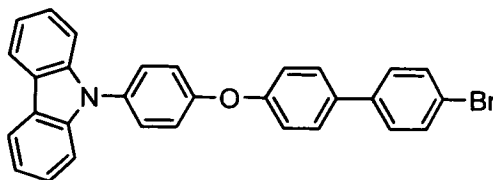
實例 1.4.2



化合物 13

4-(9H-咔唑-9-基)苯酚(化合物 13):將化合物 12(11.63 公克, 42.6 毫莫耳) 溶解於 DCM 中, 並將溶液冷卻至 -77°C 。將三溴化硼(45 毫升 1 莫耳濃度的溶液) 逐滴添加至冷溶液中。在氫氣下, 將溶液攪拌隔夜, 同時緩慢升溫至室溫。LCMS 顯示具有所需質量之單一峰($M^+ = 528$)。將甲醇(100 毫升)添加至反應混合物中, 且攪拌 30 分鐘。將整體裝載至矽膠上。急驟管柱層析(含 10-20%乙酸乙酯之己烷梯度), 得到 10.94 公克產物(化合物 13)(產率 99%), 利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.4.3

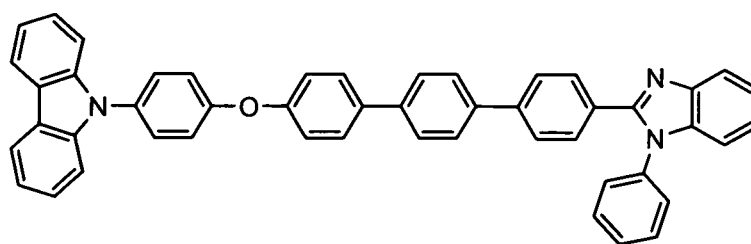


化合物 14

9-(4-(4'-溴聯苯-4-基氧基)苯基)-9H-咔唑(化合物 14):使化合物 13(10.0 公克, 8.3 毫莫耳)、4,4'-二溴聯苯(24.1 公克, 77.2 毫莫耳)、碳酸鉍(25.2 公克, 77.2

毫莫耳)、碘化亞銅 (700 毫克, 3.86 毫莫耳) 與二甲基甘胺酸鹽酸鹽 (1.62 公克, 11.6 毫莫耳) 之混合物於 1,4-二噁烷 (無水, 100 毫升) 中脫氣 45 分鐘。氬氣下, 將混合物加熱至 120°C 隔夜。冷卻後, 將混合物傾入 DCM (300 毫升) 中, 隨後用水及鹽水洗滌混合物。收集有機層, 用硫酸鈉乾燥, 隨後裝載至矽膠上。使用塞子 (plug), 用含 10% 乙酸乙酯之己烷, 移除基線雜質。隨後急驟管柱層析 (含 5% 甲苯之己烷), 並自 DCM/ 甲醇沈澱, 得到 11.17 公克產物 (化合物 14) (產率 59%), 利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.4.4

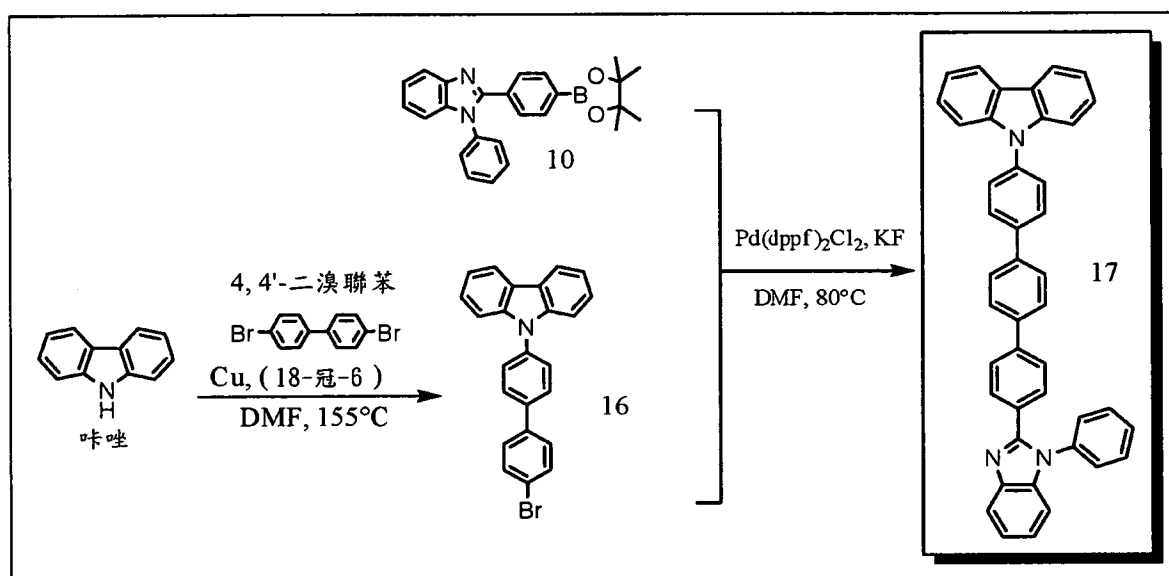


化合物 15

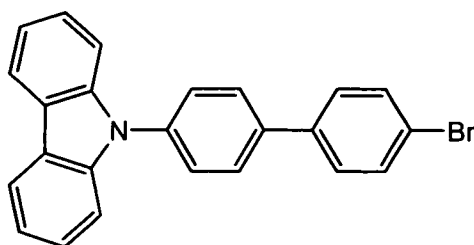
使化合物 14 (1.85 公克, 3.79 毫莫耳)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑 (1.5 公克, 3.79 毫莫耳)、1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈹 (139 毫克, .190 毫莫耳) 與氟化鉀 (661 毫克, 11.4 毫莫耳) 之混合物於二甲基甲醯胺 (無水, 30 毫升) 中脫氣 30 分鐘。氬氣下, 將混合物加熱至 80°C 隔夜。冷卻後, 將混合物傾入 DCM (200 毫升) 中, 隨後用

水及鹽水洗滌。收集有機層，用硫酸鈉乾燥，隨後裝載至矽膠上。急驟管柱層析（含 20% 乙酸乙酯之己烷）且自 DCM/甲醇再結晶，得到 1.83 公克（71% 產率）產物（化合物 15）；利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.5



實例 1.5.1

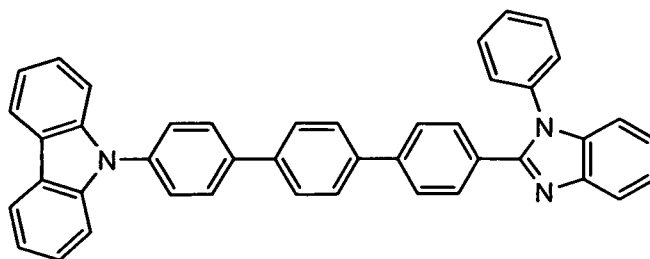


化合物 16

9-(4'-溴聯苯-4-基)-9H-咪唑：使咪唑（300 毫克，1.81

毫莫耳)、4,4'-二溴聯苯(846 毫克, 2.71 毫莫耳)、銅(344 毫克, 5.43 毫莫耳)、18-冠-6(187 毫克, .71 毫莫耳)、碳酸鉀(750 毫克, 5.43 毫莫耳)與無水 N,N-二甲基甲醯胺(10 毫升)之混合物脫氣 30 分鐘。在氫氣下, 將混合物加熱至 155°C, 保持 66 小時。冷卻後, 將混合物傾入 DCM(400 毫升)中, 隨後過濾混合物。將濾液裝載至矽膠上。急驟管柱層析(二氧化矽, 含 10% DCM 之己烷)且在 DCM/己烷中再沈澱, 得到 304 毫克(42%產率)純產物, 利用 HNMR 確定。

實例 1.5.2

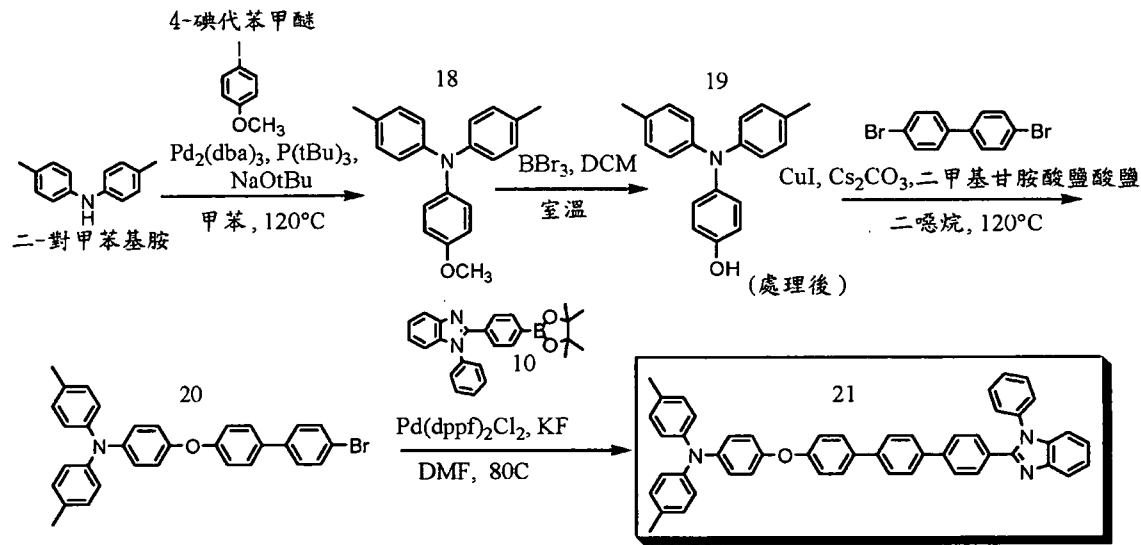


化合物 17

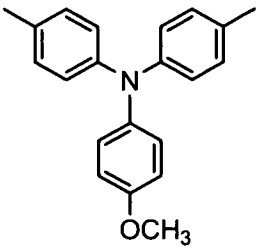
使化合物 16(250 毫克, .63 毫莫耳)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑(化合物 10)(250 毫克, .63 毫莫耳)、[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈹(II)(23 毫克, .03 毫莫耳)、氟化鉀(110 毫克, 1.89 毫莫耳)與二甲基甲醯胺(無水, 15 毫升)中之混合物脫氣 20 分鐘。隨後在氫氣下, 將混合物加熱至 80°C 隔夜。冷卻後, 將混合物傾入 DCM(200 毫升)中, 隨後濾出固體。用水洗滌所得濾液 2 次, 每次 100 毫

升，用硫酸鈉乾燥，隨後裝載至矽膠上。急驟管柱層析（含 3-10%乙酸乙酯之 DCM 梯度）且使用 DCM/己烷再結晶，得到 170 毫克（46%產率）物質（化合物 17）；利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.6



實例 1.6.1

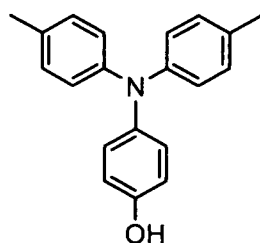


化合物 18

4-甲氧基-N,N'-二-對甲苯基苯胺(化合物 18): 使三(二亞苄基丙酮)二鈹 (60 毫克，催化量) 與三-第三丁基膦 (5

毫升 10% 的己烷溶液) 之混合物於甲苯 (無水, 60 毫升) 中脫氣 20 分鐘。添加二-對甲苯基胺 (4.0 公克, 20.3 毫莫耳) 及 4-碘代苯甲醚 (11.88 公克, 50.8 毫莫耳), 並繼續脫氣 15 分鐘。添加第三丁醇鈉 (2.4 公克, 25 毫莫耳), 並使混合物再脫氣 10 分鐘。氫氣下, 在 120°C 加熱整個混合物隔夜。冷卻後, 將混合物傾入乙酸乙酯中, 並用水洗滌 2 次, 每次 200 毫升。收集有機層, 並用硫酸鈉乾燥, 隨後裝載至矽膠上。急驟管柱層析 (含 2-3% 乙酸乙酯之己烷梯度), 得到 3.26 公克物質 (化合物 18) (產率 53%), 利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.6.2

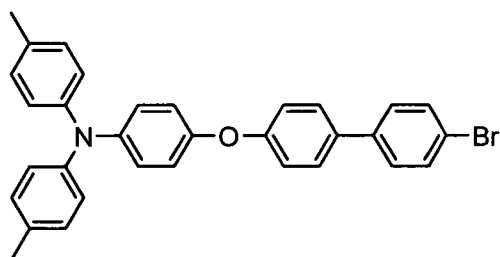


化合物 19

4-(二-對甲苯基胺基)苯酚 (化合物 19): 將化合物 18 (3.05 公克, 10.1 毫莫耳) 溶解於 DCM (無水, 50 毫升) 中, 並將溶液冷卻至 -77°C。將三溴化硼 (12 毫升 1 莫耳濃度的溶液) 逐滴添加至冷溶液中。在氫氣下攪拌整個混合物並緩慢升溫至室溫隔夜。LCMS 顯示單一所需質量 288 (M⁻)。將混合物傾入甲醇 (200 毫升) 中, 並攪拌 45 分鐘。隨後真空濃縮混合物, 接著添加 DCM (100 毫升)。用水

洗滌溶液 2 次，每次 200 毫升。收集有機層，用硫酸鈉乾燥，並真空濃縮。使用己烷沈澱有機層，得到 2.44 公克物質（化合物 19）（產率 84%）；利用 HNMR 確定是純的。

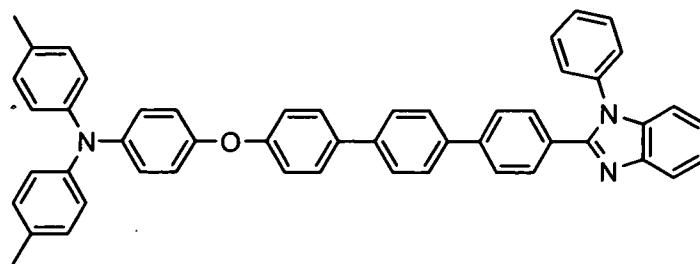
實例 1.6.3



化合物 20

4-(4'-溴聯苯-4-基氧基)-N,N-二-對甲苯基苯胺（化合物 20）：使化合物 19（2.4 公克，8.3 毫莫耳）、4,4'-二溴聯苯（1.25 公克，4.0 毫莫耳）、碳酸鉍（5.41 公克，16.6 毫莫耳）、碘化亞銅（158 毫克，0.83 毫莫耳）與二甲基甘胺酸鹽酸鹽（348 毫克，2.49 毫莫耳）之混合物於 1,4-二噁烷（無水，40 毫升）中脫氣 45 分鐘。氬氣下，將混合物加熱至 120°C 隔夜。冷卻後，將混合物傾入 DCM（300 毫升）中，隨後用水及鹽水洗滌混合物。收集有機層，用硫酸鈉乾燥，隨後裝載至矽膠上。急驟管柱層析（含 5-20% DCM 之己烷梯度）且自 DCM/己烷再沈澱，得到 760 毫克產物（化合物 20）（37%產率）；利用 HNMR 確定是純的。

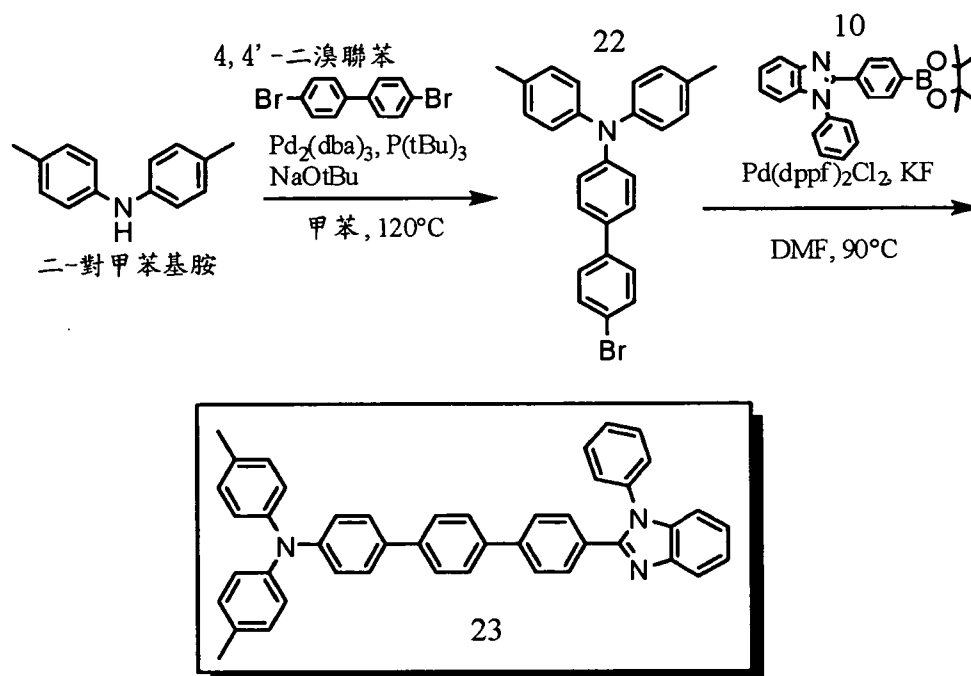
實例 1.6.4



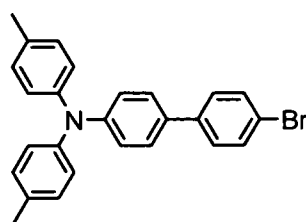
化合物 21

使化合物 20 (656 毫克, 1.26 毫莫耳)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑 (500 毫克, 1.26 毫莫耳)、1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈹 (100 毫克, 催化量) 與氟化鉀 (220 毫克, 3.8 毫莫耳) 之混合物於二甲基甲醯胺 (無水, 8 毫升) 中脫氣 30 分鐘。氬氣下, 將混合物加熱至 80°C 隔夜。冷卻後, 將混合物傾入水 (200 mL) 中。用 DCM 萃取產物 2 次, 每次 150 毫升。收集有機層, 用硫酸鈉乾燥, 並裝載至矽膠上。急驟管柱層析 (含 15-45% 乙酸乙酯之己烷梯度) 且自 DCM/甲醇再沈澱, 得到 400 毫克 (45% 產率) 產物; 利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.7



實例 1.7.1

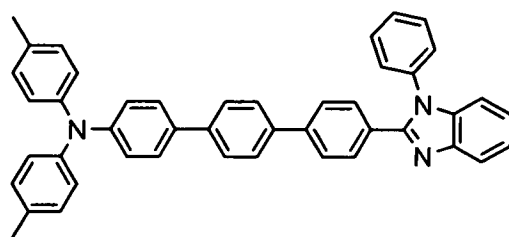


化合物 22

4'-溴-N,N'-二-對甲苯基聯苯-4-胺 (化合物 22): 使三(二亞苄基丙酮)二鈹 (353 毫克, .385 毫莫耳) 與三-第三丁基磷 (3.11 公克 10%的己烷溶液) 之混合物於甲苯 (無水, 50 毫升) 中脫氣 20 分鐘。添加二-對甲苯基胺 (3.00 公克, 15.2 毫莫耳) 及 4,4'-二溴聯苯 (4.80 公克, 15.4 毫莫耳), 且再使混合物脫氣 15 分鐘。添加第三丁醇鈉 (2.4 公克, 25 毫莫耳), 並使混合物再脫氣 10 分鐘。氬氣下,

在 120°C 整體加熱隔夜。冷卻後，將混合物傾入 DCM 中，並濾出固體。用水及鹽水洗滌濾液。收集有機層，並用硫酸鈉乾燥，隨後裝載至矽膠上。急驟管柱層析（含 2-20% 乙酸乙酯之己烷梯度），得到 190 毫克物質（產率 3%），利用 HNMR 確定是純的。

實例 1.7.2

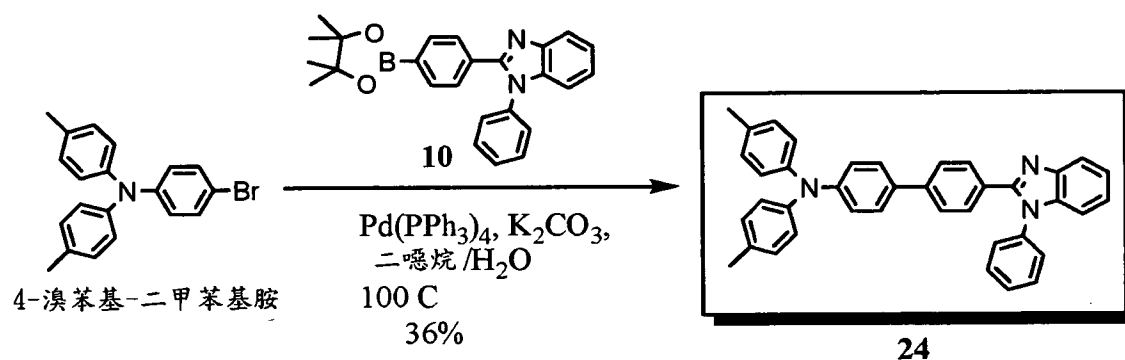


化合物 23

使化合物 22（170 毫克，.397 毫莫耳）、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑（173 毫克，.436 毫莫耳）、1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈹（15 毫克，.02 毫莫耳）與氟化鉀（70 毫克，1.2 毫莫耳）之混合物於二甲基甲醯胺（無水，15 毫升）中脫氣 30 分鐘。氬氣下，將混合物加熱至 90°C 隔夜。冷卻後，將混合物傾入水中並過濾。將固體溶解於 DCM（50 毫升）中，並用水及鹽水洗滌溶液。對於第一次過濾之濾液：用 DCM 萃取濾液 2 次，每次 100 毫升。合併所有有機相，用硫酸鈉乾燥，並裝載至矽膠上。急驟管柱層析（含 10-20% 乙酸乙酯之己烷梯度）且自 DCM/甲醇再沈澱，得到 146 毫克（59% 產率）產物（化合物 23）；利用 HNMR

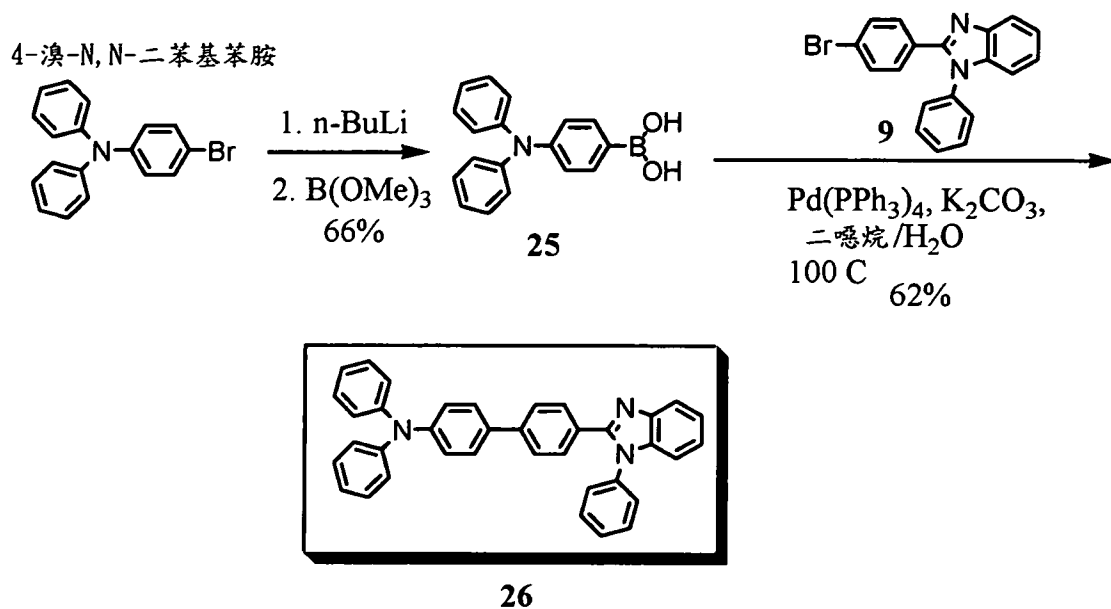
確定。

實例 1.8.1



化合物 24：使 4-溴苯基-二甲苯基胺（2.80 公克，8.0 毫莫耳）、化合物 10（3.15 公克，8.0 毫莫耳）、 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ （0.90 公克，0.8 毫莫耳）及碳酸鉀（ K_2CO_3 ）（2.76 公克，20 毫莫耳）於 1,4-二噁烷/水（ H_2O ）（30 毫升/5 毫升）中之混合物脫氣，並在約 100°C 下加熱所得混合物隔夜。冷卻至室溫後，用 10% 氯化鈉（ NaCl ）水溶液處理所得混合物，隨後用乙酸乙酯萃取 2 次，每次 150 毫升。收集有機相，並用硫酸鈉（ Na_2SO_4 ）乾燥，隨後吸附於矽膠上，並藉由急驟層析法（己烷/乙酸乙酯 6:1 至 4:1）純化，得到黃色固體，於二氯甲烷/甲醇中再結晶 3 次，得到白色固體（化合物 24）（1.55 公克，36% 產率）。

實例 1.9.1

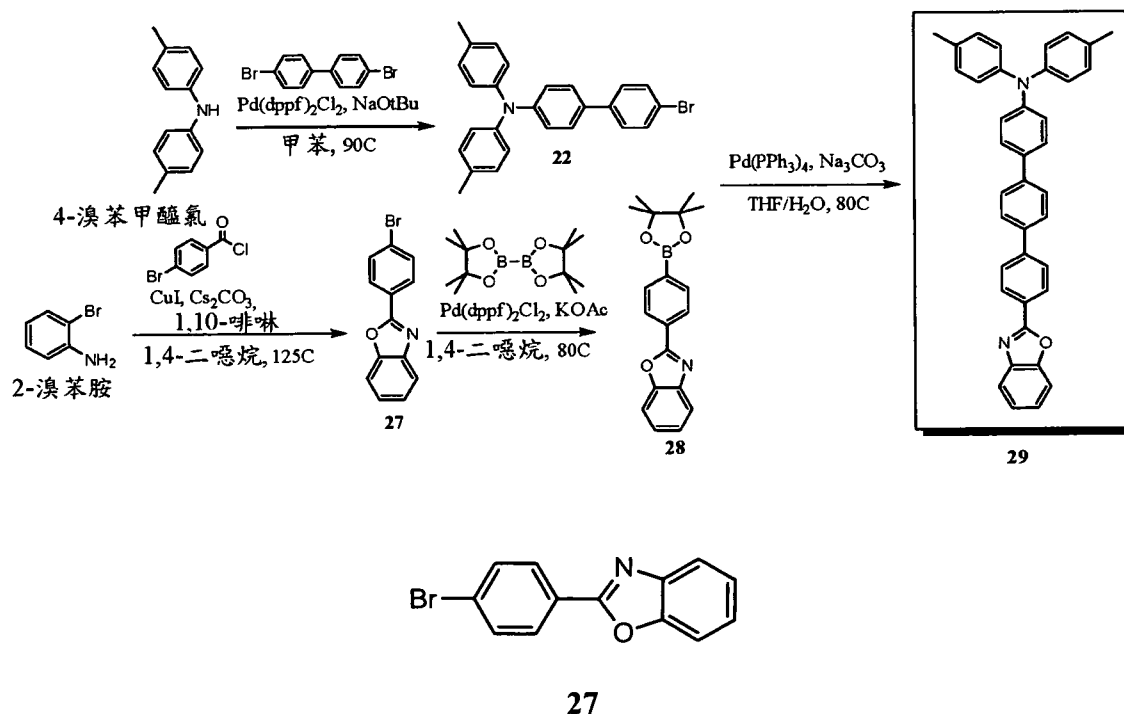


(4-(二苯基胺基)苯基)硼酸 (化合物 25): -78°C 下，向 4-溴-N,N-二苯基苯胺 (22 公克，68 毫莫耳) 於無水 THF (170 毫升) 中之溶液中緩慢添加正丁基鋰 (n-BuLi) 溶液 (2.5 莫耳濃度的己烷溶液，20 毫升，75 毫莫耳)。隨後，在 -78°C 下攪拌所得混合物約 5 小時，接著添加新蒸餾出來的硼酸三甲酯 (8.8 毫升，80 毫莫耳)。室溫下攪拌所得混合物過週末。向溶液中添加 5% 鹽酸溶液 (150 毫升)，並攪拌隔夜，隨後用乙酸乙酯萃取 2 次，每次 200 毫升。收集有機相，並用硫酸鈉乾燥。移除溶劑後，在二氯甲烷/己烷中再結晶剩餘固體，得到白色固體 (11.0 公克)。藉由急驟層析法 (矽膠，己烷/乙酸乙酯 9:1 至 2:1) 純化濾液，又得到白色固體 (2.0 公克)。產物 (化合物 25) 總量為 13 公克，產率 66%。

化合物 26: 使化合物 25 (4-(二苯基胺基)苯基)硼酸 (900 毫克，3.1 毫莫耳)、化合物 9 (1.09 公克，3.1 毫莫耳)

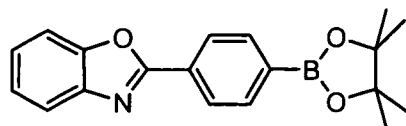
耳)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (180 毫克, 0.16 毫莫耳) 及碳酸鉀 (1.38 公克, 10 毫莫耳) 於 1,4-二噁烷/水 (25 毫升/5 毫升) 中之混合物脫氣, 並在氫氣氛圍下, 於約 100°C 加熱所得混合物隔夜。冷卻至室溫後, 將所得混合物傾入水中, 用乙酸乙酯萃取 2 次, 每次 100 毫升。有機相用硫酸鈉乾燥, 並過濾。添加己烷 (100 毫升), 約 1 小時後形成黃色沈澱。過濾得到黃色固體 (760 毫克), 並將濾液吸附於矽膠上, 藉由急驟層析法純化, 得到黃色固體 (200 毫克)。產物 (化合物 26) 總量為 960 毫克, 產率 62%。

實例 1.10.1



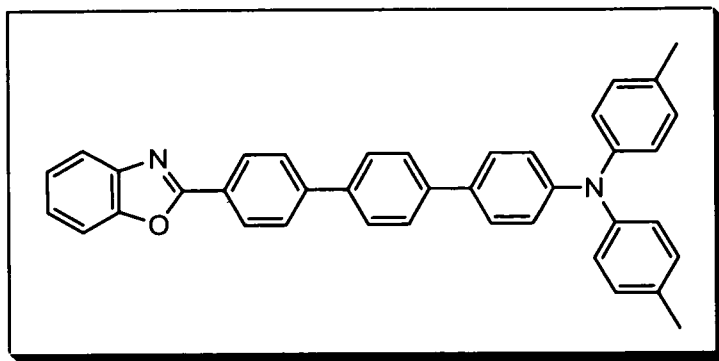
2-(4-溴苯基)苯並[d]噁唑 (化合物 27): 使 4-溴苯甲醯氯 (4.84 公克, 22 毫莫耳)、2-溴苯胺 (3.8 公克, 22 毫

莫耳)、碘化亞銅 (CuI) (0.21 公克, 1.1 毫莫耳)、碳酸鉯 (Cs_2CO_3) (14.3 公克, 44 毫莫耳) 及 1,10-啡啉 (0.398 公克, 2.2 毫莫耳) 於無水 1,4-二噁烷 (80 毫升) 中之混合物脫氣, 並在氬氣下, 於約 125°C 加熱所得混合物隔夜。冷卻所得混合物, 並傾入乙酸乙酯 (約 200 毫升) 中, 並過濾。將濾液吸附於矽膠上, 藉由管柱層析法 (己烷/乙酸乙酯 4:1) 純化, 並利用己烷沈澱, 得到白色固體 (化合物 27) (5.2 公克, 87% 產率)。



28

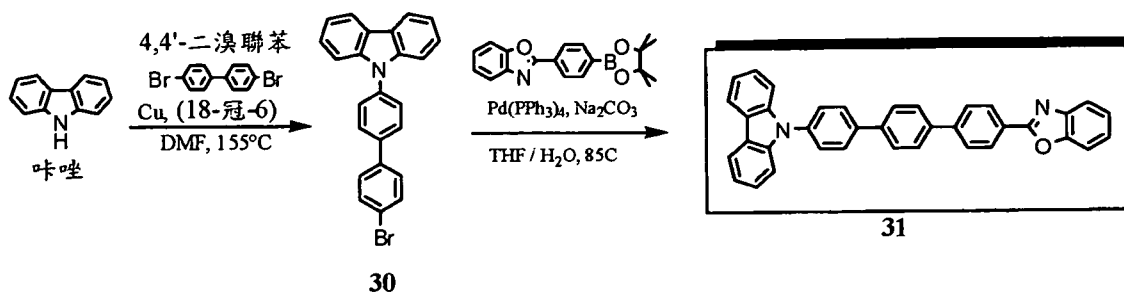
2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)苯並[d]噁唑 (化合物 28): 使 10 (4.45 公克, 16 毫莫耳)、雙(頻哪醇基)二硼 (4.09 公克, 16.1 毫莫耳)、無水乙酸鉀 (3.14 公克, 32 毫莫耳) 及 $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (0.48 公克, 0.66 毫莫耳) 於無水 1,4-二噁烷 (80 毫升) 中之混合物脫氣, 並在氬氣下, 於約 85°C 加熱所得混合物約 48 小時。冷卻至室溫後, 將混合物傾入乙酸乙酯 (約 200 毫升) 中, 並過濾。將濾液吸附於矽膠上, 藉由管柱層析法 (己烷/乙酸乙酯 4:1) 純化, 得到白色固體 (化合物 28) (4.15 公克, 81% 產率)。

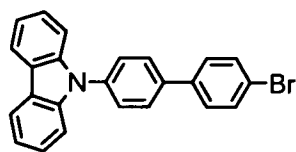


29

化合物 29：使化合物 **28** (0.66 公克，2.05 毫莫耳)、化合物 **22** (0.80 公克，1.87 毫莫耳)、碳酸鈉 (0.708 公克，6.68 毫莫耳) 及 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.065 公克，56.1 毫莫耳) 於四氫呋喃/水 (10 毫升/6 毫升) 中之混合物脫氣，並在氬氣氛圍下，於約 80°C 加熱所得混合物隔夜。冷卻後，將所得混合物傾入二氯甲烷 (100 毫升) 中，並用水 (2×200 毫升) 及鹽水 (100 毫升) 洗滌。收集有機相，用硫酸鈉乾燥，隨後藉由急驟層析法 (矽膠，己烷/乙酸乙酯 40:1 至 9:1) 純化，得到固體 (化合物 **29**) (0.936 公克，93% 產率)。

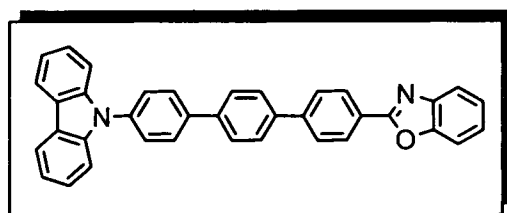
實例 1.11.1





30

9-(4'-溴聯苯-4-基)-9H-咔唑(化合物 30):使咔唑(300 毫克, 1.81 毫莫耳)、4,4'-二溴聯苯(846 毫克, 2.71 毫莫耳)、銅(344 毫克, 5.43 毫莫耳)、18-冠-6(187 毫克, .71 毫莫耳)、碳酸鉀(750 毫克, 5.43 毫莫耳)與無水 N,N-二甲基甲醯胺(10 毫升)之混合物脫氣 30 分鐘。接著在氬氣下, 將所得混合物加熱至約 155°C, 保持 66 小時。冷卻後, 將所得混合物傾入二氯甲烷(400 毫升)中, 隨後過濾混合物。將濾液裝載至矽膠上。急驟管柱層析(二氧化矽, 含 10%二氯甲烷之己烷)且在二氯甲烷/己烷中再沈澱, 得到 304 毫克(42%產率)純產物, 利用 HNMR 確定。

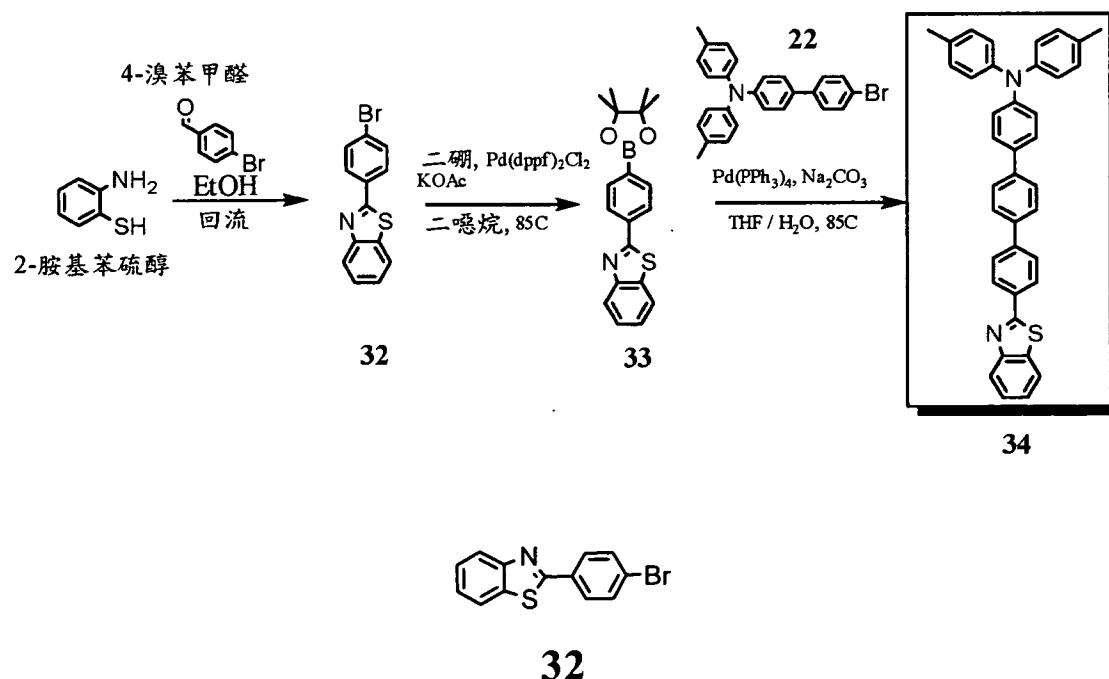


31

化合物 31:使 9-(4'-溴聯苯-4-基)-9H-咔唑(化合物 30)(1.6 公克, 4.03 毫莫耳)、化合物 28(1.42 公克, 4.43 毫莫耳)、碳酸鈉(1.53 公克, 14.39 毫莫耳)及 Pd(PPh₃)₄(0.14 公克, 0.121 毫莫耳)於四氫呋喃/水(24 毫升/14 毫

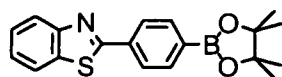
升) 中之混合物脫氣，並在氬氣氛圍下，將所得混合物加熱至約 85°C 隔夜。冷卻後，將所得混合物傾入二氯甲烷 (200 毫升) 中，並用水 (2×150 毫升) 及鹽水 (150 毫升) 洗滌。收集有機相，並用硫酸鈉乾燥，且濃縮，形成灰色沈澱。過濾得到濾液 (A) 及固體，將固體再溶解於氯仿 (550 毫升) 中，並濾出懸浮顆粒，澄清濾液 (B) 在 -15°C 下保持隔夜，形成白色固體 (1.19 公克)。將濾液 (C) 與濾液 A 合併，並吸附於矽膠上，藉由急驟層析法 (二氯甲烷) 純化，又得到 0.52 公克固體。合併兩份固體，並用熱乙酸乙酯洗滌，並過濾，得到產物 (化合物 31) (1.66 公克，81% 產率)。

實例 1.12.1



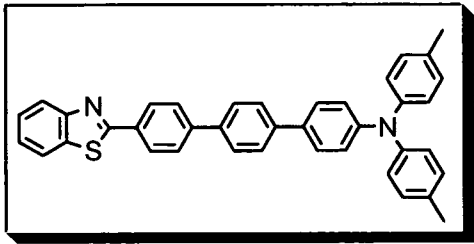
2-(4-溴苯基)苯並[d]噻唑 (thioxazole) (32): 將 2-

胺基苯硫醇（2.0 公克，15.97 毫莫耳）、4-溴苯甲醛（2.95 公克，15.97 毫莫耳）及 50 毫克 10%鈀/碳於乙醇（50 毫升）中之混合物用空氣鼓泡約 20 分鐘，隨後加熱至回流，保持約 6 天。冷卻後，將混合物傾入二氯甲烷（100 毫升）中，濾出催化劑。用水（100 毫升）及鹽水（100 毫升）洗滌濾液，隨後用硫酸鈉乾燥，接著進行急驟層析（矽膠，己烷/乙酸乙酯 20:1），並於二氯甲烷/甲醇中再結晶，得到白色固體（化合物 32）（2.90 公克，63%產率）。



33

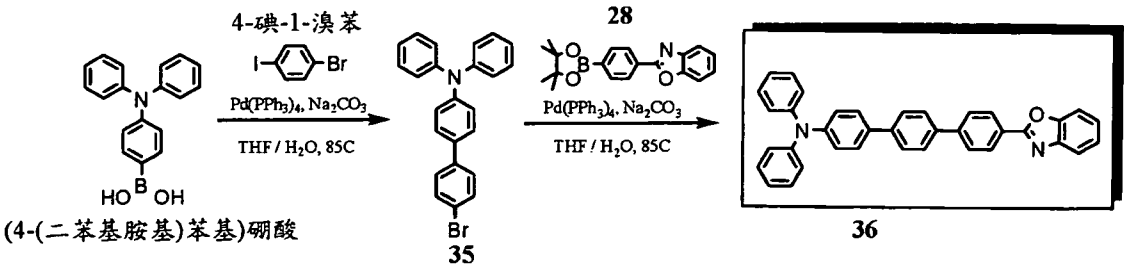
2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)苯並[d]噻唑（化合物 33）：使 32（2.32 公克，7.99 毫莫耳）、雙(頻哪醇基)二硼（2.25 公克，8.79 毫莫耳）、無水乙酸鉀（2.35 公克，23.97 毫莫耳）及 Pd(dppf)Cl₂（0.292 公克，0.399 毫莫耳）於無水 1,4-二噁烷（40 毫升）中之混合物脫氣，並在氫氣下，於約 85°C 加熱所得混合物約 20 小時。冷卻後，將混合物傾入二氯甲烷中，並濾出鹽。真空乾燥濾液，以移除二噁烷，隨後再溶解於二氯甲烷中。依次用水及鹽水洗滌，隨後將所得混合物裝載至矽膠上，並藉由急驟層析法（己烷/二氯甲烷 2:1 至 1:1）純化，得到白色固體（化合物 33）（1.89 公克，90%產率）。

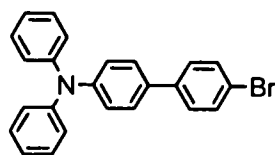


34

化合物 34：使 33（1.48 公克，4.39 毫莫耳）、化合物 22（1.71 公克，4.0 毫莫耳）、碳酸鈉（1.51 公克，14.28 毫莫耳）及 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ （0.139 公克，0.12 毫莫耳）於四氫呋喃/水（24 毫升/14 毫升）中之混合物脫氣 45 分鐘，並在氬氣氛圍下，將所得混合物加熱至回流隔夜。冷卻後，將所得混合物傾入氯仿（300 毫升）中，並加熱以溶解產物。用水（2×200 毫升）及鹽水（200 毫升）洗滌溶液。用硫酸鈉乾燥有機相，並濃縮，沈澱析出固體，過濾，並用甲醇洗滌，得到固體（化合物 34）（1.24 公克，53%產率）。

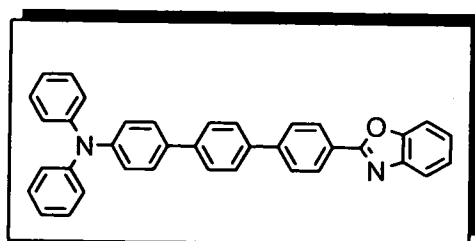
實例 1.13.1





35

4'-溴-N,N-二苯基-[1,1'-聯苯]-4-胺 (35)：使(4-(二苯基胺基)苯基)硼酸 (1.5 公克，5.19 毫莫耳)、4-碘-1-溴苯 (1.33 公克，4.71 毫莫耳)、碳酸鈉 (1.78 公克，16.8 毫莫耳) 及 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.163 公克，0.141 毫莫耳) 於四氫呋喃/水 (28 毫升/17 毫升) 中之混合物脫氣，並在氬氣氛圍下，回流加熱所得混合物隔夜。冷卻後，將混合物傾入二氯甲烷 (150 毫升) 中，隨後用水 (2×150 毫升) 及鹽水 (100 毫升) 洗滌。有機相用硫酸鈉乾燥，用急驟管柱層析法 (矽膠，己烷/乙酸乙酯 50:1) 純化，接著在二氯甲烷/甲醇中再結晶，得到白色固體 (化合物 35) (1.64 公克，87% 產率)。



36

化合物 36：使 35 (1.40 公克，3.5 毫莫耳)、化合物 28 (1.52 公克，3.85 毫莫耳)、碳酸鈉 (1.32 公克、12.5 毫莫耳) 及 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (121 毫克，0.105 毫莫耳) 於四氫

呋喃/水 (21 毫升/12.5 毫升) 中之混合物脫氣，並在氬氣氛圍下，回流加熱所得混合物隔夜。冷卻至室溫後，將所得混合物傾入二氯甲烷 (150 毫升) 中，隨後用水 (150 毫升) 及鹽水 (150 毫升) 洗滌。有機相用硫酸鈉乾燥，吸附於矽膠上，並用急驟管柱層析法 (己烷/乙酸乙酯 5:1 至 2:1，隨後二氯甲烷作為洗脫劑) 純化。收集產物，並由丙酮/己烷再結晶，得到固體 (1.69 公克)。再在二氯甲烷/乙酸乙酯中再結晶，得到固體 (化合物 36) (1.4 公克，68%產率)。

實例 2：OLED 裝置配置及效能

實例 2.1

製造發光裝置：依次在丙酮及 2-丙醇中，利用超音波清潔塗有 ITO 的玻璃基板，於 110°C 烘焙 3 小時，隨後用氧電漿處理 5 分鐘。PEDOT 層：在 3000 轉/分鐘 (rpm) 下，將 PSS (購自 H.C. Starck 公司之 Baytron P) 旋塗至預先清潔並經過氧電漿處理的 (ITO) -基板上，並在 180°C 下退火 10 分鐘，得到約 40 奈米厚度。在以手套箱為主體 (glove-box hosted) 之真空沈積系統中，在 10^{-7} 托 (1 托 = 133.322 帕) 壓力下，首先將 4,4',4''-三(N-咔唑基)三苯胺 (4,4',4''-tri (N-carbazolyl)triphenylamine, TCTA) 以 0.06 奈米/秒之沈積速率沈積於 PEDOT/PSS 層的上部，得到 30 奈米厚的膜。隨後，將深藍色光發射器化合物 17 沈積於 TCTA 的上部，形成 30 奈米厚的膜，隨後沈積 40 奈米厚的 1,3,5- 三 (N- 苯基 苯 並 咪 唑 -2- 基) 苯

(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazol-2-yl)benzene, TPBI) 層，沈積速率均為約 0.06 奈米/秒。接著，分別以 0.005 奈米/秒及 0.2 奈米/秒之沈積速率，依次沈積氟化銫 (CsF) 及鋁。各個別裝置的面積為 0.14 平方公分。利用 ocean optics HR4000 光譜儀量測光譜，並用 Keithley 2400 SourceMeter 及 Newport 2832-C 功率表以及 818 UV 偵測器取得 I-V 光輸出量測值。所有裝置均在填充氮氣之手套箱中操作。

實例 2.2

根據實例 2.1 構造另一裝置 (裝置 B)，但是將淨化合物 17 層沈積於 TCTA 的上面，改為將化合物 17 (99.35%)、三(2-苯基吡啶陰離子)銱(III)錯合物 (tris(2-phenylpyridine anion) iridium (III) complex, Ir(ppy)₃) (0.5%) 與雙(2-苯基喹啉基-N,C2')乙醯丙酮酸銱(III) (bis(2-phenylquinolyl-N,C2')acetylacetonate iridium(III), PQIr) (0.15%) 之混合物共沈積於 TCTA 的上面，形成 15 奈米厚的膜。

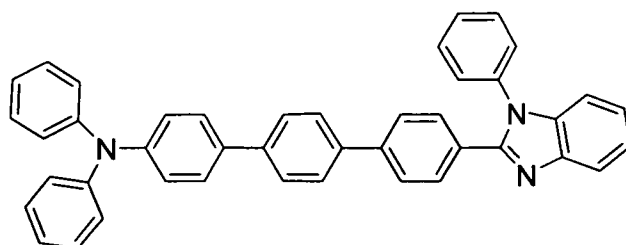
實例 2.3

裝置 C 製造如下：依次在丙酮及 2-丙醇中，利用超音波清潔塗有 ITO 的玻璃基板，於 110°C 烘焙 3 小時，隨後用氧電漿處理 5 分鐘。PEDOT 層：在 3000 轉/分鐘 (rpm) 下，將 PSS (購自 H.C. Starck 公司之 Baytron P) 旋塗至預先清潔並經過氧電漿處理的 (ITO)-基板上，並在 180°C 下退火 10 分鐘，得到約 40 奈米厚度。在以手套箱為主體之真空沈積系統中，在 10^{-7} 托 (1 托=133.322 帕) 壓力下，首先將 4,4'-雙[N-(萘基)-N-苯基-胺基]聯苯 (α -NPD) 以 0.06

奈米/秒之沈積速率沈積於 PEDOT/PSS 層的上部，得到 30 奈米厚的膜。隨後，將深藍色光發射器化合物 23 沈積於 α -NPD 的上部，形成 30 奈米厚的膜，隨後沈積 40 奈米厚的 1,3,5-三(N-苯基苯並咪唑-2-基)苯 (TPBI) 層，沈積速率均為約 0.06 奈米/秒。接著，分別以 0.005 奈米/秒及 0.2 奈米/秒之沈積速率，依次沈積氟化銫及鋁。各個別裝置的面積為 0.14 平方公分。利用 ocean optics HR4000 光譜儀量測光譜，並用 Keithley 2400 SourceMeter 及 Newport 2832-C 功率表以及 818 UV 偵測器取得 I-V 光輸出量測值。所有裝置均在填充氮氣之手套箱中操作。

實例 2.4

根據實例 2.3 構造另一裝置（比較裝置 A），但是將淨化合物 23 層沈積於 α -NPD 的上部，改為將淨：



比較化合物 A

沈積於 α -NPD 的上部，形成 30 奈米厚的膜。

實例 3：裝置效能

實例 3.1

對包括化合物 21 並根據實例 1 及 2 製造之發藍光裝置—裝置 A 進行測試，藉由檢查（1）裝置 A 之發光強度

(裝置之強度[任意單位(a.u.)]隨波長而變化);(2)測定裝置 A 之 CIE 座標;(3)測定裝置 A 之效率(電流密度及亮度隨施加至裝置之電壓而變化;且外量子效率(external quantum efficiency)、功率效率及亮度隨電流密度而變化),來測定裝置之發光品質。所有光譜都是利用 Ocean Optics HR 4000 光譜儀(Ocean Optics, Dunedin, FLA, USA)量測,且 I-V-L 特徵是利用 Keithley 2400 SourceMeter (Keithley Instruments 公司, Cleveland, OH, USA)以及 Newport 2832-C 功率表及 818 UV 偵測器(Newport 公司, Irvine, CA, USA)取得。所有裝置均在填充氮氣之手套箱中操作。裝置(裝置 A)之例示性配置顯示於圖 1 中(裝置結構:PEDOT:PSS/TCTA(30 奈米)/化合物 17(30 奈米)/TPBi(40 奈米)/氟化銫/鋁)。圖 2 顯示裝置 A 之電致發光光譜,以及 CIE 座標。光譜顯示,在 400 奈米與 500 奈米之間存在顯著發射。CIE 座標($X=0.16$; $Y=0.05$)證明發射深藍色光之輻射的純度。此外,如圖 3、4 及 5 所示,裝置 A 亦證明於習知有機發光裝置參數中之功效。由此,化合物 21 已經證明其作為有機發光裝置中發藍光化合物的效用。

實例 3.2

對包括化合物 17、三(2-苯基吡啶)銱(Ir(ppy)_3)及 PQIr 並根據實例 1 及 2 製造之發白光裝置—裝置 B 進行測試,藉由檢查(1)裝置 B 之發光強度(裝置之強度[a.u.]隨波長而變化);(2)測定裝置 B 之 CIE 座標;(3)測定裝置

B 之效率（電流密度及亮度隨施加至裝置之電壓而變化；且外量子效率、功率效率及亮度隨電流密度而變化），來測定裝置之發光品質。所有光譜都是利用 Ocean Optics HR 4000 光譜儀（Ocean Optics, Dunedin, FLA, USA）量測，且 I-V-L 特徵是利用 Keithley 2400 SourceMeter（Keithley Instruments 公司，Cleveland, OH, USA）以及 Newport 2832-C 功率表及 818 UV 偵測器（Newport 公司，Irvine, CA, USA）取得。所有裝置均在填充氮氣之手套箱中操作。裝置（裝置 B）之例示性配置顯示於圖 6 中（裝置結構：PEDOT:PSS/TCTA（30 奈米）/化合物 17：Ir(ppy)₃（0.5%）：Ir(pq)₂acac(PQIr)（0.15%）（15 奈米）/TPBi（40 奈米）/氟化銫/鋁）。圖 7 顯示裝置 B 之電致發光光譜，以及 CIE 座標及 CRI 值。光譜顯示，在 400 奈米與 450 奈米之間、500 奈米與 525 奈米之間以及在 575 奈米與 625 奈米之間存在顯著發射。CIE 座標(X=0.37; Y = 0.37)及顯色指數 77 證明發白光之輻射的純度。此外，如圖 8、9 及 10 所示，裝置 B 亦證明於習知有機發光裝置參數中之功效。由此，化合物 17 已經證明其作為發白光有機發光裝置中發藍光化合物之效用。

實例 3.3

對分別包括化合物 23 及比較化合物 A 並根據實例 2.3 及 2.4 製造之發藍光裝置—裝置 C 及比較裝置 D 進行測試，藉由至少檢查（1）裝置 C 及 D 之發光強度（裝置之強度[a.u.]隨波長而變化）；（2）測定裝置 C 及 D 之效率（電

流密度及亮度隨施加至裝置之電壓而變化；且外量子效率、功率效率及亮度隨電流密度而變化)，來測定裝置之發光品質。所有光譜都是利用 Ocean Optics HR 4000 光譜儀 (Ocean Optics, Dunedin, FLA, USA) 量測，且 I-V-L 特徵是利用 Keithley 2400 SourceMeter (Keithley Instruments 公司, Cleveland, OH, USA) 以及 Newport 2832-C 功率表及 818 UV 偵測器 (Newport 公司, Irvine, CA, USA) 取得。所有裝置均在填充氮氣之手套箱中操作。裝置 (裝置 C 及 D) 之例示性配置顯示於圖 6 中 (裝置 C 結構：PEDOT:PSS/ α -NPD (30 奈米)/化合物 23 (30 奈米)/TPBi (40 奈米)/氟化鈹/鋁；裝置 D 結構：PEDOT:PSS/ α -NPD (30 奈米)/比較化合物 A (30 奈米)/TPBi (40 奈米)/氟化鈹/鋁)。結果提供於表 1 中。

表 1

	發射 波長 (奈米)	電壓 (伏)	電流 (毫 安)	發光 效率 (堪德 拉/安)	功率效 率 (流 明/瓦)	外量 子效 率	LT50 (小時)
比較化 合物 A	457	3.73	1.55	5.16	4.34	3.68%	8.3
化合物 23	470	3.76	0.95	9.28	7.75	6.80%	10

如表 1 所示，裝置 C 證明發光效率是習知有機發光裝置參數之約 2 倍 (9.28 堪德拉/安[裝置 C]，5.16 堪德拉/安[裝置 D])，功率效率是後者之約 2 倍 (7.75 流明/瓦[裝

置 C]，4.34 流明/瓦[裝置 D])，且 EQE 是後者之約 2 倍 (6.80%[裝置 C]，3.68%[裝置 D])。由此，與比較實例 A 比較，**化合物 23** 已經證明其作為發藍光有機發光裝置中發藍光化合物之效用。

熟習此項技術者應瞭解，可在不偏離本發明之精神的情況下，進行各種各樣之修改。因此，應清楚地瞭解，本發明之形式僅為說明性的，且不欲限制本發明之範疇。

【圖式簡單說明】

圖 1 顯示併入式 1 化合物之有機發光裝置的一個實施例。

圖 2 是描述圖 1 之有機發光裝置實施例之電致發光光譜及 CIE 座標的圖。

圖 3 是描述圖 1 之裝置實施例之電流密度(毫安/平方公分)及亮度(堪德拉/平方公尺)隨驅動電壓而變化的圖。

圖 4 是描述圖 1 之有機發光裝置實施例之外量子效率(EQE)隨電流密度而變化的圖。

圖 5 是描述圖 1 之有機發光裝置實施例之發光效率(堪德拉/安)和功率效率(流明/瓦)隨電流密度(毫安/平方公分)而變化的圖。

圖 6 顯示併入式 1 化合物之發白光有機發光裝置的一個實施例。

圖 7 是描述圖 6 之有機發光裝置實施例之電致發光光譜及 CIE 座標的圖。

圖 8 是描述圖 6 之裝置實施例之電流密度(毫安/平方公分)及亮度(堪德拉/平方公尺)隨驅動電壓而變化的圖。

圖 9 是描述圖 6 之有機發光裝置實施例之外量子效率(EQE)隨電流密度而變化的圖。

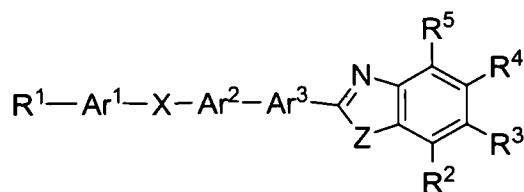
圖 10 是描述圖 6 之有機發光裝置實施例之發光效率(堪德拉/安)和功率效率(流明/瓦)隨電流密度(毫安/平方公分)而變化的圖。

【主要元件符號說明】

無

七、申請專利範圍：

1. 一種以下式表示之化合物，



其中 R^1 是在氧原子處連接之 $C_{1-10}O_{1-4}$ 醚，或 $-R^7-NR^8R^9$ ；

其中 R^7 是單鍵、選擇性經取代之 C_{6-10} 芳氧基或選擇性經取代之 C_{6-10} 芳基；及

R^8 及 R^9 獨立地為選擇性經取代之 C_{6-10} 芳基，其中 R^8 與 R^9 選擇性鍵聯在一起形成包括氮之第三環；

Ar^1 及 Ar^2 獨立地為具有 0、1、2、3 或 4 個獨立地選自 C_{1-3} 烷基及氟之取代基的芳基；

X 是氧；

Ar^3 是具有 0、1、2、3 或 4 個獨立地選自 C_{1-3} 烷基及氟之取代基的芳基；或 Ar^3 是單鍵；

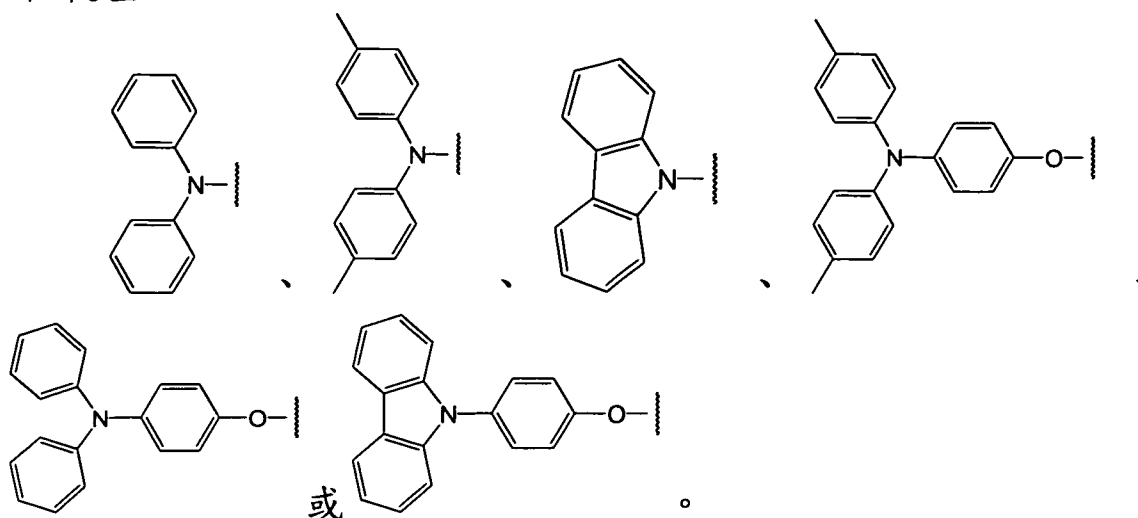
Z 為 NR^6 ，其中 R^6 是選擇性經取代之苯基、選擇性經取代之 $-CH_2-$ 苯基或選擇性經取代之 (4-鹵苯基) 甲基；及

R^2 、 R^3 、 R^4 及 R^5 獨立地為氫、選擇性經取代之 C_{6-30} 芳基、 C_{1-10} 烷基或 C_{1-10} 烷氧基。

2. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中 R^1 是選擇性經取代之咪唑基、選擇性經取代之咪唑基苯氧基、選擇性經取代之二苯基胺、選擇性經取代之二苯基胺基苯氧基或 C_{1-10} 烷氧基。

3. 如申請專利範圍第 2 項所述之化合物，其中 R^1 是

甲氧基、



4. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中 Ar¹、Ar² 及 Ar³ 是選擇性經取代之對-內伸苯基。

5. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中 Ar¹、Ar² 及 Ar³ 中至少一者是未經取代之對-內伸苯基。

6. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中 R⁶ 是選擇性經取代之苯基。

7. 如申請專利範圍第 6 項所述之化合物，其中 R¹ 是選擇性經取代之二苯基胺。

8. 如申請專利範圍第 6 項所述之化合物，其中 R¹ 是選擇性經取代之咪唑基。

9. 如申請專利範圍第 6 項所述之化合物，其中 R¹ 是選擇性經取代之對-咪唑基苯氧基。

10. 如申請專利範圍第 6 項所述之化合物，其中 R¹ 是選擇性經取代之對-二苯基胺基苯氧基。

11. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中 Ar³ 是單鍵。

12. 如申請專利範圍第 11 項所述之化合物，其中 R^1 是選擇性經取代之二苯基胺。

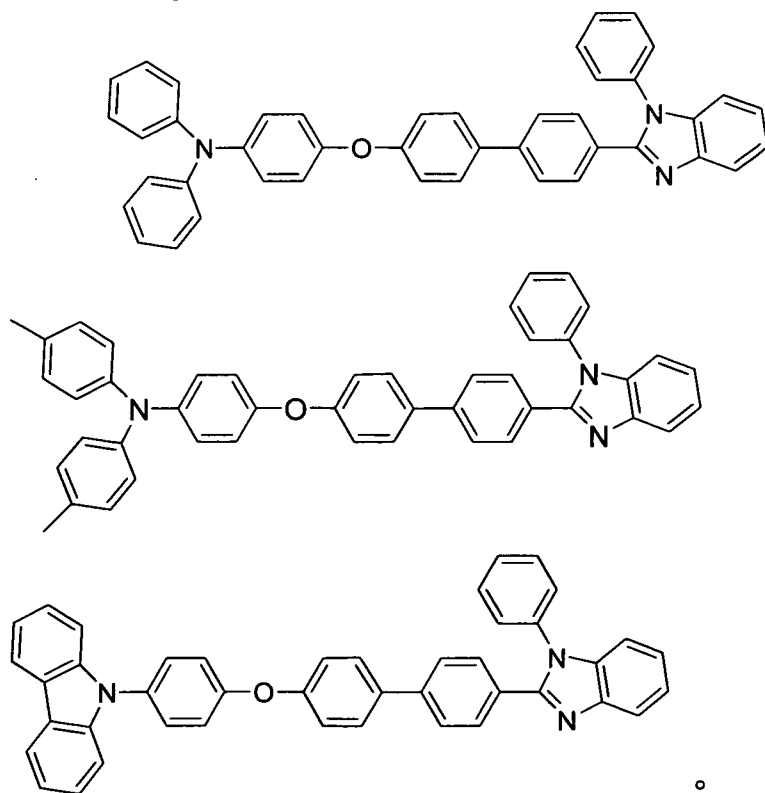
13. 如申請專利範圍第 11 項所述之化合物，其中 R^1 是選擇性經取代之咪唑基。

14. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中 Ar^3 是具有 0、1、2、3 或 4 個獨立地選自 C_{1-3} 烷基及氟之取代基的芳基。

15. 如申請專利範圍第 14 項所述之化合物，其中 R^1 是選擇性經取代之二苯基胺。

16. 如申請專利範圍第 14 項所述之化合物，其中 R^1 是選擇性經取代之咪唑基。

17. 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中所述化合物選自：



及

18. 一種以下式表示之化合物： R^1 -Ar¹-X-Ar²-Ar³-Het，

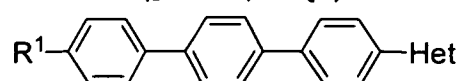
其中 R^1 是 C_{1-10} 烷氧基、經取代呋唑基、經取代二苯基胺基、選擇性經取代之呋唑基苯氧基或選擇性經取代之二苯基胺基苯氧基；

Ar¹ 及 Ar² 獨立地為選擇性經取代之芳基；X 是氧；

Ar³ 是選擇性經取代之芳基；或 Ar³ 是單鍵；及

Het 是選擇性經取代之苯並咪唑基。

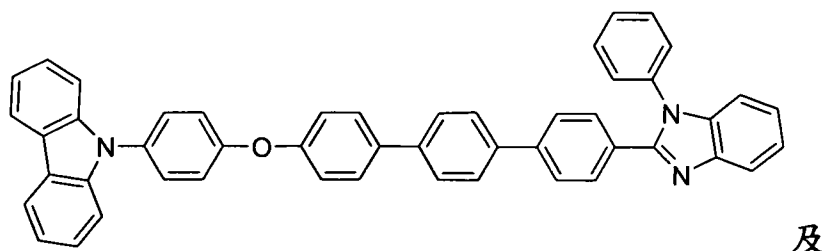
19. 一種以下式表示之化合物，



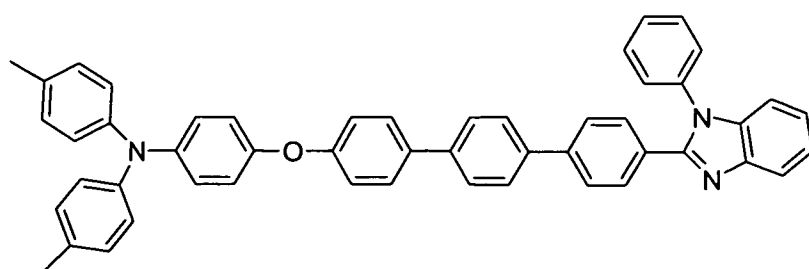
其中 R^1 是選擇性經取代之呋唑基苯氧基或選擇性經取代之二苯基胺基苯氧基；及

Het 是選擇性經取代之苯並咪唑基。

20. 如申請專利範圍第 19 項所述之化合物，其中所述化合物選自：



及



21. 一種發光裝置，其包括：

發光層，其包括如申請專利範圍第 1 項至第 20 項中

任一項所述之化合物。

22. 一種將電位差轉換成光的方法，其包括將包括如申請專利範圍第 1 項至第 20 項中任一項所述之化合物的組成物暴露於電位差，由此產生光。

23. 一種將光轉換成電位差的方法，其包括將包括如申請專利範圍第 1 項至第 20 項中任一項所述之化合物的組成物暴露於光，由此產生電位差。

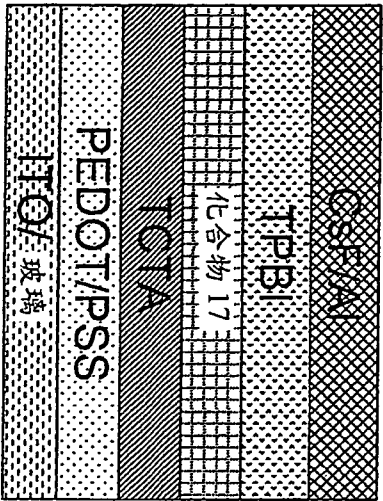


圖 1

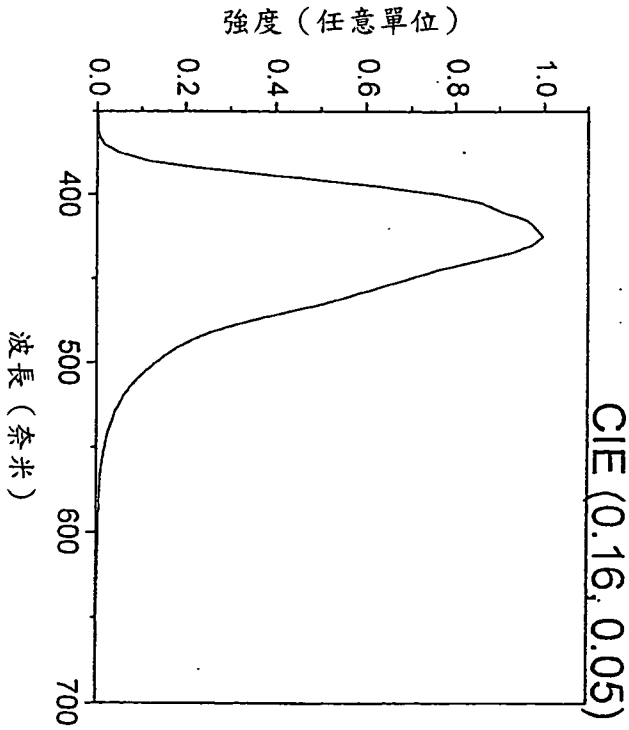


圖 2

圖 3

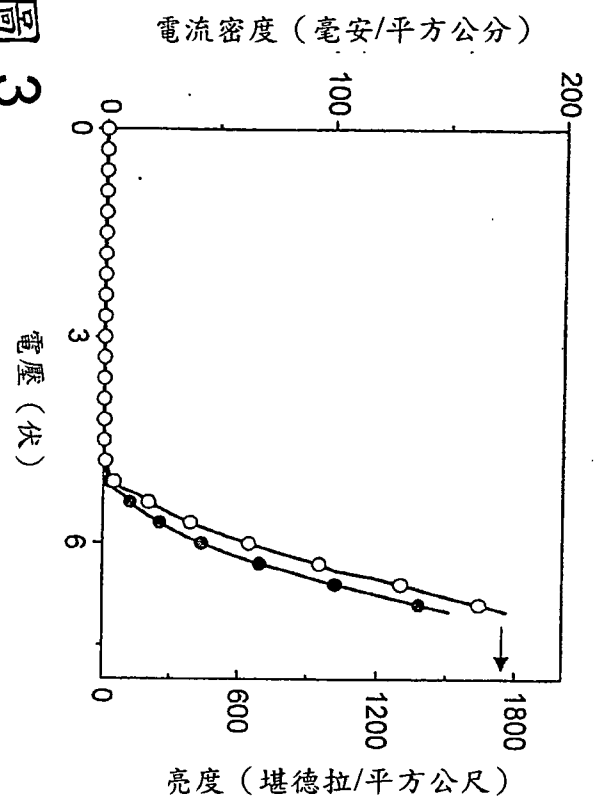


圖 4

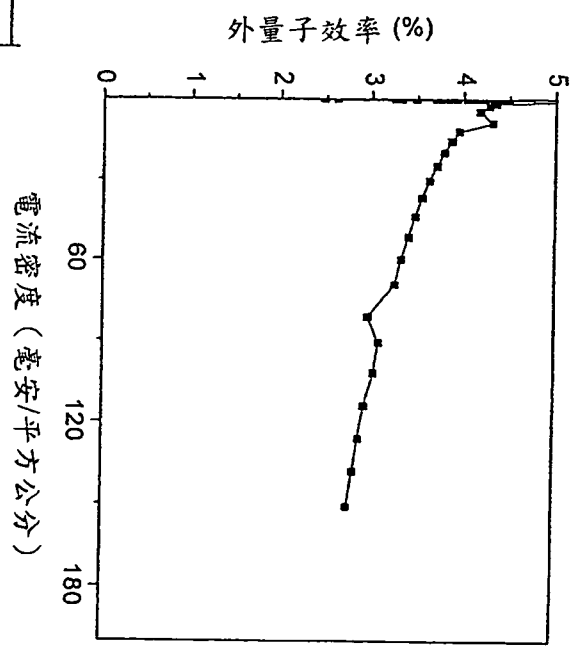
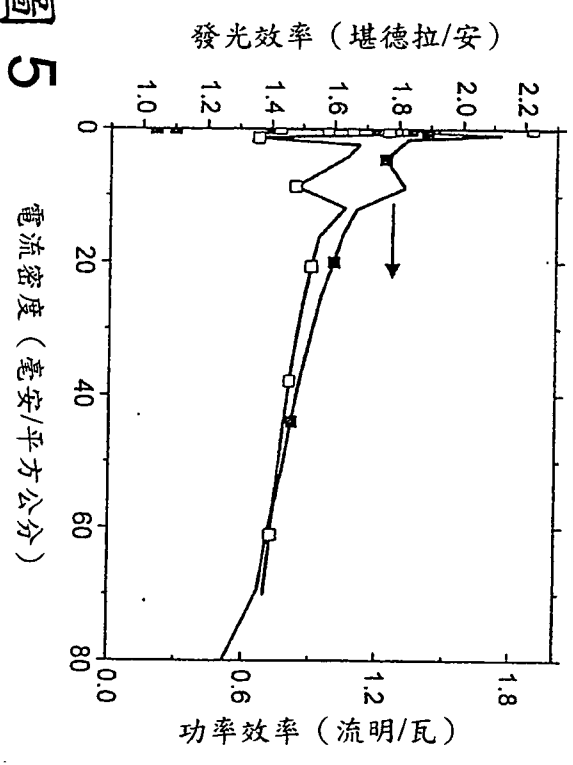


圖 5



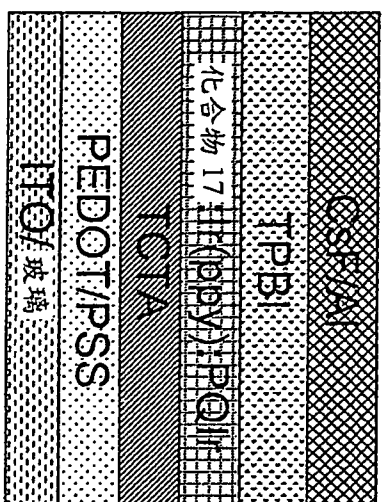


圖 6

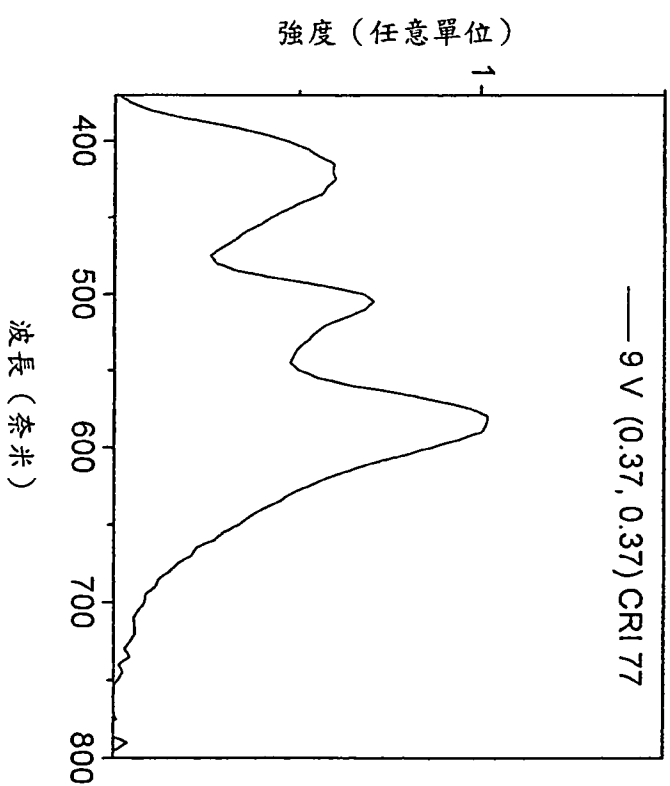


圖 7

圖 8

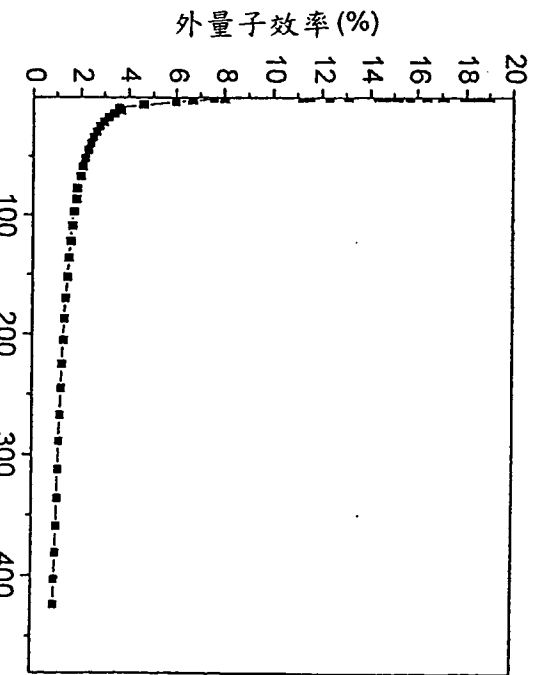
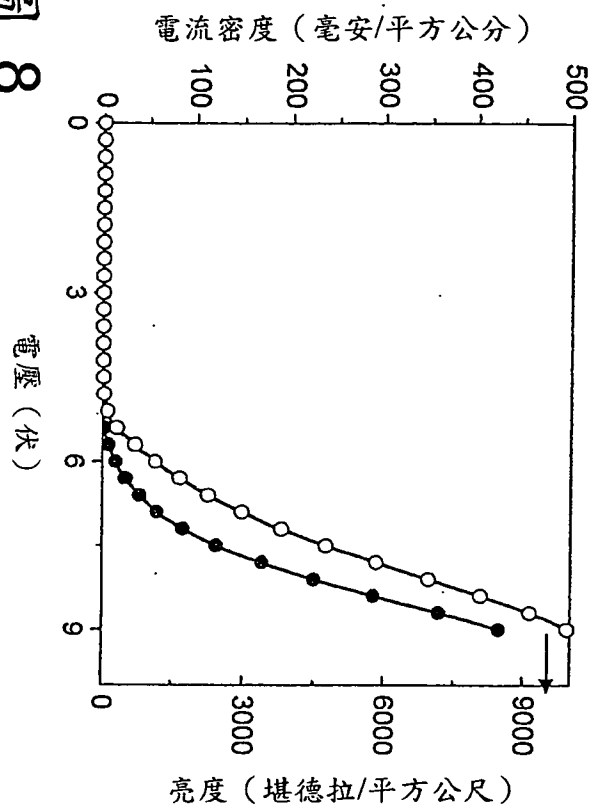


圖 10

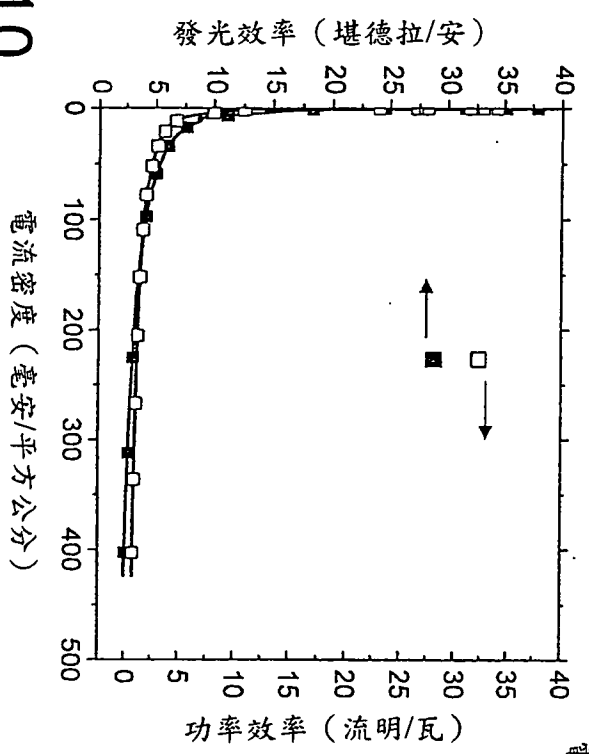


圖 9

電流密度 (毫安/平方公分)

