202212334

(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本 (11)公開編號：TW 202212334 A

(43)公開日： 中華民國 111 (2022) 年 04 月 01 日

(21)申請案號：110122908 (22)申請日： 中華民國 110 (2021) 年 06 月 23 日

(51)Int. Cl.： *C07D405/10 (2006.01)* *C07D409/04 (2006.01)*
C07D409/10 (2006.01) *C07D251/24 (2006.01)*
C07D403/04 (2006.01) *C07D403/10 (2006.01)*
C07D209/86 (2006.01) *C09K11/06 (2006.01)*
H01L51/54 (2006.01)

(30)優先權：2020/06/26 南韓 10-2020-0078447

(71)申請人：南韓商ＬＴ素材股份有限公司 (南韓) LT MATERIALS CO.,LTD. (KR)
南韓

(72)發明人：朴建裕 PARK, GEON-YU (KR) ；盧永錫 NO, YOUNG-SEOK (KR) ；金東駿 KIM, DONG-JUN (KR)

(74)代理人：葉璟宗；卓俊傑

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：14 項 圖式數：3 共 101 頁

(54)名稱

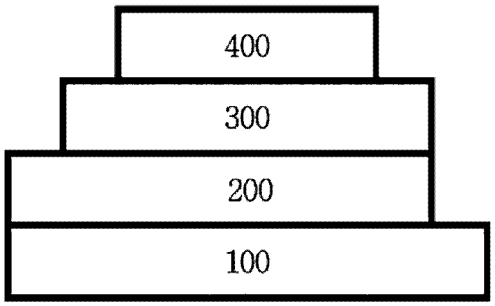
化合物、有機發光元件以及用於形成有機材料層的組合物

(57)摘要

本說明書是關於一種化學式 1 的化合物，以及包含其的有機發光元件及用於形成有機材料層的組合物。

The present specification relates to a compound of Chemical Formula 1, and an organic light emitting device and a composition for forming an organic material layer including the same.

指定代表圖：



符號簡單說明：

100:基底

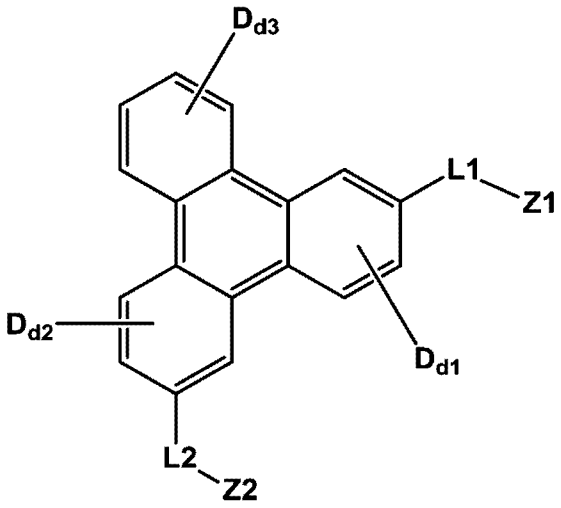
200:陽極

300:有機材料層

400:陰極

【圖1】

特徵化學式：


Dd3
L1
Z1
Dd2
Dd1
L2
Z2

【發明摘要】

【中文發明名稱】化合物以及包括其之有機發光元件

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

【中文】本說明書是關於一種化學式1的化合物，以及包含其的有機發光元件及用於形成有機材料層的組合物。

【英文】The present specification relates to a compound of Chemical Formula 1, and an organic light emitting device and a composition for forming an organic material layer including the same.

【指定代表圖】圖1

【代表圖之符號簡單說明】

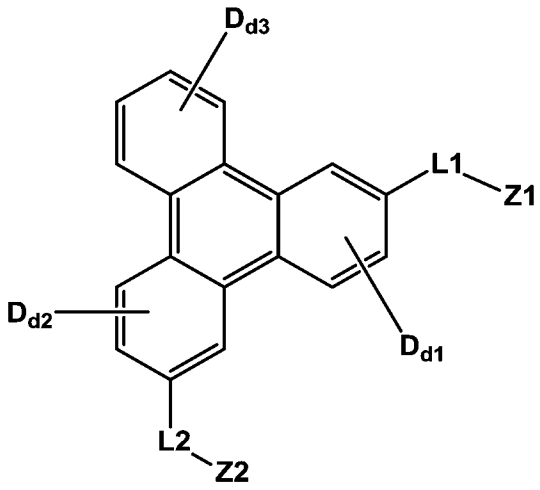
100:基底

200:陽極

300:有機材料層

400:陰極

【特徵化學式】


Dd3
L1
Z1
Dd2
Dd1
L2
Z2

【發明說明書】

【中文發明名稱】化合物以及包括其之有機發光元件

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

【技術領域】

【0001】 本說明書是關於一種化合物以及包含其的有機發光元件。

【0002】 本申請案主張 2020 年 6 月 26 日在韓國智慧財產局申請的韓國專利申請案第 10-2020-0078447 號的優先權及權益，所述申請案的全部內容以引用的方式併入本文中。

【先前技術】

【0003】 電致發光元件為一種類型的自發射顯示元件，且具有優勢，所述優勢為具有廣視角及較快回應速度且具有極佳對比度。

【0004】 有機發光元件具有在兩個電極之間安置有機薄膜的結構。當將電壓施加至具有此類結構的有機發光元件時，自兩個電極注入的電子及電洞在有機薄膜中結合及配對，且在所述電子及電洞湮滅時發光。視需要，有機薄膜可以單層或多層的形式形成。

【0005】 有機薄膜的材料可視需要具有發光功能。舉例而言，可單獨使用能夠形成發光層本身的化合物作為有機薄膜的材料，或亦可使用能夠起主體-摻雜劑類發光層的主體或摻雜劑作用的化合物作為有機薄膜的材料。另外，亦可使用能夠起電洞注入、電洞轉移、電子阻擋、電洞阻擋、電子轉移、電子注入以及類似者作用的

化合物作為有機薄膜的材料。

【0006】 有機薄膜材料的發展不斷要求增強有機發光元件的效能、使用壽命或效率。

【發明內容】

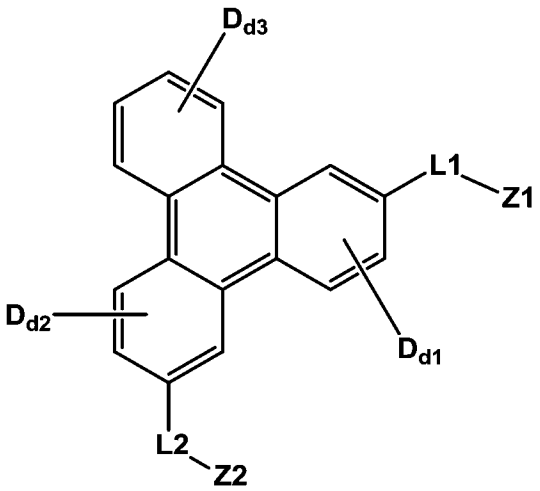
[技術問題]

【0007】 本說明書是關於提供一種化合物以及包含其的有機發光元件。

[技術解決方案]

【0008】 本說明書的一個實施例提供一種以下化學式 1 的化合物。

[化學式 1]



【0009】 在化學式 1 中，

d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，

d3 為 0 至 4 的整數，

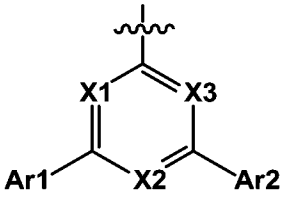
L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取

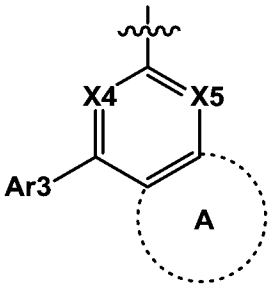
代的矽烷基（silyl group）、經取代或未經取代的芴基（fluorenyl group）或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且

Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基，

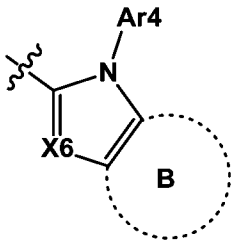
[化學式 1-1]



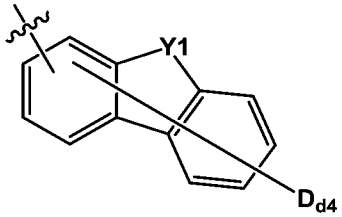
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

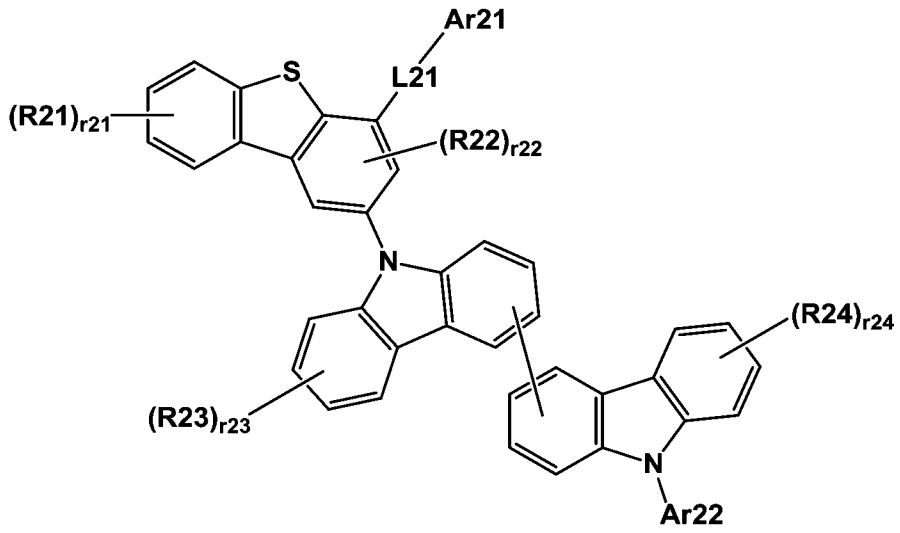
A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環，且

當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

【0010】 另一實施例提供一種有機發光元件，包含：第一電極；第二電極，設置為與第一電極相對；以及有機材料層，設置於第一電極與第二電極之間，其中有機材料層包含一或多種類型的化學式 1 的化合物。

【0011】 另一實施例提供一種用於形成有機材料層的組合物，所述組合物包含化學式 1 的化合物及以下化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[化學式 2]



【0012】 在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

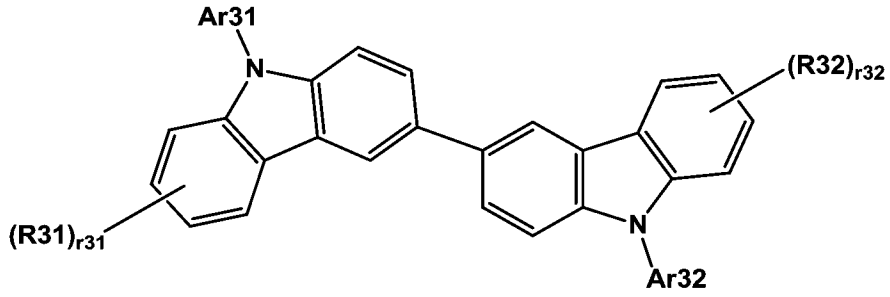
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

[有利效應]

【0013】 本說明書中所描述的化合物可用作有機發光元件的有機材料層的材料。化合物能夠在有機發光元件中起電洞注入材料、電洞轉移材料、發光材料、電子轉移材料、電子注入材料、電荷產生材料以及類似材料的作用。特定而言，化合物可用作有機發光元件的發光層的材料。

【0014】 化學式 1 在聯伸三苯的特定位置處具有兩個取代基，且藉由必須包含含有 N 的雜芳基，可藉由增強電子穩定性及遷移率而在用於元件中時提供優良的發光效率及使用壽命。

【0015】 此外，聯伸三苯及取代聯伸三苯的所有取代基可在化學式 1 中經氘取代，且藉由化學式 1 的化合物經一或多個氘取代，經氘取代的分子的 C-D 鍵的鍵解離能（bond-dissociation energy；BDE）增強，且在用於元件中時可提供優良的使用壽命。

【0016】 當將化學式 1 的化合物及化學式 2 或化學式 3 的化合物一起用作有機發光元件的發光層的材料時，驅動電壓可降低，發光效率可增強，且元件中的使用壽命性質可增強。

【圖式簡單說明】

【0017】

圖 1 至圖 3 為各自示出根據本說明書的一個實施例的有機發光元件的層壓結構的圖式。

【實施方式】

【0018】 下文中，將更詳細地描述本說明書。

【0019】 在本說明書中，某一部分「包含（including）」某些組分的描述意謂能夠更包含其他組分，且除非另有相反的特定陳述，否則不排除其他組分。

【0020】 術語「取代」意謂鍵結至化合物的碳原子的氫原子變成另一取代基，且只要取代位置為氫原子經取代的位置，亦即取代基可取代的位置，則取代的位置不受限制，且當兩個或多於兩個取代基取代時，所述兩個或多於兩個取代基可彼此相同或不同。

【0021】 在本說明書中，「經取代或未經取代」意謂經由下述者所組成的族群中選出的一或多個取代基取代或未經取代：氘、鹵基、

氰基、C1 至 C60 烷基、C2 至 C60 烯基、C2 至 C60 炔基、C3 至 C60 環烷基、C2 至 C60 雜環烷基、C6 至 C60 芳基、C2 至 C60 雜芳基、矽烷基、氧化膦基以及胺基，或經鍵聯由上文所示出的取代基中選出的兩個或多於兩個取代基的取代基取代或未經取代。

【0022】 在本說明書中，「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」意謂氫原子鍵結至碳原子。然而，由於氘（^{2}H）為氫的同位素，因此一些氫原子可為氘。

【0023】 在本申請案的一個實施例中，「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」可意謂可出現取代基的位置可全部為氫或氘。換言之，由於氘為氫的同位素，因此一些氫原子可為作為同位素的氘，且在本文中，氘的含量可為 0%至 100%。

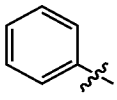
【0024】 在本申請案的一個實施例中，在「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」中，當未明確地排除氘（諸如氘含量為 0%、氫含量為 100%或取代基全部為氫時）時，氫及氘可混合在化合物中。

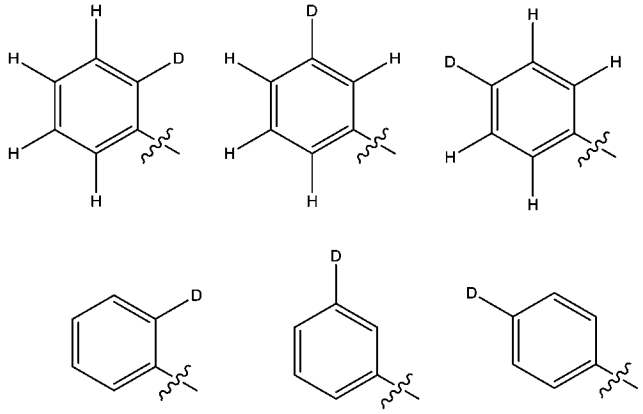
【0025】 在本申請案的一個實施例中，氘為氫的同位素中的一者，為具有由一個質子及一個中子形成的氘核作為原子核的元素，且可表示為氫-2，且元素符號亦可寫作 D 或 ^{2}H。

【0026】 在本申請案的一個實施例中，同位素意謂具有相同原子數（Z）但具有不同質量數（A）的原子，且亦可解釋為具有相同質子數但具有不同中子數的元素。

【0027】 在本申請案的一個實施例中，當將鹼性化合物可具有的取代基的總數目定義為 T1 且將此等取代基中的特定取代基的數目定義為 T2 時，可將特定取代基的含量 T%的含義定義為

T2/T1×100=T%。

【0028】 換言之，在一個實例中，在由  表示的苯基中具有20%的氘含量意謂苯基可具有的取代基的總數目為 5（公式中的T1），且此等取代基中的氘的數目為 1（公式中的 T2）。換言之，在苯基中具有 20%的氘含量可由以下結構式表示。



【0029】 此外，在本申請案的一個實施例中，「具有 0%的氘含量的苯基」可意謂不包含氘原子的苯基，亦即具有 5 個氫原子的苯基。

【0030】 在本說明書中，鹵素可為氟、氯、溴或碘。

【0031】 在本說明書中，烷基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。烷基的碳原子數可為 1 至 60，特定言之 1 至 40，且更特定言之 1 至 20。其特定實例可包含甲基、乙基、丙基、正丙基、異丙基、丁基、正丁基、異丁基、三級丁基、二級丁基、1-甲基-丁基、1-乙基-丁基、戊基、正戊基、異戊基、新戊基、三級戊基、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、三級辛基、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-甲基己基以及類似基團，但不限於此。

【0032】 在本說明書中，烯基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。烯基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 2 至 20。其特定實例可包含乙烯基、1-丙烯基、異丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、3-甲基-1-丁烯基、1,3-丁二烯基、烯丙基、1-苯基乙烯基-1-基、2-苯基乙烯基-1-基、2,2-二苯基乙烯基-1-基、2-苯基-2-(萘基-1-基)乙烯基-1-基、2,2-雙(二苯基-1-基)乙烯基-1-基、芪基、苯乙烯基以及類似基團，但不限於此。

【0033】 在本說明書中，炔基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。炔基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 2 至 20。

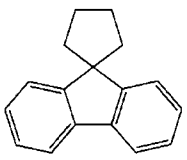
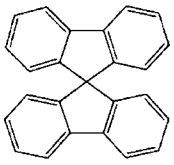
【0034】 在本說明書中，環烷基包含具有 3 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中環烷基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為環烷基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如雜環烷基、芳基以及雜芳基。環烷基的碳基團數可為 3 至 60，特定言之 3 至 40，且更特定言之 5 至 20。其特定實例可包含環丙基、環丁基、環戊基、3-甲基環戊基、2,3-二甲基環戊基、環己基、3-甲基環己基、4-甲基環己基、2,3-二甲基環己基、3,4,5-三甲基環己基、4-三級丁基環己基、環庚基、環辛基以及類似基團，但不限於此。

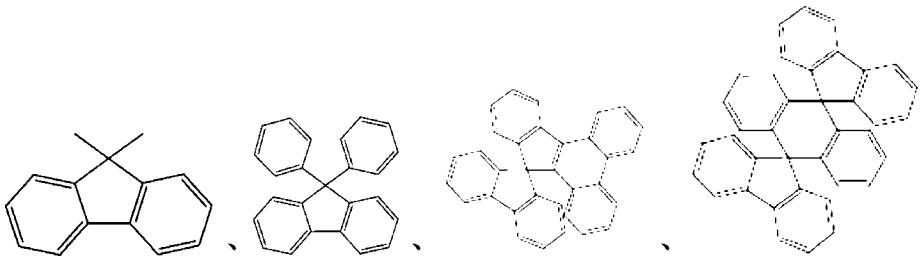
【0035】 在本說明書中，雜環烷基包含 O、S、Se、N 或 Si 作為雜

原子，包含具有 2 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中雜環烷基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為雜環烷基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、芳基以及雜芳基。雜環烷基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 3 至 20。

【0036】 在本說明書中，芳基包含具有 6 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中芳基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為芳基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、雜環烷基以及雜芳基。芳基包含螺環基團。芳基的碳原子數可為 6 至 60，特定言之 6 至 40，且更特定言之 6 至 25。當芳基為雙環或高於雙環時，碳原子數可為 8 至 60、8 至 40 或 8 至 30。芳基的特定實例可包含苯基、聯苯基、三苯基、萘基、蒽基、屈基、菲基、苝基、苯蒽基、聯伸三苯基、丙烯合萘基、芘基、稠四苯基、稠五苯基、苯基、茚基、芴基、苯并芴基、螺聯芴基、2,3-二氫-1H-茚基、其稠環基團以及類似基團，但不限於此。

【0037】 在本說明書中，芳基可經取代，且相鄰取代基可彼此鍵結以形成環。

【0038】 當芳基經取代時，可包含  、  、



以及類似基團，然而，結構不限於此。

【0039】 在本說明書中，雜芳基包含 O、S、SO_2、Se、N 或 Si 作為雜原子，包含單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中雜芳基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為雜芳基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、雜環烷基以及芳基。雜芳基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 3 至 25。當雜芳基為雙環或高於雙環時，碳原子數可為 4 至 60、4 至 40 或 4 至 25。雜芳基的特定實例可包含吡啶基、吡咯基、嘧啶基、噠嗪基、呋喃基、噻吩基（thiophene group）、咪唑基、吡唑基、噁唑基、異噁唑基、噻唑基、異噻唑基、三唑基、呋呫基、噁二唑基、噻二唑基、二噻唑基、四唑基、哌喃基、硫代哌喃基、二嗪基、噁嗪基、噻嗪基、二氧基（dioxynyl group）、三嗪基、四嗪基、喹啉基、異喹啉基、喹唑啉基、異喹唑啉基、喹嗪啉基（qninozolinyl group）、萘啶基、吖啶基、啡啶基、咪唑并吡啶基、二氮雜萘基、三吖茚基、吲哚基、吲哚嗪基、苯并噻唑基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻吩基、苯并呋喃基、二苯并噻吩基、二苯并呋喃基、咔唑基、苯并咔唑基、二苯并咔唑基、啡嗪基、二苯并矽羅基、螺二(二苯并矽羅)、二氫啡嗪基（dihydrophenazinyl group）、啡噁嗪基、啡基（phenanthridyl group）、咪唑并吡啶基、噻吩基（thienyl

group）、吲哚并[2,3-a]咔唑基、吲哚并[2,3-b]咔唑基、吲哚啉基、10,11-二氫-二苯并[b,f]氮呯基、9,10-二氫吖啶基、啡噁嗪基、啡噻嗪基、呫噁嗪基、萘吲啶基、啡啉基、苯并[c][1,2,5]噻二唑基、5,10-二氫苯并[b,e][1,4]氮雜矽啉基、吡唑并[1,5-c]喹唑啉基、吡啶并[1,2-b]吲唑基、吡啶并[1,2-a]咪唑并[1,2-e]吲哚啉基、苯并呋喃并[2,3-d]嘧啶基、苯并噻吩并[2,3-d]嘧啶基、苯并呋喃并[2,3-a]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-a]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-a]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-a]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-a]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-a]咔唑基、苯并呋喃并[2,3-b]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-b]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-b]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-b]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-b]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-b]咔唑基、苯并呋喃并[2,3-c]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-c]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-c]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-c]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-c]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-c]咔唑基、1,3-二氫茚并[2,1-b]咔唑基、5,11-二氫茚并[1,2-b]咔唑基、5,12-二氫茚并[1,2-c]咔唑基、5,8-二氫茚并[2,1-c]咔唑基、7,12-二氫茚并[1,2-a]咔唑基、11,12-二氫茚并[2,1-a]咔唑基以及類似基團，但不限於此。

【0040】 在本說明書中，矽烷基為包含 Si，使 Si 原子直接鍵聯為自由基的取代基，且由-Si(R101)(R102)(R103)表示。R101 至 R103 彼此相同或不同，且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。矽烷基之特定實例可包含三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三級丁基二甲基矽烷基、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、苯基矽烷基以及類似基團，

但不限於此。

【0041】 在本說明書中，氧化膦基由-P(=O)(R104)(R105)表示，且R104 與 R105 彼此相同或不同且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。特定言之，氧化膦基可經烷基或芳基取代，且作為烷基或芳基，上文所描述的實例可適用。氧化膦基的實例可包含氧化二甲基膦基、氧化二苯基膦基、氧化二萘基膦基以及類似基團，但不限於此。

【0042】 在本說明書中，胺基由-N(R106)(R107)表示，且 R106 與 R107 彼此相同或不同且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。胺基可由下述者所組成的族群中選出：$-NH_2$、單烷基胺基、單芳基胺基、單雜芳基胺基、二烷基胺基、二芳基胺基、二雜芳基胺基、烷基芳基胺基、烷基雜芳基胺基以及芳基雜芳基胺基，且儘管碳原子數不受其特定限制，但較佳為 1 至 30。胺基的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、二聯苯胺基、蒽胺基（anthracenylamine group）、9-甲基-蒽胺基、二苯胺基、苯基萘胺基、二甲苯胺基（ditolylamine group）、苯基甲苯胺基、三苯胺基、聯苯萘胺基、苯基聯苯胺基、聯苯芴胺基、苯基聯伸三苯基胺基（phenyltriphenylenylamine group）、聯苯基聯伸三苯基胺基（biphenyltriphenylenylamine group）以及類似基團，但不限於此。

【0043】 在本說明書中，除伸芳基為二價基團以外，上文所描述的芳基的實例可適用於伸芳基。

【0044】 在本說明書中，除伸雜芳基為二價基團以外，上文所描述的雜芳基的實例可適用於伸雜芳基。

【0045】 本說明書的一個實施例提供一種由化學式 1 表示的化合物。

【0046】 在本說明書的一個實施例中，d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，且 d3 為 0 至 4 的整數。

【0047】 在本說明書的一個實施例中，d1、d2 以及 d3 為 0。

【0048】 在本說明書的一個實施例中，d1 及 d2 為 3，且 d3 為 4。

【0049】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基。

【0050】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 伸雜芳基。

【0051】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C20 伸雜芳基。

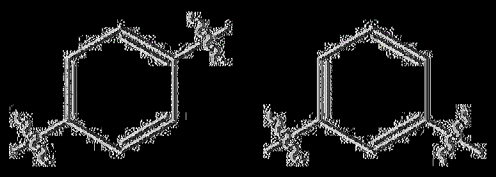
【0052】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基。

【0053】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

【0054】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的伸苯基。

【0055】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，

且各自獨立地為直接鍵或由以下結構中選出的任一者。



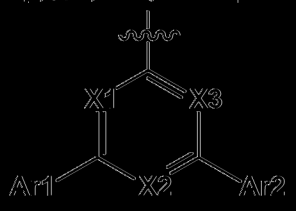
[0056] 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或伸苯基。當 L1 及 L2 為伸苯基時，聯伸三苯與 Z1 或聯伸三苯與 Z2 可在對位或間位處鍵結，其藉由減小分子之間的位阻而有效地增大分子穩定性。

[0057] 在本說明書的一個實施例中，L1 及 L2 可為直接鍵。

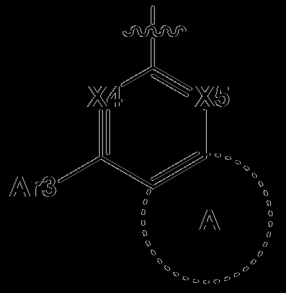
[0058] 在本說明書的一個實施例中，L1 及 L2 中的任一者為直接鍵，且另一者可為經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

[0059] 在本說明書的一個實施例中，Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芳基或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且 Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基。

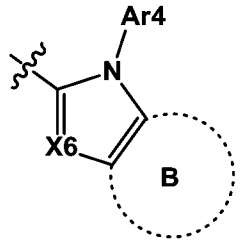
[化學式 1-1]



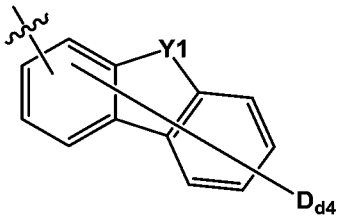
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



【0060】 在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，且

A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環。

【0061】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 至 X3 各自為 N 或 CR，且 X1 至 X3 中的至少一者為 N。

【0062】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 至 X3 可為 N。

【0063】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 及 X2 為

N，X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0064】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 及 X3 為 N，X2 為 CR，且 R 可為氫。

【0065】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 為 N，X2 及 X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0066】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X2 為 N，X1 及 X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0067】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X3 為 N，X1 及 X2 為 CR，且 R 可為氫。

【0068】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0069】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0070】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C40 雜芳基。

【0071】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0072】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯

苯基、經取代或未經取代的芴基、經取代或未經取代的二苯并呋喃基、經取代或未經取代的二苯并噻吩基或經取代或未經取代的咔唑基。

【0073】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為未經取代或經氘取代的苯基、聯苯基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基、9,9′-螺二[芴]、經取代或未經取代的二苯并呋喃基、經取代或未經取代的二苯并噻吩基或經取代或未經取代的咔唑基。

【0074】 當化學式 1-1 的 Ar1 或 Ar2 為經取代或未經取代的咔唑基時，鍵結位置為吡啶環的氮或苯環的碳。

【0075】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 X4 及 X5 各自為 N 或 CR，且 X4 及 X5 中的至少一者為 N。

【0076】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 X4 及 X5 為 N。

【0077】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環。

【0078】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

【0079】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的苯環、經取代或未經取代的苯并呋喃環或經取代或未經取代的苯并噻吩環。

【0080】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為苯環、

苯并呋喃環或苯并噻吩環。

【0081】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0082】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0083】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的苯基。

【0084】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為苯基。

【0085】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 X6 為 N。

【0086】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環。

【0087】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環。

【0088】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的苯環。

【0089】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為苯環。

【0090】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0091】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0092】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的苯基。

【0093】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為苯基。

【0094】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 O、S

或 NR′。

【0095】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 可為 O。

【0096】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 可為 S。

【0097】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0098】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0099】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的苯基。

【0100】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 d4 為 0 至 7 的整數。

【0101】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 d4 為 0 或 7。

【0102】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-1 表示的雜芳基。

【0103】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-2 表示的雜芳基。

【0104】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-3 表示的雜芳基。

【0105】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

【0106】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、

經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-4 表示的雜芳基。

【0107】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為經取代或未經取代的矽烷基或經取代或未經取代的芴基。

【0108】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為未經取代或經芳基取代的矽烷基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基，或 9,9′-螺二[芴]。

【0109】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代的多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

【0110】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代的雙環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的雙環雜環。

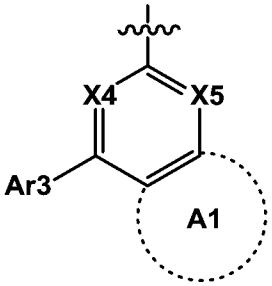
【0111】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代且包含 O 或 S 的雙環雜環。

【0112】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為苯并呋喃環或苯并噻吩環。

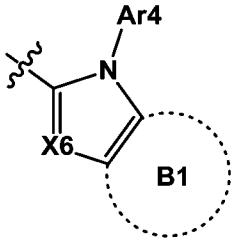
【0113】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為由化學式 1-4 表示的雜芳基。

【0114】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由以下化學式 1-1-1 至化學式 1-1-3 中的任一者表示的雜芳基。

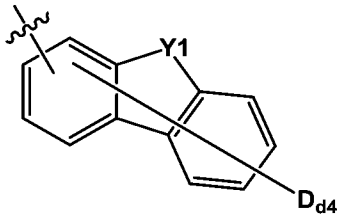
[化學式 1-1-1]



[化學式 1-1-2]



[化學式 1-1-3]



【0115】 在化學式 1-1-1 至化學式 1-1-3 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X4 及 X6 各自為 N 或 CR，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

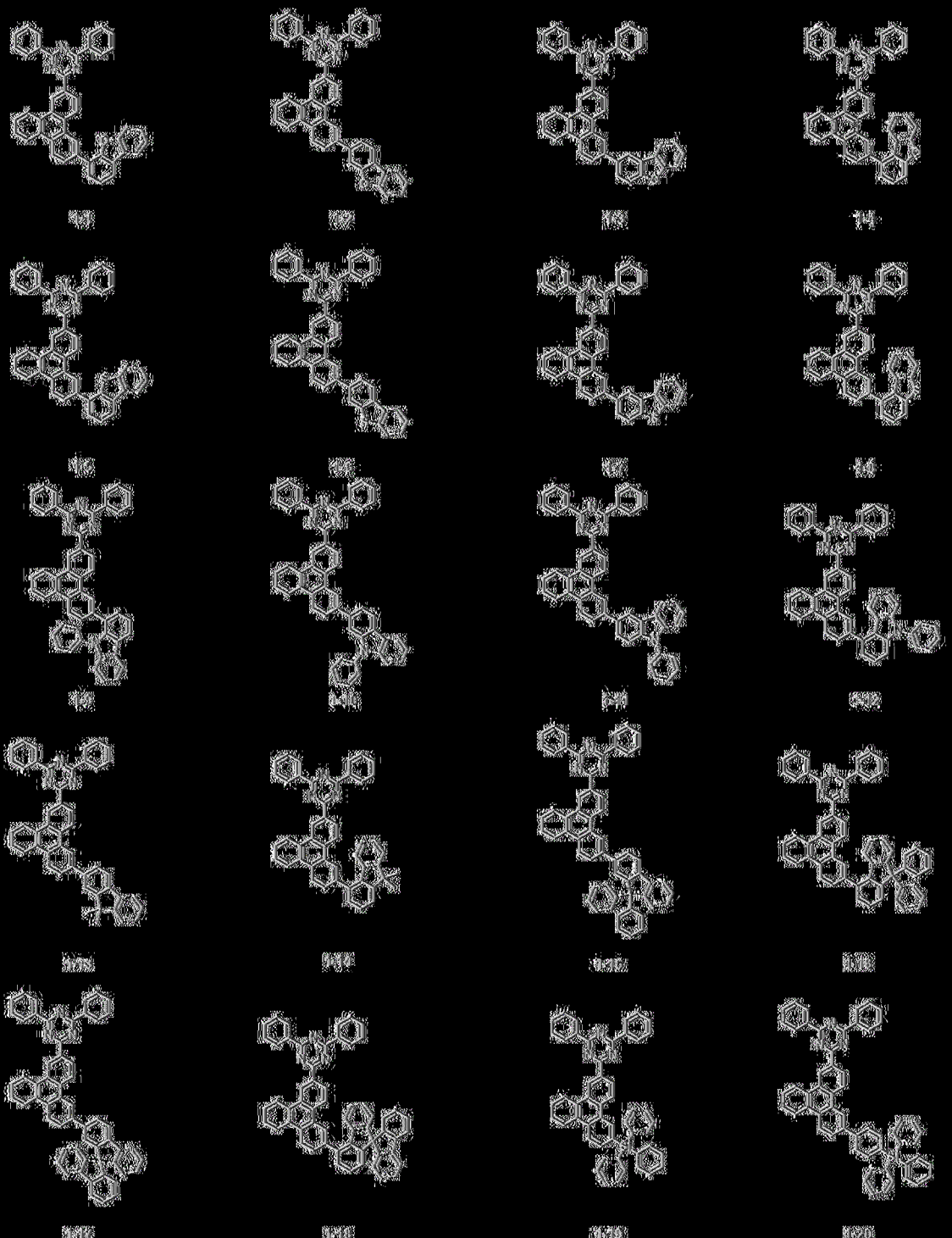
Y1 為 O、S 或 NR′，

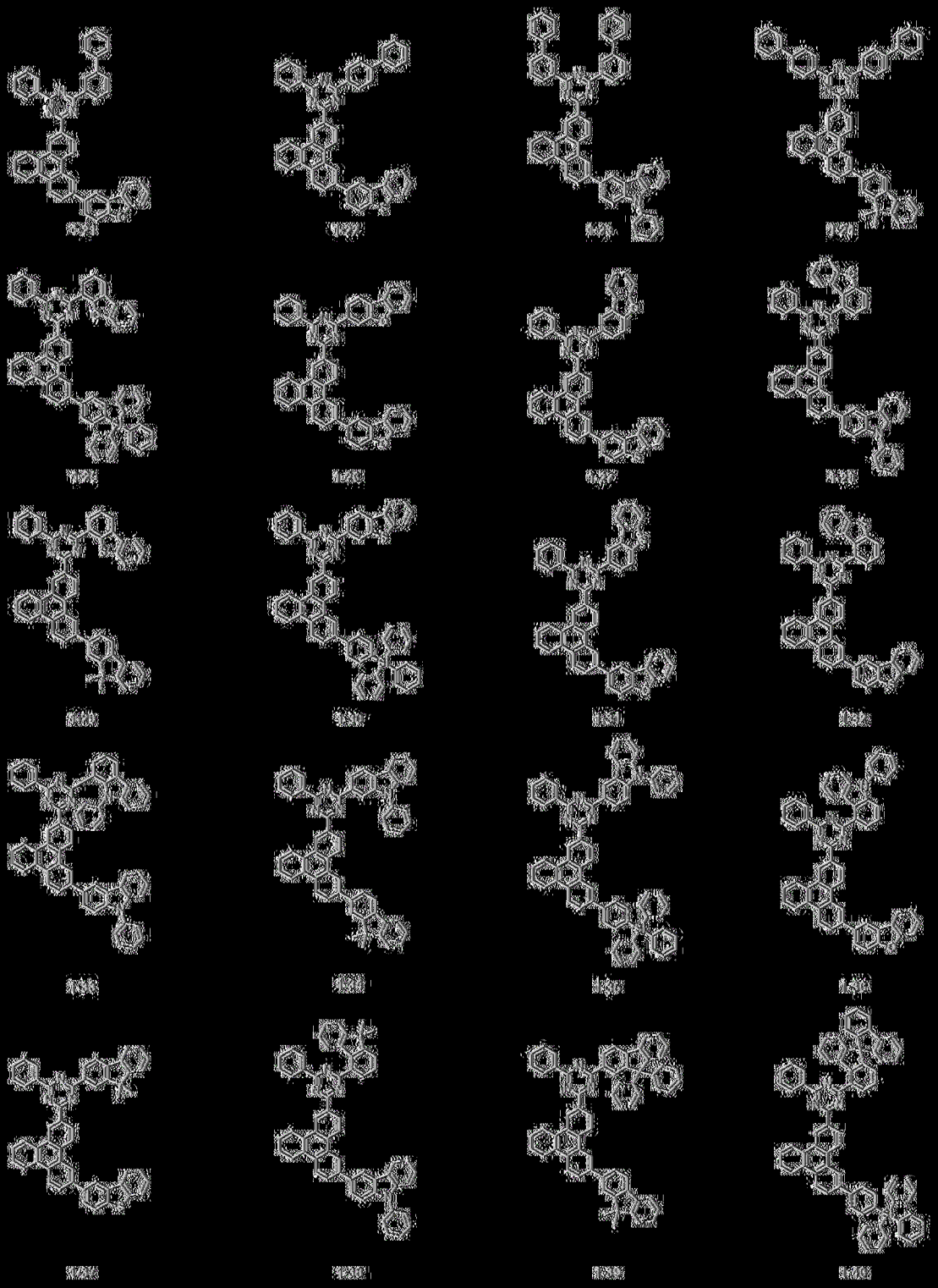
R、R′、Ar3 以及 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至

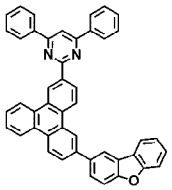
C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，且

A1 及 B1 各自獨立地為經取代或未經取代的多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

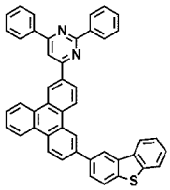
[0116] 在本說明書的一個實施例中，化學式 1 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。



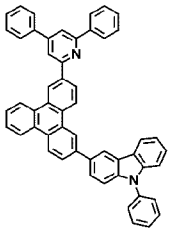




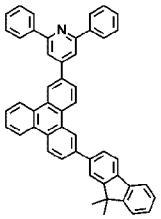
1-41



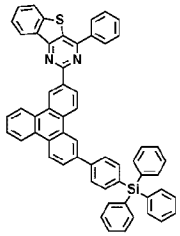
1-42



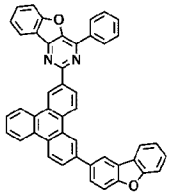
1-43



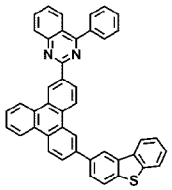
1-44



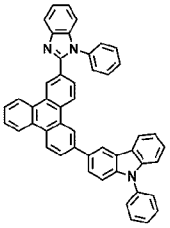
1-45



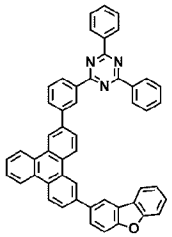
1-46



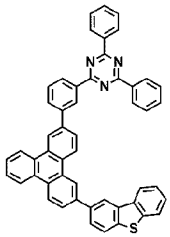
1-47



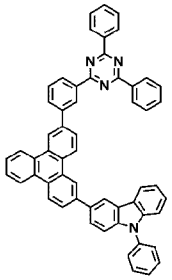
1-48



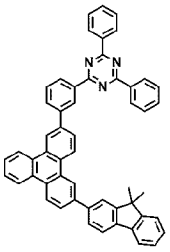
1-49



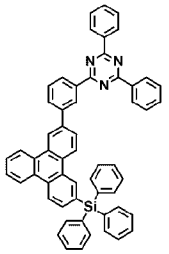
1-50



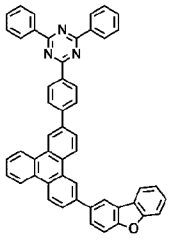
1-51



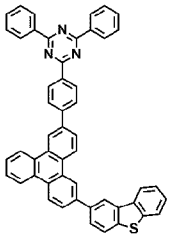
1-52



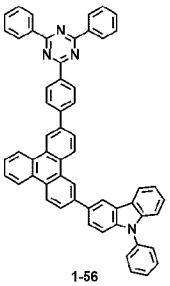
1-53



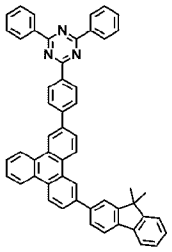
1-54



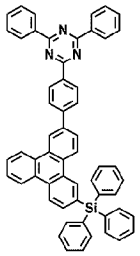
1-55



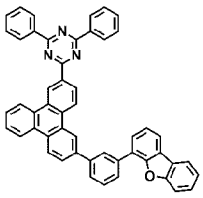
1-56



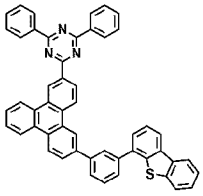
1-57



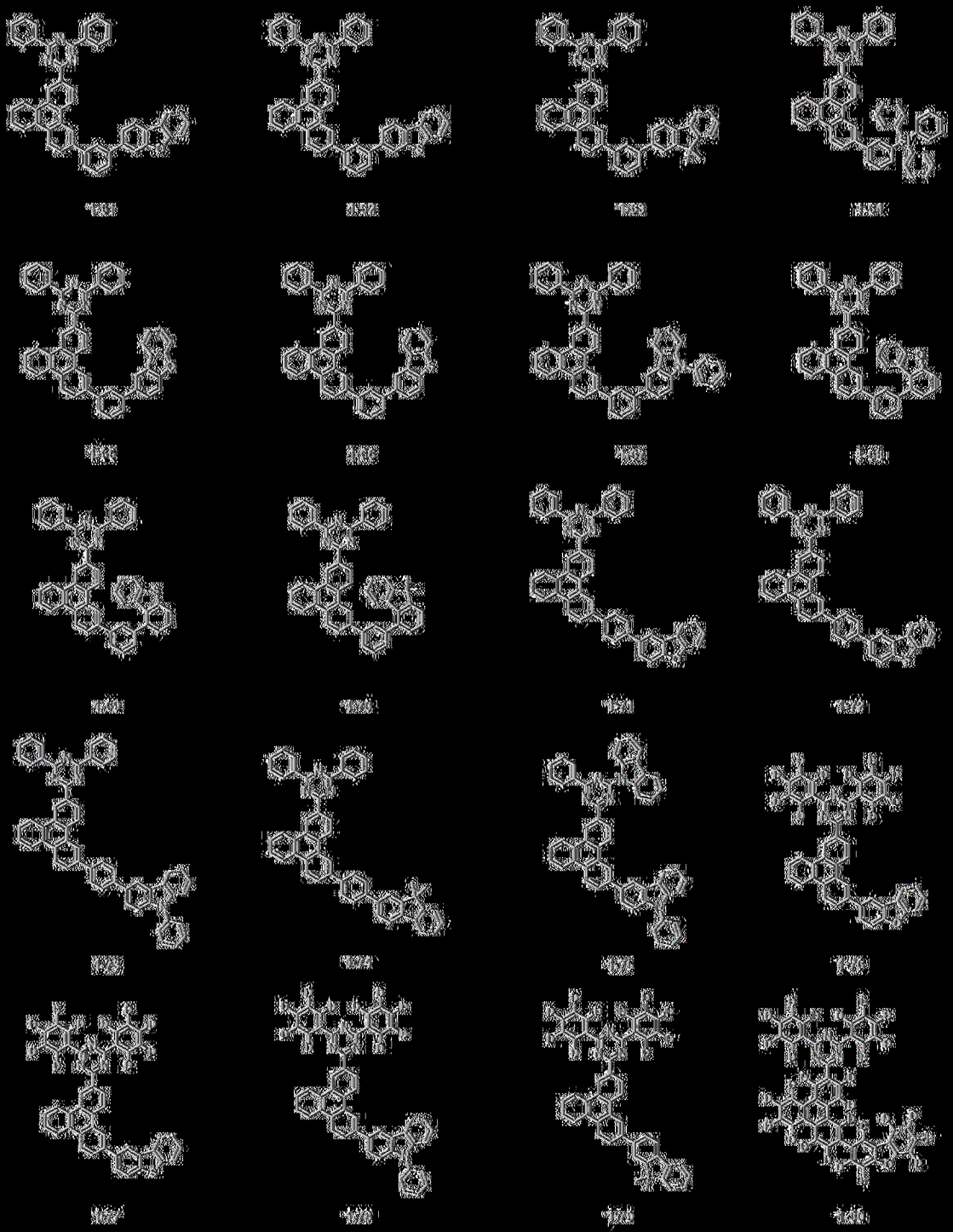
1-58

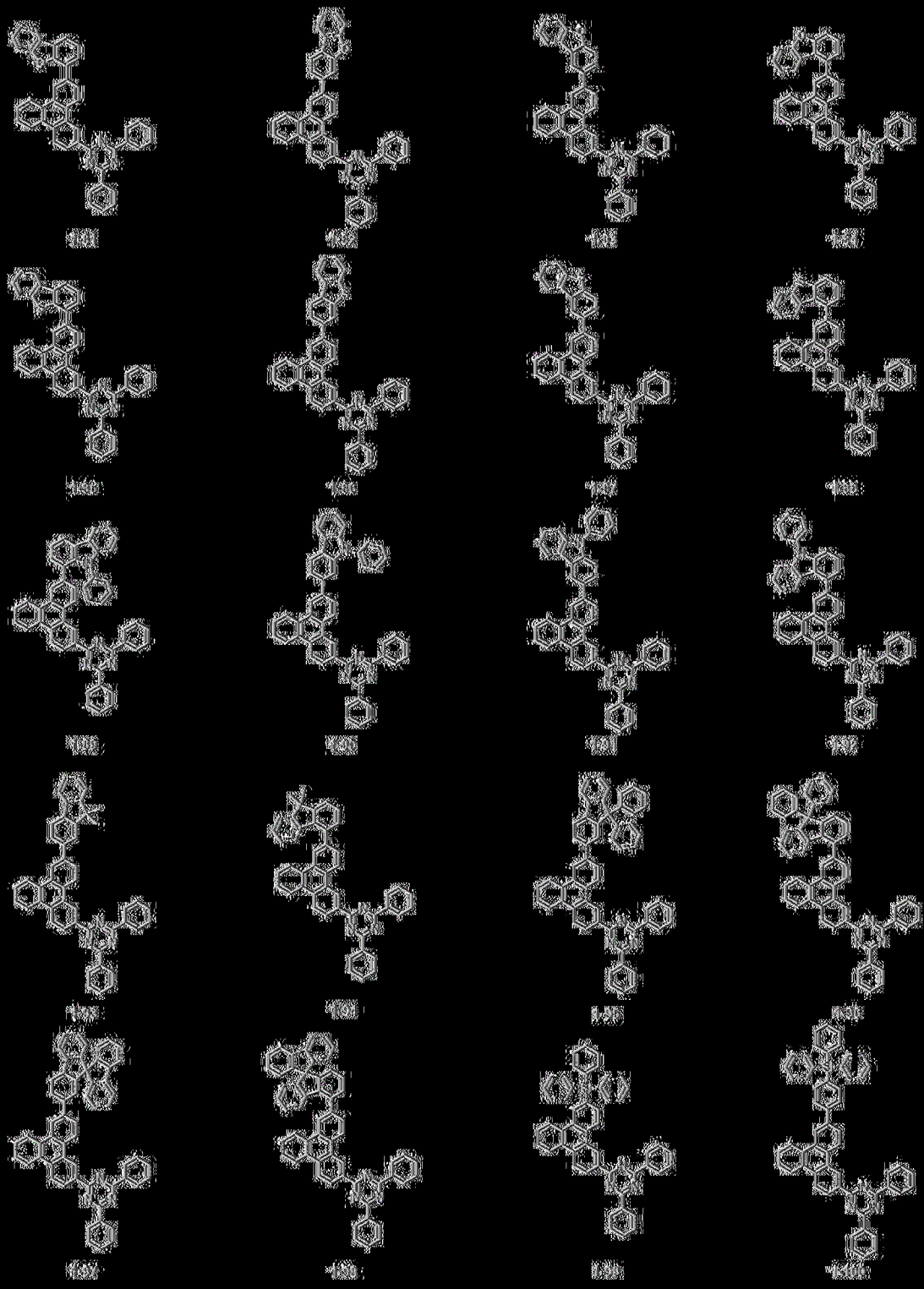


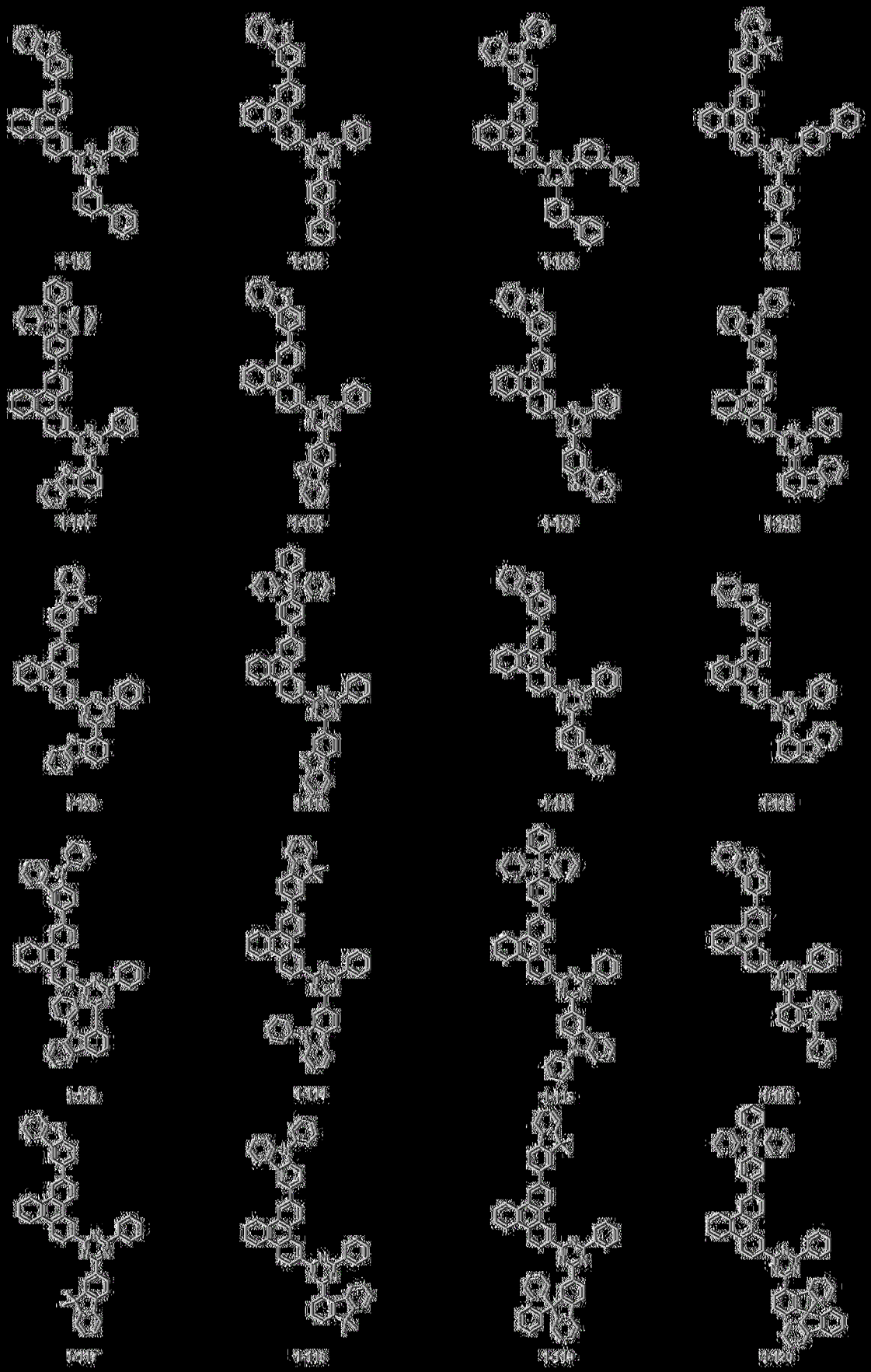
1-59

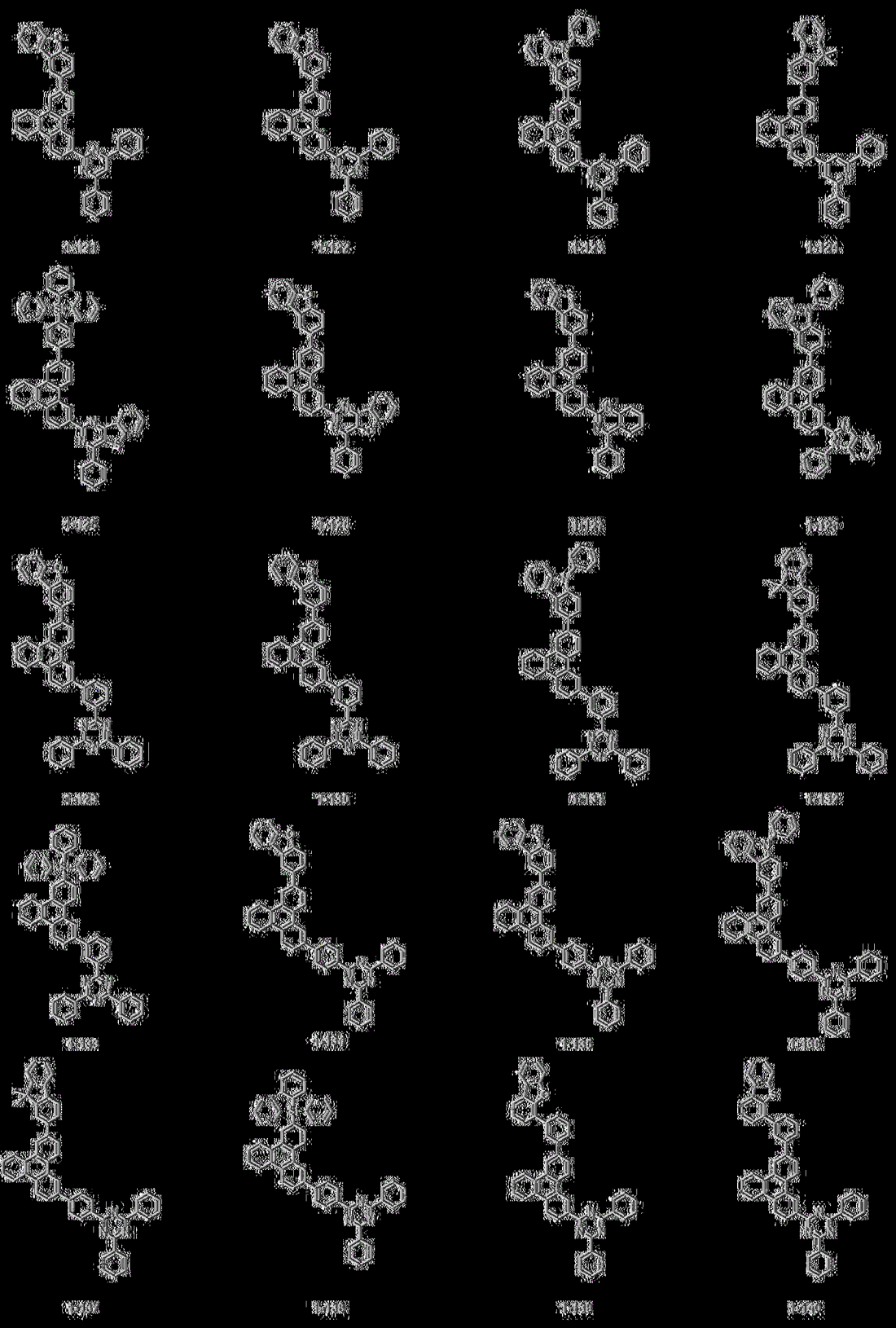


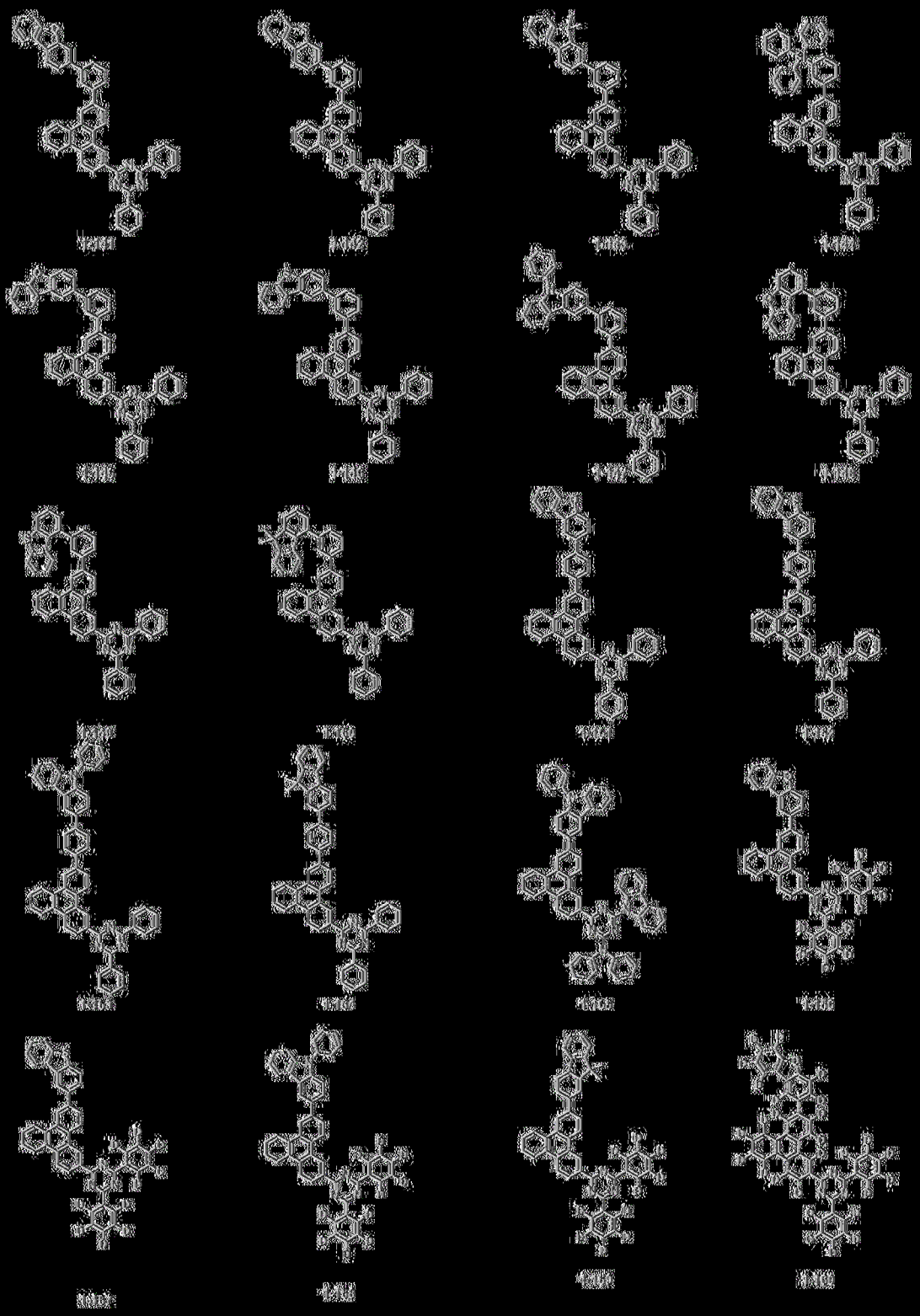
1-60











[0117] 另外，藉由將各種取代基引入至化學式 1 的結構，可合成具有所引入的取代基的獨特性質的化合物。舉例而言，藉由將通常用作用於製造有機發光元件的電洞注入層材料、電洞轉移層材料、發光層材料、電子轉移層材料以及電荷產生層材料的取代基引

入至核心結構，可合成符合各有機材料層所需條件的材料。

【0118】 另外，藉由將各種取代基引入至化學式 1 的結構，可精細控制能帶隙，且同時，強化有機材料之間的界面處的性質，且材料應用可變得多樣化。

【0119】 本說明書的一個實施例提供一種有機發光元件，包含：第一電極；第二電極；以及一或多個有機材料層，設置於第一電極與第二電極之間，其中有機材料層的一或多個層包含一或多種類型的化學式 1 的化合物。

【0120】 在本說明書的一個實施例中，有機材料層的一或多個層包含一種類型的化學式 1 的化合物。

【0121】 在本說明書的一個實施例中，第一電極可為陽極，且第二電極可為陰極。

【0122】 在本說明書的另一實施例中，第一電極可為陰極，且第二電極可為陽極。

【0123】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為藍色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作藍色有機發光元件的材料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於藍色有機發光元件的發光層中。

【0124】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為綠色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作綠色有機發光元件的材料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於綠色有機發光元件的發光層中。

【0125】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為紅色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作紅色有機發光元件的材

料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於紅色有機發光元件的發光層中。

【0126】 除使用上文所描述的化合物形成一或多個有機材料層以外，本說明書的有機發光元件可使用常用有機發光元件製造方法及材料來製造。

【0127】 當製造有機發光元件時，可使用溶液塗佈方法以及真空沈積方法使化合物形成為有機材料層。在本文中，溶液塗佈方法意謂旋塗、浸塗、噴墨印刷、網板印刷、噴霧法、滾塗法以及類似方法，但不限於此。

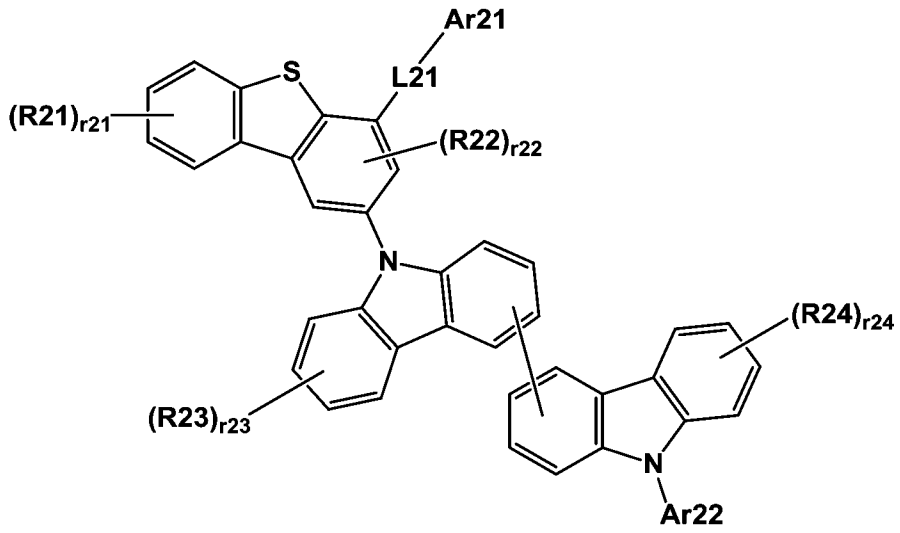
【0128】 本說明書的有機發光元件的有機材料層可以單層結構形成，但可以其中兩個或多於兩個有機材料層層壓的多層結構形成。舉例而言，本揭露的有機發光元件可具有包含電洞注入層、電洞轉移層、發光層、電子轉移層、電子注入層以及類似層作為有機材料層的結構。然而，有機發光元件的結構不限於此，且可包含更少數目的有機材料層。

【0129】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，且發光層可包含化學式 1 的化合物。

【0130】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，發光層包含主體，且主體可包含化學式 1 的化合物。

【0131】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，且除了化學式 1 的化合物以外，發光層可更包含以下化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[化學式 2]



【0132】 在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

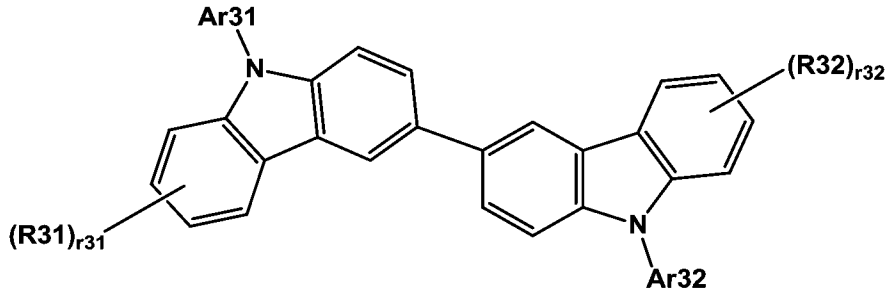
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

【0133】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0134】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0135】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0136】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘或經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0137】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 為氫或氘。

【0138】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 為氫。

【0139】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 伸雜芳基。

【0140】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基。

【0141】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

【0142】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的伸苯基。

【0143】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或伸苯基。

【0144】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C40 雜芳基。

【0145】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0146】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22

各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的 C2 至 C30 雜芳基。

【0147】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的芴基、經取代或未經取代的二苯并呋喃基或經取代或未經取代的二苯并噻吩基。

【0148】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

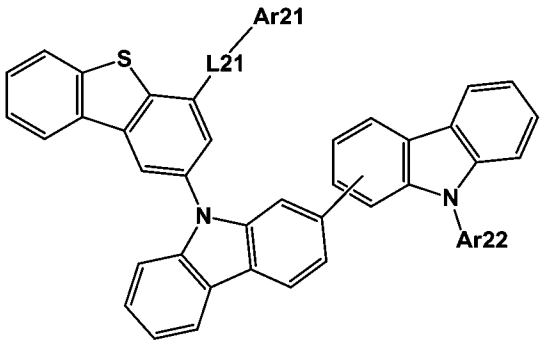
【0149】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

【0150】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

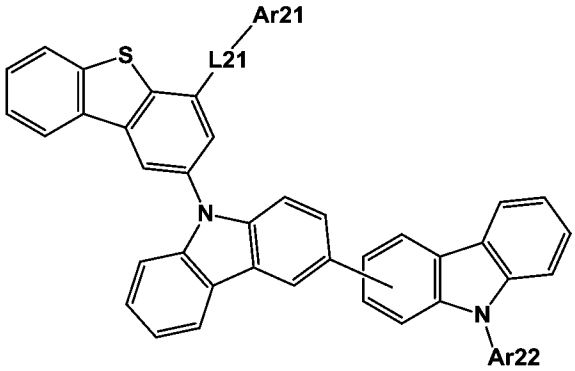
【0151】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar22 為苯基。

【0152】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 可由以下化學式 2-1 至化學式 2-3 中的任一者表示。

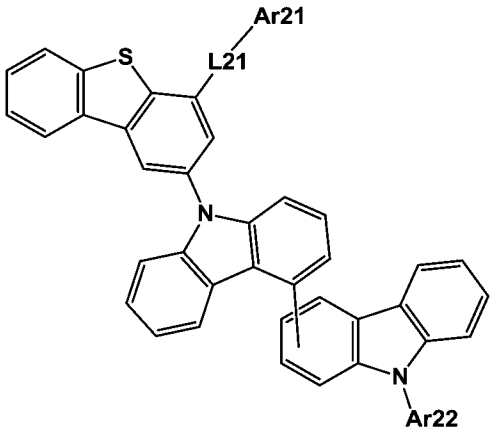
[化學式 2-1]



[化學式 2-2]



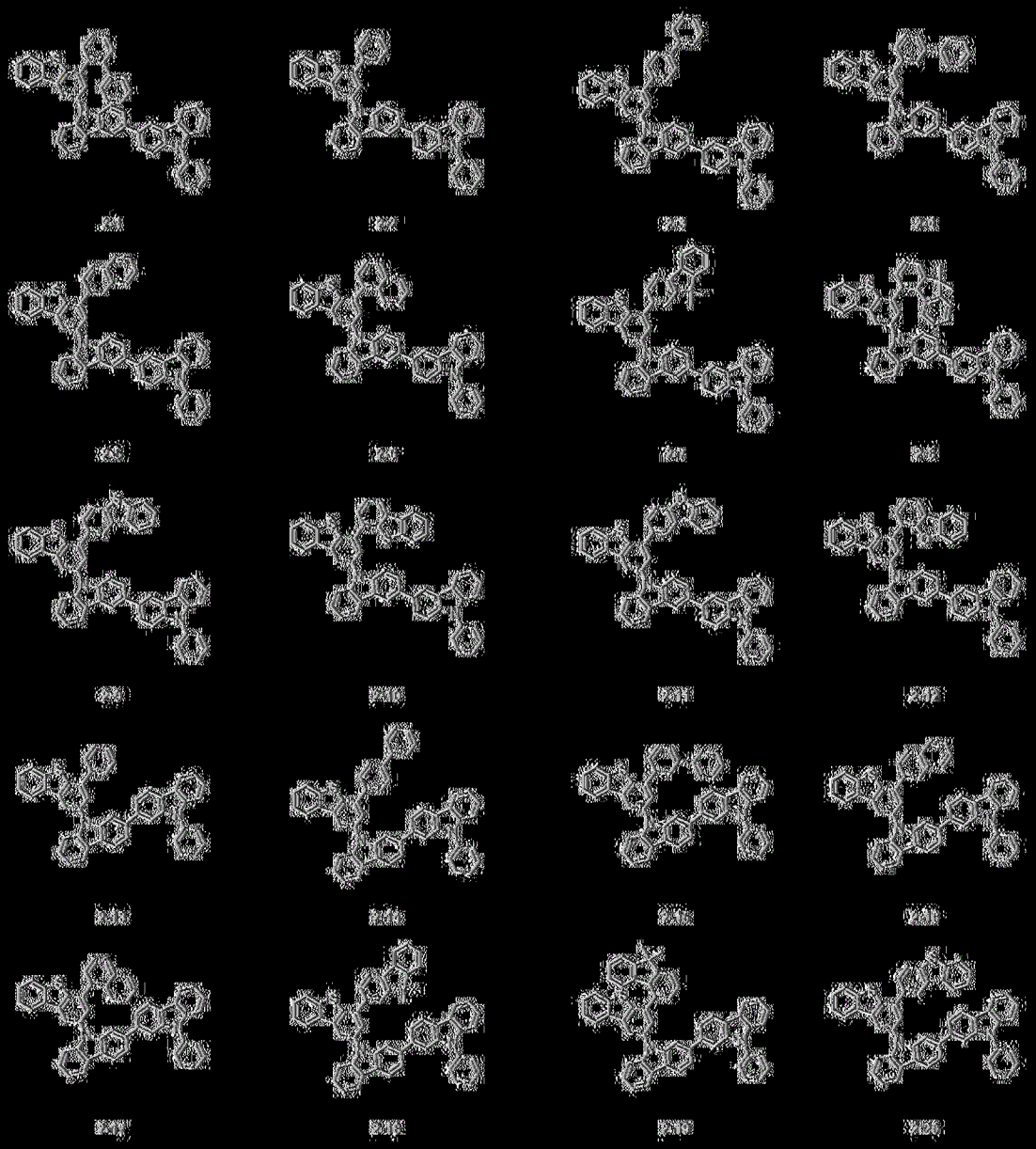
[化學式 2-3]

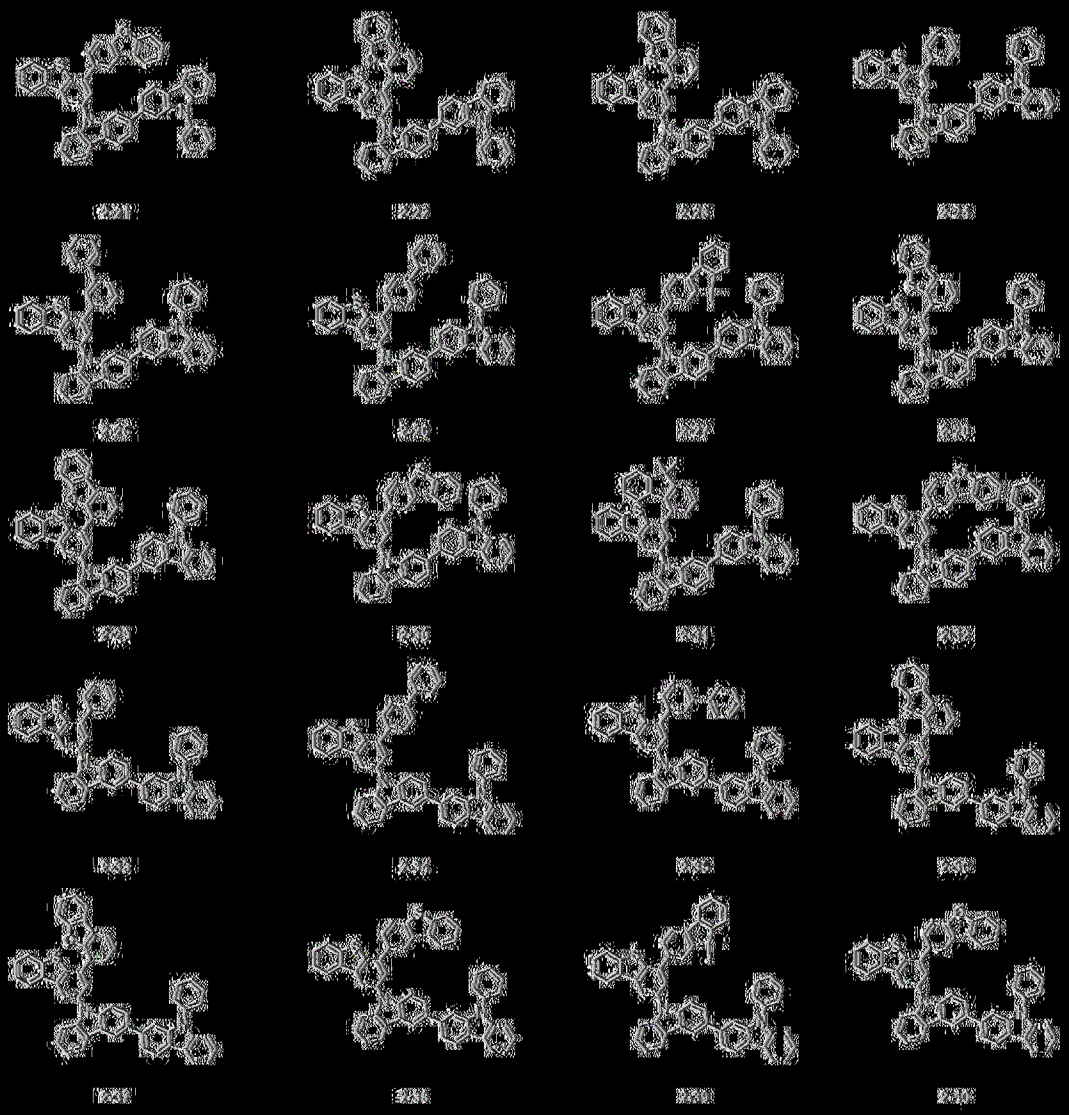


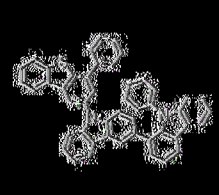
【0153】 在化學式 2-1 至化學式 2-3 中，

各取代基具有與化學式 2 中相同的定義。

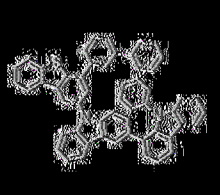
【0154】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。



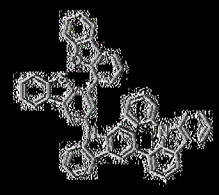


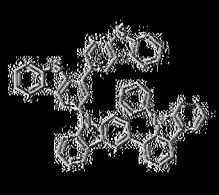


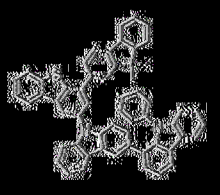


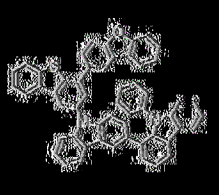


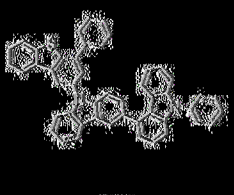


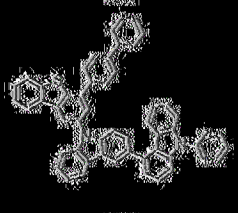


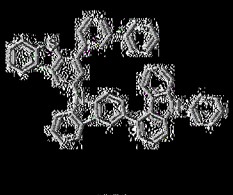


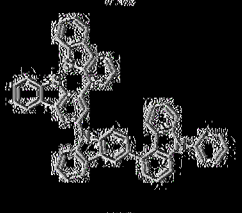


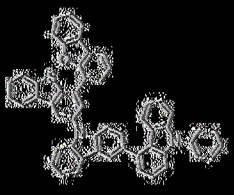


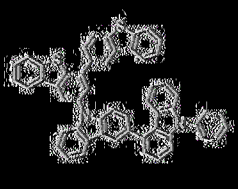


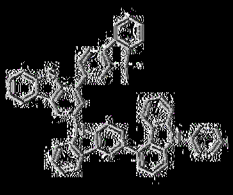


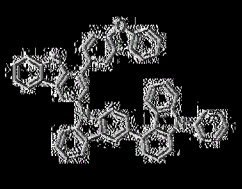


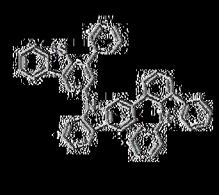


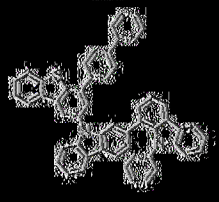


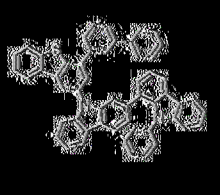


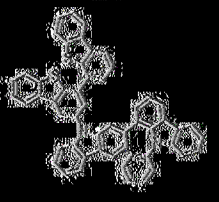


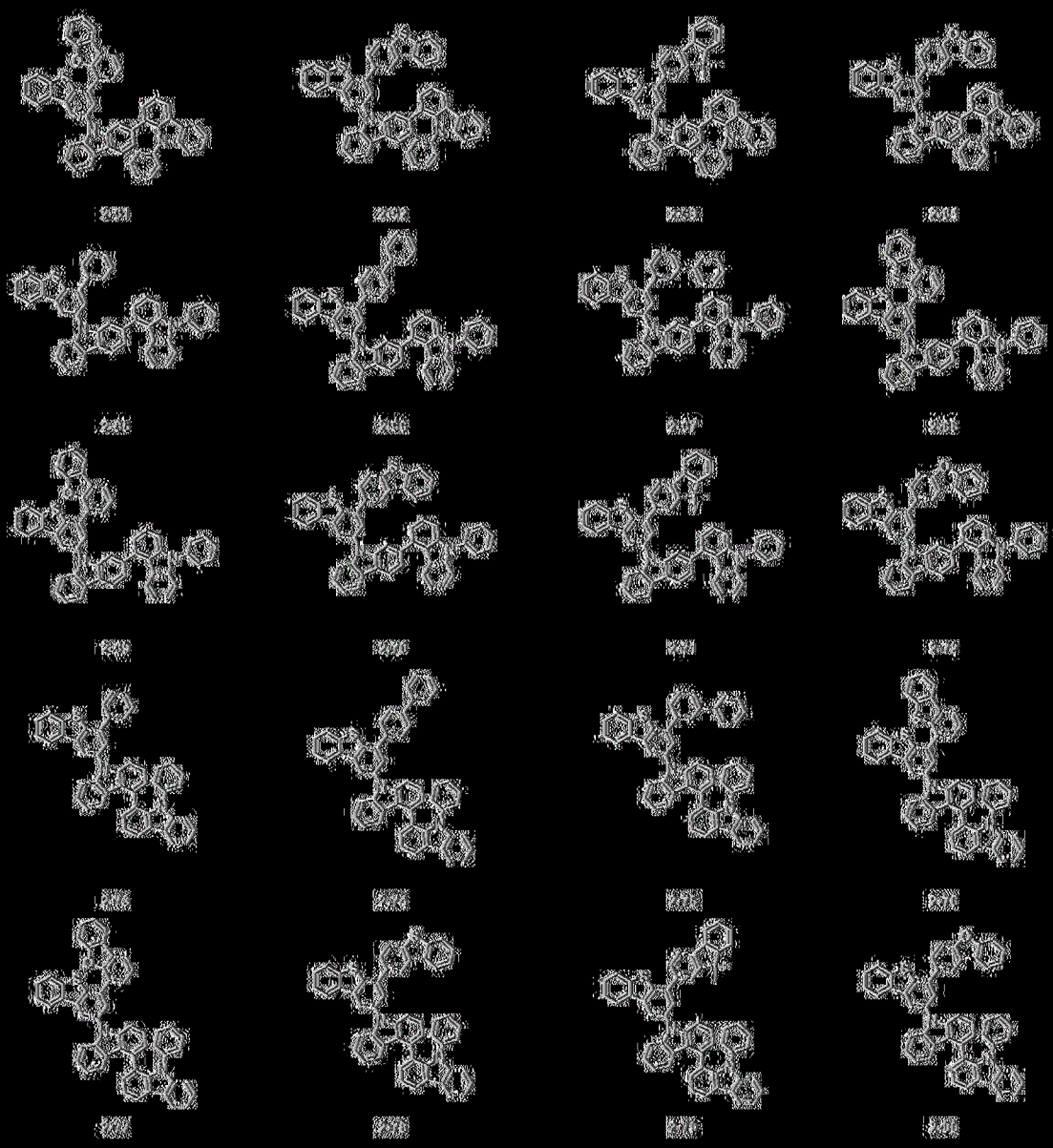


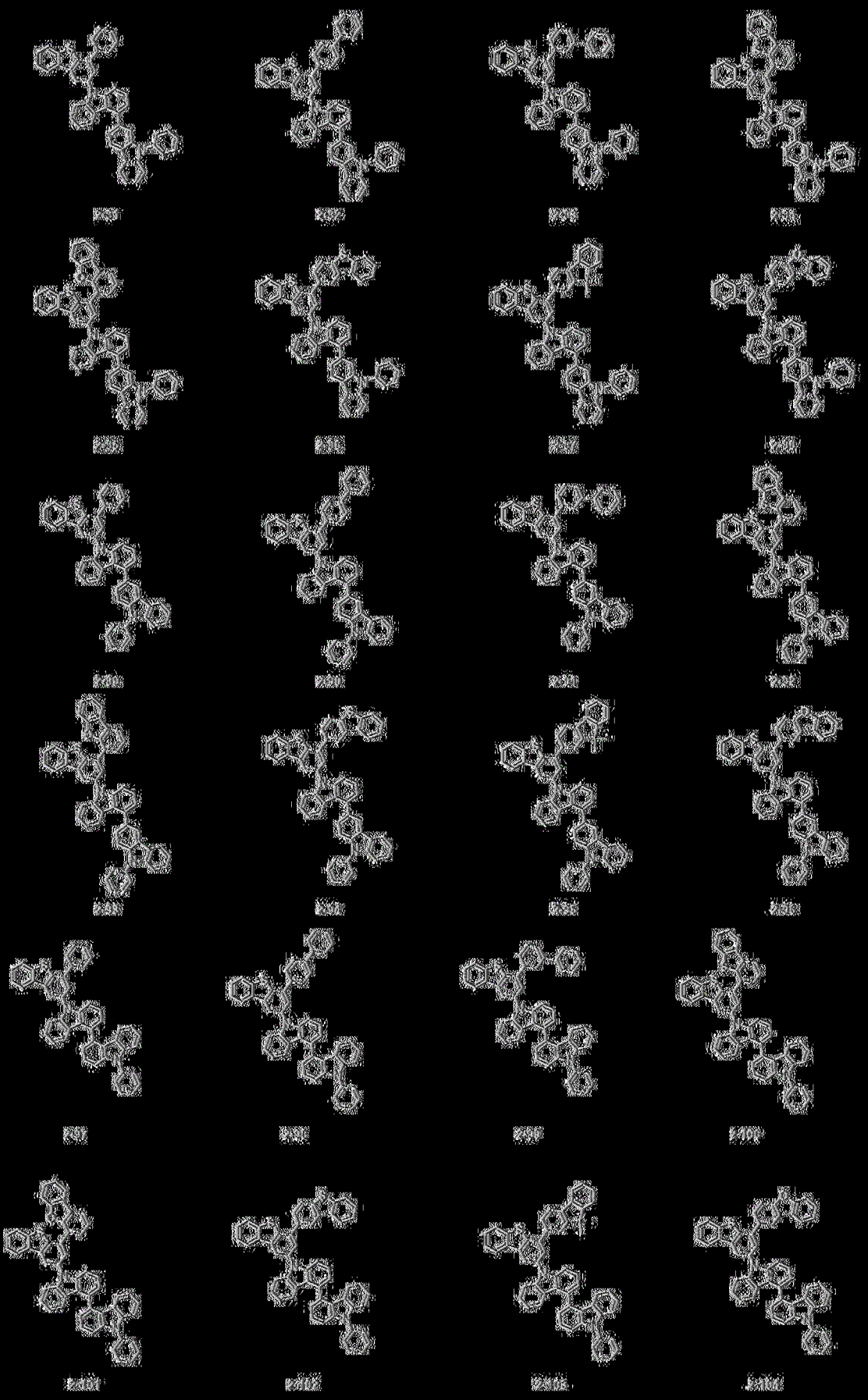












[0155] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各

自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0156】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0157】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘或經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0158】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 為氫或氘。

【0159】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 為氫。

【0160】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C40 雜芳基。

【0161】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基。

【0162】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

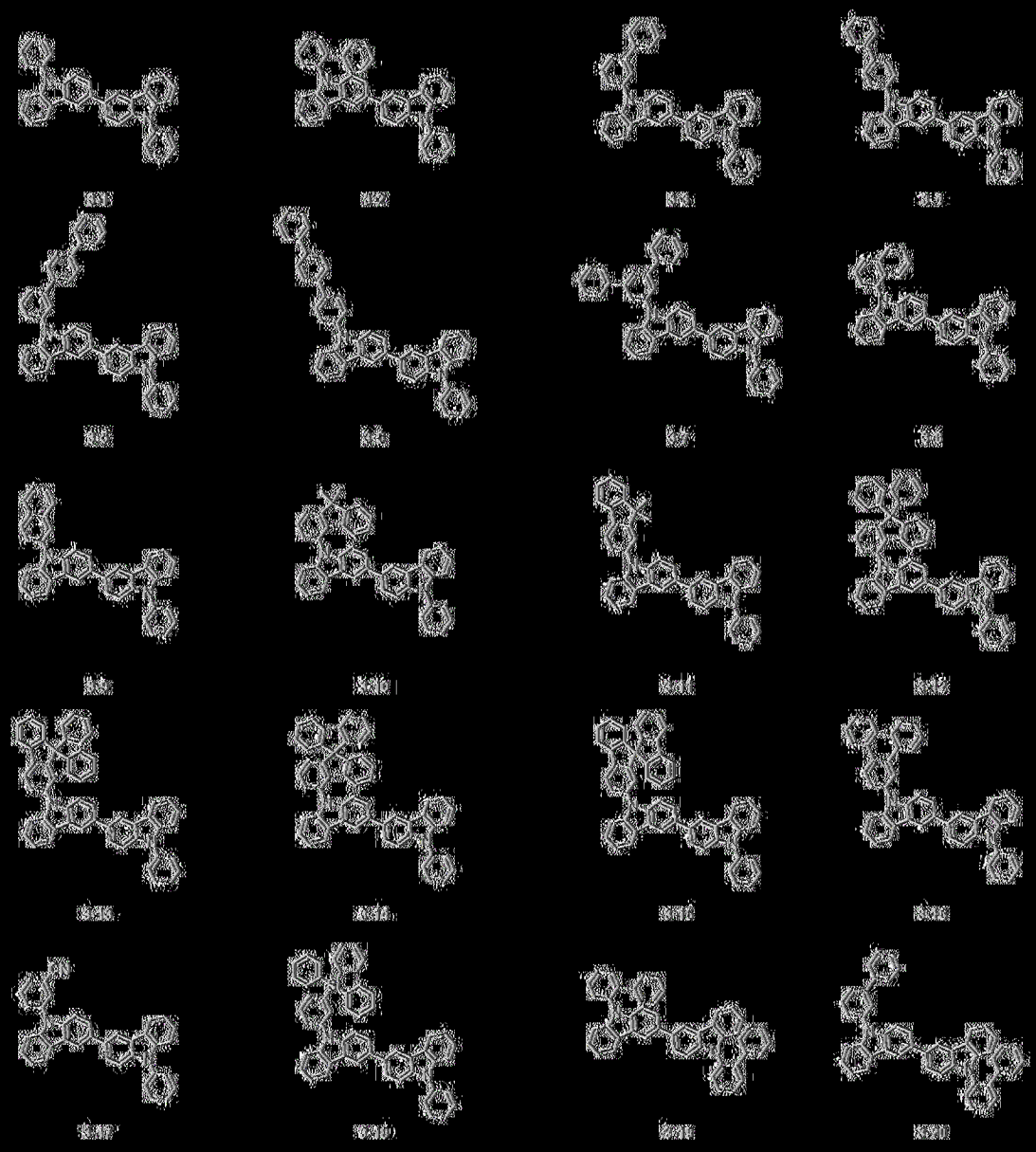
【0163】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的芴基或經取代或未經取代的聯伸三苯基。

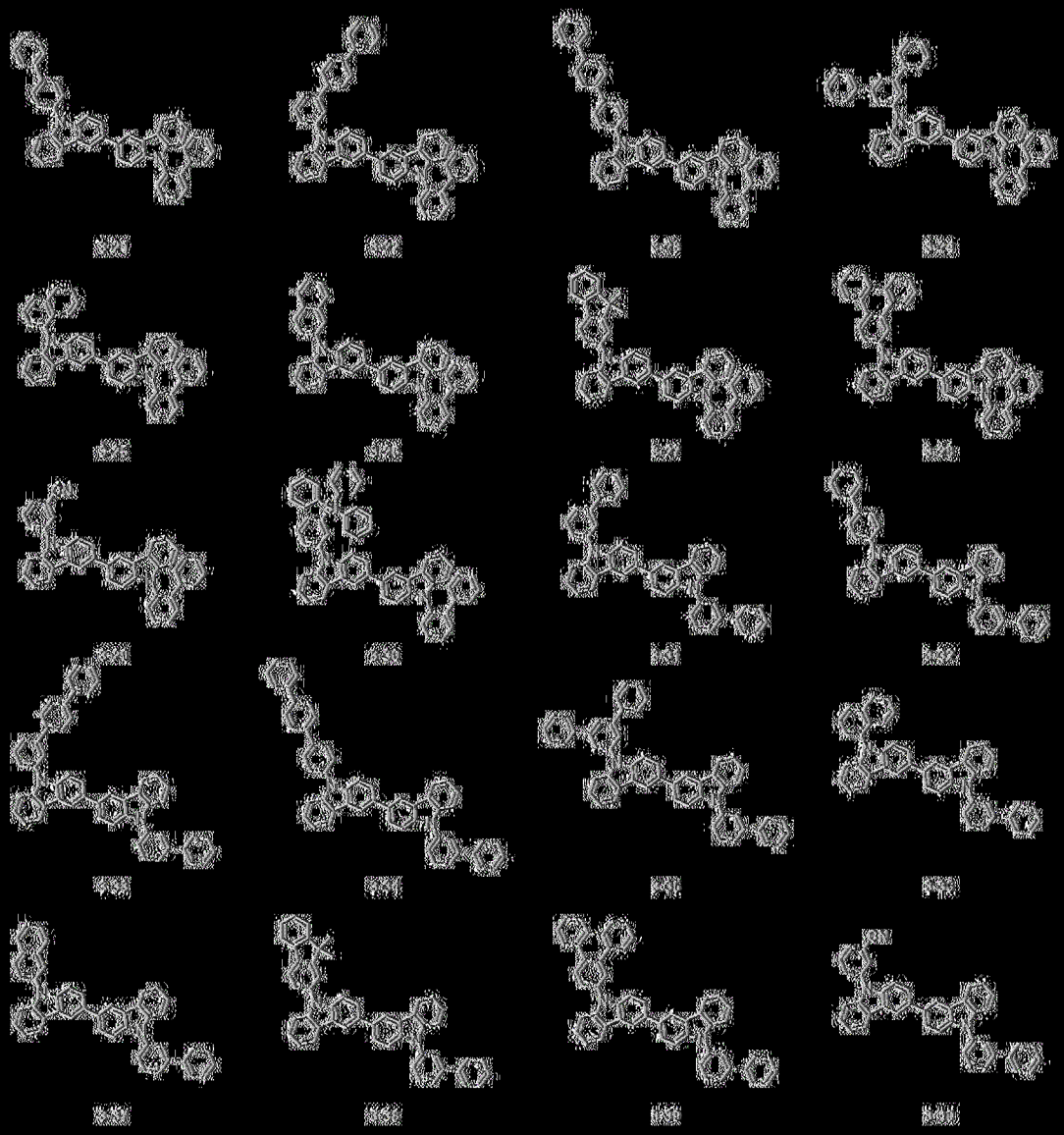
【0164】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為未經取代或經氰基、矽烷基或芳基取代的苯基；聯苯

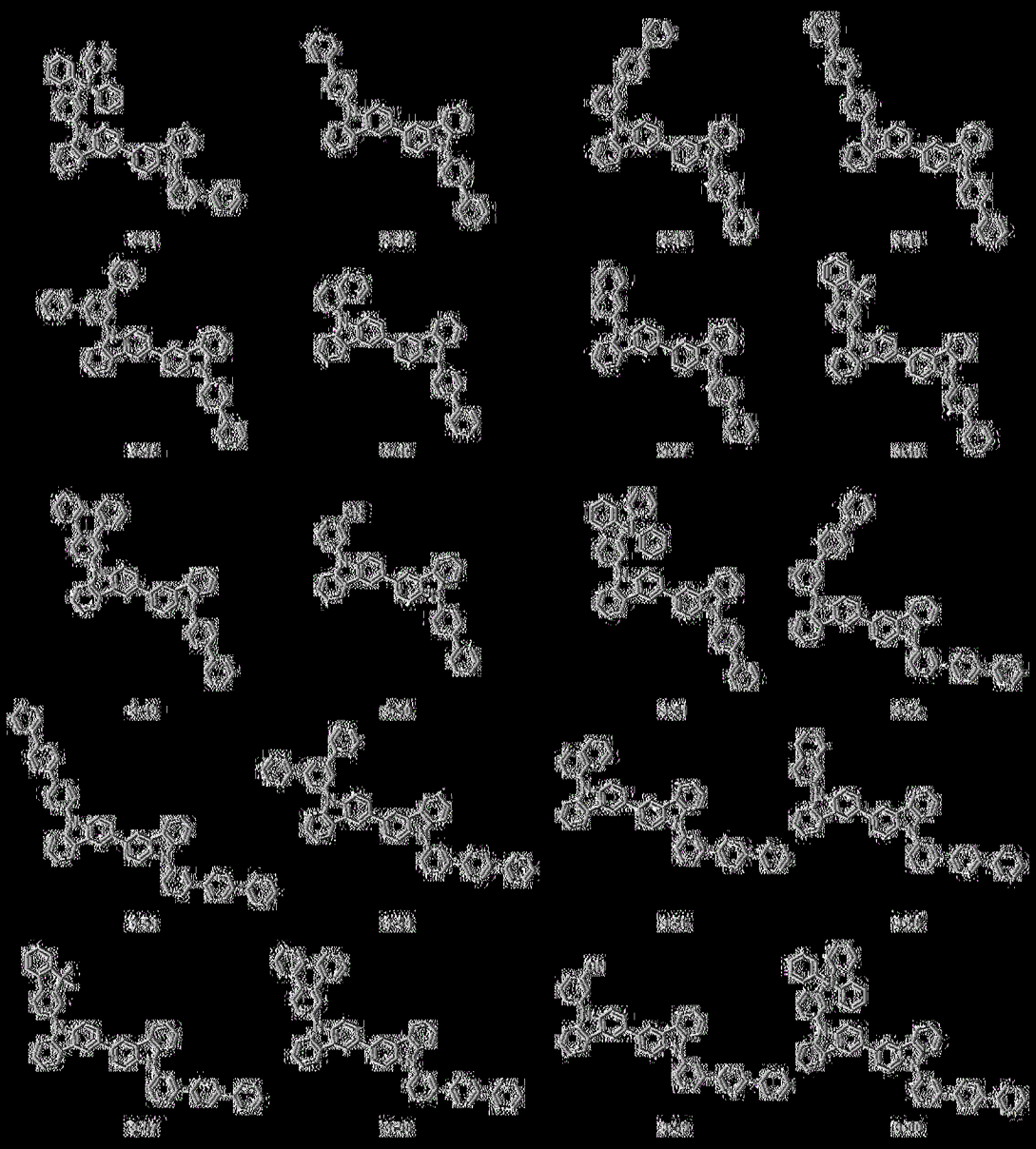
基；聯三苯基；萘基；未經取代或經烷基或芳基取代的芴基；9,9'-螺二[芴]；或聯伸三苯基。

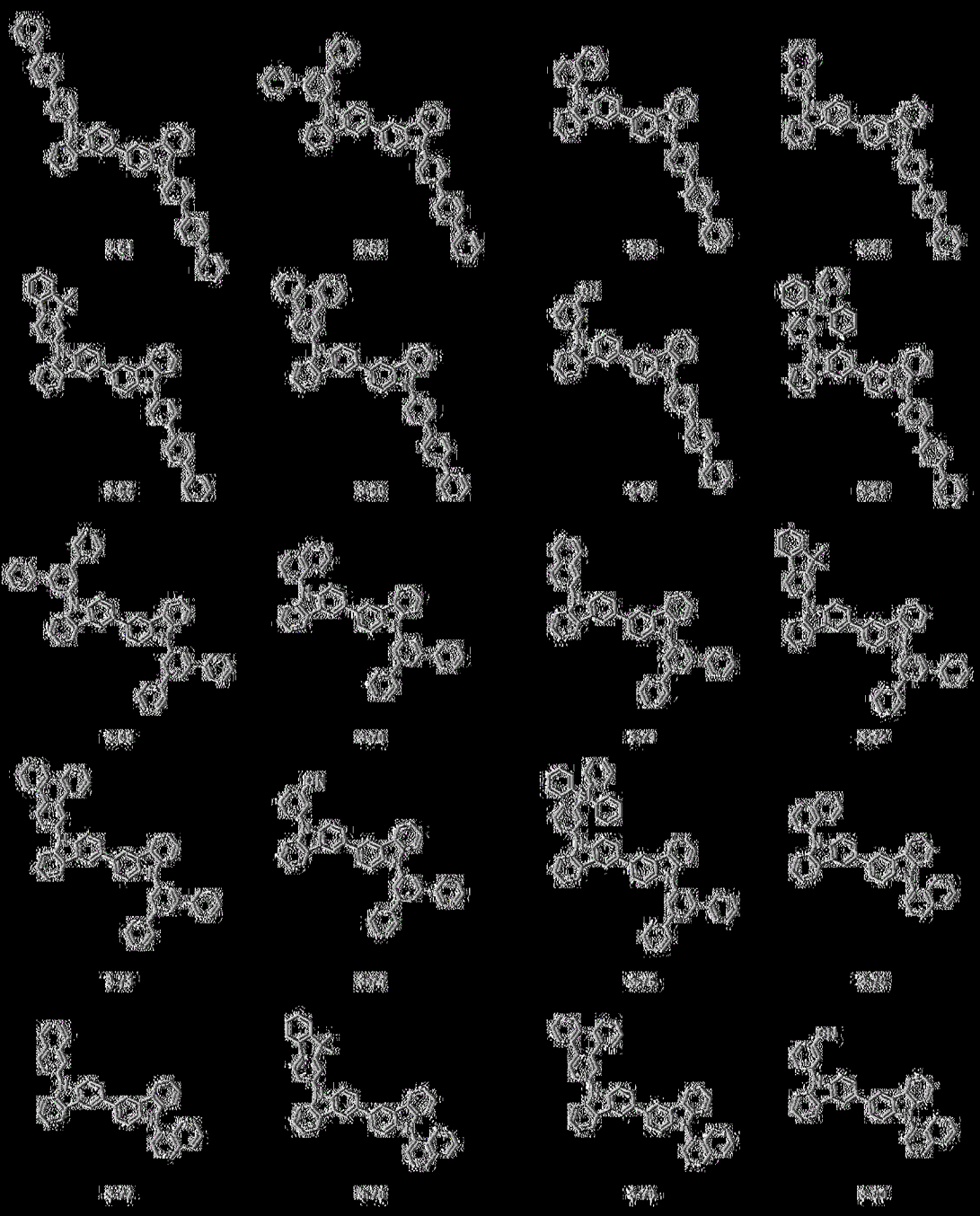
[0165] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為未經取代或經氟基、三苯基矽烷基或芳基取代的苯基；聯苯基；聯三苯基；萘基；未經取代或經烷基或芳基取代的芴基；9,9'-螺二[芴]；或聯伸三苯基。

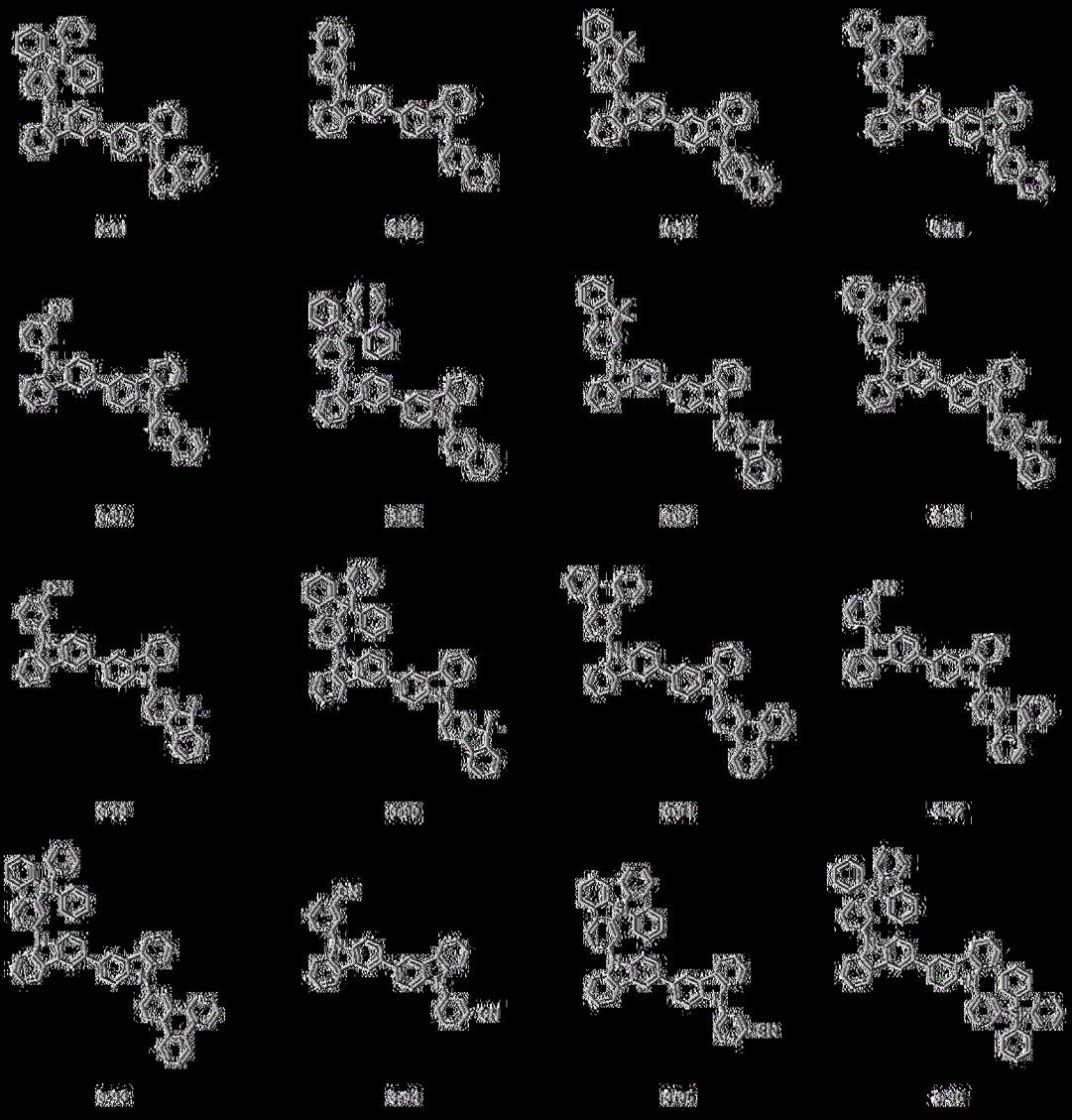
[0166] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。











[0167] 在本說明書的一個實施例中，有機材料層包含呈 1:10 至 10:1 的重量比、1:8 至 8:1 的重量比、1:5 至 5:1 的重量比以及 1:2 至 2:1 的重量比的化學式 1 的化合物與化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[0168] 當包含上文所描述的重量比範圍內的化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物時，可提供具有低驅動電壓以及優良的發光效率及使用壽命的有機發光元件。特定而言，當包含呈 1:2 至 2:1 的重量比的此等化合物時，獲得具有高發光效率及使用壽命的有機發光元件。

[0169] 本揭露的有機發光元件可更包含由下述者所組成的族群

中選出的一個、兩個或多於兩個層：發光層、電洞注入層、電洞轉移層、電子注入層、電子轉移層、電子阻擋層以及電洞阻擋層。

【0170】 圖 1 至圖 3 示出根據本說明書的一個實施例的有機發光元件的電極及有機材料層的層壓次序。然而，本申請案的範疇不限於此等圖式，且所屬領域中已知的有機發光元件的結構亦可用於本申請案中。

【0171】 圖 1 示出有機發光元件，其中陽極 200、有機材料層 300 以及陰極 400 連續層壓於基底 100 上。然而，結構不限於此類結構，且如圖 2 中所示出，亦可獲得其中陰極、有機材料層以及陽極連續層壓於基底上的有機發光元件。

【0172】 圖 3 示出有機材料層為多層的情況。根據圖 3 的有機發光元件包含電洞注入層 301、電洞轉移層 302、發光層 303、電洞阻擋層 304、電子轉移層 305 以及電子注入層 306。然而，本申請案的範疇不限於此層壓結構，且視需要，可不包含除發光層以外的層，並且可進一步增加其他所需功能層。

【0173】 視需要，包含化學式 1 的化合物的有機材料層可更包含其他材料。

【0174】 在根據本說明書的一個實施例的有機發光元件中，下文示出除化學式 1 的化合物以外的材料，然而，此等材料僅用於說明性目的且不用於限制本申請案的範疇，且可由所屬領域中已知的材料置換。

【0175】 可使用具有相對較大功函數的材料作為陽極材料，且可使用透明的導電氧化物、金屬、導電聚合物或類似材料作為陽極材料。陽極材料的特定實例包含：金屬，諸如釩、鉻、銅、鋅以及金，

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）以及氧化銦鋅（indium zinc oxide；IZO）；金屬與氧化物的組合，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）、聚吡咯以及聚苯胺，以及類似物，但不限於此。

【0176】 可使用具有相對較小功函數的材料作為陰極材料，且可使用金屬、金屬氧化物、導電聚合物或類似材料作為陰極材料。陰極材料的特定實例包含：金屬，諸如，鎂、鈣、鈉、鉀、鈦、銦、釔、鋰、釓、鋁、銀、錫以及鉛，或其合金；多層結構材料，諸如 LiF/Al 或 LiO_2/Al，以及類似物，但不限於此。

【0177】 可使用已知的電洞注入材料作為電洞注入材料，且例如可使用：酞菁化合物，諸如美國專利第 4,356,429 號中所揭露的銅酞菁；或星爆型（starburst-type）胺衍生物，諸如於文獻[高級材料（Advanced Material）, 6, 第 677 頁(1994)]中描述的三(4-肼甲醯基-9-基苯基)胺（TCTA）、4,4′,4"-三[苯基(間甲苯基)胺基]三苯胺（間MTDATA）或 1,3,5-三[4-(3-甲基苯基苯胺基)苯基]苯（間MTDAPB）；具有溶解性的導電聚合物，聚苯胺/十二烷基苯磺酸、聚(3,4-伸乙二氧基噻吩)/聚(4-苯乙烯磺酸脂)、聚苯胺/樟腦磺酸或聚苯胺/聚(4-苯乙烯磺酸酯)；以及類似材料。

【0178】 可使用吡唑啉衍生物、芳胺類衍生物、芪衍生物、三苯基二胺衍生物以及類似物作為電洞轉移材料，且亦可使用低分子材料或高分子材料作為電洞轉移材料。

【0179】 可使用噁二唑衍生物的金屬錯合物、蒽醌二甲烷（anthraquinodimethane）及其衍生物、苯醌及其衍生物、萘醌

（naphthoquinone）及其衍生物、蒽醌及其衍生物、四氰蒽醌二甲烷及其衍生物、芴酮衍生物、二苯基二氰乙烯及其衍生物、聯苯醌衍生物、8-羥基喹啉及其衍生物以及類似物作為電子轉移材料，且亦可使用高分子材料以及低分子材料作為電子轉移材料。

【0180】 作為電子注入材料的實例，LiF 通常用於所屬領域中，然而，本申請案不限於此。

【0181】 可使用紅色發光材料、綠色發光材料或藍色發光材料作為發光材料，且視需要，可混合且使用兩種或多於兩種發光材料。在本文中，兩種或多於兩種發光材料可藉由沈積為個別供應源或藉由預混合及沈積為一個供應源而使用。另外，螢光材料亦可用作發光材料，然而，亦可使用磷光材料。可單獨使用藉由結合分別自陽極及陰極注入的電子及電洞來發射光的材料作為發光材料，然而，亦可使用具有涉及光發射的主體材料及摻雜劑材料的材料作為發光材料。

【0182】 當混合發光材料主體時，可混合相同系列的主體，或可混合不同系列的主體。舉例而言，可選擇 n 型主體材料或 p 型主體材料中的任何兩種或多於兩種類型的材料，且將其用作發光層的主體材料。

【0183】 取決於所使用的材料，根據本說明書的一個實施例的有機發光元件可為頂部發射型、底部發射型或雙面發射型。

【0184】 根據本說明書的一個實施例的化合物亦可根據有機發光元件中使用的類似原理用於包含有機太陽能電池、有機光導體、有機電晶體以及類似物的有機電子元件中。

【0185】 本說明書的一個實施例提供一種用於形成有機材料層的

組合物，所述組合物包含化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[0186] 根據本說明書的一個實施例的用於形成有機材料層的組合物包含呈 1:10 至 10:1 的重量比、1:8 至 8:1 的重量比、1:5 至 5:1 的重量比以及 1:2 至 2:1 的重量比的化學式 1 的化合物與化學式 2 或化學式 3 的化合物。

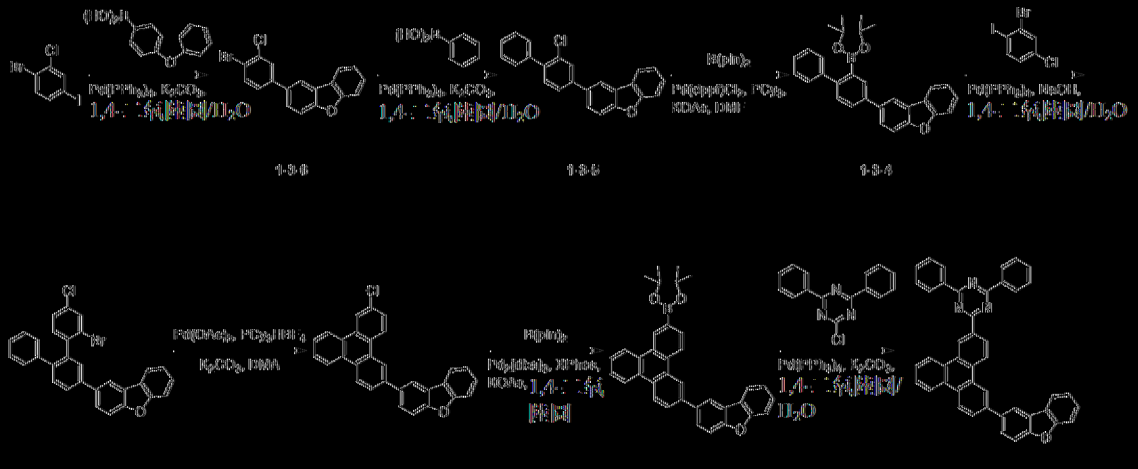
[0187] 當包含上文所描述的重量比範圍內的化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物時，可提供具有低驅動電壓以及優良的發光效率及使用壽命的有機發光元件。特定而言，當包含呈 1:2 至 2:1 的重量比的此等化合物時，獲得具有高發光效率及使用壽命的有機發光元件。

[0188] 根據本說明書的一個實施例的用於形成有機材料層的組合物可用作有機發光元件的發光層的材料。

[0189] 在下文中，本說明書將參考實例更詳細地進行描述，然而，此等實例僅用於說明性目的，且本申請案的範疇不限於此。

<製備實例>

<製備實例 1>化合物 1-3 的製備



1）化合物 1-3-6 的製備

【0190】 將 1-溴-2-氯-4-碘苯（20.0 公克，63.0 mM）、二苯并[b,d]呋喃-2-基硼酸（11.1 公克，52.5 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（四(三苯基膦)鈀(0)）（3.0 公克，2.6 mM）以及 K_2CO_3（14.5 公克，105.0 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（400 毫升/80 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及二氯甲烷（DCM）來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-6（14.4 公克，80%）。

2）化合物 1-3-5 的製備

【0191】 將化合物 1-3-6（13.4 公克，37.4 mM）、苯硼酸（5.5 公克，44.9 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（2.2 公克，1.9 mM）以及 K_2CO_3（10.3 公克，74.8 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-5（10.8 公克，85%）。

3）化合物 1-3-4 的製備

【0192】 將化合物 1-3-5（6.8 公克，19.2 mM）、雙(頻哪醇根基)二硼（7.3 公克，28.8 mM）、$Pd(dppf)Cl_2$（[1,1′-雙(二苯膦基)二茂鐵]二氯鈀(II)）（702 毫克，1.0 mM）、三環己基膦（PCy_3）（533 毫克，1.9 mM）以及乙酸鉀（KOAc）（5.6 公克，57.3 mM）溶解於 DMF（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾

燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 1-3-4（7.1 公克，85%）。

4）化合物 1-3-3 的製備

【0193】 將化合物 1-3-4（16.7 公克，37.4 mM）、2-溴-4-氯-1-碘苯（14.2 公克，44.9 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（2.2 公克，1.9 mM）以及 NaOH（3.0 公克，74.8 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-3（15.8 公克，85%）。

5）化合物 1-3-2 的製備

【0194】 將化合物 1-3-3（14.1 公克，27.7 mM）、$Pd(OAc)_2$（乙酸鈀(II)）（622 毫克，2.8 mM）、$PCy_3 \cdot HBF_4$（三環己基膦四氟硼酸酯）（2.0 公克，5.5 mM）以及 K_2CO_3（7.7 公克，55.4 mM）溶解於二甲基乙醯胺（DMA）（100 毫升）中，且接著回流 12 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-2（8.0 公克，70%）。

4）化合物 1-3-1 的製備

【0195】 將化合物 1-3-2（8.2 公克，19.2 mM）、雙(頻哪醇根基)二硼（7.3 公克，28.8 mM）、$Pd_2(dba)_3$（879 毫克，1.0 mM）、Xphos（2-二環已基膦-2′,4′,6′-三異丙基聯苯）（915 毫克，1.9 mM）以及

KOAc（5.6 公克，57.3 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 1-3-1（8.3 公克，85%）。

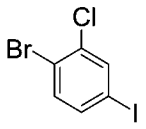
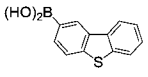
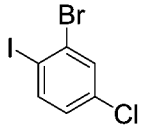
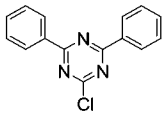
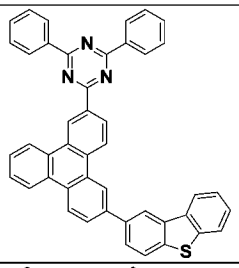
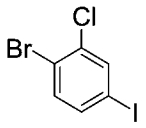
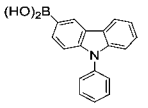
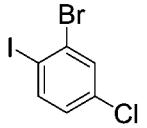
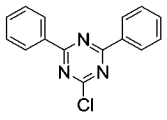
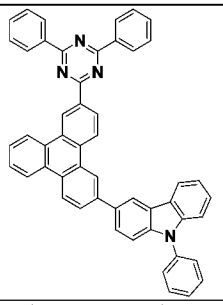
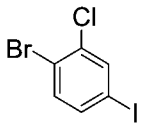
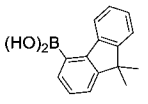
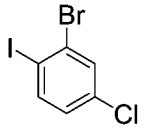
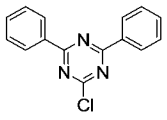
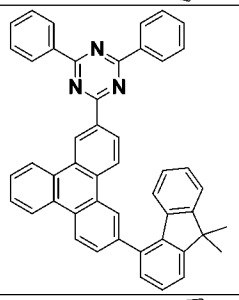
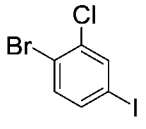
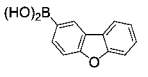
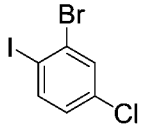
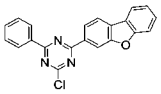
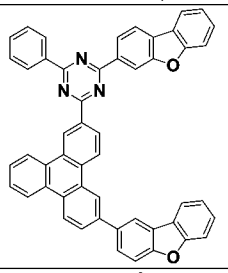
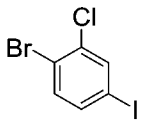
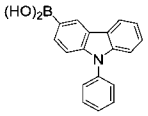
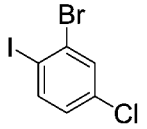
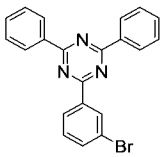
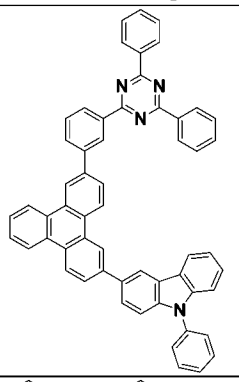
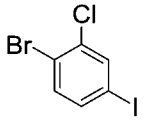
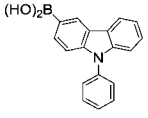
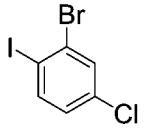
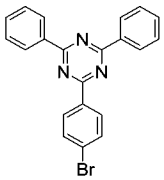
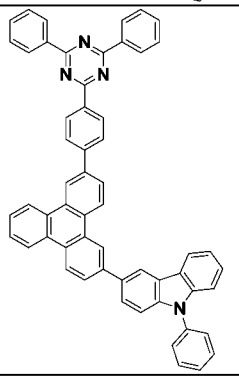
5）化合物 1-3 的製備

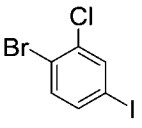
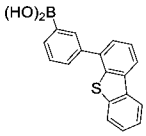
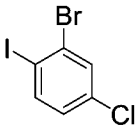
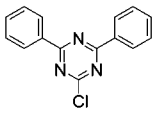
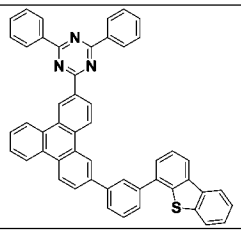
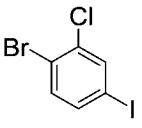
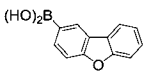
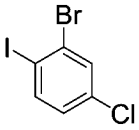
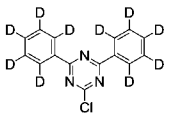
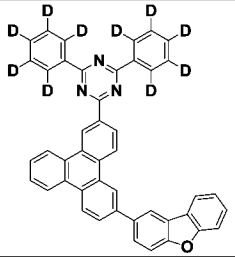
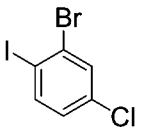
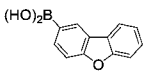
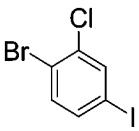
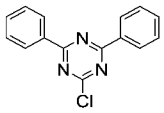
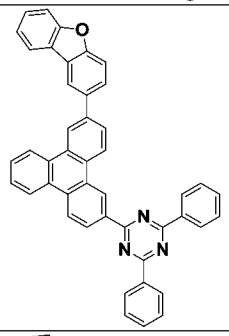
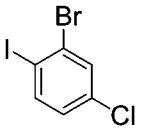
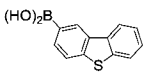
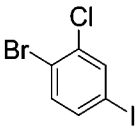
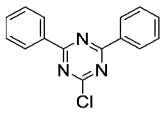
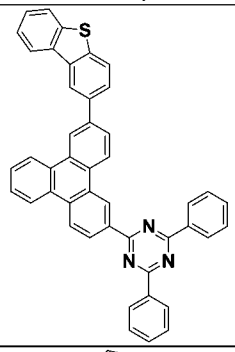
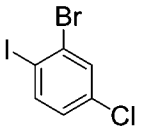
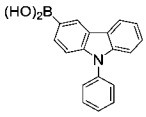
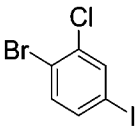
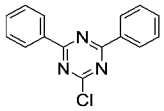
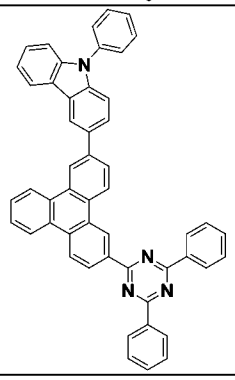
【0196】 將化合物 1-3-1（8.4 公克，16.1 mM）、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（4.7 公克，17.7 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（0.9 公克，0.8 mM）以及 K_2CO_3（4.5 公克，32.3 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 1-3（8.1 公克，82%）。

【0197】 除使用下表 1 的中間物 A 替代 1-溴-2-氯-4-碘苯，使用下表 1 的中間物 B 替代二苯并[b,d]呋喃-2-基硼酸，使用下表 1 的中間物 C 替代 2-溴-4-氯-1-碘苯且使用下表 1 的中間物 D 替代 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪以外，以與製備實例 1 中相同的方式合成目標化合物。

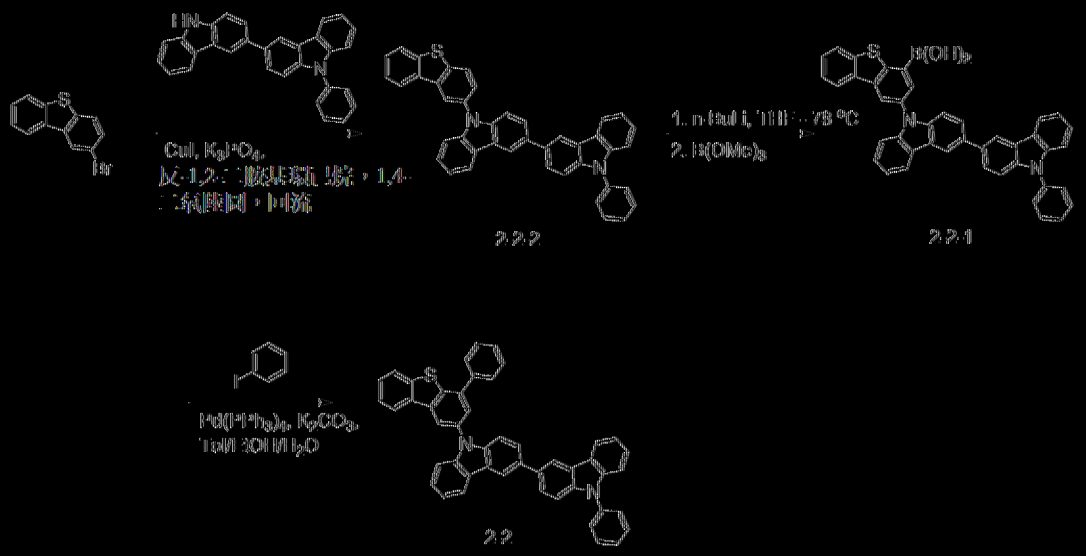
[表 1]

化合物編號	中間物 A	中間物 B	中間物 C	中間物 D	目標化合物

1-7					
1-11					
1-14					
1-26					
1-51					
1-56					

1-60					
1-76					
1-83					
1-87					
1-91					

<製備實例 2>化合物 2-2 的合成



1）化合物 2-2-2 的製備

[0198] 將 2-溴二苯并[b,d]噻吩（4.2 公克，15.8 mM）、9-苯基-9H,9'H-3,3'-二咔唑（6.5 公克，15.8 mM）、CuI（3.0 公克，15.8 mM）、反-1,2-二胺基環己烷（1.9 毫升，15.8 mM）以及 K_3PO_4（3.3 公克，31.6 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex = 1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 2-2-2（7.9 公克，85%）。

2）化合物 2-2-1 的製備

[0199] 在 -78℃ 下，向藉由引入化合物 2-2-2（8.4 公克，14.3 毫莫耳）及四氫呋喃（THF）（100 毫升）而獲得的混合物溶液中逐滴添加 2.5 M 正丁基鋰（n-BuLi）（7.4 毫升，18.6 毫莫耳），且將所得物在室溫下攪拌 1 小時。向反應混合物中逐滴添加硼酸三甲酯（4.8 毫升，42.9 毫莫耳），且將所得物在室溫下攪拌 2 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。

藉由管柱層析（DCM:甲醇（MeOH） 100:3）純化反應材料，且用 DCM 再結晶以獲得化合物 2-2-1（3.9 公克，70%）。

3）化合物 2-2 的製備

[0200] 將化合物 2-2-1（6.7 公克，10.5 mM）、碘苯（2.1 公克，10.5 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（606 毫克，0.52 mM）以及 K_2CO_3（2.9 公克，21.0 mM）溶解於甲苯/乙醇（EtOH）/H_2O（100 毫升/20 毫升/20 毫升）中，且接著回流 12 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex 1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 2-2（4.9 公克，70%）。

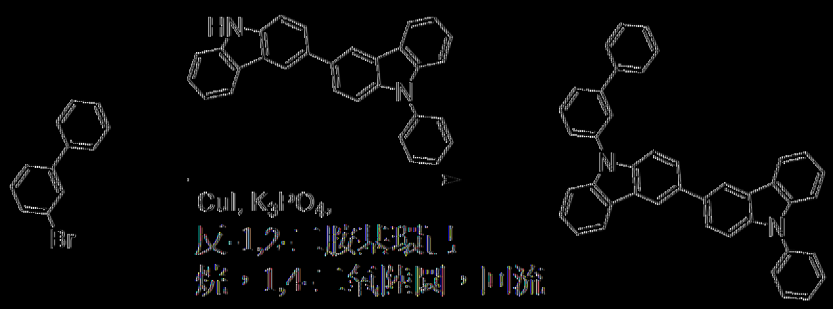
<製備實例 2-1>化合物 2-3 的合成

[0201] 除使用 4-碘-1,1'-聯苯基替代碘苯以外，以與製備實例 2 的化合物 2-2 的製備中相同的方式獲得目標化合物 2-3（83%）。

<製備實例 2-2>化合物 2-12 的合成

[0202] 除使用 4-碘二苯并[b,d]呋喃替代碘苯以外，以與製備實例 2 的化合物 2-2 的製備中相同的方式獲得目標化合物 2-12（80%）。

<製備實例 3>化合物 3-3 的合成



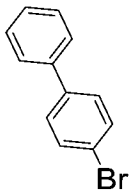
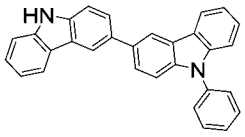
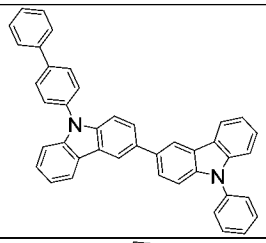
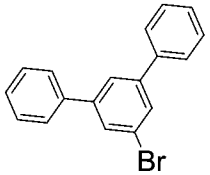
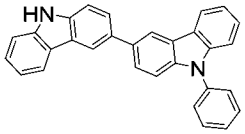
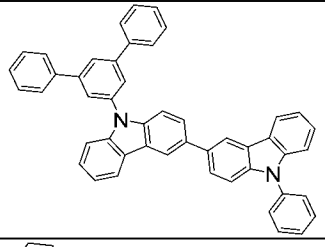
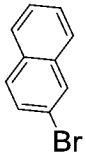
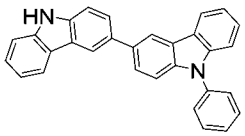
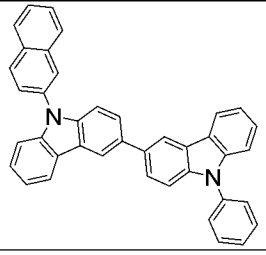
3-3

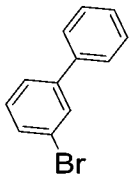
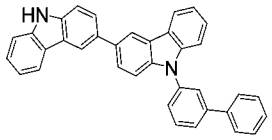
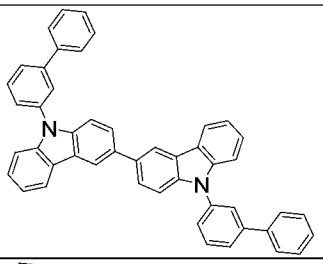
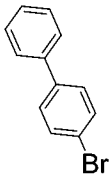
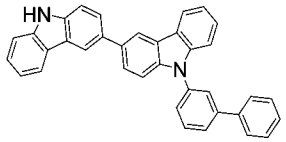
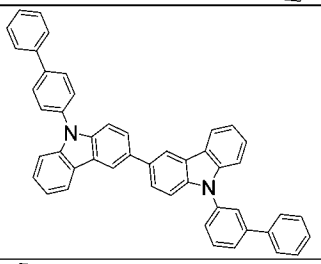
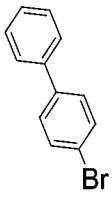
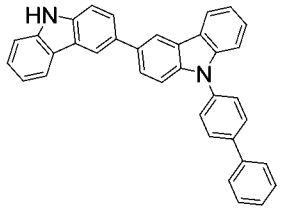
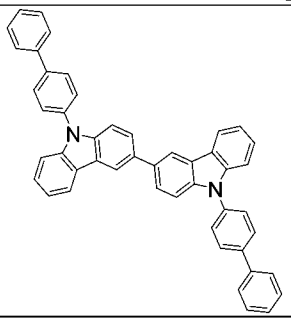
1）化合物 3-3 的製備

【0203】 將 3-溴-1,1′-聯苯基（3.7 公克，15.8 mM）、9-苯基-9H,9′H-3,3′-二咔唑（6.5 公克，15.8 mM）、CuI（3.0 公克，15.8 mM）、反-1,2-二胺基環己烷（1.9 毫升，15.8 mM）以及 K_3PO_4（3.3 公克，31.6 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 3-3（7.5 公克，85%）。

【0204】 除使用下表 2 的中間物 A 替代 3-溴-1,1′-聯苯基且使用表 2 的中間物 B 替代 9-苯基-9H,9′H-3,3′-二咔唑以外，以與製備實例 3 中相同的方式合成目標化合物。

[表 2]

化合物編號	中間物 A	中間物 B	目標化合物
3-4			
3-7			
3-9			

3-31			
3-32			
3-42			

【0205】 除製備實例 1 至製備實例 3 以及表 1 及表 2 中所描述的化合物以外的化合物亦以與上文所描述的製備實例中相同的方式製備，且合成結果展示於下表 3 及表 4 中。

[表 3]

化合物編號	^{1}H NMR ($CDCl_3$, 200 Mz)
1-3	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d), 7.98 (1H, d), 7.88-7.79 (3H, m), 7.70-7.64 (2H, m), 7.54-7.50 (8H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-7	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.45-8.30 (8H, m), 8.15-8.12 (3H, m), 7.99-7.93 (2H, m), 7.70-7.49 (11H, m)
1-11	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (8H, m), 8.19-8.13 (3H, m), 7.89 (1H, s), 7.70-7.50 (16H, m), 7.20 (1H, t)
1-14	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d), 7.90 (1H, d), 7.78-7.64 (4H, m), 7.55-7.38 (10H, m), 7.28 (1H, t), 1.69 (6H, s)
1-26	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (5H, m), 8.15 (1H, d), 8.03-7.98 (3H, m), 7.86-7.64 (7H, m), 7.54-7.50 (6H, m), 7.39-7.31 (4H, m)
1-51	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.38-8.30 (9H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.50 (17H, m), 7.35 (1H, t), 7.16 (1H, t)
1-56	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.38-8.30 (8H, m), 7.99-7.89 (5H, m), 7.77-7.50 (15H, m), 7.35 (1H, t), 7.25 (2H, d), 7.16 (1H, t)
1-60	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.45-8.30 (9H, m), 8.15 (1H, d), 7.94-7.93 (2H, m), 7.73-7.49 (15H, m)
1-76	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (3H, m), 8.15 (1H, d), 7.98 (1H, d), 7.88-7.52 (7H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-83	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d),

	7.98 (1H, d), 7.88-7.79 (3H, m), 7.70-7.64 (2H, m), 7.54-7.50 (8H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-87	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (8H, m), 8.15-8.12 (3H, m), 7.99-7.93 (2H, m), 7.70-7.49 (11H, m)
1-91	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (8H, m), 8.19-8.13 (3H, m), 7.89 (1H, s), 7.70-7.50 (16H, m), 7.20 (1H, t)
2-2	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19(1H, d), 8.13(1H, d), 8.00~7.89(6H, m), 7.77(2H, m), 7.62~7.35(15H, m), 7.20~7.16(2H, m)
2-3	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19(1H, d), 8.13(1H, d), 8.00~7.89(6H, m), 7.77-7.75(4H, m), 7.62~7.35(13H, m), 7.25~7.16(6H, m)
2-12	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19~7.89(11H, m), 7.77(2H, m), 7.62~7.31(14H, m), 7.20~7.16(2H, m)
3-3	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (3H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.35 (17H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-4	δ=8.55 (1H, d), 8.30(1H, d), 8.19-8.13(2H, m), 7.99-7.89(8H, m), 7.77-7.75 (3H, m), 7.62-7.35 (11H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-7	δ=8.55 (1H, d), 8.31-8.30 (3H, d), 8.19-8.13 (2H, m), 7.99-7.89 (5H, m), 7.77-7.75 (5H, m), 7.62-7.35 (14H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-9	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.19-8.13 (2H, m), 8.03-7.77 (9H, m), 7.62-7.50 (9H, m), 7.36-7.35 (2H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-31	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (4H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.35 (20H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-32	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (3H, m), 7.99-7.89 (8H, m), 7.77-7.35 (17H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-42	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.19 (1H, d), 8.13 (1H, d), 7.99-7.89 (12H, m), 7.77-7.75 (5H, m), 7.58 (1H, d), 7.50-7.35 (8H, m), 7.20-7.16 (2H, m)

[表 4]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
1-3	m/z=625.22($C_{45}H_{27}N_3O$=625.73)	1-7	m/z=641.19 ($C_{45}H_{27}N_3O$=641.79)
1-11	m/z=700.26($C_{51}H_{32}N_4$=700.84)	1-14	m/z=651.27 ($C_{48}H_{33}N_3$=651.81)
1-26	m/z=715.23($C_{51}H_{29}N_3O_2$=715.81)	1-51	m/z=776.29 ($C_{57}H_{36}N_4$=776.94)
1-56	m/z=776.29($C_{57}H_{36}N_4$=776.94)	1-60	m/z=717.22 ($C_{51}H_{31}N_3S$=717.89)
1-76	m/z=635.28($C_{45}H_{17}D_{10}N_3O$=635.79)	1-83	m/z=625.22 ($C_{45}H_{27}N_3O$=625.73)
1-87	m/z=641.19($C_{45}H_{27}N_3O$=641.79)	1-91	m/z=700.26 ($C_{51}H_{32}N_4$=700.84)
2-2	m/z=666.21($C_{48}H_{30}N_2S$=666.84)	2-3	m/z=742.24 ($C_{54}H_{34}N_2S$=742.94)
2-12	m/z=756.22($C_{54}H_{32}N_2OS$=756.92)	3-3	m/z=560.23 ($C_{42}H_{28}N_2$=560.70)
3-4	m/z=560.23($C_{42}H_{28}N_2$=560.70)	3-7	m/z=636.26 ($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)
3-9	m/z=534.21($C_{40}H_{26}N_2$=534.66)	3-31	m/z=636.26 ($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)
3-32	m/z=636.26($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)	3-42	m/z=636.26

			($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)

<實驗實例 1>

-有機發光元件的製造

【0206】 用蒸餾水超音波清潔玻璃基底，氧化銦錫（ITO）作為薄膜以 1,500 埃的厚度塗佈於所述玻璃基底上。在用蒸餾水清潔完成之後，用溶劑（諸如丙酮、甲醇以及異丙醇）來超音波清潔基底，接著乾燥，且在紫外線（UV）清潔器中使用 UV 進行紫外線臭氧（UVO）處理 5 分鐘。此後，將基底轉移至電漿清潔器（plasma cleaner；PT），且在真空下進行電漿處理以用於 ITO 功函數及殘餘膜移除之後，將基底轉移至熱沈積裝置以用於有機沈積。

【0207】 在透明 ITO 電極（陽極）上，形成作為常用層的電洞注入層 2-TNATA（4,4′,4"-三[2-萘基(苯基)胺基]三苯胺）及電洞轉移層 NPB（N,N′-二(1-萘基)-N,N′-二苯基-(1,1′-聯苯基)-4,4′-二胺）。

【0208】 如下在其上熱真空沈積發光層。作為發光層，將下表 5 中所描述的化學式 1 的化合物沈積至 400 埃作為主體，且綠色磷光摻雜劑[$Ir(ppy)_3$]以發光層的沈積厚度的 7%摻雜且沈積。此後，將 BCP（浴銅靈）沈積至 60 埃作為電洞阻擋層，且於其上將 Alq_3 沈積至 200 埃作為電子轉移層。最後，藉由將氟化鋰（LiF）沈積至 10 埃的厚度來在電子轉移層上形成電子注入層，且接著藉由將鋁（Al）陰極沈積至 1,200 埃的厚度來在電子注入層上形成陰極，且因此，製造有機電致發光元件。

【0209】 同時，在 10^{-8} 托至 10^{-6} 托下針對 OLED 製造中使用的各材料真空昇華純化製造 OLED 所需的所有有機化合物。

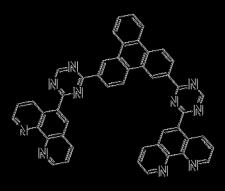
【0210】 對於如上所製造的有機電致發光元件中的每一者，使用

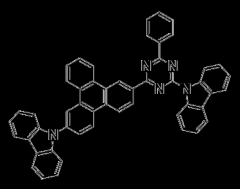
由麥克科學（McScience）公司製造的 M7000 來量測電致發光（electroluminescent；EL）性質，且藉由量測結果，當標準亮度為 6,000 坎德拉/平方公尺（cd/m^2）時，經由由麥克科學公司製造的使用壽命量測系統（M6000）來量測 T_{90}。

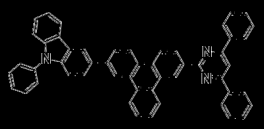
【0211】 量測根據本揭露製造的有機發光元件的驅動電壓、發光效率、色彩（EL 色彩）以及使用壽命的結果如下表 5 中所展示。

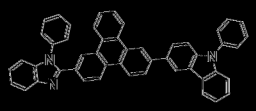
[表 5]

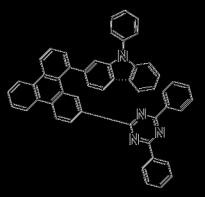
	發光層化合物	驅動電壓（V）	效率（cd/A）	色彩（EL 色彩）	使用壽命（T_{90}）
實例 1	1-3	4.66	71.1	綠色	352
實例 2	1-7	4.32	71.5	綠色	289
實例 3	1-11	4.33	74.2	綠色	405
實例 4	1-14	4.36	78.9	綠色	256
實例 5	1-26	4.66	71.2	綠色	360
實例 6	1-51	4.69	77.2	綠色	221
實例 7	1-56	4.41	75.8	綠色	225
實例 8	1-60	4.41	75.8	綠色	249
實例 9	1-76	4.67	71.2	綠色	356
實例 10	1-83	4.66	71.1	綠色	347
實例 11	1-87	4.67	71.2	綠色	277
實例 12	1-91	4.67	71.2	綠色	390
比較例 1	Ref. 1	5.42	45.7	綠色	47
比較例 2	Ref. 2	5.37	53.5	綠色	82
比較例 3	Ref. 3	5.45	59.8	綠色	78
比較例 4	Ref. 4	5.82	50.8	綠色	68
比較例 5	Ref. 5	5.47	41.2	綠色	57
比較例 6	Ref. 6	5.03	48.7	綠色	69
比較例 7	Ref. 7	5.66	45.8	綠色	48
比較例 8	Ref. 8	5.17	63.2	綠色	154
比較例 9	Ref. 9	5.35	61.2	綠色	105

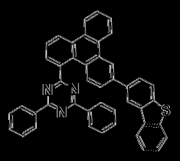

Ref. 1

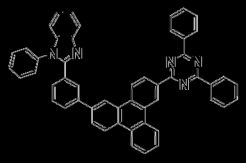

Ref. 2

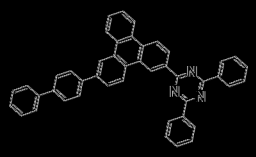

Ref. 3

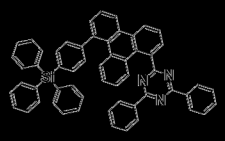

Ref. 4


Ref. 5


Ref. 6


Ref. 7

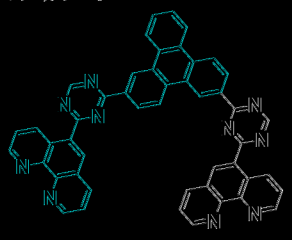
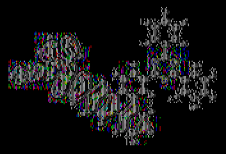
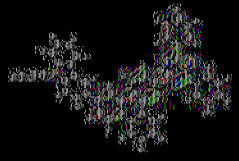

Ref. 8


Ref. 9

[02.12] 如自表 5 的結果所見，相較於比較例 1 至比較例 9，使用本揭露的有機電致發光元件的發光層材料的有機電致發光元件具有較低的驅動電壓、增強的發光效率以及顯著改良的使用壽命。

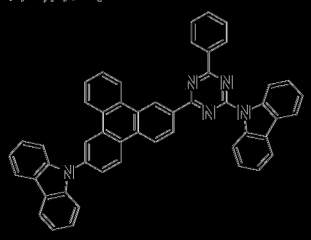
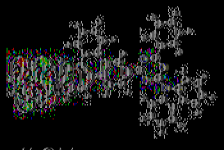
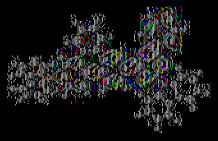
[02.13] 特定言之，在下表 6 中，化合物 Ref. 1 的 LUMO 軌跨咔啉基團與聯伸苯基團咔啉廣泛地非定域，且 LUMO 能級為 2.38。可確認，此結果藉由產生過量電子遷移率來抑制電荷平衡，且藉由 LUMO 能級低於抑制能量轉移的摻雜劑，量測到效率低。此外，可確認，相較於具有兩個取代基（Ref. 1），具有基於咔啉的單個取代基（化合物 1-11）具有優良的穩定性及增強的使用壽命。

[表 6]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 1		 6.24	 2.38
1-11		 5.26	 1.88

[0214] 此外，在下表 7 中，化合物 Ref. 2 的 HOMO 軌域於咔唑，而化合物 1-11 的 HOMO 軌廣泛地非定域於咔唑及聯伸三苯。可確認，此藉由增強電洞穩定性及遷移率而增強元件的效率及使用壽命。

[表 7]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 2		 5.37	 2.08

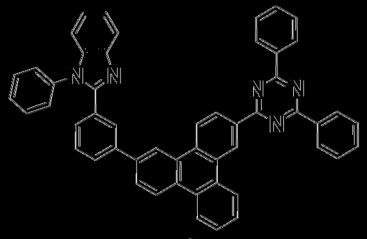
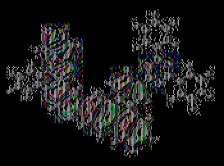
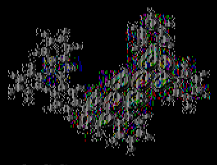
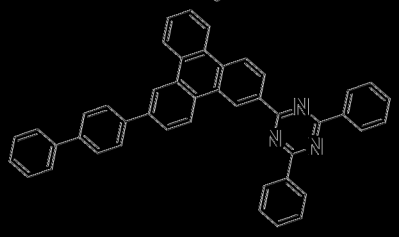
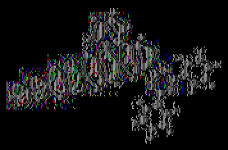
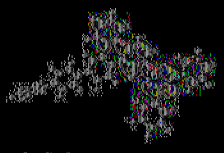
[0215] 化合物 Ref. 2、化合物 Ref. 3 以及化合物 Ref. 4 與本揭露的化學式 1 在取代位置方面不同。在化合物 Ref. 2、化合物 Ref. 3 以及化合物 Ref. 4 的結構中，HOMO 核心、連接子以及 LUMO 核心線性地連接，從而促進分子中的電荷轉移且降低能帶隙。可確認，低能帶隙抑制電洞及電子自輔助層注入至主體，此減小元件的效率及使用壽命。

[0216] 同樣，化合物 Ref. 5、化合物 Ref. 6 以及化合物 Ref. 9 與本揭露的化學式 1 亦在取代位置方面不同。具有如同化合物 Ref. 5、化合物 Ref. 6 以及化合物 Ref. 9 的結構的分子位阻的材料在分子穩定性方面的問題可為產生減小元件使用壽命的問題。

[0217] 在下表 8 中，化合物 Ref. 7 及化合物 Ref. 8 具有與本揭露的化學式 1 相同的取代位置，但具有不同取代基。特定言之，當在本揭露中單環雜芳基直接取代為聯伸三苯上的 Z1（或 Z2）時，另一取代基 Z2（或 Z1）為矽烷基、芳基或三環或高於三環的雜芳基，而化合物 Ref. 7 及化合物 Ref. 8 經雙環雜芳基及芳基（聯苯

其）取代。

[表 8]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 7		 5.68	 -1.88
Ref. 8		 5.63	 -1.94

[0218] 在化合物 Ref. 7 中，HOMO 軌廣泛地非定域於咪唑及聯伸三苯。HOMO 核心需要使電洞穩定，然而，相較於化合物 1-11 的吡唑，咪唑不適合用於使電洞穩定，且減小元件的使用壽命。

[0219] 此外，化合物 Ref. 8 的 HOMO 軌非定域於苯基及聯伸三苯。相較於咪唑，化合物 Ref. 8 的 HOMO 核心能夠使電洞穩定，然而，可確認相較於吡唑，獲得低電洞穩定性及短使用壽命。

[0220] 在有機電致發光元件中，發光屑中的主體的所得物可取決於轉移至發光屑的電洞與電子之間的平衡度而改變。

<實驗實例 2>

有機發光元件的製造

[0221] 用蒸餾水超音波清潔玻璃基底，氧化銦錫（ITO）作為薄膜以 1,500 埃的厚度塗佈於所述玻璃基底上。在用蒸餾水清潔完成之後，用溶劑（諸如丙酮、甲醇以及異丙醇）來超音波清潔基底，接著乾燥，且在紫外線（UV）清潔器中使用 UV 進行紫外線臭氧（UVO）處理 5 分鐘。此後，將基底轉移至電漿清潔器（PT），且

在真空下進行電漿處理以用於 ITO 功函數及殘餘膜移除之後，將基底轉移至熱沈積裝置以用於有機沈積。

【0222】 在透明 ITO 電極（陽極）上，形成作為常用層的電洞注入層 2-TNATA（4,4′,4"-三 [2-萘基(苯基)胺基]三苯胺）及電洞轉移層 NPB(N,N′-二(1-萘基)-N,N′-二苯基-(1,1′-聯苯基)-4,4′-二胺)。

【0223】 如下在其上熱真空沈積發光層。作為發光層，一種類型的化學式 1 的化合物以及一種類型的化學式 2 或化學式 3 的化合物如下表 9 中所描述預混合且在一個供應源中沈積至 400 埃作為主體，且綠色磷光摻雜劑[$Ir(ppy)_3$]以發光層的沈積厚度的 7%的量摻雜且沈積。此後，將 BCP（浴銅靈）沈積至 60 埃作為電洞阻擋層，且於其上將 Alq_3 沈積至 200 埃作為電子轉移層。最後，藉由將氟化鋰（LiF）沈積至 10 埃的厚度來在電子轉移層上形成電子注入層，且接著藉由將鋁（Al）陰極沈積至 1,200 埃的厚度來在電子注入層上形成陰極，且因此，製造有機電致發光元件。

【0224】 同時，在 10^{-8} 托至 10^{-6} 托下針對 OLED 製造中使用的各材料真空昇華純化製造 OLED 所需的所有有機化合物。

【0225】 對於如上所製造的有機電致發光元件中的每一者，使用由麥克科學公司製造的 M7000 來量測電致發光（EL）性質，且藉由量測結果，當標準亮度為 6,000 坎德拉/平方公尺時，經由由麥克科學公司製造的使用壽命量測系統（M6000）來量測 T_{90}。

【0226】 量測根據本揭露製造的有機發光元件的驅動電壓、發光效率、色彩（EL 色彩）以及使用壽命的結果如下表 9 中所展示。

[表 9]

	發光層化合物	比	驅動電壓(V)	效率(cd/A)	色彩（EL色彩）	使用壽命(T_{90})

實例 13	1-11:2-2	1:8	4.73	54.2	綠色	338
實例 14	1-11:2-2	1:5	4.71	57.2	綠色	444
實例 15	1-11:2-2	1:2	4.33	75.2	綠色	679
實例 16	1-11:2-2	1:1	4.48	70.2	綠色	546
實例 17	1-11:2-2	2:1	4.69	69.2	綠色	525
實例 18	1-11:2-2	5:1	4.32	68.3	綠色	433
實例 19	1-11:2-2	8:1	4.21	67.0	綠色	325
實例 20	1-26:2-3	1:2	4.35	79.2	綠色	599
實例 21	1-26:2-3	1:1	4.41	75.8	綠色	591
實例 22	1-26:2-3	2:1	4.67	71.2	綠色	540
實例 23	1-7:2-12	1:2	4.38	76.4	綠色	539
實例 24	1-7:2-12	1:1	4.45	72.8	綠色	522
實例 25	1-7:2-12	2:1	4.66	71.1	綠色	500
實例 26	1-91:3-4	1:2	4.33	75.2	綠色	620
實例 27	1-91:3-4	1:1	4.48	70.2	綠色	582
實例 28	1-91:3-4	2:1	4.69	69.2	綠色	543
實例 29	1-3:3-7	1:2	4.33	75.2	綠色	569
實例 30	1-3:3-7	1:1	4.48	70.2	綠色	543
實例 31	1-3:3-7	2:1	4.69	69.2	綠色	518
實例 32	1-76:3-31	1:2	4.31	79.2	綠色	586
實例 33	1-76:3-31	1:1	4.42	75.7	綠色	558
實例 34	1-76:3-31	2:1	4.66	71.1	綠色	536
實例 35	1-83:3-32	1:2	4.33	74.2	綠色	562
實例 36	1-83:3-32	1:1	4.42	72.2	綠色	553
實例 37	1-83:3-32	2:1	4.66	71.2	綠色	528

【0227】 自表 9 的結果，可確認當同時包含化學式 1 的化合物（N 型）以及化學式 2 或化學式 3 的化合物（P 型）時，獲得更優良的效率及使用壽命的效果。此類結果可導致預測當同時包含兩種化合物時，激發複合物現象出現。

【0228】 激發複合物現象為由於兩個分子之間的電子交換而釋放具有供體（p 主體）HOMO 能級及受體（n 主體）LUMO 能級的大小的能量的現象。當激發複合物現象出現在兩個分子之間時，反向系統間穿越（reverse intersystem crossing；RISC）出現，且因此，螢光的內部量子效率可增大至 100%。當具有良好電洞轉移能力的供體（p 主體）及具有良好電子轉移能力的受體（n 主體）用作發

光層的主體時，將電洞注入至 p 主體且將電子注入至 n 主體，且因此，可降低驅動電壓，從而最終有助於增強使用壽命。在本申請案的揭露內容中，化學式 2 或化學式 3 的化合物執行供體作用，且化學式 1 的化合物執行受體作用，且當一起用作發光層主體時，獲得極佳元件性質。

【符號說明】

【0229】

100:基底

200:陽極

300:有機材料層

301:電洞注入層

302:電洞轉移層

303:發光層

304:電洞阻擋層

305:電子轉移層

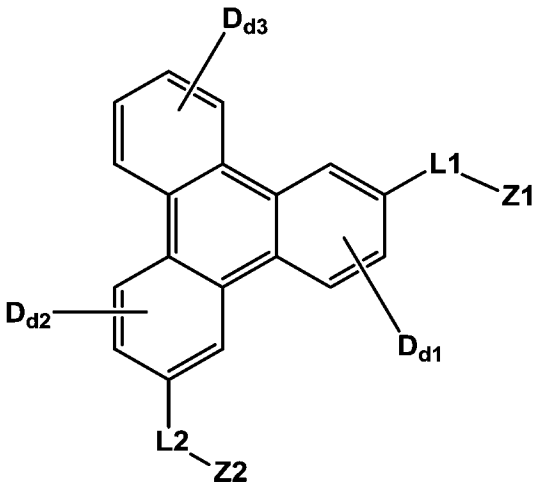
306:電子注入層

400:陰極

【發明申請專利範圍】

【請求項1】 一種化合物，具有以下化學式 1：

[化學式 1]



其中，在化學式 1 中，

d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，

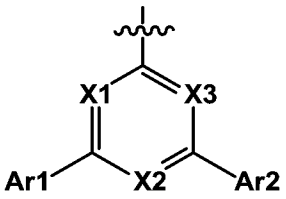
d3 為 0 至 4 的整數，

L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

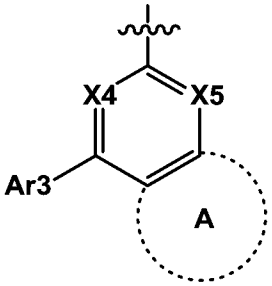
Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且

Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基，

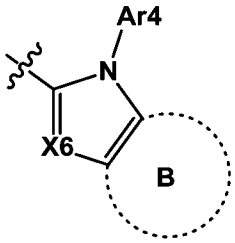
[化學式 1-1]



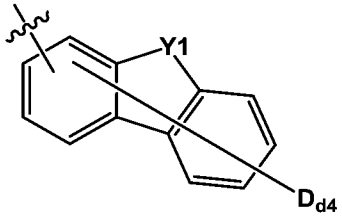
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環，且

當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

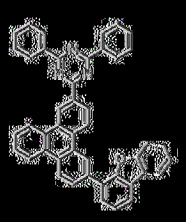
【請求項2】 如請求項 1 所述的化合物，其中 L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

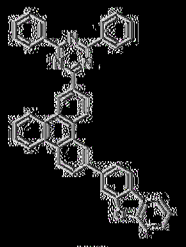
【請求項3】 如請求項 1 所述的化合物，其中化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

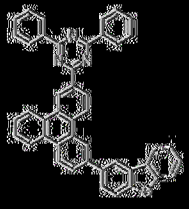
【請求項4】 如請求項 1 所述的化合物，其中化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環，且化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環。

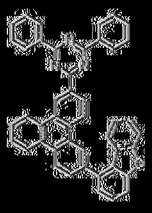
【請求項5】 如請求項 1 所述的化合物，其中 Z1 及 Z2 中的至少一者為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基。

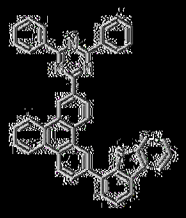
【請求項6】 如請求項 1 所述的化合物，其中化學式 1 由以下化合物中的任一者表示：

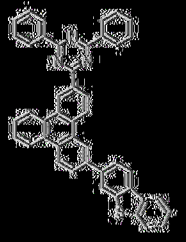


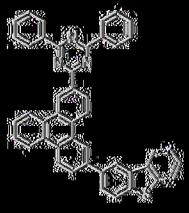


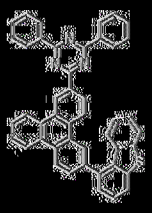


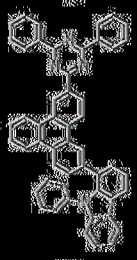


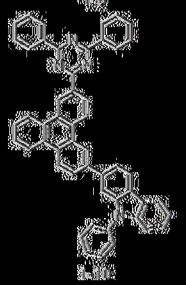


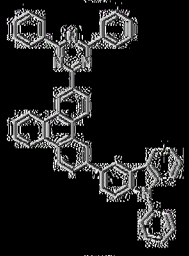


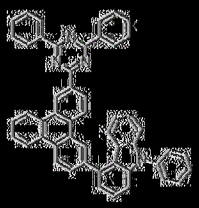


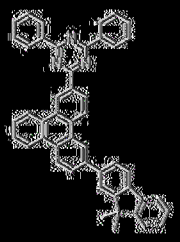




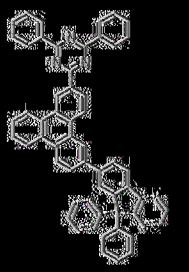


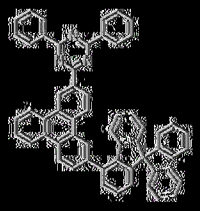


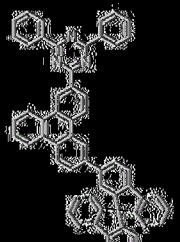


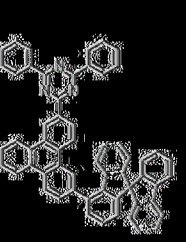


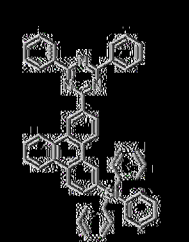


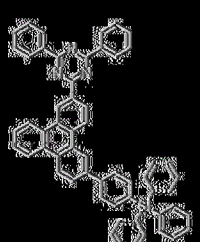


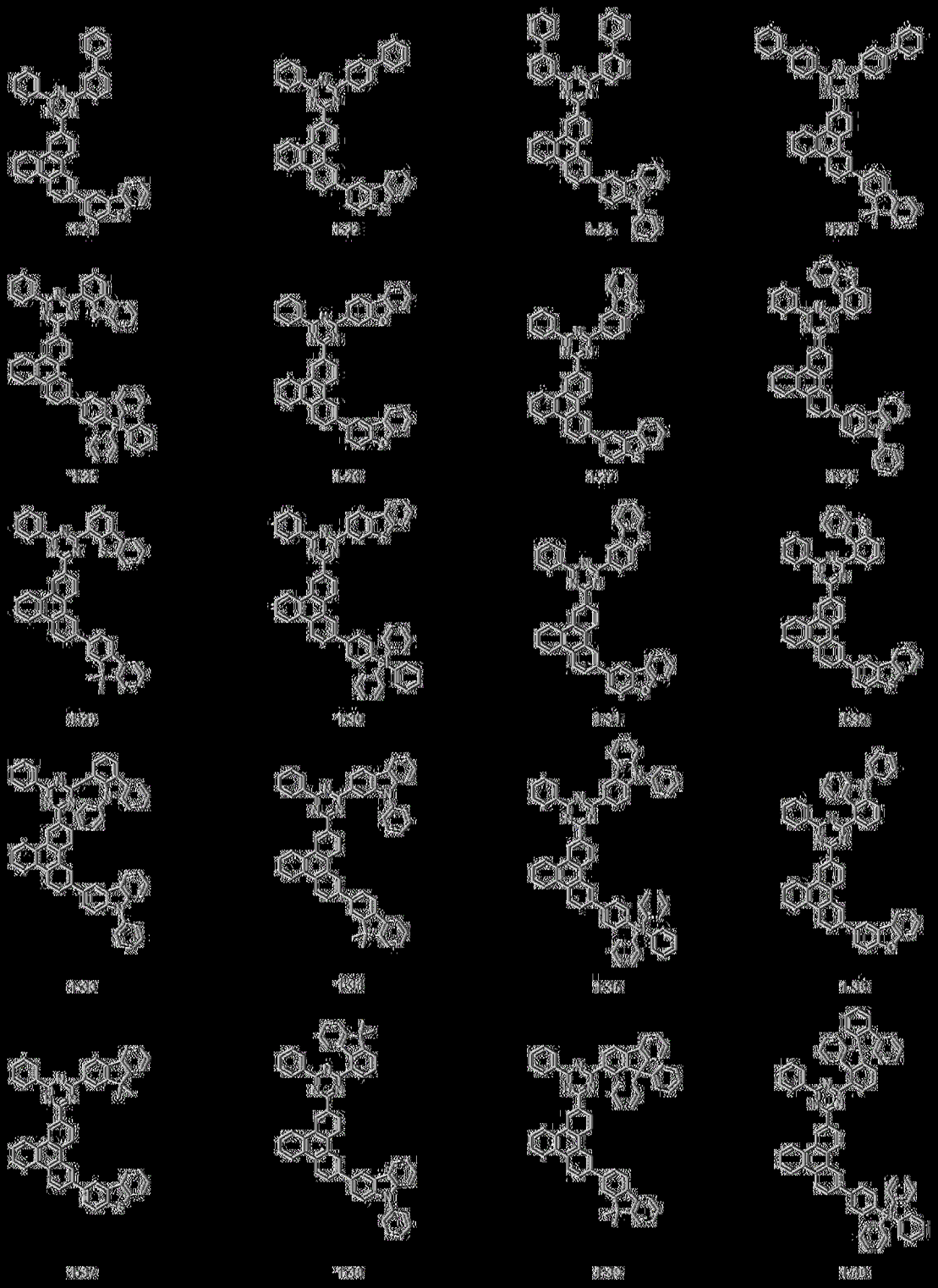


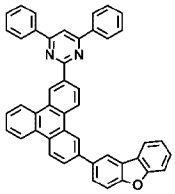




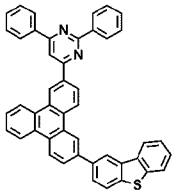




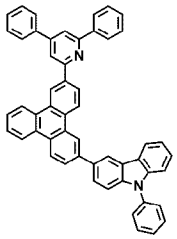




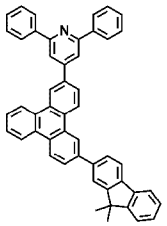
1-41



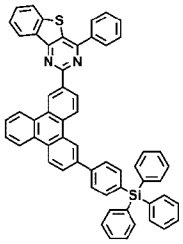
1-42



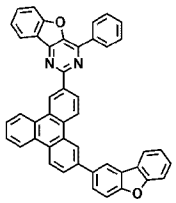
1-43



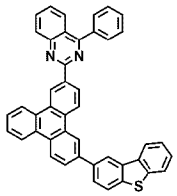
1-44



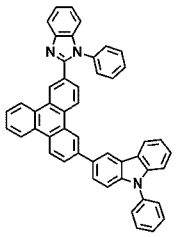
1-45



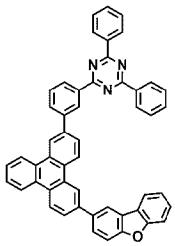
1-46



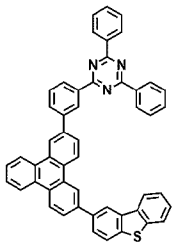
1-47



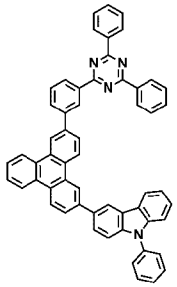
1-48



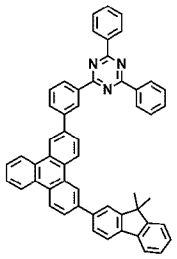
1-49



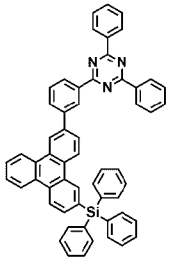
1-50



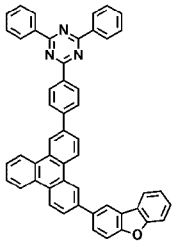
1-51



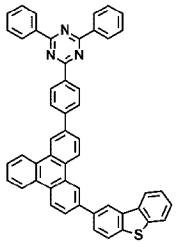
1-52



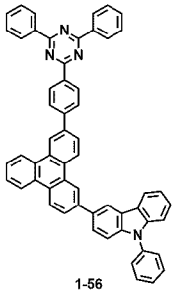
1-53



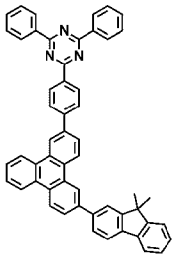
1-54



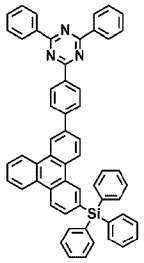
1-55



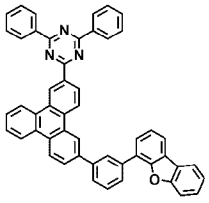
1-56



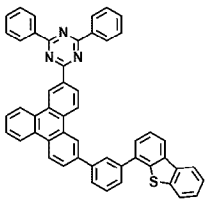
1-57



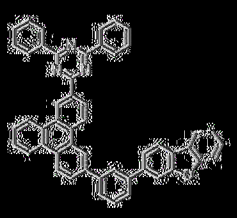
1-58

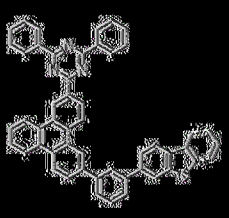


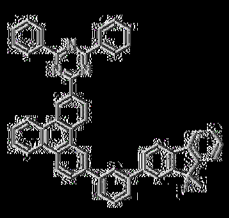
1-59

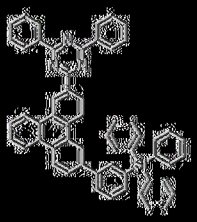


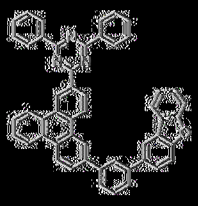
1-60

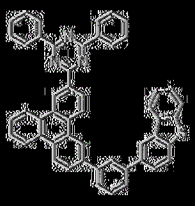


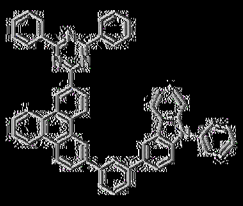


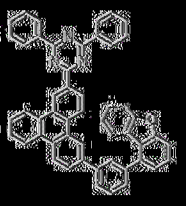


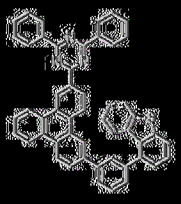


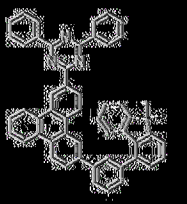


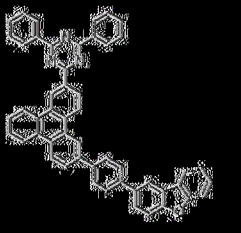


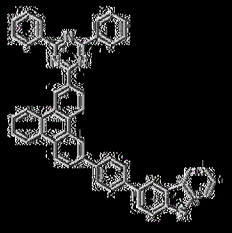


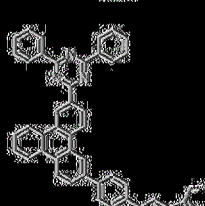


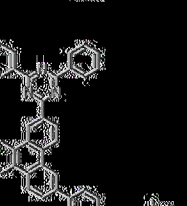


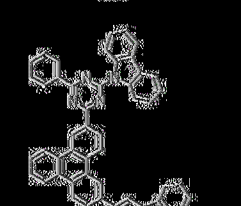


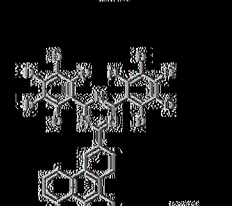


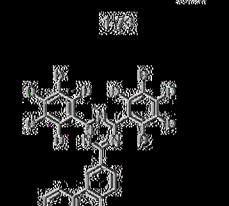


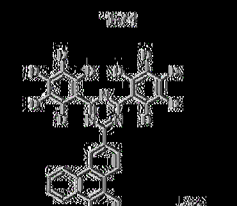


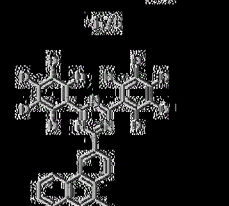


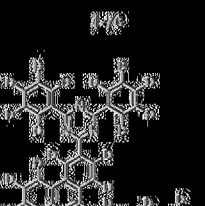


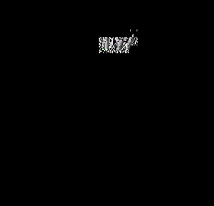




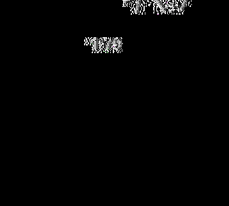


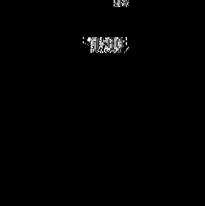


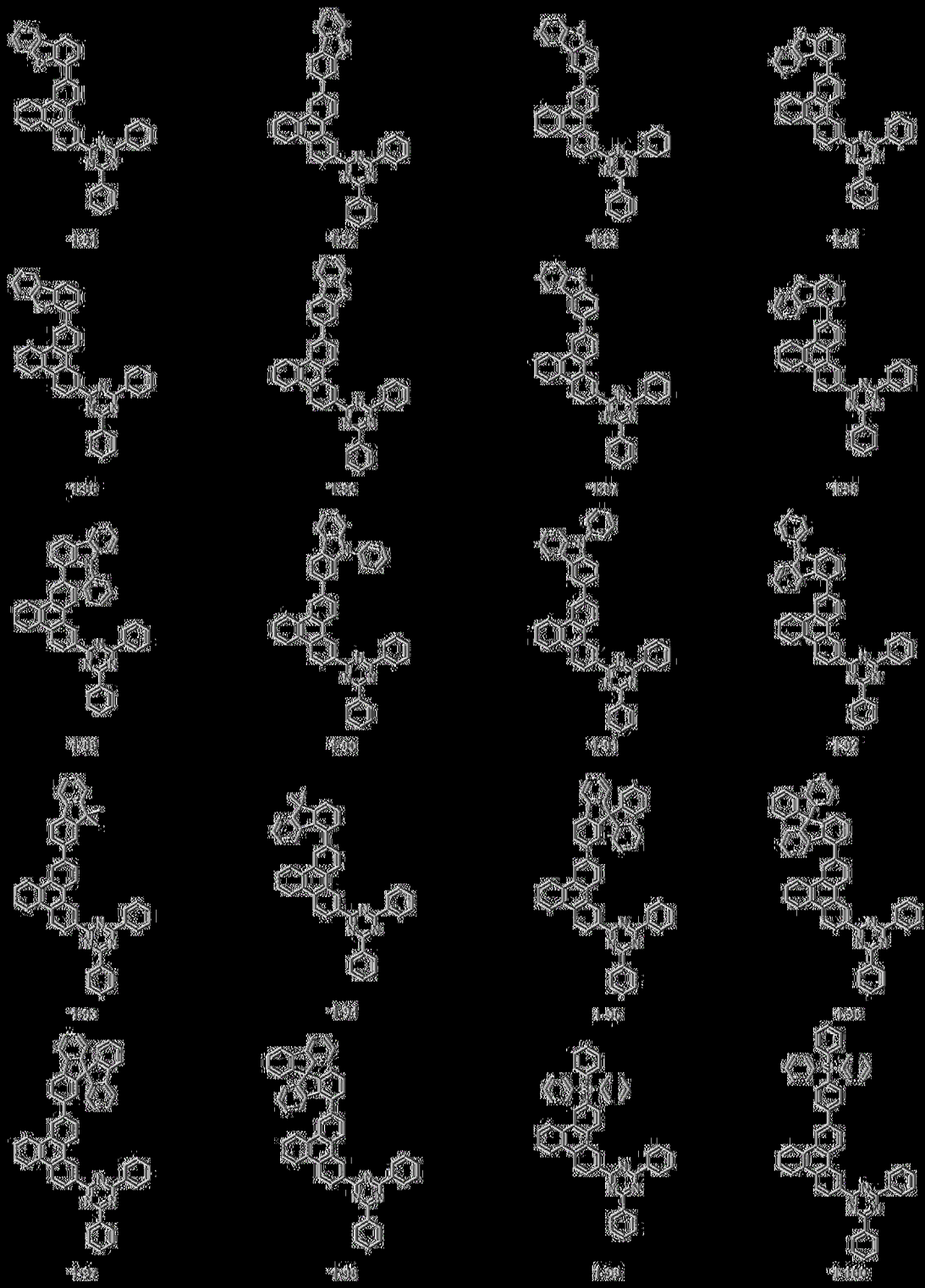


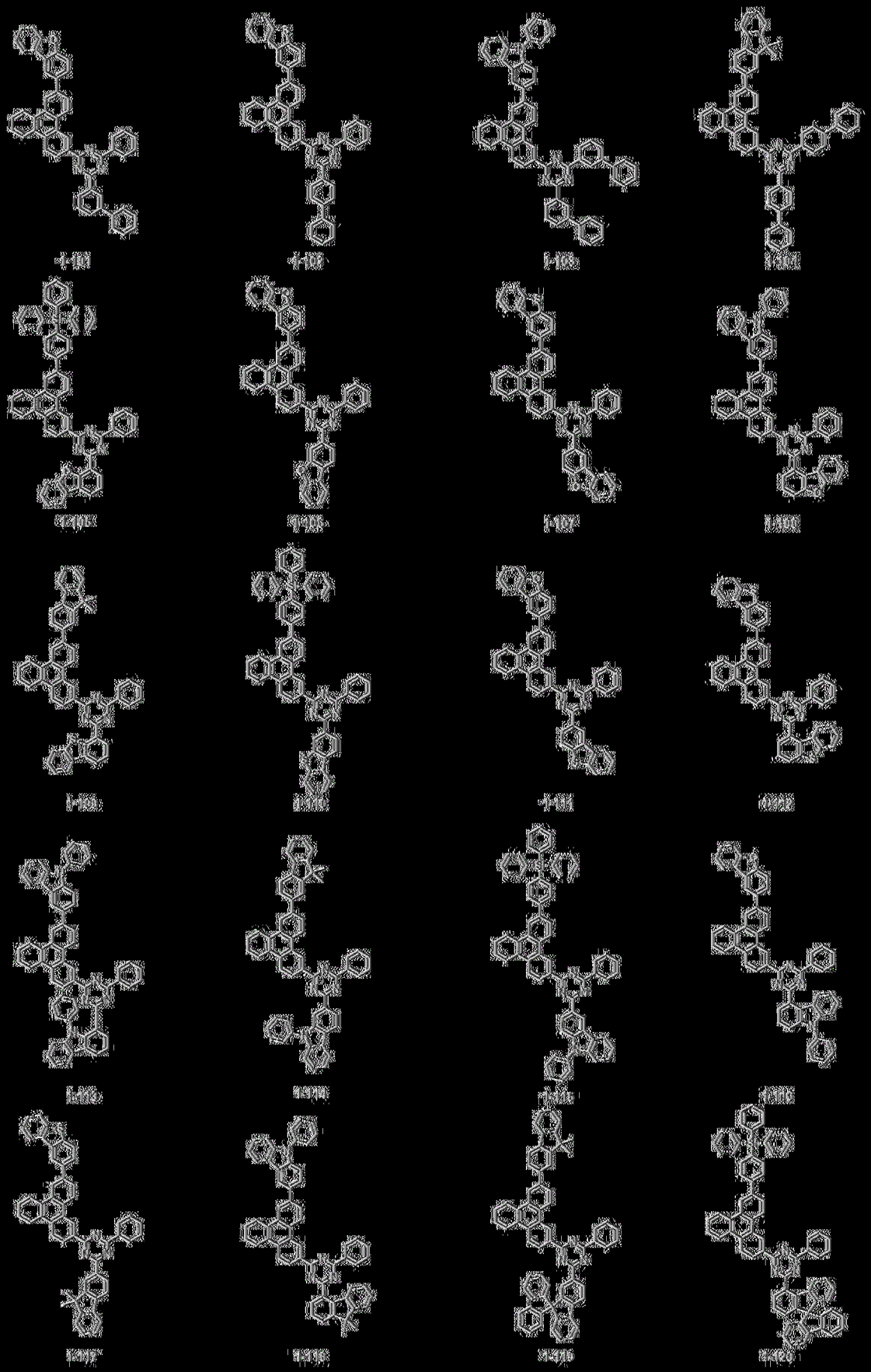


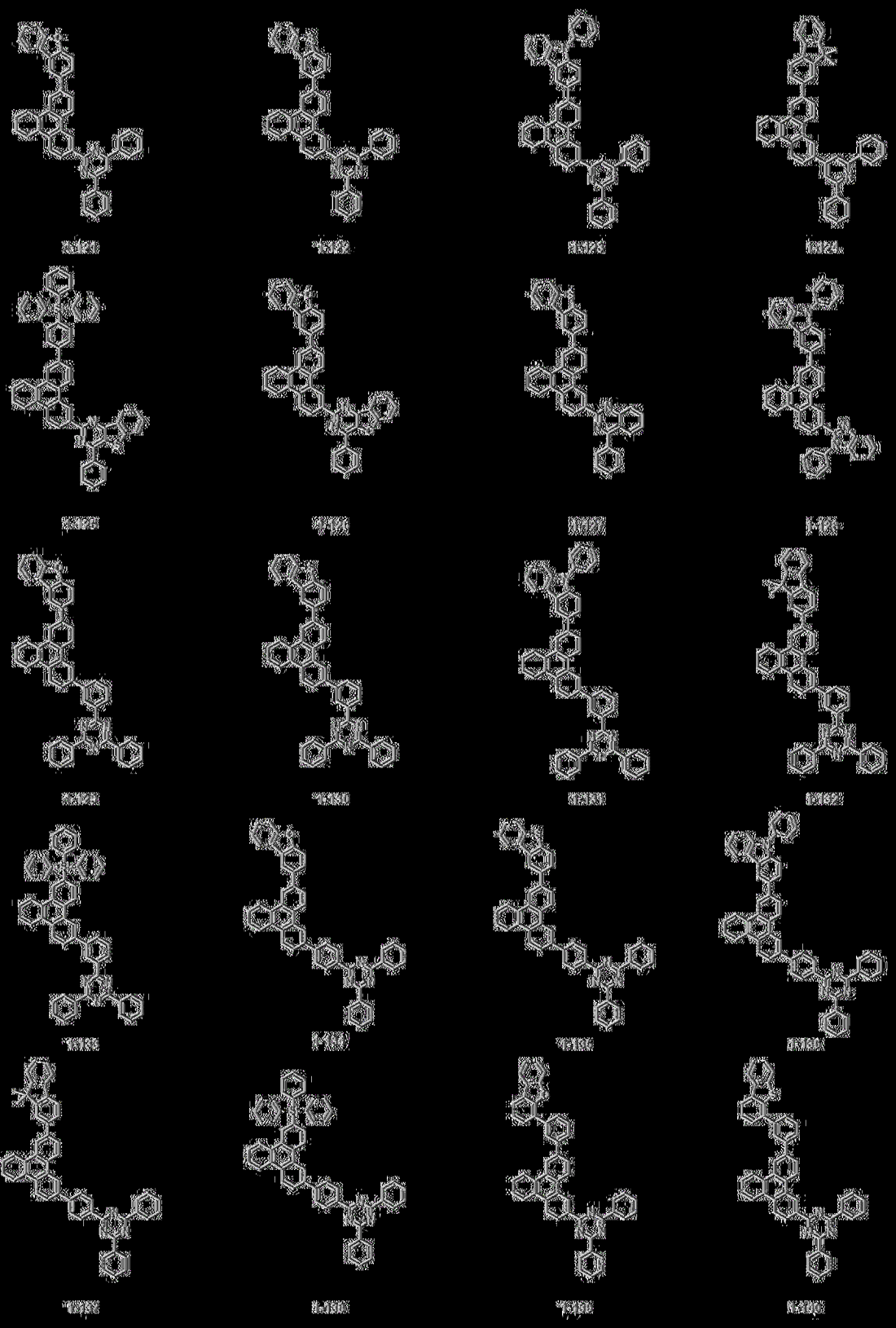


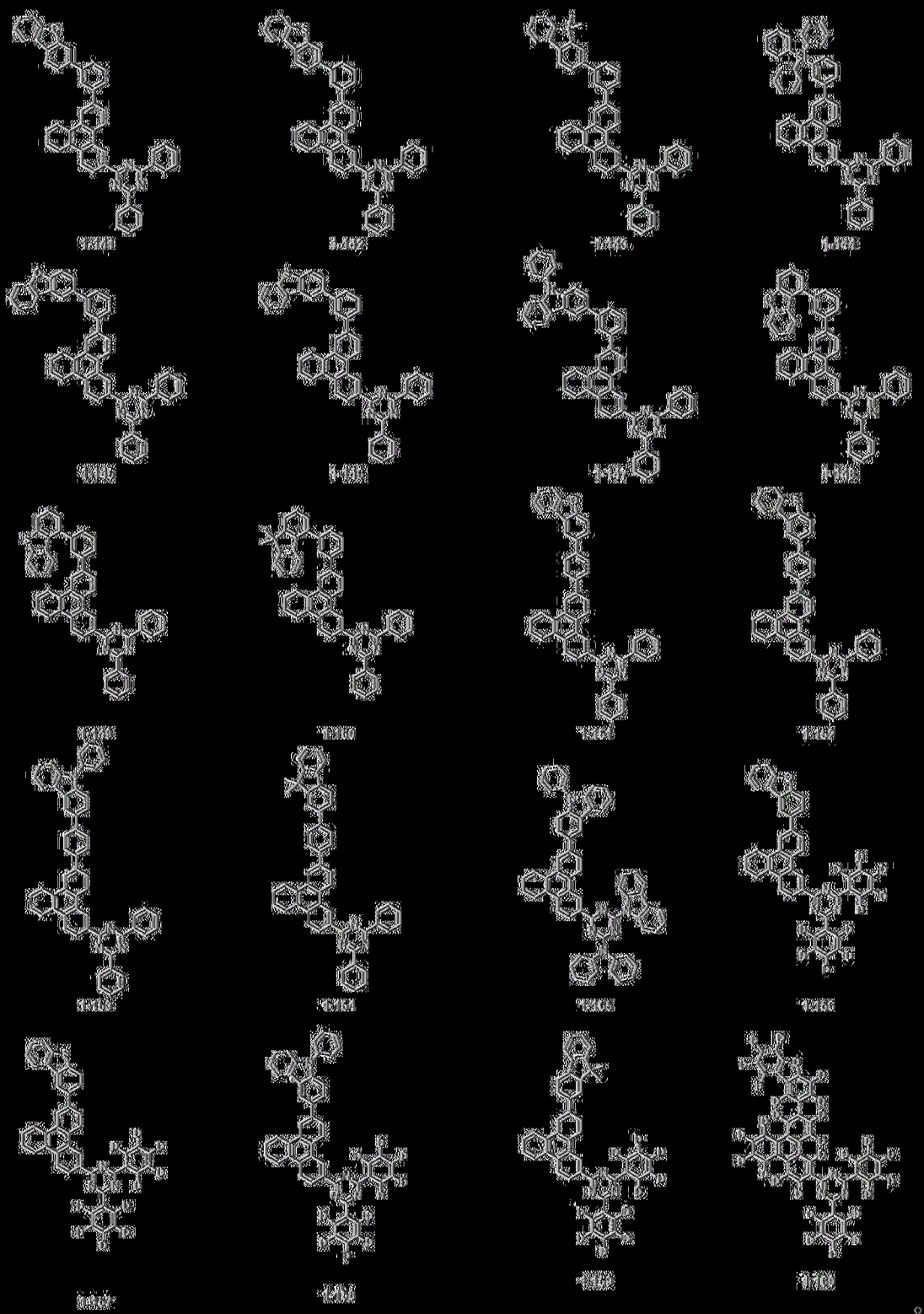












。

[請求項7] 一種有機發光元件，包括：

第一電極；

第二電極；以及

有機材料層，設置於所述第一電極與所述第二電極之間，

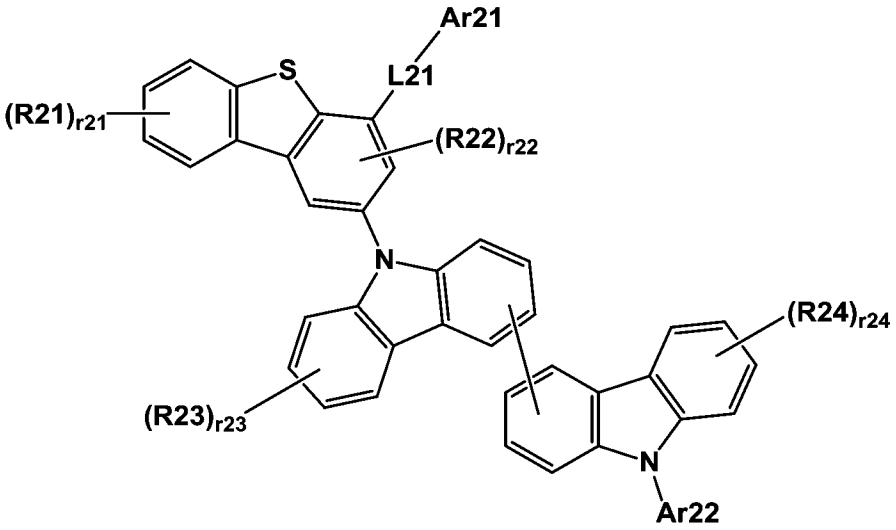
其中所述有機材料層包含一或多種類型的如請求項 1 至 6 中任一項所述的化合物。

【請求項8】 如請求項 7 所述的有機發光元件，其中所述有機材料層包含發光層，且所述發光層包含所述化合物。

【請求項9】 如請求項 7 所述的有機發光元件，其中所述有機材料層包含發光層，所述發光層包含主體，且所述主體包含所述化合物。

【請求項10】如請求項 8 所述的有機發光元件，其中所述發光層更包含以下化學式 2 或化學式 3 的化合物：

[化學式 2]



在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

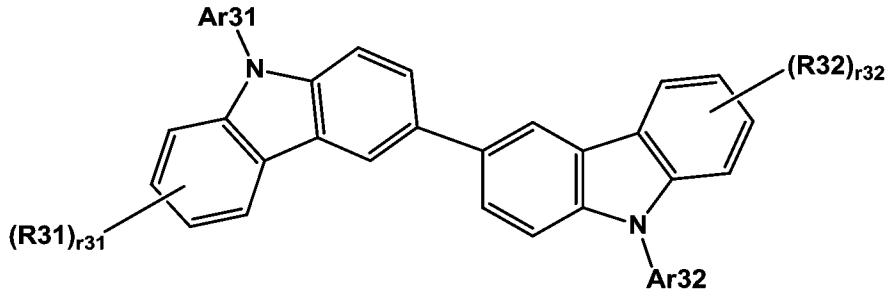
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

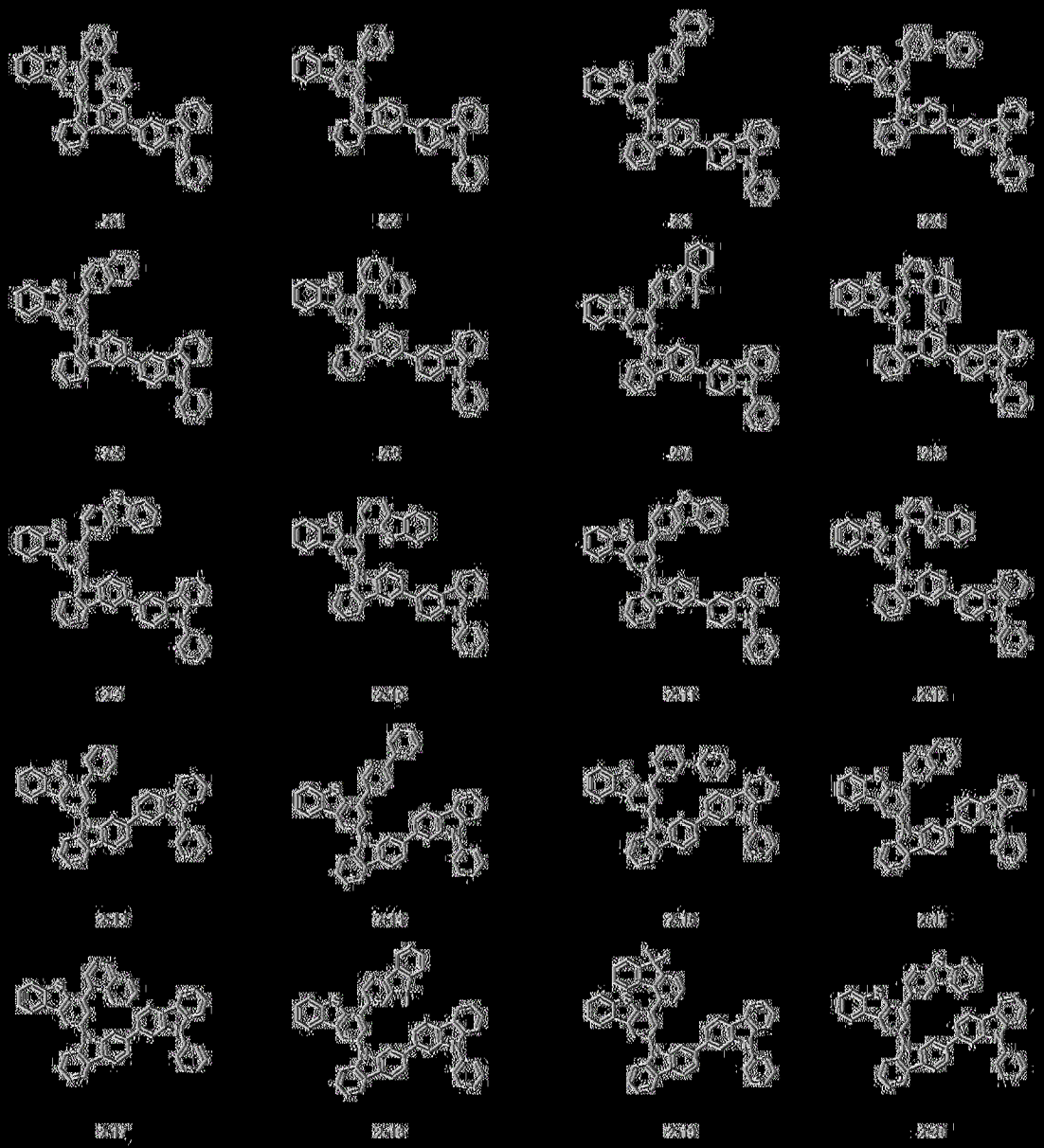
Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

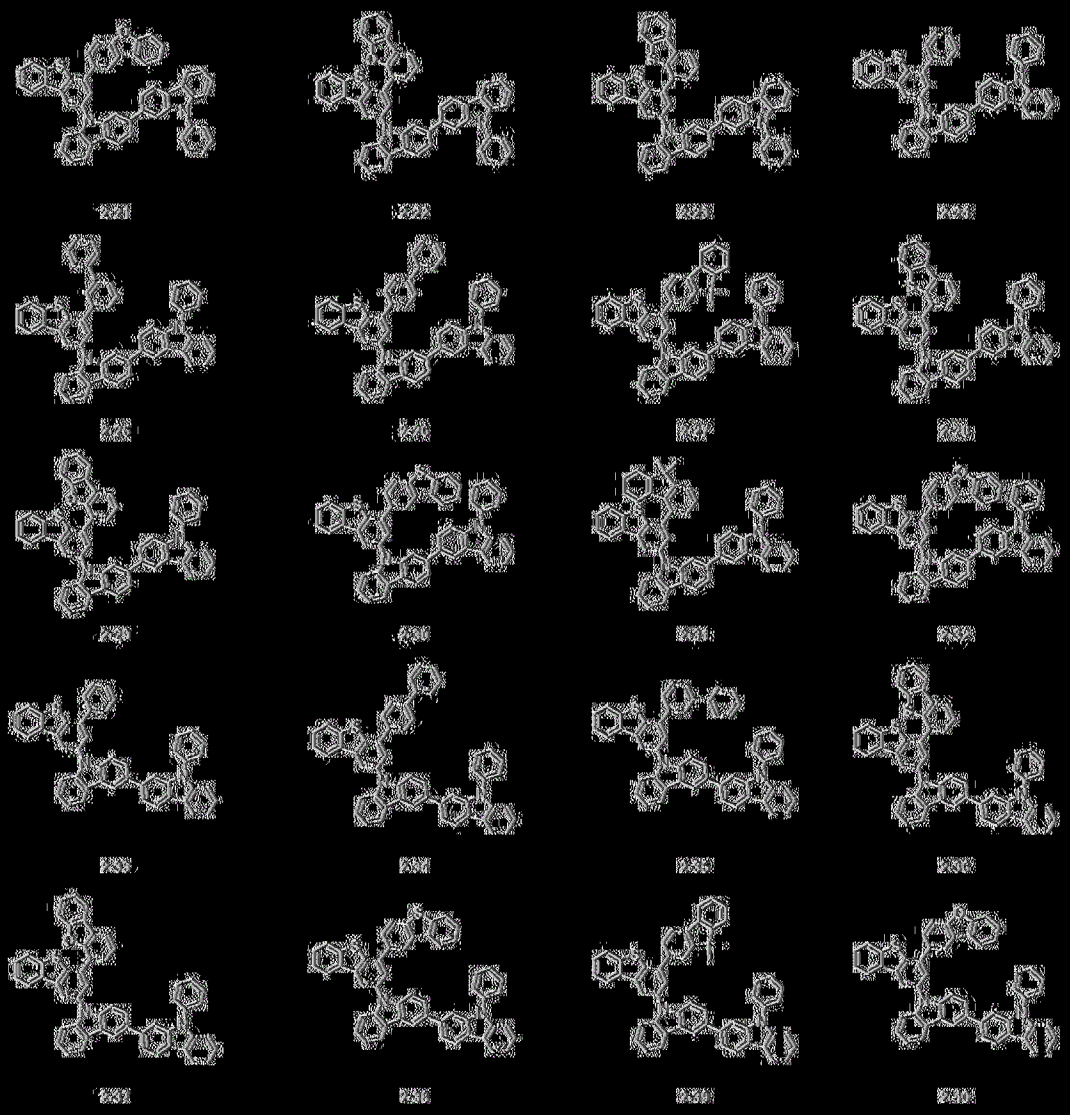
r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

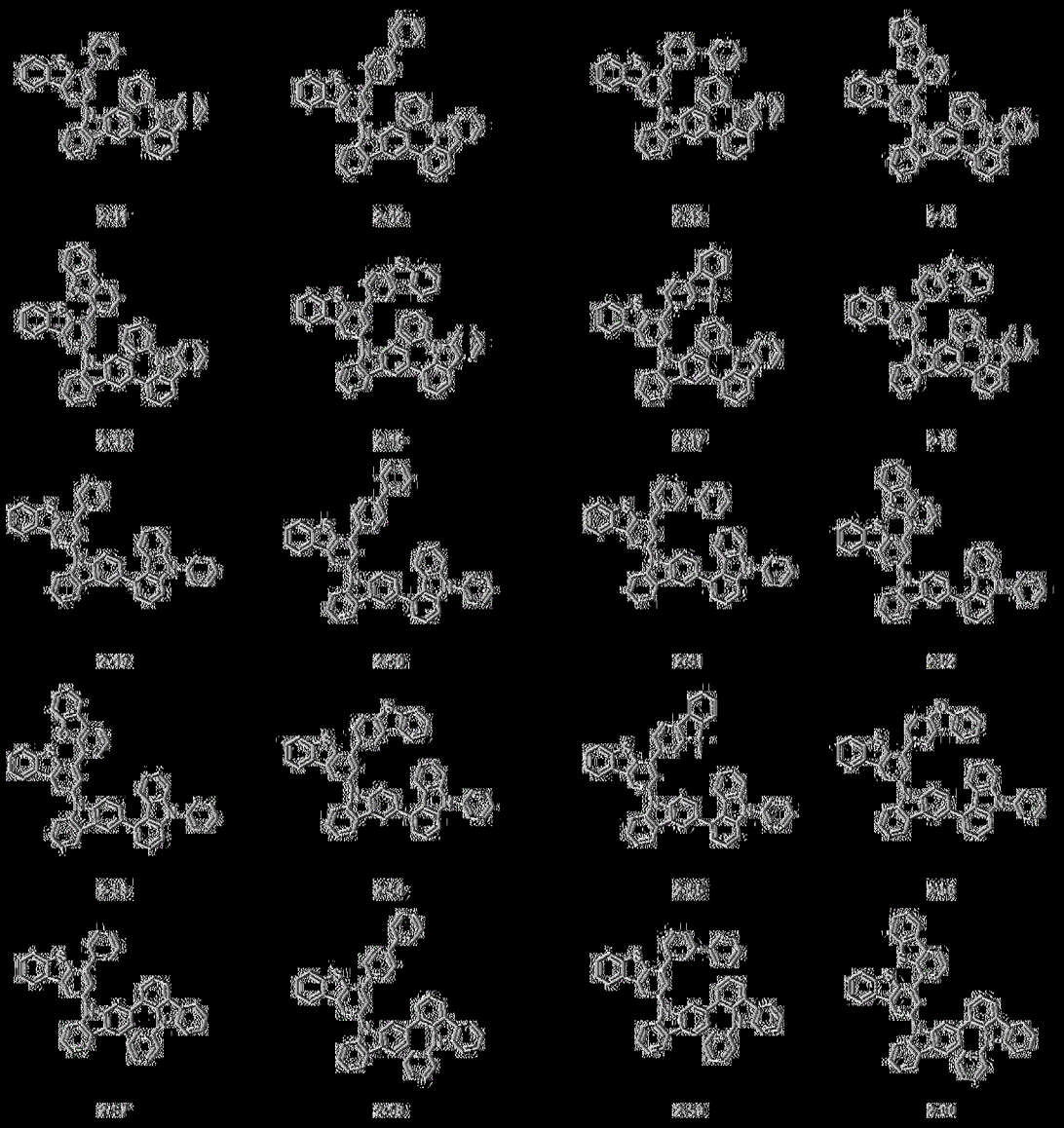
r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或

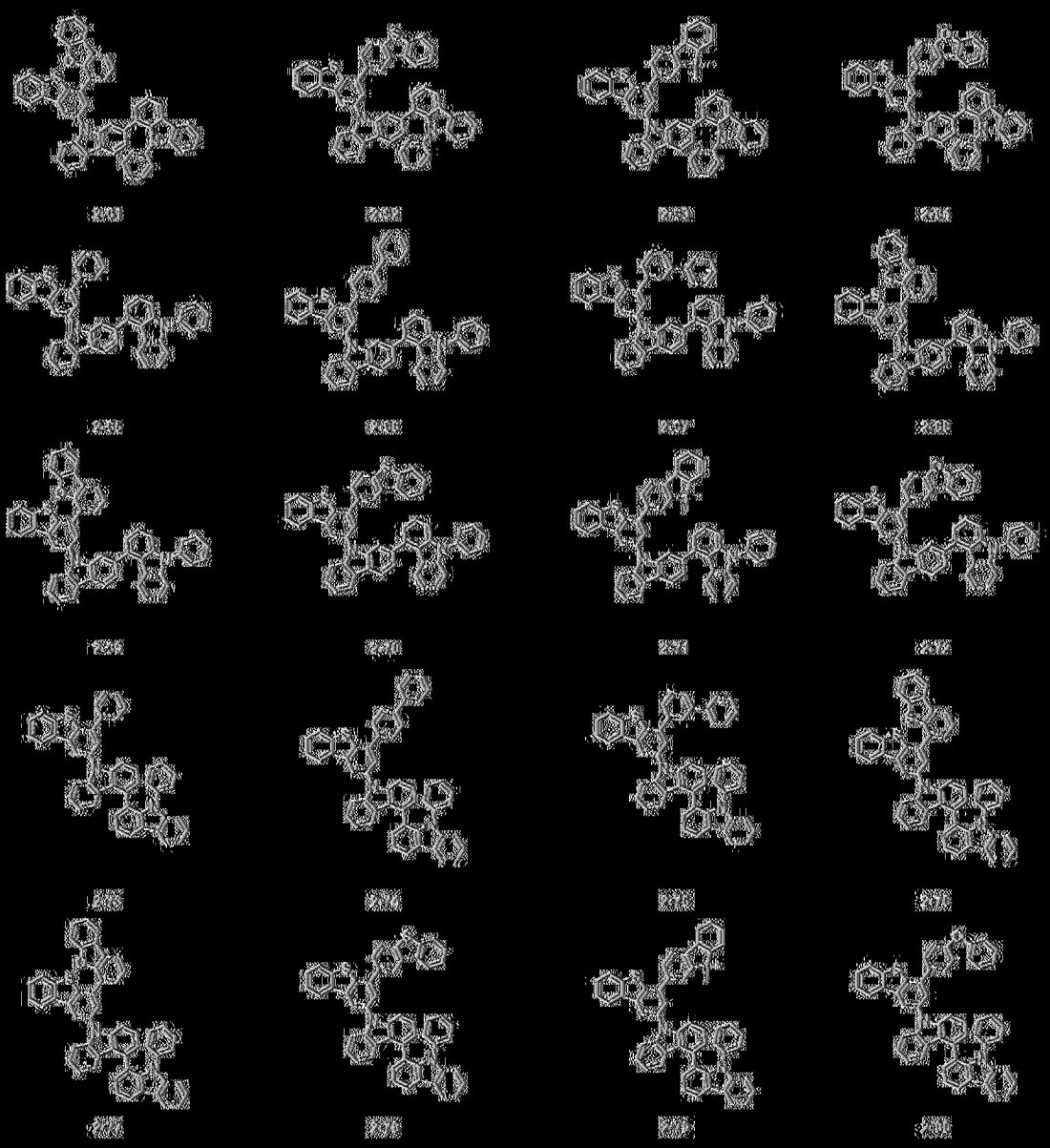
不同。

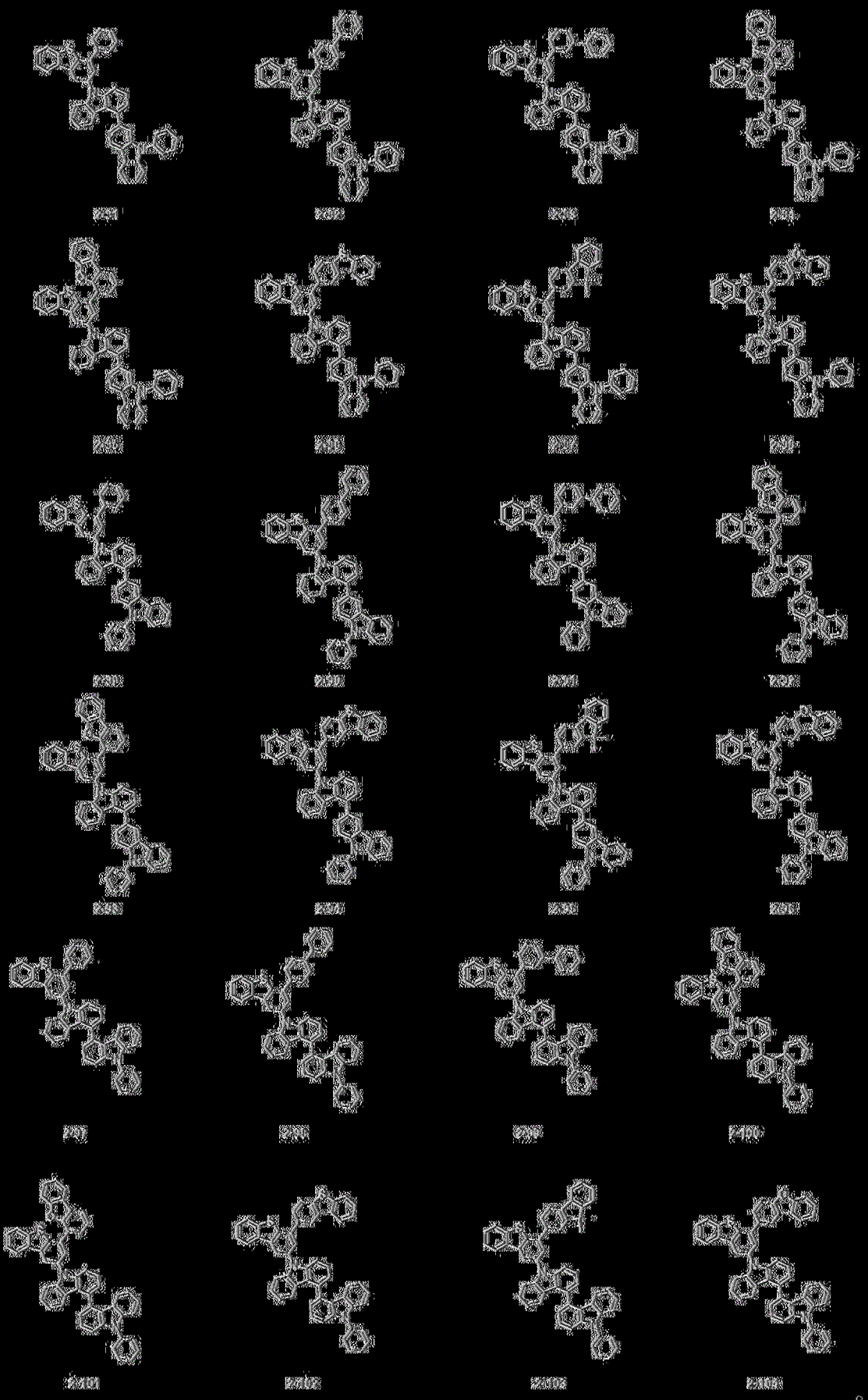
[請求項11] 如請求項 10 所述的有機發光元件，其中化學式 2 由以下化合物中的任一者表示：





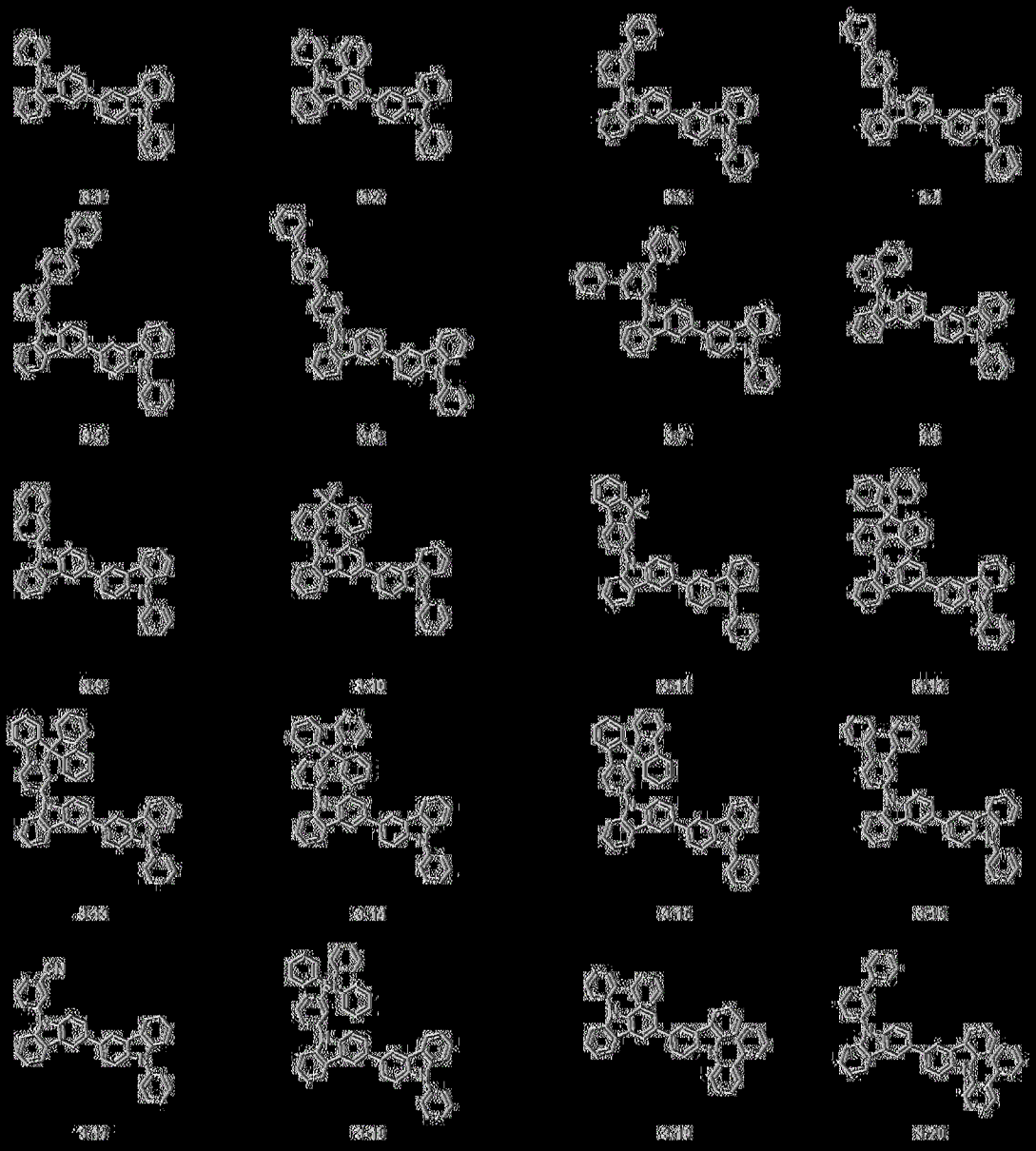


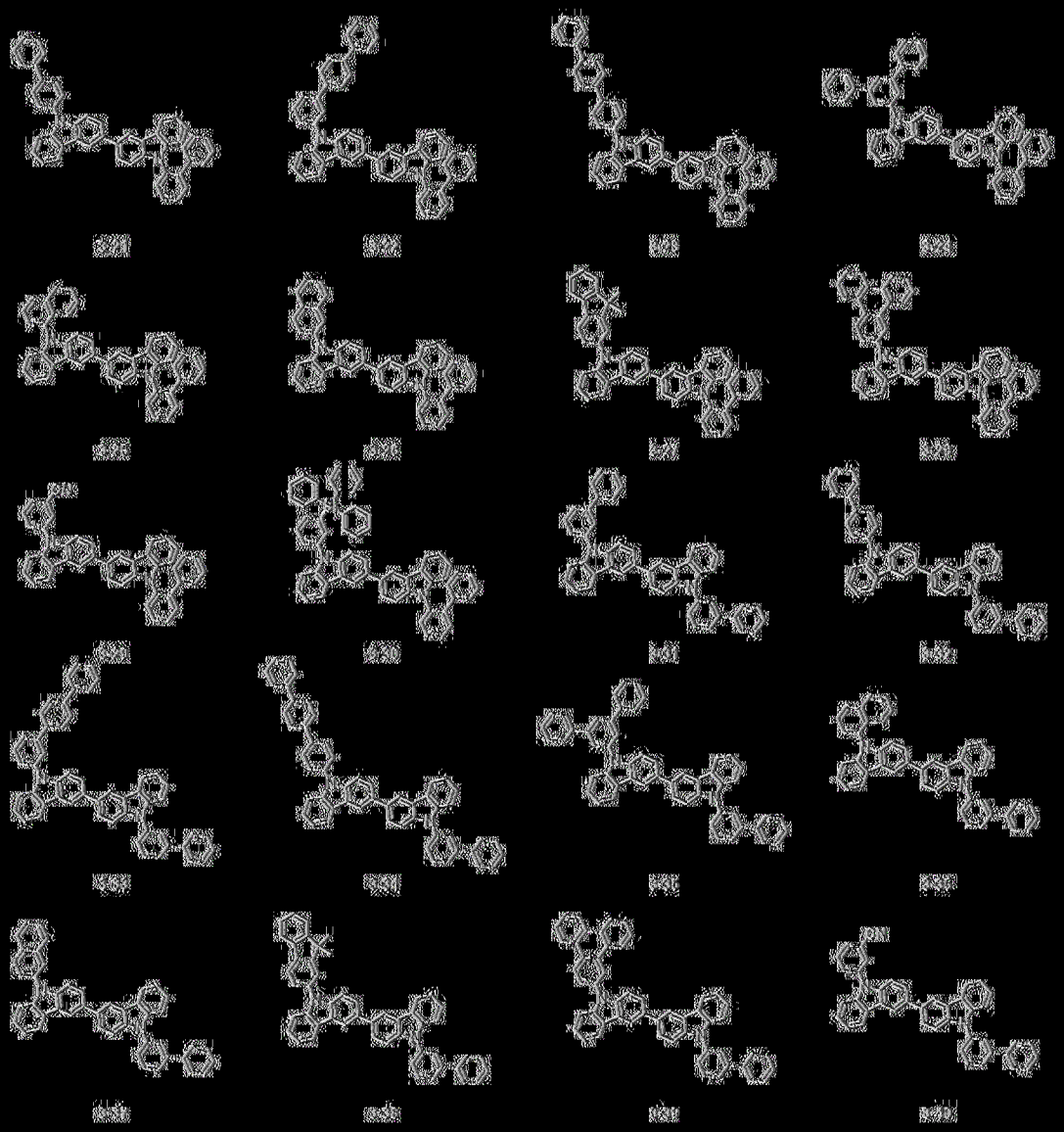


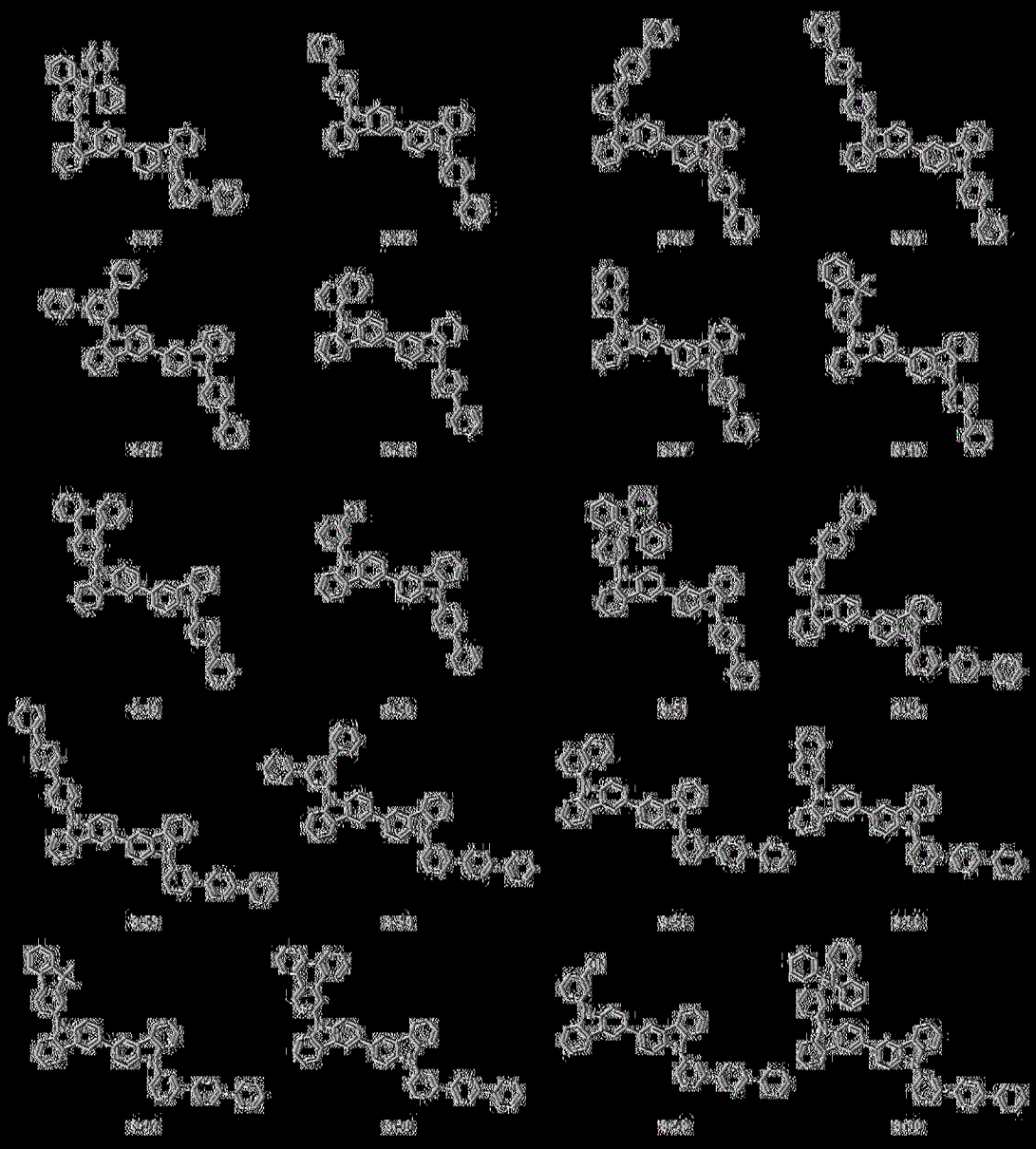


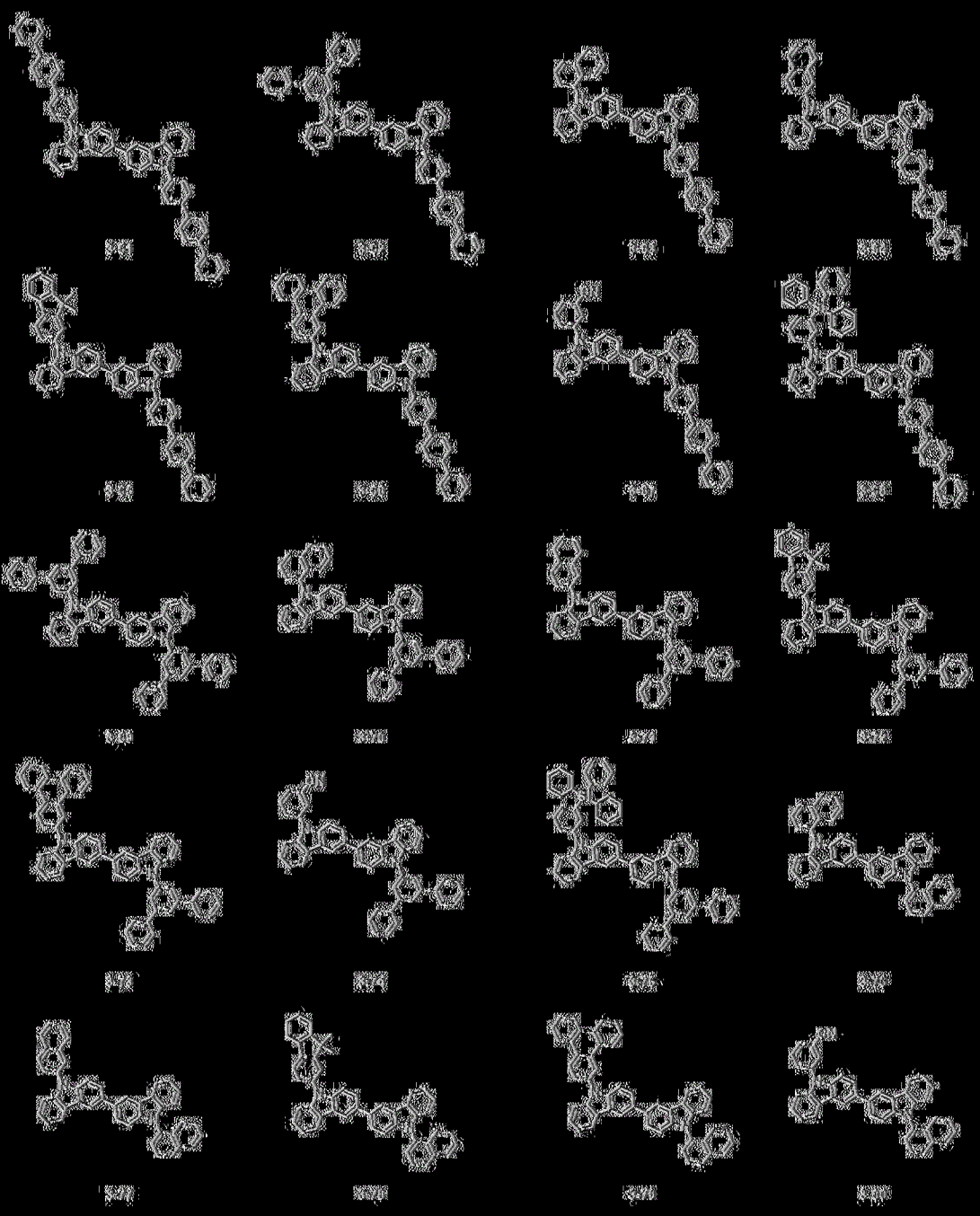
[請求項12] 如請求項 10 所述的有機發光元件，其中化學式 3 由

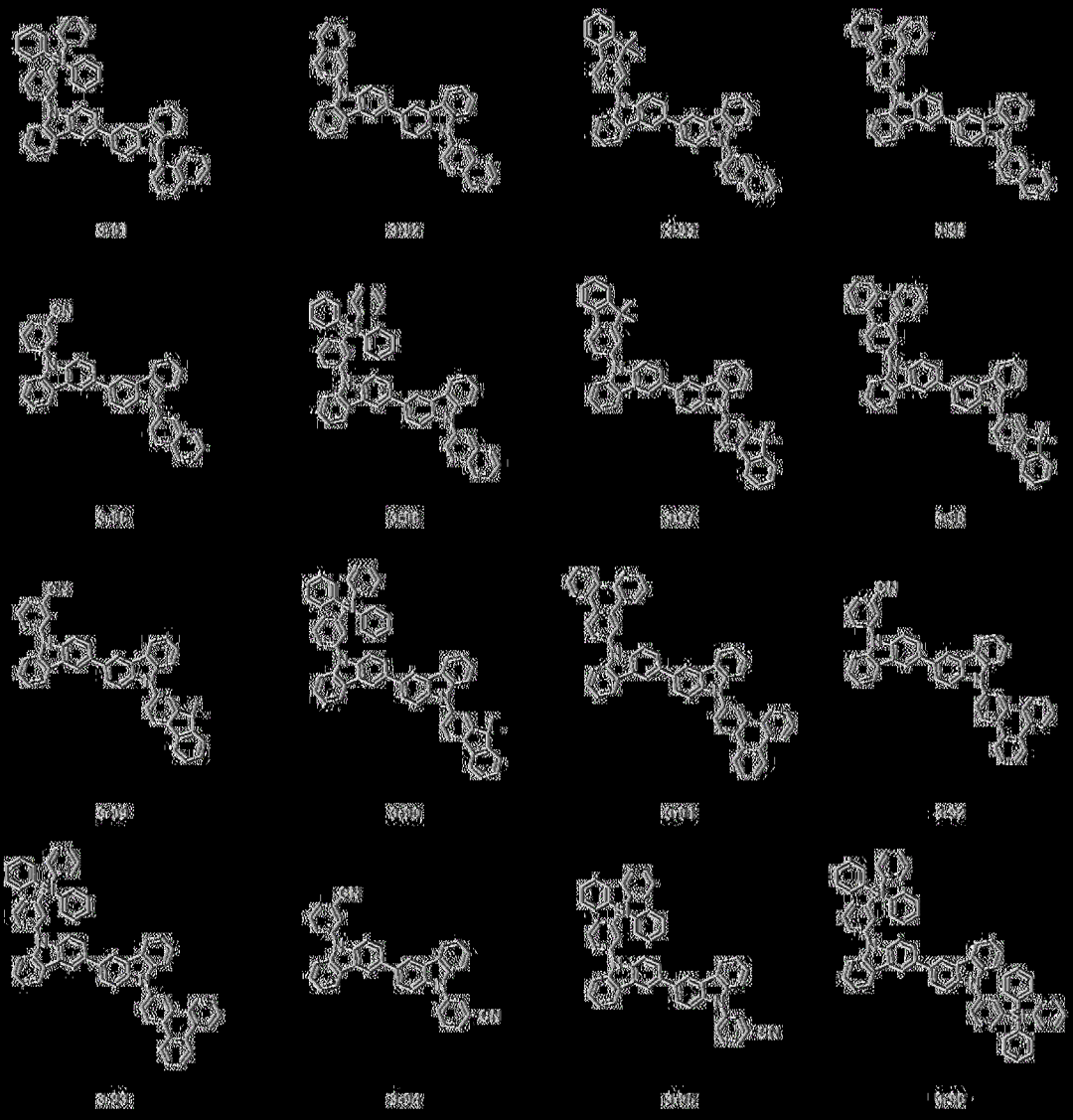
以下化合物中的任一者表示：











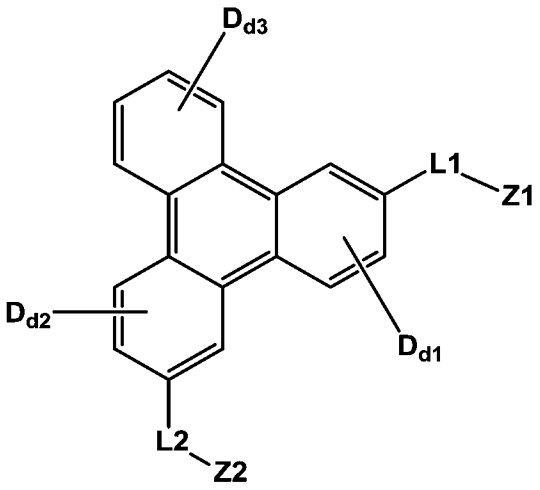
。

[請求項13]一種用於形成有機材料層的組合物，所述組合物包括：

以下化學式1的化合物；以及

以下化學式2或化學式3的化合物：

[化學式1]



其中，在化學式 1 中，

d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，

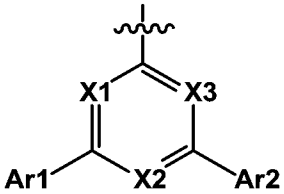
d3 為 0 至 4 的整數，

L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

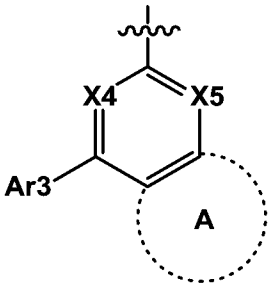
Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且

Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基，

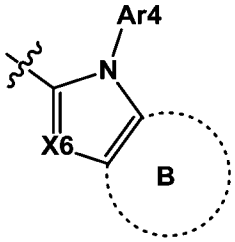
[化學式 1-1]



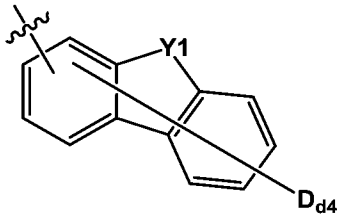
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

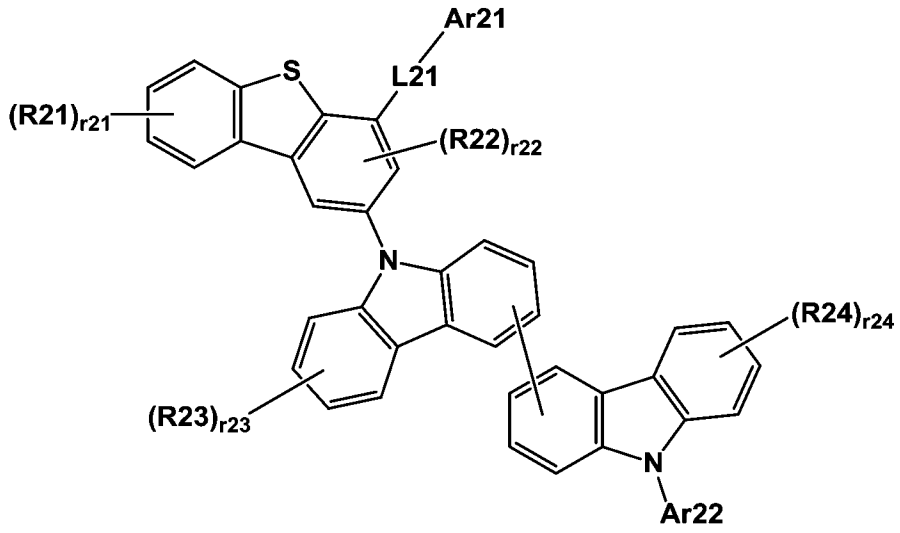
R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環，且

當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基時，

Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基，

[化學式 2]



在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

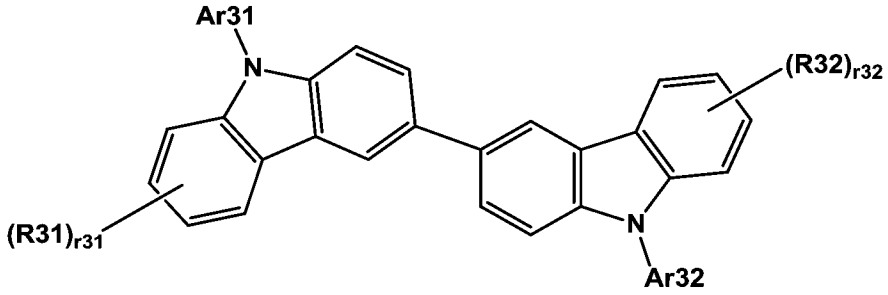
r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或

不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

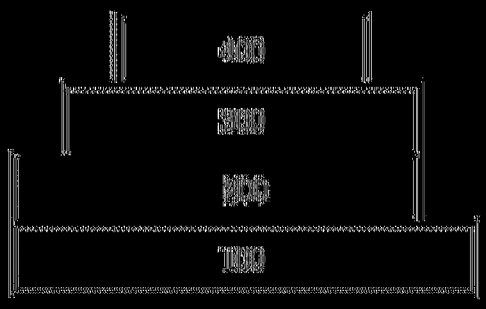
Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

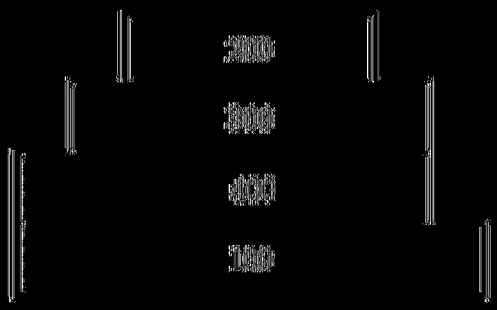
r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

【請求項14】如請求項 13 所述的用於形成有機材料層的組合物，其中所述化學式 1 的化合物與所述化學式 2 或化學式 3 的化合物具有 1:10 至 10:1 的重量比。

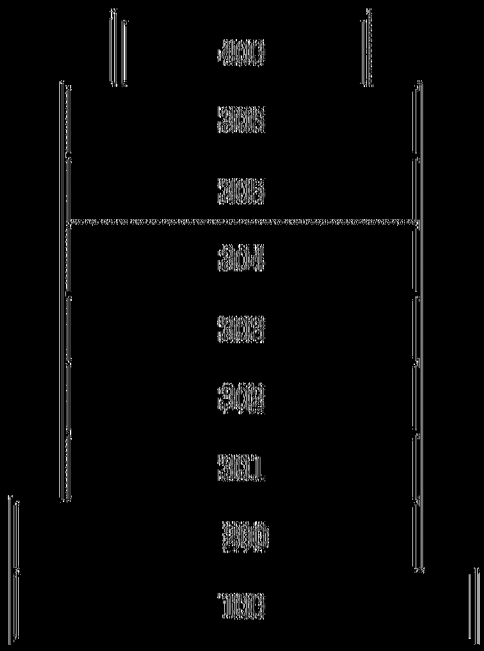
【發明圖式】



【圖1】



【圖2】



【圖3】

【發明摘要】

【中文發明名稱】化合物、有機發光元件以及用於形成有機材料層的組合物

【英文發明名稱】COMPOUND, ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE AND COMPOSITION FOR FORMING ORGANIC MATERIAL LAYER

【中文】本說明書是關於一種化學式1的化合物，以及包含其的有機發光元件及用於形成有機材料層的組合物。

【英文】The present specification relates to a compound of Chemical Formula 1, and an organic light emitting device and a composition for forming an organic material layer including the same.

【指定代表圖】圖1

【代表圖之符號簡單說明】

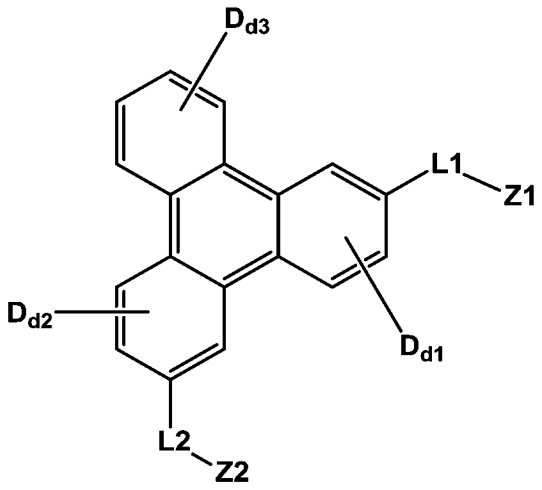
100:基底

200:陽極

300:有機材料層

400:陰極

【特徵化學式】


Dd3
L1
Z1
Dd2
Dd1
L2
Z2

【發明說明書】

【中文發明名稱】化合物、有機發光元件以及用於形成有機材料層的組合物

【英文發明名稱】COMPOUND, ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE AND COMPOSITION FOR FORMING ORGANIC MATERIAL LAYER

【技術領域】

【0001】 本說明書是關於一種化合物、以及包含其的有機發光元件及用於形成有機材料層的組合物。

【0002】 本申請案主張 2020 年 6 月 26 日在韓國智慧財產局申請的韓國專利申請案第 10-2020-0078447 號的優先權及權益，所述申請案的全部內容以引用的方式併入本文中。

【先前技術】

【0003】 電致發光元件為一種類型的自發射顯示元件，且具有優勢，所述優勢為具有廣視角及較快回應速度且具有極佳對比度。

【0004】 有機發光元件具有在兩個電極之間安置有機薄膜的結構。當將電壓施加至具有此類結構的有機發光元件時，自兩個電極注入的電子及電洞在有機薄膜中結合及配對，且在所述電子及電洞湮滅時發光。視需要，有機薄膜可以單層或多層的形式形成。

【0005】 有機薄膜的材料可視需要具有發光功能。舉例而言，可單獨使用能夠形成發光層本身的化合物作為有機薄膜的材料，或亦可使用能夠起主體-摻雜劑類發光層的主體或摻雜劑作用的化合

【發明說明書】

【中文發明名稱】化合物、有機發光元件以及用於形成有機材料層的組合物

【英文發明名稱】COMPOUND, ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE AND COMPOSITION FOR FORMING ORGANIC MATERIAL LAYER

【技術領域】

【0001】 本說明書是關於一種化合物、以及包含其的有機發光元件及用於形成有機材料層的組合物。

【0002】 本申請案主張 2020 年 6 月 26 日在韓國智慧財產局申請的韓國專利申請案第 10-2020-0078447 號的優先權及權益，所述申請案的全部內容以引用的方式併入本文中。

【先前技術】

【0003】 電致發光元件為一種類型的自發射顯示元件，且具有優勢，所述優勢為具有廣視角及較快回應速度且具有極佳對比度。

【0004】 有機發光元件具有在兩個電極之間安置有機薄膜的結構。當將電壓施加至具有此類結構的有機發光元件時，自兩個電極注入的電子及電洞在有機薄膜中結合及配對，且在所述電子及電洞湮滅時發光。視需要，有機薄膜可以單層或多層的形式形成。

【0005】 有機薄膜的材料可視需要具有發光功能。舉例而言，可單獨使用能夠形成發光層本身的化合物作為有機薄膜的材料，或亦可使用能夠起主體-摻雜劑類發光層的主體或摻雜劑作用的化合

物作為有機薄膜的材料。另外，亦可使用能夠起電洞注入、電洞轉移、電子阻擋、電洞阻擋、電子轉移、電子注入以及類似者作用的化合物作為有機薄膜的材料。

【0006】 有機薄膜材料的發展不斷要求增強有機發光元件的效能、使用壽命或效率。

【發明內容】

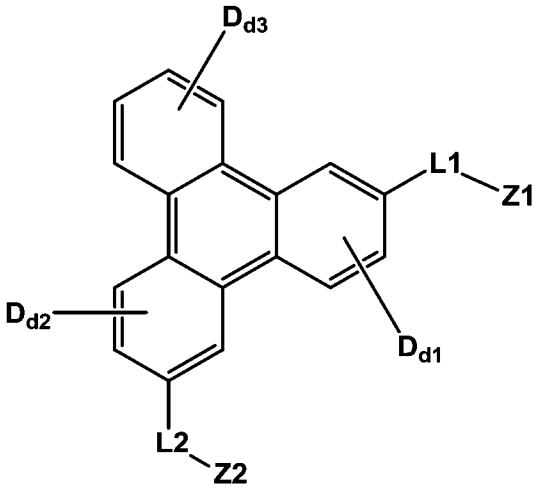
[技術問題]

【0007】 本說明書是關於提供一種化合物、以及包含其的有機發光元件及用於形成有機材料層的組合物。

[技術解決方案]

【0008】 本說明書的一個實施例提供一種以下化學式 1 的化合物。

[化學式 1]



【0009】 在化學式 1 中，

d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，

d3 為 0 至 4 的整數，

L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60

物作為有機薄膜的材料。另外，亦可使用能夠起電洞注入、電洞轉移、電子阻擋、電洞阻擋、電子轉移、電子注入以及類似者作用的化合物作為有機薄膜的材料。

【0006】 有機薄膜材料的發展不斷要求增強有機發光元件的效能、使用壽命或效率。

【發明內容】

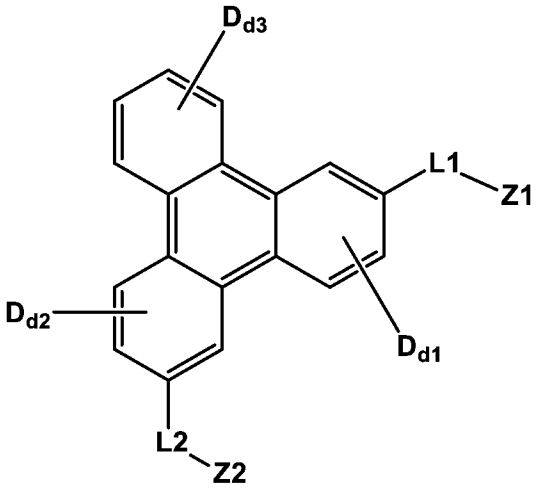
[技術問題]

【0007】 本說明書是關於提供一種化合物、以及包含其的有機發光元件及用於形成有機材料層的組合物。

[技術解決方案]

【0008】 本說明書的一個實施例提供一種以下化學式 1 的化合物。

[化學式 1]



【0009】 在化學式 1 中，

d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，

d3 為 0 至 4 的整數，

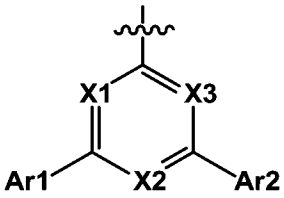
L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60

伸雜芳基，

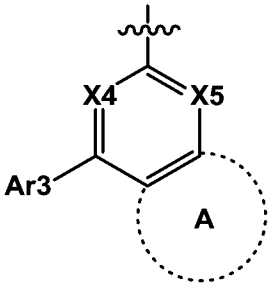
Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基（silyl group）、經取代或未經取代的芴基（fluorenyl group）或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且

Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基，

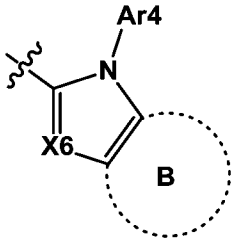
[化學式 1-1]



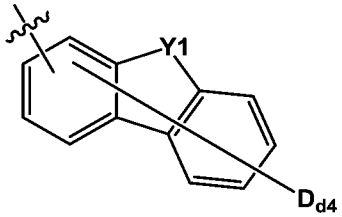
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



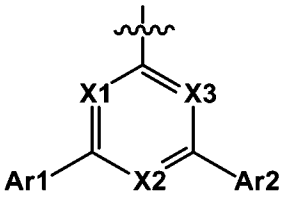
在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

伸雜芳基，

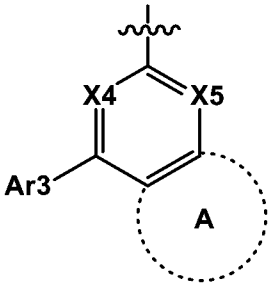
Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基（silyl group）、經取代或未經取代的芴基（fluorenyl group）或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且

Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基，

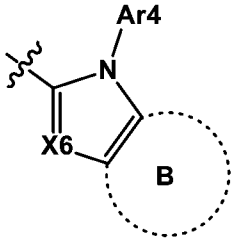
[化學式 1-1]



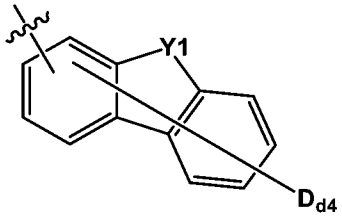
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環，且

當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

【0010】 另一實施例提供一種有機發光元件，包含：第一電極；第二電極，設置為與第一電極相對；以及有機材料層，設置於第一電極與第二電極之間，其中有機材料層包含一或多種類型的化學式 1 的化合物。

【0011】 另一實施例提供一種用於形成有機材料層的組合物，所述組合物包含化學式 1 的化合物及以下化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[化學式 2]

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

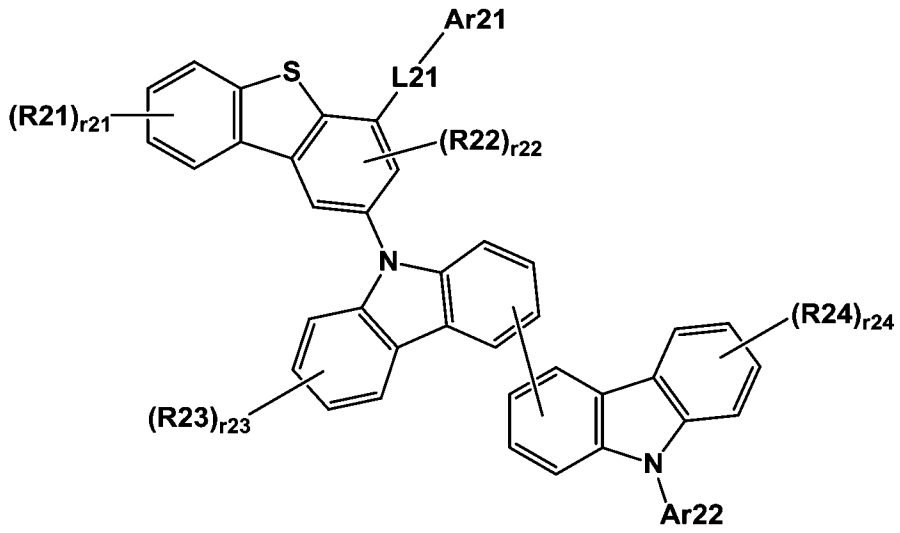
A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環，且

當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

【0010】 另一實施例提供一種有機發光元件，包含：第一電極；第二電極，設置為與第一電極相對；以及有機材料層，設置於第一電極與第二電極之間，其中有機材料層包含一或多種類型的化學式 1 的化合物。

【0011】 另一實施例提供一種用於形成有機材料層的組合物，所述組合物包含化學式 1 的化合物及以下化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[化學式 2]



【0012】 在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

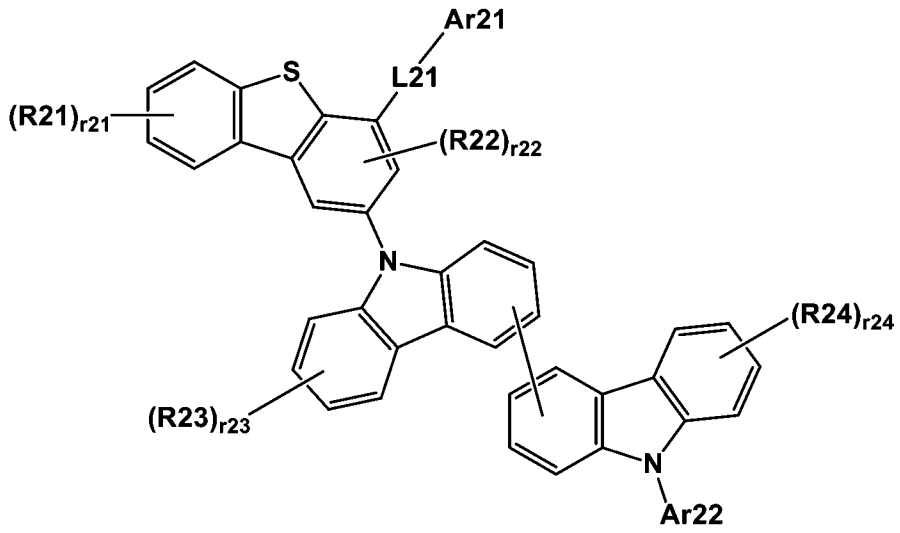
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



【0012】 在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

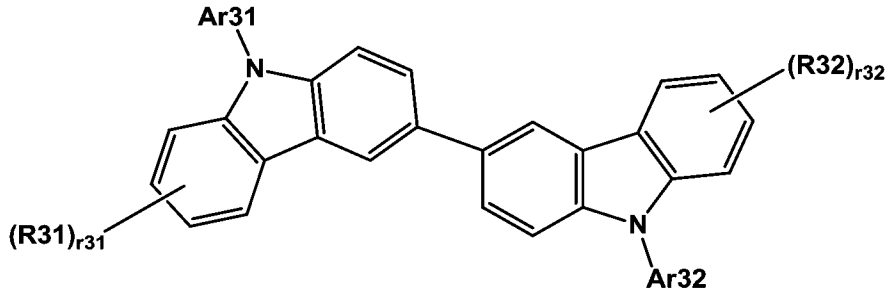
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

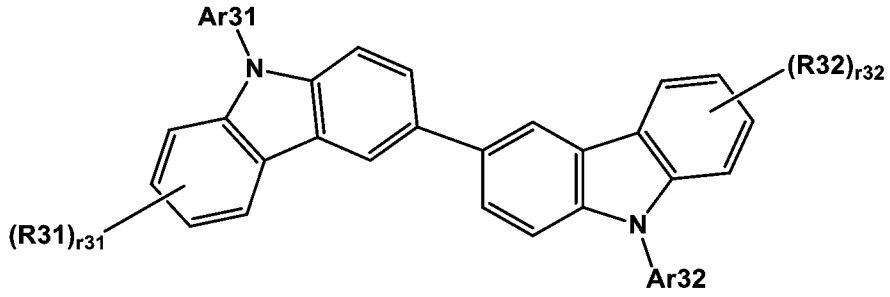
r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

[有利效應]

【0013】 本說明書中所描述的化合物可用作有機發光元件的有機材料層的材料。化合物能夠在有機發光元件中起電洞注入材料、電洞轉移材料、發光材料、電子轉移材料、電子注入材料、電荷產生材料以及類似材料的作用。特定而言，化合物可用作有機發光元件的發光層的材料。

【0014】 化學式 1 在聯伸三苯的特定位置處具有兩個取代基，且藉由必須包含含有 N 的雜芳基，可藉由增強電子穩定性及遷移率而在用於元件中時提供優良的發光效率及使用壽命。



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

[有利效應]

【0013】 本說明書中所描述的化合物可用作有機發光元件的有機材料層的材料。化合物能夠在有機發光元件中起電洞注入材料、電洞轉移材料、發光材料、電子轉移材料、電子注入材料、電荷產生材料以及類似材料的作用。特定而言，化合物可用作有機發光元件的發光層的材料。

【0014】 化學式 1 在聯伸三苯的特定位置處具有兩個取代基，且藉由必須包含含有 N 的雜芳基，可藉由增強電子穩定性及遷移率而在用於元件中時提供優良的發光效率及使用壽命。

【0015】 此外，聯伸三苯及取代聯伸三苯的所有取代基可在化學式 1 中經氘取代，且藉由化學式 1 的化合物經一或多個氘取代，經氘取代的分子的 C-D 鍵的鍵解離能（bond-dissociation energy；BDE）增強，且在用於元件中時可提供優良的使用壽命。

【0016】 當將化學式 1 的化合物及化學式 2 或化學式 3 的化合物一起用作有機發光元件的發光層的材料時，驅動電壓可降低，發光效率可增強，且元件中的使用壽命性質可增強。

【圖式簡單說明】

【0017】

圖 1 至圖 3 為各自示出根據本說明書的一個實施例的有機發光元件的層壓結構的圖式。

【實施方式】

【0018】 下文中，將更詳細地描述本說明書。

【0019】 在本說明書中，某一部分「包含（including）」某些組分的描述意謂能夠更包含其他組分，且除非另有相反的特定陳述，否則不排除其他組分。

【0020】 術語「取代」意謂鍵結至化合物的碳原子的氫原子變成另一取代基，且只要取代位置為氫原子經取代的位置，亦即取代基可取代的位置，則取代的位置不受限制，且當兩個或多於兩個取代基取代時，所述兩個或多於兩個取代基可彼此相同或不同。

【0021】 在本說明書中，「經取代或未經取代」意謂經由下述者所組成的族群中選出的一或多個取代基取代或未經取代：氘、鹵基、

【0015】 此外，聯伸三苯及取代聯伸三苯的所有取代基可在化學式 1 中經氘取代，且藉由化學式 1 的化合物經一或多個氘取代，經氘取代的分子的 C-D 鍵的鍵解離能（bond-dissociation energy；BDE）增強，且在用於元件中時可提供優良的使用壽命。

【0016】 當將化學式 1 的化合物及化學式 2 或化學式 3 的化合物一起用作有機發光元件的發光層的材料時，驅動電壓可降低，發光效率可增強，且元件中的使用壽命性質可增強。

【圖式簡單說明】

【0017】

圖 1 至圖 3 為各自示出根據本說明書的一個實施例的有機發光元件的層壓結構的圖式。

【實施方式】

【0018】 下文中，將更詳細地描述本說明書。

【0019】 在本說明書中，某一部分「包含（including）」某些組分的描述意謂能夠更包含其他組分，且除非另有相反的特定陳述，否則不排除其他組分。

【0020】 術語「取代」意謂鍵結至化合物的碳原子的氫原子變成另一取代基，且只要取代位置為氫原子經取代的位置，亦即取代基可取代的位置，則取代的位置不受限制，且當兩個或多於兩個取代基取代時，所述兩個或多於兩個取代基可彼此相同或不同。

【0021】 在本說明書中，「經取代或未經取代」意謂經由下述者所組成的族群中選出的一或多個取代基取代或未經取代：氘、鹵基、

氰基、C1 至 C60 烷基、C2 至 C60 烯基、C2 至 C60 炔基、C3 至 C60 環烷基、C2 至 C60 雜環烷基、C6 至 C60 芳基、C2 至 C60 雜芳基、矽烷基、氧化膦基以及胺基，或經鍵聯由上文所示出的取代基中選出的兩個或多於兩個取代基的取代基取代或未經取代。

【0022】 在本說明書中，「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」意謂氫原子鍵結至碳原子。然而，由於氘（^{2}H）為氫的同位素，因此一些氫原子可為氘。

【0023】 在本申請案的一個實施例中，「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」可意謂可出現取代基的位置可全部為氫或氘。換言之，由於氘為氫的同位素，因此一些氫原子可為作為同位素的氘，且在本文中，氘的含量可為 0%至 100%。

【0024】 在本申請案的一個實施例中，在「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」中，當未明確地排除氘（諸如氘含量為 0%、氫含量為 100%或取代基全部為氫時）時，氫及氘可混合在化合物中。

【0025】 在本申請案的一個實施例中，氘為氫的同位素中的一者，為具有由一個質子及一個中子形成的氘核作為原子核的元素，且可表示為氫-2，且元素符號亦可寫作 D 或 ^{2}H。

【0026】 在本申請案的一個實施例中，同位素意謂具有相同原子數（Z）但具有不同質量數（A）的原子，且亦可解釋為具有相同質子數但具有不同中子數的元素。

【0027】 在本申請案的一個實施例中，當將鹼性化合物可具有的取代基的總數目定義為 T1 且將此等取代基中的特定取代基的數目定義為 T2 時，可將特定取代基的含量 T%的含義定義為

氰基、C1 至 C60 烷基、C2 至 C60 烯基、C2 至 C60 炔基、C3 至 C60 環烷基、C2 至 C60 雜環烷基、C6 至 C60 芳基、C2 至 C60 雜芳基、矽烷基、氧化膦基以及胺基，或經鍵聯由上文所示出的取代基中選出的兩個或多於兩個取代基的取代基取代或未經取代。

【0022】 在本說明書中，「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」意謂氫原子鍵結至碳原子。然而，由於氘（^{2}H）為氫的同位素，因此一些氫原子可為氘。

【0023】 在本申請案的一個實施例中，「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」可意謂可出現取代基的位置可全部為氫或氘。換言之，由於氘為氫的同位素，因此一些氫原子可為作為同位素的氘，且在本文中，氘的含量可為 0%至 100%。

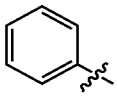
【0024】 在本申請案的一個實施例中，在「化學式或化合物結構中未指示取代基的情況」中，當未明確地排除氘（諸如氘含量為 0%、氫含量為 100%或取代基全部為氫時）時，氫及氘可混合在化合物中。

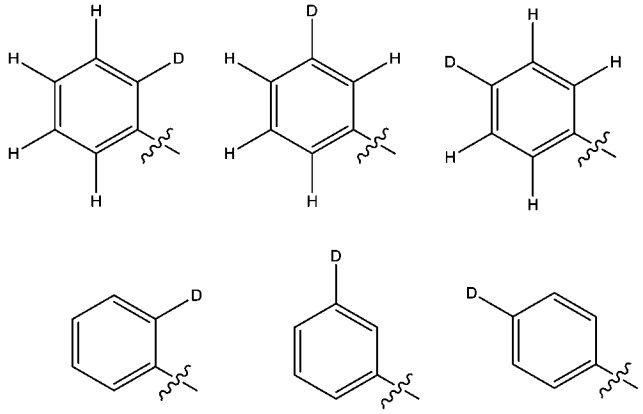
【0025】 在本申請案的一個實施例中，氘為氫的同位素中的一者，為具有由一個質子及一個中子形成的氘核作為原子核的元素，且可表示為氫-2，且元素符號亦可寫作 D 或 ^{2}H。

【0026】 在本申請案的一個實施例中，同位素意謂具有相同原子數（Z）但具有不同質量數（A）的原子，且亦可解釋為具有相同質子數但具有不同中子數的元素。

【0027】 在本申請案的一個實施例中，當將鹼性化合物可具有的取代基的總數目定義為 T1 且將此等取代基中的特定取代基的數目定義為 T2 時，可將特定取代基的含量 T%的含義定義為

T2/T1×100=T%。

【0028】 換言之，在一個實例中，在由  表示的苯基中具有20%的氘含量意謂苯基可具有的取代基的總數目為 5（公式中的T1），且此等取代基中的氘的數目為 1（公式中的 T2）。換言之，在苯基中具有 20%的氘含量可由以下結構式表示。

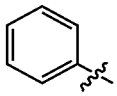


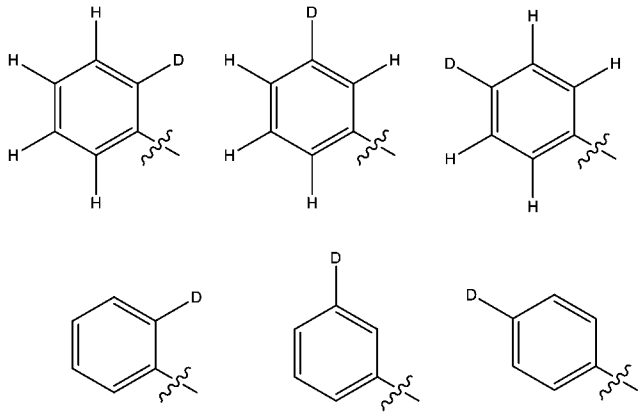
【0029】 此外，在本申請案的一個實施例中，「具有 0%的氘含量的苯基」可意謂不包含氘原子的苯基，亦即具有 5 個氫原子的苯基。

【0030】 在本說明書中，鹵素可為氟、氯、溴或碘。

【0031】 在本說明書中，烷基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。烷基的碳原子數可為 1 至 60，特定言之 1 至 40，且更特定言之 1 至 20。其特定實例可包含甲基、乙基、丙基、正丙基、異丙基、丁基、正丁基、異丁基、三級丁基、二級丁基、1-甲基-丁基、1-乙基-丁基、戊基、正戊基、異戊基、新戊基、三級戊基、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、三級辛基、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、

T2/T1×100=T%。

【0028】 換言之，在一個實例中，在由  表示的苯基中具有20%的氘含量意謂苯基可具有的取代基的總數目為 5（公式中的T1），且此等取代基中的氘的數目為 1（公式中的 T2）。換言之，在苯基中具有 20%的氘含量可由以下結構式表示。



【0029】 此外，在本申請案的一個實施例中，「具有 0%的氘含量的苯基」可意謂不包含氘原子的苯基，亦即具有 5 個氫原子的苯基。

【0030】 在本說明書中，鹵素可為氟、氯、溴或碘。

【0031】 在本說明書中，烷基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。烷基的碳原子數可為 1 至 60，特定言之 1 至 40，且更特定言之 1 至 20。其特定實例可包含甲基、乙基、丙基、正丙基、異丙基、丁基、正丁基、異丁基、三級丁基、二級丁基、1-甲基-丁基、1-乙基-丁基、戊基、正戊基、異戊基、新戊基、三級戊基、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、三級辛基、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-甲基己基以及類似基團，但不限於此。

【0032】 在本說明書中，烯基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。烯基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 2 至 20。其特定實例可包含乙烯基、1-丙烯基、異丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、3-甲基-1-丁烯基、1,3-丁二烯基、烯丙基、1-苯基乙烯基-1-基、2-苯基乙烯基-1-基、2,2-二苯基乙烯基-1-基、2-苯基-2-(萘基-1-基)乙烯基-1-基、2,2-雙(二苯基-1-基)乙烯基-1-基、苊基、苯乙烯基以及類似基團，但不限於此。

【0033】 在本說明書中，炔基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。炔基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 2 至 20。

【0034】 在本說明書中，環烷基包含具有 3 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中環烷基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為環烷基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如雜環烷基、芳基以及雜芳基。環烷基的碳原子數可為 3 至 60，特定言之 3 至 40，且更特定言之 5 至 20。其特定實例可包含環丙基、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、4-三級丁基環己基、環庚基、環辛基以及類似基團，但不限於此。

【0035】 在本說明書中，雜環烷基包含 O、S、Se、N 或 Si 作為雜

1,1-二甲基-丙基、異己基、2-甲基戊基、4-甲基己基、5-甲基己基以及類似基團，但不限於此。

【0032】 在本說明書中，烯基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。烯基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 2 至 20。其特定實例可包含乙烯基、1-丙烯基、異丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、3-甲基-1-丁烯基、1,3-丁二烯基、烯丙基、1-苯基乙烯基-1-基、2-苯基乙烯基-1-基、2,2-二苯基乙烯基-1-基、2-苯基-2-(萘基-1-基)乙烯基-1-基、2,2-雙(二苯基-1-基)乙烯基-1-基、苊基、苯乙烯基以及類似基團，但不限於此。

【0033】 在本說明書中，炔基包含直鏈或分支鏈，且可進一步經其他取代基取代。炔基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 2 至 20。

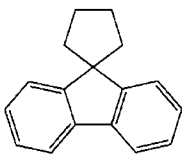
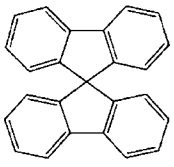
【0034】 在本說明書中，環烷基包含具有 3 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中環烷基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為環烷基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如雜環烷基、芳基以及雜芳基。環烷基的碳原子數可為 3 至 60，特定言之 3 至 40，且更特定言之 5 至 20。其特定實例可包含環丙基、環丁基、環戊基、3-甲基環戊基、2,3-二甲基環戊基、環己基、3-甲基環己基、4-甲基環己基、2,3-二甲基環己基、3,4,5-三甲基環己基、4-三級丁基環己基、環庚基、環辛基以及類似基團，但不限於此。

【0035】 在本說明書中，雜環烷基包含 O、S、Se、N 或 Si 作為雜

原子，包含具有 2 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中雜環烷基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為雜環烷基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、芳基以及雜芳基。雜環烷基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 3 至 20。

【0036】 在本說明書中，芳基包含具有 6 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中芳基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為芳基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、雜環烷基以及雜芳基。芳基包含螺環基團。芳基的碳原子數可為 6 至 60，特定言之 6 至 40，且更特定言之 6 至 25。當芳基為雙環或高於雙環時，碳原子數可為 8 至 60、8 至 40 或 8 至 30。芳基的特定實例可包含苯基、聯苯基、三苯基、萘基、蒽基、屈基、菲基、苝基、芴蒽基、聯伸三苯基、丙烯合萘基、苊基、稠四苯基、稠五苯基、芴基、茚基、苊基、苯并芴基、螺聯芴基、2,3-二氫-1H-茚基、其稠環基團以及類似基團，但不限於此。

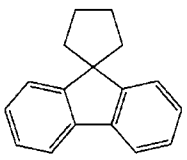
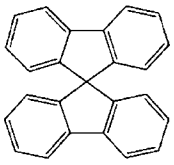
【0037】 在本說明書中，芴基可經取代，且相鄰取代基可彼此鍵結以形成環。

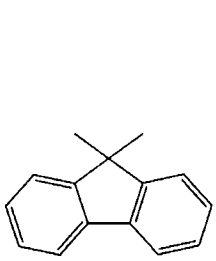
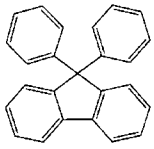
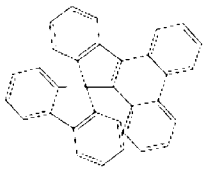
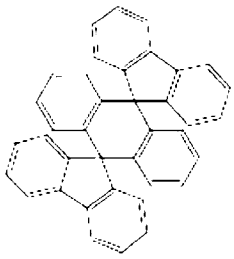
【0038】 當芴基經取代時，可包含  、  、

原子，包含具有 2 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中雜環烷基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為雜環烷基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、芳基以及雜芳基。雜環烷基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 3 至 20。

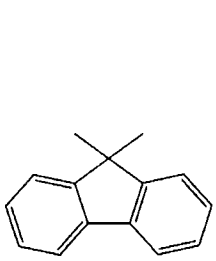
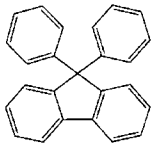
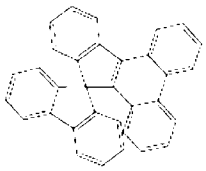
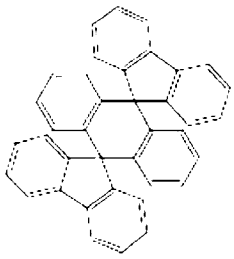
【0036】 在本說明書中，芳基包含具有 6 個至 60 個碳原子的單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中芳基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為芳基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、雜環烷基以及雜芳基。芳基包含螺環基團。芳基的碳原子數可為 6 至 60，特定言之 6 至 40，且更特定言之 6 至 25。當芳基為雙環或高於雙環時，碳原子數可為 8 至 60、8 至 40 或 8 至 30。芳基的特定實例可包含苯基、聯苯基、三苯基、萘基、蒽基、屈基、菲基、苝基、苯蒽基、聯伸三苯基、丙烯合萘基、芘基、稠四苯基、稠五苯基、苯基、茚基、芴基、苯并芴基、螺聯芴基、2,3-二氫-1H-茚基、其稠環基團以及類似基團，但不限於此。

【0037】 在本說明書中，芳基可經取代，且相鄰取代基可彼此鍵結以形成環。

【0038】 當芳基經取代時，可包含  、  、

 、  、  、  以及類似基團，然而，結構不限於此。

【0039】 在本說明書中，雜芳基包含 O、S、SO_2、Se、N 或 Si 作為雜原子，包含單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中雜芳基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為雜芳基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、雜環烷基以及芳基。雜芳基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 3 至 25。當雜芳基為雙環或高於雙環時，碳原子數可為 4 至 60、4 至 40 或 4 至 25。雜芳基的特定實例可包含吡啶基、吡咯基、嘧啶基、噠嗪基、呋喃基、噻吩基（thiophene group）、咪唑基、吡唑基、噁唑基、異噁唑基、噻唑基、異噻唑基、三唑基、呋呫基、噁二唑基、噻二唑基、二噻唑基、四唑基、哌喃基、硫代哌喃基、二嗪基、噁嗪基、噻嗪基、二氧基（dioxynyl group）、三嗪基、四嗪基、喹啉基、異喹啉基、喹唑啉基、異喹唑啉基、喹嗪啉基（qninozolinyl group）、萘啶基、吖啶基、啡啶基、咪唑并吡啶基、二氮雜萘基、三吖茚基、吲哚基、吲哚嗪基、苯并噻唑基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻吩基、苯并呋喃基、二苯并噻吩基、二苯并呋喃基、咔唑基、苯并咔唑基、二苯并咔唑基、啡嗪基、二苯并矽羅基、螺二(二苯并矽羅)、二氫啡嗪基（dihydrophenazinyl group）、啡噁嗪基、啡基（phenanthridyl group）、咪唑并吡啶基、噻吩基（thienyl

 、  、  、  以及類似基團，然而，結構不限於此。

【0039】 在本說明書中，雜芳基包含 O、S、SO_2、Se、N 或 Si 作為雜原子，包含單環或多環，且可進一步經其他取代基取代。在本文中，多環意謂其中雜芳基直接鍵聯至其他環狀基團或與其他環狀基團稠合的基團。在本文中，其他環狀基團可為雜芳基，但亦可為不同類型的環狀基團，諸如環烷基、雜環烷基以及芳基。雜芳基的碳原子數可為 2 至 60，特定言之 2 至 40，且更特定言之 3 至 25。當雜芳基為雙環或高於雙環時，碳原子數可為 4 至 60、4 至 40 或 4 至 25。雜芳基的特定實例可包含吡啶基、吡咯基、嘧啶基、噠嗪基、呋喃基、噻吩基（thiophene group）、咪唑基、吡唑基、噁唑基、異噁唑基、噻唑基、異噻唑基、三唑基、呋呫基、噁二唑基、噻二唑基、二噻唑基、四唑基、哌喃基、硫代哌喃基、二嗪基、噁嗪基、噻嗪基、二氧基（dioxynyl group）、三嗪基、四嗪基、喹啉基、異喹啉基、喹唑啉基、異喹唑啉基、喹嗪啉基（qninozolinyl group）、萘啶基、吖啶基、啡啶基、咪唑并吡啶基、二氮雜萘基、三吖茚基、吲哚基、吲哚嗪基、苯并噻唑基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻吩基、苯并呋喃基、二苯并噻吩基、二苯并呋喃基、咔唑基、苯并咔唑基、二苯并咔唑基、啡嗪基、二苯并矽羅基、螺二(二苯并矽羅)、二氫啡嗪基（dihydrophenazinyl group）、啡噁嗪基、啡基（phenanthridyl group）、咪唑并吡啶基、噻吩基（thienyl

group）、吲哚并[2,3-a]咔唑基、吲哚并[2,3-b]咔唑基、吲哚啉基、10,11-二氫-二苯并[b,f]氮呯基、9,10-二氫吖啶基、啡噁嗪基、啡噻噁嗪基、呫噁嗪基、萘吲啶基、啡啉基、苯并[c][1,2,5]噻二唑基、5,10-二氫苯并[b,e][1,4]氮雜矽啉基、吡唑并[1,5-c]喹唑啉基、吡啶并[1,2-b]吲唑基、吡啶并[1,2-a]咪唑并[1,2-e]吲哚啉基、苯并呋喃并[2,3-d]嘧啶基、苯并噻吩并[2,3-d]嘧啶基、苯并呋喃并[2,3-a]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-a]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-a]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-a]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-a]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-a]咔唑基、苯并呋喃并[2,3-b]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-b]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-b]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-b]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-b]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-b]咔唑基、苯并呋喃并[2,3-c]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-c]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-c]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-c]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-c]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-c]咔唑基、1,3-二氫茚并[2,1-b]咔唑基、5,11-二氫茚并[1,2-b]咔唑基、5,12-二氫茚并[1,2-c]咔唑基、5,8-二氫茚并[2,1-c]咔唑基、7,12-二氫茚并[1,2-a]咔唑基、11,12-二氫茚并[2,1-a]咔唑基以及類似基團，但不限於此。

【0040】 在本說明書中，矽烷基為包含 Si，使 Si 原子直接鍵聯為自由基的取代基，且由-Si(R101)(R102)(R103)表示。R101 至 R103 彼此相同或不同，且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。矽烷基之特定實例可包含三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三級丁基二甲基矽烷基、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、苯基矽烷基以及類似基團，

group）、吲哚并[2,3-a]咔唑基、吲哚并[2,3-b]咔唑基、吲哚啉基、10,11-二氫-二苯并[b,f]氮呯基、9,10-二氫吖啶基、啡噻基、啡噻噻基、呫噻基、萘吲啶基、啡啉基、苯并[c][1,2,5]噻二唑基、5,10-二氫苯并[b,e][1,4]氮雜矽啉基、吡唑并[1,5-c]喹唑啉基、吡啶并[1,2-b]吲唑基、吡啶并[1,2-a]咪唑并[1,2-e]吲哚啉基、苯并呋喃并[2,3-d]嘧啶基、苯并噻吩并[2,3-d]嘧啶基、苯并呋喃并[2,3-a]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-a]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-a]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-a]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-a]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-a]咔唑基、苯并呋喃并[2,3-b]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-b]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-b]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-b]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-b]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-b]咔唑基、苯并呋喃并[2,3-c]咔唑基、苯并噻吩并[2,3-c]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[2,3-c]咔唑基、苯并呋喃并[3,2-c]咔唑基、苯并噻吩并[3,2-c]咔唑基、1,3-二氫吲哚并[3,2-c]咔唑基、1,3-二氫茚并[2,1-b]咔唑基、5,11-二氫茚并[1,2-b]咔唑基、5,12-二氫茚并[1,2-c]咔唑基、5,8-二氫茚并[2,1-c]咔唑基、7,12-二氫茚并[1,2-a]咔唑基、11,12-二氫茚并[2,1-a]咔唑基以及類似基團，但不限於此。

【0040】 在本說明書中，矽烷基為包含 Si，使 Si 原子直接鍵聯為自由基的取代基，且由-Si(R101)(R102)(R103)表示。R101 至 R103 彼此相同或不同，且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。矽烷基之特定實例可包含三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三級丁基二甲基矽烷基、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、苯基矽烷基以及類似基團，

但不限於此。

【0041】 在本說明書中，氧化膦基由-P(=O)(R104)(R105)表示，且R104 與 R105 彼此相同或不同且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。特定言之，氧化膦基可經烷基或芳基取代，且作為烷基或芳基，上文所描述的實例可適用。氧化膦基的實例可包含氧化二甲基膦基、氧化二苯基膦基、氧化二萘基膦基以及類似基團，但不限於此。

【0042】 在本說明書中，胺基由-N(R106)(R107)表示，且 R106 與 R107 彼此相同或不同且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。胺基可由下述者所組成的族群中選出：$-NH_2$、單烷基胺基、單芳基胺基、單雜芳基胺基、二烷基胺基、二芳基胺基、二雜芳基胺基、烷基芳基胺基、烷基雜芳基胺基以及芳基雜芳基胺基，且儘管碳原子數不受其特定限制，但較佳為 1 至 30。胺基的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、二聯苯胺基、蒽胺基（anthracenylamine group）、9-甲基-蒽胺基、二苯胺基、苯基萘胺基、二甲苯胺基（ditolylamine group）、苯基甲苯胺基、三苯胺基、聯苯萘胺基、苯基聯苯胺基、聯苯芴胺基、苯基聯伸三苯基胺基（phenyltriphenylenylamine group）、聯苯基聯伸三苯基胺基（biphenyltriphenylenylamine group）以及類似基團，但不限於此。

【0043】 在本說明書中，除伸芳基為二價基團以外，上文所描述的芳基的實例可適用於伸芳基。

但不限於此。

【0041】 在本說明書中，氧化膦基由-P(=O)(R104)(R105)表示，且R104 與 R105 彼此相同或不同且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。特定言之，氧化膦基可經烷基或芳基取代，且作為烷基或芳基，上文所描述的實例可適用。氧化膦基的實例可包含氧化二甲基膦基、氧化二苯基膦基、氧化二萘基膦基以及類似基團，但不限於此。

【0042】 在本說明書中，胺基由-N(R106)(R107)表示，且 R106 與 R107 彼此相同或不同且可各自獨立地為由下述者中的至少一者形成的取代基：氫、氘、鹵基、烷基、烯基、烷氧基、環烷基、芳基以及雜芳基。胺基可由下述者所組成的族群中選出：$-NH_2$、單烷基胺基、單芳基胺基、單雜芳基胺基、二烷基胺基、二芳基胺基、二雜芳基胺基、烷基芳基胺基、烷基雜芳基胺基以及芳基雜芳基胺基，且儘管碳原子數不受其特定限制，但較佳為 1 至 30。胺基的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、二聯苯胺基、蒽胺基（anthracenylamine group）、9-甲基-蒽胺基、二苯胺基、苯基萘胺基、二甲苯胺基（ditolylamine group）、苯基甲苯胺基、三苯胺基、聯苯萘胺基、苯基聯苯胺基、聯苯芴胺基、苯基聯伸三苯基胺基（phenyltriphenylenylamine group）、聯苯基聯伸三苯基胺基（biphenyltriphenylenylamine group）以及類似基團，但不限於此。

【0043】 在本說明書中，除伸芳基為二價基團以外，上文所描述的芳基的實例可適用於伸芳基。

【0044】 在本說明書中，除伸雜芳基為二價基團以外，上文所描述的雜芳基的實例可適用於伸雜芳基。

【0045】 本說明書的一個實施例提供一種由化學式 1 表示的化合物。

【0046】 在本說明書的一個實施例中，d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，且 d3 為 0 至 4 的整數。

【0047】 在本說明書的一個實施例中，d1、d2 以及 d3 為 0。

【0048】 在本說明書的一個實施例中，d1 及 d2 為 3，且 d3 為 4。

【0049】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基。

【0050】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 伸雜芳基。

【0051】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C20 伸雜芳基。

【0052】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基。

【0053】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

【0054】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的伸苯基。

【0055】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，

【0044】 在本說明書中，除伸雜芳基為二價基團以外，上文所描述的雜芳基的實例可適用於伸雜芳基。

【0045】 本說明書的一個實施例提供一種由化學式 1 表示的化合物。

【0046】 在本說明書的一個實施例中，d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，且 d3 為 0 至 4 的整數。

【0047】 在本說明書的一個實施例中，d1、d2 以及 d3 為 0。

【0048】 在本說明書的一個實施例中，d1 及 d2 為 3，且 d3 為 4。

【0049】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基。

【0050】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 伸雜芳基。

【0051】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C20 伸雜芳基。

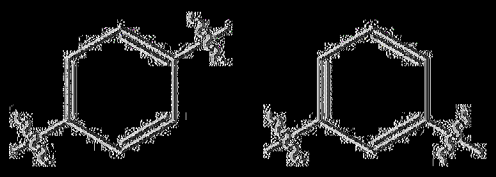
【0052】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基。

【0053】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

【0054】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的伸苯基。

【0055】 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，

且各自獨立地為直接鍵或由以下結構中選出的任一者。



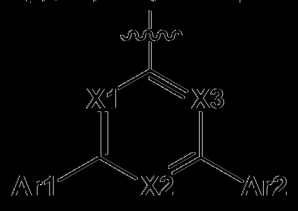
[0056] 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或伸苯基。當 L1 及 L2 為伸苯基時，聯伸三苯與 Z1 或聯伸三苯與 Z2 可在對位或間位處鍵結，其藉由減小分子之間的位阻而有效地增大分子穩定性。

[0057] 在本說明書的一個實施例中，L1 及 L2 可為直接鍵。

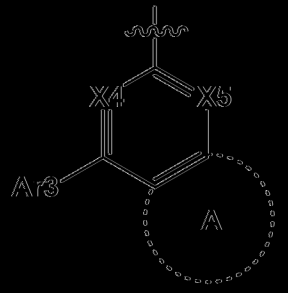
[0058] 在本說明書的一個實施例中，L1 及 L2 中的任一者為直接鍵，且另一者可為經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

[0059] 在本說明書的一個實施例中，Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芳基或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且 Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基。

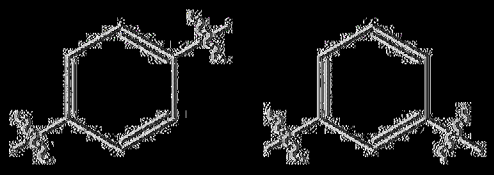
[化學式 1-1]



[化學式 1-2]



且各自獨立地為直接鍵或由以下結構中選出的任一者。



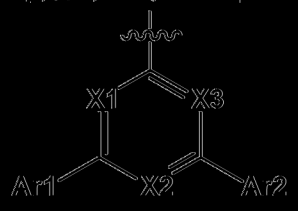
[0056] 在本說明書的一個實施例中，L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或伸苯基。當 L1 及 L2 為伸苯基時，聯伸三苯與 Z1 或聯伸三苯與 Z2 可在對位或間位處鍵結，其藉由減小分子之間的位阻而有效地增大分子穩定性。

[0057] 在本說明書的一個實施例中，L1 及 L2 可為直接鍵。

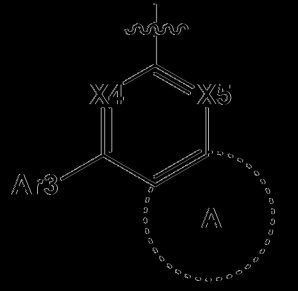
[0058] 在本說明書的一個實施例中，L1 及 L2 中的任一者為直接鍵，且另一者可為經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

[0059] 在本說明書的一個實施例中，Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芳基或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且 Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基。

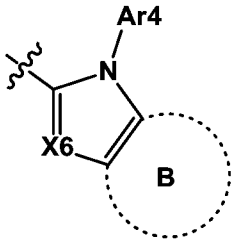
[化學式 1-1]



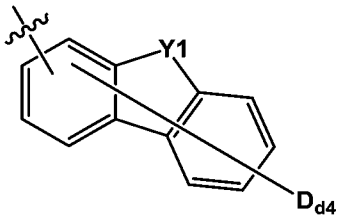
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



【0060】 在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，且

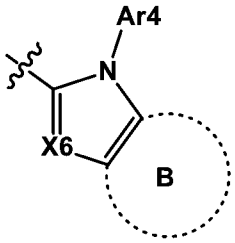
A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環。

【0061】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 至 X3 各自為 N 或 CR，且 X1 至 X3 中的至少一者為 N。

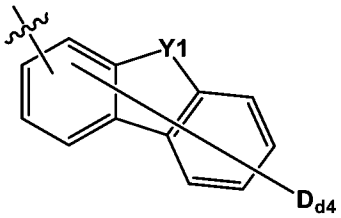
【0062】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 至 X3 可為 N。

【0063】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 及 X2 為

[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



【0060】 在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，且

A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環。

【0061】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 至 X3 各自為 N 或 CR，且 X1 至 X3 中的至少一者為 N。

【0062】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 至 X3 可為 N。

【0063】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 及 X2 為

N，X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0064】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 及 X3 為 N，X2 為 CR，且 R 可為氫。

【0065】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 為 N，X2 及 X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0066】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X2 為 N，X1 及 X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0067】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X3 為 N，X1 及 X2 為 CR，且 R 可為氫。

【0068】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0069】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0070】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C40 雜芳基。

【0071】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0072】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯

N，X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0064】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 及 X3 為 N，X2 為 CR，且 R 可為氫。

【0065】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X1 為 N，X2 及 X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0066】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X2 為 N，X1 及 X3 為 CR，且 R 可為氫。

【0067】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 X3 為 N，X1 及 X2 為 CR，且 R 可為氫。

【0068】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0069】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0070】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C40 雜芳基。

【0071】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0072】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯

苯基、經取代或未經取代的芴基、經取代或未經取代的二苯并呋喃基、經取代或未經取代的二苯并噻吩基或經取代或未經取代的咔唑基。

【0073】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為未經取代或經氘取代的苯基、聯苯基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基、9,9′-螺二[芴]、經取代或未經取代的二苯并呋喃基、經取代或未經取代的二苯并噻吩基或經取代或未經取代的咔唑基。

【0074】 當化學式 1-1 的 Ar1 或 Ar2 為經取代或未經取代的咔唑基時，鍵結位置為吡啶環的氮或苯環的碳。

【0075】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 X4 及 X5 各自為 N 或 CR，且 X4 及 X5 中的至少一者為 N。

【0076】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 X4 及 X5 為 N。

【0077】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環。

【0078】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

【0079】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的苯環、經取代或未經取代的苯并呋喃環或經取代或未經取代的苯并噻吩環。

【0080】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為苯環、

苯基、經取代或未經取代的芴基、經取代或未經取代的二苯并呋喃基、經取代或未經取代的二苯并噻吩基或經取代或未經取代的咔唑基。

【0073】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為未經取代或經氘取代的苯基、聯苯基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基、9,9′-螺二[芴]、經取代或未經取代的二苯并呋喃基、經取代或未經取代的二苯并噻吩基或經取代或未經取代的咔唑基。

【0074】 當化學式 1-1 的 Ar1 或 Ar2 為經取代或未經取代的咔唑基時，鍵結位置為吡啶環的氮或苯環的碳。

【0075】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 X4 及 X5 各自為 N 或 CR，且 X4 及 X5 中的至少一者為 N。

【0076】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 X4 及 X5 為 N。

【0077】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環。

【0078】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

【0079】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的苯環、經取代或未經取代的苯并呋喃環或經取代或未經取代的苯并噻吩環。

【0080】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 A 為苯環、

苯并呋喃環或苯并噻吩環。

【0081】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0082】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0083】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的苯基。

【0084】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為苯基。

【0085】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 X6 為 N。

【0086】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環。

【0087】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環。

【0088】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的苯環。

【0089】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為苯環。

【0090】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0091】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0092】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的苯基。

【0093】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為苯基。

【0094】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 O、S

苯并呋喃環或苯并噻吩環。

【0081】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0082】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0083】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為經取代或未經取代的苯基。

【0084】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-2 的 Ar3 為苯基。

【0085】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 X6 為 N。

【0086】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環。

【0087】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環。

【0088】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的苯環。

【0089】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 B 為苯環。

【0090】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0091】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0092】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為經取代或未經取代的苯基。

【0093】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-3 的 Ar4 為苯基。

【0094】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 O、S

或 NR′。

【0095】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 可為 O。

【0096】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 可為 S。

【0097】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0098】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0099】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的苯基。

【0100】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 d4 為 0 至 7 的整數。

【0101】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 d4 為 0 或 7。

【0102】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-1 表示的雜芳基。

【0103】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-2 表示的雜芳基。

【0104】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-3 表示的雜芳基。

【0105】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

【0106】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、

或 NR′。

【0095】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 可為 O。

【0096】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 可為 S。

【0097】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基。

【0098】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0099】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 Y1 為 NR′，且 R′可為經取代或未經取代的苯基。

【0100】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 d4 為 0 至 7 的整數。

【0101】 在本說明書的一個實施例中，化學式 1-4 的 d4 為 0 或 7。

【0102】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-1 表示的雜芳基。

【0103】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-2 表示的雜芳基。

【0104】 在本說明書的一個實施例中，Z1 及 Z2 中的至少一者可為由化學式 1-3 表示的雜芳基。

【0105】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

【0106】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、

經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-4 表示的雜芳基。

【0107】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為經取代或未經取代的矽烷基或經取代或未經取代的芴基。

【0108】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為未經取代或經芳基取代的矽烷基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基，或 9,9′-螺二[芴]。

【0109】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代的多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

【0110】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代的雙環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的雙環雜環。

【0111】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代且包含 O 或 S 的雙環雜環。

【0112】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為苯并呋喃環或苯并噻吩環。

【0113】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為由化學式 1-4 表示的雜芳基。

經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-4 表示的雜芳基。

【0107】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為經取代或未經取代的矽烷基或經取代或未經取代的芴基。

【0108】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為未經取代或經芳基取代的矽烷基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基，或 9,9′-螺二[芴]。

【0109】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代的多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

【0110】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代的雙環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的雙環雜環。

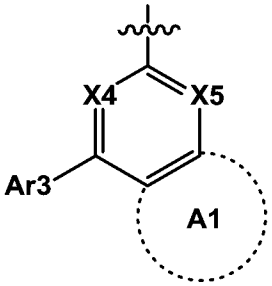
【0111】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為經取代或未經取代且包含 O 或 S 的雙環雜環。

【0112】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為由化學式 1-2 表示的雜芳基，且在本文中，化學式 1-2 的 A 可為苯并呋喃環或苯并噻吩環。

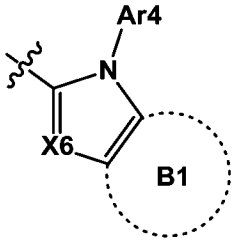
【0113】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 可為由化學式 1-4 表示的雜芳基。

【0114】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由以下化學式 1-1-1 至化學式 1-1-3 中的任一者表示的雜芳基。

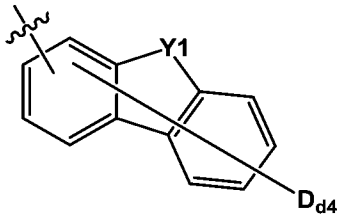
[化學式 1-1-1]



[化學式 1-1-2]



[化學式 1-1-3]



【0115】 在化學式 1-1-1 至化學式 1-1-3 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X4 及 X6 各自為 N 或 CR，

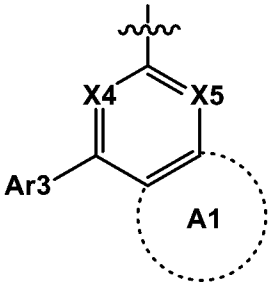
X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

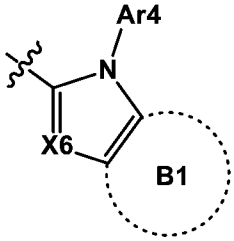
R、R′、Ar3 以及 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至

【0114】 在本說明書的一個實施例中，當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由以下化學式 1-1-1 至化學式 1-1-3 中的任一者表示的雜芳基。

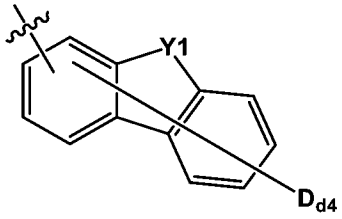
[化學式 1-1-1]



[化學式 1-1-2]



[化學式 1-1-3]



【0115】 在化學式 1-1-1 至化學式 1-1-3 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X4 及 X6 各自為 N 或 CR，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

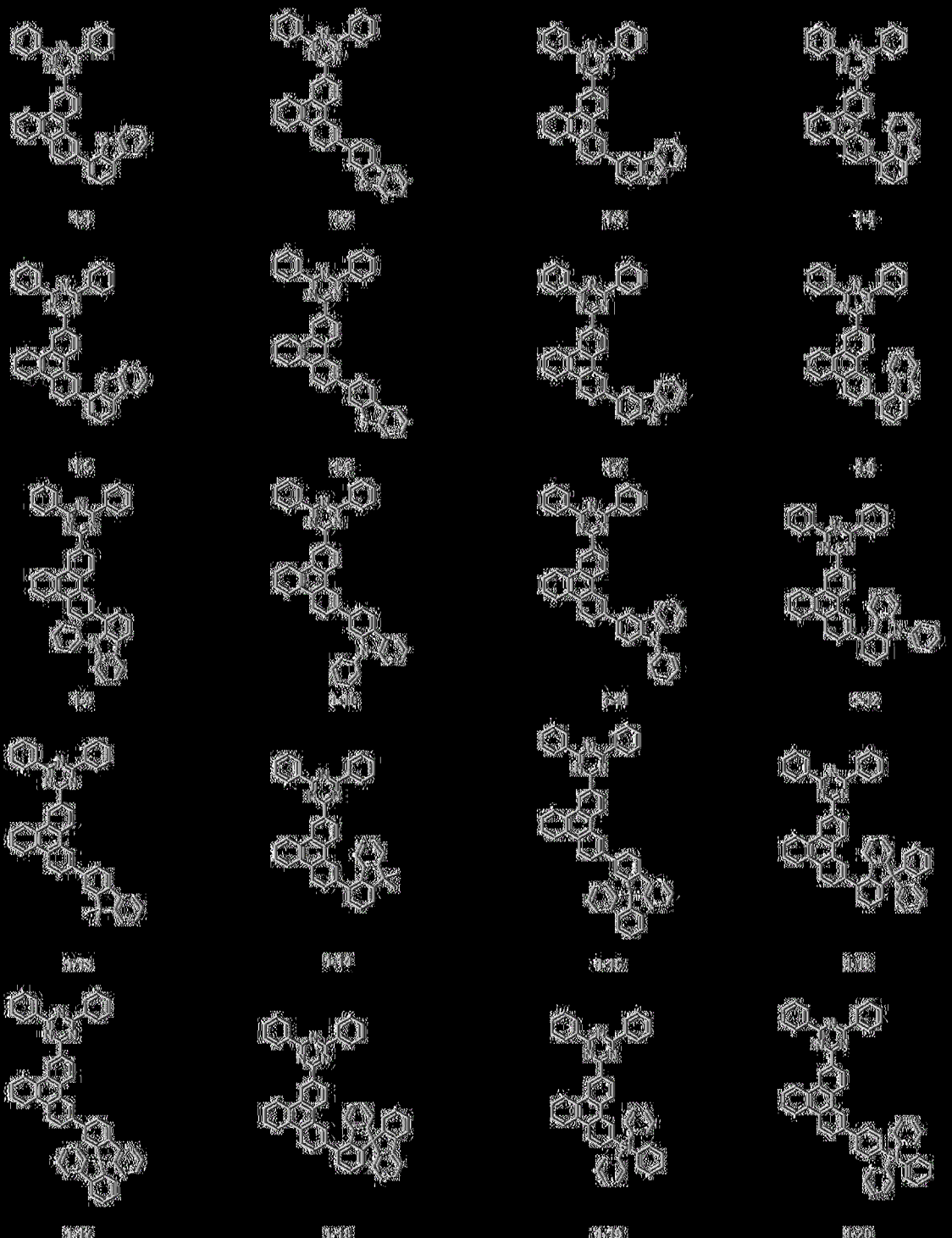
Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar3 以及 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至

C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，且

A1 及 B1 各自獨立地為經取代或未經取代的多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

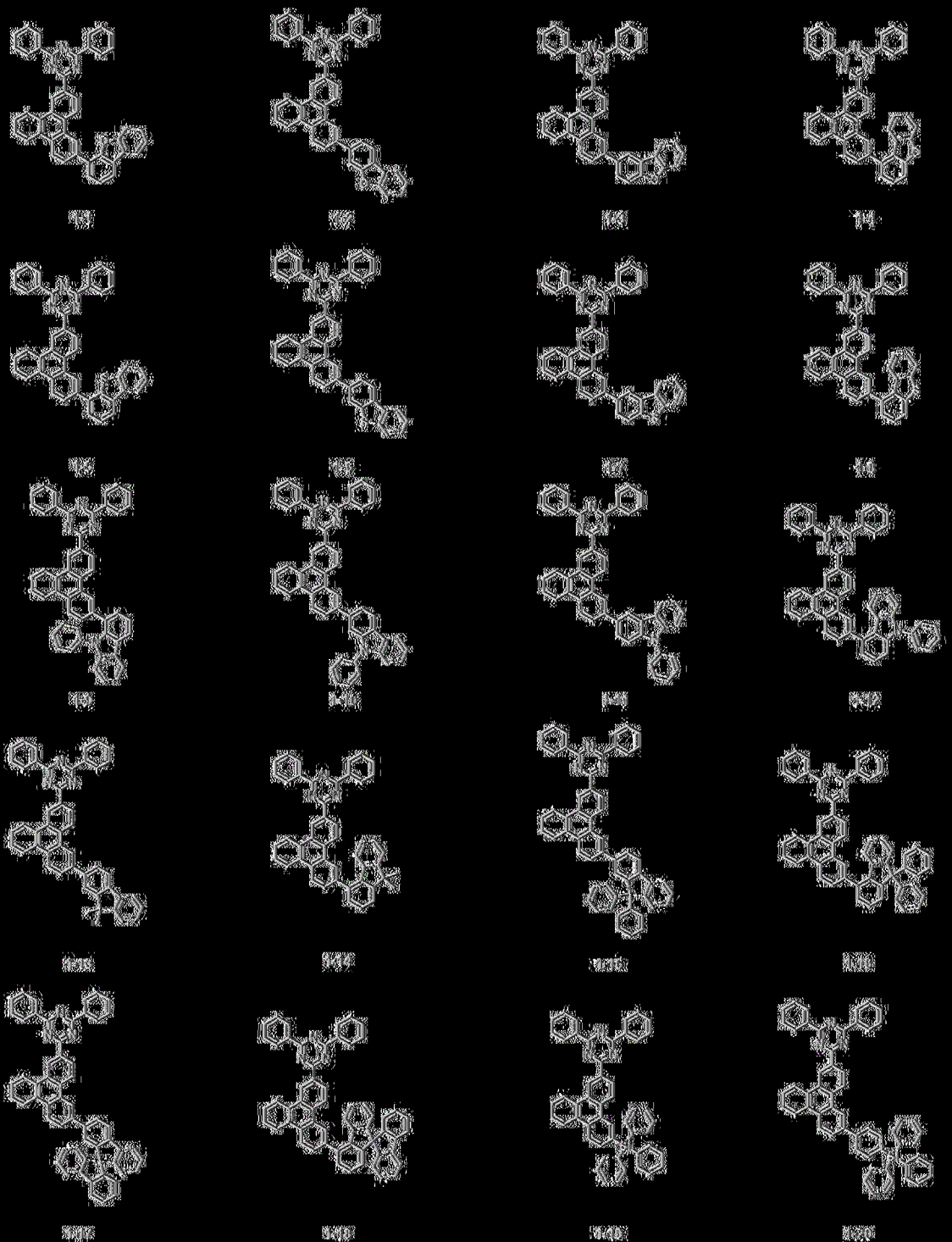
[0116] 在本說明書的一個實施例中，化學式 1 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。

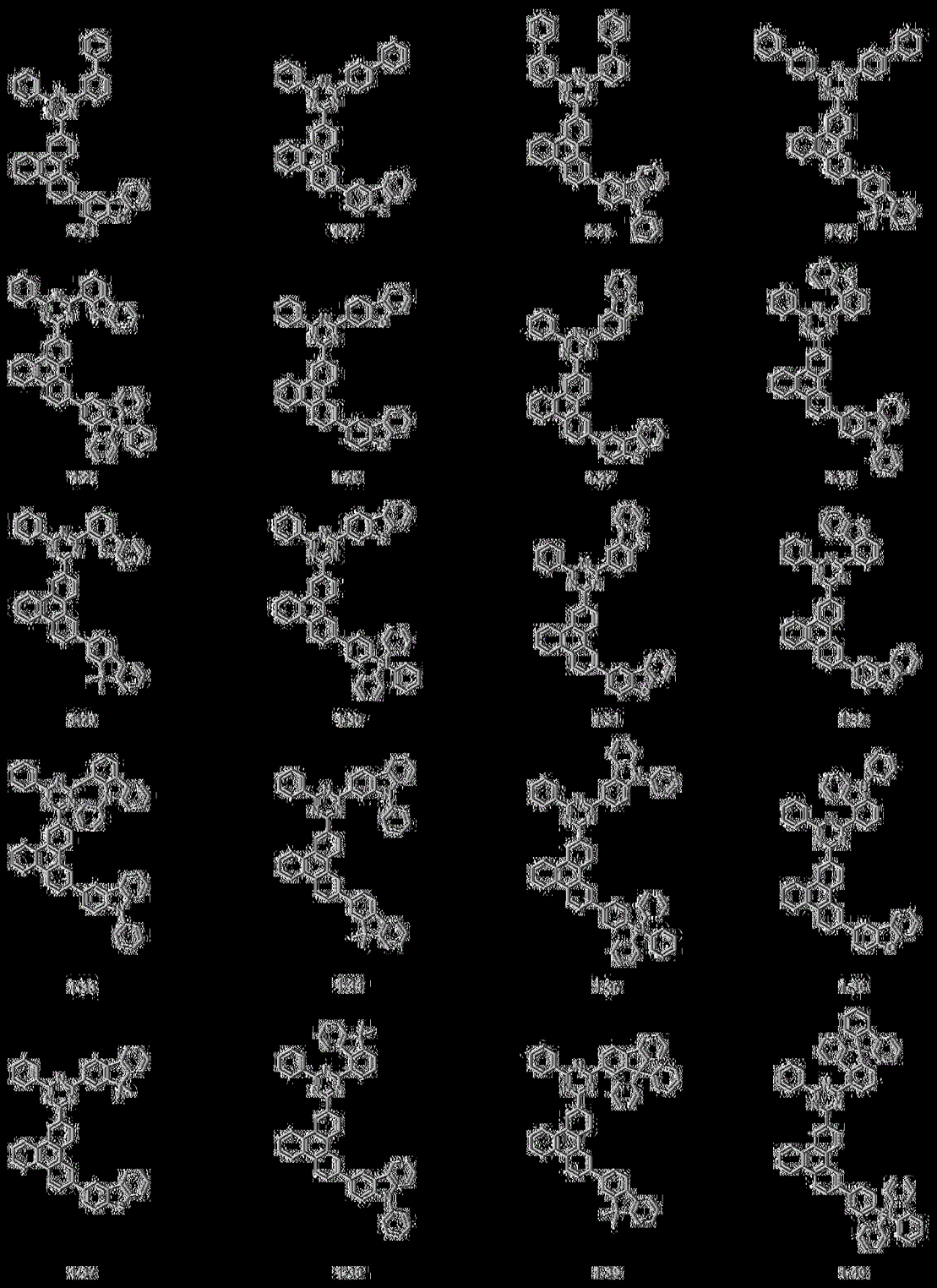


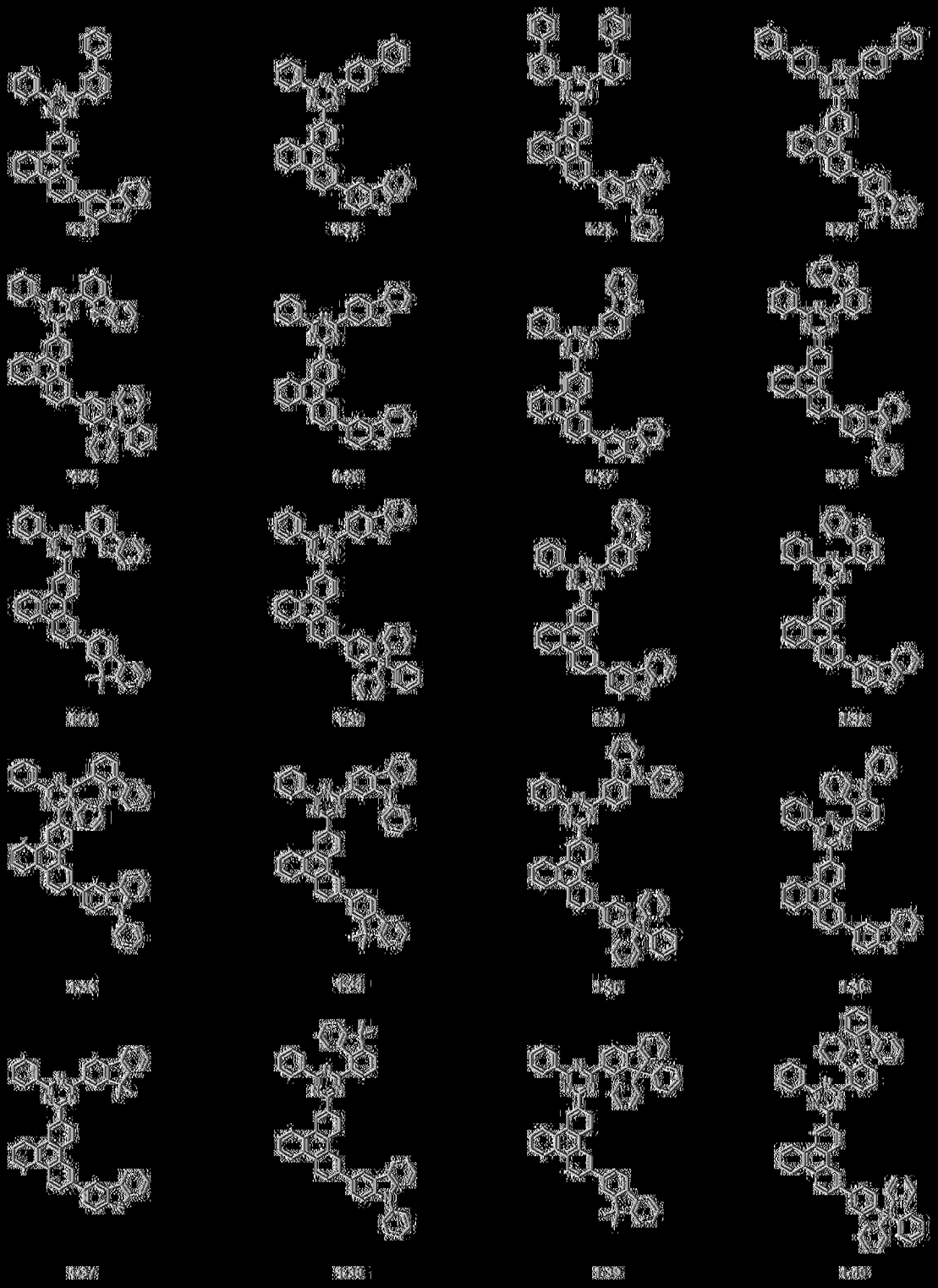
C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，且

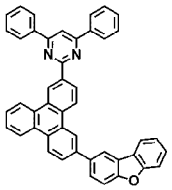
A1 及 B1 各自獨立地為經取代或未經取代的多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環。

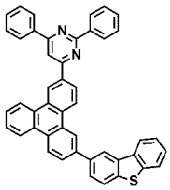
[0116] 在本說明書的一個實施例中，化學式 1 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。

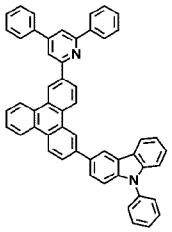


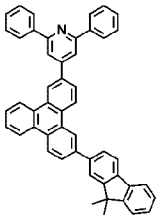


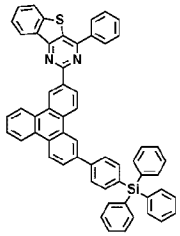


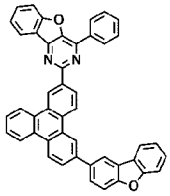

1-41

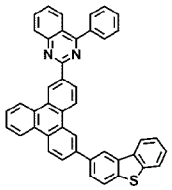

1-42

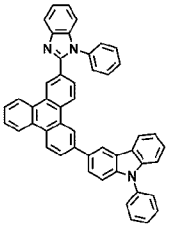

1-43

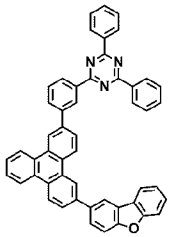

1-44

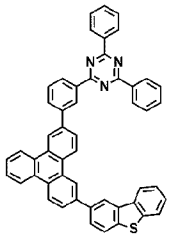

1-45

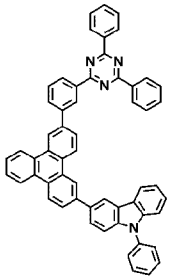

1-46

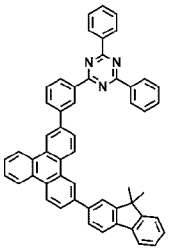

1-47

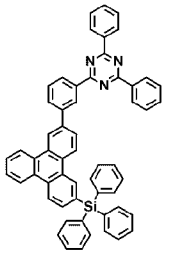

1-48

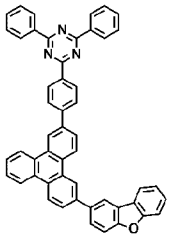

1-49

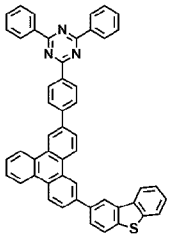

1-50

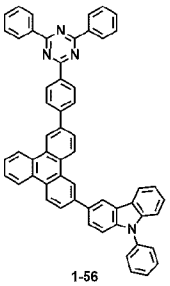

1-51

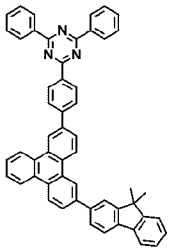

1-52

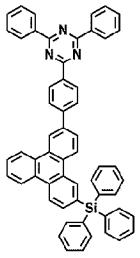

1-53

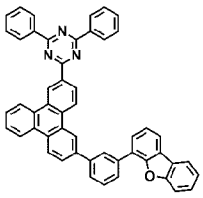

1-54

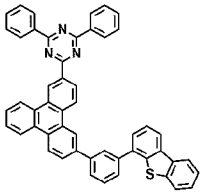

1-55

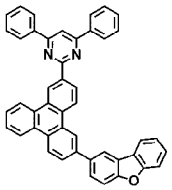

1-56

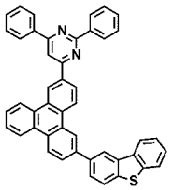

1-57

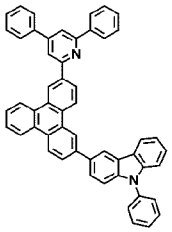

1-58

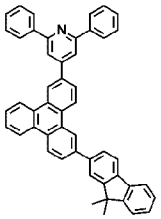

1-59

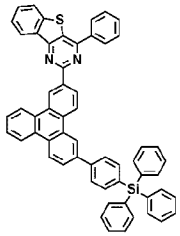

1-60

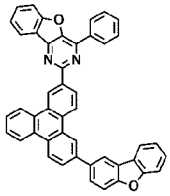

1-41

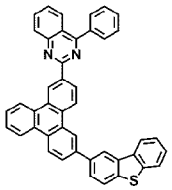

1-42

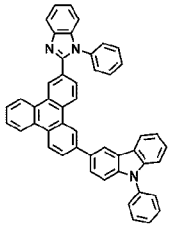

1-43

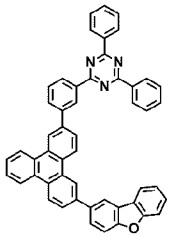

1-44

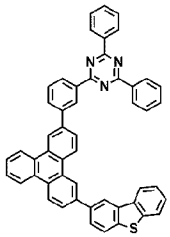

1-45

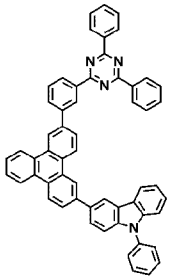

1-46

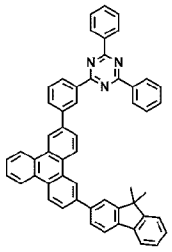

1-47

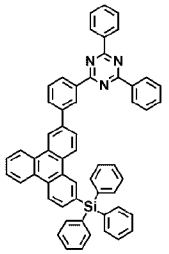

1-48

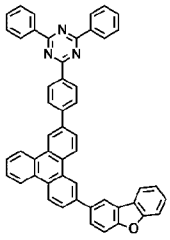

1-49

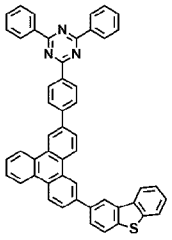

1-50

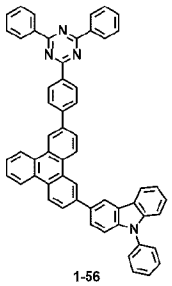

1-51

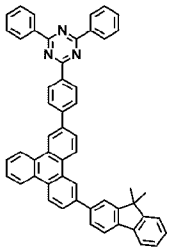

1-52

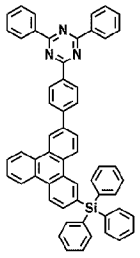

1-53

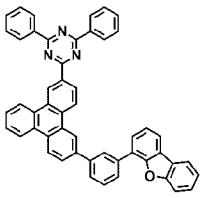

1-54

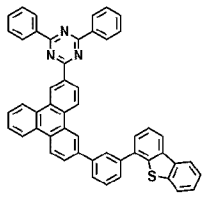

1-55

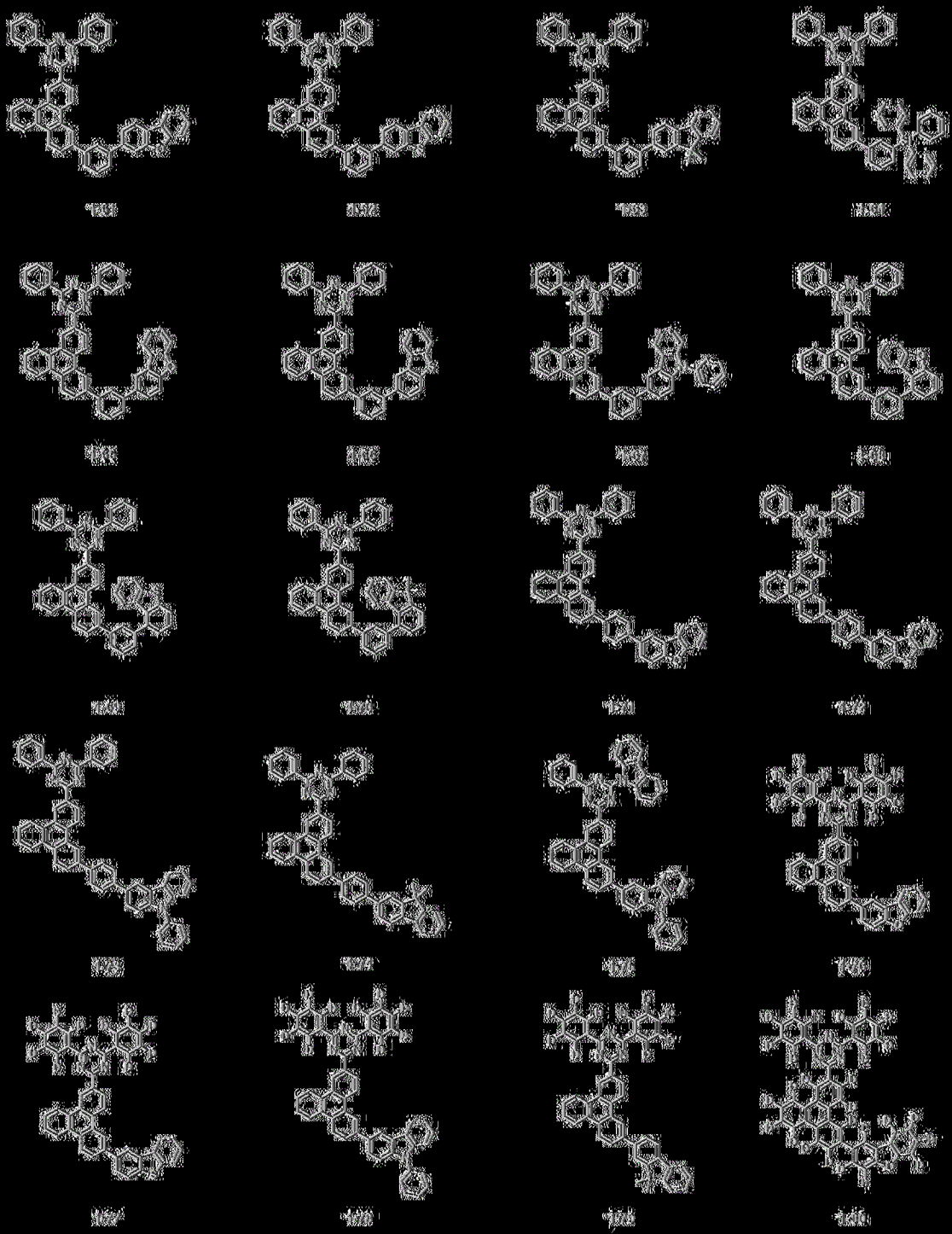

1-56

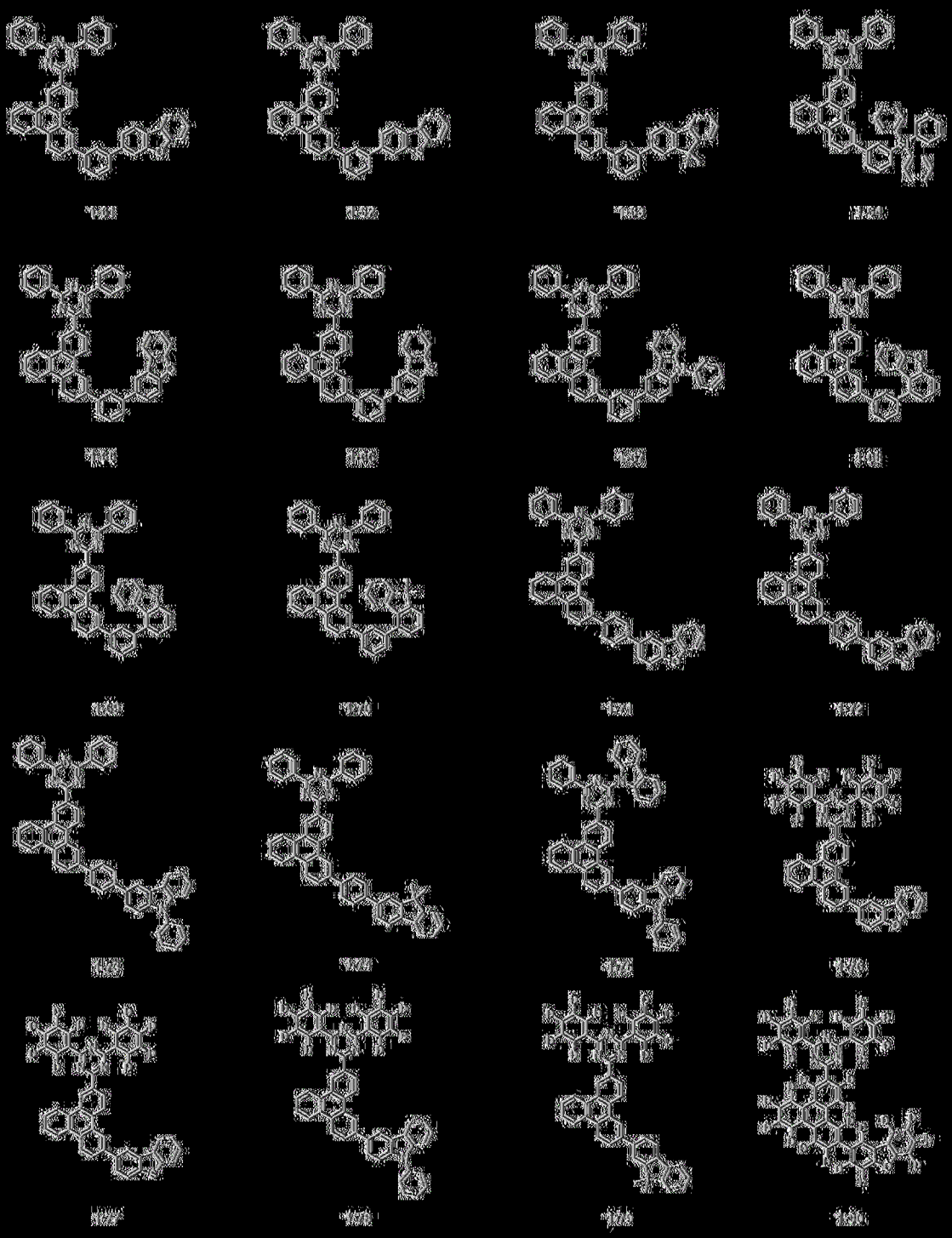

1-57

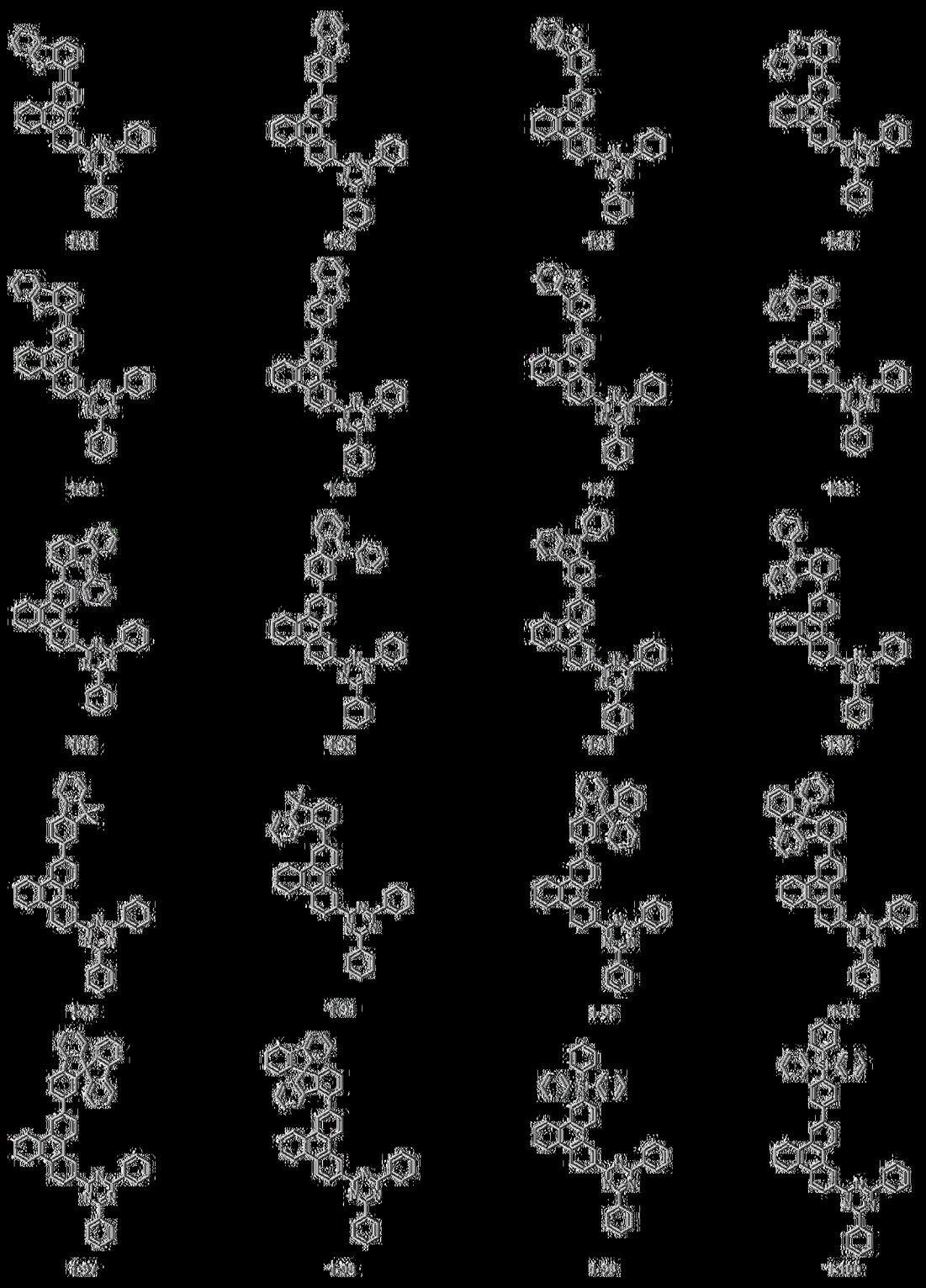

1-58

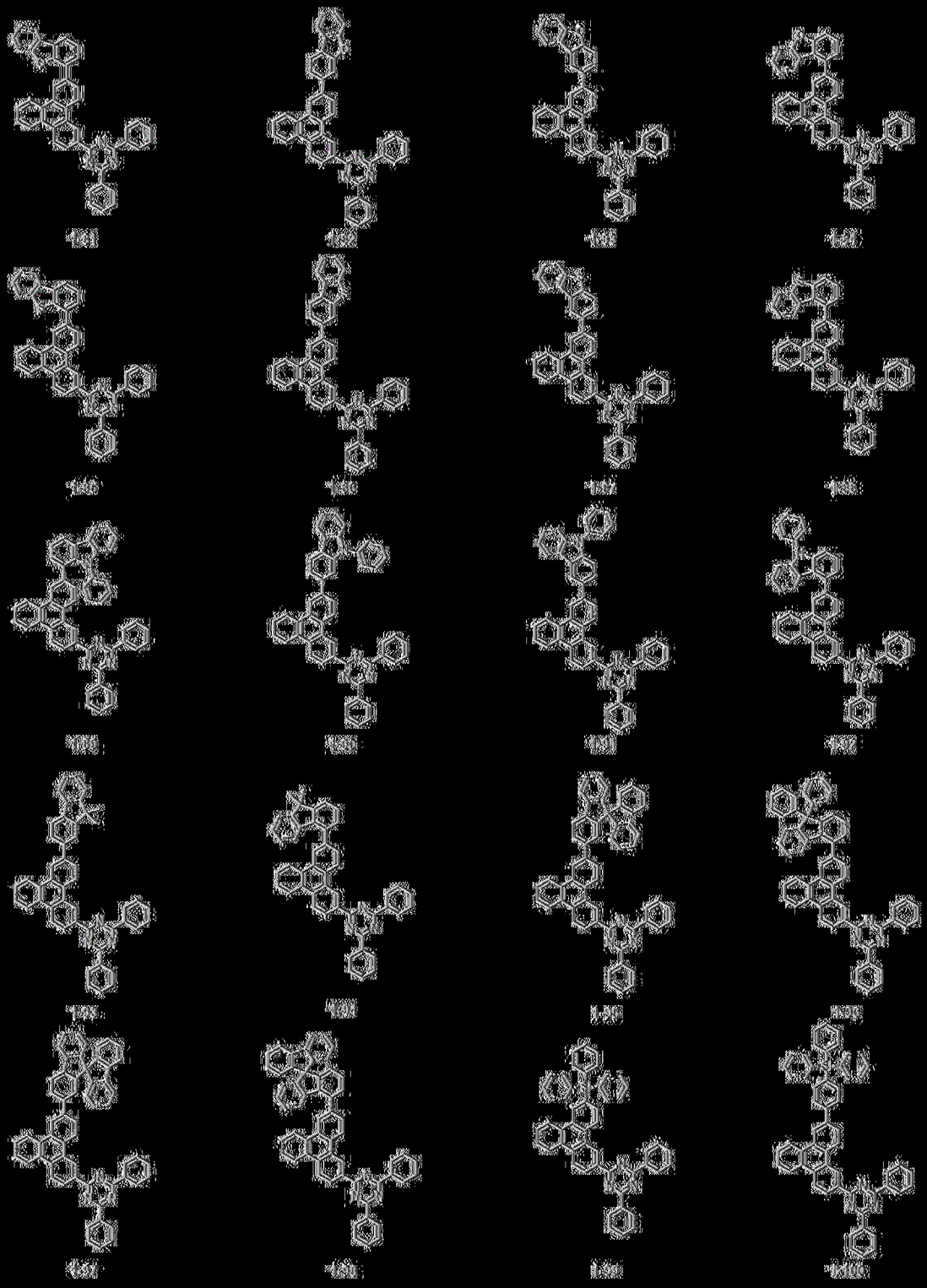

1-59

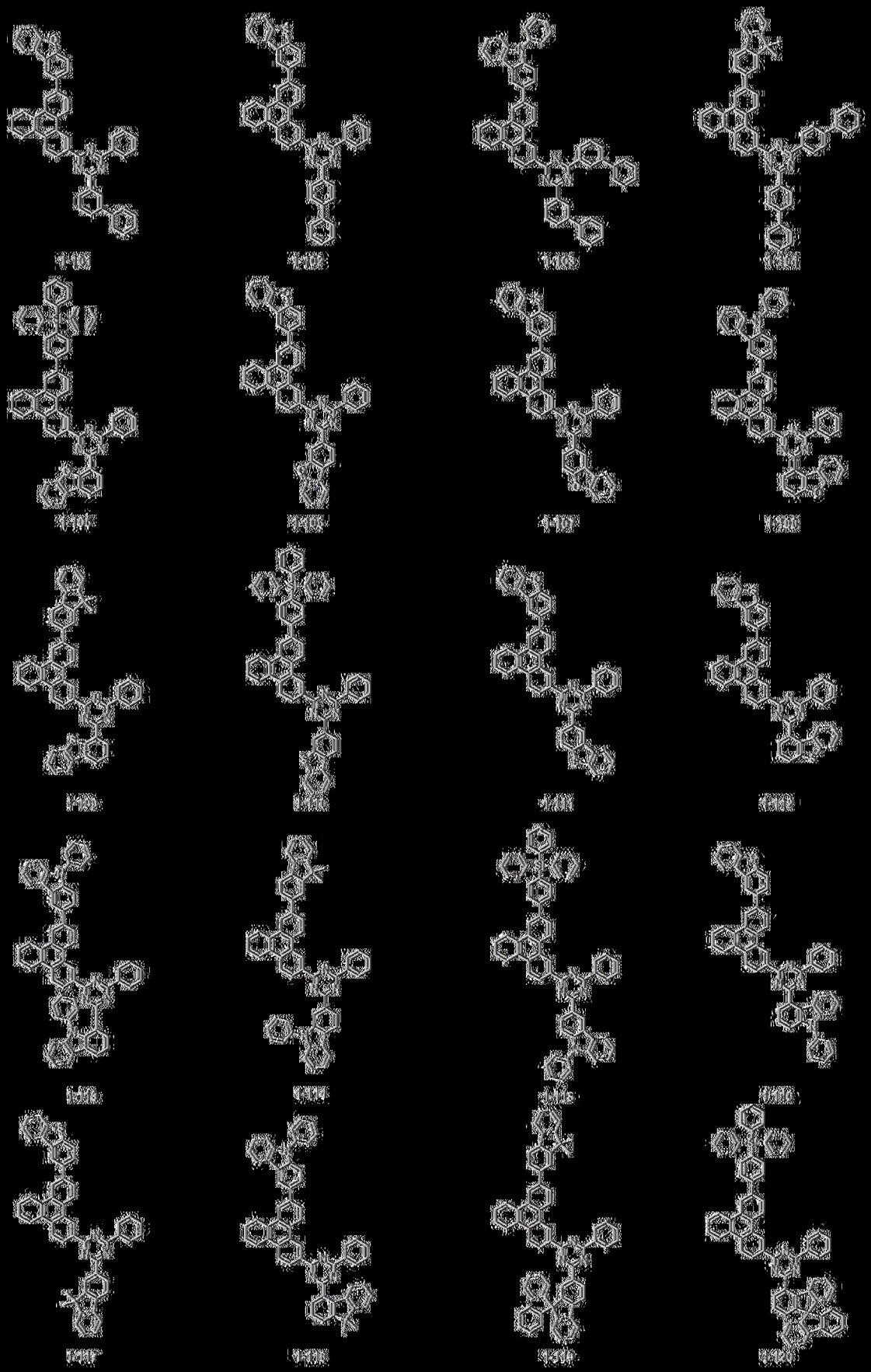

1-60

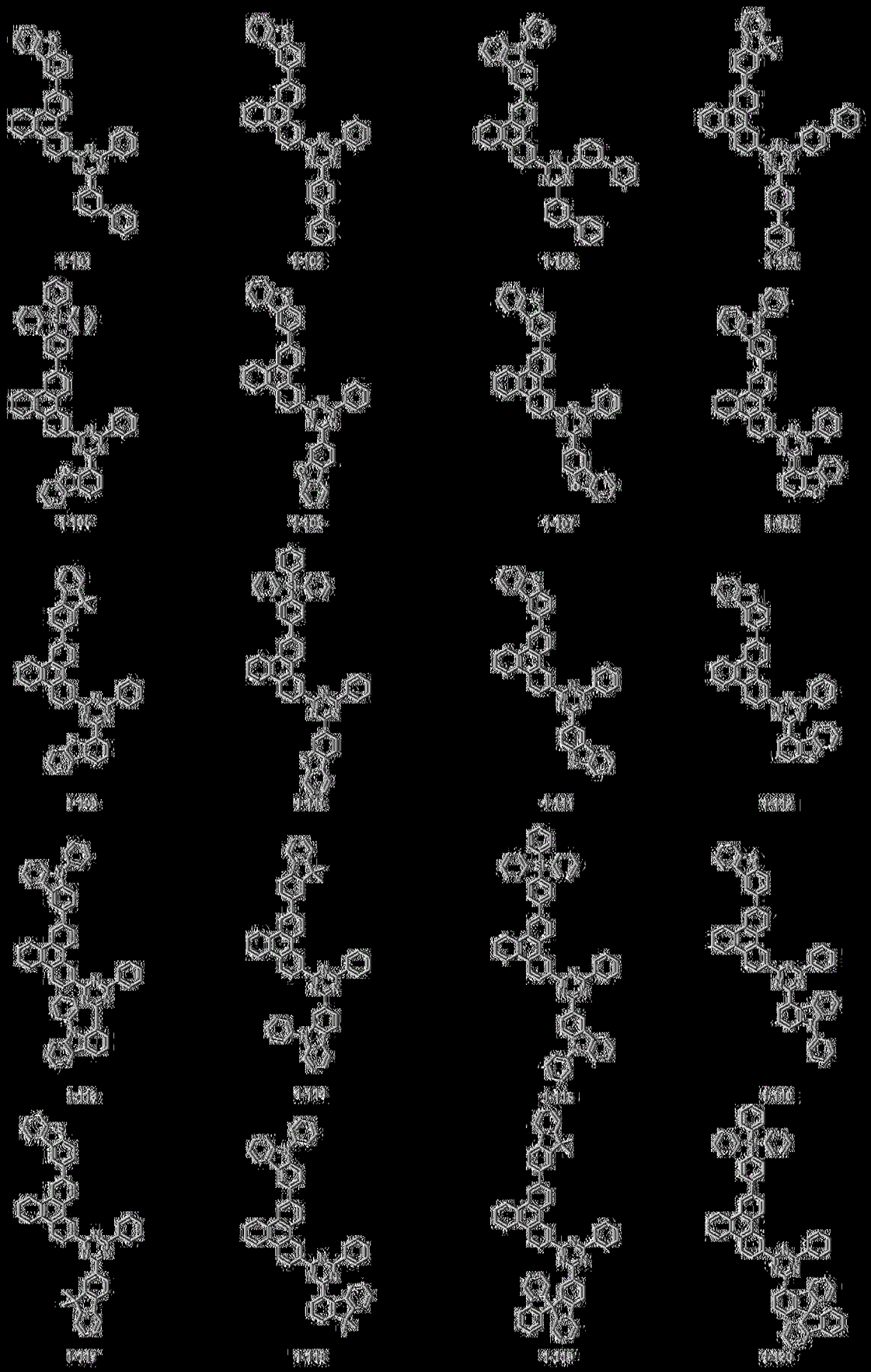


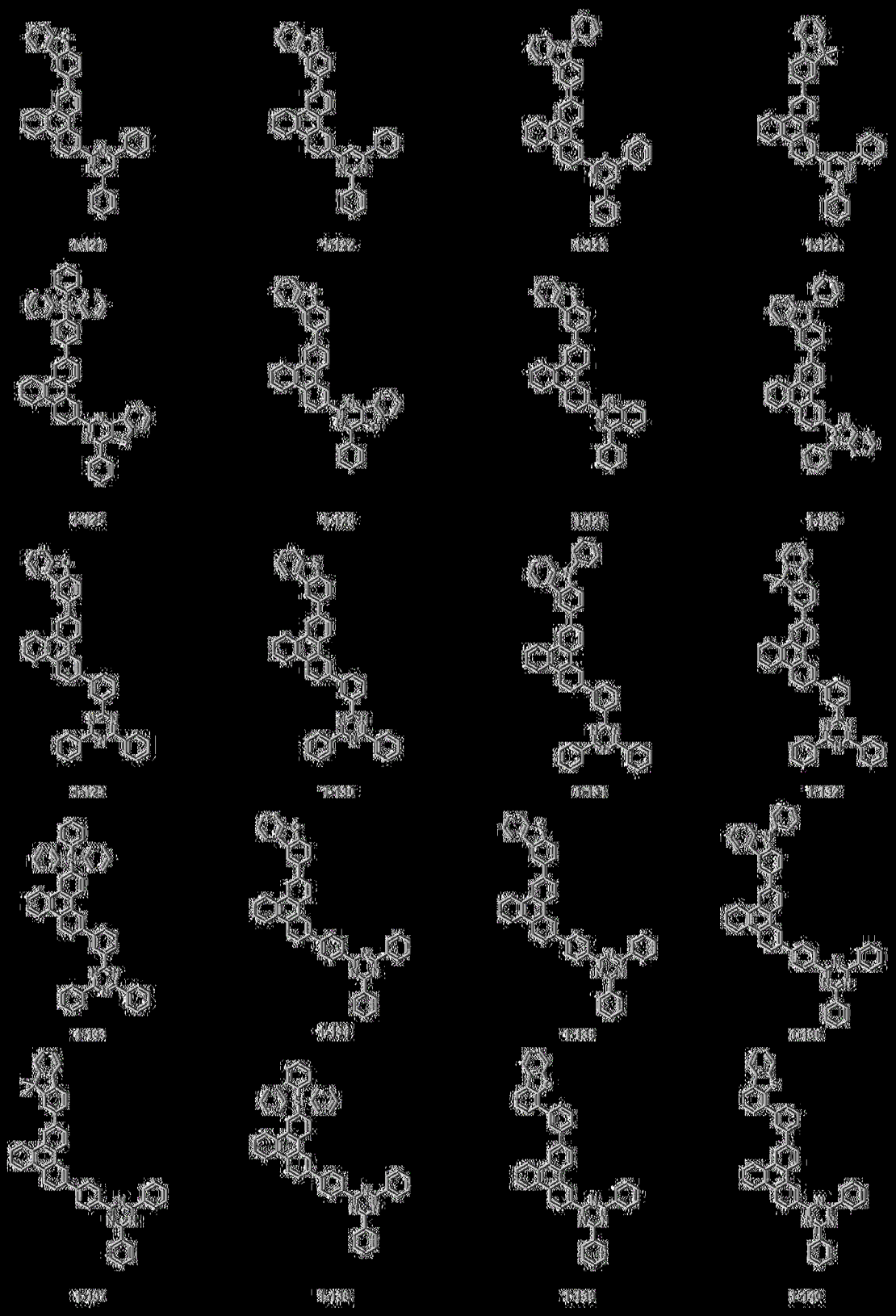


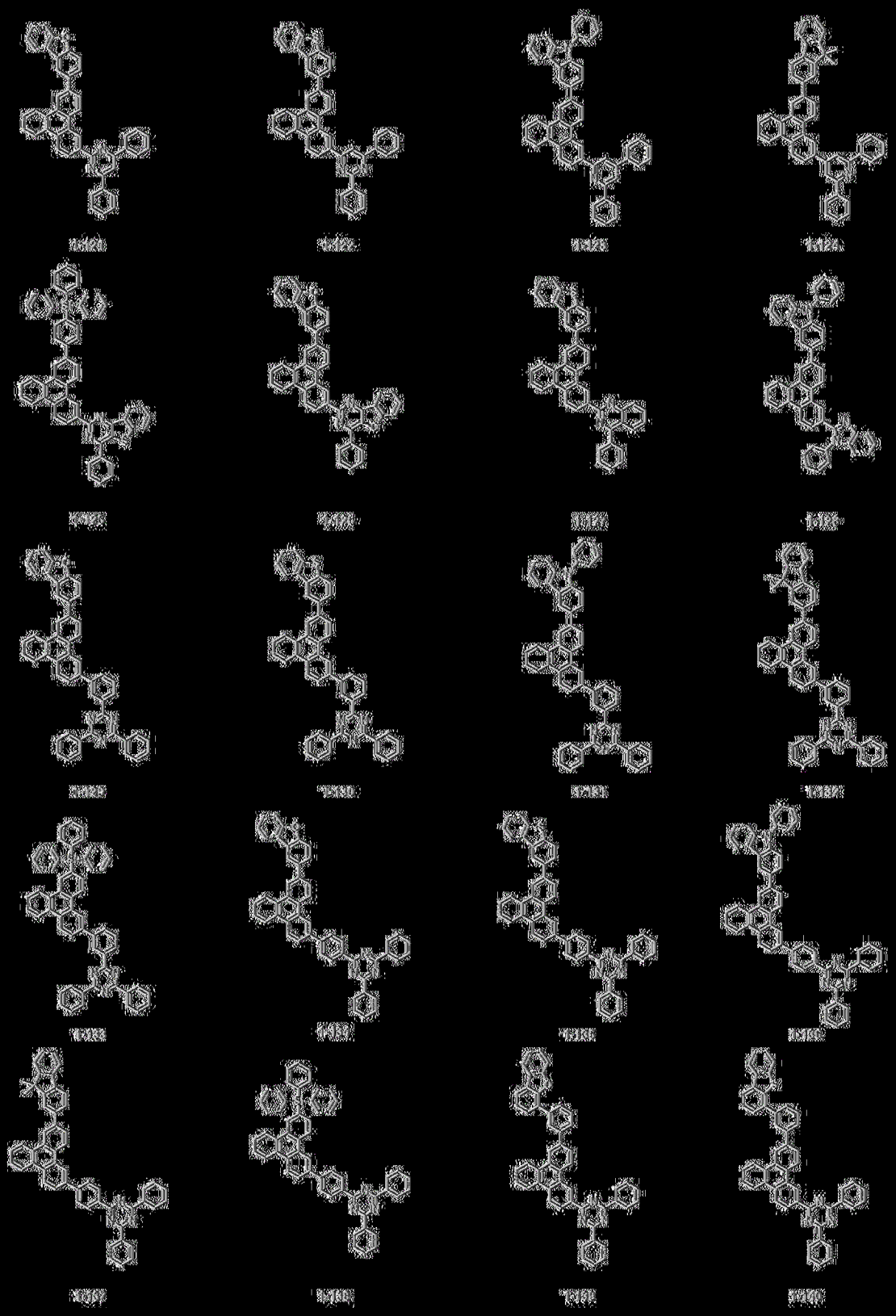


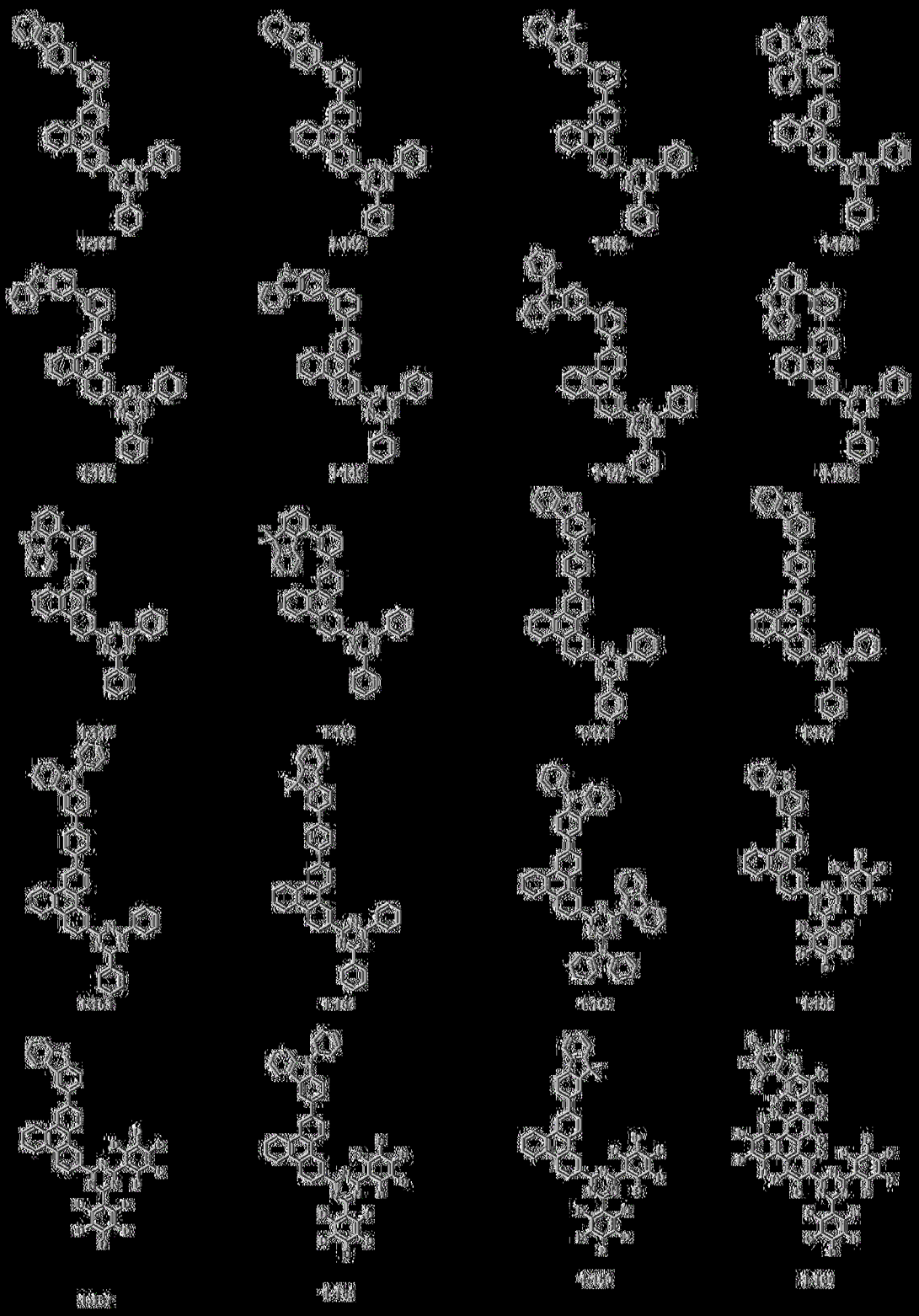




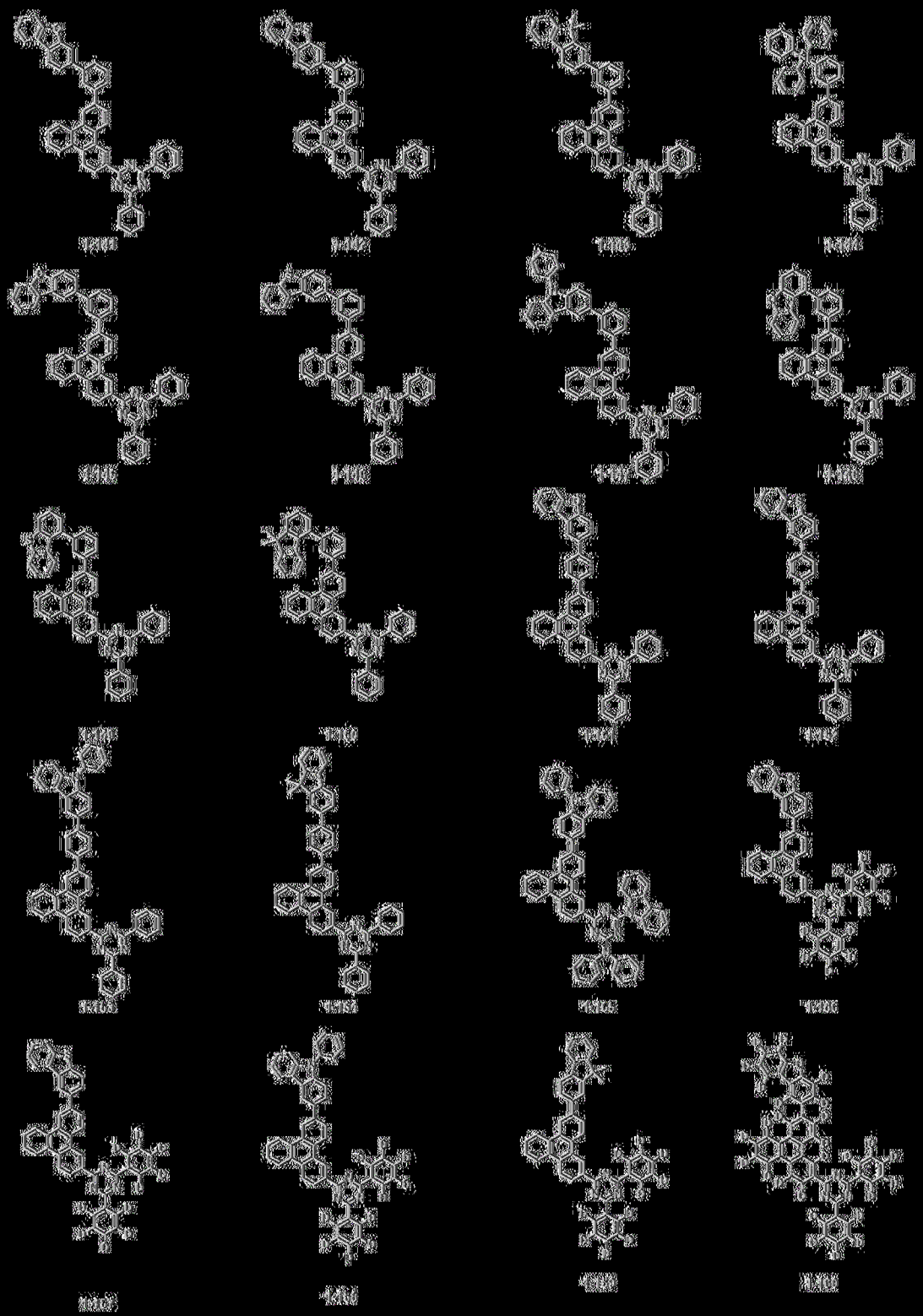








[0117] 另外，藉由將各種取代基引入至化學式 1 的結構，可合成具有所引入的取代基的獨特性質的化合物。舉例而言，藉由將通常用作用於製造有機發光元件的電洞注入層材料、電洞轉移層材料、發光層材料、電子轉移層材料以及電荷產生層材料的取代基引



[0117] 另外，藉由將各種取代基引入至化學式 1 的結構，可合成具有所引入的取代基的獨特性質的化合物。舉例而言，藉由將通常用作用於製造有機發光元件的電洞注入層材料、電洞轉移層材料、發光層材料、電子轉移層材料以及電荷產生層材料的取代基引

入至核心結構，可合成符合各有機材料層所需條件的材料。

【0118】 另外，藉由將各種取代基引入至化學式 1 的結構，可精細控制能帶隙，且同時，強化有機材料之間的界面處的性質，且材料應用可變得多樣化。

【0119】 本說明書的一個實施例提供一種有機發光元件，包含：第一電極；第二電極；以及一或多個有機材料層，設置於第一電極與第二電極之間，其中有機材料層的一或多個層包含一或多種類型的化學式 1 的化合物。

【0120】 在本說明書的一個實施例中，有機材料層的一或多個層包含一種類型的化學式 1 的化合物。

【0121】 在本說明書的一個實施例中，第一電極可為陽極，且第二電極可為陰極。

【0122】 在本說明書的另一實施例中，第一電極可為陰極，且第二電極可為陽極。

【0123】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為藍色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作藍色有機發光元件的材料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於藍色有機發光元件的發光層中。

【0124】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為綠色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作綠色有機發光元件的材料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於綠色有機發光元件的發光層中。

【0125】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為紅色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作紅色有機發光元件的材

入至核心結構，可合成符合各有機材料層所需條件的材料。

【0118】 另外，藉由將各種取代基引入至化學式 1 的結構，可精細控制能帶隙，且同時，強化有機材料之間的界面處的性質，且材料應用可變得多樣化。

【0119】 本說明書的一個實施例提供一種有機發光元件，包含：第一電極；第二電極；以及一或多個有機材料層，設置於第一電極與第二電極之間，其中有機材料層的一或多個層包含一或多種類型的化學式 1 的化合物。

【0120】 在本說明書的一個實施例中，有機材料層的一或多個層包含一種類型的化學式 1 的化合物。

【0121】 在本說明書的一個實施例中，第一電極可為陽極，且第二電極可為陰極。

【0122】 在本說明書的另一實施例中，第一電極可為陰極，且第二電極可為陽極。

【0123】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為藍色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作藍色有機發光元件的材料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於藍色有機發光元件的發光層中。

【0124】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為綠色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作綠色有機發光元件的材料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於綠色有機發光元件的發光層中。

【0125】 在本說明書的一個實施例中，有機發光元件可為紅色有機發光元件，且化學式 1 的化合物可用作紅色有機發光元件的材

料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於紅色有機發光元件的發光層中。

【0126】 除使用上文所描述的化合物形成一或多個有機材料層以外，本說明書的有機發光元件可使用常用有機發光元件製造方法及材料來製造。

【0127】 當製造有機發光元件時，可使用溶液塗佈方法以及真空沈積方法使化合物形成為有機材料層。在本文中，溶液塗佈方法意謂旋塗、浸塗、噴墨印刷、網板印刷、噴霧法、滾塗法以及類似方法，但不限於此。

【0128】 本說明書的有機發光元件的有機材料層可以單層結構形成，但可以其中兩個或多於兩個有機材料層層壓的多層結構形成。舉例而言，本揭露的有機發光元件可具有包含電洞注入層、電洞轉移層、發光層、電子轉移層、電子注入層以及類似層作為有機材料層的結構。然而，有機發光元件的結構不限於此，且可包含更少數目的有機材料層。

【0129】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，且發光層可包含化學式 1 的化合物。

【0130】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，發光層包含主體，且主體可包含化學式 1 的化合物。

【0131】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，且除了化學式 1 的化合物以外，發光層可更包含以下化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[化學式 2]

料。舉例而言，化學式 1 的化合物可包含於紅色有機發光元件的發光層中。

【0126】 除使用上文所描述的化合物形成一或多個有機材料層以外，本說明書的有機發光元件可使用常用有機發光元件製造方法及材料來製造。

【0127】 當製造有機發光元件時，可使用溶液塗佈方法以及真空沈積方法使化合物形成為有機材料層。在本文中，溶液塗佈方法意謂旋塗、浸塗、噴墨印刷、網板印刷、噴霧法、滾塗法以及類似方法，但不限於此。

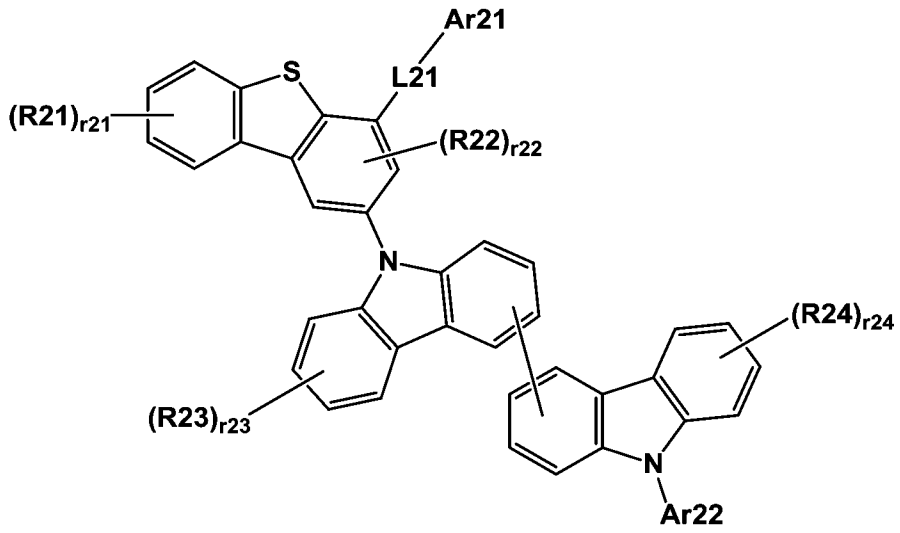
【0128】 本說明書的有機發光元件的有機材料層可以單層結構形成，但可以其中兩個或多於兩個有機材料層層壓的多層結構形成。舉例而言，本揭露的有機發光元件可具有包含電洞注入層、電洞轉移層、發光層、電子轉移層、電子注入層以及類似層作為有機材料層的結構。然而，有機發光元件的結構不限於此，且可包含更少數目的有機材料層。

【0129】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，且發光層可包含化學式 1 的化合物。

【0130】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，發光層包含主體，且主體可包含化學式 1 的化合物。

【0131】 在本說明書的有機發光元件中，有機材料層包含發光層，且除了化學式 1 的化合物以外，發光層可更包含以下化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[化學式 2]



【0132】 在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

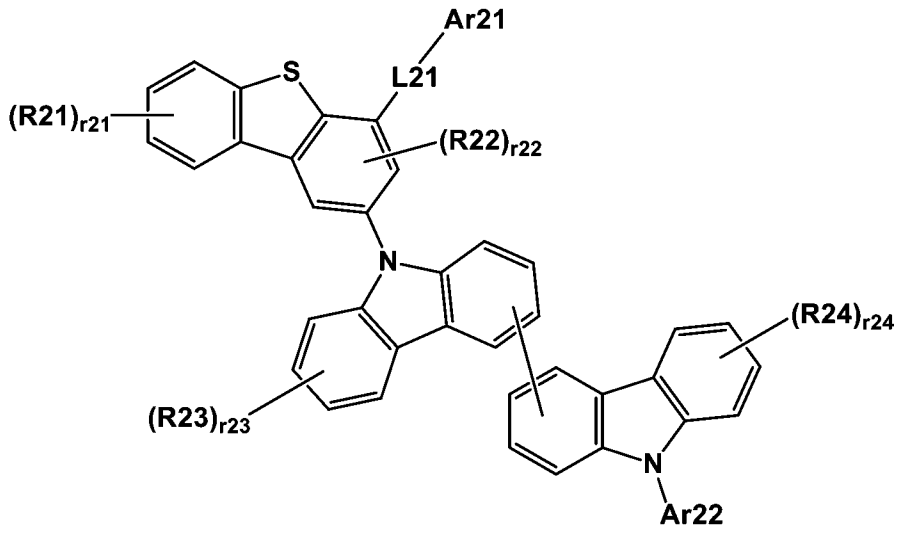
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



【0132】 在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

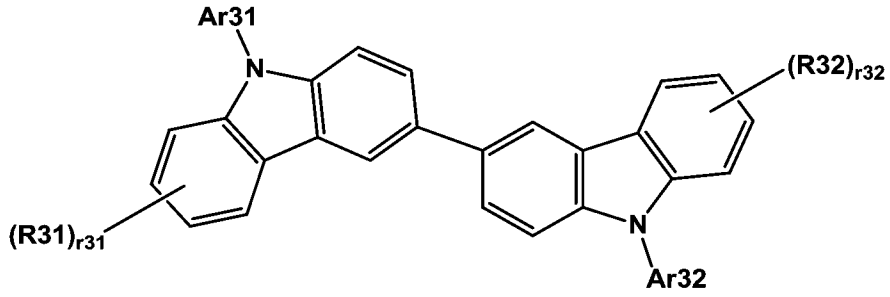
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

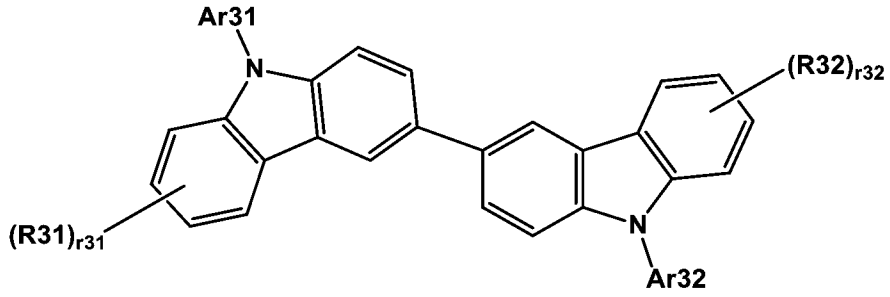
r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

【0133】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0134】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0135】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

【0133】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0134】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0135】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0136】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘或經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0137】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 為氫或氘。

【0138】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 為氫。

【0139】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 伸雜芳基。

【0140】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基。

【0141】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

【0142】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的伸苯基。

【0143】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或伸苯基。

【0144】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C40 雜芳基。

【0145】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0146】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22

【0136】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘或經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0137】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 為氫或氘。

【0138】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 R21 至 R24 為氫。

【0139】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 伸雜芳基。

【0140】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C30 伸芳基。

【0141】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

【0142】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或經取代或未經取代的伸苯基。

【0143】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 L21 為直接鍵或伸苯基。

【0144】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C40 雜芳基。

【0145】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0146】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22

各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的 C2 至 C30 雜芳基。

【0147】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的芴基、經取代或未經取代的二苯并呋喃基或經取代或未經取代的二苯并噻吩基。

【0148】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

【0149】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

【0150】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

【0151】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar22 為苯基。

【0152】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 可由以下化學式 2-1 至化學式 2-3 中的任一者表示。

[化學式 2-1]

各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的 C2 至 C30 雜芳基。

【0147】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的芴基、經取代或未經取代的二苯并呋喃基或經取代或未經取代的二苯并噻吩基。

【0148】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基或芳基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

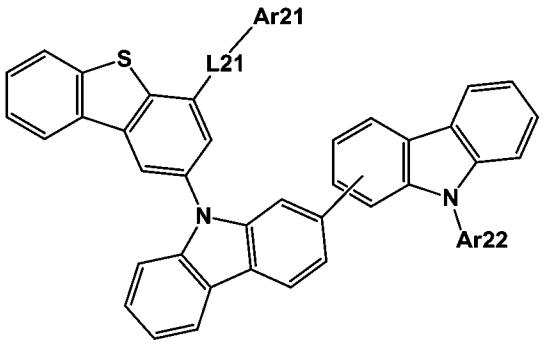
【0149】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 及 Ar22 各自獨立地為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

【0150】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar21 為苯基、聯苯基、萘基、未經取代或經烷基取代的芴基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。

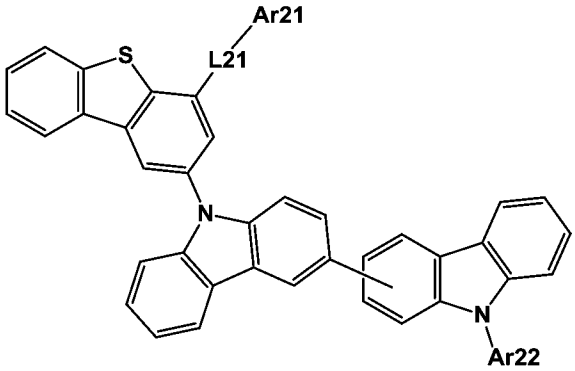
【0151】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 的 Ar22 為苯基。

【0152】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 可由以下化學式 2-1 至化學式 2-3 中的任一者表示。

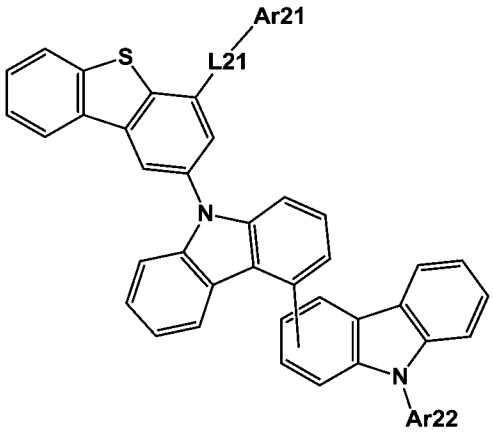
[化學式 2-1]



[化學式 2-2]



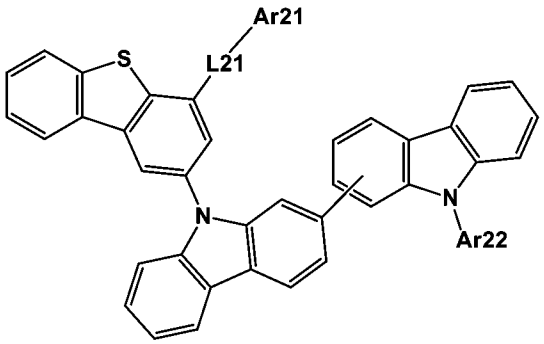
[化學式 2-3]



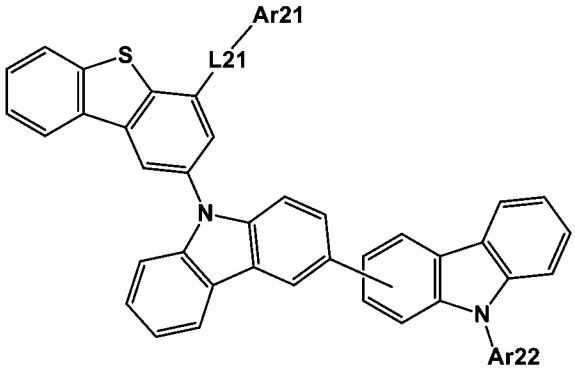
【0153】 在化學式 2-1 至化學式 2-3 中，

各取代基具有與化學式 2 中相同的定義。

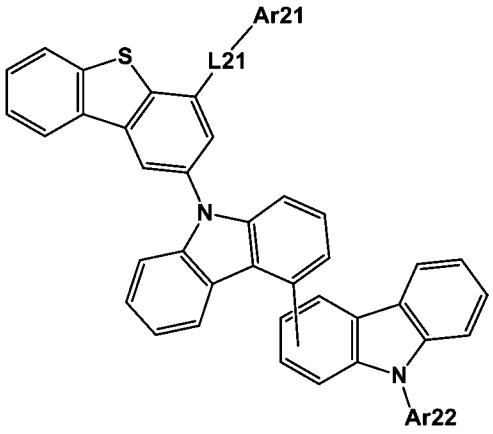
【0154】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。



[化學式 2-2]



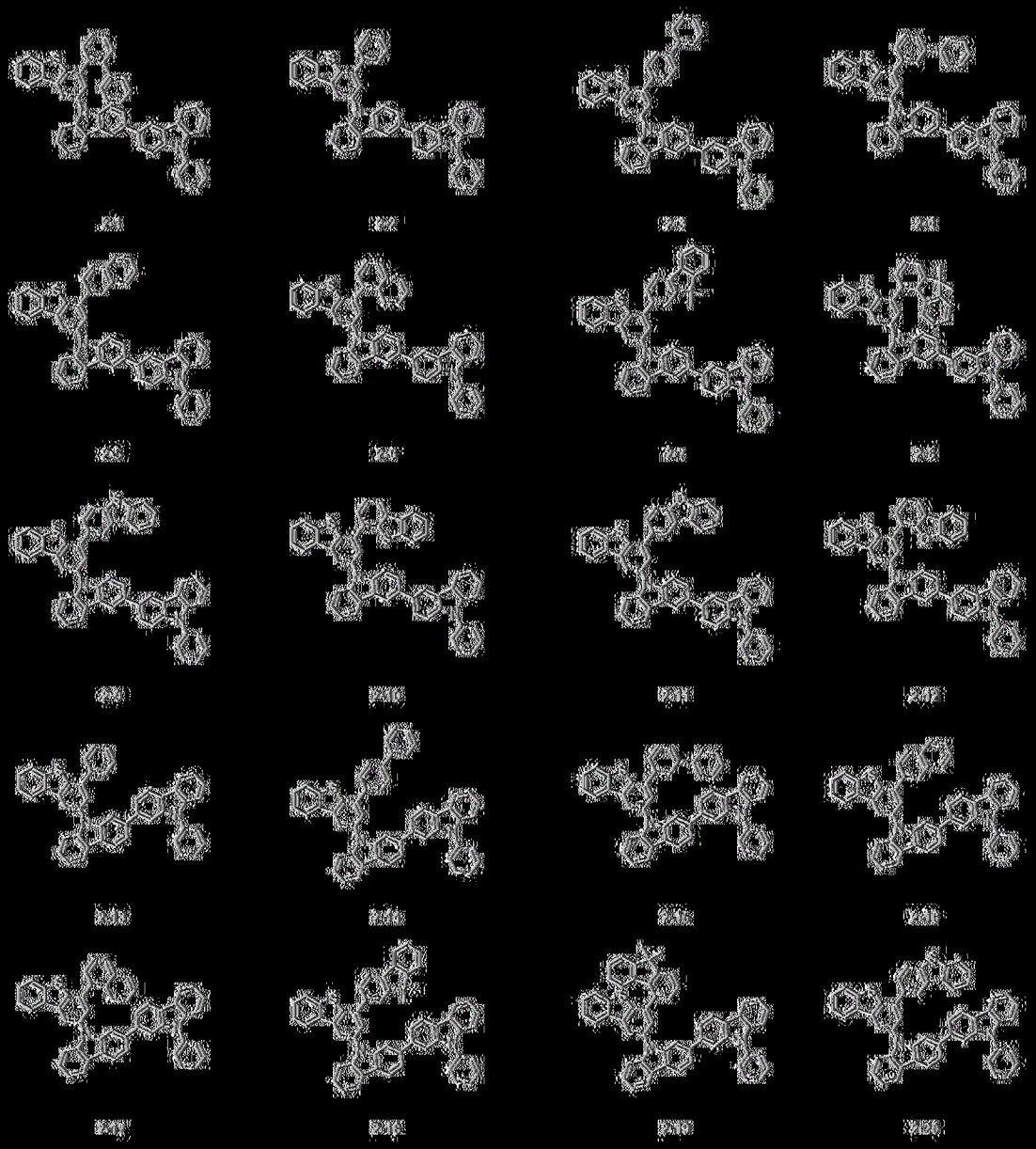
[化學式 2-3]

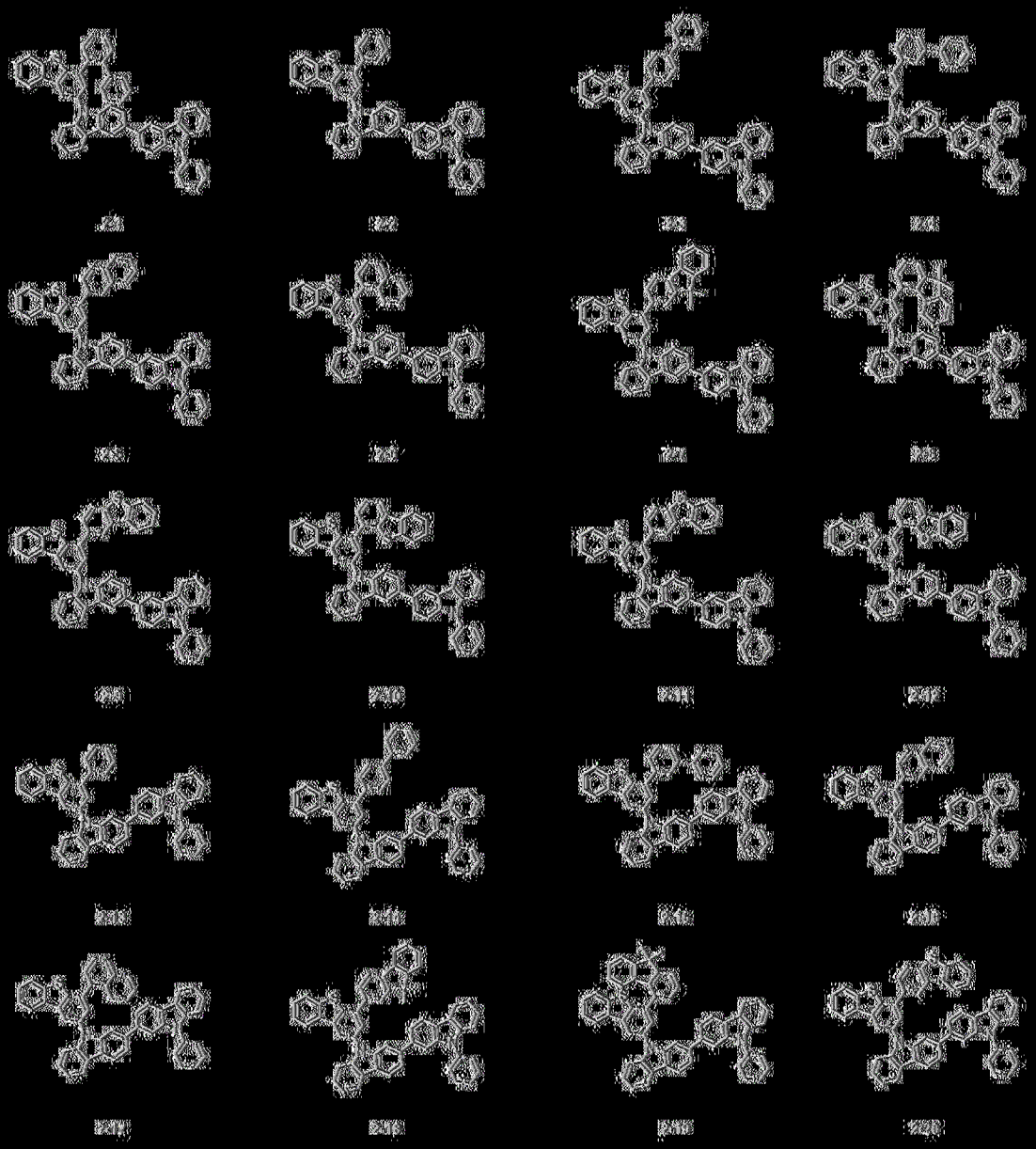


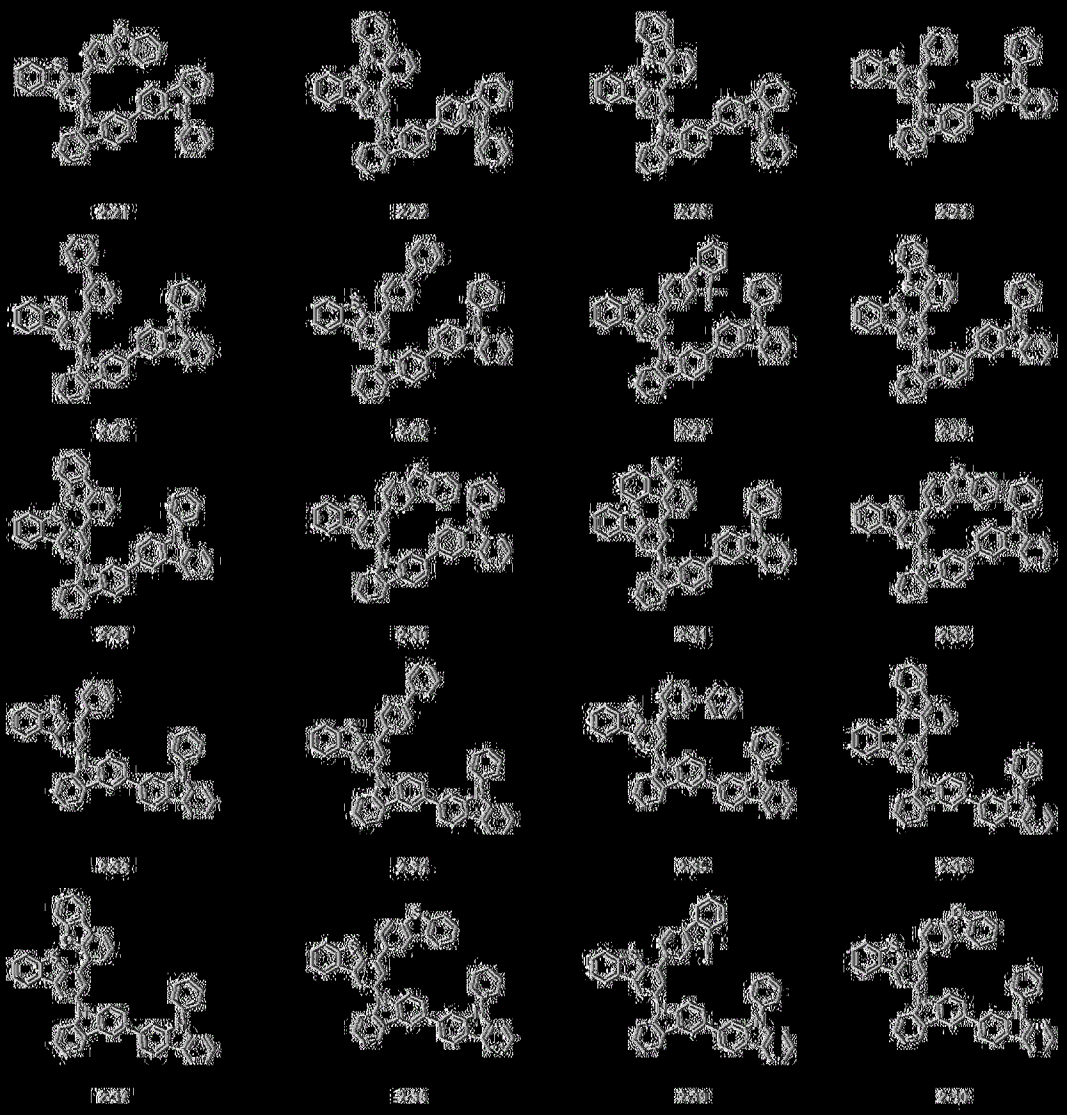
【0153】 在化學式 2-1 至化學式 2-3 中，

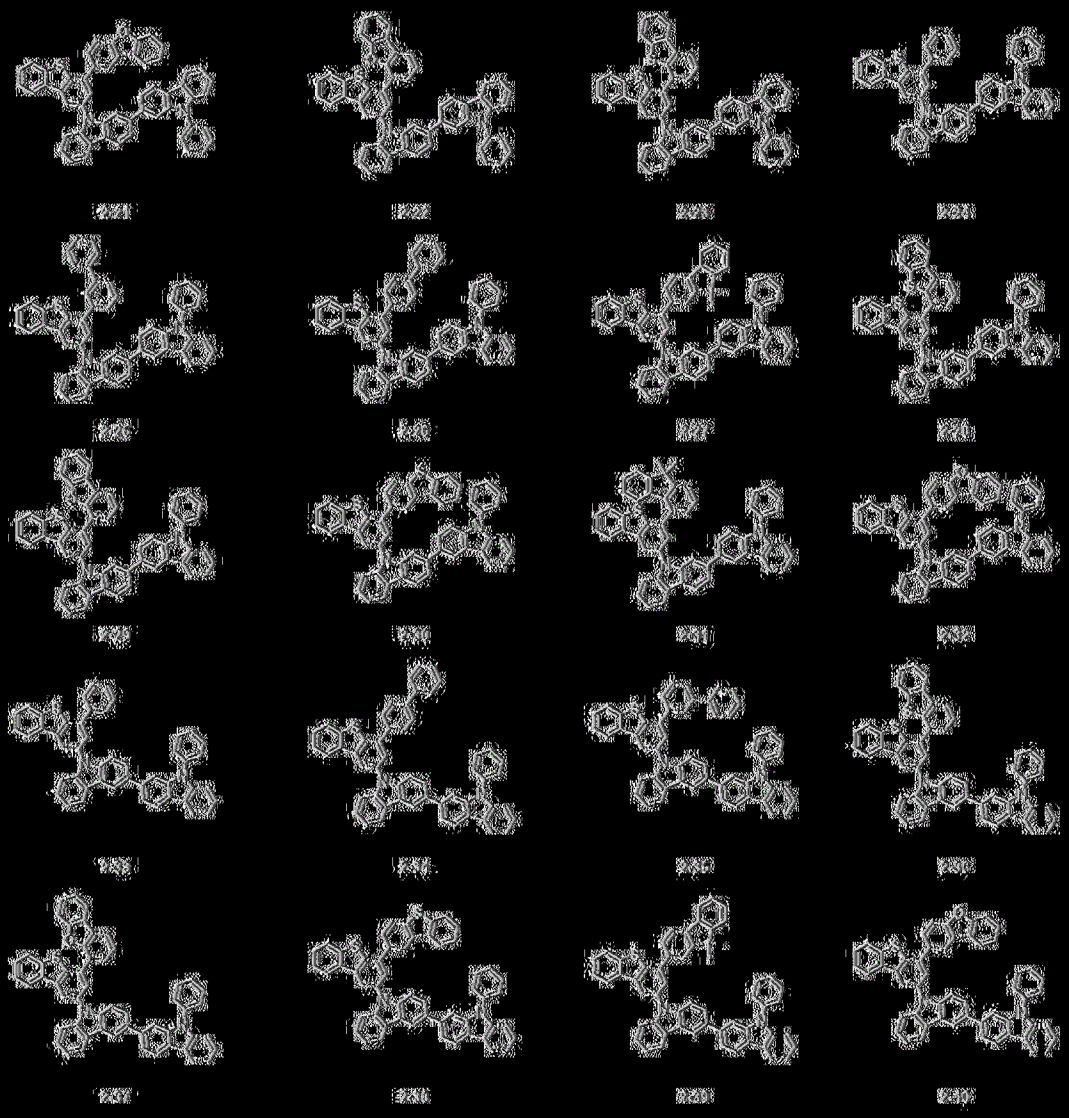
各取代基具有與化學式 2 中相同的定義。

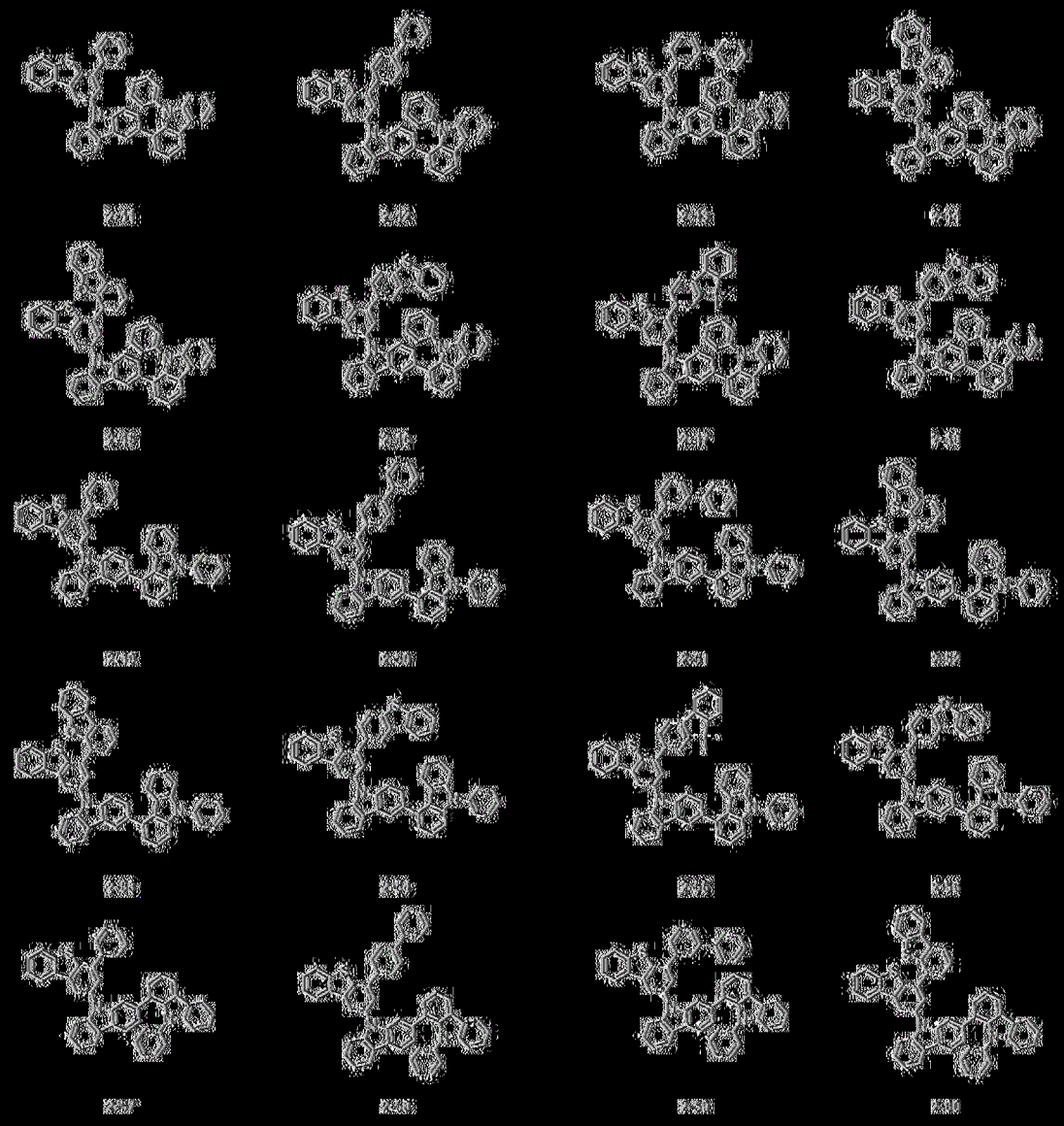
【0154】 在本說明書的一個實施例中，化學式 2 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。

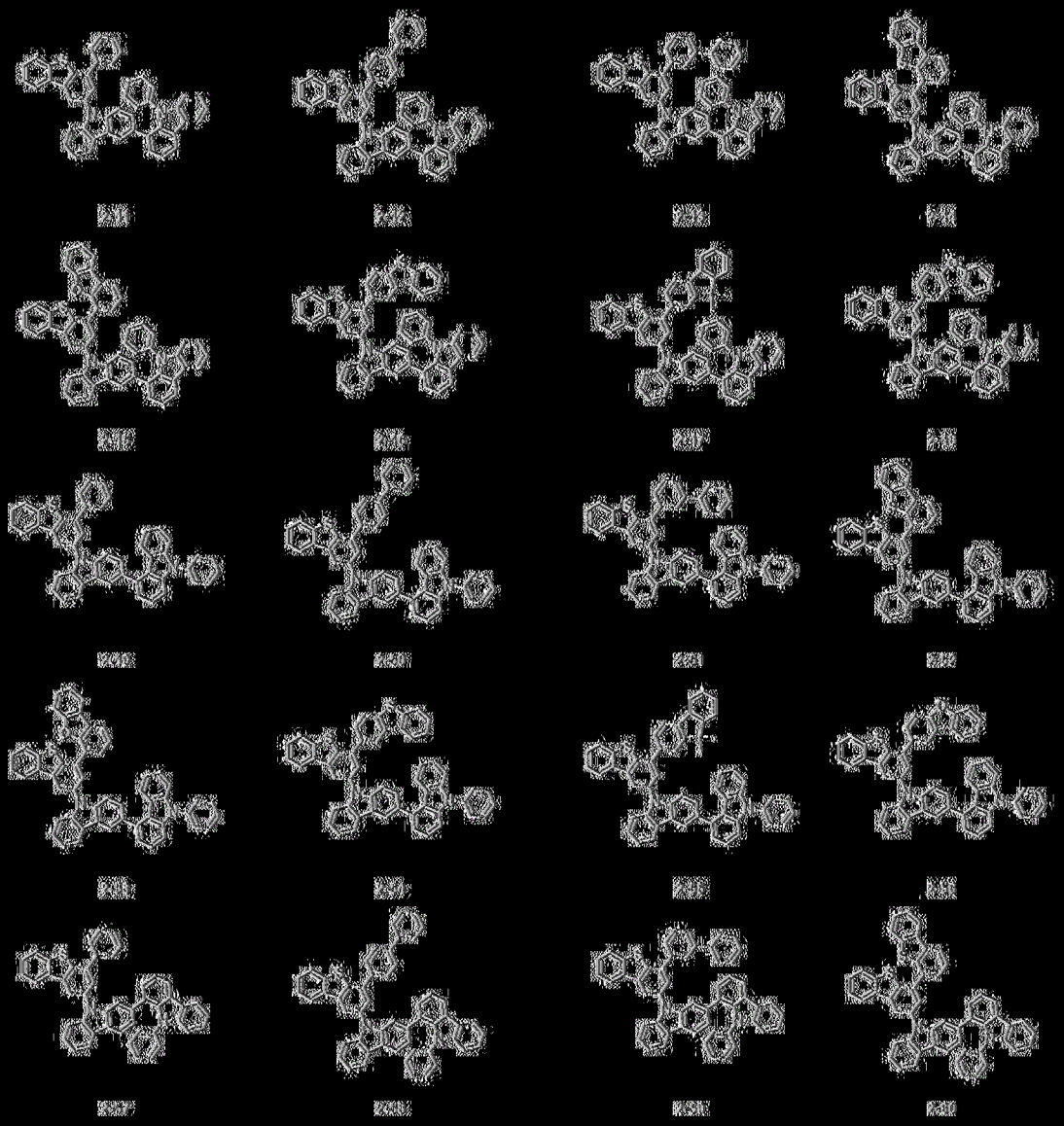


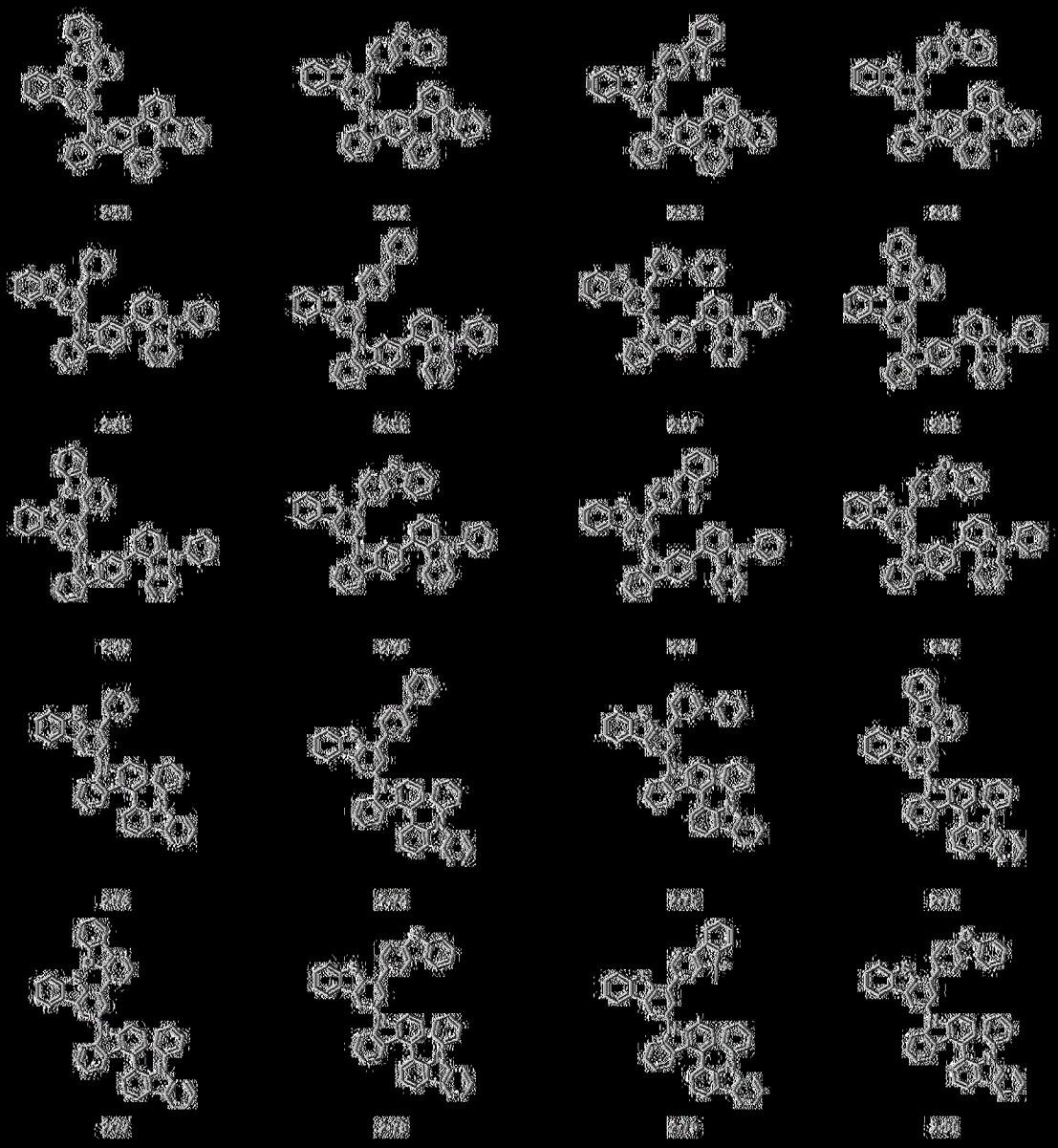


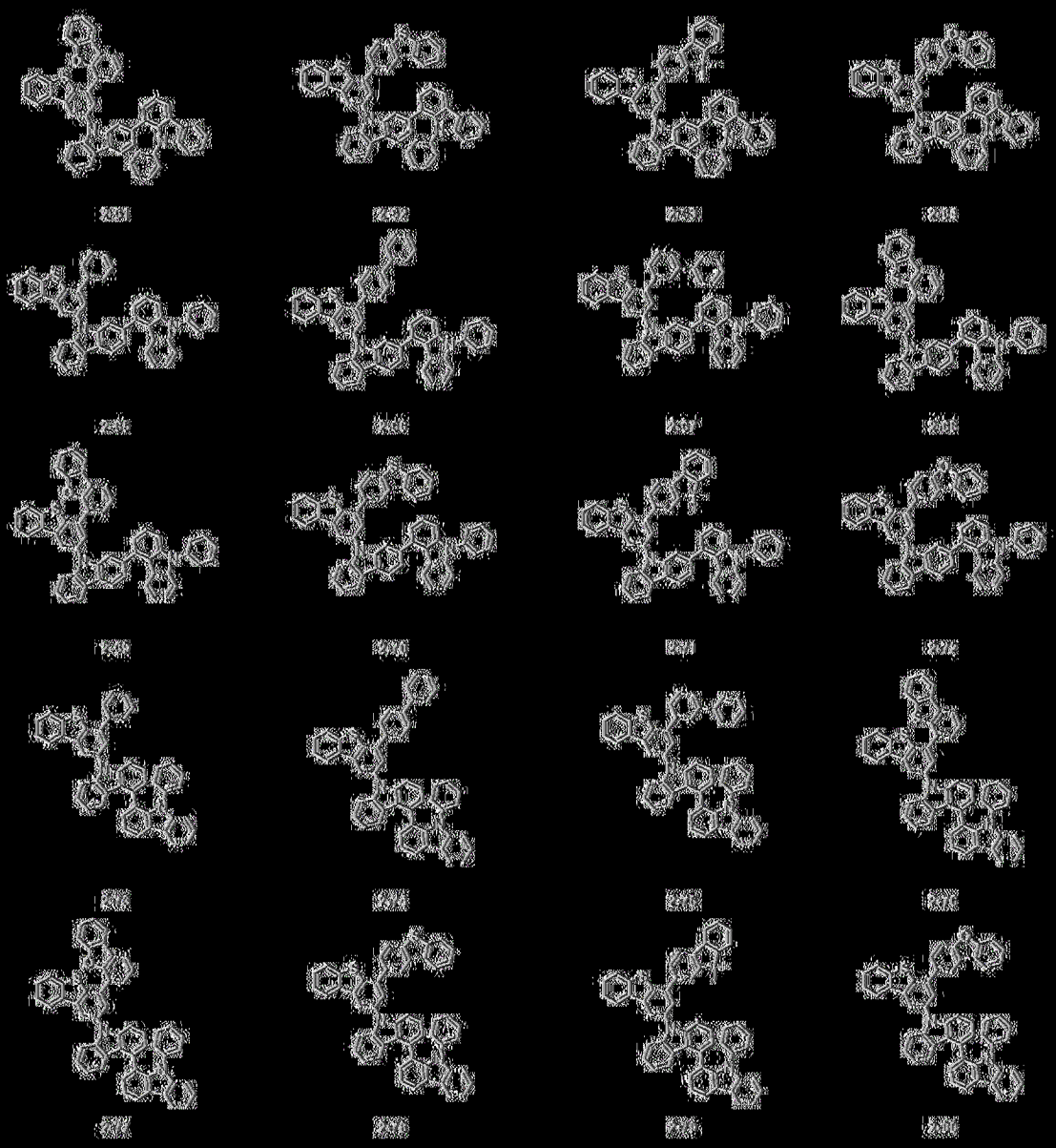


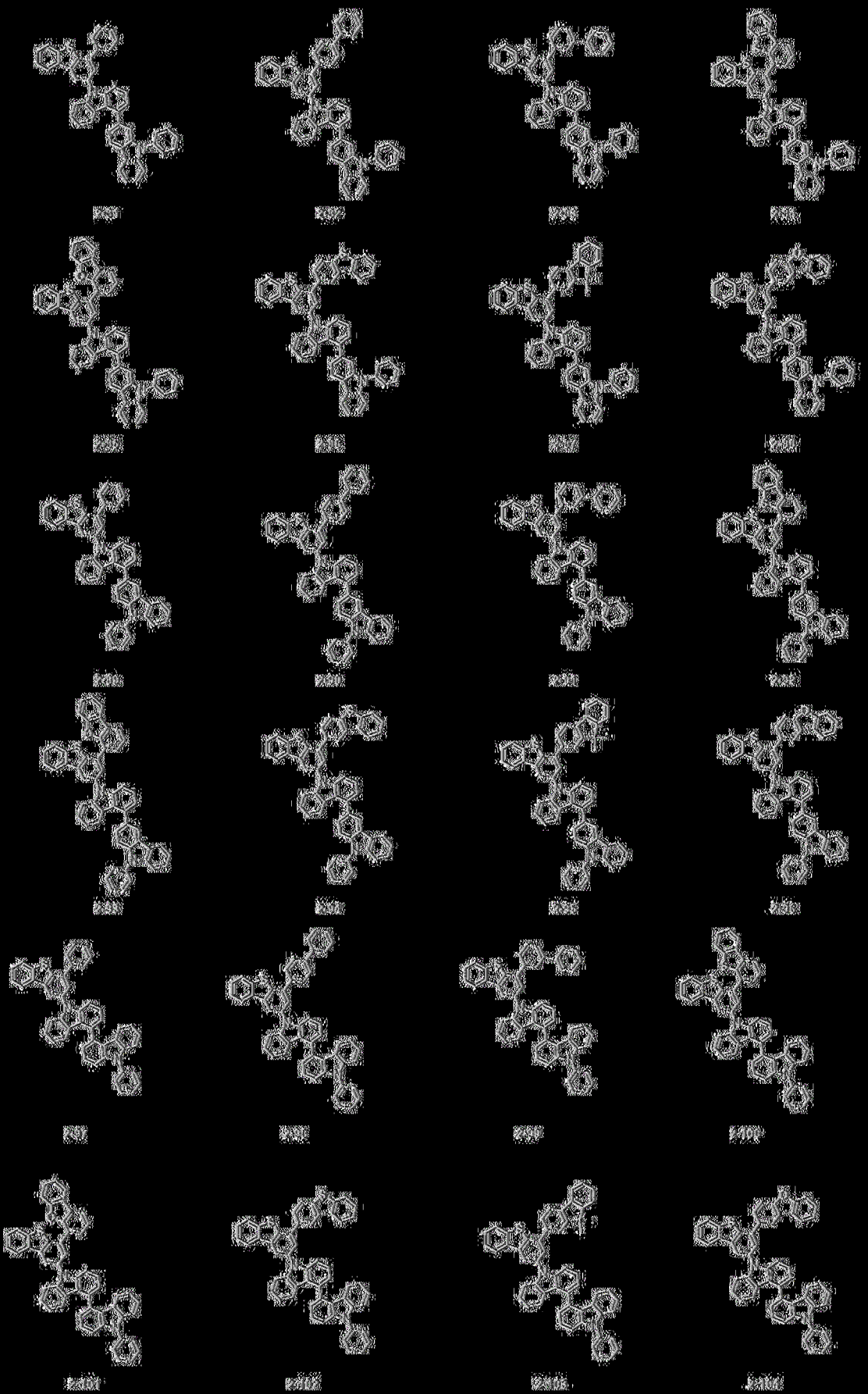




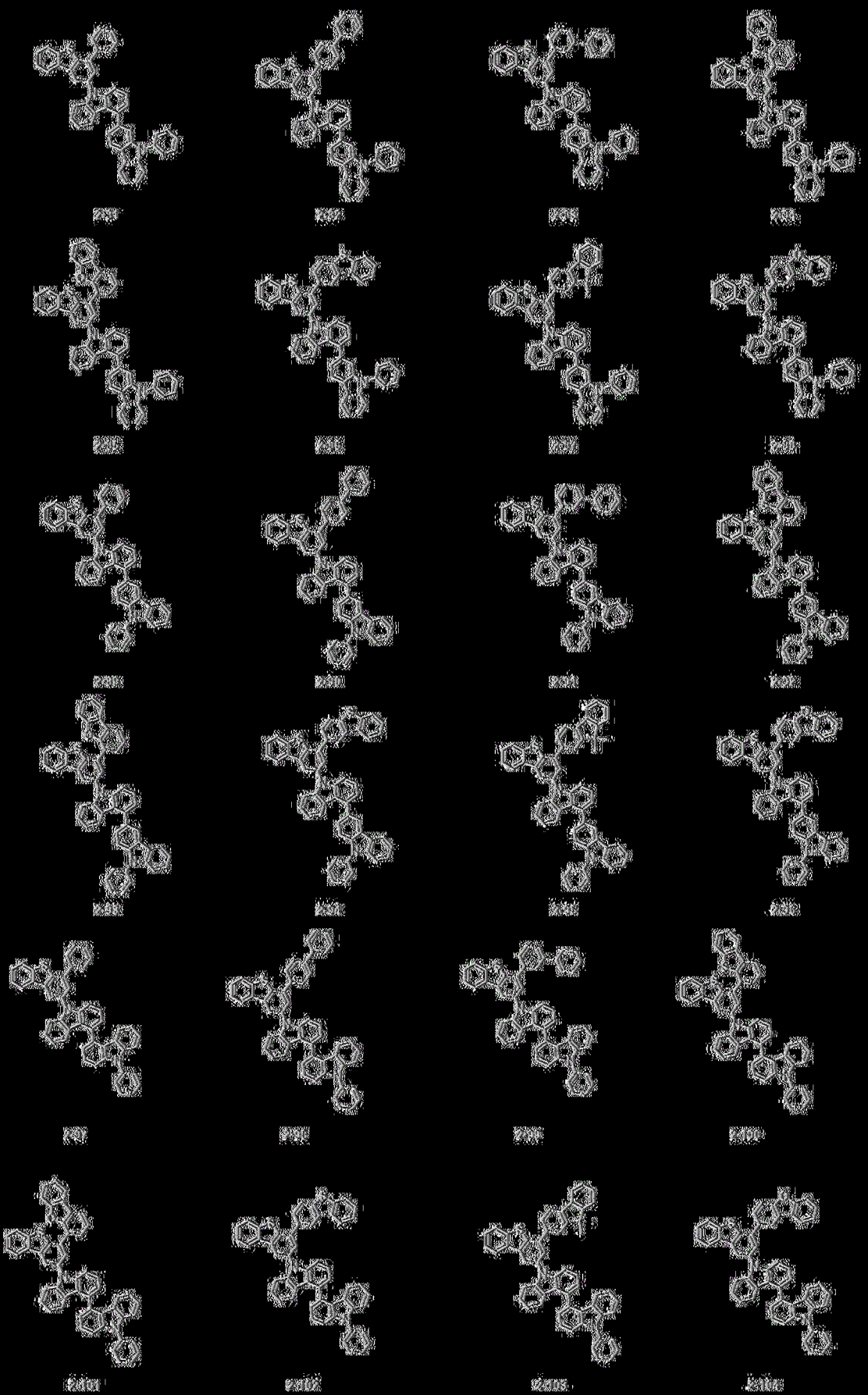








[0155] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各



[0155] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各

自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0156】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0157】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘或經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0158】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 為氫或氘。

【0159】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 為氫。

【0160】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C40 雜芳基。

【0161】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基。

【0162】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0163】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的芴基或經取代或未經取代的聯伸三苯基。

【0164】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為未經取代或經氰基、矽烷基或芳基取代的苯基；聯苯

自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基。

【0156】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0157】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘或經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

【0158】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 為氫或氘。

【0159】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 R31 及 R32 為氫。

【0160】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C40 雜芳基。

【0161】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C40 芳基。

【0162】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基。

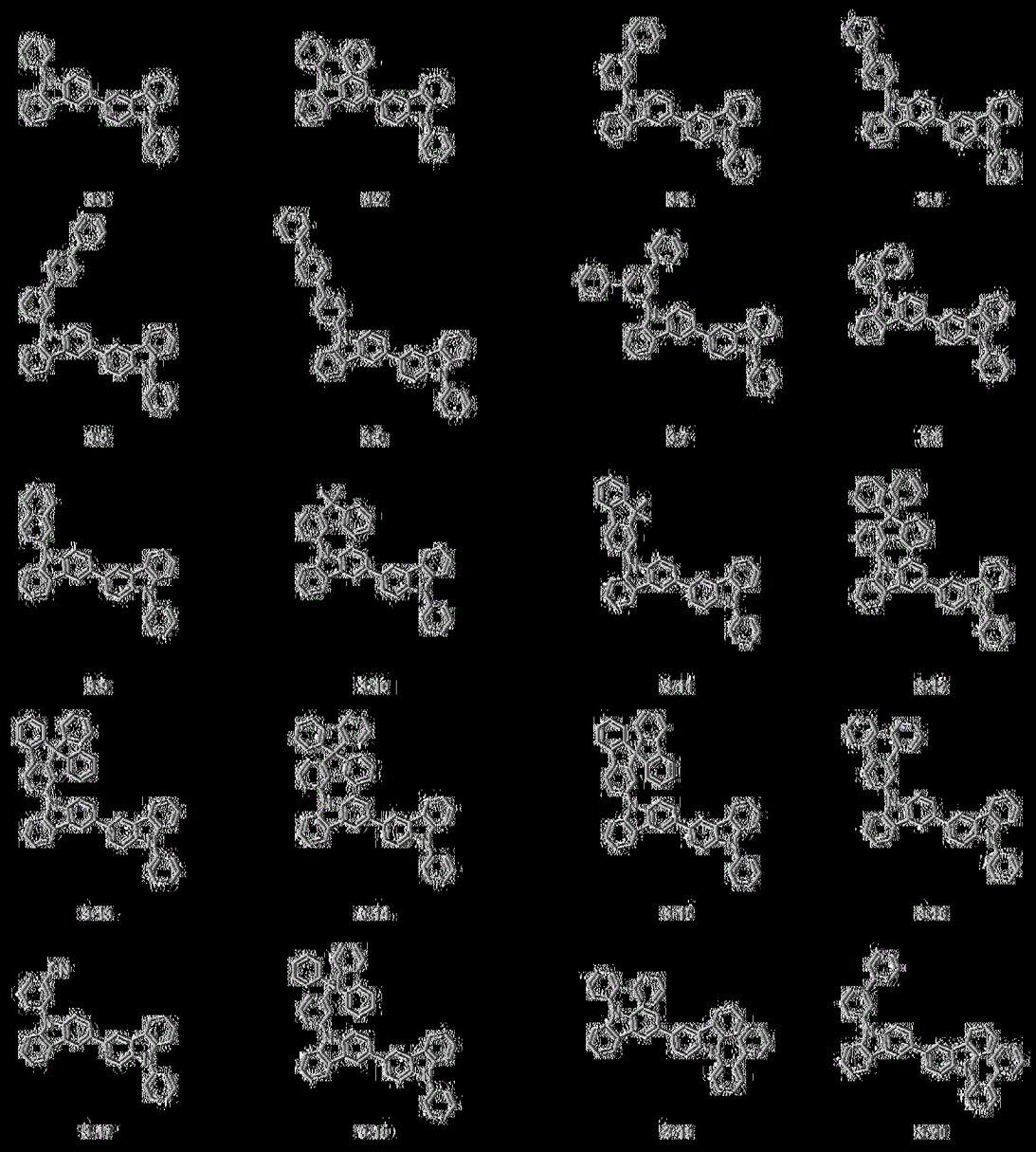
【0163】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的芴基或經取代或未經取代的聯伸三苯基。

【0164】 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為未經取代或經氰基、矽烷基或芳基取代的苯基；聯苯

基；聯三苯基；萘基；未經取代或經烷基或芳基取代的芴基；9,9'-螺二[芴]；或聯伸三苯基。

[0165] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為未經取代或經氟基、三苯基矽烷基或芳基取代的苯基；聯苯基；聯三苯基；萘基；未經取代或經烷基或芳基取代的芴基；9,9'-螺二[芴]；或聯伸三苯基。

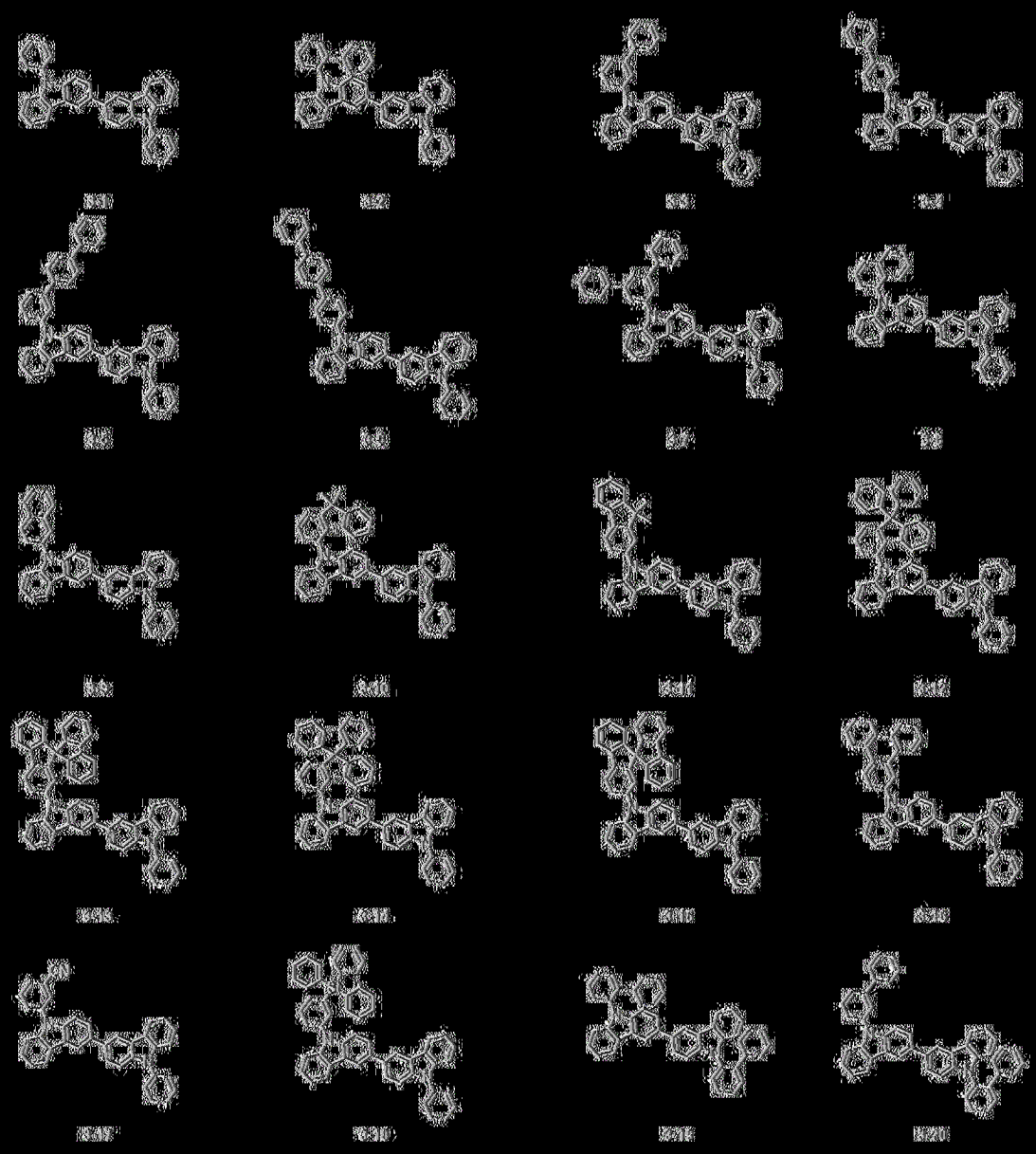
[0166] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。

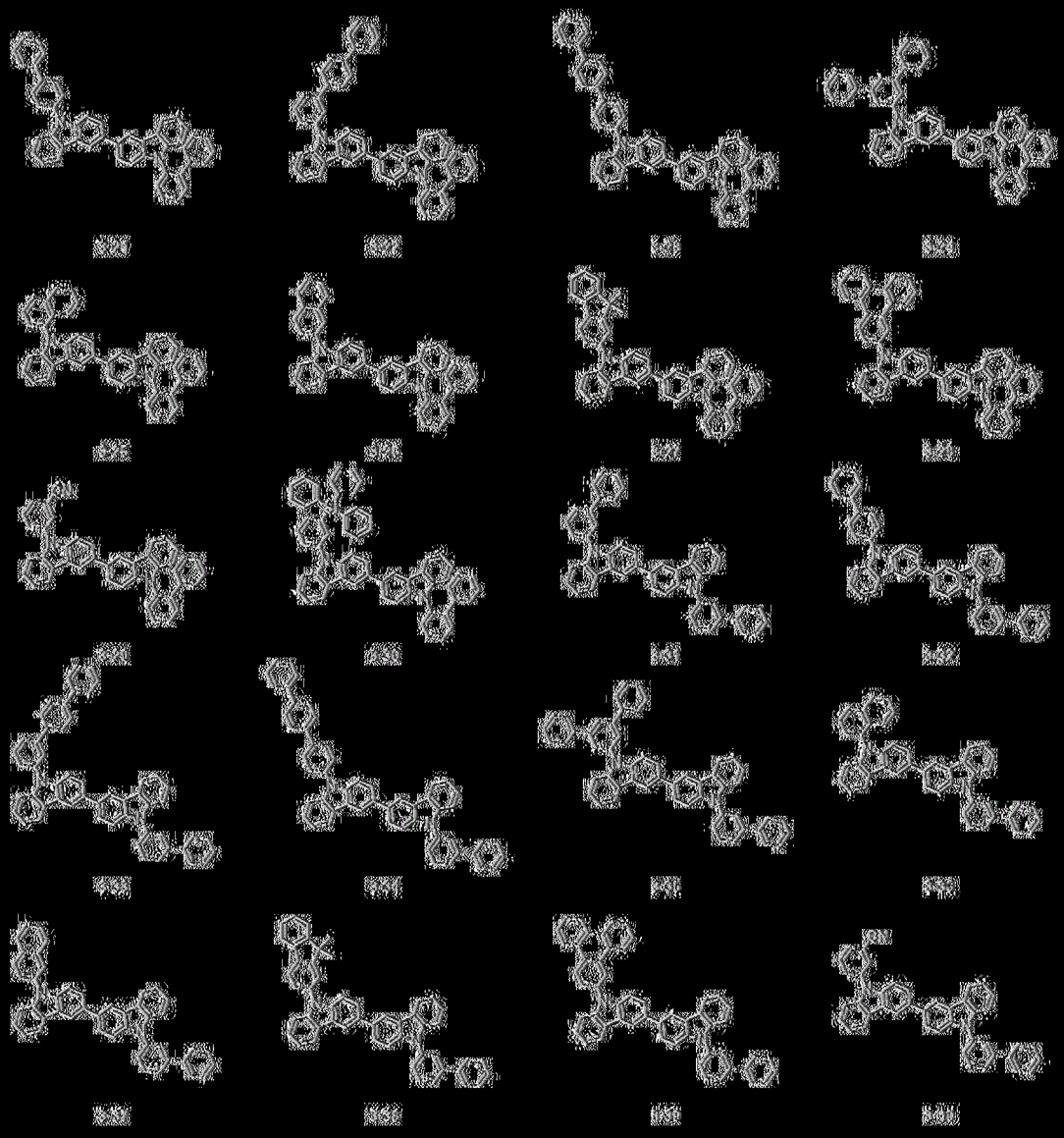


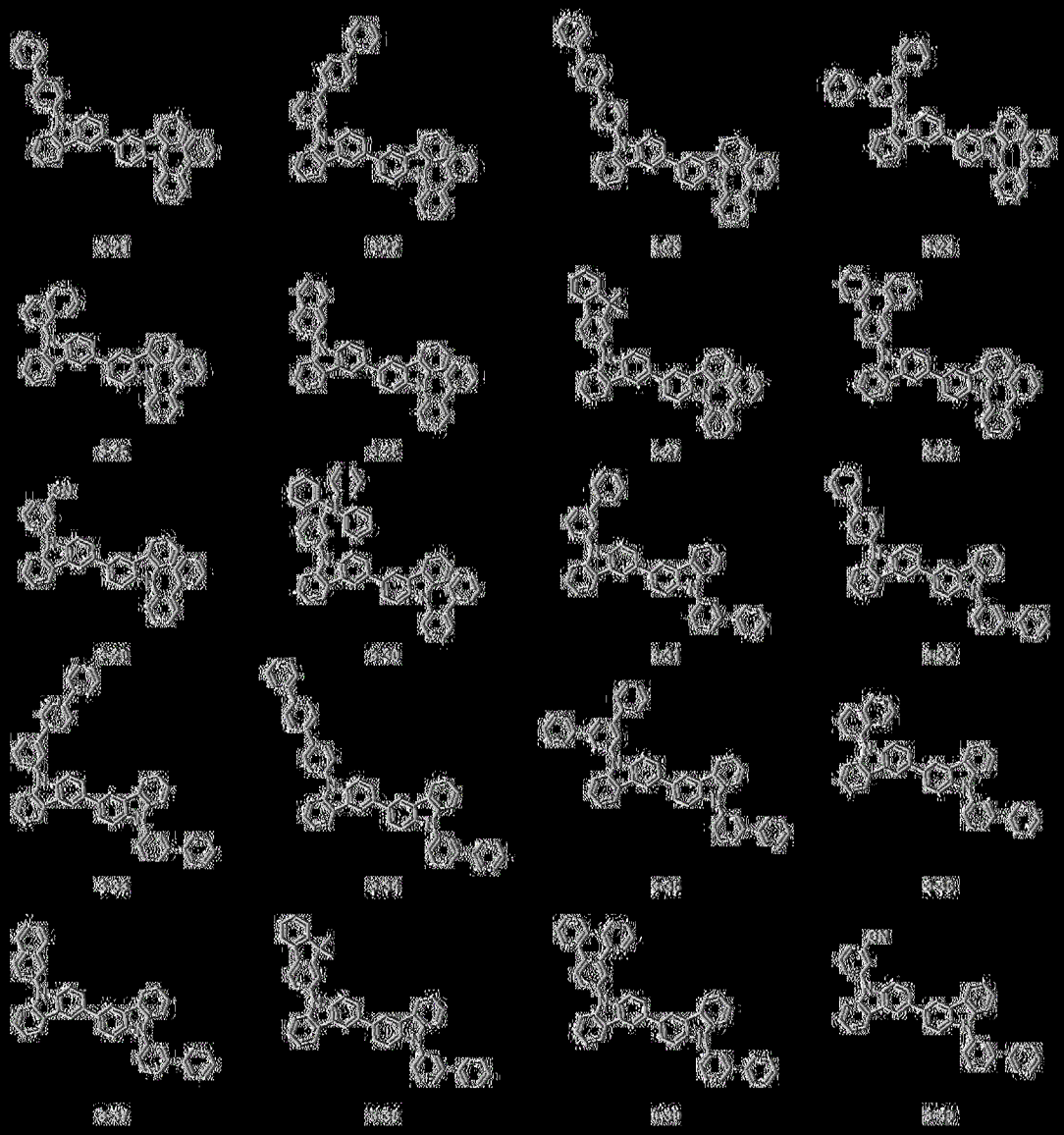
基；聯三苯基；萘基；未經取代或經烷基或芳基取代的芴基；9,9'-螺二[芴]；或聯伸三苯基。

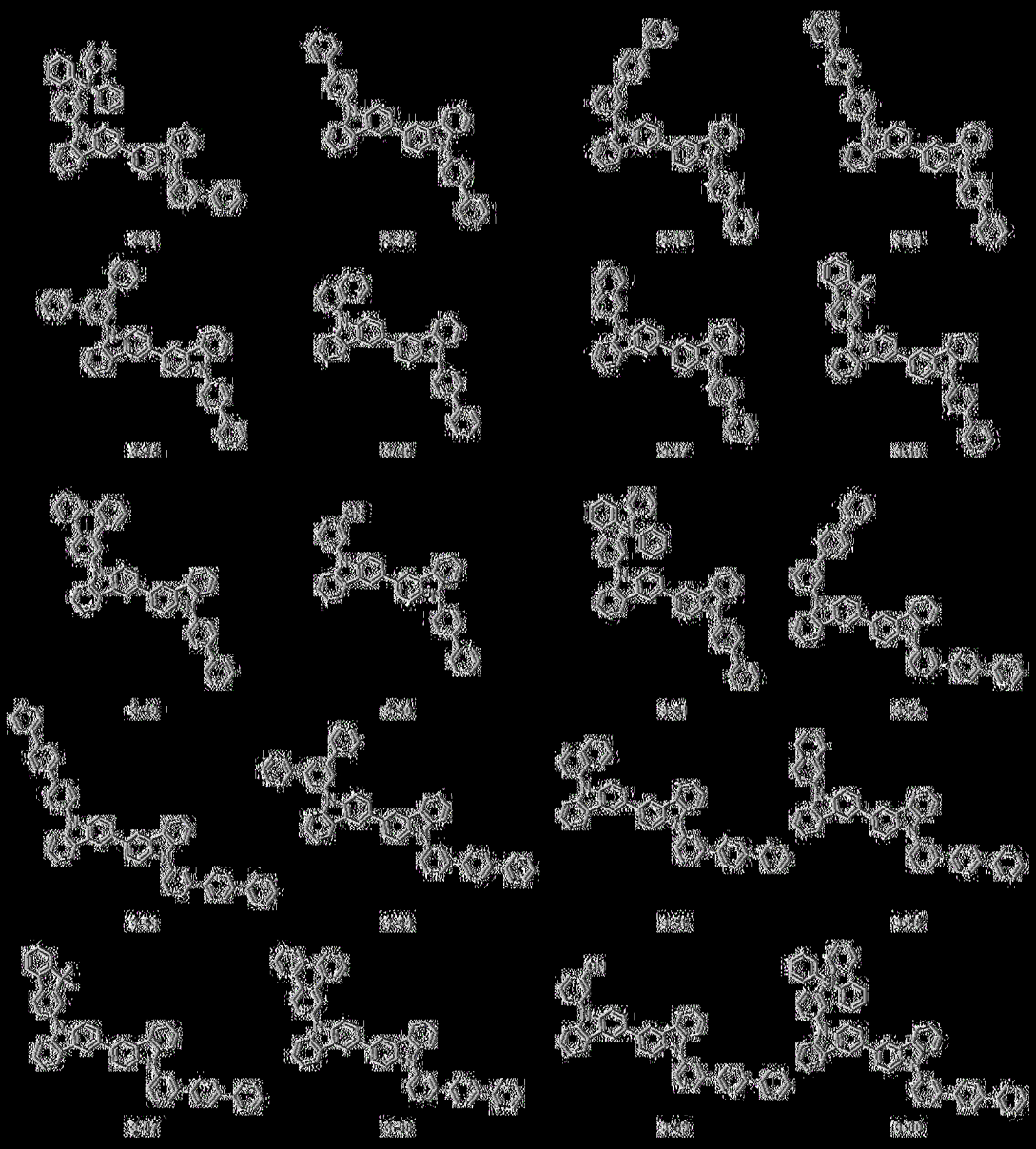
[0165] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 的 Ar31 及 Ar32 各自獨立地為未經取代或經氟基、三苯基矽烷基或芳基取代的苯基；聯苯基；聯三苯基；萘基；未經取代或經烷基或芳基取代的芴基；9,9'-螺二[芴]；或聯伸三苯基。

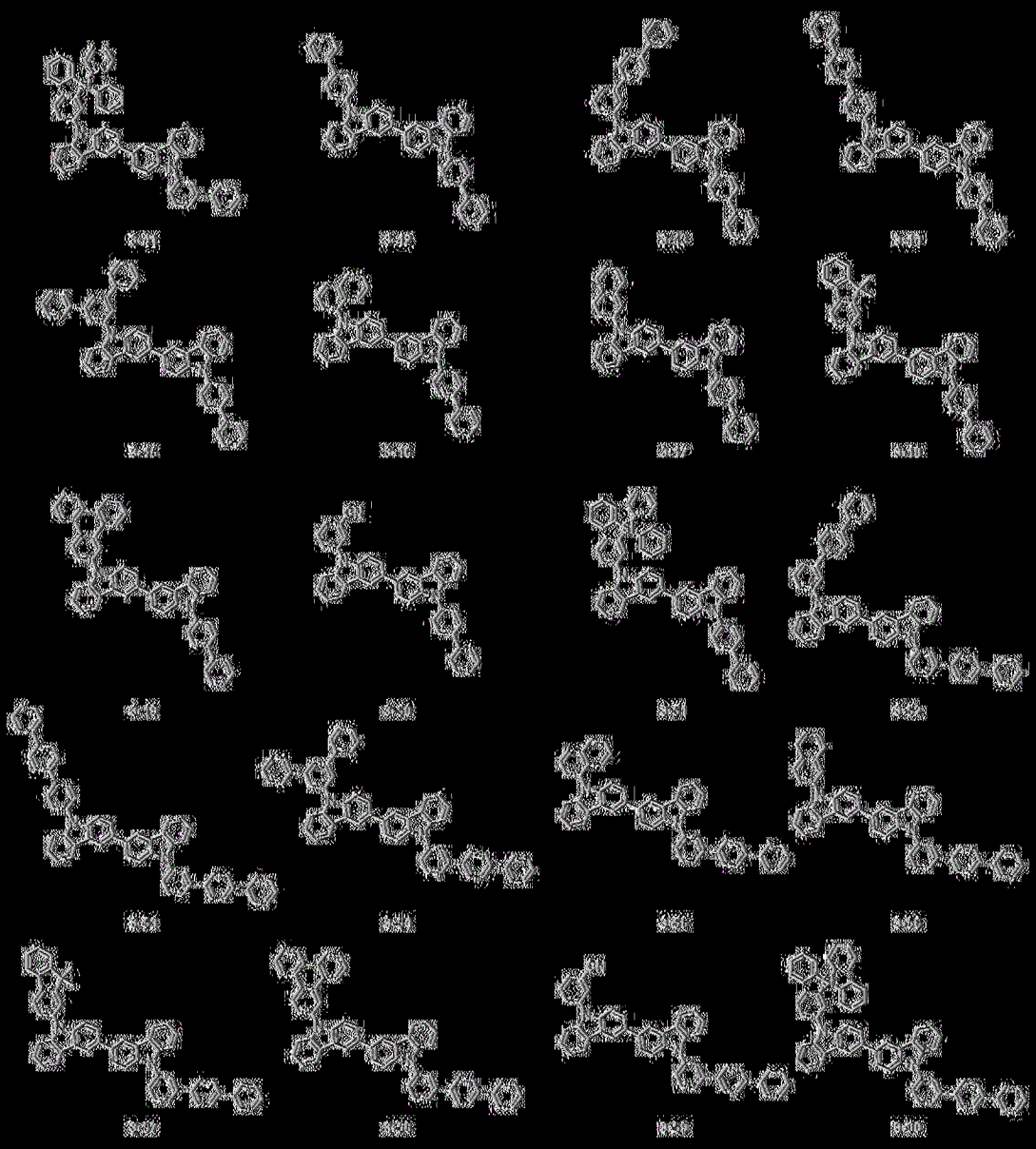
[0166] 在本說明書的一個實施例中，化學式 3 可由以下化合物中的任一者表示，但不限於此。

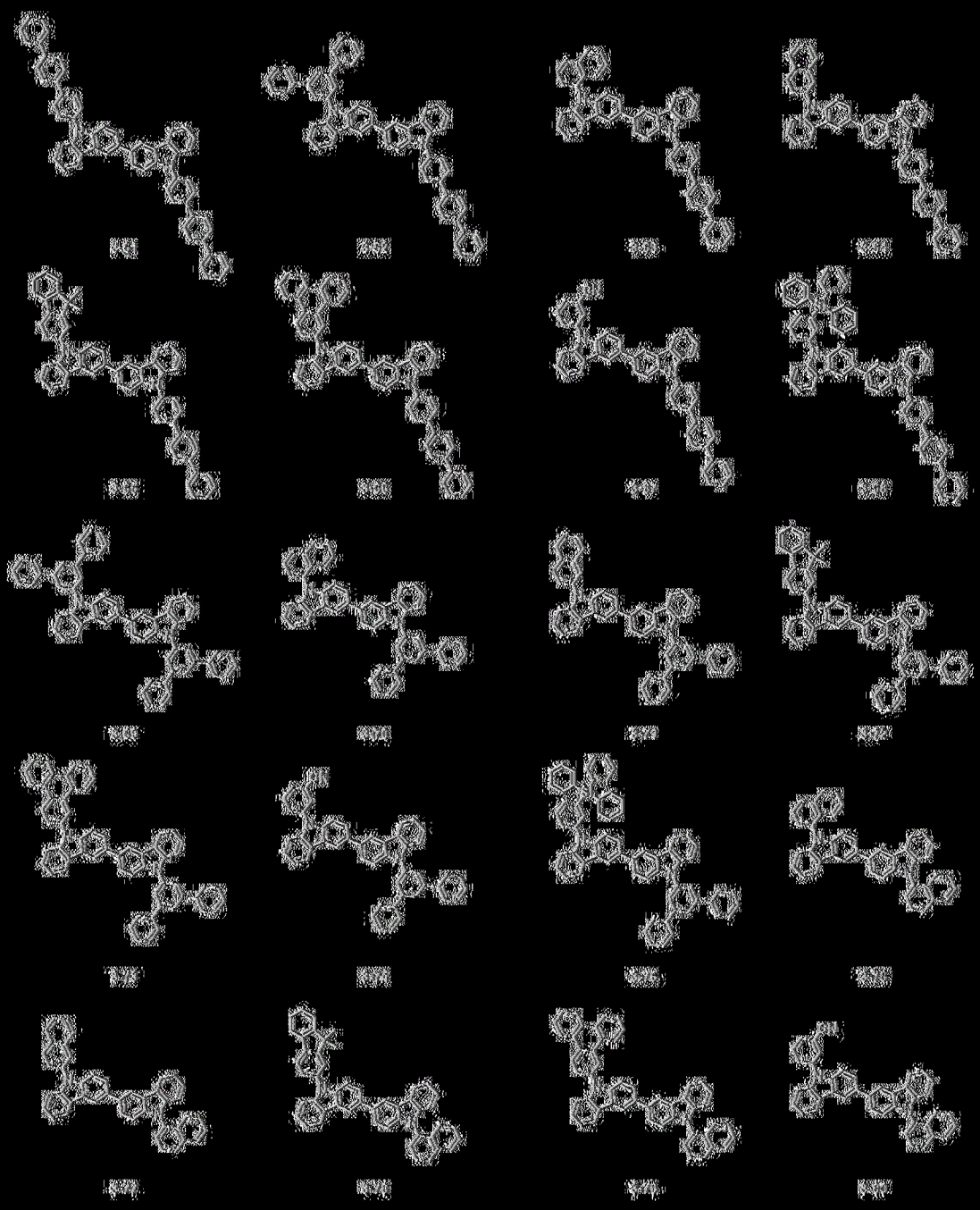


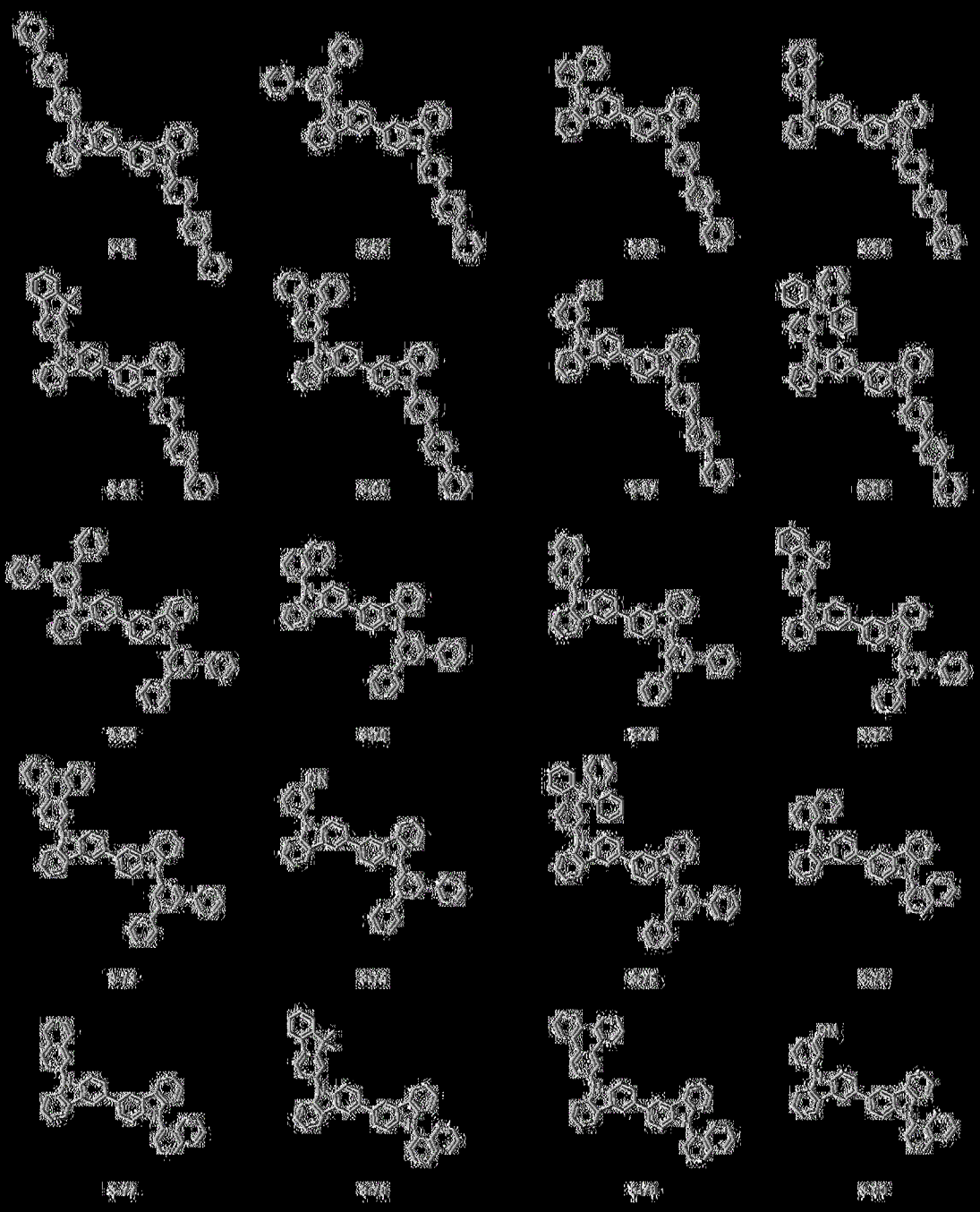


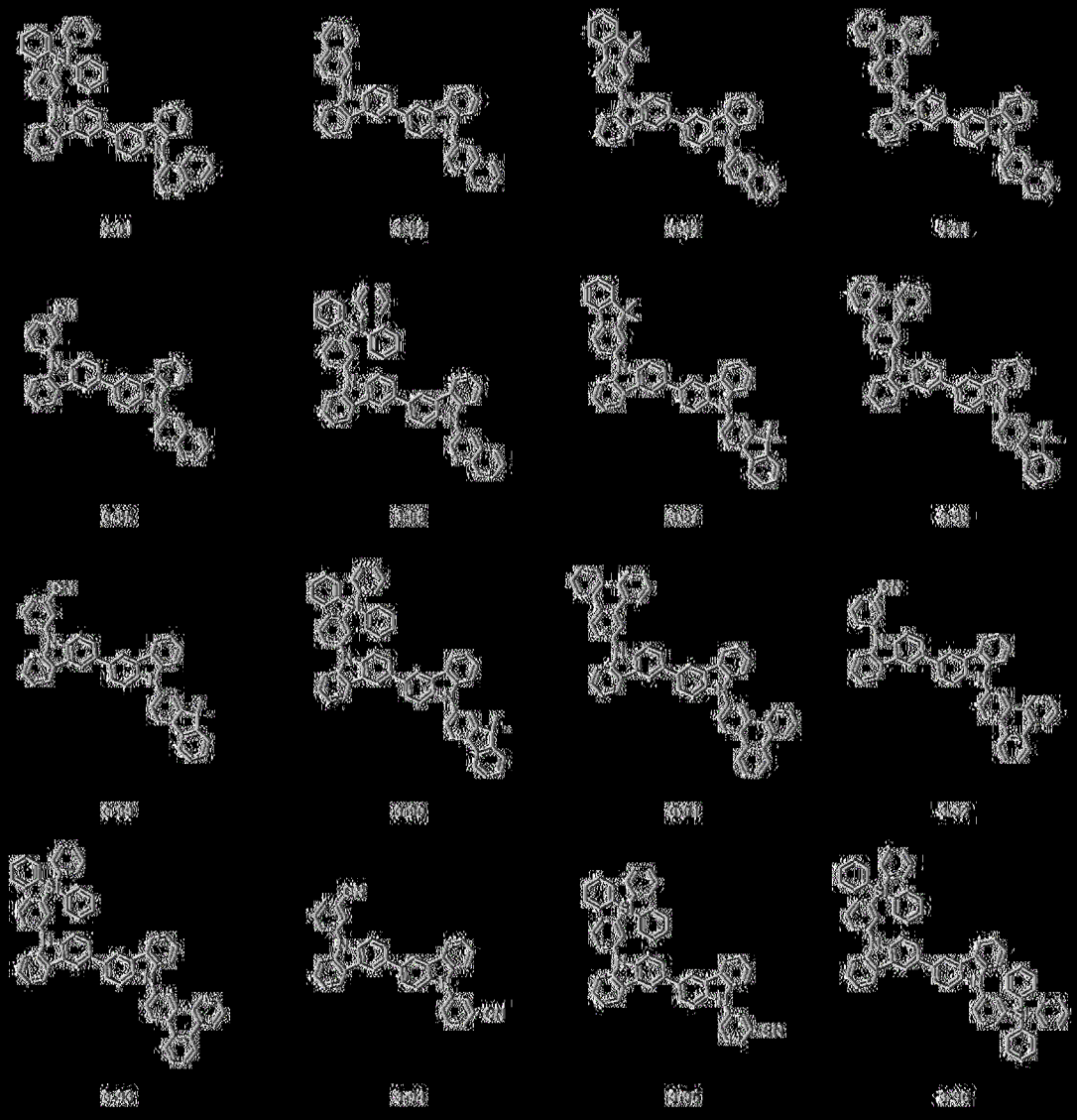








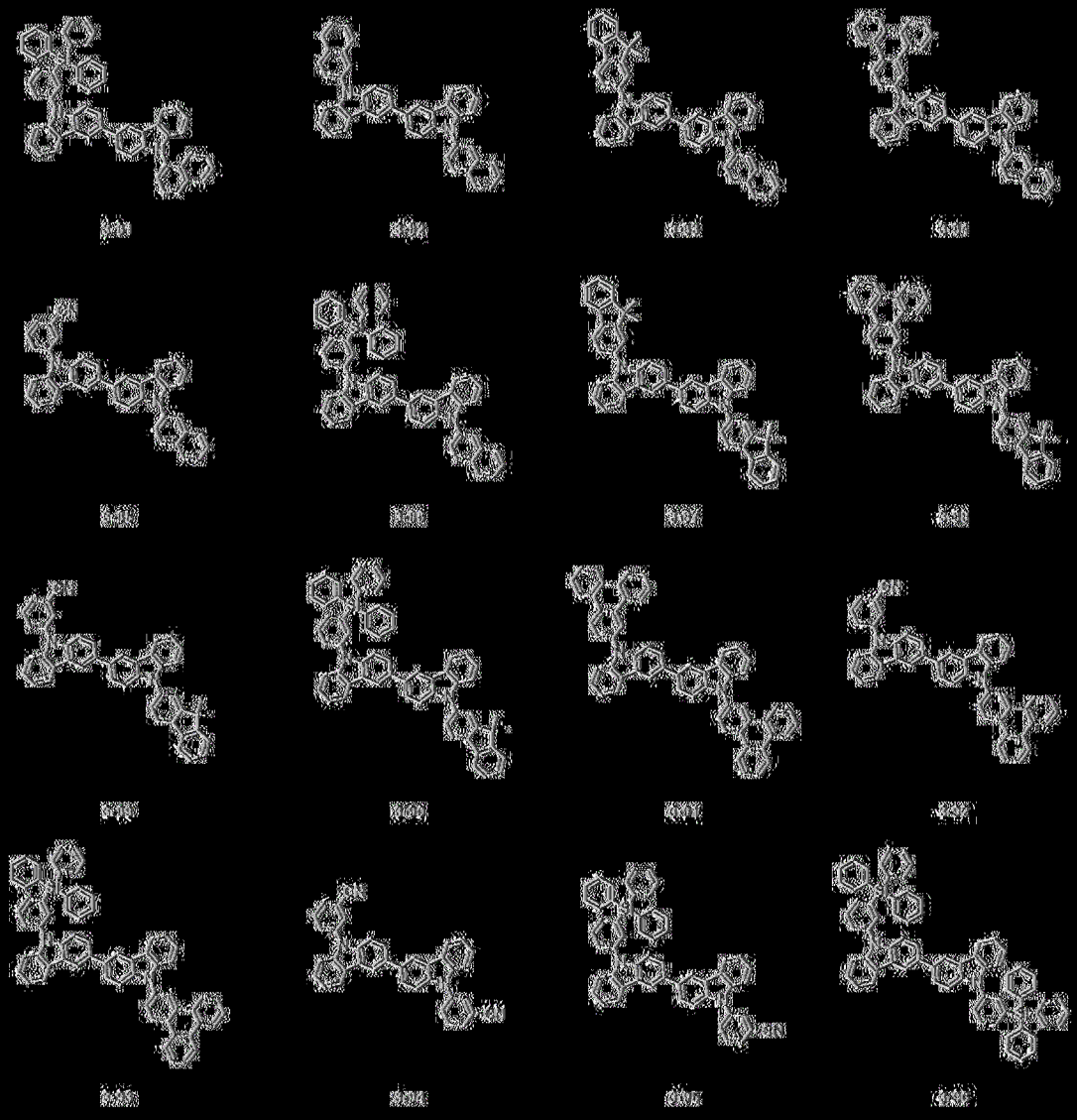




[0167] 在本說明書的一個實施例中，有機材料層包含呈 1:10 至 10:1 的重量比、1:8 至 8:1 的重量比、1:5 至 5:1 的重量比以及 1:2 至 2:1 的重量比的化學式 1 的化合物與化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[0168] 當包含上文所描述的重量比範圍內的化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物時，可提供具有低驅動電壓以及優良的發光效率及使用壽命的有機發光元件。特定而言，當包含呈 1:2 至 2:1 的重量比的此等化合物時，獲得具有高發光效率及使用壽命的有機發光元件。

[0169] 本揭露的有機發光元件可更包含由下述者所組成的族群



[0167] 在本說明書的一個實施例中，有機材料層包含呈 1:10 至 10:1 的重量比、1:8 至 8:1 的重量比、1:5 至 5:1 的重量比以及 1:2 至 2:1 的重量比的化學式 1 的化合物與化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[0168] 當包含上文所描述的重量比範圍內的化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物時，可提供具有低驅動電壓以及優良的發光效率及使用壽命的有機發光元件。特定而言，當包含呈 1:2 至 2:1 的重量比的此等化合物時，獲得具有高發光效率及使用壽命的有機發光元件。

[0169] 本揭露的有機發光元件可更包含由下述者所組成的族群

中選出的一個、兩個或多於兩個層：發光層、電洞注入層、電洞轉移層、電子注入層、電子轉移層、電子阻擋層以及電洞阻擋層。

【0170】 圖 1 至圖 3 示出根據本說明書的一個實施例的有機發光元件的電極及有機材料層的層壓次序。然而，本申請案的範疇不限於此等圖式，且所屬領域中已知的有機發光元件的結構亦可用於本申請案中。

【0171】 圖 1 示出有機發光元件，其中陽極 200、有機材料層 300 以及陰極 400 連續層壓於基底 100 上。然而，結構不限於此類結構，且如圖 2 中所示出，亦可獲得其中陰極、有機材料層以及陽極連續層壓於基底上的有機發光元件。

【0172】 圖 3 示出有機材料層為多層的情況。根據圖 3 的有機發光元件包含電洞注入層 301、電洞轉移層 302、發光層 303、電洞阻擋層 304、電子轉移層 305 以及電子注入層 306。然而，本申請案的範疇不限於此層壓結構，且視需要，可不包含除發光層以外的層，並且可進一步增加其他所需功能層。

【0173】 視需要，包含化學式 1 的化合物的有機材料層可更包含其他材料。

【0174】 在根據本說明書的一個實施例的有機發光元件中，下文示出除化學式 1 的化合物以外的材料，然而，此等材料僅用於說明性目的且不用於限制本申請案的範疇，且可由所屬領域中已知的材料置換。

【0175】 可使用具有相對較大功函數的材料作為陽極材料，且可使用透明的導電氧化物、金屬、導電聚合物或類似材料作為陽極材料。陽極材料的特定實例包含：金屬，諸如釩、鉻、銅、鋅以及金，

中選出的一個、兩個或多於兩個層：發光層、電洞注入層、電洞轉移層、電子注入層、電子轉移層、電子阻擋層以及電洞阻擋層。

【0170】 圖 1 至圖 3 示出根據本說明書的一個實施例的有機發光元件的電極及有機材料層的層壓次序。然而，本申請案的範疇不限於此等圖式，且所屬領域中已知的有機發光元件的結構亦可用於本申請案中。

【0171】 圖 1 示出有機發光元件，其中陽極 200、有機材料層 300 以及陰極 400 連續層壓於基底 100 上。然而，結構不限於此類結構，且如圖 2 中所示出，亦可獲得其中陰極、有機材料層以及陽極連續層壓於基底上的有機發光元件。

【0172】 圖 3 示出有機材料層為多層的情況。根據圖 3 的有機發光元件包含電洞注入層 301、電洞轉移層 302、發光層 303、電洞阻擋層 304、電子轉移層 305 以及電子注入層 306。然而，本申請案的範疇不限於此層壓結構，且視需要，可不包含除發光層以外的層，並且可進一步增加其他所需功能層。

【0173】 視需要，包含化學式 1 的化合物的有機材料層可更包含其他材料。

【0174】 在根據本說明書的一個實施例的有機發光元件中，下文示出除化學式 1 的化合物以外的材料，然而，此等材料僅用於說明性目的且不用於限制本申請案的範疇，且可由所屬領域中已知的材料置換。

【0175】 可使用具有相對較大功函數的材料作為陽極材料，且可使用透明的導電氧化物、金屬、導電聚合物或類似材料作為陽極材料。陽極材料的特定實例包含：金屬，諸如釩、鉻、銅、鋅以及金，

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）以及氧化銦鋅（indium zinc oxide；IZO）；金屬與氧化物的組合，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）、聚吡咯以及聚苯胺，以及類似物，但不限於此。

【0176】 可使用具有相對較小功函數的材料作為陰極材料，且可使用金屬、金屬氧化物、導電聚合物或類似材料作為陰極材料。陰極材料的特定實例包含：金屬，諸如，鎂、鈣、鈉、鉀、鈦、銦、釔、鋰、釓、鋁、銀、錫以及鉛，或其合金；多層結構材料，諸如 LiF/Al 或 LiO_2/Al，以及類似物，但不限於此。

【0177】 可使用已知的電洞注入材料作為電洞注入材料，且例如可使用：酞菁化合物，諸如美國專利第 4,356,429 號中所揭露的銅酞菁；或星爆型（starburst-type）胺衍生物，諸如於文獻[高級材料（Advanced Material）, 6, 第 677 頁(1994)]中描述的三(4-肼甲醯基-9-基苯基)胺（TCTA）、4,4′,4"-三[苯基(間甲苯基)胺基]三苯胺（間MTDATA）或 1,3,5-三[4-(3-甲基苯基苯胺基)苯基]苯（間MTDAPB）；具有溶解性的導電聚合物，聚苯胺/十二烷基苯磺酸、聚(3,4-伸乙二氧基噻吩)/聚(4-苯乙烯磺酸脂)、聚苯胺/樟腦磺酸或聚苯胺/聚(4-苯乙烯磺酸酯)；以及類似材料。

【0178】 可使用吡唑啉衍生物、芳胺類衍生物、芪衍生物、三苯基二胺衍生物以及類似物作為電洞轉移材料，且亦可使用低分子材料或高分子材料作為電洞轉移材料。

【0179】 可使用噁二唑衍生物的金屬錯合物、蒽醌二甲烷（anthraquinodimethane）及其衍生物、苯醌及其衍生物、萘醌

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）以及氧化銦鋅（indium zinc oxide；IZO）；金屬與氧化物的組合，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）、聚吡咯以及聚苯胺，以及類似物，但不限於此。

【0176】 可使用具有相對較小功函數的材料作為陰極材料，且可使用金屬、金屬氧化物、導電聚合物或類似材料作為陰極材料。陰極材料的特定實例包含：金屬，諸如，鎂、鈣、鈉、鉀、鈦、銦、釔、鋰、釓、鋁、銀、錫以及鉛，或其合金；多層結構材料，諸如 LiF/Al 或 LiO_2/Al，以及類似物，但不限於此。

【0177】 可使用已知的電洞注入材料作為電洞注入材料，且例如可使用：酞菁化合物，諸如美國專利第 4,356,429 號中所揭露的銅酞菁；或星爆型（starburst-type）胺衍生物，諸如於文獻[高級材料（Advanced Material）, 6, 第 677 頁(1994)]中描述的三(4-肼甲醯基-9-基苯基)胺（TCTA）、4,4′,4"-三[苯基(間甲苯基)胺基]三苯胺（間MTDATA）或 1,3,5-三[4-(3-甲基苯基苯胺基)苯基]苯（間MTDAPB）；具有溶解性的導電聚合物，聚苯胺/十二烷基苯磺酸、聚(3,4-伸乙二氧基噻吩)/聚(4-苯乙烯磺酸脂)、聚苯胺/樟腦磺酸或聚苯胺/聚(4-苯乙烯磺酸酯)；以及類似材料。

【0178】 可使用吡唑啉衍生物、芳胺類衍生物、芪衍生物、三苯基二胺衍生物以及類似物作為電洞轉移材料，且亦可使用低分子材料或高分子材料作為電洞轉移材料。

【0179】 可使用噁二唑衍生物的金屬錯合物、蒽醌二甲烷（anthraquinodimethane）及其衍生物、苯醌及其衍生物、萘醌

（naphthoquinone）及其衍生物、蒽醌及其衍生物、四氰蒽醌二甲烷及其衍生物、芴酮衍生物、二苯基二氰乙烯及其衍生物、聯苯醌衍生物、8-羥基喹啉及其衍生物以及類似物作為電子轉移材料，且亦可使用高分子材料以及低分子材料作為電子轉移材料。

【0180】 作為電子注入材料的實例，LiF 通常用於所屬領域中，然而，本申請案不限於此。

【0181】 可使用紅色發光材料、綠色發光材料或藍色發光材料作為發光材料，且視需要，可混合且使用兩種或多於兩種發光材料。在本文中，兩種或多於兩種發光材料可藉由沈積為個別供應源或藉由預混合及沈積為一個供應源而使用。另外，螢光材料亦可用作發光材料，然而，亦可使用磷光材料。可單獨使用藉由結合分別自陽極及陰極注入的電子及電洞來發射光的材料作為發光材料，然而，亦可使用具有涉及光發射的主體材料及摻雜劑材料的材料作為發光材料。

【0182】 當混合發光材料主體時，可混合相同系列的主體，或可混合不同系列的主體。舉例而言，可選擇 n 型主體材料或 p 型主體材料中的任何兩種或多於兩種類型的材料，且將其用作發光層的主體材料。

【0183】 取決於所使用的材料，根據本說明書的一個實施例的有機發光元件可為頂部發射型、底部發射型或雙面發射型。

【0184】 根據本說明書的一個實施例的化合物亦可根據有機發光元件中使用的類似原理用於包含有機太陽能電池、有機光導體、有機電晶體以及類似物的有機電子元件中。

【0185】 本說明書的一個實施例提供一種用於形成有機材料層的

（naphthoquinone）及其衍生物、蒽醌及其衍生物、四氰蒽醌二甲烷及其衍生物、芴酮衍生物、二苯基二氰乙烯及其衍生物、聯苯醌衍生物、8-羥基喹啉及其衍生物以及類似物作為電子轉移材料，且亦可使用高分子材料以及低分子材料作為電子轉移材料。

【0180】 作為電子注入材料的實例，LiF 通常用於所屬領域中，然而，本申請案不限於此。

【0181】 可使用紅色發光材料、綠色發光材料或藍色發光材料作為發光材料，且視需要，可混合且使用兩種或多於兩種發光材料。在本文中，兩種或多於兩種發光材料可藉由沈積為個別供應源或藉由預混合及沈積為一個供應源而使用。另外，螢光材料亦可用作發光材料，然而，亦可使用磷光材料。可單獨使用藉由結合分別自陽極及陰極注入的電子及電洞來發射光的材料作為發光材料，然而，亦可使用具有涉及光發射的主體材料及摻雜劑材料的材料作為發光材料。

【0182】 當混合發光材料主體時，可混合相同系列的主體，或可混合不同系列的主體。舉例而言，可選擇 n 型主體材料或 p 型主體材料中的任何兩種或多於兩種類型的材料，且將其用作發光層的主體材料。

【0183】 取決於所使用的材料，根據本說明書的一個實施例的有機發光元件可為頂部發射型、底部發射型或雙面發射型。

【0184】 根據本說明書的一個實施例的化合物亦可根據有機發光元件中使用的類似原理用於包含有機太陽能電池、有機光導體、有機電晶體以及類似物的有機電子元件中。

【0185】 本說明書的一個實施例提供一種用於形成有機材料層的

組合物，所述組合物包含化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[0186] 根據本說明書的一個實施例的用於形成有機材料層的組合物包含呈 1:10 至 10:1 的重量比、1:8 至 8:1 的重量比、1:5 至 5:1 的重量比以及 1:2 至 2:1 的重量比的化學式 1 的化合物與化學式 2 或化學式 3 的化合物。

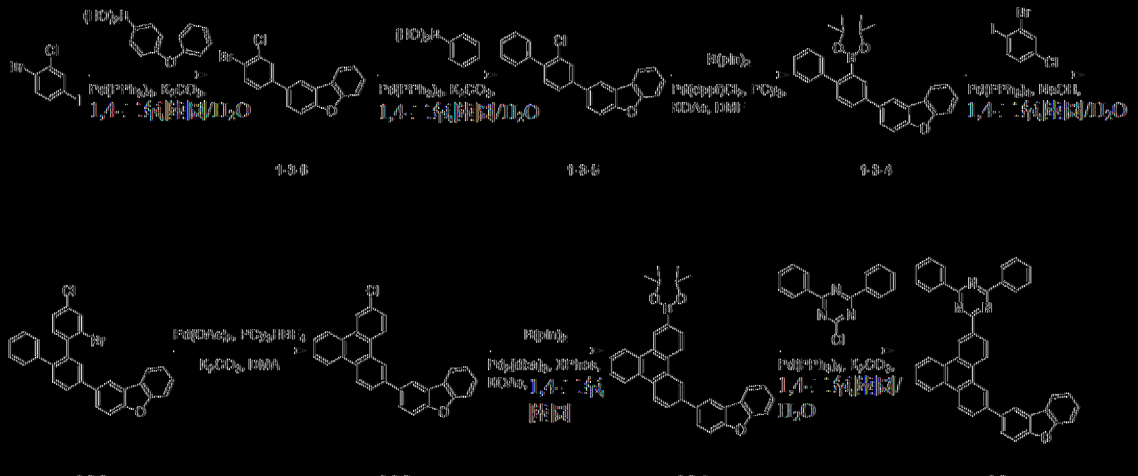
[0187] 當包含上文所描述的重量比範圍內的化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物時，可提供具有低驅動電壓以及優良的發光效率及使用壽命的有機發光元件。特定而言，當包含呈 1:2 至 2:1 的重量比的此等化合物時，獲得具有高發光效率及使用壽命的有機發光元件。

[0188] 根據本說明書的一個實施例的用於形成有機材料層的組合物可用作有機發光元件的發光層的材料。

[0189] 在下文中，本說明書將參考實例更詳細地進行描述，然而，此等實例僅用於說明性目的，且本申請案的範疇不限於此。

<製備實例>

<製備實例 1>化合物 1-3 的製備



組合物，所述組合物包含化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物。

[0186] 根據本說明書的一個實施例的用於形成有機材料層的組合物包含呈 1:10 至 10:1 的重量比、1:8 至 8:1 的重量比、1:5 至 5:1 的重量比以及 1:2 至 2:1 的重量比的化學式 1 的化合物與化學式 2 或化學式 3 的化合物。

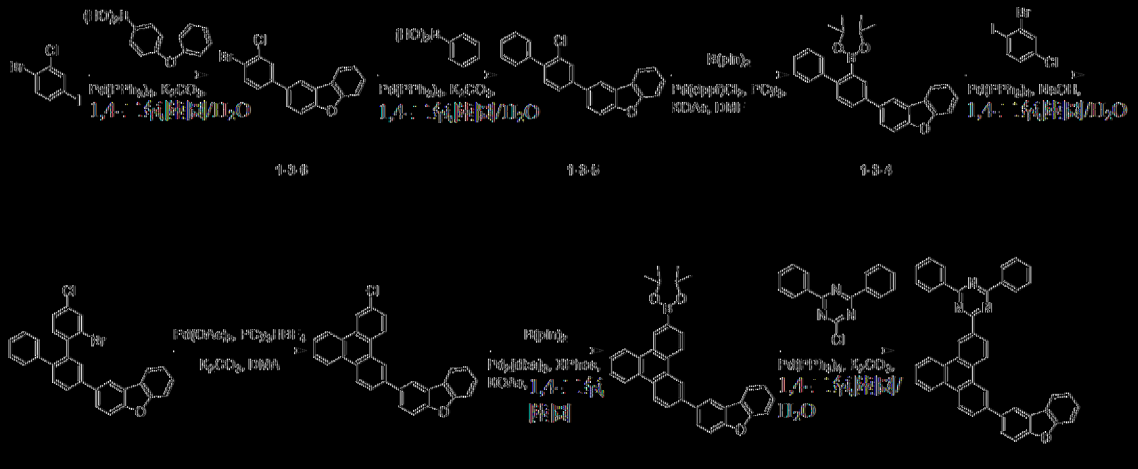
[0187] 當包含上文所描述的重量比範圍內的化學式 1 的化合物以及化學式 2 或化學式 3 的化合物時，可提供具有低驅動電壓以及優良的發光效率及使用壽命的有機發光元件。特定而言，當包含呈 1:2 至 2:1 的重量比的此等化合物時，獲得具有高發光效率及使用壽命的有機發光元件。

[0188] 根據本說明書的一個實施例的用於形成有機材料層的組合物可用作有機發光元件的發光層的材料。

[0189] 在下文中，本說明書將參考實例更詳細地進行描述，然而，此等實例僅用於說明性目的，且本申請案的範疇不限於此。

<製備實例>

<製備實例 1>化合物 1-3 的製備



1）化合物 1-3-6 的製備

【0190】 將 1-溴-2-氯-4-碘苯（20.0 公克，63.0 mM）、二苯并[b,d]呋喃-2-基硼酸（11.1 公克，52.5 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（四(三苯基膦)鈀(0)）（3.0 公克，2.6 mM）以及 K_2CO_3（14.5 公克，105.0 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（400 毫升/80 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及二氯甲烷（DCM）來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-6（14.4 公克，80%）。

2）化合物 1-3-5 的製備

【0191】 將化合物 1-3-6（13.4 公克，37.4 mM）、苯硼酸（5.5 公克，44.9 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（2.2 公克，1.9 mM）以及 K_2CO_3（10.3 公克，74.8 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-5（10.8 公克，85%）。

3）化合物 1-3-4 的製備

【0192】 將化合物 1-3-5（6.8 公克，19.2 mM）、雙(頻哪醇根基)二硼（7.3 公克，28.8 mM）、$Pd(dppf)Cl_2$（[1,1′-雙(二苯膦基)二茂鐵]二氯鈀(II)）（702 毫克，1.0 mM）、三環己基膦（PCy_3）（533 毫克，1.9 mM）以及乙酸鉀（KOAc）（5.6 公克，57.3 mM）溶解於 DMF（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾

1）化合物 1-3-6 的製備

【0190】 將 1-溴-2-氯-4-碘苯（20.0 公克，63.0 mM）、二苯并[b,d]呋喃-2-基硼酸（11.1 公克，52.5 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（四(三苯基膦)鈀(0)）（3.0 公克，2.6 mM）以及 K_2CO_3（14.5 公克，105.0 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（400 毫升/80 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及二氯甲烷（DCM）來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-6（14.4 公克，80%）。

2）化合物 1-3-5 的製備

【0191】 將化合物 1-3-6（13.4 公克，37.4 mM）、苯硼酸（5.5 公克，44.9 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（2.2 公克，1.9 mM）以及 K_2CO_3（10.3 公克，74.8 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-5（10.8 公克，85%）。

3）化合物 1-3-4 的製備

【0192】 將化合物 1-3-5（6.8 公克，19.2 mM）、雙(頻哪醇根基)二硼（7.3 公克，28.8 mM）、$Pd(dppf)Cl_2$（[1,1′-雙(二苯膦基)二茂鐵]二氯鈀(II)）（702 毫克，1.0 mM）、三環己基膦（PCy_3）（533 毫克，1.9 mM）以及乙酸鉀（KOAc）（5.6 公克，57.3 mM）溶解於 DMF（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾

燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 1-3-4（7.1 公克，85%）。

4）化合物 1-3-3 的製備

【0193】 將化合物 1-3-4（16.7 公克，37.4 mM）、2-溴-4-氯-1-碘苯（14.2 公克，44.9 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（2.2 公克，1.9 mM）以及 NaOH（3.0 公克，74.8 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-3（15.8 公克，85%）。

5）化合物 1-3-2 的製備

【0194】 將化合物 1-3-3（14.1 公克，27.7 mM）、$Pd(OAc)_2$（乙酸鈀(II)）（622 毫克，2.8 mM）、$PCy_3 \cdot HBF_4$（三環己基膦四氟硼酸酯）（2.0 公克，5.5 mM）以及 K_2CO_3（7.7 公克，55.4 mM）溶解於二甲基乙醯胺（DMA）（100 毫升）中，且接著回流 12 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-2（8.0 公克，70%）。

6）化合物 1-3-1 的製備

【0195】 將化合物 1-3-2（8.2 公克，19.2 mM）、雙(頻哪醇根基)二硼（7.3 公克，28.8 mM）、$Pd_2(dba)_3$（879 毫克，1.0 mM）、Xphos（2-二環已基膦-2′,4′,6′-三異丙基聯苯）（915 毫克，1.9 mM）以及

燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 1-3-4（7.1 公克，85%）。

4）化合物 1-3-3 的製備

【0193】 將化合物 1-3-4（16.7 公克，37.4 mM）、2-溴-4-氯-1-碘苯（14.2 公克，44.9 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（2.2 公克，1.9 mM）以及 NaOH（3.0 公克，74.8 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-3（15.8 公克，85%）。

5）化合物 1-3-2 的製備

【0194】 將化合物 1-3-3（14.1 公克，27.7 mM）、$Pd(OAc)_2$（乙酸鈀(II)）（622 毫克，2.8 mM）、$PCy_3 \cdot HBF_4$（三環己基膦四氟硼酸酯）（2.0 公克，5.5 mM）以及 K_2CO_3（7.7 公克，55.4 mM）溶解於二甲基乙醯胺（DMA）（100 毫升）中，且接著回流 12 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:10）純化反應材料，以獲得化合物 1-3-2（8.0 公克，70%）。

6）化合物 1-3-1 的製備

【0195】 將化合物 1-3-2（8.2 公克，19.2 mM）、雙(頻哪醇根基)二硼（7.3 公克，28.8 mM）、$Pd_2(dba)_3$（879 毫克，1.0 mM）、Xphos（2-二環已基膦-2′,4′,6′-三異丙基聯苯）（915 毫克，1.9 mM）以及

KOAc（5.6 公克，57.3 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 1-3-1（8.3 公克，85%）。

7）化合物 1-3 的製備

【0196】 將化合物 1-3-1（8.4 公克，16.1 mM）、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（4.7 公克，17.7 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（0.9 公克，0.8 mM）以及 K_2CO_3（4.5 公克，32.3 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 1-3（8.1 公克，82%）。

【0197】 除使用下表 1 的中間物 A 替代 1-溴-2-氯-4-碘苯，使用下表 1 的中間物 B 替代二苯并[b,d]呋喃-2-基硼酸，使用下表 1 的中間物 C 替代 2-溴-4-氯-1-碘苯且使用下表 1 的中間物 D 替代 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪以外，以與製備實例 1 中相同的方式合成目標化合物。

[表 1]

化合物編號	中間物 A	中間物 B	中間物 C	中間物 D	目標化合物

KOAc（5.6 公克，57.3 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 1-3-1（8.3 公克，85%）。

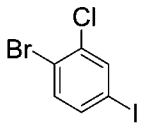
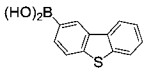
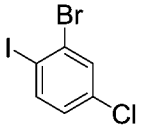
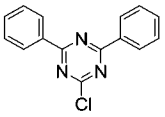
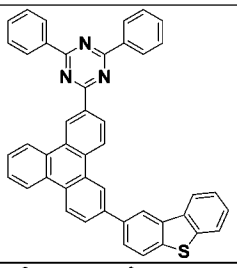
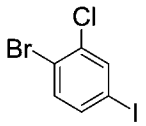
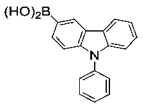
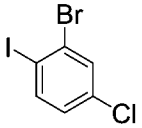
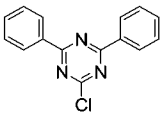
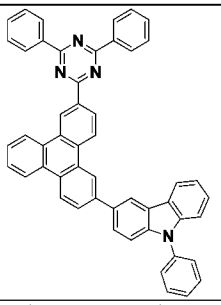
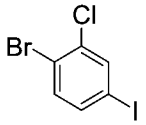
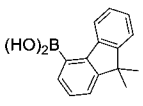
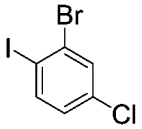
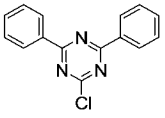
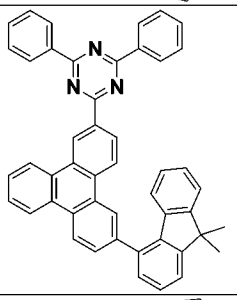
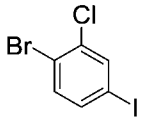
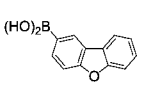
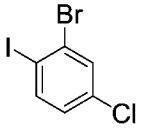
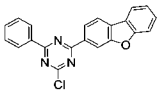
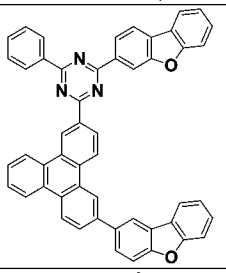
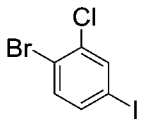
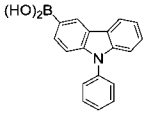
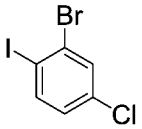
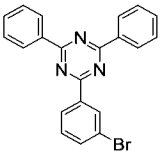
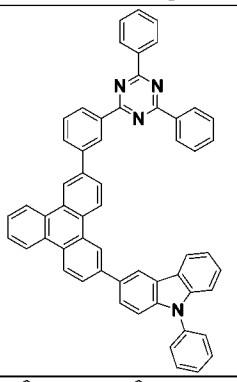
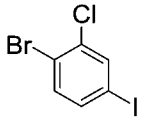
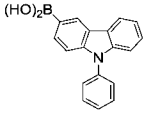
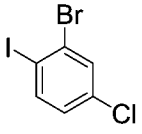
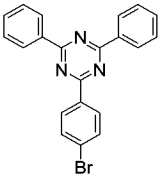
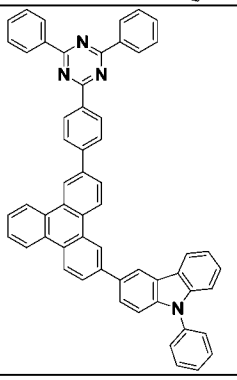
7）化合物 1-3 的製備

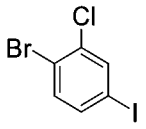
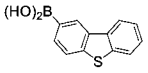
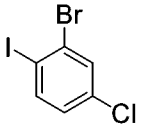
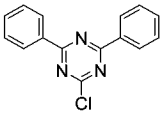
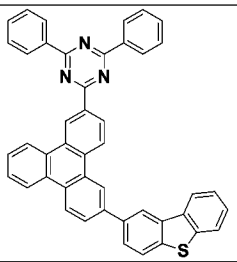
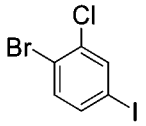
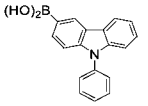
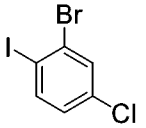
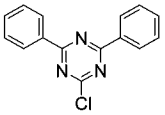
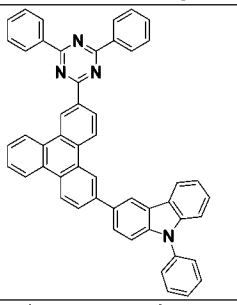
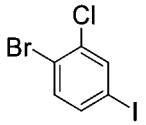
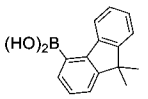
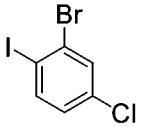
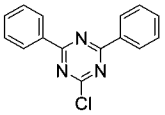
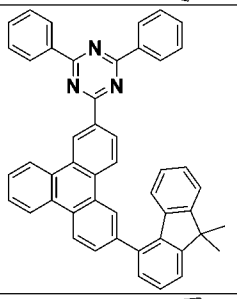
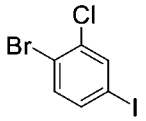
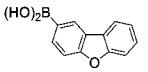
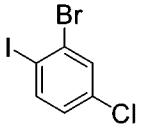
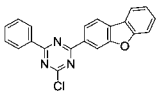
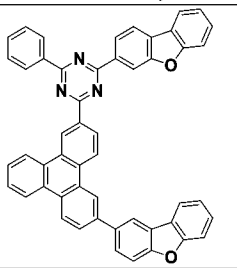
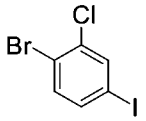
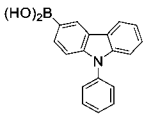
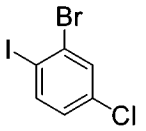
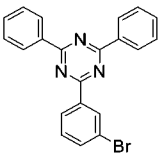
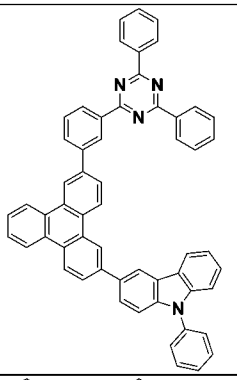
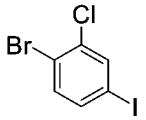
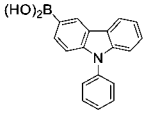
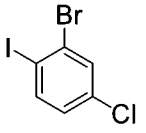
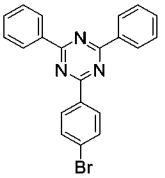
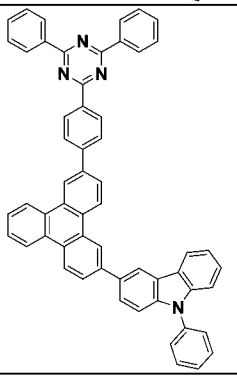
【0196】 將化合物 1-3-1（8.4 公克，16.1 mM）、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（4.7 公克，17.7 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（0.9 公克，0.8 mM）以及 K_2CO_3（4.5 公克，32.3 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜/H_2O（200 毫升/40 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:己烷=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 1-3（8.1 公克，82%）。

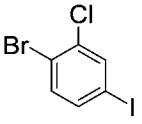
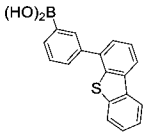
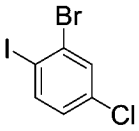
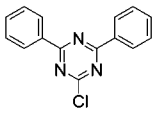
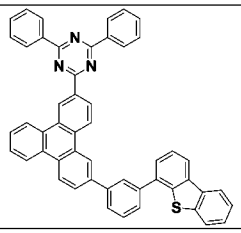
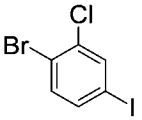
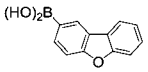
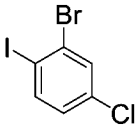
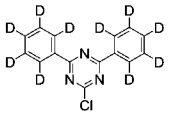
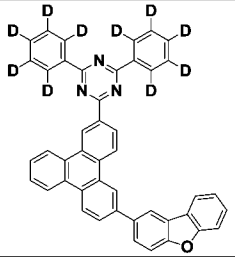
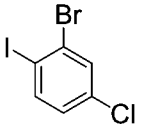
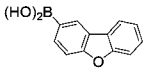
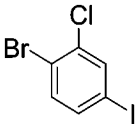
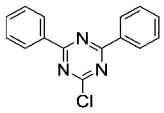
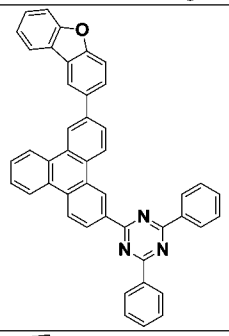
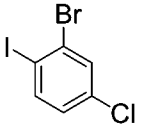
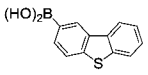
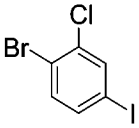
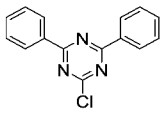
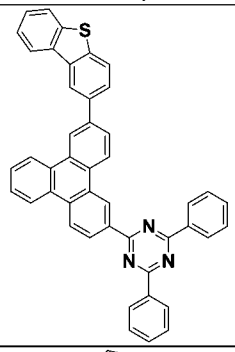
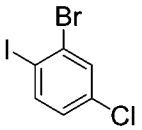
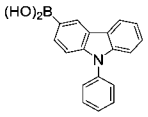
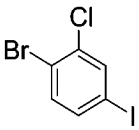
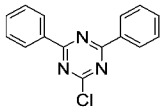
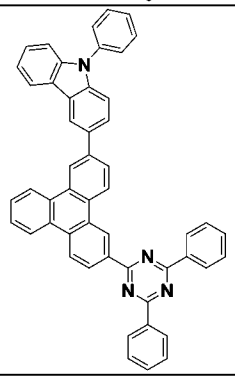
【0197】 除使用下表 1 的中間物 A 替代 1-溴-2-氯-4-碘苯，使用下表 1 的中間物 B 替代二苯并[b,d]呋喃-2-基硼酸，使用下表 1 的中間物 C 替代 2-溴-4-氯-1-碘苯且使用下表 1 的中間物 D 替代 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪以外，以與製備實例 1 中相同的方式合成目標化合物。

[表 1]

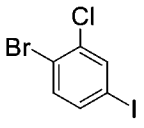
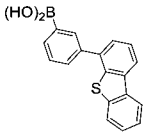
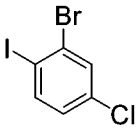
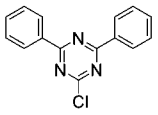
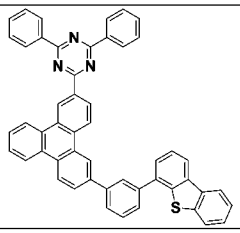
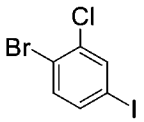
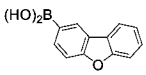
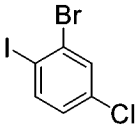
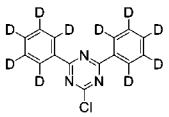
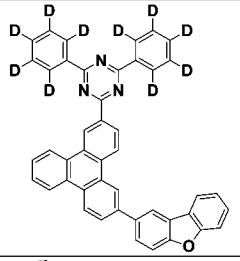
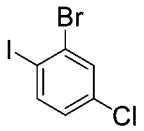
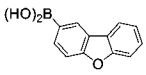
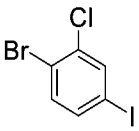
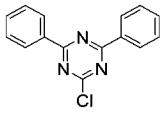
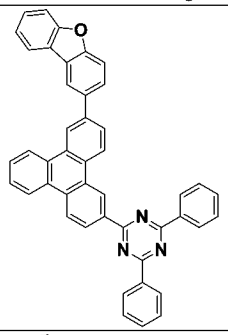
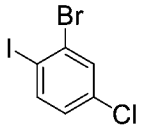
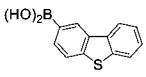
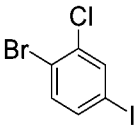
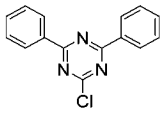
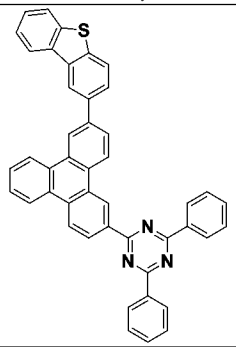
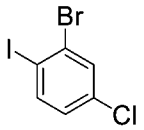
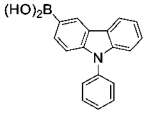
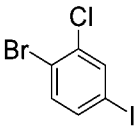
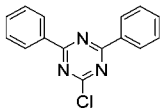
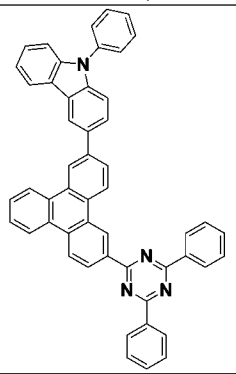
化合物編號	中間物 A	中間物 B	中間物 C	中間物 D	目標化合物

1-7					
1-11					
1-14					
1-26					
1-51					
1-56					

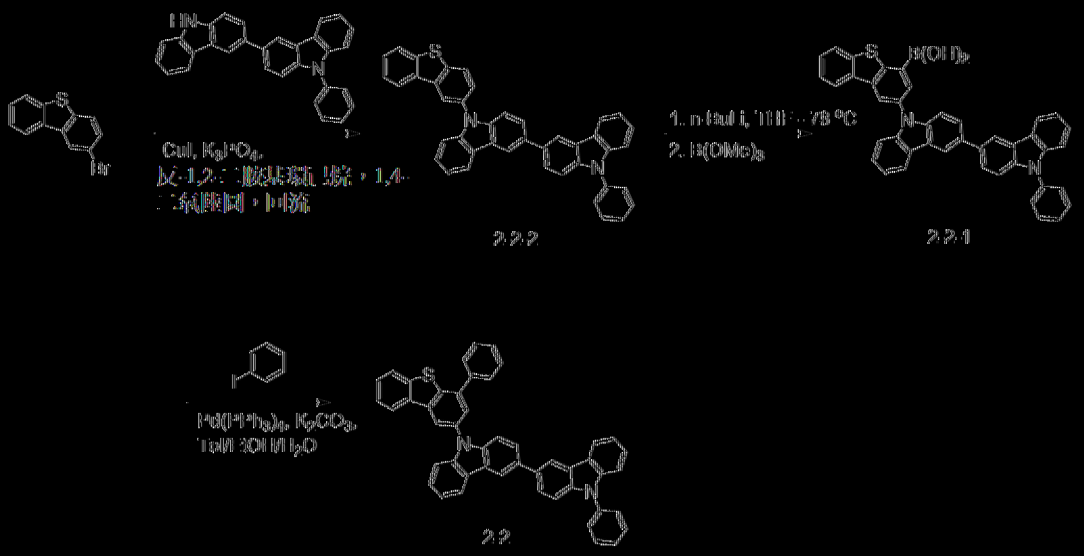
1-7					
1-11					
1-14					
1-26					
1-51					
1-56					

1-60					
1-76					
1-83					
1-87					
1-91					

<製備實例 2>化合物 2-2 的合成

1-60					
1-76					
1-83					
1-87					
1-91					

<製備實例 2>化合物 2-2 的合成

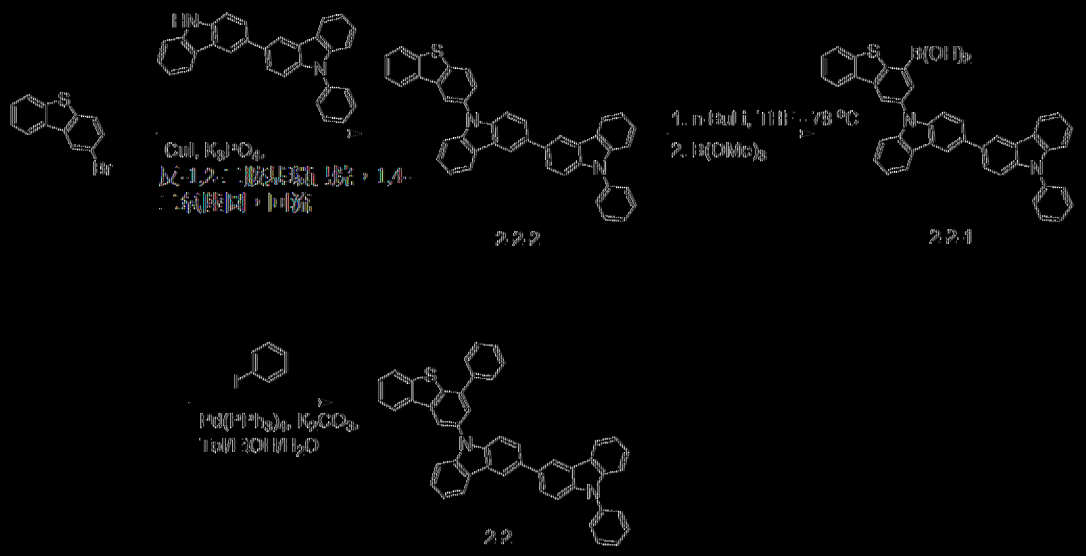


1）化合物 2.2.2 的製備

[0198] 將 2-溴二苯并[b,d]噻吩（4.2 公克，15.8 mM）、9-苯基-9H,9'H-3,3'-二咔唑（6.5 公克，15.8 mM）、CuI（3.0 公克，15.8 mM）、反-1,2-二胺基環己烷（1.9 毫升，15.8 mM）以及 K_3PO_4（3.3 公克，31.6 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex = 1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 2.2.2（7.9 公克，85%）。

2）化合物 2.2.1 的製備

[0199] 在 -78℃ 下，向藉由引入化合物 2.2.2（8.4 公克，14.3 毫莫耳）及四氫呋喃（THF）（100 毫升）而獲得的混合物溶液中逐滴添加 2.5 M 正丁基鋰（n-BuLi）（7.4 毫升，18.6 毫莫耳），且將所得物在室溫下攪拌 1 小時。向反應混合物中逐滴添加硼酸三甲酯（4.8 毫升，42.9 毫莫耳），且將所得物在室溫下攪拌 2 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。



1）化合物 2.2.2 的製備

[0198] 將 2-溴二苯并[b,d]噻吩（4.2 公克，15.8 mM）、9-苯基-9H,9'H-3,3'-二咔唑（6.5 公克，15.8 mM）、CuI（3.0 公克，15.8 mM）、反-1,2-二胺基環己烷（1.9 毫升，15.8 mM）以及 K_3PO_4（3.3 公克，31.6 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex = 1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得化合物 2.2.2（7.9 公克，85%）。

2）化合物 2.2.1 的製備

[0199] 在 -78°C 下，向藉由引入化合物 2.2.2（8.4 公克，14.3 毫莫耳）及四氫呋喃（THF）（100 毫升）而獲得的混合物溶液中逐滴添加 2.5 M 正丁基鋰（n-BuLi）（7.4 毫升，18.6 毫莫耳），且將所得物在室溫下攪拌 1 小時。向反應混合物中逐滴添加硼酸三甲酯（4.8 毫升，42.9 毫莫耳），且將所得物在室溫下攪拌 2 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。

藉由管柱層析（DCM:甲醇（MeOH） 100:3）純化反應材料，且用DCM再結晶以獲得化合物 2-2-1（3.9 公克，70%）。

3）化合物 2-2 的製備

[0200] 將化合物 2-2-1（6.7 公克，10.5 mM）、碘苯（2.1 公克，10.5 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（606 毫克，0.52 mM）以及 K_2CO_3（2.9 公克，21.0 mM）溶解於甲苯/乙醇（EtOH）/H_2O（100 毫升/20 毫升/20 毫升）中，且接著回流 12 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex 1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 2-2（4.9 公克，70%）。

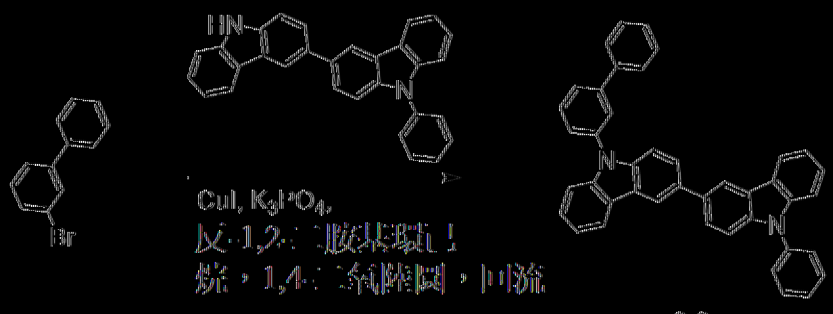
<製備實例 2-1>化合物 2-3 的合成

[0201] 除使用 4-碘-1,1'-聯苯取代碘苯以外，以與製備實例 2 的化合物 2-2 的製備中相同的方式獲得目標化合物 2-3（83%）。

<製備實例 2-2>化合物 2-12 的合成

[0202] 除使用 4-碘二苯并[b,d]呋喃取代碘苯以外，以與製備實例 2 的化合物 2-2 的製備中相同的方式獲得目標化合物 2-12（80%）。

<製備實例 3>化合物 3-3 的合成



3-3

藉由管柱層析（DCM:甲醇（MeOH） 100:3）純化反應材料，且用 DCM 再結晶以獲得化合物 2-2-1（3.9 公克，70%）。

3）化合物 2-2 的製備

[0200] 將化合物 2-2-1（6.7 公克，10.5 mM）、碘苯（2.1 公克，10.5 mM）、$Pd(PPh_3)_4$（606 毫克，0.52 mM）以及 K_2CO_3（2.9 公克，21.0 mM）溶解於甲苯/乙醇（EtOH）/H_2O（100 毫升/20 毫升/20 毫升）中，且接著回流 12 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex 1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 2-2（4.9 公克，70%）。

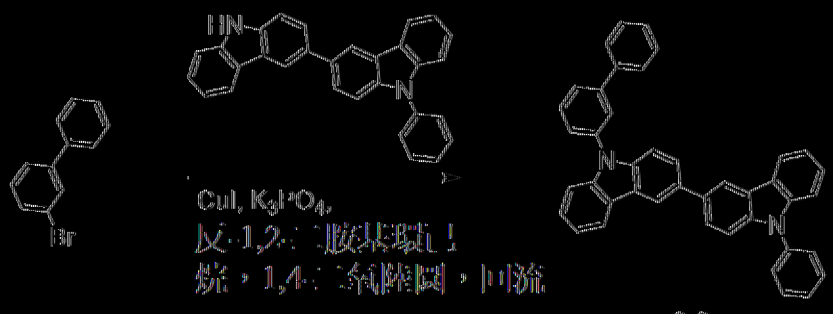
<製備實例 2-1>化合物 2-3 的合成

[0201] 除使用 4-碘-1,1'-聯苯基替代碘苯以外，以與製備實例 2 的化合物 2-2 的製備中相同的方式獲得目標化合物 2-3（83%）。

<製備實例 2-2>化合物 2-12 的合成

[0202] 除使用 4-碘二苯并[b,d]呋喃替代碘苯以外，以與製備實例 2 的化合物 2-2 的製備中相同的方式獲得目標化合物 2-12（80%）。

<製備實例 3>化合物 3-3 的合成



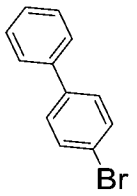
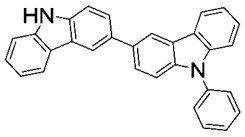
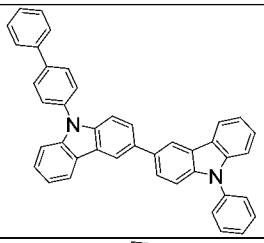
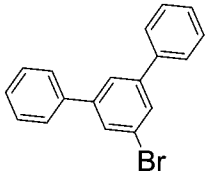
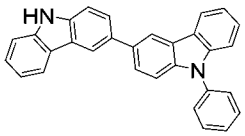
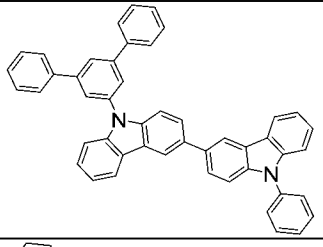
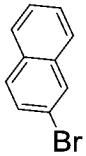
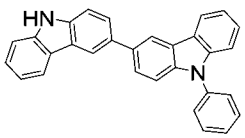
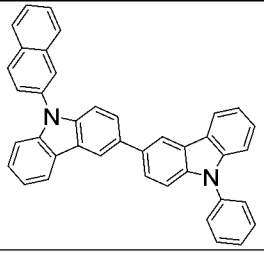
3-3

1）化合物 3-3 的製備

【0203】 將 3-溴-1,1′-聯苯基（3.7 公克，15.8 mM）、9-苯基-9H,9′H-3,3′-二咔唑（6.5 公克，15.8 mM）、CuI（3.0 公克，15.8 mM）、反-1,2-二胺基環己烷（1.9 毫升，15.8 mM）以及 K_3PO_4（3.3 公克，31.6 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 3-3（7.5 公克，85%）。

【0204】 除使用下表 2 的中間物 A 替代 3-溴-1,1′-聯苯基且使用表 2 的中間物 B 替代 9-苯基-9H,9′H-3,3′-二咔唑以外，以與製備實例 3 中相同的方式合成目標化合物。

[表 2]

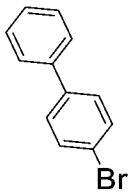
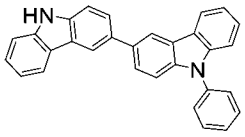
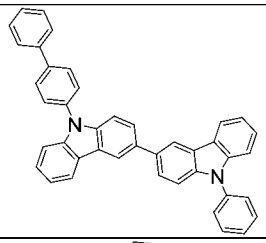
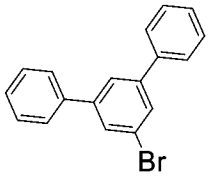
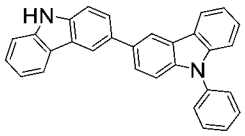
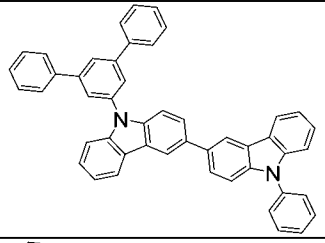
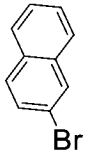
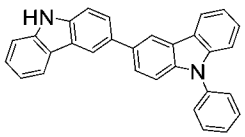
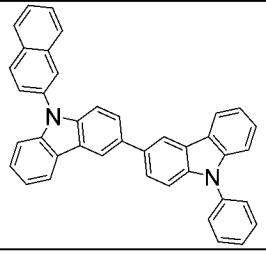
化合物編號	中間物 A	中間物 B	目標化合物
3-4			
3-7			
3-9			

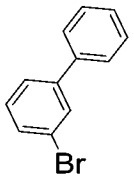
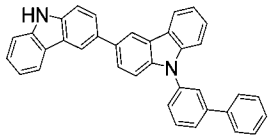
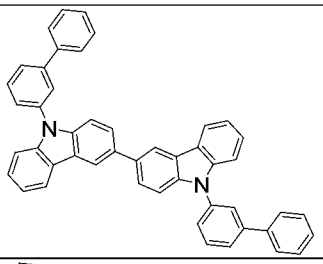
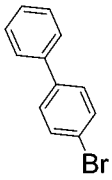
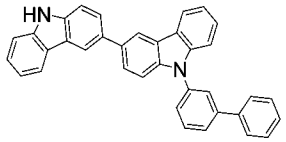
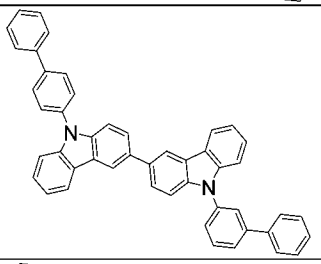
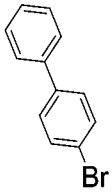
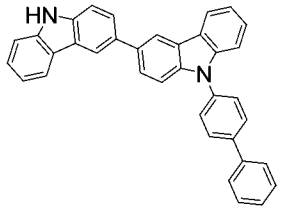
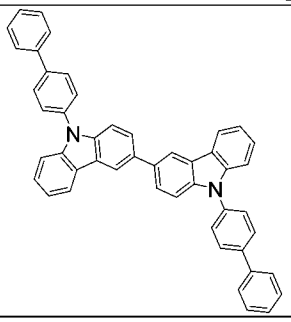
1）化合物 3-3 的製備

【0203】 將 3-溴-1,1′-聯苯基（3.7 公克，15.8 mM）、9-苯基-9H,9′H-3,3′-二咔唑（6.5 公克，15.8 mM）、CuI（3.0 公克，15.8 mM）、反-1,2-二胺基環己烷（1.9 毫升，15.8 mM）以及 K_3PO_4（3.3 公克，31.6 mM）溶解於 1,4-二氧陸圜（100 毫升）中，且接著回流 24 小時。在反應完成之後，藉由在室溫下向其中引入蒸餾水及 DCM 來萃取所得物，且在用 $MgSO_4$ 乾燥有機層之後，使用旋轉蒸發器移除溶劑。藉由管柱層析（DCM:Hex=1:3）純化反應材料，且用甲醇再結晶以獲得目標化合物 3-3（7.5 公克，85%）。

【0204】 除使用下表 2 的中間物 A 替代 3-溴-1,1′-聯苯基且使用表 2 的中間物 B 替代 9-苯基-9H,9′H-3,3′-二咔唑以外，以與製備實例 3 中相同的方式合成目標化合物。

[表 2]

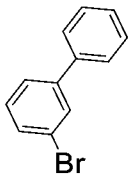
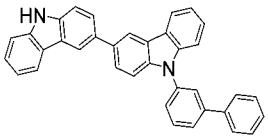
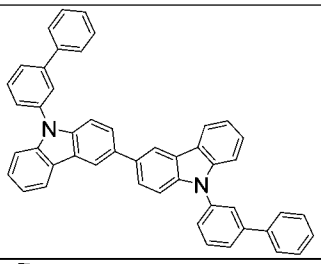
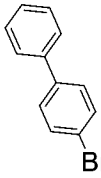
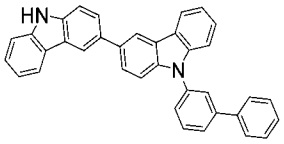
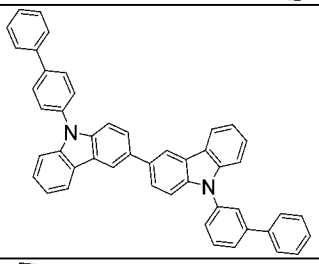
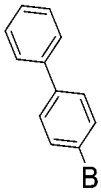
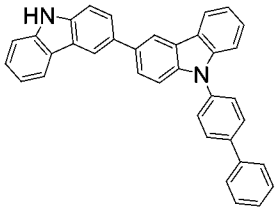
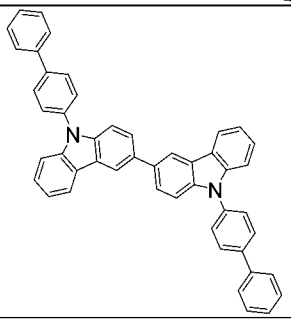
化合物編號	中間物 A	中間物 B	目標化合物
3-4			
3-7			
3-9			

3-31			
3-32			
3-42			

【0205】 除製備實例 1 至製備實例 3 以及表 1 及表 2 中所描述的化合物以外的化合物亦以與上文所描述的製備實例中相同的方式製備，且合成結果展示於下表 3 及表 4 中。

[表 3]

化合物編號	^{1}H NMR ($CDCl_3$, 200 Mz)
1-3	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d), 7.98 (1H, d), 7.88-7.79 (3H, m), 7.70-7.64 (2H, m), 7.54-7.50 (8H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-7	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.45-8.30 (8H, m), 8.15-8.12 (3H, m), 7.99-7.93 (2H, m), 7.70-7.49 (11H, m)
1-11	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (8H, m), 8.19-8.13 (3H, m), 7.89 (1H, s), 7.70-7.50 (16H, m), 7.20 (1H, t)
1-14	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d), 7.90 (1H, d), 7.78-7.64 (4H, m), 7.55-7.38 (10H, m), 7.28 (1H, t), 1.69 (6H, s)
1-26	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (5H, m), 8.15 (1H, d), 8.03-7.98 (3H, m), 7.86-7.64 (7H, m), 7.54-7.50 (6H, m), 7.39-7.31 (4H, m)
1-51	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.38-8.30 (9H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.50 (17H, m), 7.35 (1H, t), 7.16 (1H, t)
1-56	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.38-8.30 (8H, m), 7.99-7.89 (5H, m), 7.77-7.50 (15H, m), 7.35 (1H, t), 7.25 (2H, d), 7.16 (1H, t)
1-60	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.45-8.30 (9H, m), 8.15 (1H, d), 7.94-7.93 (2H, m), 7.73-7.49 (15H, m)
1-76	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (3H, m), 8.15 (1H, d), 7.98 (1H, d), 7.88-7.52 (7H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-83	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d),

3-31			
3-32			
3-42			

【0205】 除製備實例 1 至製備實例 3 以及表 1 及表 2 中所描述的化合物以外的化合物亦以與上文所描述的製備實例中相同的方式製備，且合成結果展示於下表 3 及表 4 中。

[表 3]

化合物編號	^{1}H NMR ($CDCl_3$, 200 Mz)
1-3	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d), 7.98 (1H, d), 7.88-7.79 (3H, m), 7.70-7.64 (2H, m), 7.54-7.50 (8H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-7	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.45-8.30 (8H, m), 8.15-8.12 (3H, m), 7.99-7.93 (2H, m), 7.70-7.49 (11H, m)
1-11	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (8H, m), 8.19-8.13 (3H, m), 7.89 (1H, s), 7.70-7.50 (16H, m), 7.20 (1H, t)
1-14	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d), 7.90 (1H, d), 7.78-7.64 (4H, m), 7.55-7.38 (10H, m), 7.28 (1H, t), 1.69 (6H, s)
1-26	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (5H, m), 8.15 (1H, d), 8.03-7.98 (3H, m), 7.86-7.64 (7H, m), 7.54-7.50 (6H, m), 7.39-7.31 (4H, m)
1-51	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.38-8.30 (9H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.50 (17H, m), 7.35 (1H, t), 7.16 (1H, t)
1-56	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.38-8.30 (8H, m), 7.99-7.89 (5H, m), 7.77-7.50 (15H, m), 7.35 (1H, t), 7.25 (2H, d), 7.16 (1H, t)
1-60	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.55 (1H, d), 8.45-8.30 (9H, m), 8.15 (1H, d), 7.94-7.93 (2H, m), 7.73-7.49 (15H, m)
1-76	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (2H, s), 8.37-8.30 (3H, m), 8.15 (1H, d), 7.98 (1H, d), 7.88-7.52 (7H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-83	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (7H, m), 8.15 (1H, d),

	7.98 (1H, d), 7.88-7.79 (3H, m), 7.70-7.64 (2H, m), 7.54-7.50 (8H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-87	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (8H, m), 8.15-8.12 (3H, m), 7.99-7.93 (2H, m), 7.70-7.49 (11H, m)
1-91	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (8H, m), 8.19-8.13 (3H, m), 7.89 (1H, s), 7.70-7.50 (16H, m), 7.20 (1H, t)
2-2	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19(1H, d), 8.13(1H, d), 8.00~7.89(6H, m), 7.77(2H, m), 7.62~7.35(15H, m), 7.20~7.16(2H, m)
2-3	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19(1H, d), 8.13(1H, d), 8.00~7.89(6H, m), 7.77-7.75(4H, m), 7.62~7.35(13H, m), 7.25~7.16(6H, m)
2-12	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19~7.89(11H, m), 7.77(2H, m), 7.62~7.31(14H, m), 7.20~7.16(2H, m)
3-3	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (3H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.35 (17H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-4	δ=8.55 (1H, d), 8.30(1H, d), 8.19-8.13(2H, m), 7.99-7.89(8H, m), 7.77-7.75 (3H, m), 7.62-7.35 (11H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-7	δ=8.55 (1H, d), 8.31-8.30 (3H, d), 8.19-8.13 (2H, m), 7.99-7.89 (5H, m), 7.77-7.75 (5H, m), 7.62-7.35 (14H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-9	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.19-8.13 (2H, m), 8.03-7.77 (9H, m), 7.62-7.50 (9H, m), 7.36-7.35 (2H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-31	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (4H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.35 (20H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-32	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (3H, m), 7.99-7.89 (8H, m), 7.77-7.35 (17H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-42	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.19 (1H, d), 8.13 (1H, d), 7.99-7.89 (12H, m), 7.77-7.75 (5H, m), 7.58 (1H, d), 7.50-7.35 (8H, m), 7.20-7.16 (2H, m)

[表 4]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
1-3	m/z=625.22($C_{45}H_{27}N_3O$=625.73)	1-7	m/z=641.19 ($C_{45}H_{27}N_3O$=641.79)
1-11	m/z=700.26($C_{51}H_{32}N_4$=700.84)	1-14	m/z=651.27 ($C_{48}H_{33}N_3$=651.81)
1-26	m/z=715.23($C_{51}H_{29}N_3O_2$=715.81)	1-51	m/z=776.29 ($C_{57}H_{36}N_4$=776.94)
1-56	m/z=776.29($C_{57}H_{36}N_4$=776.94)	1-60	m/z=717.22 ($C_{51}H_{31}N_3S$=717.89)
1-76	m/z=635.28($C_{45}H_{17}D_{10}N_3O$=635.79)	1-83	m/z=625.22 ($C_{45}H_{27}N_3O$=625.73)
1-87	m/z=641.19($C_{45}H_{27}N_3O$=641.79)	1-91	m/z=700.26 ($C_{51}H_{32}N_4$=700.84)
2-2	m/z=666.21($C_{48}H_{30}N_2S$=666.84)	2-3	m/z=742.24 ($C_{54}H_{34}N_2S$=742.94)
2-12	m/z=756.22($C_{54}H_{32}N_2OS$=756.92)	3-3	m/z=560.23 ($C_{42}H_{28}N_2$=560.70)
3-4	m/z=560.23($C_{42}H_{28}N_2$=560.70)	3-7	m/z=636.26 ($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)
3-9	m/z=534.21($C_{40}H_{26}N_2$=534.66)	3-31	m/z=636.26 ($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)
3-32	m/z=636.26($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)	3-42	m/z=636.26

	7.98 (1H, d), 7.88-7.79 (3H, m), 7.70-7.64 (2H, m), 7.54-7.50 (8H, m), 7.39-7.31 (2H, m)
1-87	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (8H, m), 8.15-8.12 (3H, m), 7.99-7.93 (2H, m), 7.70-7.49 (11H, m)
1-91	δ=9.60 (1H, d), 9.27 (1H, s), 9.11 (1H, d), 8.46-8.30 (8H, m), 8.19-8.13 (3H, m), 7.89 (1H, s), 7.70-7.50 (16H, m), 7.20 (1H, t)
2-2	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19(1H, d), 8.13(1H, d), 8.00~7.89(6H, m), 7.77(2H, m), 7.62~7.35(15H, m), 7.20~7.16(2H, m)
2-3	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19(1H, d), 8.13(1H, d), 8.00~7.89(6H, m), 7.77-7.75(4H, m), 7.62~7.35(13H, m), 7.25~7.16(6H, m)
2-12	δ=8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(1H, d), 8.19~7.89(11H, m), 7.77(2H, m), 7.62~7.31(14H, m), 7.20~7.16(2H, m)
3-3	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (3H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.35 (17H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-4	δ=8.55 (1H, d), 8.30(1H, d), 8.19-8.13(2H, m), 7.99-7.89(8H, m), 7.77-7.75 (3H, m), 7.62-7.35 (11H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-7	δ=8.55 (1H, d), 8.31-8.30 (3H, d), 8.19-8.13 (2H, m), 7.99-7.89 (5H, m), 7.77-7.75 (5H, m), 7.62-7.35 (14H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-9	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.19-8.13 (2H, m), 8.03-7.77 (9H, m), 7.62-7.50 (9H, m), 7.36-7.35 (2H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-31	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (4H, m), 7.99-7.89 (4H, m), 7.77-7.35 (20H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-32	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.21-8.13 (3H, m), 7.99-7.89 (8H, m), 7.77-7.35 (17H, m), 7.20-7.16 (2H, m)
3-42	δ=8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.19 (1H, d), 8.13 (1H, d), 7.99-7.89 (12H, m), 7.77-7.75 (5H, m), 7.58 (1H, d), 7.50-7.35 (8H, m), 7.20-7.16 (2H, m)

[表 4]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
1-3	m/z=625.22($C_{45}H_{27}N_3O$=625.73)	1-7	m/z=641.19 ($C_{45}H_{27}N_3O$=641.79)
1-11	m/z=700.26($C_{51}H_{32}N_4$=700.84)	1-14	m/z=651.27 ($C_{48}H_{33}N_3$=651.81)
1-26	m/z=715.23($C_{51}H_{29}N_3O_2$=715.81)	1-51	m/z=776.29 ($C_{57}H_{36}N_4$=776.94)
1-56	m/z=776.29($C_{57}H_{36}N_4$=776.94)	1-60	m/z=717.22 ($C_{51}H_{31}N_3S$=717.89)
1-76	m/z=635.28($C_{45}H_{17}D_{10}N_3O$=635.79)	1-83	m/z=625.22 ($C_{45}H_{27}N_3O$=625.73)
1-87	m/z=641.19($C_{45}H_{27}N_3O$=641.79)	1-91	m/z=700.26 ($C_{51}H_{32}N_4$=700.84)
2-2	m/z=666.21($C_{48}H_{30}N_2S$=666.84)	2-3	m/z=742.24 ($C_{54}H_{34}N_2S$=742.94)
2-12	m/z=756.22($C_{54}H_{32}N_2OS$=756.92)	3-3	m/z=560.23 ($C_{42}H_{28}N_2$=560.70)
3-4	m/z=560.23($C_{42}H_{28}N_2$=560.70)	3-7	m/z=636.26 ($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)
3-9	m/z=534.21($C_{40}H_{26}N_2$=534.66)	3-31	m/z=636.26 ($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)
3-32	m/z=636.26($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)	3-42	m/z=636.26

			($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)

<實驗實例 1>

-有機發光元件的製造

【0206】 用蒸餾水超音波清潔玻璃基底，氧化銦錫（ITO）作為薄膜以 1,500 埃的厚度塗佈於所述玻璃基底上。在用蒸餾水清潔完成之後，用溶劑（諸如丙酮、甲醇以及異丙醇）來超音波清潔基底，接著乾燥，且在紫外線（UV）清潔器中使用 UV 進行紫外線臭氧（UVO）處理 5 分鐘。此後，將基底轉移至電漿清潔器（plasma cleaner；PT），且在真空下進行電漿處理以用於 ITO 功函數及殘餘膜移除之後，將基底轉移至熱沈積裝置以用於有機沈積。

【0207】 在透明 ITO 電極（陽極）上，形成作為常用層的電洞注入層 2-TNATA（4,4′,4"-三[2-萘基(苯基)胺基]三苯胺）及電洞轉移層 NPB（N,N′-二(1-萘基)-N,N′-二苯基-(1,1′-聯苯基)-4,4′-二胺）。

【0208】 如下在其上熱真空沈積發光層。作為發光層，將下表 5 中所描述的化學式 1 的化合物沈積至 400 埃作為主體，且綠色磷光摻雜劑[$Ir(ppy)_3$]以發光層的沈積厚度的 7%摻雜且沈積。此後，將 BCP（浴銅靈）沈積至 60 埃作為電洞阻擋層，且於其上將 Alq_3 沈積至 200 埃作為電子轉移層。最後，藉由將氟化鋰（LiF）沈積至 10 埃的厚度來在電子轉移層上形成電子注入層，且接著藉由將鋁（Al）陰極沈積至 1,200 埃的厚度來在電子注入層上形成陰極，且因此，製造有機電致發光元件。

【0209】 同時，在 10^{-8} 托至 10^{-6} 托下針對 OLED 製造中使用的各材料真空昇華純化製造 OLED 所需的所有有機化合物。

【0210】 對於如上所製造的有機電致發光元件中的每一者，使用

			($C_{48}H_{32}N_2$=636.80)

<實驗實例 1>

-有機發光元件的製造

【0206】 用蒸餾水超音波清潔玻璃基底，氧化銦錫（ITO）作為薄膜以 1,500 埃的厚度塗佈於所述玻璃基底上。在用蒸餾水清潔完成之後，用溶劑（諸如丙酮、甲醇以及異丙醇）來超音波清潔基底，接著乾燥，且在紫外線（UV）清潔器中使用 UV 進行紫外線臭氧（UVO）處理 5 分鐘。此後，將基底轉移至電漿清潔器（plasma cleaner；PT），且在真空下進行電漿處理以用於 ITO 功函數及殘餘膜移除之後，將基底轉移至熱沈積裝置以用於有機沈積。

【0207】 在透明 ITO 電極（陽極）上，形成作為常用層的電洞注入層 2-TNATA（4,4′,4"-三[2-萘基(苯基)胺基]三苯胺）及電洞轉移層 NPB（N,N′-二(1-萘基)-N,N′-二苯基-(1,1′-聯苯基)-4,4′-二胺）。

【0208】 如下在其上熱真空沈積發光層。作為發光層，將下表 5 中所描述的化學式 1 的化合物沈積至 400 埃作為主體，且綠色磷光摻雜劑[$Ir(ppy)_3$]以發光層的沈積厚度的 7%摻雜且沈積。此後，將 BCP（浴銅靈）沈積至 60 埃作為電洞阻擋層，且於其上將 Alq_3 沈積至 200 埃作為電子轉移層。最後，藉由將氟化鋰（LiF）沈積至 10 埃的厚度來在電子轉移層上形成電子注入層，且接著藉由將鋁（Al）陰極沈積至 1,200 埃的厚度來在電子注入層上形成陰極，且因此，製造有機電致發光元件。

【0209】 同時，在 10^{-8} 托至 10^{-6} 托下針對 OLED 製造中使用的各材料真空昇華純化製造 OLED 所需的所有有機化合物。

【0210】 對於如上所製造的有機電致發光元件中的每一者，使用

由麥克科學（McScience）公司製造的 M7000 來量測電致發光（electroluminescent；EL）性質，且藉由量測結果，當標準亮度為 6,000 坎德拉/平方公尺（cd/m^2）時，經由由麥克科學公司製造的使用壽命量測系統（M6000）來量測 T_{90}。

【0211】 量測根據本揭露製造的有機發光元件的驅動電壓、發光效率、色彩（EL 色彩）以及使用壽命的結果如下表 5 中所展示。

[表 5]

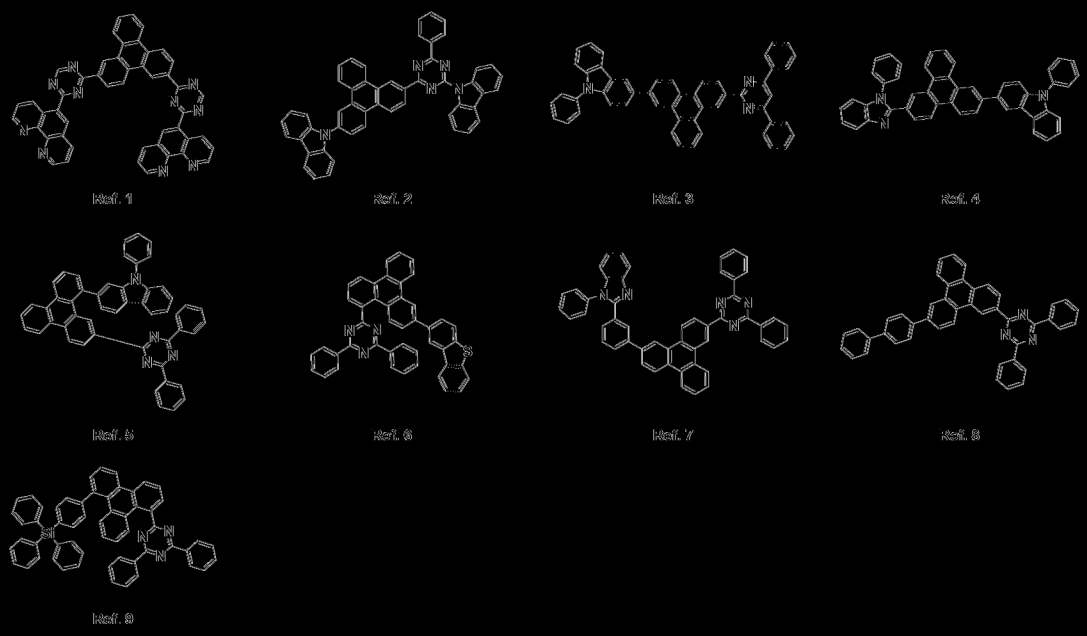
	發光層化合物	驅動電壓（V）	效率（cd/A）	色彩（EL 色彩）	使用壽命（T_{90}）
實例 1	1-3	4.66	71.1	綠色	352
實例 2	1-7	4.32	71.5	綠色	289
實例 3	1-11	4.33	74.2	綠色	405
實例 4	1-14	4.36	78.9	綠色	256
實例 5	1-26	4.66	71.2	綠色	360
實例 6	1-51	4.69	77.2	綠色	221
實例 7	1-56	4.41	75.8	綠色	225
實例 8	1-60	4.41	75.8	綠色	249
實例 9	1-76	4.67	71.2	綠色	356
實例 10	1-83	4.66	71.1	綠色	347
實例 11	1-87	4.67	71.2	綠色	277
實例 12	1-91	4.67	71.2	綠色	390
比較例 1	Ref. 1	5.42	45.7	綠色	47
比較例 2	Ref. 2	5.37	53.5	綠色	82
比較例 3	Ref. 3	5.45	59.8	綠色	78
比較例 4	Ref. 4	5.82	50.8	綠色	68
比較例 5	Ref. 5	5.47	41.2	綠色	57
比較例 6	Ref. 6	5.03	48.7	綠色	69
比較例 7	Ref. 7	5.66	45.8	綠色	48
比較例 8	Ref. 8	5.17	63.2	綠色	154
比較例 9	Ref. 9	5.35	61.2	綠色	105

由麥克科學（McScience）公司製造的 M7000 來量測電致發光（electroluminescent；EL）性質，且藉由量測結果，當標準亮度為 6,000 坎德拉/平方公尺（cd/m^2）時，經由由麥克科學公司製造的使用壽命量測系統（M6000）來量測 T_{90}。

【0211】 量測根據本揭露製造的有機發光元件的驅動電壓、發光效率、色彩（EL 色彩）以及使用壽命的結果如下表 5 中所展示。

[表 5]

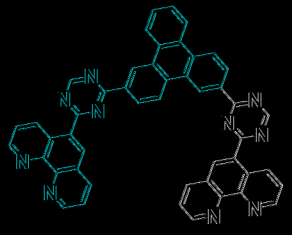
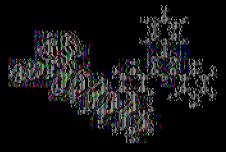
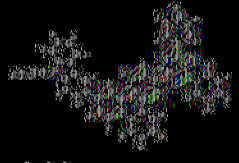
	發光層化合物	驅動電壓（V）	效率（cd/A）	色彩（EL 色彩）	使用壽命（T_{90}）
實例 1	1-3	4.66	71.1	綠色	352
實例 2	1-7	4.32	71.5	綠色	289
實例 3	1-11	4.33	74.2	綠色	405
實例 4	1-14	4.36	78.9	綠色	256
實例 5	1-26	4.66	71.2	綠色	360
實例 6	1-51	4.69	77.2	綠色	221
實例 7	1-56	4.41	75.8	綠色	225
實例 8	1-60	4.41	75.8	綠色	249
實例 9	1-76	4.67	71.2	綠色	356
實例 10	1-83	4.66	71.1	綠色	347
實例 11	1-87	4.67	71.2	綠色	277
實例 12	1-91	4.67	71.2	綠色	390
比較例 1	Ref. 1	5.42	45.7	綠色	47
比較例 2	Ref. 2	5.37	53.5	綠色	82
比較例 3	Ref. 3	5.45	59.8	綠色	78
比較例 4	Ref. 4	5.82	50.8	綠色	68
比較例 5	Ref. 5	5.47	41.2	綠色	57
比較例 6	Ref. 6	5.03	48.7	綠色	69
比較例 7	Ref. 7	5.66	45.8	綠色	48
比較例 8	Ref. 8	5.17	63.2	綠色	154
比較例 9	Ref. 9	5.35	61.2	綠色	105

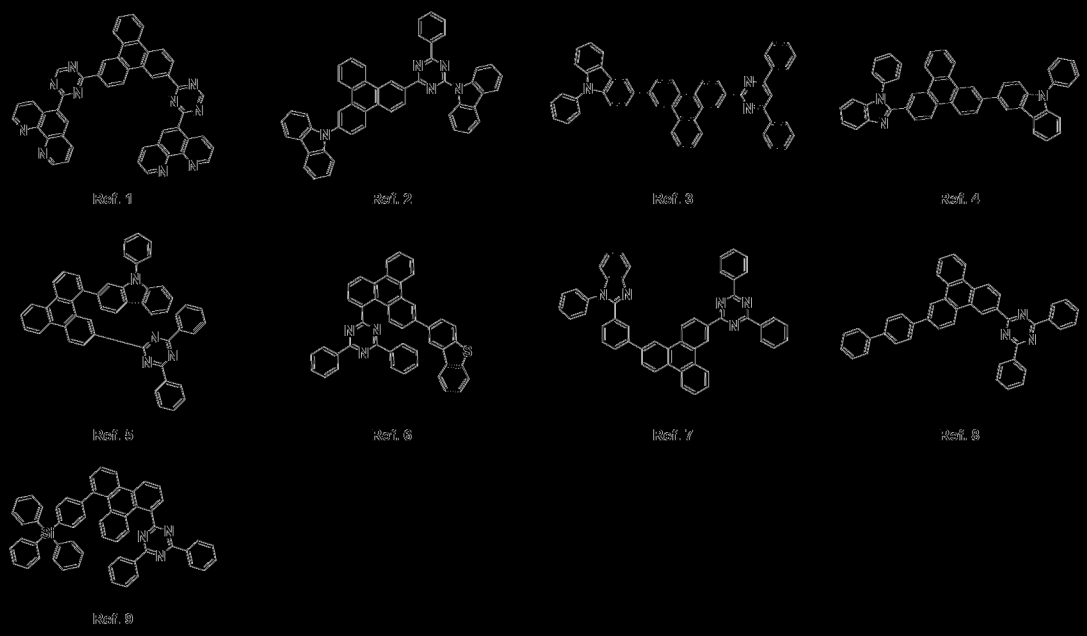


[0212] 如自表 5 的結果所見，相較於比較例 1 至比較例 9，使用本揭露的有機電致發光元件的發光層材料的有機電致發光元件具有較低的驅動電壓、增強的發光效率以及顯著改良的使用壽命。

[0213] 特定言之，在下表 6 中，化合物 Ref. 1 的 LUMO 軌跨啡啉基團與苯基-聯伸苯基-苯基-啡啉廣泛地非定域，且 LUMO 能級為 2.38。可確認，此結果藉由產生過量電子遷移率來抑制電荷平衡，且藉由 LUMO 能級低於抑制能量轉移的摻雜劑，量測到效率低。此外，可確認，相較於具有兩個取代基（Ref. 1），具有基於苯的三個取代基（化合物 1-11）具有優良的穩定性及增強的使用壽命。

[表 6]

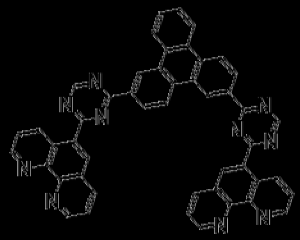
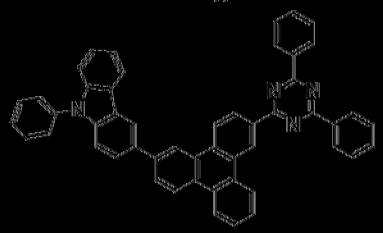
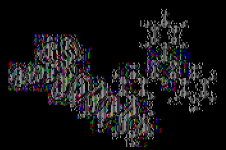
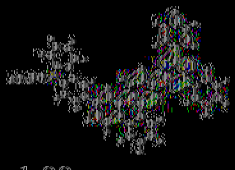
化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 1		 6.24	 2.38
1-11		 5.26	 1.88



[02.12] 如自表 5 的結果所見，相較於比較例 1 至比較例 9，使用本揭露的有機電致發光元件的發光層材料的有機電致發光元件具有較低的驅動電壓、增強的發光效率以及顯著改良的使用壽命。

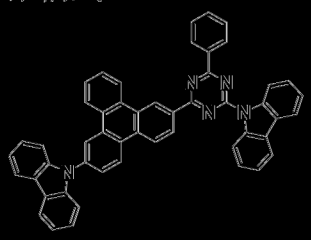
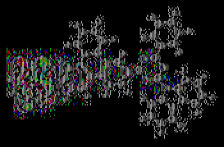
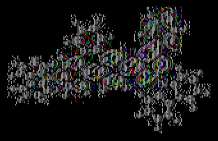
[02.13] 特定言之，在下表 6 中，化合物 Ref. 1 的 LUMO 軌跨啡啉基團與聯伸三苯基團廣泛地非定域，且 LUMO 能級為 2.38。可確認，此結果藉由產生過量電子遷移率來抑制電荷平衡，且藉由 LUMO 能級低於抑制能量轉移的摻雜劑，量測到效率低。此外，可確認，相較於具有兩個取代基（Ref. 1），具有基於[illegible]的[illegible]個取代基（化合物 1-11）具有優良的穩定性及增強的使用壽命。

[表 6]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 1		 6.24	 2.38
1-11		 5.26	 1.88

[0214] 此外，在下表 7 中，化合物 Ref. 2 的 HOMO 軌域於咔唑，而化合物 1-11 的 HOMO 軌廣泛地非定域於咔唑及聯伸三苯。可確認，此藉由增強電洞穩定性及遷移率而增強元件的效率及使用壽命。

[表 7]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 2		 5.37	 2.08

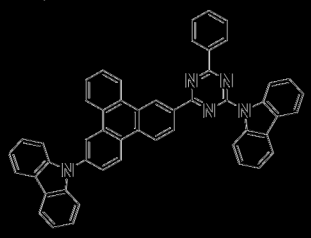
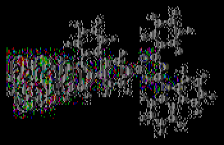
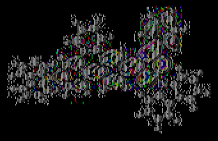
[0215] 化合物 Ref. 2、化合物 Ref. 3 以及化合物 Ref. 4 與本揭露的化學式 1 在取代位置方面不同。在化合物 Ref. 2、化合物 Ref. 3 以及化合物 Ref. 4 的結構中，HOMO 核心、連接子以及 LUMO 核心線性地連接，從而促進分子中的電荷轉移且降低能帶隙。可確認，低能帶隙抑制電洞及電子自輔助層注入至主體，此減小元件的效率及使用壽命。

[0216] 同樣，化合物 Ref. 5、化合物 Ref. 6 以及化合物 Ref. 9 與本揭露的化學式 1 亦在取代位置方面不同。具有如同化合物 Ref. 5、化合物 Ref. 6 以及化合物 Ref. 9 的結構的分子位阻的材料在分子穩定性方面的問題可為產生減小元件使用壽命的問題。

[0217] 在下表 8 中，化合物 Ref. 7 及化合物 Ref. 8 具有與本揭露的化學式 1 相同的取代位置，但具有不同取代基。特定言之，當在本揭露中單環雜芳基直接取代為聯伸三苯上的 Z1（或 Z2）時，另一取代基 Z2（或 Z1）為矽烷基、芳基或三環或高於三環的雜芳基，而化合物 Ref. 7 及化合物 Ref. 8 經雙環雜芳基及芳基（聯苯

[0214] 此外，在下表 7 中，化合物 Ref. 2 的 HOMO 軌域於咔唑，而化合物 1-11 的 HOMO 軌廣泛地非定域於咔唑及聯伸三苯。可確認，此藉由增強電洞穩定性及遷移率而增強元件的效率及使用壽命。

[表 7]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 2		 5.37	 2.08

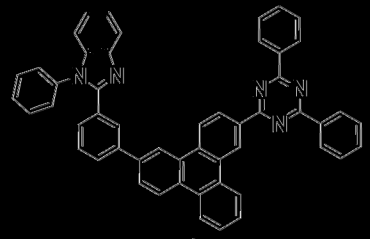
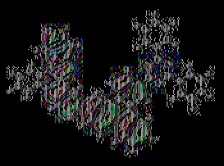
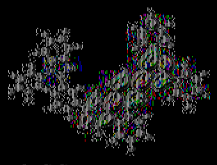
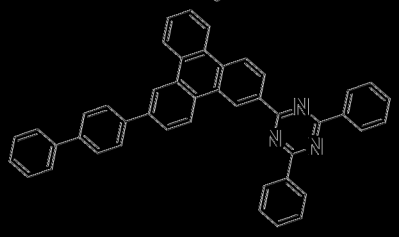
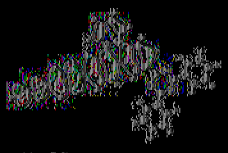
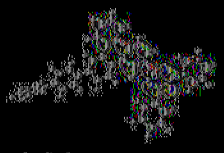
[0215] 化合物 Ref. 2、化合物 Ref. 3 以及化合物 Ref. 4 與本揭露的化學式 1 在取代位置方面不同。在化合物 Ref. 2、化合物 Ref. 3 以及化合物 Ref. 4 的結構中，HOMO 核心、連接子以及 LUMO 核心線性地連接，從而促進分子中的電荷轉移且降低能帶隙。可確認，低能帶隙抑制電洞及電子自輔助層注入至主體，此減小元件的效率及使用壽命。

[0216] 同樣，化合物 Ref. 5、化合物 Ref. 6 以及化合物 Ref. 9 與本揭露的化學式 1 亦在取代位置方面不同。具有如同化合物 Ref. 5、化合物 Ref. 6 以及化合物 Ref. 9 的結構的分子位阻的材料在分子穩定性方面的問題可為產生減小元件使用壽命的問題。

[0217] 在下表 8 中，化合物 Ref. 7 及化合物 Ref. 8 具有與本揭露的化學式 1 相同的取代位置，但具有不同取代基。特定言之，當在本揭露中單環雜芳基直接取代為聯伸三苯上的 Z1（或 Z2）時，另一取代基 Z2（或 Z1）為矽烷基、芳基或三環或高於三環的雜芳基，而化合物 Ref. 7 及化合物 Ref. 8 經雙環雜芳基及芳基（聯苯

基）取代。

[表 8]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 7		 5.68	 -1.88
Ref. 8		 5.63	 -1.94

[0218] 在化合物 Ref. 7 中，HOMO 軌廣泛地非定域於咪唑及聯伸三苯。HOMO 核心需要使電洞穩定，然而，相較於化合物 1-11 的吡唑，咪唑不適合用於使電洞穩定，且減小元件的使用壽命。

[0219] 此外，化合物 Ref. 8 的 HOMO 軌非定域於苯基及聯伸三苯。相較於咪唑，化合物 Ref. 8 的 HOMO 核心能夠使電洞穩定，然而，可確認相較於吡唑，獲得低電洞穩定性及短使用壽命。

[0220] 在有機電致發光元件中，發光屑中的主體的所得物可取決於轉移至發光屑的電洞與電子之間的平衡度而改變。

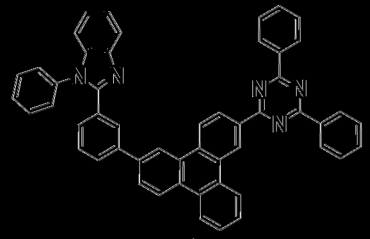
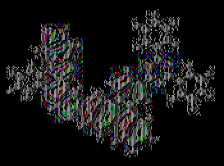
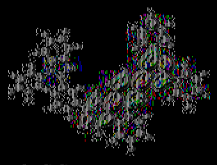
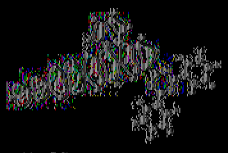
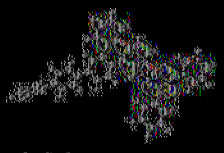
<實驗實例 2>

有機發光元件的製造

[0221] 用蒸餾水超音波清潔玻璃基底，氧化銦錫（ITO）作為薄膜以 1,500 埃的厚度塗佈於所述玻璃基底上。在用蒸餾水清潔完成之後，用溶劑（諸如丙酮、甲醇以及異丙醇）來超音波清潔基底，接著乾燥，且在紫外線（UV）清潔器中使用 UV 進行紫外線臭氧（UVO）處理 5 分鐘。此後，將基底轉移至電漿清潔器（PT），且

基）取代。

[表 8]

化合物	結構式	HOMO 軌	LUMO 軌
Ref. 7		 5.68	 -1.88
Ref. 8		 5.63	 -1.94

[0218] 在化合物 Ref. 7 中，HOMO 軌廣泛地非定域於咪唑及聯伸三苯。HOMO 核心需要使電洞穩定，然而，相較於化合物 1-11 的吡唑，咪唑不適合用於使電洞穩定，且減小元件的使用壽命。

[0219] 此外，化合物 Ref. 8 的 HOMO 軌非定域於苯基及聯伸三苯。相較於咪唑，化合物 Ref. 8 的 HOMO 核心能夠使電洞穩定，然而，可確認相較於吡唑，獲得低電洞穩定性及短使用壽命。

[0220] 在有機電致發光元件中，發光層中的主體的所得物可取決於轉移至發光層的電洞與電子之間的平衡度而改變。

<實驗實例 2>

有機發光元件的製造

[0221] 用蒸餾水超音波清潔玻璃基底，氧化銦錫（ITO）作為薄膜以 1,500 埃的厚度塗佈於所述玻璃基底上。在用蒸餾水清潔完成之後，用溶劑（諸如丙酮、甲醇以及異丙醇）來超音波清潔基底，接著乾燥，且在紫外線（UV）清潔器中使用 UV 進行紫外線臭氧（UVO）處理 5 分鐘。此後，將基底轉移至電漿清潔器（PT），且

在真空下進行電漿處理以用於 ITO 功函數及殘餘膜移除之後，將基底轉移至熱沈積裝置以用於有機沈積。

【0222】 在透明 ITO 電極（陽極）上，形成作為常用層的電洞注入層 2-TNATA（4,4′,4"-三 [2-萘基(苯基)胺基]三苯胺）及電洞轉移層 NPB(N,N′-二(1-萘基)-N,N′-二苯基-(1,1′-聯苯基)-4,4′-二胺)。

【0223】 如下在其上熱真空沈積發光層。作為發光層，一種類型的化學式 1 的化合物以及一種類型的化學式 2 或化學式 3 的化合物如下表 9 中所描述預混合且在一個供應源中沈積至 400 埃作為主體，且綠色磷光摻雜劑[$Ir(ppy)_3$]以發光層的沈積厚度的 7%的量摻雜且沈積。此後，將 BCP（浴銅靈）沈積至 60 埃作為電洞阻擋層，且於其上將 Alq_3 沈積至 200 埃作為電子轉移層。最後，藉由將氟化鋰（LiF）沈積至 10 埃的厚度來在電子轉移層上形成電子注入層，且接著藉由將鋁（Al）陰極沈積至 1,200 埃的厚度來在電子注入層上形成陰極，且因此，製造有機電致發光元件。

【0224】 同時，在 10^{-8} 托至 10^{-6} 托下針對 OLED 製造中使用的各材料真空昇華純化製造 OLED 所需的所有有機化合物。

【0225】 對於如上所製造的有機電致發光元件中的每一者，使用由麥克科學公司製造的 M7000 來量測電致發光（EL）性質，且藉由量測結果，當標準亮度為 6,000 坎德拉/平方公尺時，經由由麥克科學公司製造的使用壽命量測系統（M6000）來量測 T_{90}。

【0226】 量測根據本揭露製造的有機發光元件的驅動電壓、發光效率、色彩（EL 色彩）以及使用壽命的結果如下表 9 中所展示。

[表 9]

	發光層化合物	比	驅動電壓(V)	效率(cd/A)	色彩（EL色彩）	使用壽命(T_{90})

在真空下進行電漿處理以用於 ITO 功函數及殘餘膜移除之後，將基底轉移至熱沈積裝置以用於有機沈積。

【0222】 在透明 ITO 電極（陽極）上，形成作為常用層的電洞注入層 2-TNATA（4,4′,4"-三 [2-萘基(苯基)胺基]三苯胺）及電洞轉移層 NPB(N,N′-二(1-萘基)-N,N′-二苯基-(1,1′-聯苯基)-4,4′-二胺)。

【0223】 如下在其上熱真空沈積發光層。作為發光層，一種類型的化學式 1 的化合物以及一種類型的化學式 2 或化學式 3 的化合物如下表 9 中所描述預混合且在一個供應源中沈積至 400 埃作為主體，且綠色磷光摻雜劑[$Ir(ppy)_3$]以發光層的沈積厚度的 7%的量摻雜且沈積。此後，將 BCP（浴銅靈）沈積至 60 埃作為電洞阻擋層，且於其上將 Alq_3 沈積至 200 埃作為電子轉移層。最後，藉由將氟化鋰（LiF）沈積至 10 埃的厚度來在電子轉移層上形成電子注入層，且接著藉由將鋁（Al）陰極沈積至 1,200 埃的厚度來在電子注入層上形成陰極，且因此，製造有機電致發光元件。

【0224】 同時，在 10^{-8} 托至 10^{-6} 托下針對 OLED 製造中使用的各材料真空昇華純化製造 OLED 所需的所有有機化合物。

【0225】 對於如上所製造的有機電致發光元件中的每一者，使用由麥克科學公司製造的 M7000 來量測電致發光（EL）性質，且藉由量測結果，當標準亮度為 6,000 坎德拉/平方公尺時，經由由麥克科學公司製造的使用壽命量測系統（M6000）來量測 T_{90}。

【0226】 量測根據本揭露製造的有機發光元件的驅動電壓、發光效率、色彩（EL 色彩）以及使用壽命的結果如下表 9 中所展示。

[表 9]

	發光層化合物	比	驅動電壓（V）	效率（cd/A）	色彩（EL色彩）	使用壽命（T_{90}）

實例 13	1-11:2-2	1:8	4.73	54.2	綠色	338
實例 14	1-11:2-2	1:5	4.71	57.2	綠色	444
實例 15	1-11:2-2	1:2	4.33	75.2	綠色	679
實例 16	1-11:2-2	1:1	4.48	70.2	綠色	546
實例 17	1-11:2-2	2:1	4.69	69.2	綠色	525
實例 18	1-11:2-2	5:1	4.32	68.3	綠色	433
實例 19	1-11:2-2	8:1	4.21	67.0	綠色	325
實例 20	1-26:2-3	1:2	4.35	79.2	綠色	599
實例 21	1-26:2-3	1:1	4.41	75.8	綠色	591
實例 22	1-26:2-3	2:1	4.67	71.2	綠色	540
實例 23	1-7:2-12	1:2	4.38	76.4	綠色	539
實例 24	1-7:2-12	1:1	4.45	72.8	綠色	522
實例 25	1-7:2-12	2:1	4.66	71.1	綠色	500
實例 26	1-91:3-4	1:2	4.33	75.2	綠色	620
實例 27	1-91:3-4	1:1	4.48	70.2	綠色	582
實例 28	1-91:3-4	2:1	4.69	69.2	綠色	543
實例 29	1-3:3-7	1:2	4.33	75.2	綠色	569
實例 30	1-3:3-7	1:1	4.48	70.2	綠色	543
實例 31	1-3:3-7	2:1	4.69	69.2	綠色	518
實例 32	1-76:3-31	1:2	4.31	79.2	綠色	586
實例 33	1-76:3-31	1:1	4.42	75.7	綠色	558
實例 34	1-76:3-31	2:1	4.66	71.1	綠色	536
實例 35	1-83:3-32	1:2	4.33	74.2	綠色	562
實例 36	1-83:3-32	1:1	4.42	72.2	綠色	553
實例 37	1-83:3-32	2:1	4.66	71.2	綠色	528

【0227】 自表 9 的結果，可確認當同時包含化學式 1 的化合物（N 型）以及化學式 2 或化學式 3 的化合物（P 型）時，獲得更優良的效率及使用壽命的效果。此類結果可導致預測當同時包含兩種化合物時，激發複合物現象出現。

【0228】 激發複合物現象為由於兩個分子之間的電子交換而釋放具有供體（p 主體）HOMO 能級及受體（n 主體）LUMO 能級的大小的能量的現象。當激發複合物現象出現在兩個分子之間時，反向系統間穿越（reverse intersystem crossing；RISC）出現，且因此，螢光的內部量子效率可增大至 100%。當具有良好電洞轉移能力的供體（p 主體）及具有良好電子轉移能力的受體（n 主體）用作發

實例 13	1-11:2-2	1:8	4.73	54.2	綠色	338
實例 14	1-11:2-2	1:5	4.71	57.2	綠色	444
實例 15	1-11:2-2	1:2	4.33	75.2	綠色	679
實例 16	1-11:2-2	1:1	4.48	70.2	綠色	546
實例 17	1-11:2-2	2:1	4.69	69.2	綠色	525
實例 18	1-11:2-2	5:1	4.32	68.3	綠色	433
實例 19	1-11:2-2	8:1	4.21	67.0	綠色	325
實例 20	1-26:2-3	1:2	4.35	79.2	綠色	599
實例 21	1-26:2-3	1:1	4.41	75.8	綠色	591
實例 22	1-26:2-3	2:1	4.67	71.2	綠色	540
實例 23	1-7:2-12	1:2	4.38	76.4	綠色	539
實例 24	1-7:2-12	1:1	4.45	72.8	綠色	522
實例 25	1-7:2-12	2:1	4.66	71.1	綠色	500
實例 26	1-91:3-4	1:2	4.33	75.2	綠色	620
實例 27	1-91:3-4	1:1	4.48	70.2	綠色	582
實例 28	1-91:3-4	2:1	4.69	69.2	綠色	543
實例 29	1-3:3-7	1:2	4.33	75.2	綠色	569
實例 30	1-3:3-7	1:1	4.48	70.2	綠色	543
實例 31	1-3:3-7	2:1	4.69	69.2	綠色	518
實例 32	1-76:3-31	1:2	4.31	79.2	綠色	586
實例 33	1-76:3-31	1:1	4.42	75.7	綠色	558
實例 34	1-76:3-31	2:1	4.66	71.1	綠色	536
實例 35	1-83:3-32	1:2	4.33	74.2	綠色	562
實例 36	1-83:3-32	1:1	4.42	72.2	綠色	553
實例 37	1-83:3-32	2:1	4.66	71.2	綠色	528

【0227】 自表 9 的結果，可確認當同時包含化學式 1 的化合物（N 型）以及化學式 2 或化學式 3 的化合物（P 型）時，獲得更優良的效率及使用壽命的效果。此類結果可導致預測當同時包含兩種化合物時，激發複合物現象出現。

【0228】 激發複合物現象為由於兩個分子之間的電子交換而釋放具有供體（p 主體）HOMO 能級及受體（n 主體）LUMO 能級的大小的能量的現象。當激發複合物現象出現在兩個分子之間時，反向系統間穿越（reverse intersystem crossing；RISC）出現，且因此，螢光的內部量子效率可增大至 100%。當具有良好電洞轉移能力的供體（p 主體）及具有良好電子轉移能力的受體（n 主體）用作發

光層的主體時，將電洞注入至 p 主體且將電子注入至 n 主體，且因此，可降低驅動電壓，從而最終有助於增強使用壽命。在本申請案的揭露內容中，化學式 2 或化學式 3 的化合物執行供體作用，且化學式 1 的化合物執行受體作用，且當一起用作發光層主體時，獲得極佳元件性質。

【符號說明】

【0229】

100:基底

200:陽極

300:有機材料層

301:電洞注入層

302:電洞轉移層

303:發光層

304:電洞阻擋層

305:電子轉移層

306:電子注入層

400:陰極

光層的主體時，將電洞注入至 p 主體且將電子注入至 n 主體，且因此，可降低驅動電壓，從而最終有助於增強使用壽命。在本申請案的揭露內容中，化學式 2 或化學式 3 的化合物執行供體作用，且化學式 1 的化合物執行受體作用，且當一起用作發光層主體時，獲得極佳元件性質。

【符號說明】

【0229】

100:基底

200:陽極

300:有機材料層

301:電洞注入層

302:電洞轉移層

303:發光層

304:電洞阻擋層

305:電子轉移層

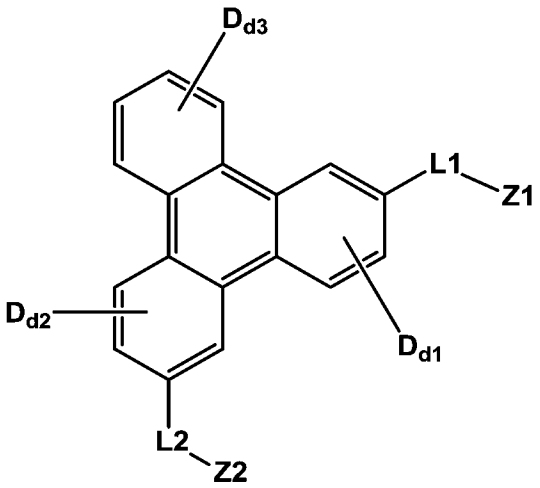
306:電子注入層

400:陰極

【發明申請專利範圍】

【請求項1】 一種化合物，具有以下化學式 1：

[化學式 1]



其中，在化學式 1 中，

d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，

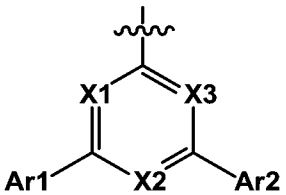
d3 為 0 至 4 的整數，

L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

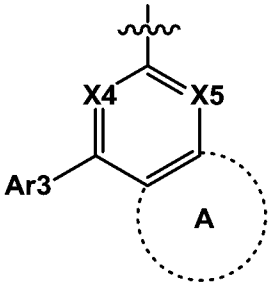
Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且

Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基，

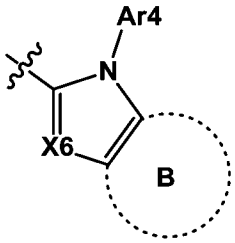
[化學式 1-1]



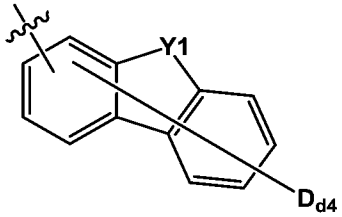
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環，且

當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基時，Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基。

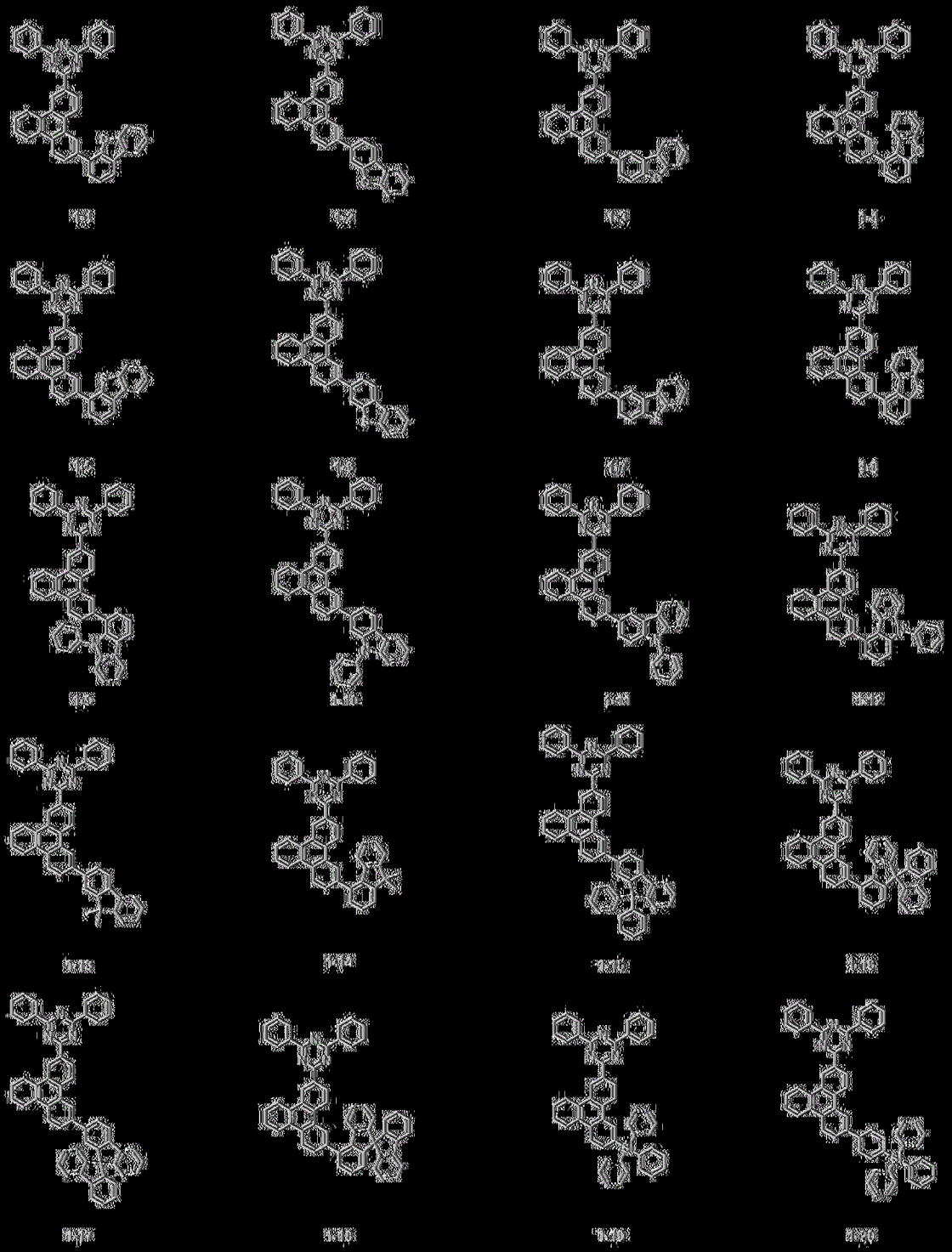
【請求項2】 如請求項 1 所述的化合物，其中 L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵或經取代或未經取代的 C6 至 C20 伸芳基。

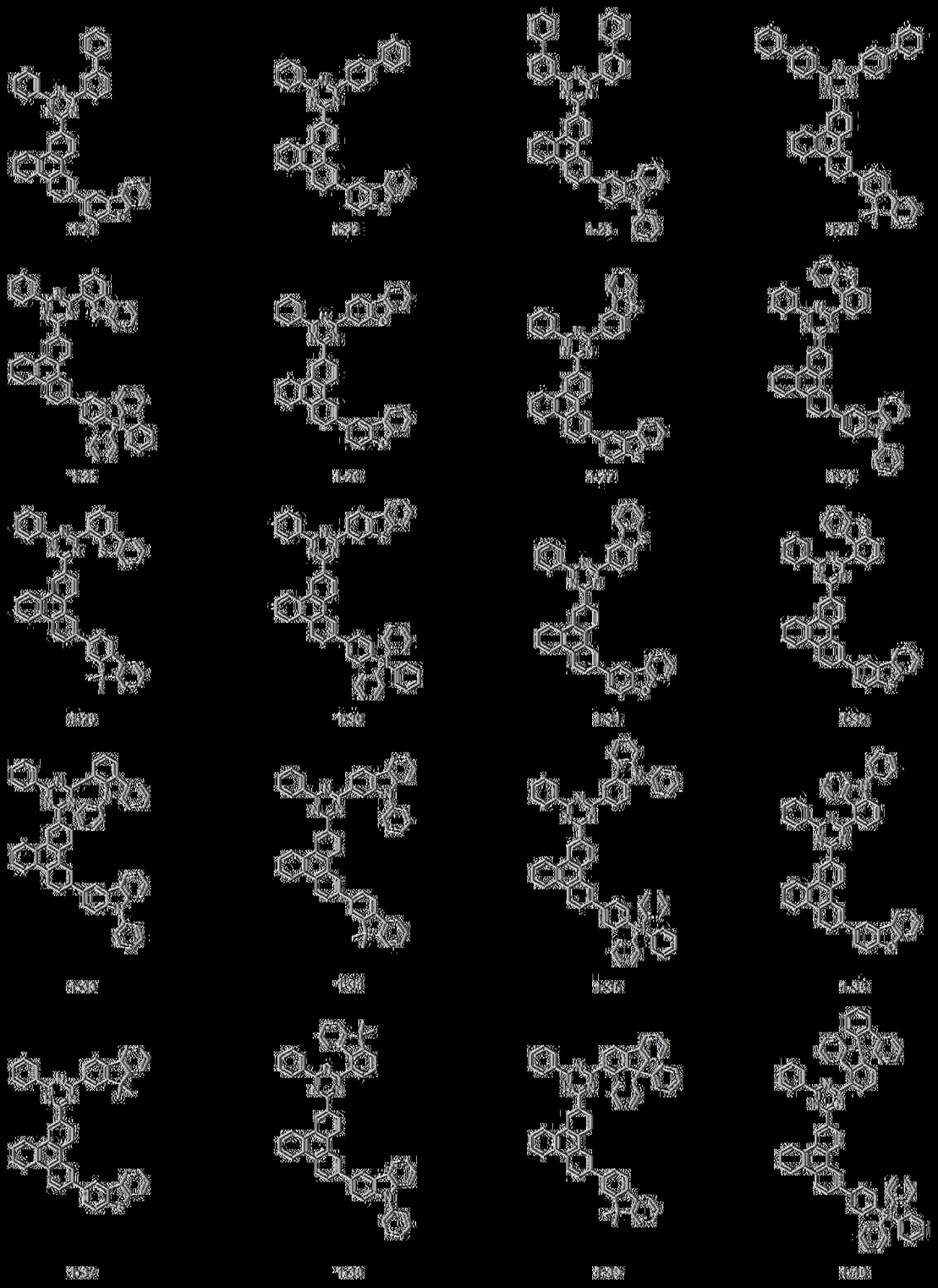
【請求項3】 如請求項 1 所述的化合物，其中化學式 1-1 的 Ar1 及 Ar2 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

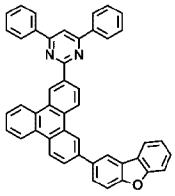
【請求項4】 如請求項 1 所述的化合物，其中化學式 1-2 的 A 為經取代或未經取代的單環芳環或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的多環雜環，且化學式 1-3 的 B 為經取代或未經取代的單環芳環。

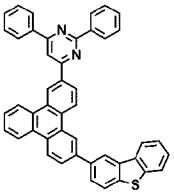
【請求項5】 如請求項 1 所述的化合物，其中 Z1 及 Z2 中的至少一者為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基。

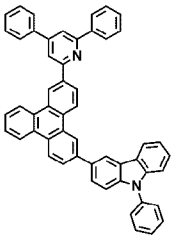
【請求項6】 如請求項 1 所述的化合物，其中化學式 1 由以下化合物中的任一者表示：

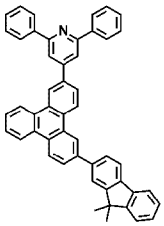


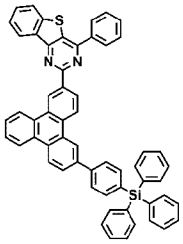


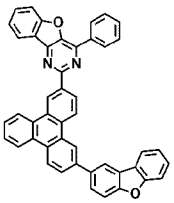

1-41

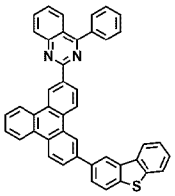

1-42

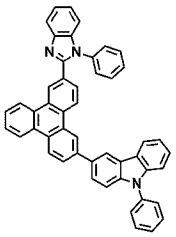

1-43

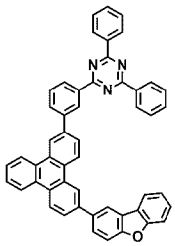

1-44

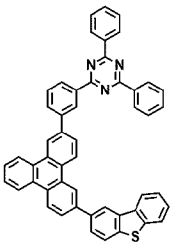

1-45

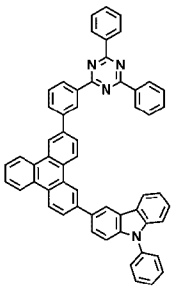

1-46

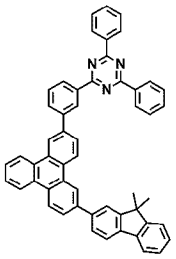

1-47

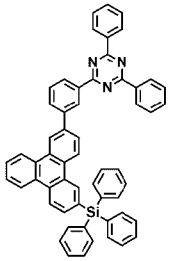

1-48

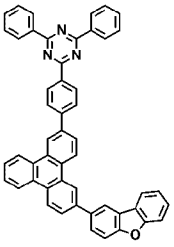

1-49

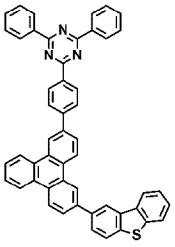

1-50

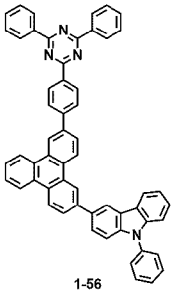

1-51

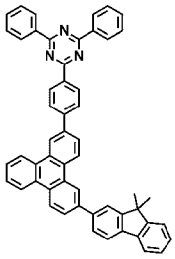

1-52

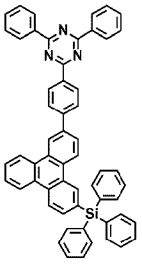

1-53

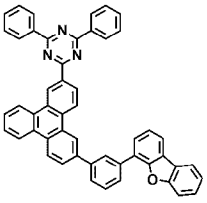

1-54

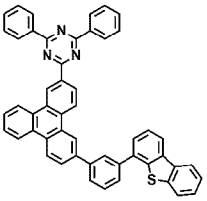

1-55

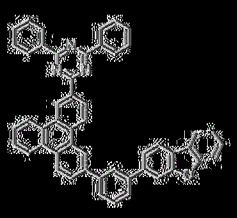

1-56

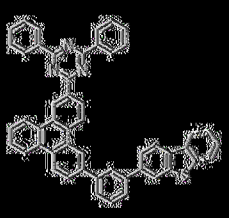

1-57

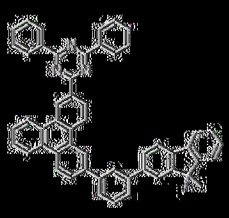

1-58

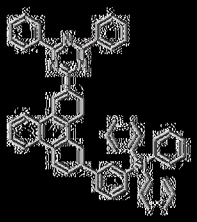

1-59

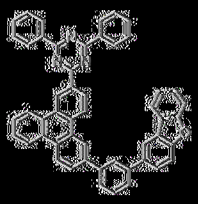

1-60

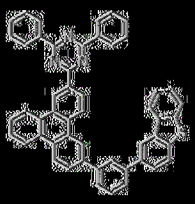


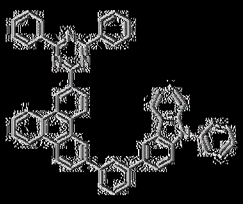


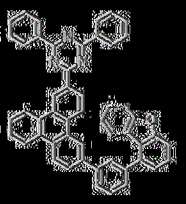


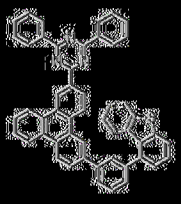


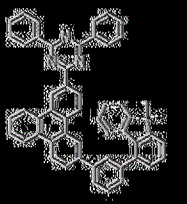


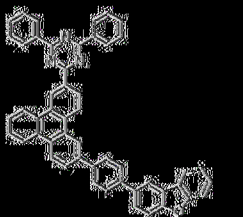


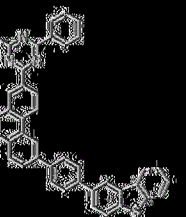


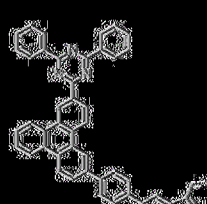


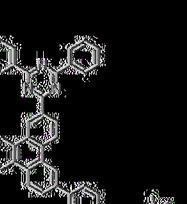


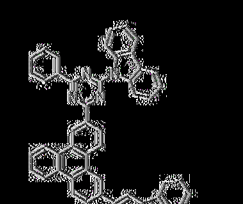


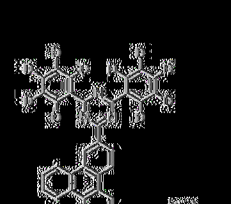


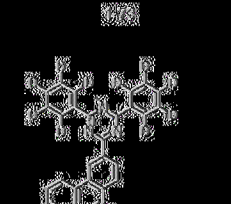


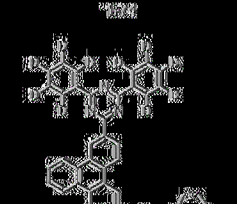


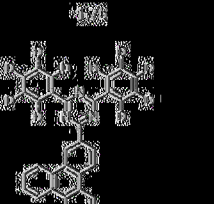


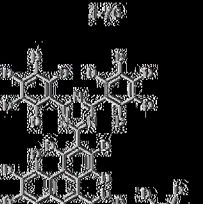




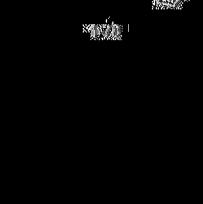




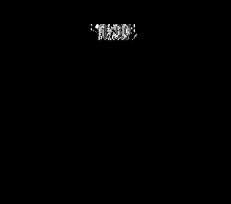


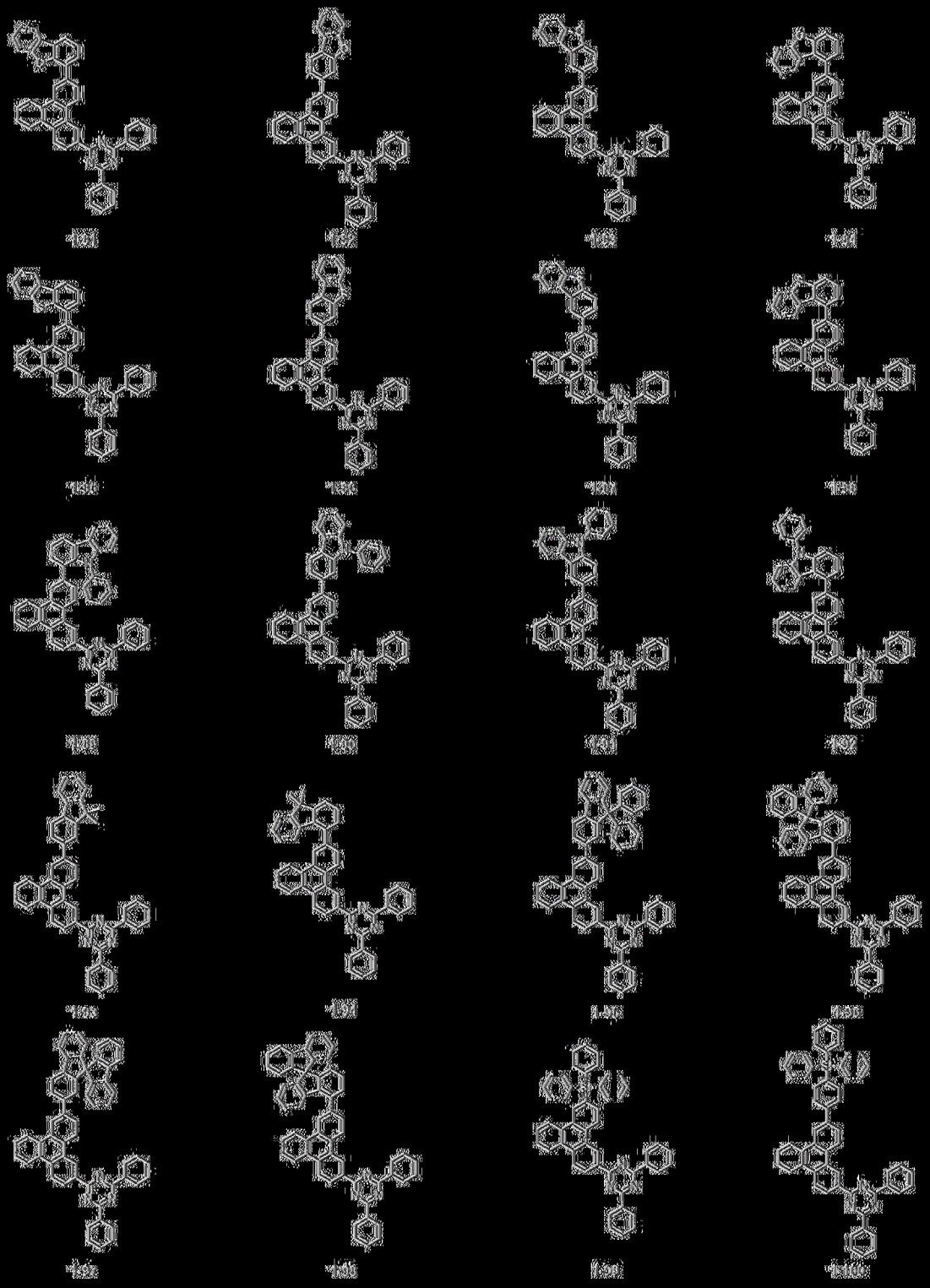


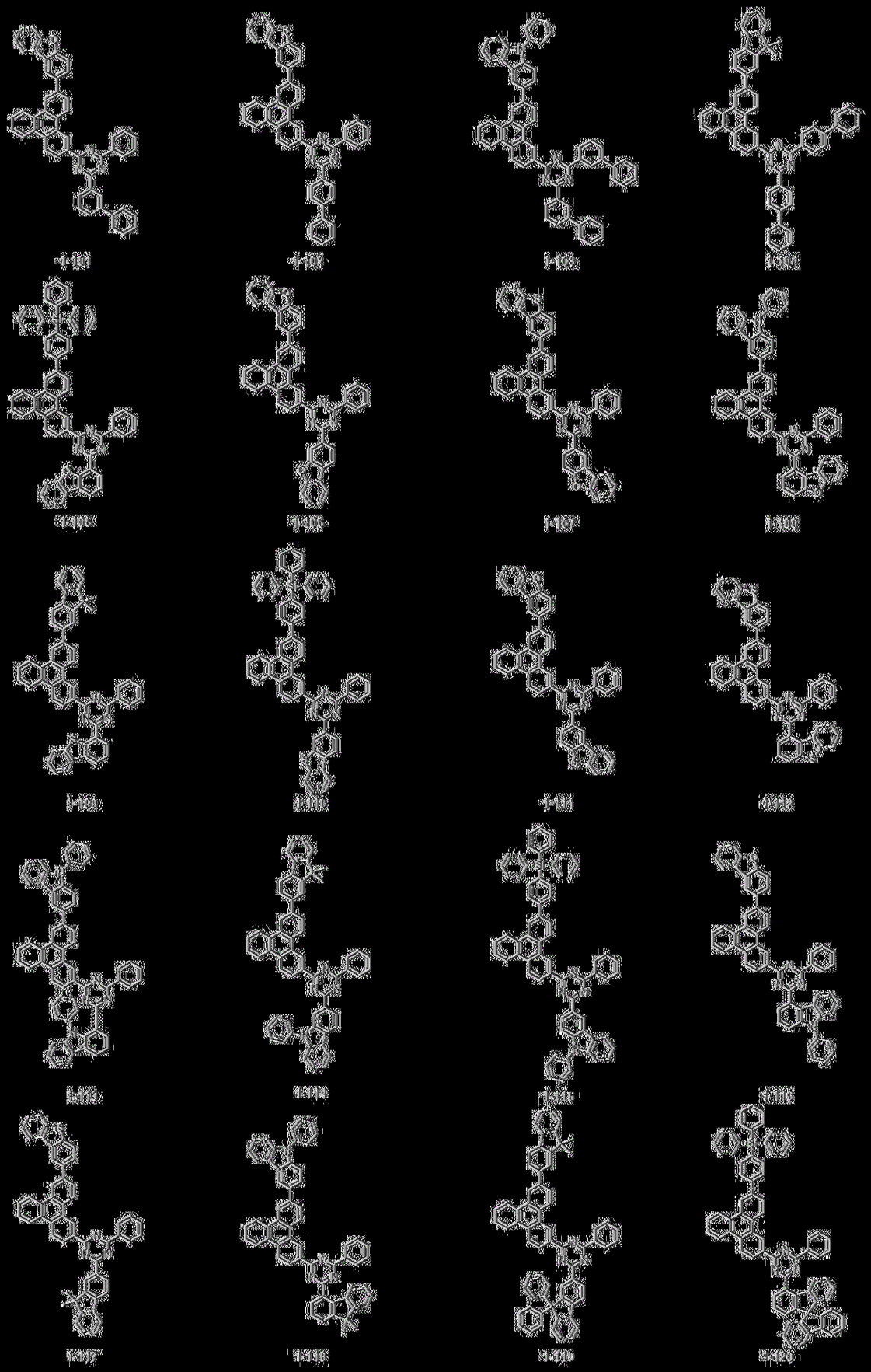


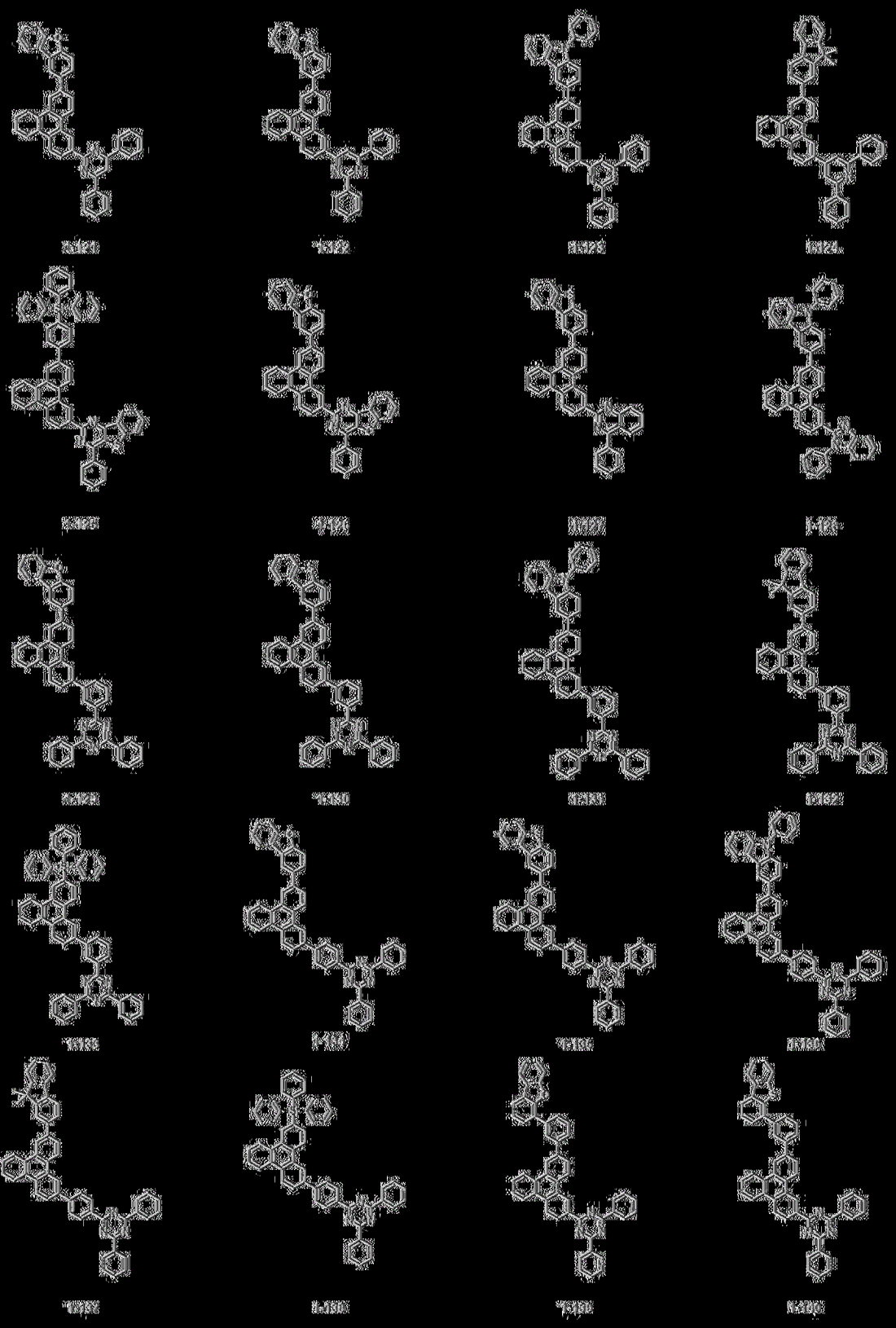


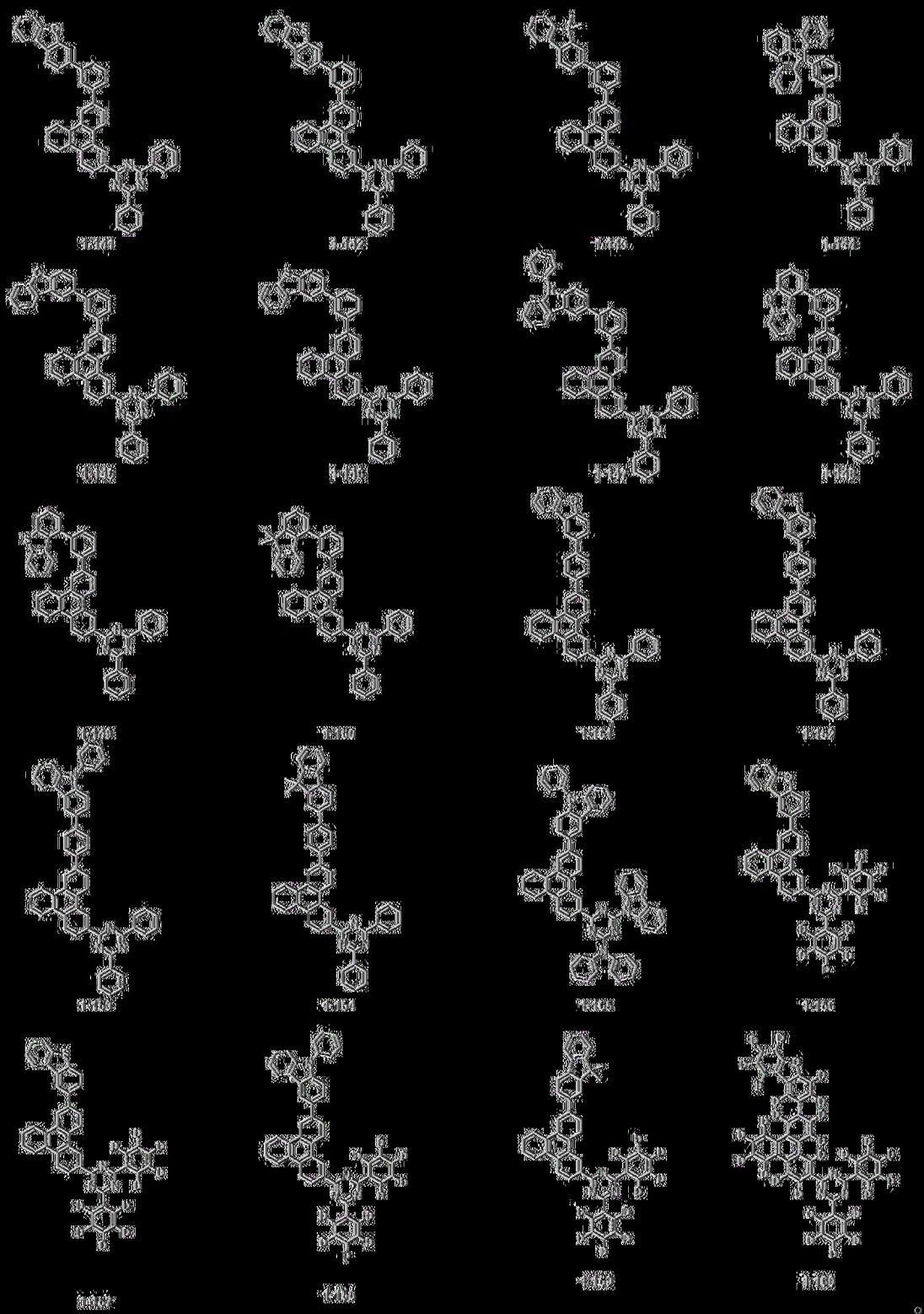












。

[請求項7] 一種有機發光元件，包括：

第一電極；

第二電極，設置為與所述第一電極相對；以及

有機材料層，設置於所述第一電極與所述第二電極之間，

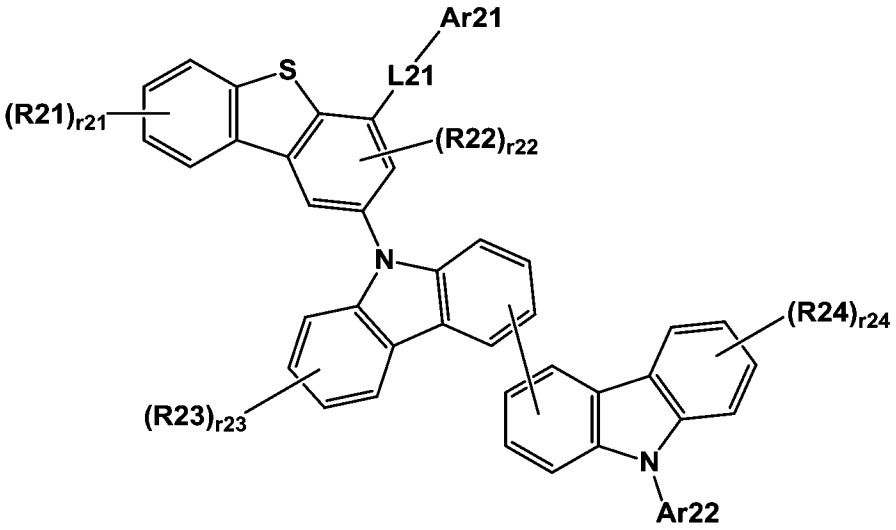
其中所述有機材料層包含一或多種類型的如請求項 1 至 6 中任一項所述的化合物。

【請求項8】 如請求項 7 所述的有機發光元件，其中所述有機材料層包含發光層，且所述發光層包含所述化合物。

【請求項9】 如請求項 7 所述的有機發光元件，其中所述有機材料層包含發光層，所述發光層包含主體，且所述主體包含所述化合物。

【請求項10】如請求項 8 所述的有機發光元件，其中所述發光層更包含以下化學式 2 或化學式 3 的化合物：

[化學式 2]



在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

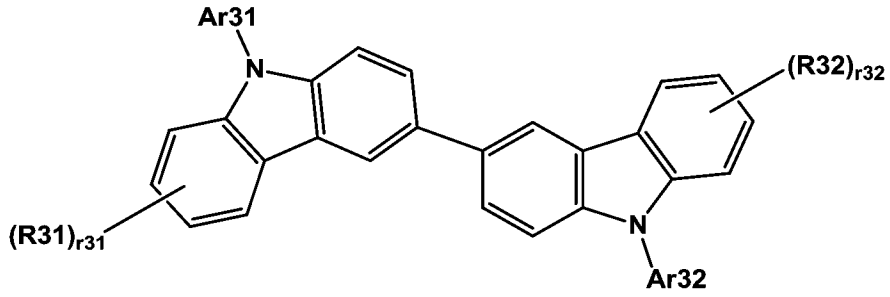
r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

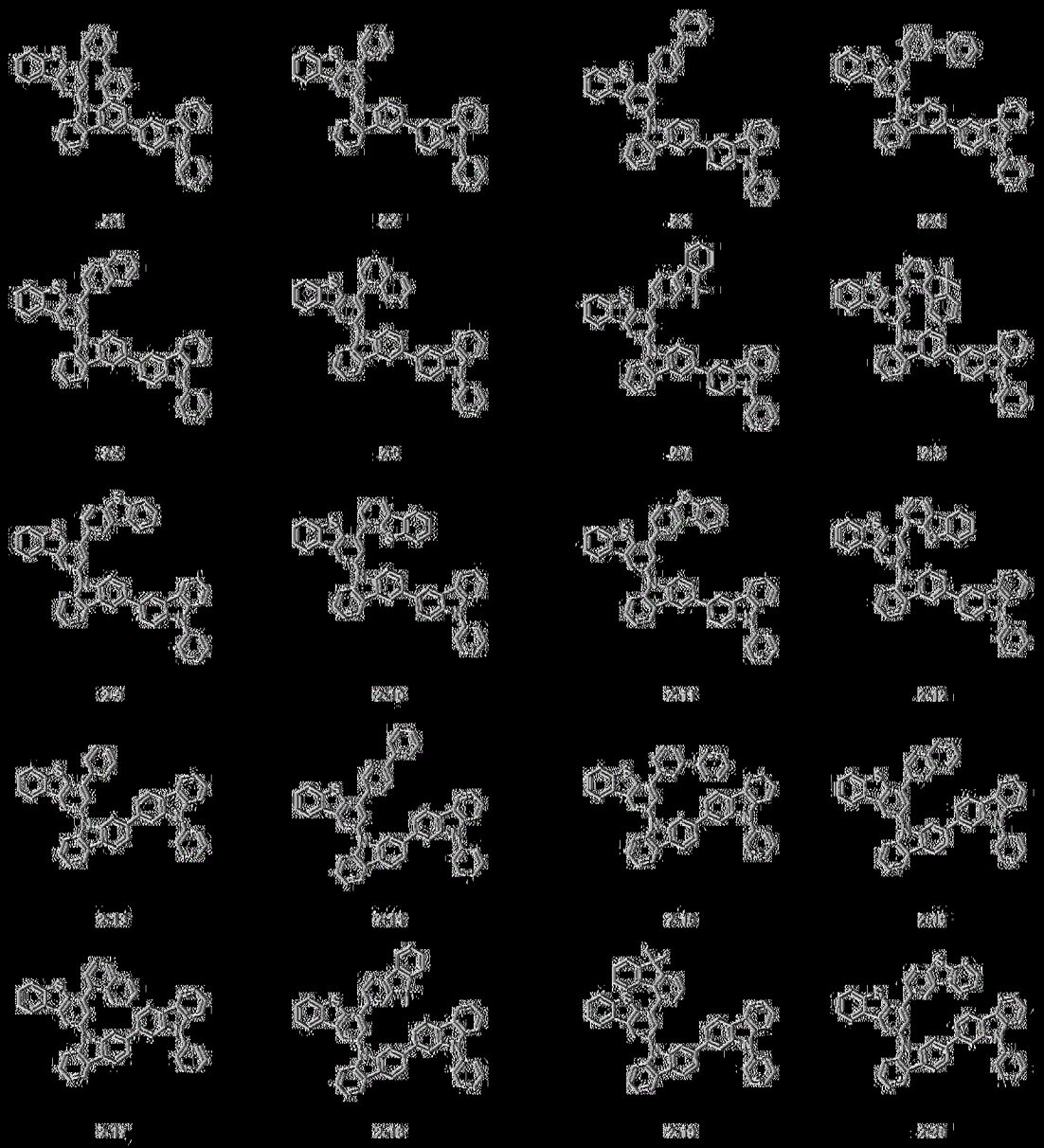
Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

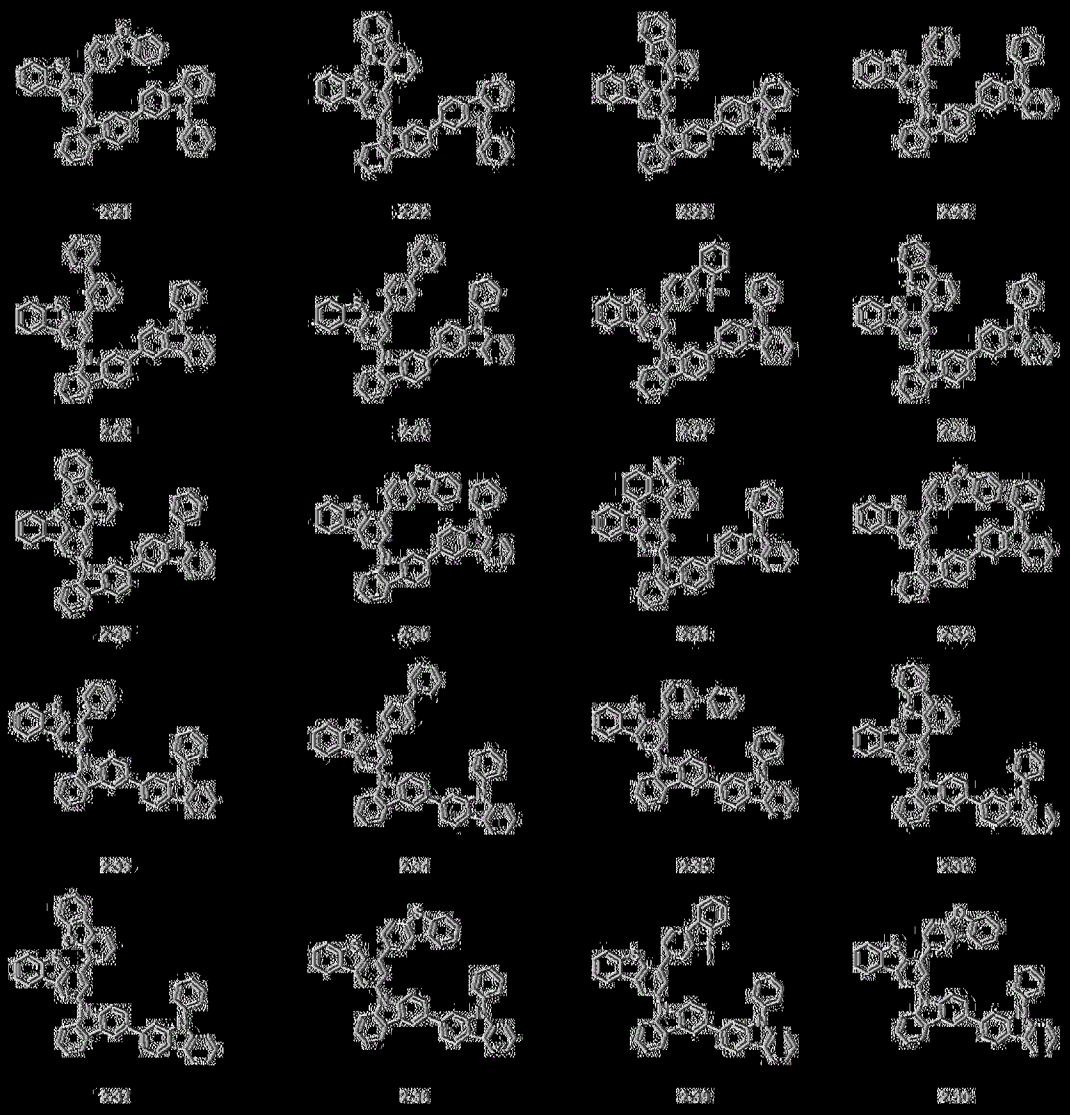
r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

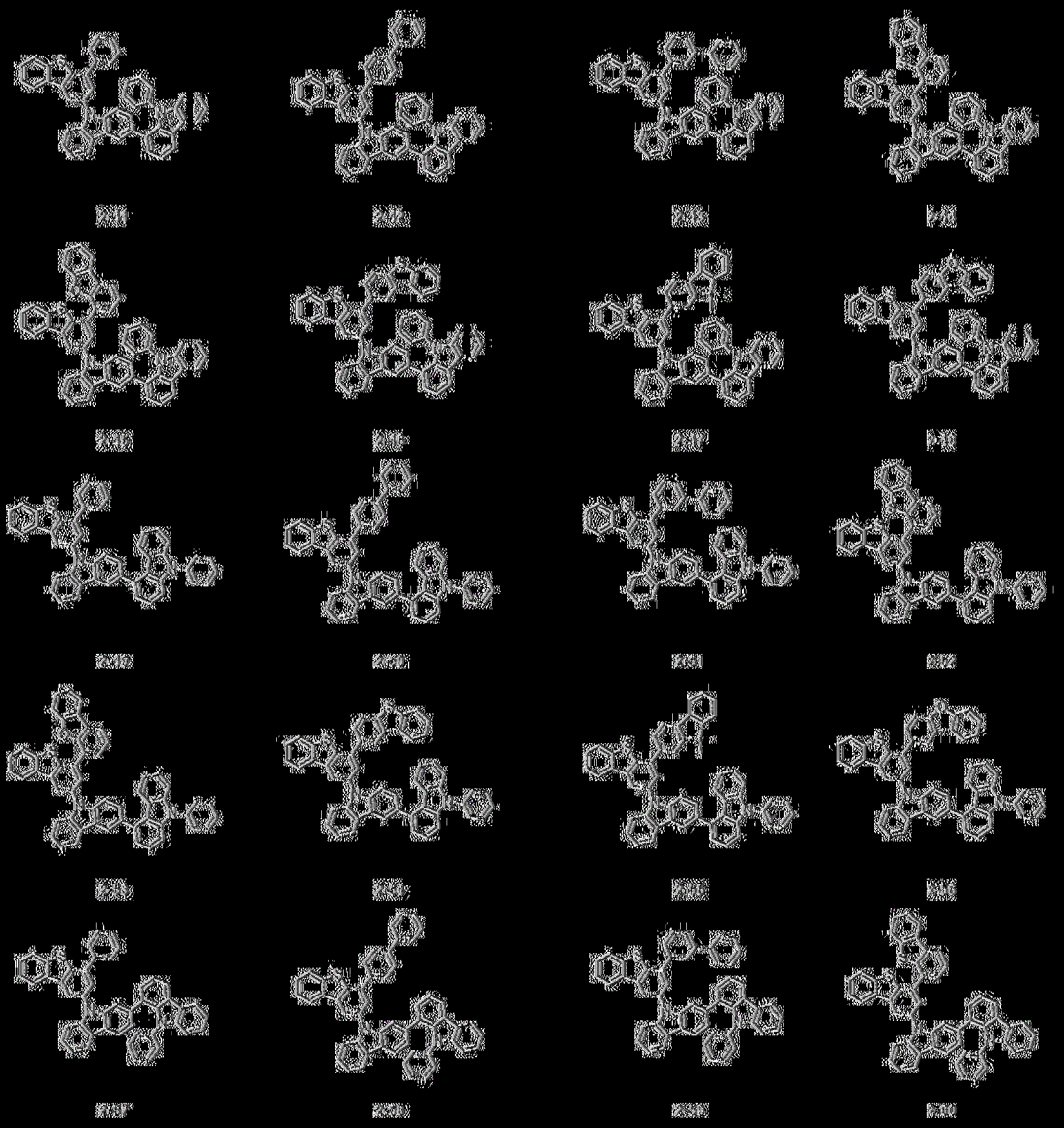
r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或

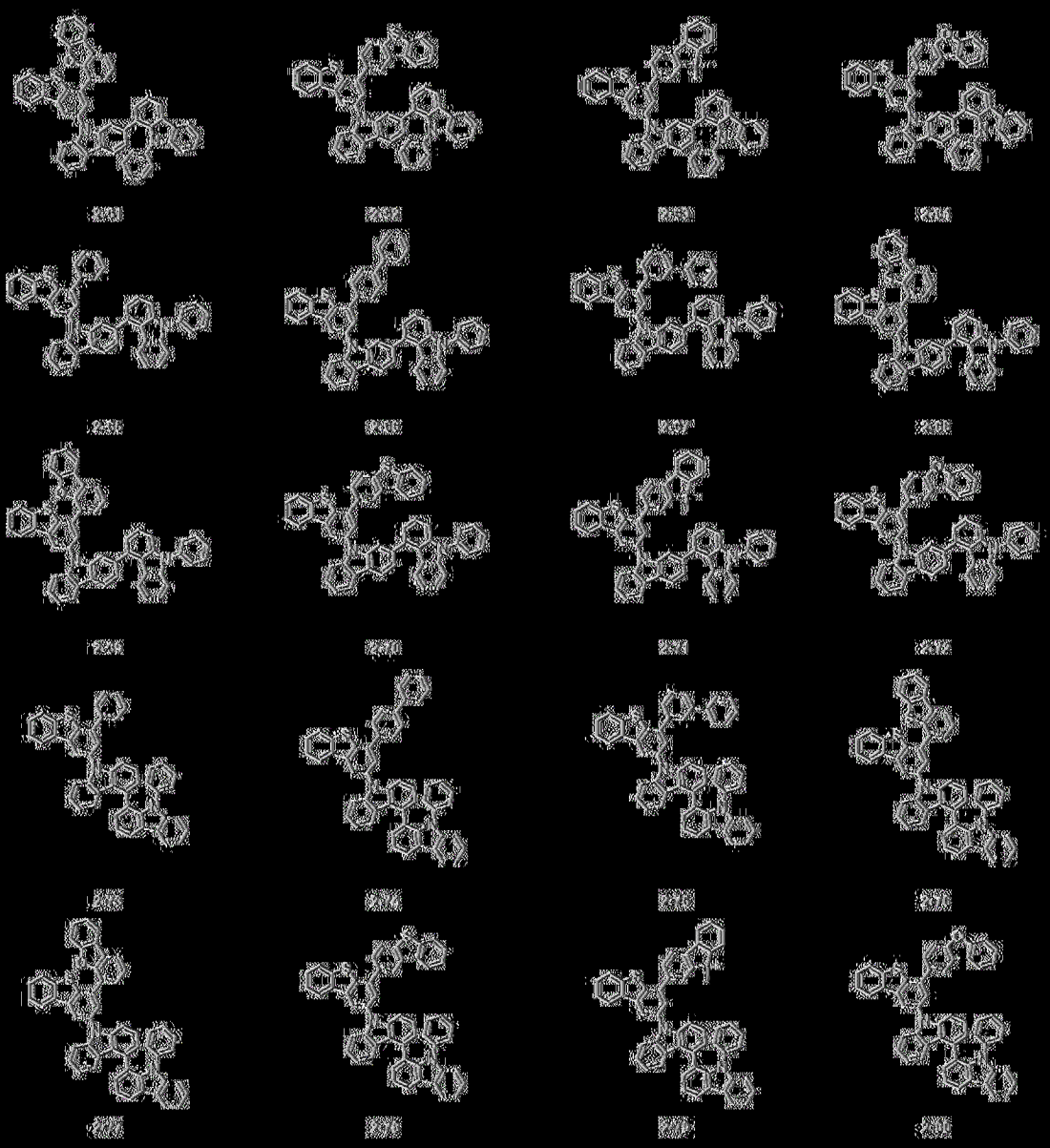
不同。

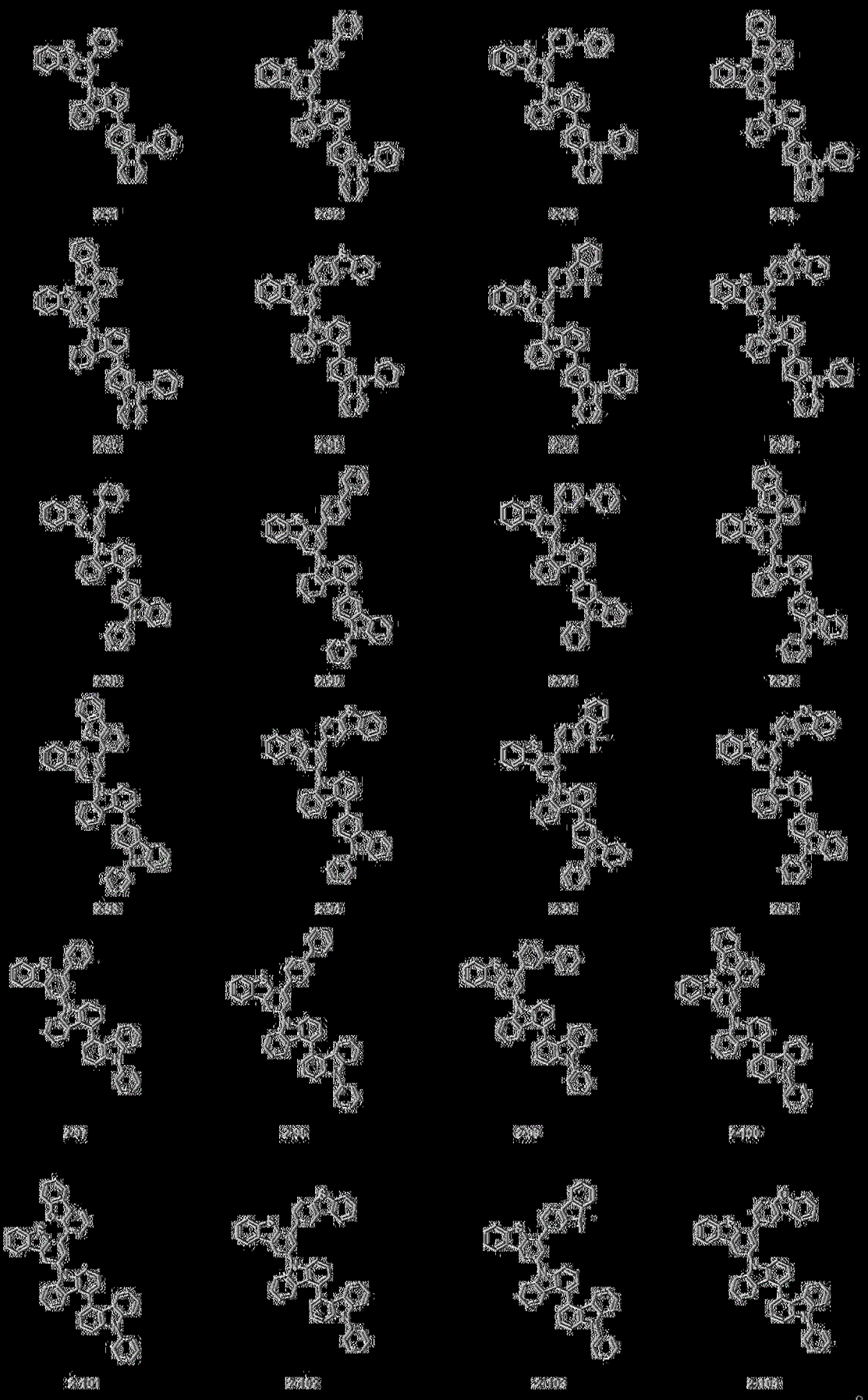
[請求項11] 如請求項 10 所述的有機發光元件，其中化學式 2 由以下化合物中的任一者表示：





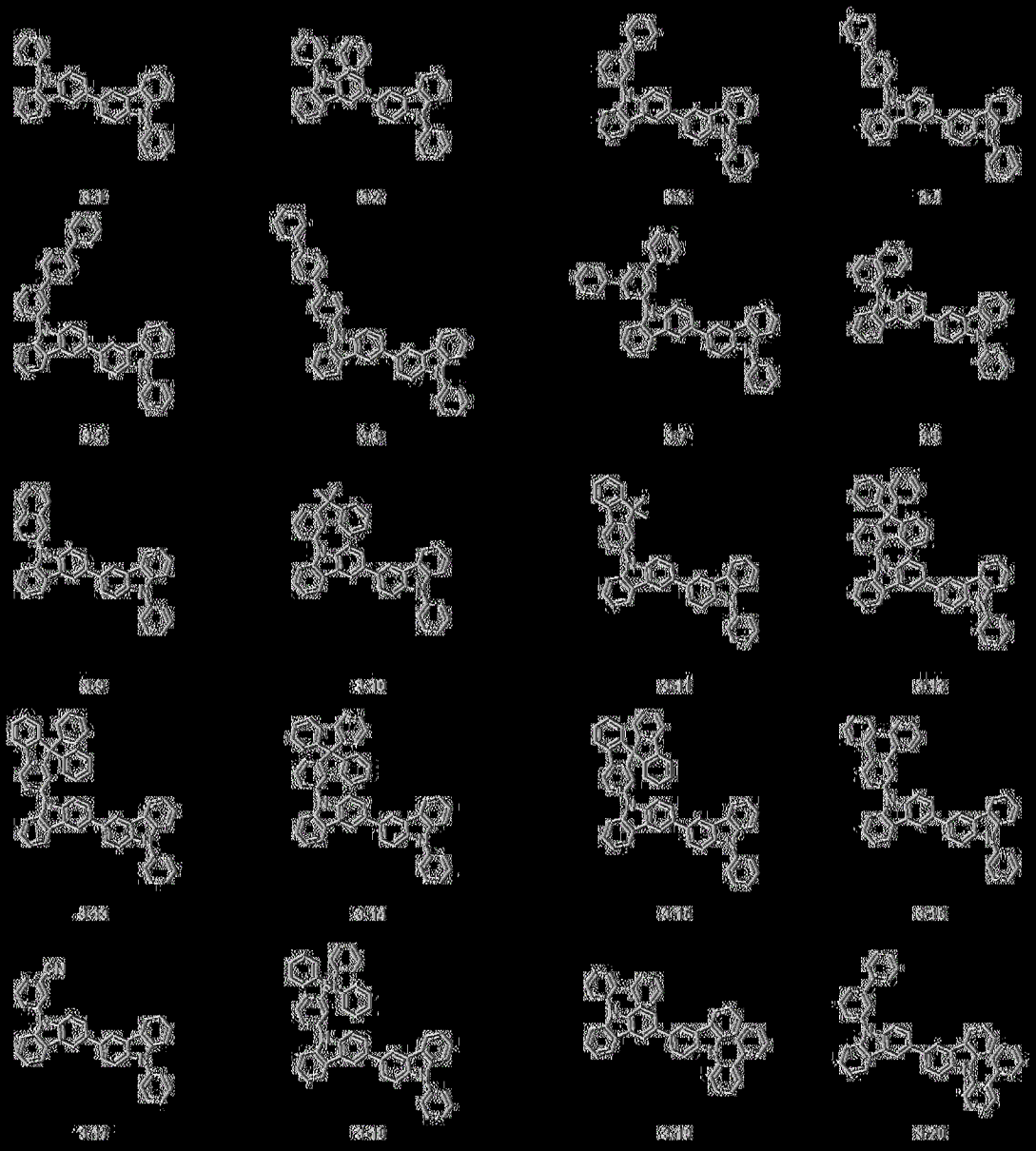


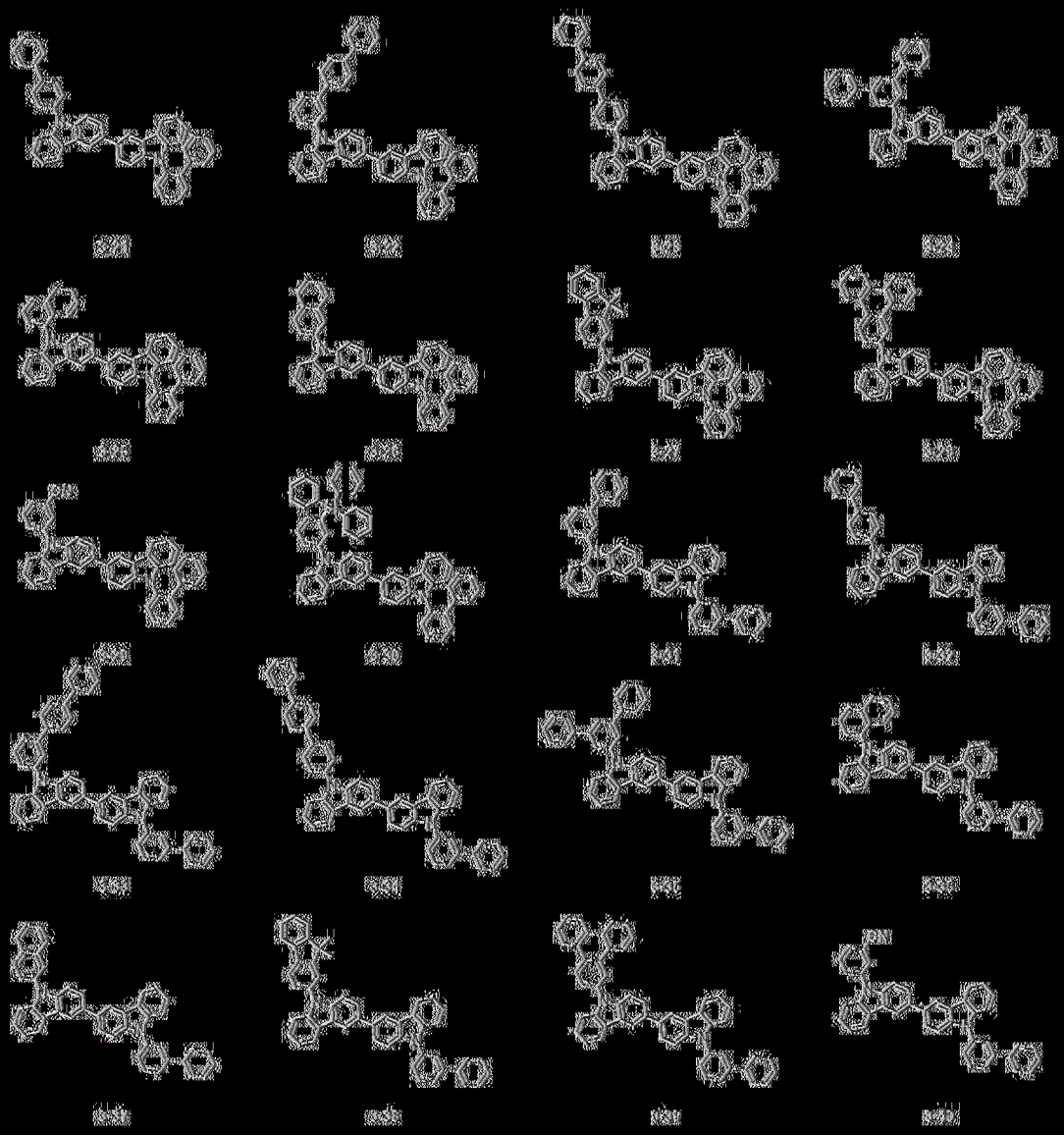


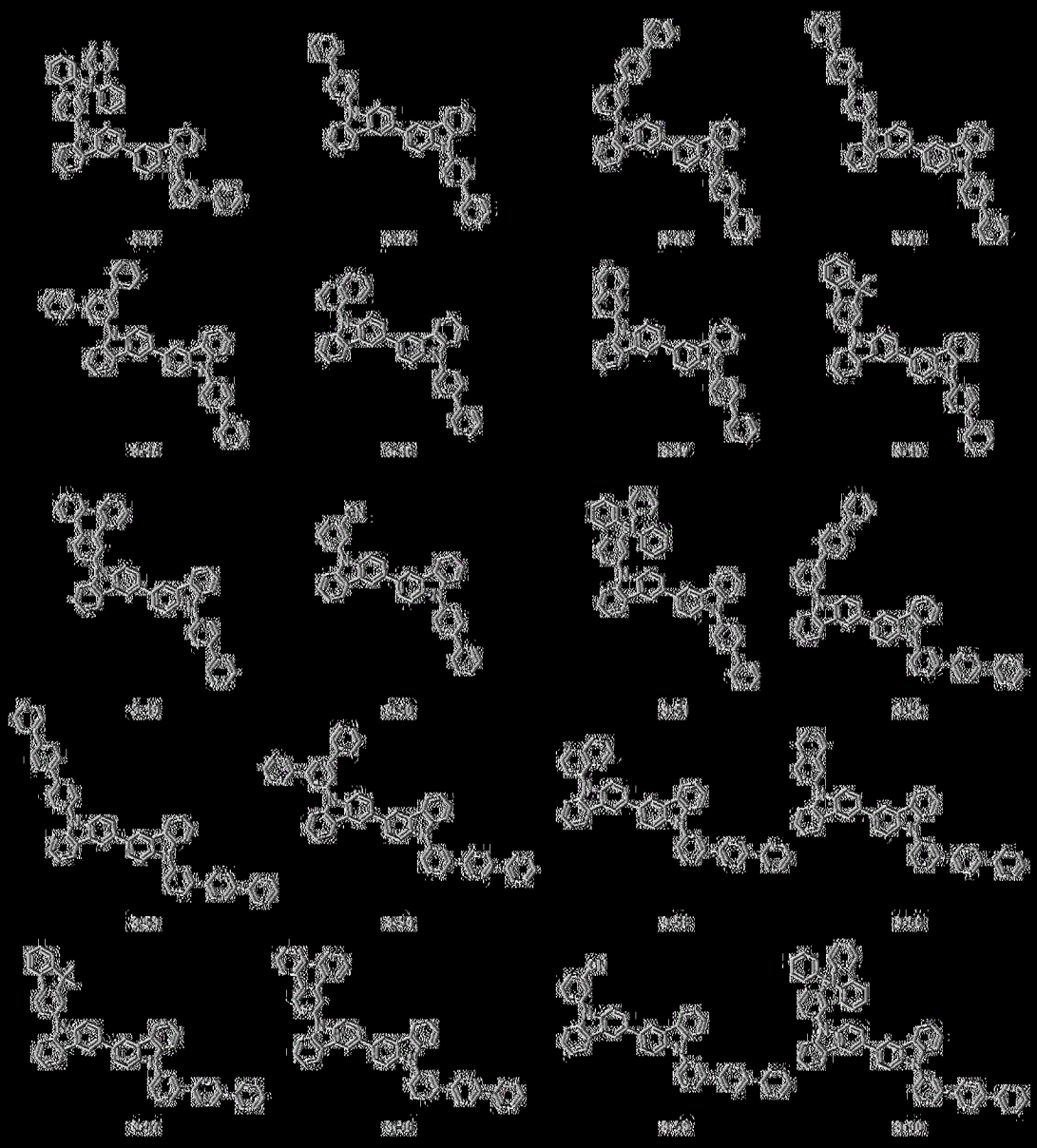


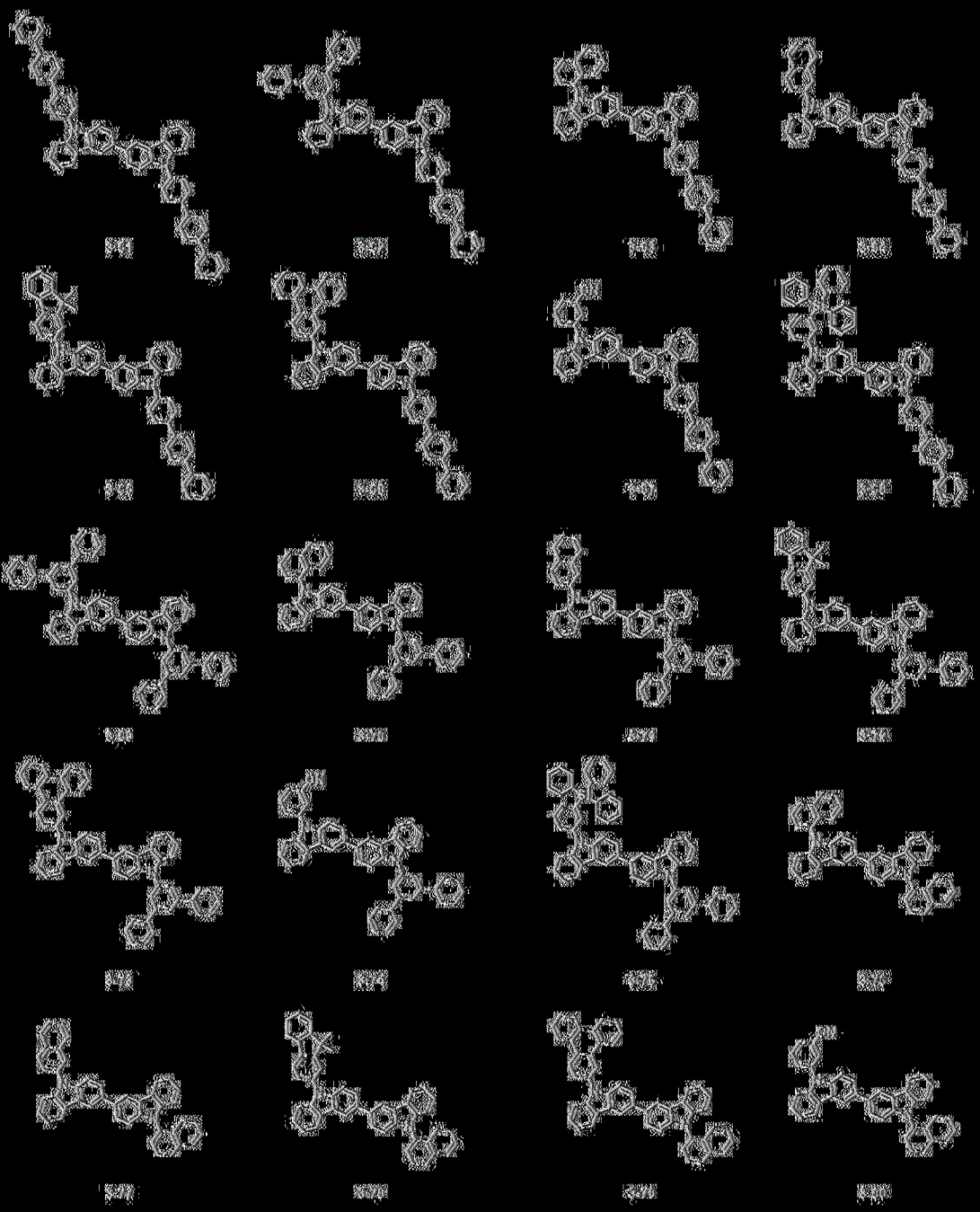
[請求項12] 如請求項 10 所述的有機發光元件，其中化學式 3 由

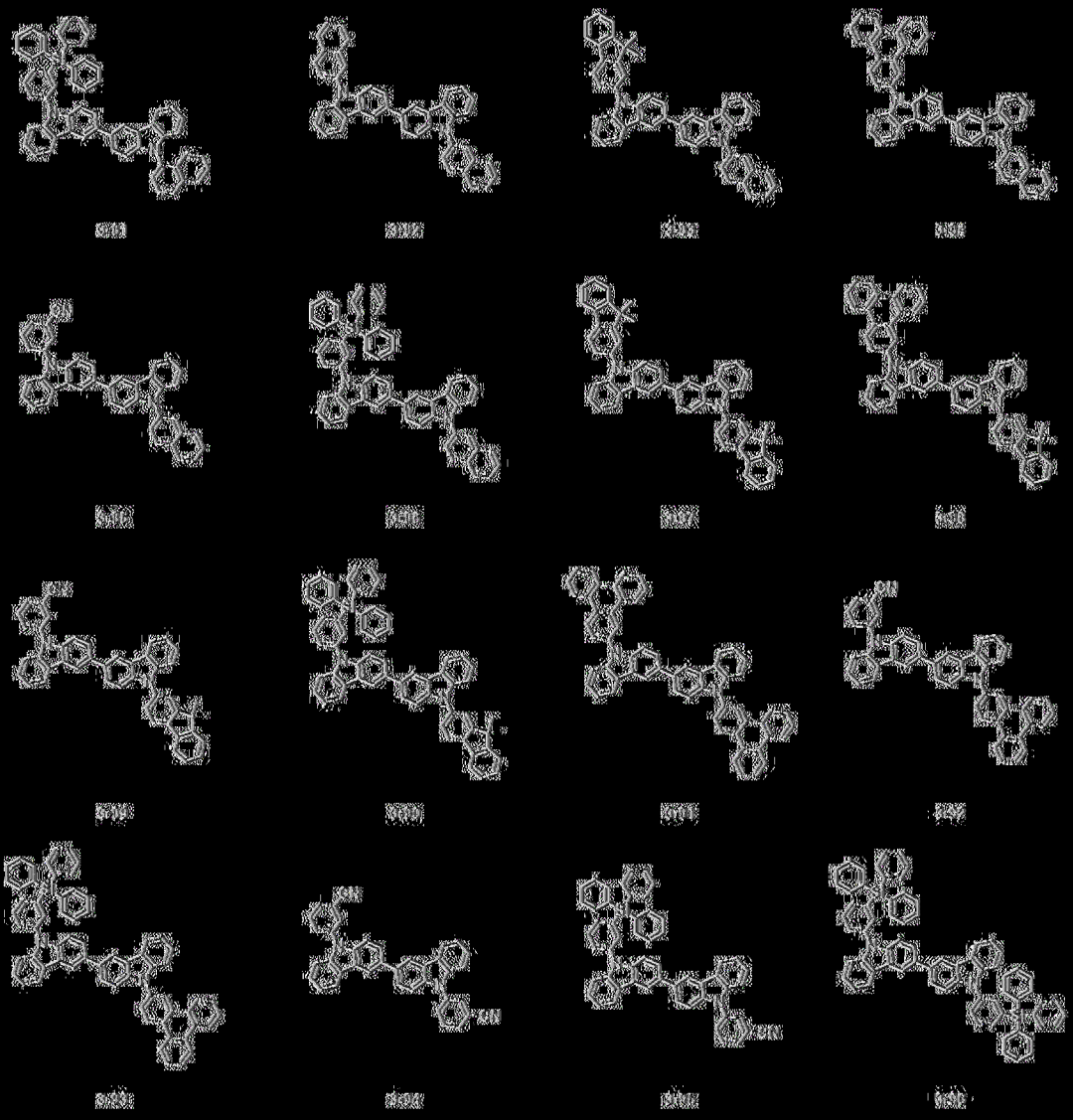
以下化合物中的任一者表示：











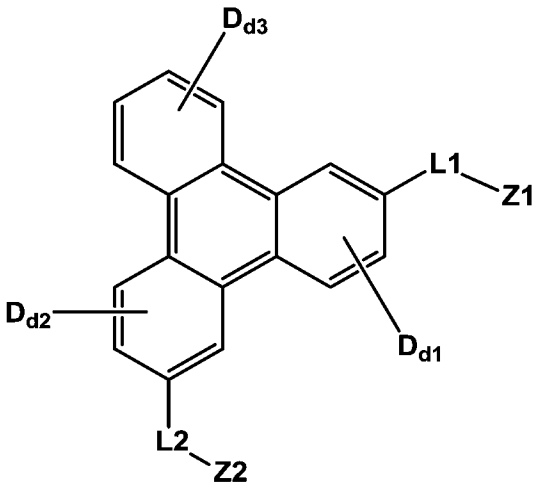
。

[請求項13]一種用於形成有機材料層的組合物，所述組合物包括：

以下化學式1的化合物；以及

以下化學式2或化學式3的化合物：

[化學式1]



其中，在化學式 1 中，

d1 及 d2 各自為 0 至 3 的整數，

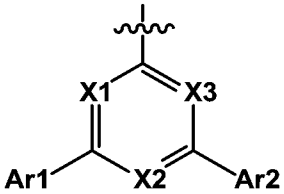
d3 為 0 至 4 的整數，

L1 與 L2 彼此相同或不同，且各自獨立地為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

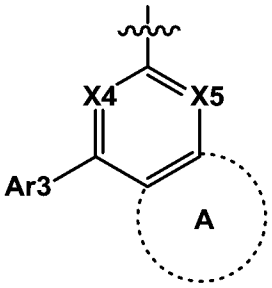
Z1 與 Z2 彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由以下化學式 1-1 至化學式 1-4 中的任一者表示的雜芳基，且

Z1 及 Z2 中的至少一者為由以下化學式 1-1 至化學式 1-3 中的任一者表示的雜芳基，

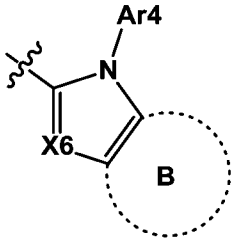
[化學式 1-1]



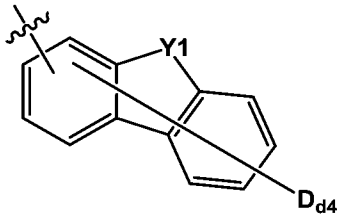
[化學式 1-2]



[化學式 1-3]



[化學式 1-4]



在化學式 1-1 至化學式 1-4 中，

d4 為 0 至 7 的整數，

X1 至 X6 各自為 N 或 CR，

X1 至 X3 中的至少一者為 N，

X4 及 X5 中的至少一者為 N，

Y1 為 O、S 或 NR′，

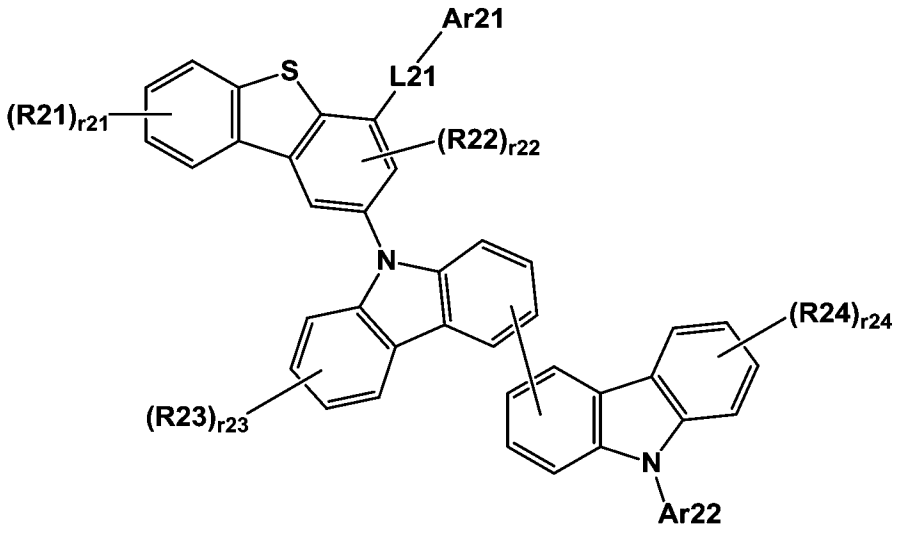
R、R′、Ar1 至 Ar4 各自獨立地為氫、氘、鹵基、氰基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

A 及 B 各自為經取代或未經取代的單環芳環或多環芳環，或經取代或未經取代且包含 O 或 S 的單環雜環或多環雜環，且

當 L1 為直接鍵且 Z1 為由化學式 1-1 表示的所述雜芳基時，

Z2 為經取代或未經取代的矽烷基、經取代或未經取代的芴基或由化學式 1-2 至化學式 1-4 中的任一者表示的三環或高於三環的雜芳基，

[化學式 2]



在化學式 2 中，

R21 至 R24 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

L21 為直接鍵、經取代或未經取代的 C6 至 C60 伸芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 伸雜芳基，

Ar21 及 Ar22 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

r21 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R21 彼此相同或不同，

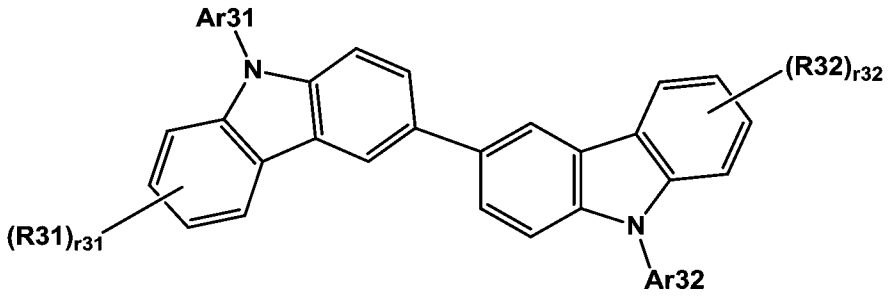
r22 為 1 或 2，且當為 2 時，R22 彼此相同或不同，

r23 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R23 彼此相同或

不同，且

r24 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R24 彼此相同或不同，

[化學式 3]



在化學式 3 中，

R31 及 R32 各自獨立地為氫、氘、鹵基、經取代或未經取代的 C1 至 C60 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C60 環烷基、經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C60 雜芳基，

Ar31 及 Ar32 各自獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C60 芳基，或經取代或未經取代且包含 O 或 N 的 C2 至 C60 雜芳基，

r31 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R31 彼此相同或不同，且

r32 為 1 至 4 的整數，且當為 2 或大於 2 時，R32 彼此相同或不同。

【請求項14】如請求項 13 所述的用於形成有機材料層的組合物，其中所述化學式 1 的化合物與所述化學式 2 或化學式 3 的化合物具有 1:10 至 10:1 的重量比。