



(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 201008942 A1

(43)公開日：中華民國 99 (2010) 年 03 月 01 日

(21)申請案號：098120989

(22)申請日：中華民國 98 (2009) 年 06 月 23 日

(51)Int. Cl.：

C07D471/22 (2006.01)

C07D239/70 (2006.01)

C07D401/04 (2006.01)

C07D487/22 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30)優先權：2008/07/18 歐洲專利局 08160714.5

(71)申請人：席巴控股股份有限公司 (瑞士) CIBA HOLDING INC. (CH)

瑞士

(72)發明人：夏佛 湯瑪斯 SCHAFFER, THOMAS (DE)；艾成柏格 湯瑪斯 EICHENBERGER, THOMAS (CH)；巴登 克里斯汀那 BARDON, KRISTINA (DE)；瑞奇 安德拉 RICCI, ANDREA (IT)；奇坡亞凡 那塔利亞 CHEBOTAREVA, NATALIA (RU)

(74)代理人：惲軼群；陳文郎

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：16 項 圖式數：0 共 126 頁

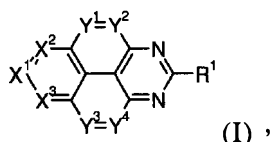
(54)名稱

用於電子應用之氮芘

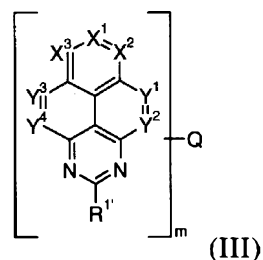
AZAPYRENES FOR ELECTRONIC APPLICATIONS

(57)摘要

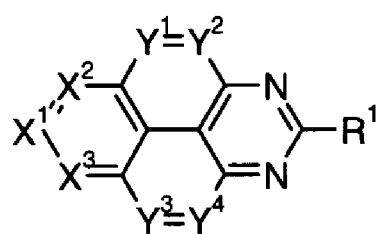
本發明係關於一種電子裝置，特別是一種電致發光裝置，其包含式



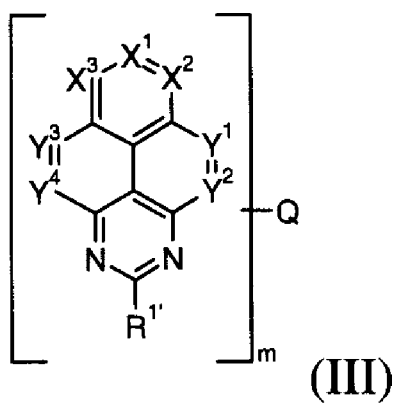
或



之氮芘，其中 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 X^1 、 X^2 及 X^3 彼此各自獨立地為 N 或 CR^4 ；附帶條件為基團 X^1 、 X^2 及 X^3 之至少一個為基團 CR^4 ； R^1 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基； R^4 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；或彼此毗連的任何取代基 R^1 、 $R^{1'}$ 及 R^4 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統；m 為整數 1 至 6；及 R^{100} 、 R^{101} 及 R^{102} 彼此各自獨立地為可選擇性經取代的 C_1 - C_8 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_7 - C_{12} 芳烷基；及 Q 為連結基團；附帶條件為在式 III 之化合物中，取代基 $R^{1'}$ 或 R^4 之至少一個為基團 Q；其特別作為磷光發射劑的宿主、電子傳輸材料或發射材料。該宿主可與磷光材料作用以提供電致發光裝置改良的效率、穩定性、製造能力或光譜特徵。



(I) ,



(III)



(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 201008942 A1

(43)公開日：中華民國 99 (2010) 年 03 月 01 日

(21)申請案號：098120989

(22)申請日：中華民國 98 (2009) 年 06 月 23 日

(51)Int. Cl.：

C07D471/22 (2006.01)

C07D239/70 (2006.01)

C07D401/04 (2006.01)

C07D487/22 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30)優先權：2008/07/18 歐洲專利局 08160714.5

(71)申請人：席巴控股股份有限公司 (瑞士) CIBA HOLDING INC. (CH)

瑞士

(72)發明人：夏佛 湯瑪斯 SCHAFFER, THOMAS (DE)；艾成柏格 湯瑪斯 EICHENBERGER, THOMAS (CH)；巴登 克里斯汀那 BARDON, KRISTINA (DE)；瑞奇 安德拉 RICCI, ANDREA (IT)；奇坡亞凡 那塔利亞 CHEBOTAREVA, NATALIA (RU)

(74)代理人：惲軼群；陳文郎

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：16 項 圖式數：0 共 126 頁

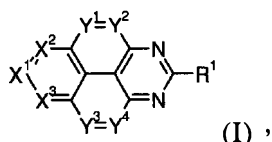
(54)名稱

用於電子應用之氮芘

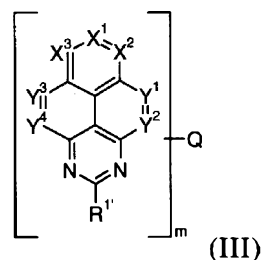
AZAPYRENES FOR ELECTRONIC APPLICATIONS

(57)摘要

本發明係關於一種電子裝置，特別是一種電致發光裝置，其包含式



或



之氮芘，其中 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 X^1 、 X^2 及 X^3 彼此各自獨立地為 N 或 CR^4 ；附帶條件為基團 X^1 、 X^2 及 X^3 之至少一個為基團 CR^4 ； R^1 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基； R^4 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；或彼此毗連的任何取代基 R^1 、 $R^{1'}$ 及 R^4 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統；m 為整數 1 至 6；及 R^{100} 、 R^{101} 及 R^{102} 彼此各自獨立地為可選擇性經取代的 C_1 - C_8 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_7 - C_{12} 芳烷基；及 Q 為連結基團；附帶條件為在式 III 之化合物中，取代基 $R^{1'}$ 或 R^4 之至少一個為基團 Q；其特別作為磷光發射劑的宿主、電子傳輸材料或發射材料。該宿主可與磷光材料作用以提供電致發光裝置改良的效率、穩定性、製造能力或光譜特徵。

六、發明說明：

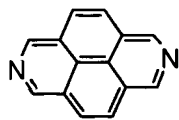
【發明所屬之技術領域】

本發明係關於一種電子裝置，特別關於一種包含氮芑的電致發光裝置，其中該氮芑特別作為磷光發射劑的宿主、電子傳輸材料或發射材料。該宿主可與磷光材料作用以提供電致發光裝置具有改良的效率、穩定性、製造能力或光譜特徵。

【先前技術】

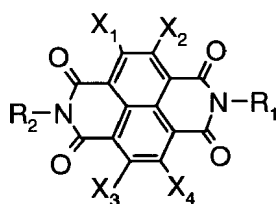
氮芑及其合成已描述例如在下列公告中：A.V.阿克森諾夫(Aksenov)等人，四面體快迅(Tetrahedron Letters) (2008)1808-1811；A.V.阿克森諾夫等人，四面體快迅(2008)707-709；I.V.阿克森諾伐(Aksenova)等人，雜環化合物化學(Chemistry of Heterocyclic Compounds) (2007)665-666；替爾里岸(Till Riehm)等人，化學-歐洲期刊(Chemistry-A European Journal) (2007) 7317-7329；I.V.波羅夫雷夫(Borovlev)等人，雜環化合物化學 (2002)968-973及(2003)1417-1442。

US 2004076853係關於一種有機發光裝置，其包括一基材、配置在該基材上之陽極與陰極、及一配置在該陽極與陰極間之發光層，其中該發光層包含宿主與至少一種摻雜物。選擇該發光層的宿主，以便其包括一包含至少二種組分的混合物之固態有機材料，其中該組分之一能形成單體狀態及團聚狀態二者。較佳的雜環化合物(作為發光層的第一宿主組分之材料)的表列尤其包括苯并[lmn][3,8]啡



啉(2,7-二氮蒽)。

JP 2255789揭示出一種有機電致發光元件，其連續地具有一正電洞注入及傳輸層、一發射層及選擇性一在陽極與陰極(其中該電極之至少一個透明)上的正電洞抑制層，其中使用具有400-800奈米最大螢光波長的茶衍生物

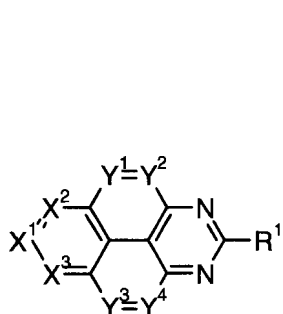


[例如，4,5-二甲氧基茶-1,8-二羧酸(2'-丙基)戊基醯亞胺、1,5-二氟基茶-4,8-二羧酸異丁基酯]作為發射層。

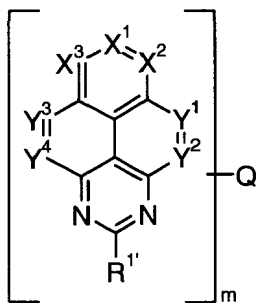
儘管這些發展，於此仍然需要一種包含新型電子傳輸、發射及/或宿主材料的EL裝置，特別是會與磷光材料作用以提供電致發光裝置具有改良的效率、穩定性、製造能力及/或光譜特徵之宿主。

【發明內容】

因此，本發明提供一種電子裝置，其包括式



(I)或



(III)之化合物，其中

Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 X^1 、 X^2 及 X^3 彼此各自獨立地為N或 CR^4 ；

附帶條件為基團 X^1 、 X^2 及 X^3 之至少一個為基團 CR^4 ；

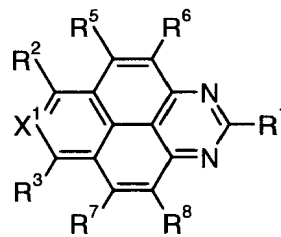
R^1 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；

$R^{1'}$ 及 R^4 彼此各自獨立地為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；或

彼此毗連的任何取代基 $R^{1'}$ 、 R^1 及 R^4 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統；

m 為整數1至6；及

R^{100} 、 R^{101} 及 R^{102} 彼此各自獨立地為可選擇性經取代之 C_1 - C_8 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_7 - C_{12} 芳烷基；及 Q 為連結基團；
附帶條件為在式III之化合物中，取代基 $R^{1'}$ 或 R^4 的至少一個為基團 Q 。



該式I之化合物特別為式 (II) 之化合物

物，其中 X^1 為N或 CR^4 ；

R^1 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 彼此各自獨立地為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；或

彼此毗連的任何取代基 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統；及 R^{100} 、 R^{101} 與 R^{102} 如上述定義。

本發明之電子裝置為一種電致發光(EL)裝置較佳。式I或III之化合物可使用在有機發光二極體(OLED)中作為磷

光化合物的宿主、作為發射及/或電子傳輸材料。根據類似於應用至有機發光裝置的原理，本發明之化合物可作用在有機電子裝置中，包括有機太陽能電池、有機光導體及有機電晶體。除了有機發光裝置外，尚有許多其它型式的半導體裝置。全部共有的是，其皆存在有一或多種半導體材料。半導體裝置已經例如由S.M.史熱(Sze)描述在半導體裝置物理(第2版，約翰威利及宋斯(John Wiley and Sons)，紐約(1981))中。此等裝置包括整流器、電晶體(其有許多型式，包括p-n-p、n-p-n及薄膜電晶體)、光導體、限流器、熱敏電阻、p-n接面、場效應二極體、蕭特基二極體等等。在每種半導體裝置中，該半導體材料與一或多種金屬或絕緣體結合以形成該裝置。半導體裝置可藉由已知方法製備或製造，諸如例如，由彼得凡忍特(Peter Van Zant)描述在微晶片製造(Microchip Fabrication)(第四版，麥克葛羅希爾(McGraw-Hill)，紐約(2000))中的那些。可使用本發明之材料之特別有用的電晶體裝置(薄膜電晶體(TFT))型式通常包括閘極電極、在該閘極電極上的閘極介電質、與該閘極介電質毗連之源極電極及汲極電極、及與該閘極介電質毗連及與該源極及汲極電極毗連之半導體層(參見例如S.M.史熱的半導體裝置物理第492頁(2^{sup}.nd版本，約翰威利及宋斯，紐約(1981)))。這些組分可以多種組態組合。例如，在有機薄膜電晶體(OTFT)中具有一有機半導體層。此等裝置的實施例描述在WO 2007/118799及WO 2009/047104中。

對異質接面太陽能電池(塊材異質接面太陽能電池)來

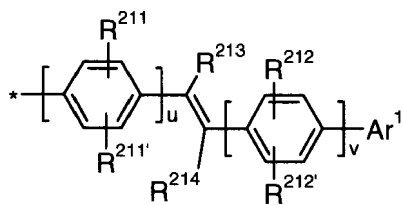
說，該活性(光活性)層包含一p型及n型有機半導體混合物。在該活性層中發生由光引發的電荷分離。在此等裝置中，式I或III之化合物可較佳使用作為n型半導體。異質接面太陽能電池以下列順序包含其它層：a)一陰極(電極)；b)選擇性一過渡層，諸如鹼金屬鹵化物，特別是氟化鋰；c)一包含式I或III之化合物的活性(光活性)層；d)選擇性一平滑層；e)一陽極(電極)；f)一基材。此等裝置之實施例描述在WO 2008/000664及WO 2009/047104中。

R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫或有機取代基較佳。

該連結基團Q為例如伸芳基或雜伸芳基。

更佳為式II之化合物，其中 X^1 為N或 CR^4 ；

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 彼此各自獨立地為H、 C_1 - C_{18} 烷基、由E取代及/或由D岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由G取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由G取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基、 C_2 - C_{18} 烯基、 C_2 - C_{18} 炔基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、由E取代及/或由D岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基、 C_7 - C_{25} 芳烷基、 $-CO-R^{28}$ 、 $-CN$ 、或基團 $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$ 、



、或基團 $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$ ，其中

u 為0或1； v 為0或1；

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為H、 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基；

R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18} 烷基；

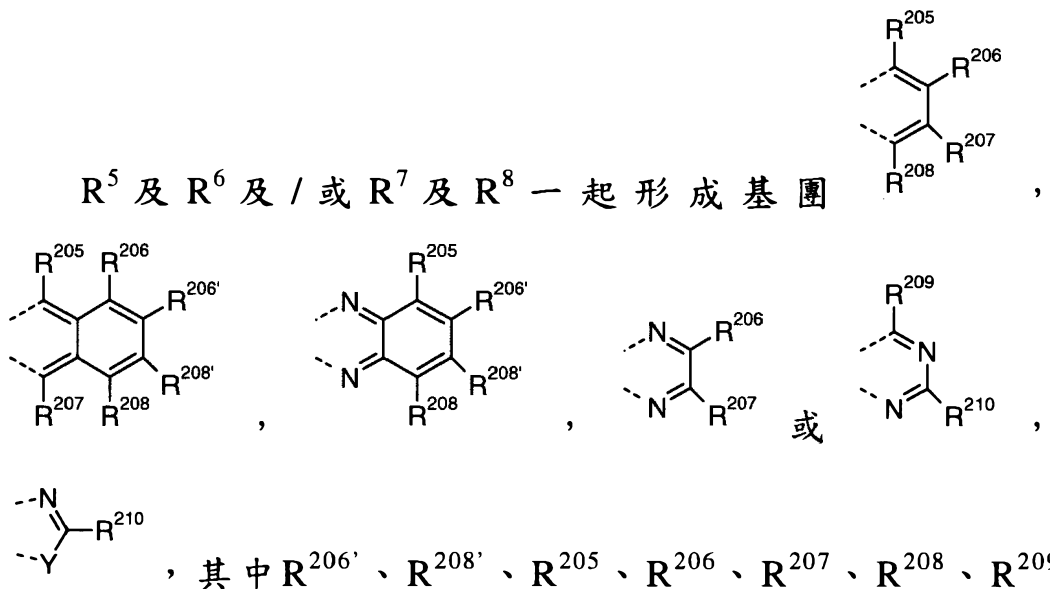
Ar^1 為 $-NR^{25'}R^{26'}$ 、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基或由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基；

其中 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為 C_1 - C_{18} 烷基、由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基；或

$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們所鍵結的氮原子一起形成一可選擇性經取代之雜芳香族環或環系統；

L^1 為單鍵或橋接單元 BU；

R^5 及 R^6 及 / 或 R^7 及 R^8 一起形成基團



及 R^{210} 彼此各自獨立地為 H、 C_1 - C_{18} 烷基、由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、或由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基、 C_2 - C_{18} 烯基、 C_2 - C_{18} 炔基、 C_7 - C_{25} 芳烷基、CN 或 $-CO-R^{28}$ ；

Y 為 O 或 $N-R^{25}$ ；

D 為 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR^{25}-$ 、

$-\text{SiR}^{30}\text{R}^{31}-$ 、 $-\text{POR}^{32}-$ 、 $-\text{CR}^{23}=\text{CR}^{24}-$ 或 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ ；及

E 為 $-\text{OR}^{29}$ 、 $-\text{SR}^{29}$ 、 $-\text{NR}^{25}\text{R}^{26}$ 、 $-\text{COR}^{28}$ 、 $-\text{COOR}^{27}$ 、 $-\text{CONR}^{25}\text{R}^{26}$ 、 $-\text{CN}$ 或鹵素；

G 為 E、 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基、由 D 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 全氟烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基、或由 E 取代及/或由 D 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基，其中

R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 及 R^{26} 彼此各自獨立地為 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基或 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或

R^{25} 及 R^{26} 一起形成一五或六員環或環系統；

R^{27} 為 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基或 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；

R^{28} 為 H； $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基或 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；

R^{29} 為 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基或 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；

R^{30} 及 R^{31} 彼此各自獨立地為 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基、 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基或由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；及

R^{32} 為 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基、 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基或由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基。

L^1 為單鍵、 $-(\text{CR}^{47}=\text{CR}^{48})_{m2}-$ 、 $-(\text{Ar}^3)_{m3}-$ 、 $-\text{[Ar}^3(\text{Y}^1)_{m5}]_{m4}-$ 、 $-\text{[(Y}^1)_{m5}\text{Ar}^3]_{m4}-$ 或 $-\text{[Ar}^3(\text{Y}^2)_{m5}\text{Ar}^4]_{m4}-$ ，其中

Y^1 為 $-(\text{CR}^{47}=\text{CR}^{48})-$ ；

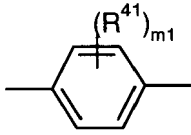
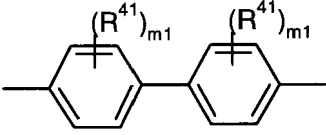
Y^2 為 NR^{49} 、O、S、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{O}$ ，其中 R^{49} 為可選擇

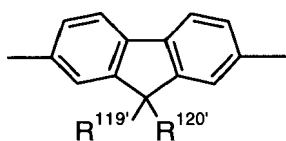
性由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基取代的 C_6 - C_{18} 芳基； C_1 - C_{18} 烷基；或由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基；

R^{47} 及 R^{48} 彼此各自獨立地為氫、 C_1 - C_{20} 烷基、或可選擇性由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基；

m_5 為整數 1 至 10、 m_2 為整數 1 至 10、 m_3 為整數 1 至 5、 m_4 為整數 1 至 5；

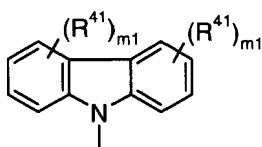
Ar^3 及 Ar^4 彼此各自獨立地為可選擇性經取代的伸芳基或雜伸芳基，其中 G 如上述定義。

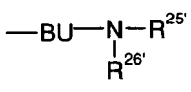
L^1 為單鍵或式  ,  , 或



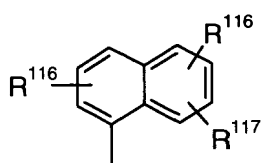
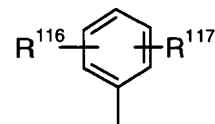
之橋接單元 BU 較佳。

甚至更佳的式 I 或 III 之化合物為其中 $-L^1-X^1$ 為式

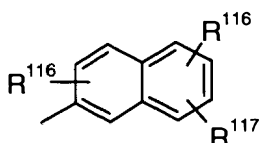


之基團、 $-NR^{25'}R^{26'}$ 或基團  , 其中

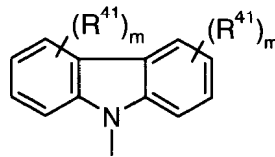
$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為



, 或

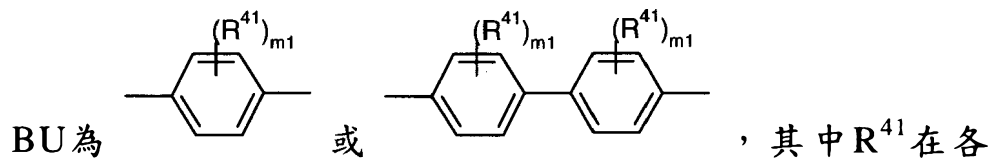


; 或 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們所鍵



結的氮原子一起形成式 之基團；

R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由-O-岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；



者事件中可相同或不同及可為選擇性由-O-岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基； m_1 為 0、1 或 2。

較佳的是， R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為 H； C_1 - C_{12} 烷基，諸如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、三級丁基、2-甲基丁基、正戊基、異戊基、正己基、2-乙基己基或正庚基；由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{12} 烷基，諸如 $-\text{CH}_2\text{OCH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$ 或 $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 、 C_6 - C_{14} 芳基(諸如苯基、萘基或聯苯基)、 C_5 - C_{12} 環烷基(諸如環己基)、由 G 取代的 C_6 - C_{14} 芳基(諸如 $-\text{C}_6\text{H}_4\text{OCH}_3$ 、 $-\text{C}_6\text{H}_4\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_6\text{H}_3(\text{OCH}_3)_2$ 或 $-\text{C}_6\text{H}_3(\text{OCH}_2\text{CH}_3)_2$ 、 $-\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ 、 $-\text{C}_6\text{H}_3(\text{CH}_3)_2$ 、 $-\text{C}_6\text{H}_2(\text{CH}_3)_3$ 或 $-\text{C}_6\text{H}_4\text{tBu}$ 。

較佳的是， R^{119} 及 R^{120} 彼此各自獨立地為 C_1 - C_{12} 烷基，諸如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、二級丁基、己基、辛基或 2-乙基-己基；由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{12} 烷基，諸如 $-\text{CH}_2(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_w\text{OCH}_3$ ， $w=1$ 、2、3 或 4； C_6 - C_{14}

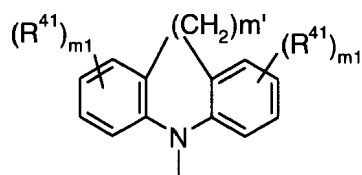
芳基，諸如苯基、萘基或聯苯基；由G取代的C₆-C₁₄芳基，諸如 -C₆H₄OCH₃、-C₆H₄OCH₂CH₃、-C₆H₃(OCH₃)₂、-C₆H₃(OCH₂CH₃)₂、-C₆H₄CH₃、-C₆H₃(CH₃)₂、-C₆H₂(CH₃)₃或-C₆H₄tBu；或R¹¹⁹與R¹²⁰一起形成4至8員環，特別是5或6員環，諸如可選擇性由C₁-C₈烷基取代的環己基或環戊基。

D為-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO₂-、-O-、-NR²⁵-較佳，其中R²⁵為C₁-C₁₂烷基，諸如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基或二級丁基；或C₆-C₁₄芳基，諸如苯基、萘基或聯苯基。

E為-OR²⁹、-SR²⁹、-NR²⁵R²⁵、-COR²⁸、-COO-R²⁷、-CONR²⁵R²⁵或-CN較佳；其中R²⁵、R²⁷、R²⁸及R²⁹彼此各自獨立地為C₁-C₁₂烷基，諸如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、己基、辛基或2-乙基-己基；或C₆-C₁₄芳基，諸如可選擇性經取代之苯基、萘基或聯苯基。

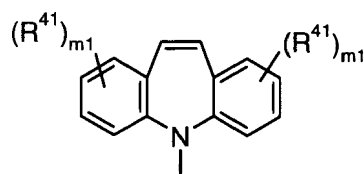
G具有與E相同的較佳選擇或為C₁-C₁₈烷基，特別是C₁-C₁₂烷基，諸如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、己基、辛基或2-乙基-己基。

由R²⁵及R²⁶與它們所鍵結的氮原子一起形成之雜芳香

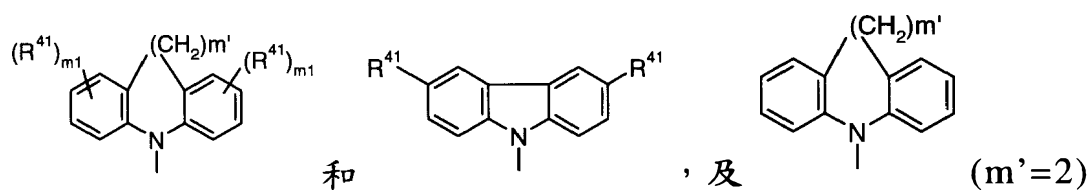


族環或環系統的實施例有

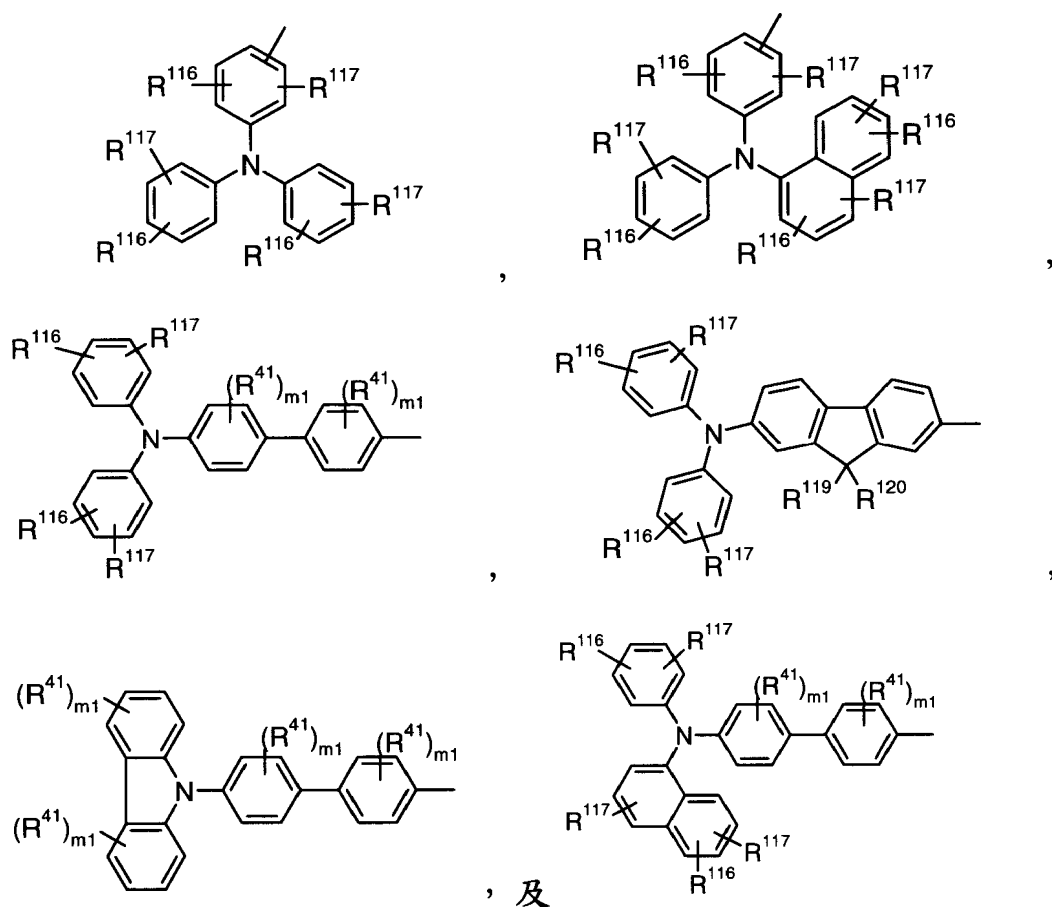
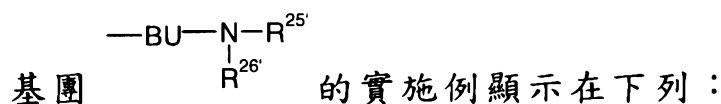
，或



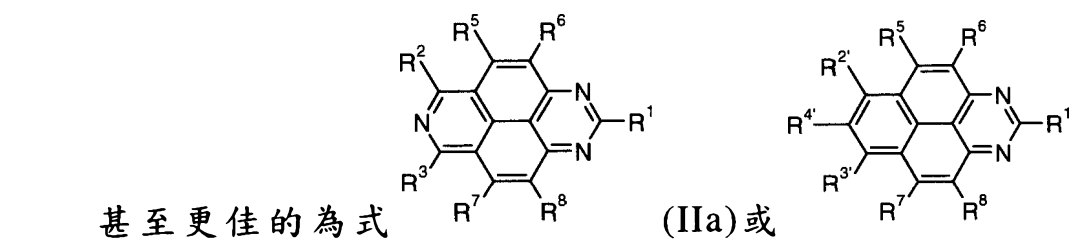
；或m'為0、1或2，m1為0、1或2。



之實施例有，其中R⁴¹為H或C₁-C₁₈烷基。



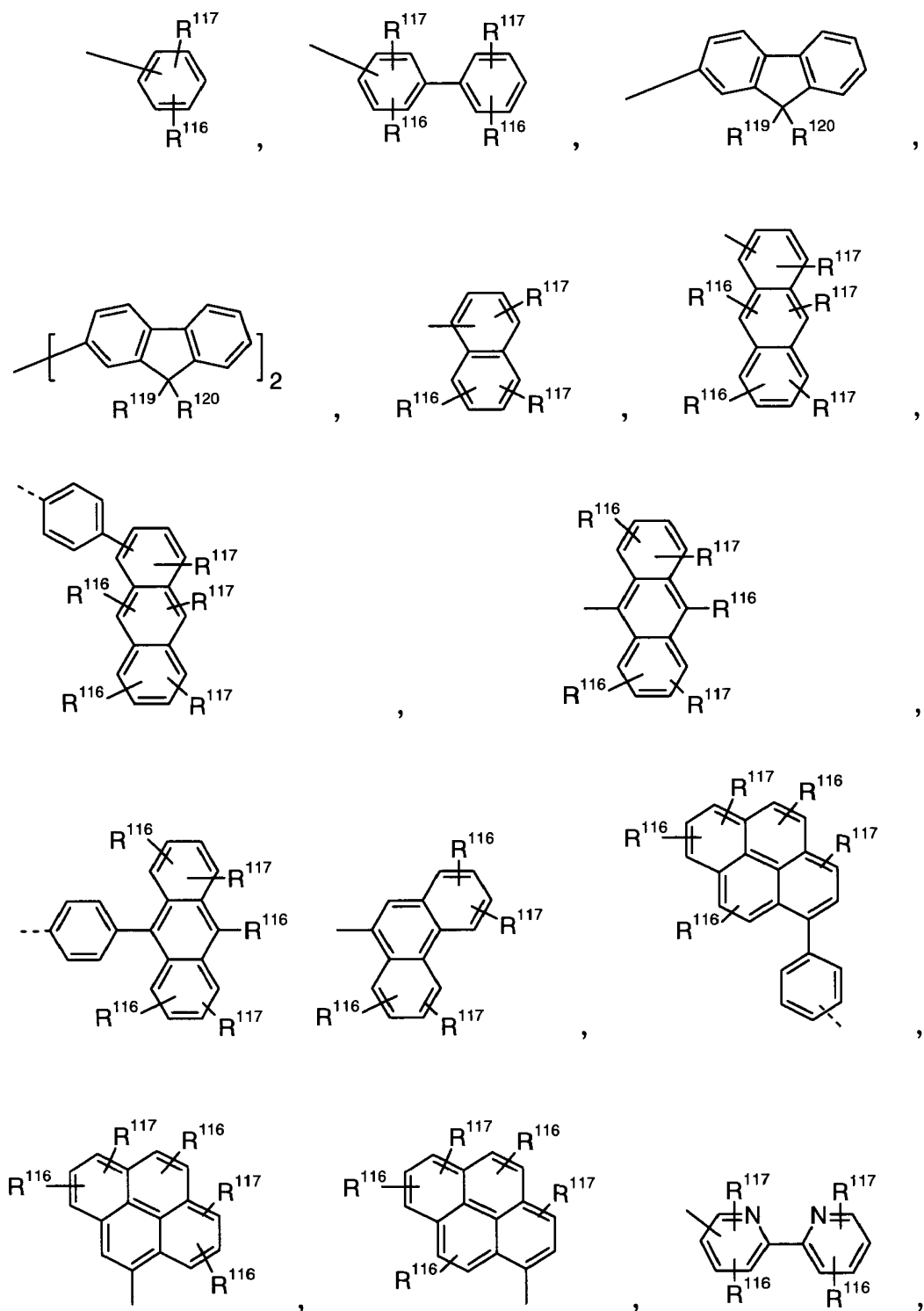
其中 R^{41} 、 R^{116} 、 R^{117} 、 R^{119} 、 R^{120} 及m1如上述定義。

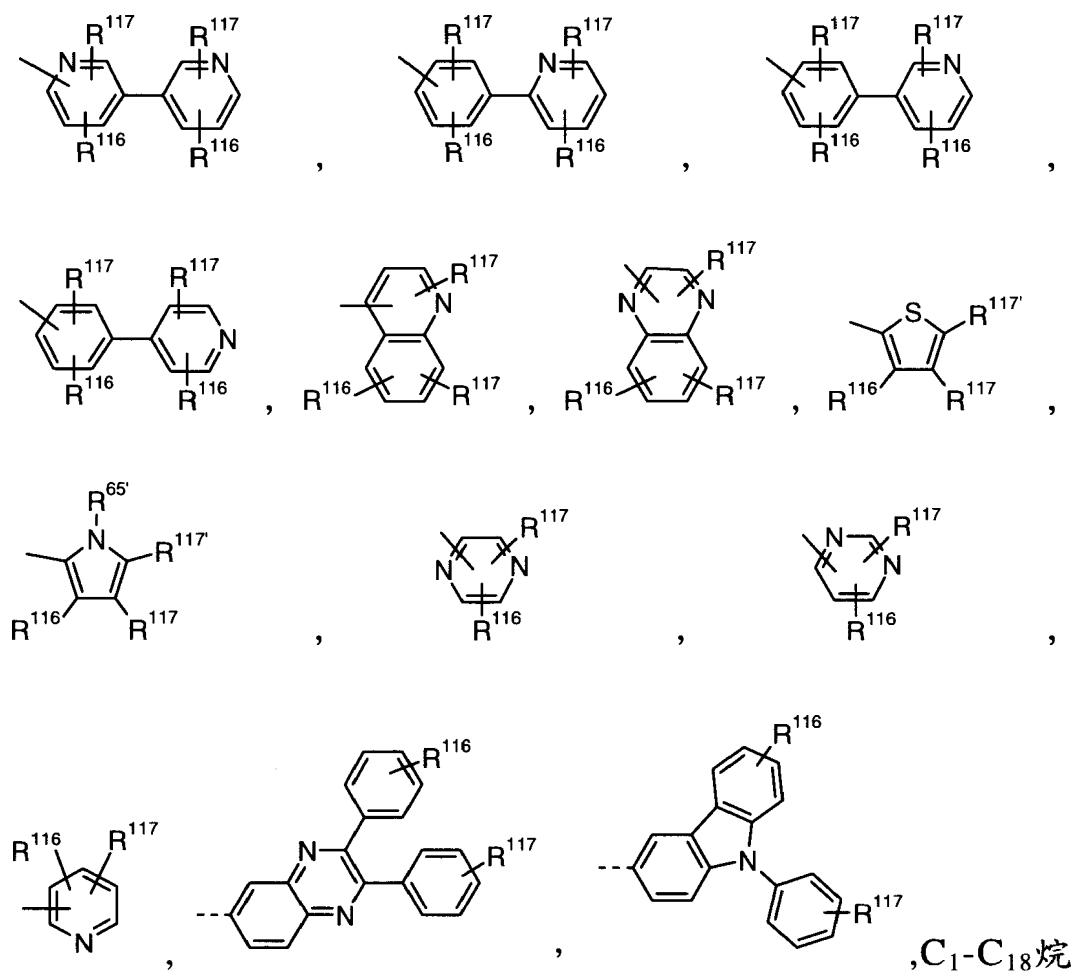


(IIb)之化合物，其中

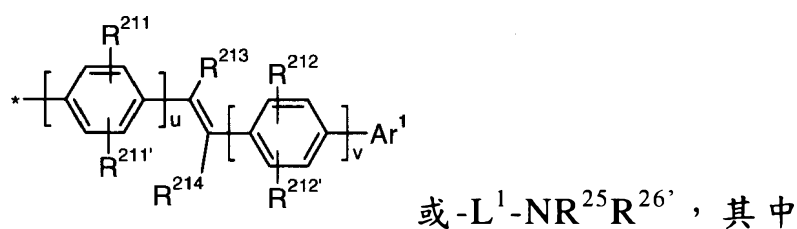
R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫；

R^1 、 R^2 、 R^3 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 及 $R^{4'}$ 彼此各自獨立地為H、 C_1 - C_{18} 烷基、由E取代及/或由D岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由G取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由G取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基，諸如





氧基、由 E 取代及 / 或由 D 岔斷的 C_1-C_{18} 烷氧基、



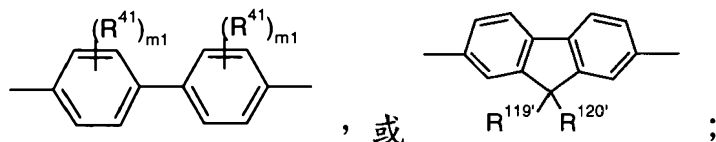
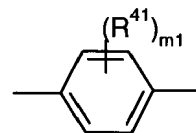
u 為 0 或 1； v 為 0 或 1；

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為 H、 C_1-C_{18} 烷基或 C_1-C_{18} 烷氧基；

R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為 H 或 C_1-C_{18} 烷基；

Ar^1 為 $-NR^{25'}R^{26'}$ 、 C_6-C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6-C_{24} 芳基、 C_2-C_{20} 雜芳基或由 G 取代的 C_2-C_{20} 雜芳基；

L^1 為單鍵或橋接單元 BU，諸如

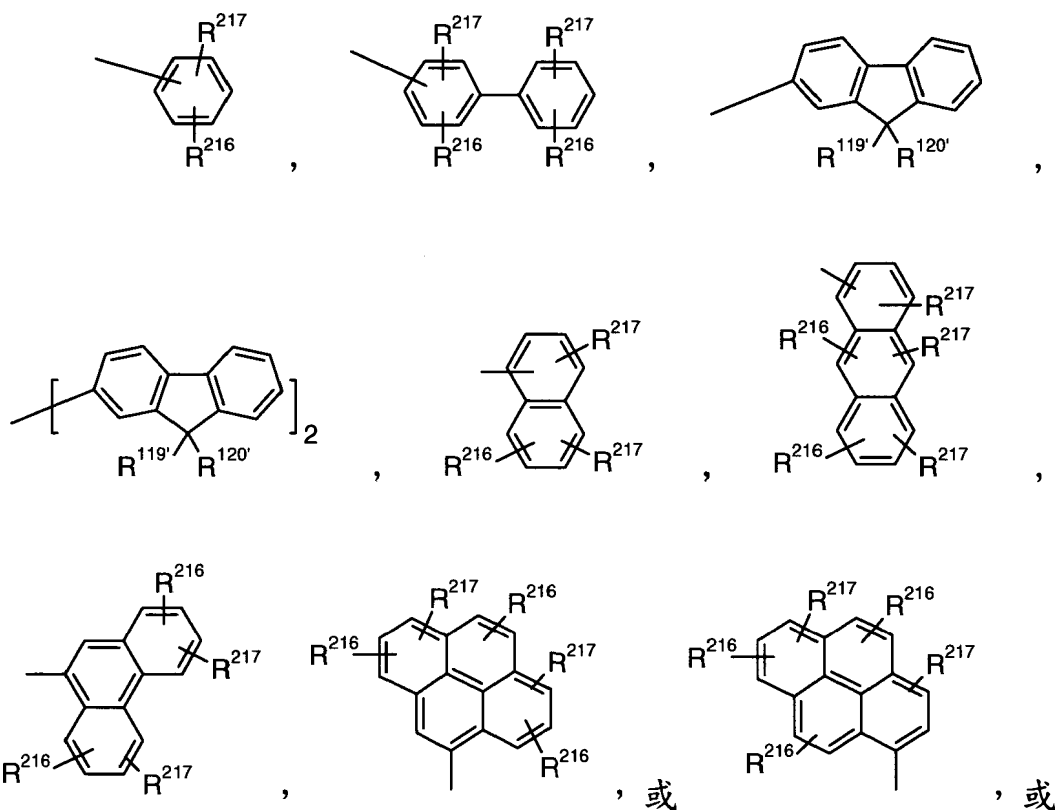


D 為 -O- 或 -NR²⁵-；

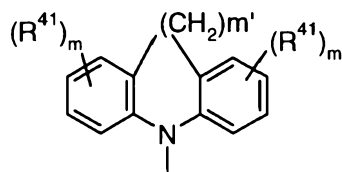
E 為 -OR²⁹、-NR²⁵R²⁶、-CN 或 F；R²⁹、R²⁵ 及 R²⁶ 如上述定義；及

G 為 E、C₁-C₁₈ 烷基、由 D 岔斷的 C₁-C₁₈ 烷基、C₁-C₁₈ 全氟烷基、C₁-C₁₈ 烷氧基、或由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C₁-C₁₈ 烷氧基。

R^{25'} 及 R^{26'} 彼此各自獨立地為可選擇性經取代之苯基、萘基、蒽基、聯苯基、2-萘基、菲基或芘基，諸如



$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們所鍵結的氮原子一起形成一雜芳香族環或



環系統，諸如

； m' 為 0、1 或 2；

m 在每個事件中可相同或不同及為 0、1、2 或 3，特別是 0、1 或 2，非常特別是 0 或 1；

$m1$ 在每個事件中可相同或不同及為 0、1、2、3 或 4，特別是 0、1 或 2，非常特別是 0 或 1；

R^{41} 在每個事件中可相同或不同及為 Cl、F、CN、 $N(R^{45})_2$ 、 C_1 - C_{25} 烷基、 C_4 - C_{18} 環烷基、 C_1 - C_{25} 烷氧基，其中未在彼此鄰近區域中的一或多個碳原子可由 $-NR^{45}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-C(=O)-O-$ 置換，及/或其中一或多個氫原子可由 F、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_6 - C_{24} 芳氧基置換，其中一或多個碳原子可由 O、S 或 N 置換，及/或其可由一或多個非芳香族基團 R^{41} 取代，或二或更多個基團 R^{41} 形成一環系統；

R^{45} 為 C_1 - C_{25} 烷基、 C_4 - C_{18} 環烷基，其中未在彼此鄰近區域的一或多個碳原子可由 $-NR^{45''}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 或 $-O-C(=O)-O-$ 置換，及/或其中一或多個氫原子可由 F、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_6 - C_{24} 芳氧基置換，其中一或多個碳原子可由 O、S 或 N 置換，及/或其可由一或多個非芳香族基團 R^{41} 取代；及

$R^{45''}$ 為 C_1 - C_{25} 烷基或 C_4 - C_{18} 環烷基；

R^{216} 、 R^{217} 、 R^{116} 、 R^{117} 及 $R^{117'}$ 彼此各自獨立地為 H、鹵素、 $-CN$ 、 C_1 - C_{18} 烷基、由 E' 取代及/或由 D' 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G' 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、

由G'取代的C₂-C₂₀雜芳基、C₂-C₁₈烯基、C₂-C₁₈炔基、C₁-C₁₈烷氧基、由E'取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷氧基、C₇-C₂₅芳烷基、-C(=O)-R¹²⁷、-C(=O)OR¹²⁷或-C(=O)NR¹²⁷R¹²⁶；或彼此毗連的取代基R¹¹⁶、R¹¹⁷及R^{117'}可形成一環；

R^{119'}及R^{120'}彼此各自獨立地為C₁-C₁₈烷基、由E'取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷基、C₆-C₂₄芳基、由G'取代的C₆-C₂₄芳基、C₂-C₂₀雜芳基、由G'取代的C₂-C₂₀雜芳基、C₂-C₁₈烯基、C₂-C₁₈炔基或C₇-C₂₅芳烷基；或

R^{119'}及R^{120'}一起形成式=CR^{121'}R^{122'}之基團，其中

R^{121'}及R^{122'}彼此各自獨立地為H、C₁-C₁₈烷基、由E'取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷基、C₆-C₂₄芳基、由G'取代的C₆-C₂₄芳基、或C₂-C₂₀雜芳基、或由G'取代的C₂-C₂₀雜芳基；或

R^{119'}及R^{120'}一起形成一五或六員環，其選擇性可由下列取代：C₁-C₁₈烷基、由E'取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷基、C₆-C₂₄芳基、由G'取代的C₆-C₂₄芳基、C₂-C₂₀雜芳基、由G'取代的C₂-C₂₀雜芳基、C₂-C₁₈烯基、C₂-C₁₈炔基、C₁-C₁₈烷氧基、由E'取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷氧基、C₇-C₂₅芳烷基或-C(=O)-R¹²⁷；及

R¹²⁶及R¹²⁷彼此各自獨立地為C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基或C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；

D'為-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO₂-、-O-、-NR⁶⁵-、-SiR⁷⁰R⁷¹-、-POR⁷²-、-CR⁶³=CR⁶⁴-或-C≡C-；及

E' 為 $-\text{OR}^{69}$ 、 $-\text{SR}^{69}$ 、 $-\text{NR}^{65}\text{R}^{66}$ 、 $-\text{COR}^{68}$ 、 $-\text{COO-R}^{67}$ 、 $-\text{CONR}^{65}\text{R}^{66}$ 、 $-\text{CN}$ 或鹵素；

G' 為 E' 或 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；

R^{63} 及 R^{64} 彼此各自獨立地為 H； $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基、 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；

R^{65} 、 $\text{R}^{65'}$ 及 R^{66} 彼此各自獨立地為 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基、 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或

R^{65} 及 R^{66} 一起形成一五或六員環；

R^{67} 及 R^{68} 彼此各自獨立地為 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基或 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；

R^{69} 為 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基、 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷氧基； $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；或由 $-\text{O}-$ 岔斷的 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基；

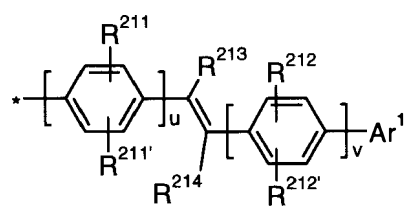
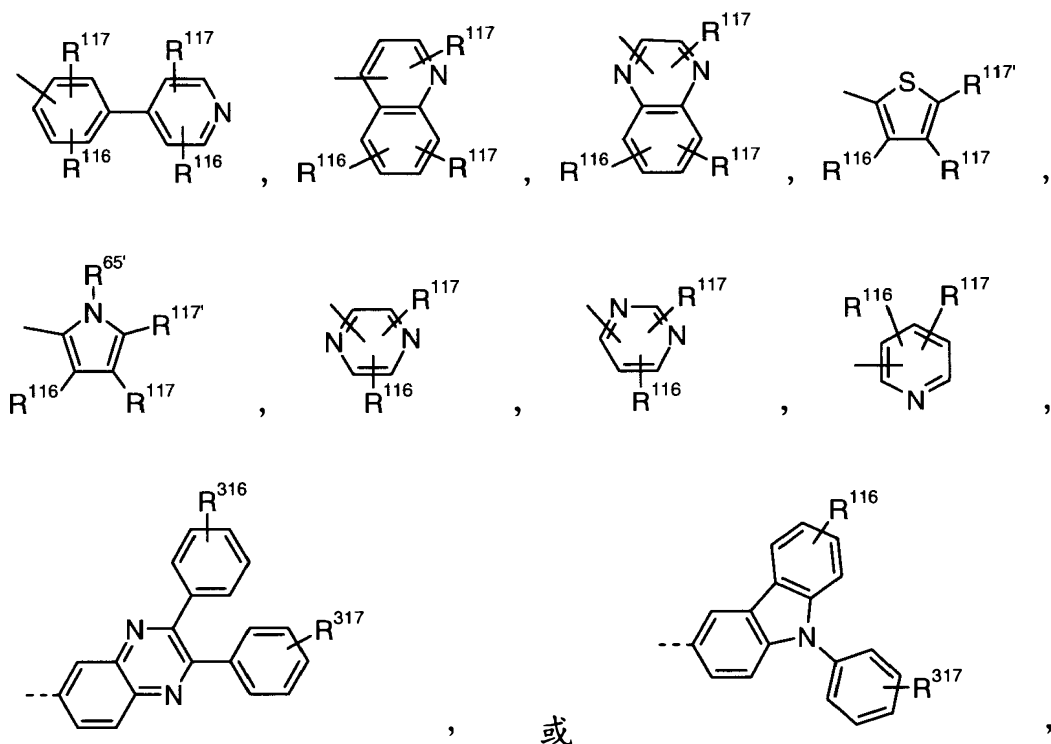
R^{70} 及 R^{71} 彼此各自獨立地為 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基、 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基或由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基；及

R^{72} 為 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基、 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基或由 $\text{C}_1\text{-C}_{18}$ 烷基取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{18}$ 芳基。

D'、E' 及 G' 各別具有與 D、E 及 G 相同的較佳選擇。 $\text{R}^{119'}$ 及 $\text{R}^{120'}$ 各別具有與 R^{119} 及 R^{120} 相同的較佳選擇。

在式 IIa 及 IIb 之化合物中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 $\text{R}^{2'}$ 及 $\text{R}^{3'}$ 彼此各自獨立地為下列較佳： $\text{C}_6\text{-C}_{24}$ 芳基、由 G 取代的 $\text{C}_6\text{-C}_{24}$ 芳基、 $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 雜芳基、由 G 取代的 $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 雜芳基，諸如





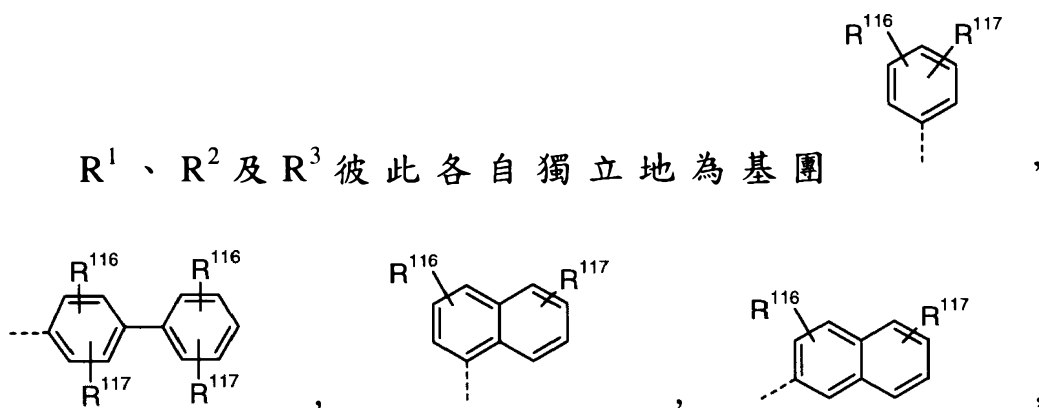
或基團 $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$ ，其中 R^{316} 及 R^{317}

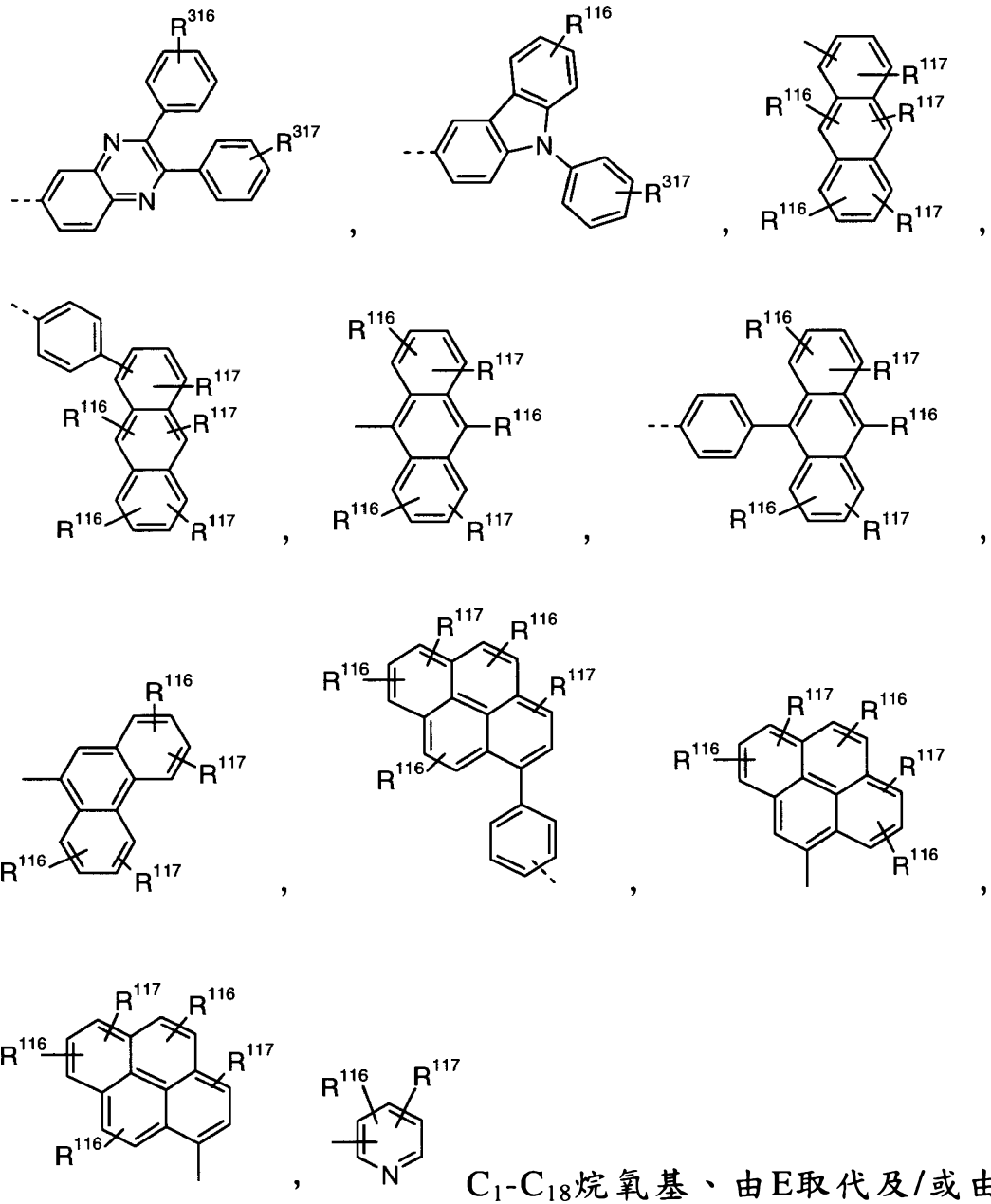
具有 R^{116} 的意義及較佳為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1-C_{25} 烷基、或 C_1-C_{25} 烷氧基。

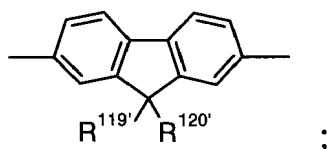
$R^{4'}$ 為氫、 C_6-C_{24} 芳基或由 G 取代的 C_6-C_{24} 芳基。

最佳有式 IIa 之化合物，其中 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫；

R^1 、 R^2 及 R^3 彼此各自獨立地為基團







;

m 為 0 或 1 ；

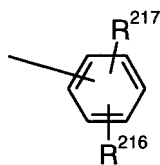
u 為 0 或 1 ； v 為 0 或 1 ；

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18}

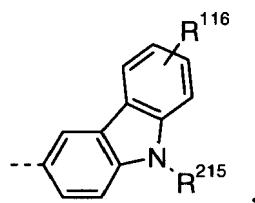
烷基 ；

R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18} 烷基 ；

Ar^1 為 $-NR^{25'}R^{26'}$ 、

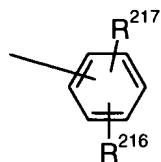


， 或

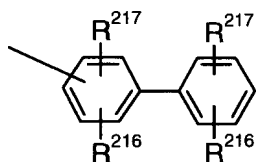


R^{215} 為 C_1 - C_{25} 烷基 或 C_6 - C_{18} 芳基 ；

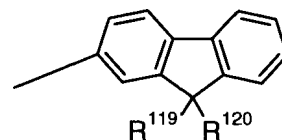
$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為



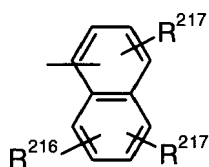
，



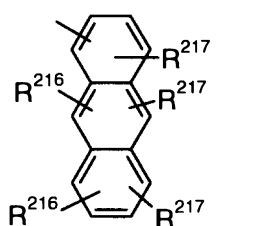
，



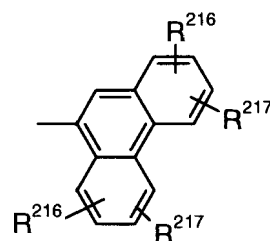
，



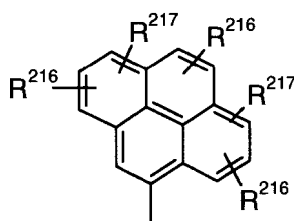
，



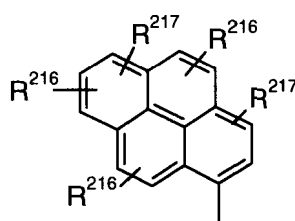
，



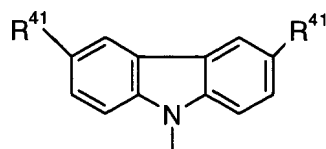
，



， 或



， 或 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們



所鍵結的氮原子一起形成基團，其中 R^{41}

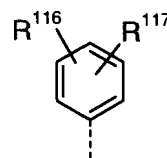
為H或 C_1 - C_8 烷基；及

R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由-O-岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基、1-萘基、2-萘基、苯基、或吡啶(其可選擇性由 C_1 - C_{25} 烷基(其可選擇性由-O-岔斷)或苯基取代)；及

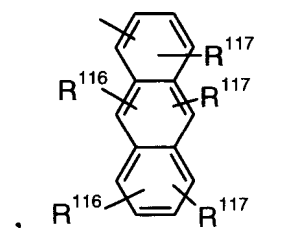
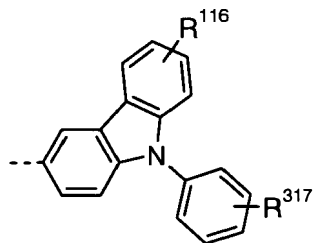
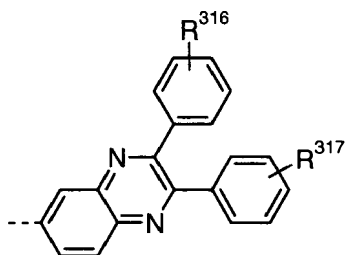
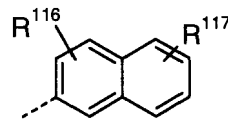
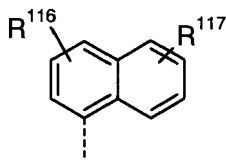
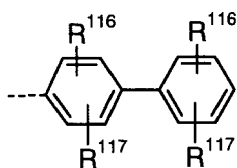
R^{316} 及 R^{317} 具有 R^{116} 的意義及較佳為可選擇性由-O-岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；

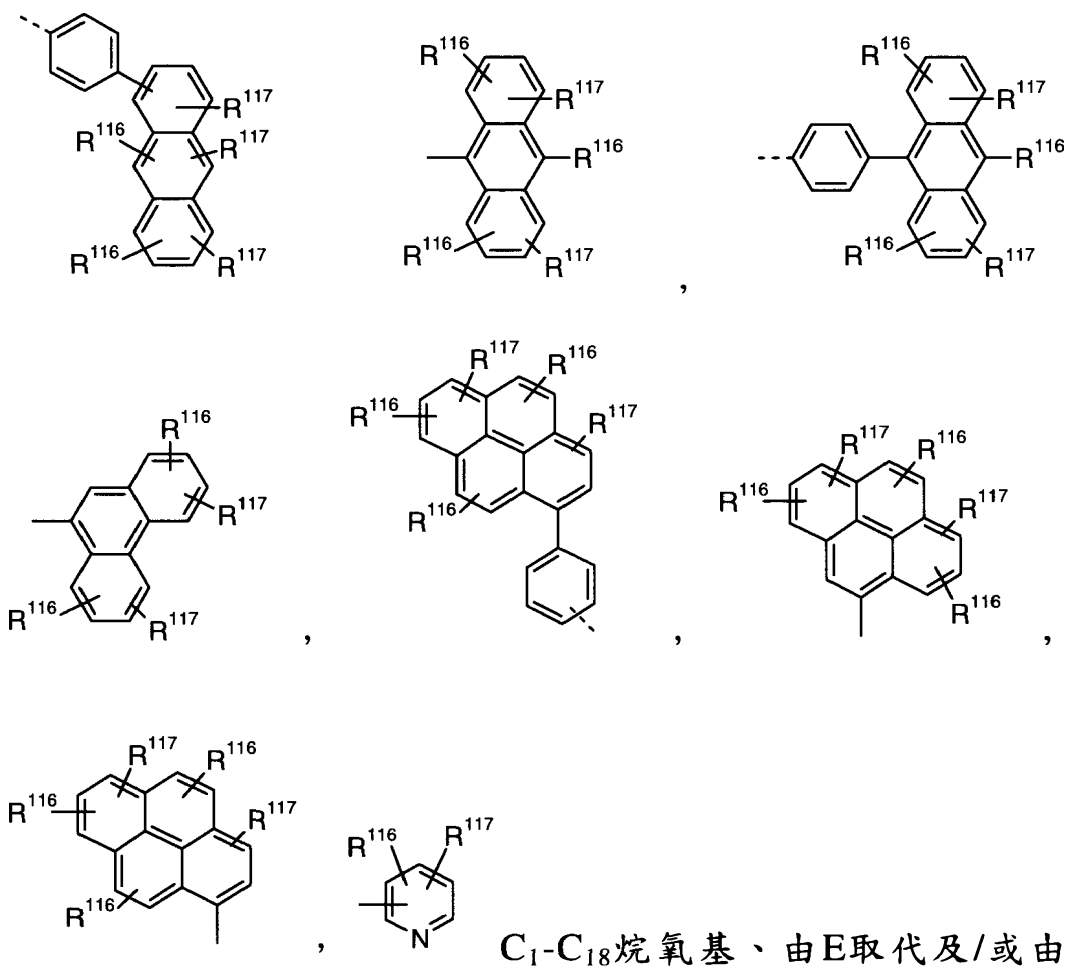
R^{216} 及 R^{217} 彼此各自獨立地為可選擇性由-O-岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；和

式IIb之化合物，其中 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫；

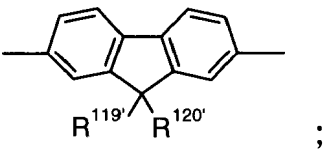
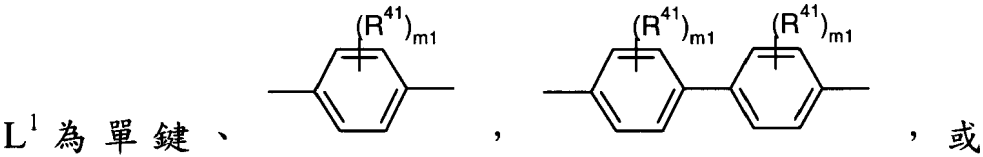
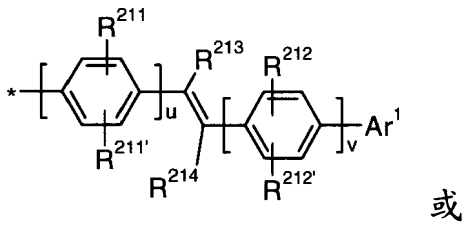


R^1 、 $R^{2'}$ 及 $R^{3'}$ 彼此各自獨立地為基團

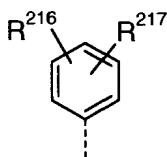




D 岔斷的 C_1-C_{18} 烷氧基、
 $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$ ；



m_1 為0或1；



$R^{4'}$ 為氫或基團

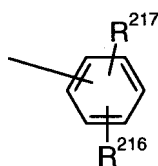
u 為 0 或 1； v 為 0 或 1；

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18}

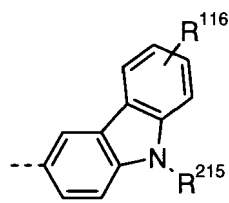
烷基；

R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18} 烷基；

Ar^1 為 $-NR^{25'}R^{26'}$ 、



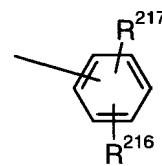
，或



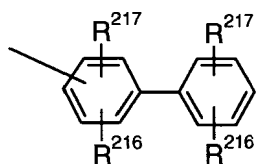
，其中 R^{215}

如上述定義；

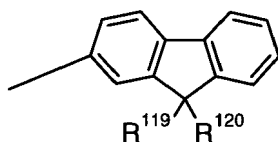
$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為



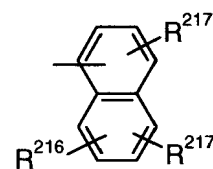
，



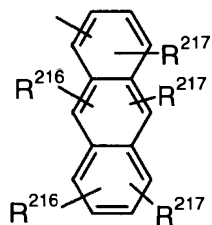
，



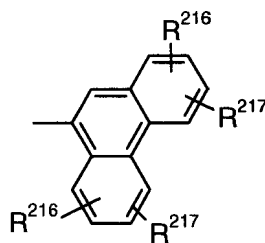
，



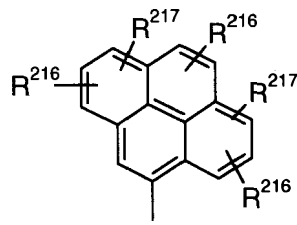
，



，

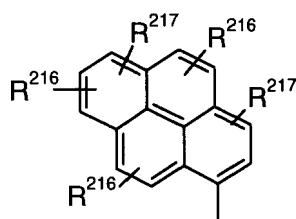


，

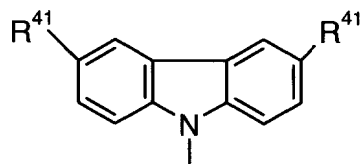


，

或



，或 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們所鍵結的氮原子一起



形成基團

，其中 R^{41} 為 H 或 C_1-C_8 烷基；

及

R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1-C_{25} 烷基、或 C_1-C_{25} 烷氧基、1-萘基、2-萘基、苯基、或吡啶(其可選擇性由 C_1-C_{25} 烷基(其可選擇性由 -O- 岔斷)或苯基取代)；

R^{316} 及 R^{317} 具有 R^{116} 的意義及較佳為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1-C_{25} 烷基、或 C_1-C_{25} 烷氧基；

$R^{119'}$ 及 $R^{120'}$ 彼此各自獨立地為 C_1-C_{25} 烷基、或由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1-C_{25} 烷基；

R^{216} 及 R^{217} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1-C_{25} 烷基、或 C_1-C_{25} 烷氧基；

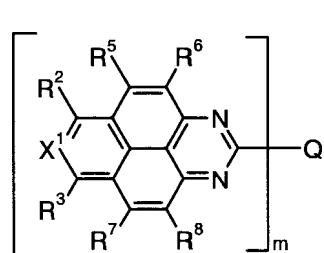
D 為 -O- 或 $-NR^{25}-$ ；及

E 為 $-OR^{29}$ 、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CN$ 或 F； R^{29} 、 R^{25} 及 R^{26} 如上述定義。

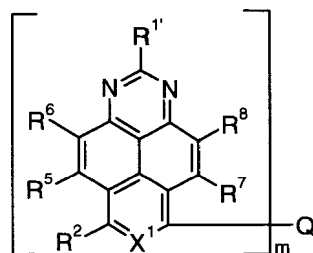
式 IIa 之特別佳的化合物之實施例有顯示在申請專利範圍第 6 項中的化合物 A-1-A-19。

式 IIb 之特別佳的化合物之實施例有顯示在申請專利範圍第 6 項中之化合物 B-1-B-42。

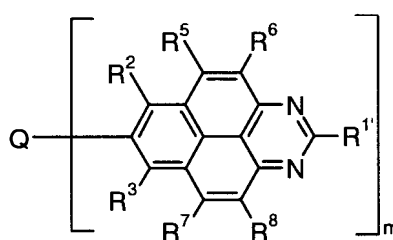
在另一個較佳具體實例中，本發明係關於一種電子裝置，其包含式 III 之化合物，特別是下式之化合物：



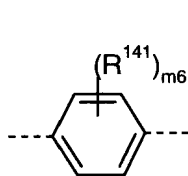
(IIIa),



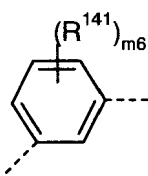
(IIIb), 或

(IIIc), 其中 m 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 R^3 、 X^1 、

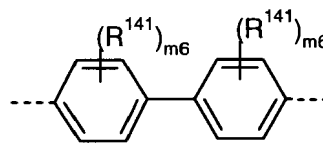
R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 如上述定義；及 Q 為下式之基團：



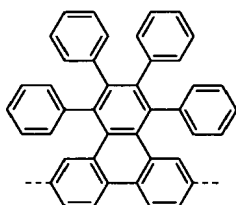
,



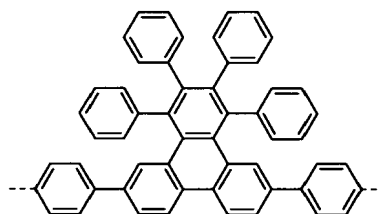
,



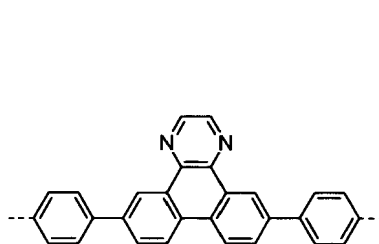
,



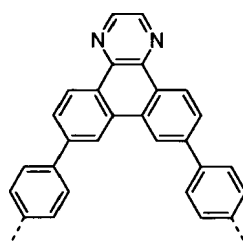
,



,

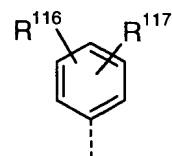


, 或

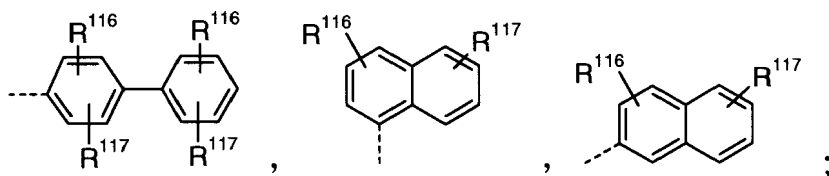
, 其中 R^{141} 在每個

事件中可相同或不同及為可選擇性由-O-岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基； m_6 為0、1或2。

甚至更佳的為式IIIa、IIIb或IIIc之化合物，其中 X^1 為CH或N； R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫；



R^1 、 R^2 、 R^3 彼此各自獨立地為



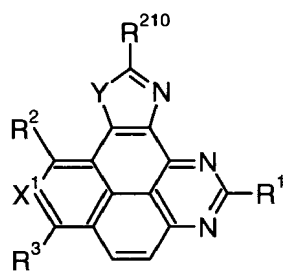
R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；及

Q 及 m 如上述定義。

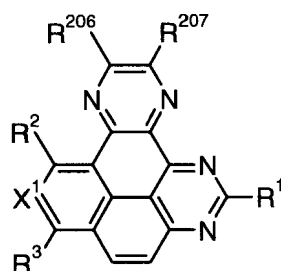
式 IIIa 之特別佳的化合物之實施例有顯示在申請專利範圍第 9 項中的化合物 C1-C7。

式 IIIb 之特別佳的化合物之實施例有顯示在申請專利範圍第 9 項中的化合物 D1-D6。

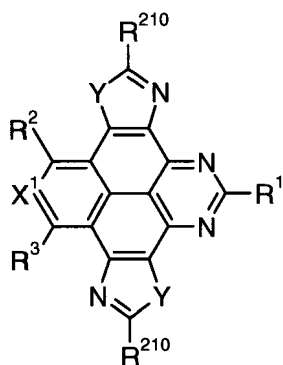
在另一個較佳具體實例中，本發明係關於一種包含下式之化合物的電子裝置：



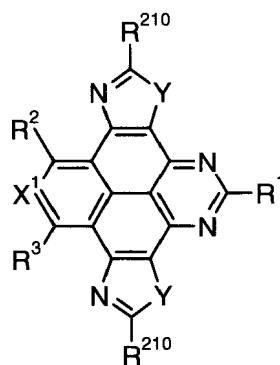
(Iva)



(Ivb)

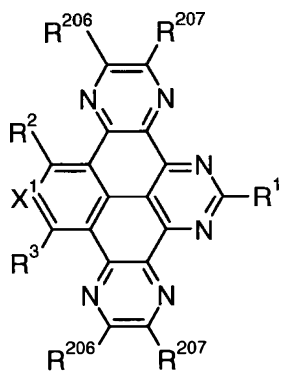


(Va)



(Vb)

及



(Vc), 其中

X^1 為 N 或 CH ;

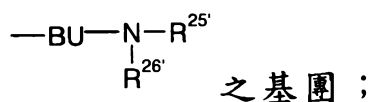
Y 為 O 或 NR^{25} ;

R^{25} 為 C_6-C_{18} 芳基、由 C_1-C_{18} 烷基或 C_1-C_{18} 烷氧基取代的 C_6-C_{18} 芳基、 C_1-C_{18} 烷基、或由 -O- 岔斷的 C_1-C_{18} 烷基 ; 及

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^{206} 、 R^{207} 、 R^{210} 如上述定義。

式 Iva、Ivb、Va、Vb 及 Vc 之化合物甚至更佳，其中

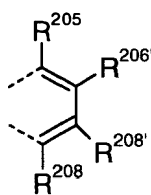
R^1 為 C_6-C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6-C_{24} 芳基或式



R^2 及 R^3 彼此各自獨立地為 C_6-C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6-C_{24} 芳基 ;

R^{25} 為 C_6-C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6-C_{24} 芳基 ;

R^{206} 及 R^{207} 彼此各自獨立地為 H、 C_1-C_{18} 烷基、由 E 取代及 / 或由 D 岔斷的 C_1-C_{18} 烷基、 C_1-C_{18} 全氟烷基、 C_6-C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6-C_{24} 芳基、 C_2-C_{20} 雜芳基、由 G 取代的 C_2-C_{20} 雜芳基 ; 或



R^{206} 及 R^{207} 一起形成式 之基團，其中

R^{205} 及 R^{208} 為 H；

$R^{206'}$ 及 $R^{208'}$ 彼此各自獨立地為 H、 C_1 - C_{18} 烷基、由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基、或 CN；

R^{210} 為 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基或式

$$\text{—BU—}\underset{\underset{R^{26'}}{|}}{\overset{R^{25'}}{N}} \text{ 之基團；}$$

X^1 為 N 或 CH；

Y 為 O 或 NR^{25} ；其中

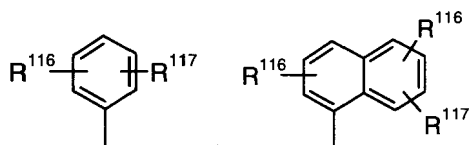
D 為 -O- 或 $-NR^{25}-$ ；

E 為 $-OR^{29}$ 、 $-NR^{25}R^{26}$ 、-CN 或 F；及

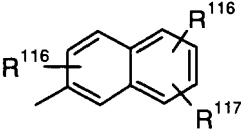
G 為 E、 C_1 - C_{18} 烷基、由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、或由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基；

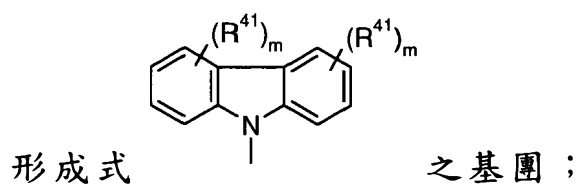
R^{25} 及 R^{26} 為 C_6 - C_{18} 芳基；由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基取代的 C_6 - C_{18} 芳基； C_1 - C_{18} 烷基；或由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基；

R^{29} 為 C_6 - C_{18} 芳基；由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基取代的 C_6 - C_{18} 芳基； C_1 - C_{18} 烷基；或由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基；

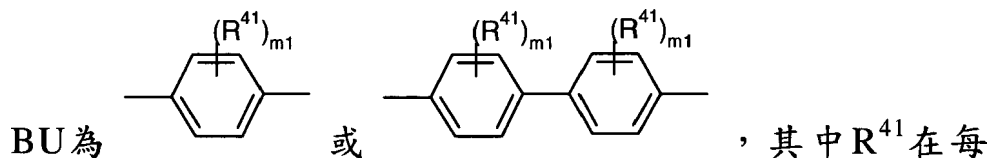


$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為

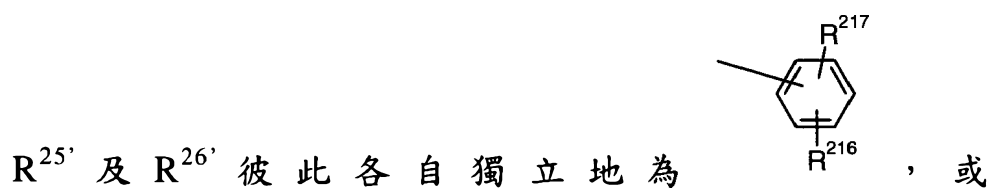
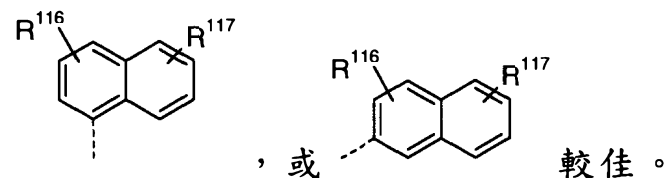
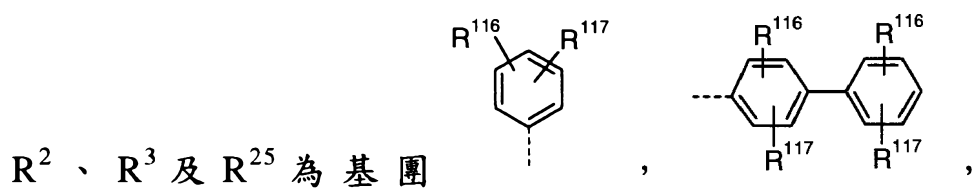
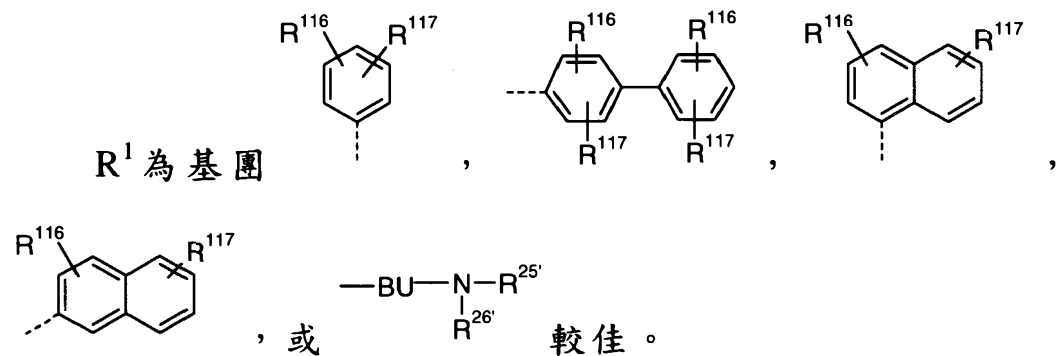
或 ；或 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們所鍵結的氮原子一起

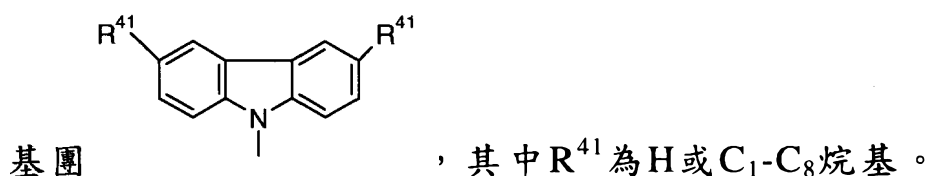
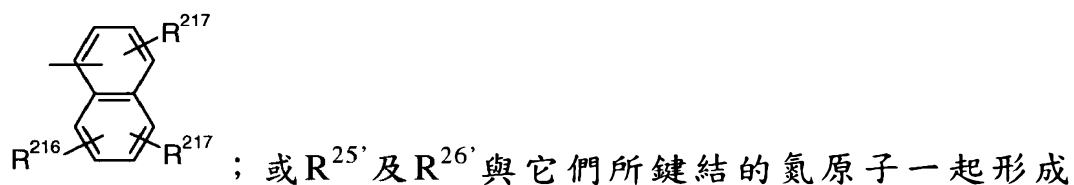


R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；

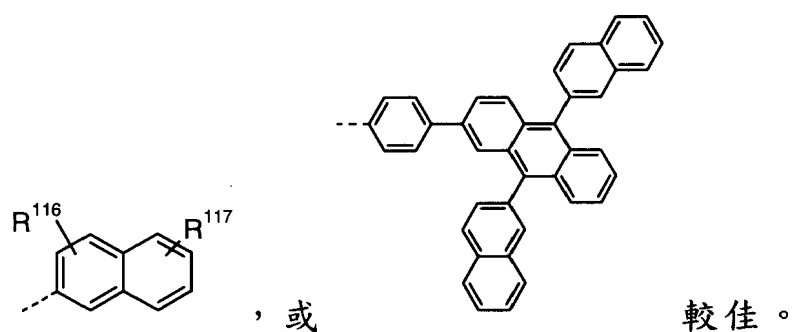
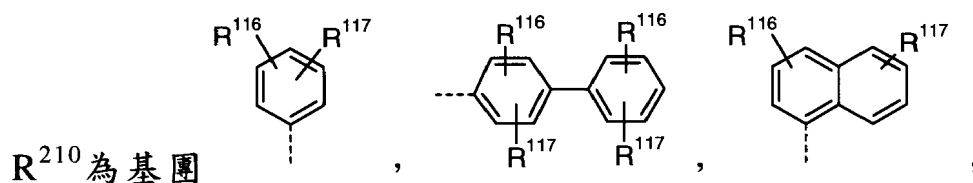
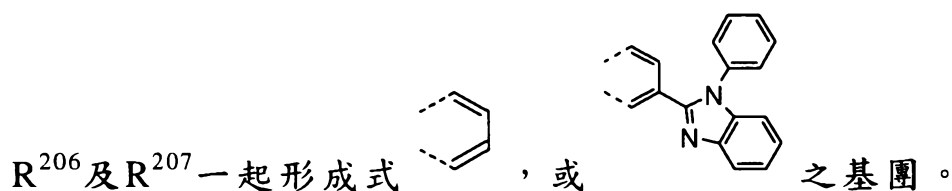


個事件中可相同或不同及為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基； m_1 為 0、1 或 2。





R^{206} 及 R^{207} 彼此各自獨立地為 H、 C_1 - C_{18} 烷基、CN 或由 O 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基；或



R^{116} 及 R^{117} 為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、CN 或 C_1 - C_{25} 烷氧基。

R^{216} 及 R^{217} 可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基。

式 Iva 之較佳化合物有如顯示在申請專利範圍第 6 項中

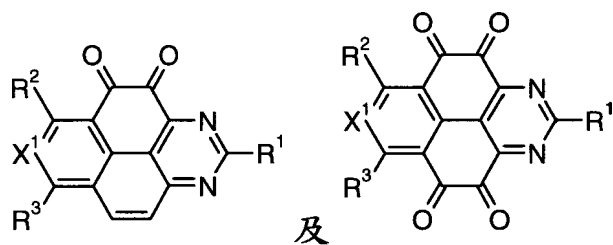
的化合物E-1至E-8、F-1及F-2。

式Ivb之較佳化合物有如顯示在申請專利範圍第6項中的化合物G-1至G-5、H-1及H-2。

式Vb之較佳化合物有如顯示在申請專利範圍第6項中的化合物I-1至I-5及J-1至J-4。

式Vc之較佳化合物有如顯示在申請專利範圍第6項中的化合物K-1至K-8、L-1及L-2。

式Iva、Ivb、Va、Vb及Vc之化合物可藉由使用式



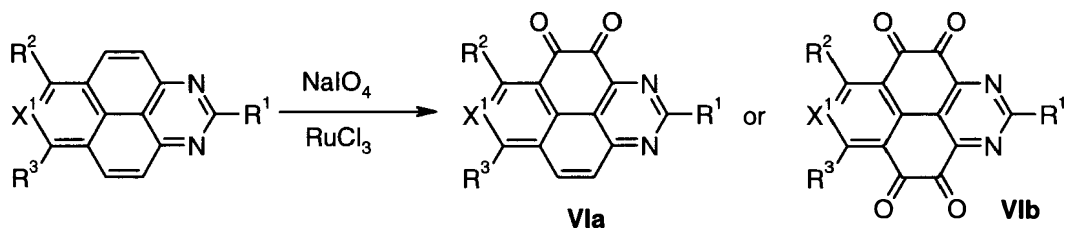
之化合物(各別作為起始

材料)來製備，其中X¹、R¹、R²及R³如上述定義。咪唑系統的化合物可藉由在迴流下攪拌式VIa或Vib之化合物與醛、醋酸銨(可選擇性加入芳香族胺，此導致經取代的產物)、適當溶劑來製備。再者，可將二胺加入至式VIa或Vib之化合物，然後在迴流下在酸條件下攪拌以製備吡嗪系統的化合物。再者，嘧啶系統之化合物可藉由於醋酸銨及脂肪族胺存在下讓式VIa或Vib之化合物與適當的醛反應獲得。合成程序描述在WO 2006/097419中。

式VIa及Vib之化合物為新型且形成本發明的進一步目標。

式VIa及Vib之化合物可根據描述在J. Org. Chem. 2005, 70, 707-708中的程序，在二氯甲烷中，於三氯酸鈦

存在下，藉由以過氯酸鈉或過碘酸鈉來氧化式II之氮芘(其中 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為H)而製造。



依氧化劑的量及反應時間而獲得式VIa及/或VIb之化合物。

式Iva、Ivb、Va、Vb及Vc之化合物具有一該衍生物不僅可在有機電子裝置中完成電子或電洞注入及/或傳輸功能，而且亦可完成光發射(例如，單一發光材料、發光摻雜物與合適的宿主一起或藍光發射宿主與合適的摻雜物一起)功能之基本結構。至於宿主，可使用螢光或磷光發射材料。藉由在有機電子裝置中施加式Iva、Ivb、Va、Vb及Vc之化合物，可就效率裝置、驅動電壓及穩定性達成優良的效應。

本發明之化合物可根據與應用至有機發光裝置類似的原理作用在有機電子裝置中，包括有機太陽能電池、有機光導體及有機電晶體。

鹵素為氟、氯、溴及碘。

若可能的話， C_1 - C_{25} 烷基(C_1 - C_{18} 烷基)典型為線性或分枝。實施例有甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、二級丁基、異丁基、三級丁基、正戊基、2-戊基、3-戊基、2,2-二甲基丙基、1,1,3,3-四甲基戊基、正己基、1-甲基己基、1,1,3,3,5,5-六甲基己基、正庚基、異庚基、1,1,3,3-四甲基丁基、1-甲基庚基、3-甲基庚基、正辛基、1,1,3,3-四甲基丁基及2-乙基己基、正壬基、癸基、十一烷基、十二烷基、

十三烷基、十四烷基、十五烷基、十六烷基、十七烷基、十八烷基、廿烷基、廿一烷基、廿二烷基、廿四烷基或廿五烷基。 C_1 - C_8 烷基典型有甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、二級丁基、異丁基、三級丁基、正戊基、2-戊基、3-戊基、2,2-二甲基-丙基、正己基、正庚基、正辛基、1,1,3,3-四甲基丁基及2-乙基己基。 C_1 - C_4 烷基典型有甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、二級丁基、異丁基、三級丁基。

C_1 - C_{25} 烷氧基(C_1 - C_{18} 烷氧基)有直鏈或分枝的烷氧基，例如甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、二級丁氧基、三級丁氧基、戊氧基、異戊氧基或三級戊氧基、庚氧基、辛氧基、異辛氧基、壬氧基、癸氧基、十一烷氧基、十二烷氧基、十四烷氧基、十五烷氧基、十六烷氧基、十七烷氧基及十八烷氧基。 C_1 - C_8 烷氧基之實施例有甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、二級丁氧基、異丁氧基、三級丁氧基、正戊氧基、2-戊氧基、3-戊氧基、2,2-二甲基丙氧基、正己氧基、正庚氧基、正辛氧基、1,1,3,3-四甲基丁氧基及2-乙基己基氧基；較佳為 C_1 - C_4 烷氧基，諸如典型有甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、二級丁氧基、異丁氧基、三級丁氧基。名稱"烷硫基"意謂著與烷氧基相同的基團，除了醚連結之氧原子由硫原子置換外。

C_2 - C_{25} 烯基(C_2 - C_{18} 烯基)為直鏈或分枝的烯基，諸如例如乙烯基、烯丙基、甲代烯丙基、異丙烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、異丁烯基、正戊-2,4-二烯基、3-甲基-丁-2-烯基、

正辛-2-烯基、正十二-2-烯基、異十二碳烯基、正十二-2-烯基或正十八-4-烯基。

C₂₋₂₄炔基(C₂₋₁₈炔基)有直鏈或分枝且較佳為C₂₋₈炔基(其可未經取代或經取代)，諸如例如，乙炔基、1-丙炔-3-基、1-丁炔-4-基、1-戊炔-5-基、2-甲基-3-丁炔-2-基、1,4-戊二炔-3-基、1,3-戊二炔-5-基、1-己炔-6-基、順-3-甲基-2-戊烯-4-炔-1-基、反-3-甲基-2-戊烯-4-炔-1-基、1,3-己二炔-5-基、1-辛炔-8-基、1-壬炔-9-基、1-癸炔-10-基或1-廿四碳炔-24-基。

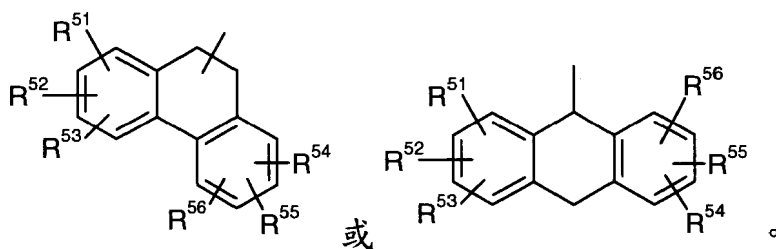
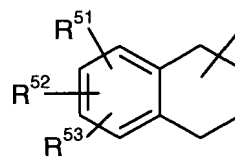
C₁-C₁₈全氟烷基(特別是C₁-C₄全氟烷基)為分枝或未分枝的基團，諸如例如 -CF₃、-CF₂CF₃、-CF₂CF₂CF₃、-CF(CF₃)₂、-(CF₂)₃CF₃及-C(CF₃)₃。

名稱"鹵烷基、鹵烯基及鹵炔基"意謂著藉由以鹵素部分或完全取代上述提及的烷基、烯基及炔基所提供之基團，諸如三氟甲基等等。"醛基團、酮基團、酯基團、胺甲醯基及胺基"包括由烷基、環烷基、芳基、芳烷基或雜環基團取代的那些，其中該烷基、環烷基、芳基、芳烷基及雜環基團可未經取代或經取代。名稱"矽烷基"意謂著式 -SiR²⁶²R²⁶³R²⁶⁴之基團，其中R²⁶²、R²⁶³及R²⁶⁴彼此各自獨立地為C₁-C₈烷基，特別是C₁-C₄烷基、C₆-C₂₄芳基或C₇-C₁₂芳烷基，諸如三甲基矽烷基。名稱"矽氧烷基"意謂著式 -O-SiR²⁶²R²⁶³R²⁶⁴之基團，其中R²⁶²、R²⁶³及R²⁶⁴如上述定義，諸如三甲基矽氧烷基。

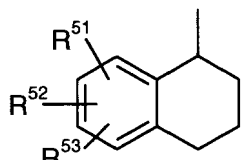
名稱"環烷基"典型為C₅-C₁₈環烷基，特別是C₅-C₁₂環烷

基，諸如環戊基、環己基、環庚基、環辛基、環壬基、環癸基、環十一烷基、環十二烷基，較佳為環戊基、環己基、環庚基或環辛基(其可未經取代或經取代)。名稱"環烯基"意謂著包含一或多個雙鍵的不飽和脂環烴基團，諸如環戊烯基、環戊二烯基、環己烯基及其類似物，其可未經取代或經取代。環烷基(特別是環己基)可與苯基(其可以C₁-C₄-烷基、鹵素及氰基取代一至三次)稠和一或二次。

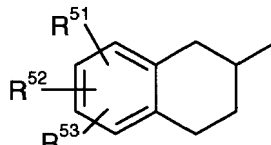
此稠和的環己基之實施例有：



特別是



或



，其中R⁵¹、

R⁵²、R⁵³、R⁵⁴、R⁵⁵及R⁵⁶彼此各自獨立地為C₁-C₈-烷基、C₁-C₈-烷氧基、鹵素及氰基，特別是氫。

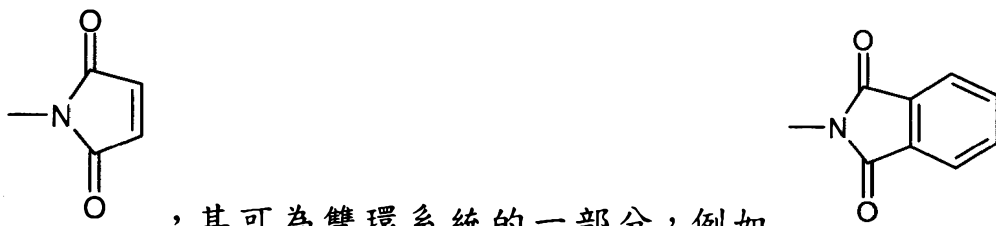
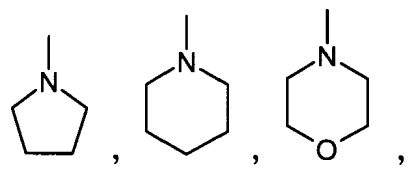
芳基通常為C₆-C₃₀芳基，較佳為可選擇性經取代的C₆-C₂₄芳基，諸如例如，苯基、4-甲基苯基、4-甲氧基苯基、萘基(特別是1-萘基或2-萘基)、聯苯基、聯三苯基、芘基、2-或9-芴基、菲基、蒽基、四醯基、五醯基、六醯基或四聯苯基(quaderphenyllyl)(其可未經取代或經取代)。

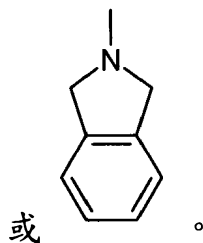
名稱"芳烷基"典型為 C_7-C_{25} 芳烷基，諸如苄基、2-苄基-2-丙基、 β -苄基-乙基、 α,α -二甲基苄基、 ω -苄基-丁基、 ω,ω -二甲基- ω -苄基-丁基、 ω -苄基-十二烷基、 ω -苄基-十八烷基、 ω -苄基-廿烷基或 ω -苄基-廿二烷基；較佳為 C_7-C_{18} 芳烷基，諸如苄基、2-苄基-2-丙基、 β -苄基-乙基、 α,α -二甲基苄基、 ω -苄基-丁基、 ω,ω -二甲基- ω -苄基-丁基、 ω -苄基-十二烷基或 ω -苄基-十八烷基；及特別佳為 C_7-C_{12} 芳烷基，諸如苄基、2-苄基-2-丙基、 β -苄基-乙基、 α,α -二甲基苄基、 ω -苄基-丁基或 ω,ω -二甲基- ω -苄基-丁基，其中脂肪烴基團及芳香烴基團二者可未經取代或經取代。

名稱"芳基醚基團"典型為 C_{6-24} 芳氧基，也就是說 $O-C_{6-24}$ 芳基，諸如例如，苯氧基或4-甲氧基苯基。名稱"芳基硫醚基團"典型為 C_{6-24} 芳硫基，也就是說 $S-C_{6-24}$ 芳基，諸如例如，苯硫基或4-甲氧基苯硫基。名稱"胺甲鹽基"典型為 C_{1-18} 胺甲鹽基，較佳為未經取代或經取代的 C_{1-8} 胺甲鹽基，諸如例如，胺甲鹽基、甲基胺甲鹽基、乙基胺甲鹽基、正丁基胺甲鹽基、三級丁基胺甲鹽基、二甲基胺甲鹽基氧基、嗎福啉胺甲鹽基或吡咯啉胺甲鹽基。

名稱在烷基胺基、二烷基胺基、烷基芳基胺基、芳基胺基及二芳基中的"芳基"及"烷基"典型各別為 C_1-C_{25} 烷基及 C_6-C_{24} 芳基。

烷基芳基指為經烷基取代的芳基，特別是 C_7-C_{12} 烷基芳基。實施例有甲苯基，諸如3-甲基-或4-甲基苯基；或二甲苯基，諸如3,4-二甲基苯基或3,5-二甲基苯基。





上述提及的基團之可能的取代基有C₁-C₈烷基、羥基、巯基團、C₁-C₈烷氧基、C₁-C₈烷硫基、鹵素、鹵-C₁-C₈烷基、氰基、醛基團、酮基團、羧基、酯基團、胺甲鹽基、胺基、硝基或矽烷基，其中C₁-C₈烷基、C₁-C₈烷氧基、氰基或矽烷基較佳。

若取代基(諸如例如R⁴¹)在基團中發生多於一次時，其在每個事件中可不同。

措辭“由G取代”意謂著可存在一或多個(特別是一至三個)基團G。

如上所述，前述提及的基團可由E取代及/或若必要時由D岔斷。當然，岔斷僅可能在包含至少2個由單鍵彼此連接的碳原子之基團的實例中；C₆-C₁₈芳基不被岔斷；經岔斷的芳基烷基或烷基芳基在烷基部分中包含單元D。由一或多個E取代及/或由一或多個單元D岔斷之C₁-C₁₈烷基有例如(CH₂CH₂O)₁₋₉-R^x，其中R^x為H或C₁-C₁₀烷基或C₂-C₁₀烷鹽基(例如，CO-CH(C₂H₅)C₄H₉)、CH₂-CH(OR^{y'})-CH₂-O-R^y，其中R^y為C₁-C₁₈烷基、C₅-C₁₂環烷基、苯基、C₇-C₁₅苯基烷基；及R^{y'}包括與R^y相同的定義或為H；

C₁-C₈ 伸 烷 基 -COO-R^z，例如 CH₂COOR^z、CH(CH₃)COOR^z、CH(CH₃)₂COOR^z，其中R^z為H、C₁-C₁₈烷

基、 $(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_{1-9}\text{-R}^x$ ，及 R^x 包括上述指示出的定義；

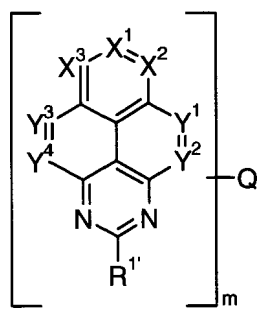
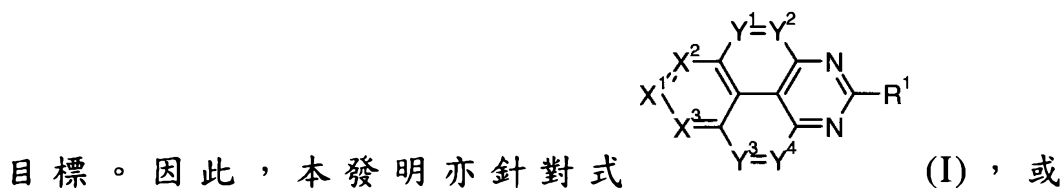
$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-O-CO-CH=CH}_2$ ；

$\text{CH}_2\text{CH(OH)CH}_2\text{-O-CO-C(CH}_3\text{)=CH}_2$ 。

較佳的伸芳基有1,4-伸苯基、2,5-伸甲苯基、1,4-伸萘基、1,9-伸蒽基、2,7-伸菲基及2,7-伸二氫菲基。

較佳的雜伸芳基有2,5-伸吡咩基、3,6-伸噻咩基、2,5-伸吡啶基、2,5-伸嘧啶基、1,3,4-噻二唑-2,5-伸基、1,3-噻唑-2,4-伸基、1,3-噻唑-2,5-伸基、2,4-伸噻吩基、2,5-伸噻吩基、1,3-呋唑-2,4-伸基、1,3-呋唑-2,5-伸基及1,3,4-呋二唑-2,5-伸基、2,5-伸節基及2,6-伸節基。

式I及III的特定化合物為新型及形成本發明的進一步



(III)，之化合物，其中 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 X^1 、

X^2 及 X^3 彼此各自獨立地為N或 CR^4 ；

附帶條件為基團 X^1 、 X^2 及 X^3 之至少一個為基團 CR^4 ；

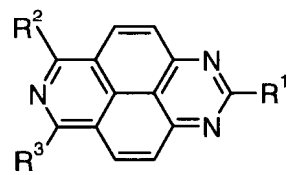
R^1 為F、 $-\text{SiR}^{100}\text{R}^{101}\text{R}^{102}$ 或有機取代基；

$\text{R}^{1'}$ 及 R^4 彼此各自獨立地為氫、F、 $-\text{SiR}^{100}\text{R}^{101}\text{R}^{102}$ 或有機取代基；或

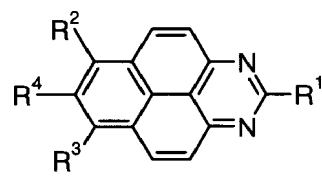
彼此毗連的任何取代基 R^1 、 $R^{1'}$ 及 R^4 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統；

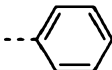
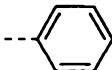
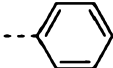
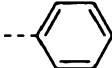
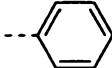
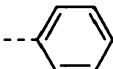
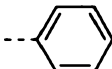
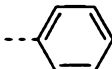
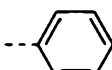
m 為整數1至6；及

R^{100} 、 R^{101} 及 R^{102} 彼此各自獨立地為 C_1 - C_8 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_7 - C_{12} 芳烷基，其可選擇性經取代；及 Q 為連結基團；附帶條件為在式III之化合物中，取代基 R^1 或 R^4 之至少一個為基團 Q ；及進一步附帶條件為排除下列化合物1至12：

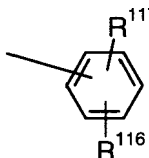


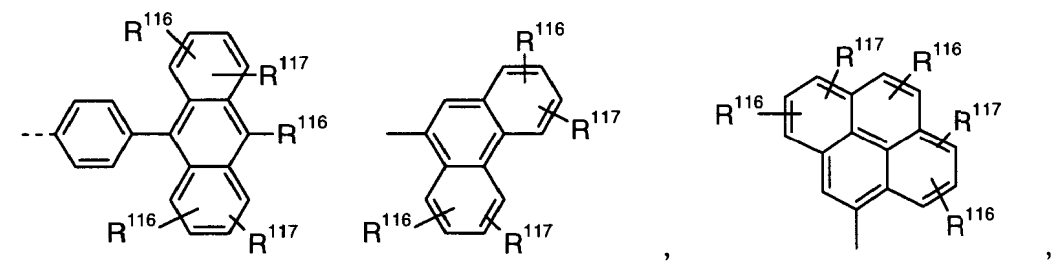
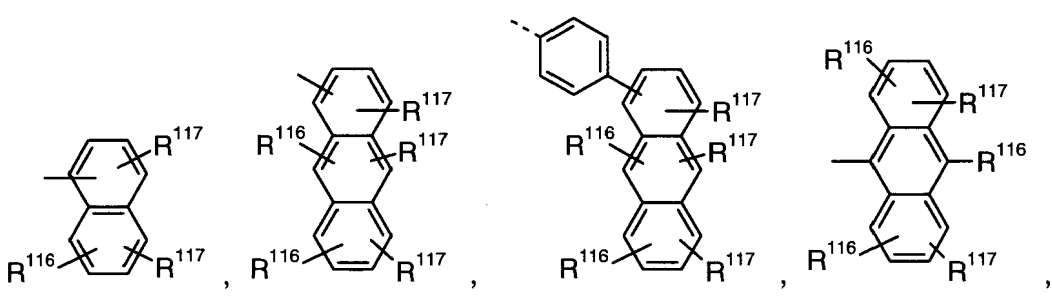
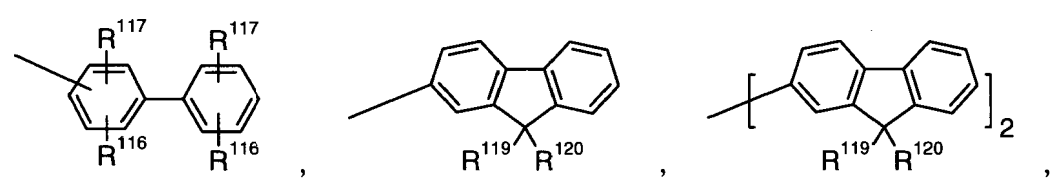
化合物	R^1	R^2	R^3
1			
2			
3			
4	$-CH_3$	H	H
5		H	H
6	$-CH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$

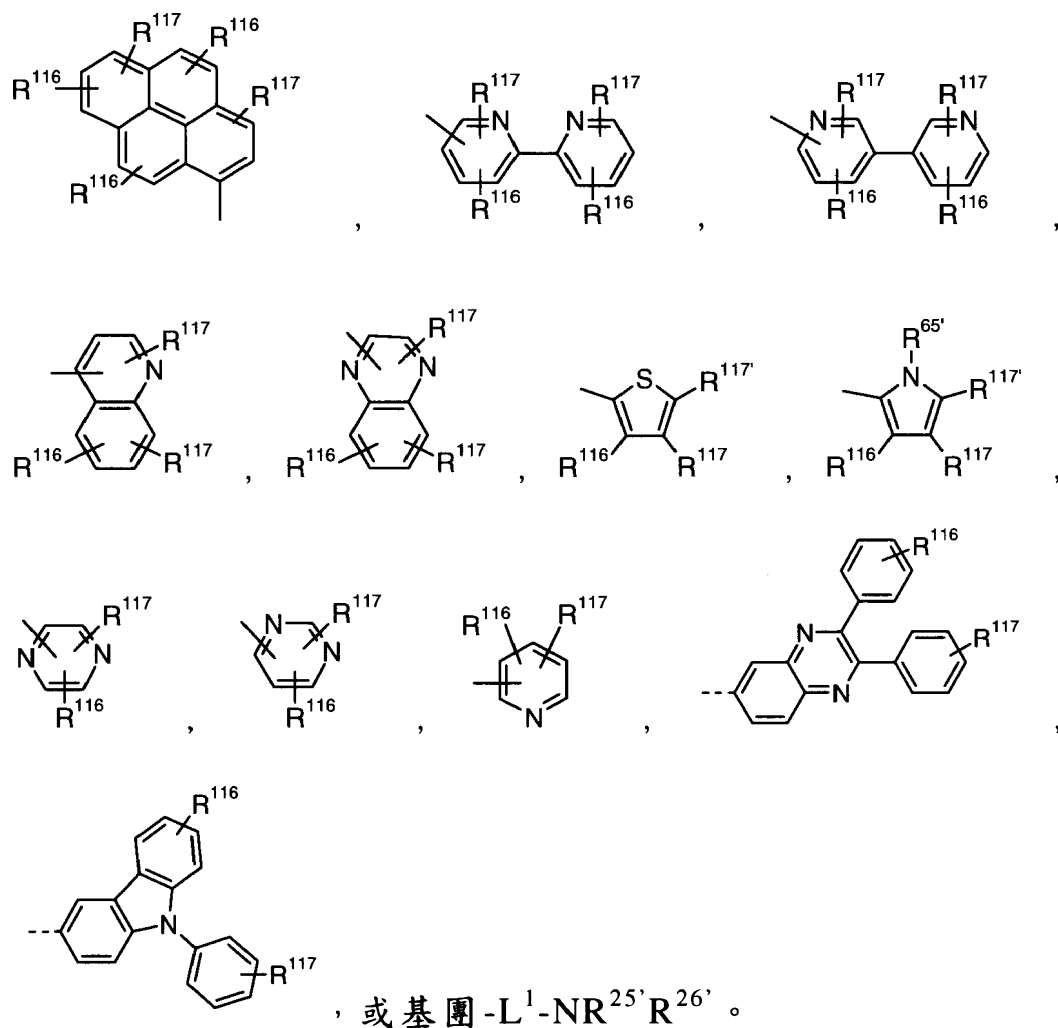


化合物	R ¹	R ²	R ³
7	-CH ₃		
8			
9	-CH ₃	H	-CH ₃
10			
11	-CH ₃	-CH ₃	

R¹為C₆-C₂₄芳基、由G取代的C₆-C₂₄芳基、C₂-C₂₀雜芳

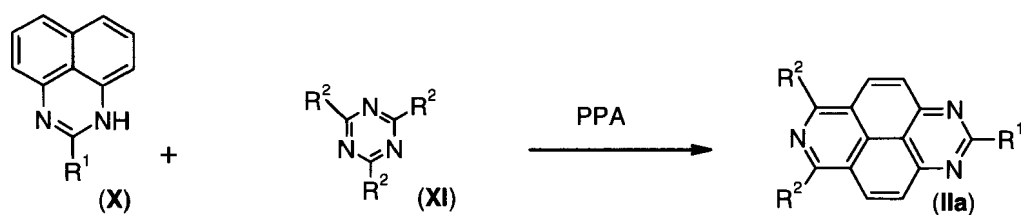
基、由G取代的C₂-C₂₀雜芳基較佳，諸如  ,





可根據或類似於已知的程序完成式I之化合物的合成。參考例如A.V.阿克森諾夫等人，雜環化合物化學(2003)1417。

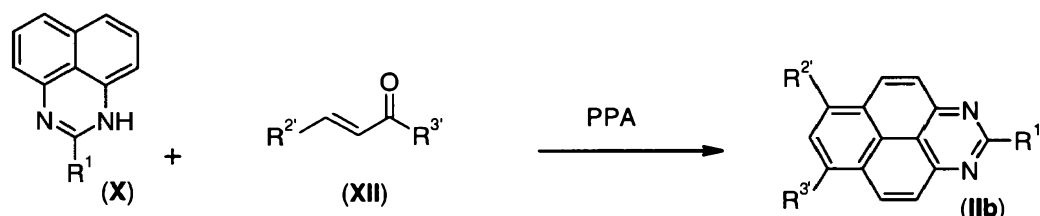
式IIa之化合物可藉由於多磷酸(PPA)存在下讓式X之化合物與式XI之化合物反應獲得(A.V.阿克森諾夫等人，四面體快迅(2008)707及同前所述(2008)1808)。



再者，式IIa之化合物(其中 $R^1=R^2=R^3$)可藉由於多磷酸(PPA)存在下讓式XIII之化合物與式XIV之化合物反應獲得(A.V.阿克森諾夫等人，雜環化合物化學(2002)665)。

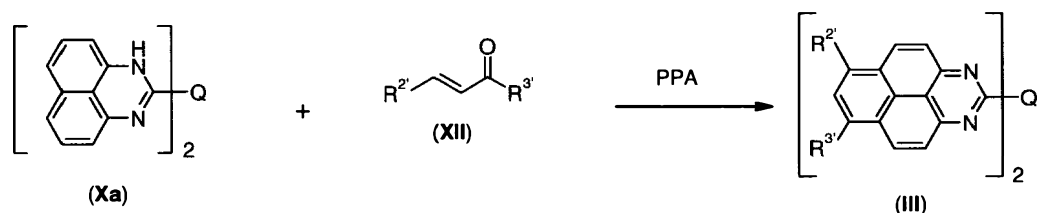


式IIb之化合物可藉由於多磷酸(PPA)存在下讓式X之化合物與式XII之化合物反應獲得(A.V.阿克森諾夫等人，雜環化合物化學(1997)1367及同前所述(2007)257)。



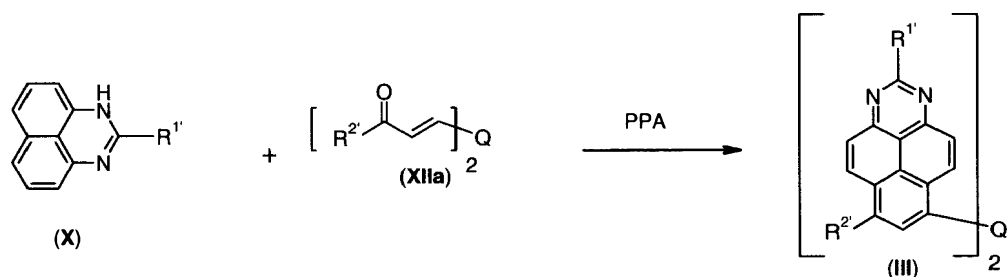
可根據或類似於描述在A.L.拉瑪斯沙伊日(Llamas-Saiz), J. Chem. Soc. Perkin. Trans.(1995)1389中的程序完成式X之化合物的合成。

可例如藉由在PPA中讓式Xa之化合物與XII反應來製備式III之化合物(其中Q為伸芳基或雜伸芳基)。

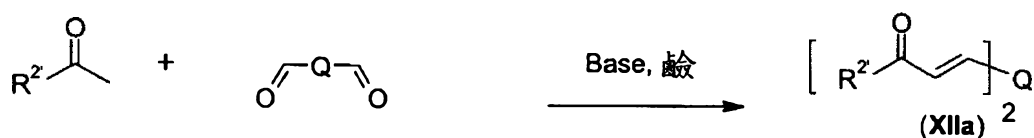


可如在 Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii (1980)96-100中所描述般製備式Xa之化合物。

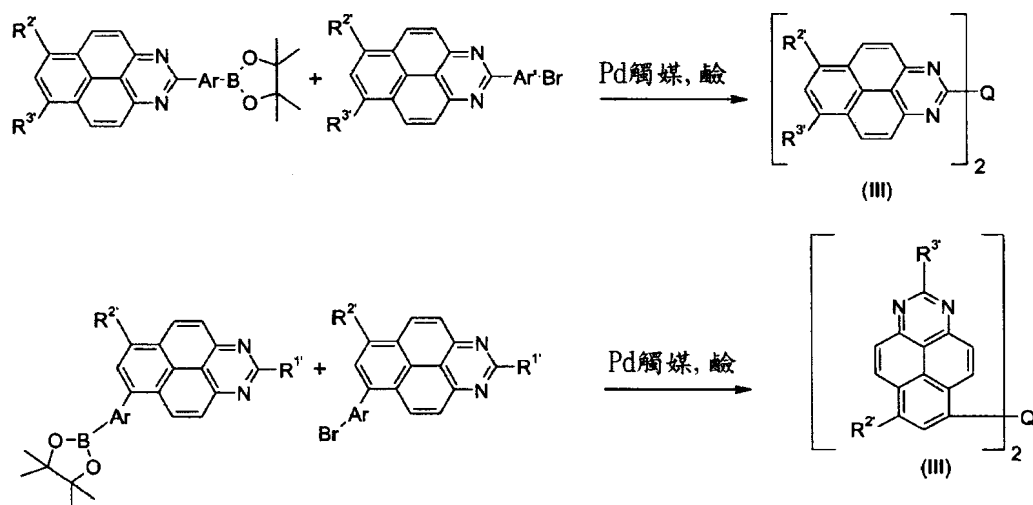
式III之化合物(其中Q為伸芳基或雜伸芳基)亦可從X及XIIa開始製備：



可如例如在合成通訊(Synthetic Communications) 32 (2002) 3389 中所描述般製備式 XIIa 之化合物：



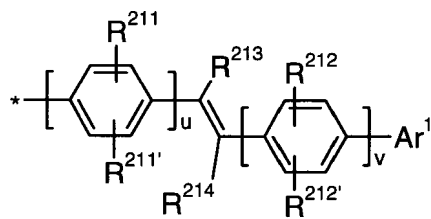
再者，亦可藉由攜帶硼酸酯官能基的氮芘與溴芳基氮芘之鈴木(Suzuki)耦合來製備式 III 之化合物。



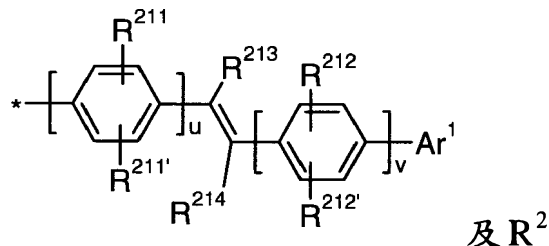
可如在 WO 04039786 中所描述般進行鈴木反應。Ar 及 Ar' 為伸芳基或雜伸芳基，其在攜帶硼酸酯官能基的氮芘與溴芳基氮芘之鈴木耦合後一起形成橋接單元 Q。

本發明之電子裝置為電致發光(EL)裝置較佳。式 I 或 III 之化合物可使用在有機發光二極體(OLED)中作為磷光化合物的宿主、作為發射及/或電子傳輸材料。

可使用式II之化合物(其中 R^1 、 R^2 及 R^3 之至少一個為式



之基團)作為螢光發射劑，特別是



與宿主材料組合。 R^1 為基團

及 R^2

與 R^3 彼此各自獨立地為 C_6-C_{24} 芳基、由 C_1-C_{18} 烷基或 C_1-C_{18} 烷氧基取代的 C_6-C_{24} 芳基的式II之化合物較佳。

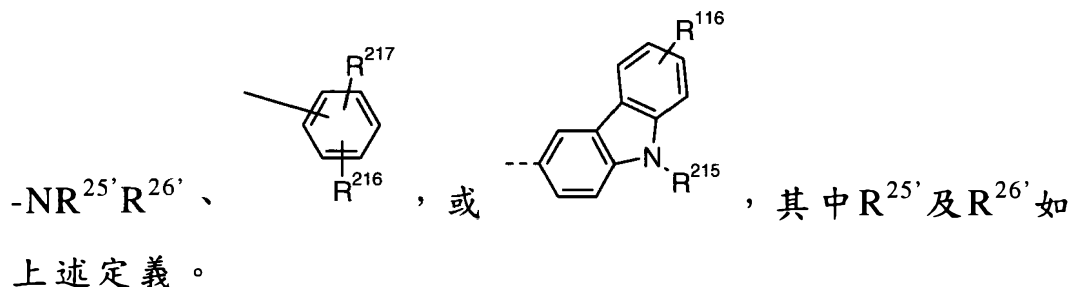
u 為0或1； v 為0或1。

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為H、 C_1-C_{18} 烷基或 C_1-C_{18} 烷氧基。

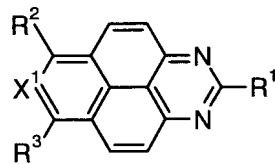
R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為H或 C_1-C_{18} 烷基。

X^1 為N或CH，特別是CH。 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為H。

Ar^1 為 $-NR^{25'}R^{26'}$ 、 C_6-C_{24} 芳基、由G取代的 C_6-C_{24} 芳基、 C_2-C_{20} 雜芳基、或由G取代的 C_2-C_{20} 雜芳基，較佳為



此等化合物之實施例有如顯示在申請專利範圍第6項中的化合物B-26至B-32。



式II之化合物 VI，作為螢光發射劑的宿主材料較佳，其中

R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為H；

X^1 為N或 CR^4 ，特別為N、CH，非常特別為CH；

R^1 至 R^4 彼此各自獨立地為 C_6 - C_{18} 芳基；由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基(特別是 C_1 - C_8 烷基)取代的 C_6 - C_{18} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基(特別是 C_1 - C_8 烷基)取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基。

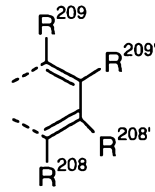
此等化合物的實施例有如顯示在申請專利範圍第6項中的化合物A-1、B-1、B-2、B-9、B-34、B-35及B-36。

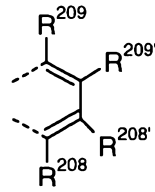
式Ivb及Vc之化合物為在電子應用中合適的電子傳輸材料，其中

X^1 為N或 CR^4 ，特別是N、CH，非常特別是CH；

R^1 至 R^4 彼此各自獨立地為 C_6 - C_{24} 芳基、由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基(特別是 C_1 - C_8 烷基)取代的 C_6 - C_{24} 芳基； C_2 - C_{20} 雜芳基、由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基(特別是 C_1 - C_8 烷基)取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基；

R^{206} 及 R^{207} 彼此各自獨立地為 C_6 - C_{24} 芳基；由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基(特別是 C_1 - C_8 烷基)取代的 C_6 - C_{24} 芳基； C_2 - C_{20} 雜芳基、經 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基(特別是 C_1 - C_8 烷基)取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基；或CN；或



R^{206} 及 R^{207} 一起形成式  之基團，其中

R^{209} 及 R^{208} 為 H；

$R^{209'}$ 及 $R^{208'}$ 彼此各自獨立地為 H、 C_1 - C_{18} 烷基、由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基取代的 C_6 - C_{24} 芳基； C_2 - C_{20} 雜芳基、或由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基。此等化合物可使用在 OLED 中在電子傳輸或注入層中。於此實例中，該化合物可單獨或與摻雜物使用。此等化合物亦可使用在有機光生伏打電池中作為電子接收材料。

此等化合物的實施例有如顯示在申請專利範圍第 6 項中之化合物 G-1 至 G-5、H-1、H-2、K-1 至 K-8、L-1 及 L-2。

合適的摻雜物有鹼金屬鹵化物，如 LiF、NaF、KF、CsF、LiCl；鹼金屬硫族化合物，如 Li_2O 、 K_2O 、 Cs_2O 、 Cs_2CO_3 ；鹼土硫族化合物，如 CaO、BaO，如描述在 US 2008/018237 中。使用以 1：1 的莫耳比率摻雜 Li 之 Bphen 之 n-摻雜的電子傳輸層之實施例揭示在 US 6,337,102 中。WO 2009000237 揭示出有機摻雜物及此等材料之用途。

在本發明的一個具體實例中，該 EL 裝置包含一陰極、一陽極及於此之間的發光層（其包含宿主材料及磷光發射材料，其中該宿主材料為式 I 或 III 之化合物）。

在本發明的另一個具體實例中，該 EL 裝置包含一陰

極、一陽極及一電子傳輸材料，其中該電子傳輸材料為式I或III之化合物或包含其。

在本發明的另一個具體實例中，該EL裝置包含一陰極、一陽極及一發射層，其中該發射層由式I或III之化合物組成或包含其。

在本發明的另一個具體實例中，該EL裝置包含一陰極、一陽極及一於此之間包含式I或III之材料的發光層，其中式I或III之化合物使用作為螢光宿主材料或螢光發射材料。

此外，本發明亦針對式I或III之化合物之用途，其使用於電子顯像感光器、光電整流器、太陽能電池、影像感應器、染料雷射及電致發光裝置。

該OLED裝置之發光層合適地包含一宿主材料及一或多種用於發射光的客宿材料。該宿主材料之一可為式I或III之化合物。該發光客宿材料的存在量通常少於宿主材料的量，及其典型存在量為宿主的最高15重量%，更典型為宿主的0.1至10重量%，及通常從宿主的2至8%。為了方便起見，磷光錯合物客宿材料於本文可指為磷光材料。該發射層可包括結合傳輸與發射性質之單一材料。不論該發射材料是為摻雜物或主要組分，發射層可包含其它材料，諸如調整發射層之發射的摻雜物。該發射層可包括組合複數種能發射出想要的光譜光之發射材料。

用於磷光材料的其它宿主材料

在本發明中有用的宿主材料可單獨或與其它宿主材料

組合著使用。其它宿主材料應該經選擇，以便三重態激子可有效率地從宿主材料轉移至磷光材料。合適的宿主材料描述在 WO 00/70655；01/39234；01/93642；02/074015；02/15645 及 US 20020117662 中。合適的宿主包括某些芳基胺類、三唑類、吡啶類及呋唑化合物。宿主之實施例有 4,4'-N,N'-二呋唑-聯苯(CBP)、2,2'-二甲基-4,4'-N,N'-二呋唑-聯苯、間-(N,N'-二呋唑)苯及聚(N-乙基呋唑)，包括其衍生物。

想要的宿主材料能形成連續薄膜。該發光層可包含多於一種宿主材料，以改良該裝置的薄膜形態學、電性質、發光效率及壽命。該發光層可包含一具有好的電洞傳輸性質之第一宿主材料，及一具有好的電子傳輸性質之第二宿主材料。

磷光材料

磷光材料可單獨使用，或在某些實例中，彼此組合著使用在相同或不同層中。磷光及相關材料的實施例描述在 WO 00/57676、WO 00/70655、WO 01/41512、WO 02/15645、US 2003/0017361、WO 01/93642、WO 01/39234、US 6,458,475、WO 02/071813、US 6,573,651、US 2002/0197511、WO 02/074015、US 6,451,455、US 2003/0072964、US 2003/0068528、US 6,413,656、6,515,298、6,451,415、6,097,147、US 2003/0124381、US 2003/0059646、US 2003/0054198、EP 1239526、EP 1238981、EP 1244155、US 2002/0100906、US 2003/0068526、US 2003/0068535、JP

2003073387、JP 2003073388、US 2003/0141809、US 2003/0040627、JP 2003059667、JP 2003073665 及 US 2002/0121638 中。

IrL_3 及 $\text{IrL}_2\text{L}'$ 型式的環金屬化 Ir(III) 錯合物之發射波長 (諸如發射綠光的面-三(2-苯基吡啶- $\text{N},\text{C}^{2'}$) 銱(III) 及 雙(2-苯基吡啶- $\text{N},\text{C}^{2'}$) 銱(III)(乙醯丙酮酸鹽)) 可藉由取代在環金屬化配位基 L 上的適當位置處之推或吸電子基團，或藉由選擇環金屬化配位基 L 的不同雜環而偏移。該發射波長亦可藉由輔助配位基 L' 之選擇而偏移。紅光發射劑的實施例有雙(2-(2'-苯并噻吩基)吡啶- $\text{N},\text{C}^{3'}$) 銱(III)(乙醯丙酮酸鹽) 及 三(1-苯基異喹啉- N,C) 銱(III)。發射藍光的實施例有雙(2-(4,6-二氟苯基)-吡啶- $\text{N},\text{C}^{2'}$) 銱(III)(甲吡啶鹽)。

已經報導紅光電激發磷光使用雙(2-(2'-苯并[4,5-a]噻吩基)吡啶- $\text{N},\text{C}^{3'}$) 銱(乙醯丙酮酸鹽) [$\text{Btp}_2\text{Ir}(\text{acac})$] 作為磷光材料 (阿達棄 (Adachi) C.，拉曼斯基 (Lamansky) S.，巴杜 (Baldo) M.A.，忘 (Kwong) R.C.，湯普生 (Thompson) M.E. 及 佛瑞斯特 (Forrest) S.R.，App. Phys. Lett.，78，1622 1624(2001)。

其它重要的磷光材料包括環金屬化的 Pt(II) 錯合物，諸如順-雙(2-苯基吡啶- $\text{N},\text{C}^{2'}$) 鉑(II)、順-雙(2-(2'-噻吩基)吡啶- $\text{N},\text{C}^{3'}$) 鉑(II)、順-雙(2-(2'-噻吩基)喹啉- $\text{N},\text{C}^{5'}$) 鉑(II) 或 (2-(4,6-二氟苯基)吡啶- $\text{N},\text{C}^{2'}$) 鉑(II) 乙醯丙酮酸鹽。Pt(II) 卟啉錯合物 (諸如 2,3,7,8,12,13,17,18-八乙基-21H,23H-卟吩鉑(II)) 亦為有用的磷光材料。

有用的磷光材料之又其它實施例包括三價鏷系的配位錯合物，諸如 Th^{3+} 及 Eu^{3+} (J. 奇多 (Kido) 等人，Appl. Phys. Lett.，65，2124(1994))。

其它重要的磷光材料描述在 WO 06/000544 及歐洲專利申請案案號 07102949.0 中。

磷光材料的實施例有化合物 A-1 至 B-234、B-1 至 B-234、C-1 至 C-44 及 D-1 至 D-234，其描述在 WO 08/101842 中；及化合物 A1-A144 及 B1-B144，其描述在 PCT/EP2009/051109 中。

阻障層

除了合適的宿主外，使用磷光材料之 OLED 裝置經常需要至少一層激子或電洞阻障層，以幫助將激子或電子電洞重組中心侷限至該包含宿主與磷光材料的發光層，或減低電荷載體(電子或電洞)的數目。在一個具體實例中，此阻障層將配置在電子傳輸層與發光層間。於此實例中，該阻障層之游離電位應該為電洞從宿主漂移進入電子傳輸層中之能量阻礙，同時電子親和力應該為電子更容易從電子傳輸層通過進入該包含宿主與磷光材料的發光層中。進一步想要(但非絕對需要)的是，阻礙材料的三重態能量大於磷光材料。合適的電洞阻礙材料描述在 WO 00/70655 及 WO 01/93642 中。二種有用的材料之實施例有浴銅靈(bathocuproine)(BCP)及雙(2-甲基-8-羥基喹啉)(4-苯基酚)鋁(III)(BalQ)。除了 BalQ 外的金屬錯合物亦已知可阻礙電洞及激子，如描述在 US 20030068528 中。US 20030175553 描

述出將面-三(1-苯基吡唑-N,C²)銦(III)(Irppz)使用在電子/激子阻障層中。

本發明之具體實例可提供優良的特徵，諸如操作效率、較高的亮度、色調、低驅動電壓及改良的操作穩定性。在本發明中有用的有機金屬化合物之具體實例可提供寬範圍的色調，包括在發射白光(直接或經由濾波器以提供多色顯示)上有用的那些。

通用的裝置架構

本發明之化合物可使用在許多使用小分子材料、寡聚性材料、聚合材料或其組合的OLED裝置組態中。這些包括包含單一陽極與陰極之非常簡單的結構至更複雜的裝置，諸如由陽極與陰極的正交陣列組成以形成畫素的被動陣列顯示器，及各者畫素各自獨立地例如以薄膜電晶體(TFT)控制之主動陣列顯示器。

有許多有機層組態。OLED的基本需求有陽極、陰極及設置在陽極與陰極間之有機發光層。可使用其它層，如此後將更完全描述。

典型的結構(對小分子裝置特別有用)由基材、陽極、電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、選擇性電洞或激子阻障層、電子傳輸層及陰極組成。這些層詳細描述在下列。要注意的是，該基材可再者設置成與陰極毗連，或該基材可實際上構成陽極或陰極。在陽極與陰極間之有機層合宜地指為有機EL元件。同樣地，該有機層的總結合厚度想要少於500奈米。

式IIa之化合物可使用在發光層(發射層)中作為宿主。

式IIa及IIb之化合物可使用在電子傳輸層中，選擇性與摻雜物組合。

在較佳的具體實例中，該裝置以下列順序包括玻璃基材、陽極(氧化銦錫(ITO))、電洞注入層(2-TNATA(4,4',4''-三(N-(石油脂-2-基)-N-苯基-胺基)三苯基胺；摻雜以有機或無機摻雜物的 α -NPD)、電洞傳輸層(4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD))、發射層(雙(2-甲基-8-羥基喹啉)-4-苯基酚鋁(III)(BalQ)、 α -NPD、摻雜以雙(1-苯基異喹啉)(乙醯丙酮酸鹽)銦(III)或雙-(2-甲基二苯并[f,h]喹啉)(乙醯丙酮酸鹽)銦(III)的化合物A-1或化合物A-19)、電子傳輸層(BalQ/AlQ₃；AlQ₃；化合物A-1/AlQ₃；1,3,5-三(N-苯基苯并咪唑-2-基)苯(TPBI)/化合物A-1；TPBI/AlQ₃；化合物B-38；摻雜以Cs₂CO₃或有機摻雜物的BalQ/BCP；摻雜以Cs₂CO₃或有機摻雜物的BalQ/化合物A-1；摻雜以Cs₂CO₃或有機摻雜物的BalQ/化合物B-38；化合物B-1；化合物B-39；BalQ/化合物B-1)、及陰極LiF/Al或Cs₂CO₃/Al。p-摻雜物的實施例例如在K.窩惹(Walzer)，B.馬愛寧(Maennig)，M.菲弗(Pfeiffer)及K.獅子(Leo)，Chem. Rev. 107(2007)1233-1271、EP 1596445A1、WO 2009/003455A1、DE 100357044、WO 2008/058525、WO 2008/138580、US 20080171228及US 2008/0265216中提到。合適的n-摻雜物有鹼金屬鹵化物，如LiF、NaF、KF、CsF、LiCl；鹼金屬硫族化合物，如Li₂O、K₂O、Cs₂O、Cs₂CO₃；鹼土硫族化合物，如CaO、BaO，如

描述在WO 2008/018237中。使用以1：1的莫耳比率摻雜Li的Bphen之n-摻雜電子傳輸層的實施例揭示在US 6,337,102中。WO 2009000237揭示出有機摻雜物及此材料之用途。

基材

該基材可依想要的光發射方向而呈光透明或不透明。對透過基材觀看EL發射來說，想要其具透光性質。在此實例中通常使用透明的玻璃或塑膠。該基材可為包含多層材料層的複合結構。此為將TFT提供在OLED層下之主動式陣列基材的典型實例。仍然需要的是，該基材(至少在發射像素化(pixelated)的區域中)由大大透明的材料組成，諸如玻璃或聚合物。對經由上電極觀看EL發射的應用來說，底部支撐物的透射特徵不重要，因此其可呈光穿透、光吸收或光反射。於此實例中所使用的基材包括(但不限於)玻璃、塑膠、半導體材料、矽、陶瓷及電路板材料。再次，該基材可為包含多層材料層之複合結構，諸如可在主動式陣列TFT設計中找到。在這些裝置組態中需要提供一光透明的上電極。

陽極

當經由陽極觀看想要的電致發光光發射(EL)時，該陽極應該對有興趣的發射光透明或實質上透明。在本發明中所使用之常見的透明陽極材料有氧化銦錫(ITO)、氧化銦鋅(IZO)及氧化錫，但是可使用其它金屬氧化物，包括(但不限於)摻雜鋁的氧化鋅、氧化鎂銦及氧化鎳鎢。除了這些氧化物外，可使用金屬氮化物，諸如氮化鎵；及金屬硒化物，

諸如硒化鋅；及金屬硫化物，諸如硫化鋅作為陽極。對僅經由陰極觀看EL發射的應用來說，陽極的透射特徵不重要及可使用任何導電材料(透明、不透明或反射)。此應用的導體之實施例包括(但不限於)黃金、銦、鉬、鈮及鉑。想要的陽極材料通常藉由任何合適的方法沉積，諸如蒸鍍、濺鍍、化學氣相沉積或電化學方法。陽極可使用熟知的光微影光刻方法圖形化。陽極可在塗佈其它層之前選擇性經研磨以減低表面粗糙度，以便減少短路或提高反射性。

陰極

當獨自經由陽極觀看光發射時，在本發明中所使用的陰極可由幾乎任何導電材料組成。想要的材料具有好的薄膜形成性質以保證與在下面的有機層有好的接觸、促進在低電壓下電子注入及具有好的穩定性。有用的陰極材料經常包括低功函數金屬(<4.0電子伏特)或金屬合金。一種有用的陰極材料由Mg:Ag合金組成，其中銀的百分比在範圍1至20%，如描述在US-A-4,885,221中。另一種合適的陰極材料種類包括與覆蓋以較厚的導電金屬層之有機層(例如，電子傳輸層(ETL))接觸的雙層(其包含該陰極與一薄電子注入層(EIL))。於此，該EIL較佳包括一低功函數金屬或金屬鹽，且若如此時，該較厚的覆蓋層不需要具有低功函數。此陰極之一由薄LiF層接著較厚的Al層組成，如描述在US-A-5,677,572中。摻雜鹼金屬的ETL材料(例如，摻雜Li的Alq)為有用的EIL之另一個實施例。其它有用的陰極材料組包括(但不限於)揭示在US-A-5,059,861、5,059,862及

6,140,763中的那些。

當經由陰極觀看光發射時，該陰極必需透明或幾乎透明。對此應用來說，金屬必需薄或必需使用透明的導電氧化物或這些材料之組合。光學透明的陰極已經更詳細描述在US-A-4,885,211、5,247,190、JP 3,234,963、美國專利案號5,703,436、5,608,287、5,837,391、5,677,572、5,776,622、5,776,623、5,714,838、5,969,474、5,739,545、5,981,306、6,137,223、6,140,763、6,172,459、EP 1076368、US-A-6,278,236及6,284,3936中。陰極材料典型藉由任何合適的方法沉積，諸如蒸鍍、濺鍍或化學氣相沉積。當需要時，可經由許多熟知的方法達成圖形化，包括(但不限於)掩模(through-mask)沉積、整合屏蔽法(integral shadow masking)(如描述在US-A-5,276,380及EP 0732868中)、雷射消融及選擇性化學氣相沉積。

電洞注入層(HIL)

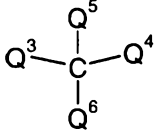
可在陽極與電洞傳輸層之間提供一電洞注入層。可提供該電洞注入材料以改良隨後的有機層之薄膜形成性質及使電洞容易注入電洞傳輸層中。合適於使用在電洞注入層中的材料包括(但不限於)卟啉化合物，如描述在US-A-4,720,432中；電漿沉積的碳氟化合物聚合物，如描述在US-A-6,208,075中；及某些芳香族胺，例如，間-MTDATA(4,4',4''-三[(3-甲基苯基)苯基胺基]三苯基胺)或2-TNATA(4,4',4''-三(N-(石油脂-2-基)-N-苯基-胺基)三苯基胺)。據報導在有機EL裝置中有用的另一種電洞注入材料描

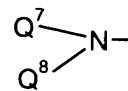
述在EP 0891121及EP 1029909中。

電洞傳輸層(HTL)

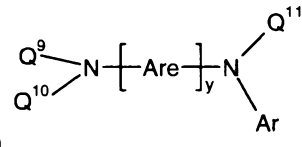
該有機EL裝置的電洞傳輸層包括至少一種電洞傳輸化合物(諸如芳香族三級胺)，其中後者經了解為包含至少一個僅鍵結至碳原子(其至少一個為芳香環的成員)的三價氮原子之化合物。在一種形式中，該芳香族三級胺可為芳基胺，諸如單芳基胺、二芳基胺、三芳基胺或聚合的芳基胺。典型的單體三芳基胺闡明在US-A-3,180,730中。經一或多個乙烯基取代及/或包含至少一個含活性氫基團的其它合適三芳基胺揭示在US-A-3,567,450及3,658,520中。更佳的芳香族三級胺種類有包含至少二個芳香族三級胺部分的那些，如描述在US-A-4,720,432及5,061,569中。此等化合物包括由結構式 Q^1-G-Q^2 (A) 所表示的那些，其中 Q^1 及 Q^2 為各自獨立地選擇的芳香族三級胺部分及 G 為連結基團(諸如碳對碳鍵結的伸芳基、伸環烷基或伸烷基)。在一個具體實例中， Q^1 或 Q^2 之至少一個包括多環的并合環結構，例如，萘。當 G 為芳基時，其合宜地為伸苯基、伸聯苯基或萘部分。

滿足結構式(A)及包含二個三芳基胺部分之有用的三

芳基胺種類由結構式  (B) 表示，其中 Q^3 及 Q^4 各者各自獨立地代表氮原子、芳基或烷基，或 Q^3 及 Q^4 一起代表完成環烷基的原子；及 Q^5 與 Q^6 各者各自獨立地代表依次以經

二芳基取代的胺基取代之芳基，如由結構式  (C) 指示出，其中 Q^7 及 Q^8 為各自獨立地選擇的芳基。在一個具體實例中， Q^7 或 Q^8 之至少一個包括多環的并合環結構，例如，萘。

另一種芳香族三級胺種類有四芳基二胺。想要的四芳基二胺包括二個透過伸芳基連結的二芳基胺基，諸如由式 I

指示出。有用的四芳基二胺包括由式  (D) 所表示的那些，其中每個 Are 為各自獨立地選擇的伸芳基，諸如伸苯基或蔥部分；y 為整數從 1 至 4；及 Ar、 Q^9 、 Q^{10} 及 Q^{11} 為各自獨立地選擇的芳基。在典型的具體實例中，Ar、 Q^9 、 Q^{10} 及 Q^{11} 之至少一種為多環的并合環結構，例如，萘。前述結構式 (A)、(B)、(C)、(D) 的多種烷基、伸烷基、芳基及伸芳基部分各者可依次經取代。典型的取代基包括烷基、烷氧基、芳基、芳氧基及鹵素(諸如氟、氯及溴)。該多種烷基及伸烷基部分典型包含從約 1 至 6 個碳原子。該環烷基部分可包含從 3 至約 10 個碳原子，但是典型包含五、六或七個環碳原子，例如環戊基、環己基及環庚基環結構。該芳基及伸芳基部分通常為苯基及伸苯基部分。

該電洞傳輸層可由單一或芳香族三級胺化合物的混合物形成。特別是，可使用三芳基胺(諸如滿足式 (B) 的三芳基胺)與四芳基二胺(諸如由式 (D) 指示出)之組合。當三芳基胺與四芳基二胺組合著使用時，後者配置如為一插入在三芳

基胺與電子注入及傳輸層間之層。有用的芳香族三級胺之闡明有下列：1,1-雙(4-二-對-甲苯基胺基苯基)環己烷、1,1-雙(4-二-對-甲苯基胺基苯基)-4-苯基環己烷、N,N,N',N'-四苯基-4,4''-二胺基-1,1':4',1'':4'',1'''-四聯苯基雙(4-二甲基胺基-2-甲基苯基)苯基甲烷、1,4-雙[2-[4-[N,N-二(對-甲苯基)胺基]苯基]乙烯基]苯(BDTAPVB)、N,N,N',N'-四-對-甲苯基-4,4'-二胺基聯苯、N,N,N',N'-四苯基-4,4'-二胺基聯苯、N,N,N',N'-四-1-萘基-4,4'-二胺基聯苯、N,N,N',N'-四-2-萘基-4,4'-二胺基聯苯、N-苯基吡啶、4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD)、4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-(2-萘基)胺基]聯苯(TNB)、4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]對-聯三苯、4,4'-雙[N-(2-萘基)-N-苯基胺基]聯苯、4,4'-雙[N-(3-二氫芴基)-N-苯基胺基]聯苯、1,5-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]萘、4,4'-雙[N-(9-蒽基)-N-苯基胺基]聯苯、4,4'-雙[N-(1-蒽基)-N-苯基胺基]-對-聯三苯、4,4'-雙[N-(2-菲基)-N-苯基胺基]聯苯、4,4'-雙[N-(8-丙二烯合萘基)-N-苯基胺基]聯苯、4,4'-雙[N-(2-芘基)-N-苯基胺基]聯苯、4,4'-雙[N-(2-稠四苯基)-N-苯基胺基]聯苯、4,4'-雙[N-(2-芘基)-N-苯基胺基]聯苯、4,4'-雙[N-(1-蒽基)-N-苯基胺基]聯苯、2,6-雙(二-對-甲苯基胺基)萘、2,6-雙[二-(1-萘基)胺基]萘、2,6-雙[N-(1-萘基)-N-(2-萘基)胺基]萘、N,N,N',N'-四(2-萘基)-4,4'-二胺基-對-聯三苯、4,4'-雙{N-苯基-N-[4-(1-萘基)-苯基]胺基}聯苯、2,6-雙[N,N-二(2-萘基)胺基]氟、4,4',4''-三[(3-甲基苯基)胺基]三苯基胺(MTDATA)及4,4'-雙[N-(3-甲基苯

基)-N-苯基胺基]聯苯(TPD)。可使用電洞傳輸層來提高導電度。 α -NPD及TPD為本徵電洞傳輸層之實施例。 p -摻雜的電洞傳輸層之實施例有以50:1的莫耳比率摻雜 F_4 -TCNQ的間-MTDATA，如揭示在US 6,337,102或DE 10058578中。

另一種有用的電洞傳輸材料種類包括多環的芳香族化合物，如描述在EP 1009041中。可使用含有多於二個胺基團的三級芳香族胺，包括寡聚性材料。此外，可使用聚合的電洞傳輸材料，諸如聚(N-乙基基吡啶)(PVK)、聚噻吩類、聚吡咯、聚苯胺及共聚物(諸如聚(3,4-乙二氧基噻吩)/聚(4-苯乙烯磺酸鹽)，亦稱為PEDOT/PSS)。

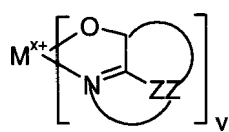
螢光發射材料及層(LEL)

除了磷光材料外，可在OLED裝置中使用其它發光材料，包括螢光材料。式I及III之化合物可作用為螢光發射材料。雖然通常使用名稱"螢光"來描述任何發光材料，於此實例中，我們指為從單重態激發狀態發射光的材料。可在與磷光材料相同的層中、在毗連層中、在毗連畫素中或任何組合使用螢光材料。必需關心的是，不能選擇將會相反影響磷光材料性能之材料。熟習該項技術者將了解，必需適當地設定在與磷光材料相同的層中或在毗連層中之材料的三重態激發狀態能量，以便防止不想要的消光。如更完全地描述在US-A-4,769,292及5,935,721中，該有機EL元件的發光層(LEL)包括發光性螢光或磷光材料，其中由於在此區域中的電子電洞對重組而產生電致發光。該發光層可由單一材料組成，但是更通常由摻雜以客宿發射材料的宿主

材料，或光發射主要來自發射材料及可為任何顏色之材料組成。在發光層中的宿主材料可為電子傳輸材料(如在下列定義)、電洞傳輸材料(如上述定義)或另一種材料或支撐電洞電子重組的材料之組合。螢光發射材料典型以宿主材料之0.01至10重量%併入。該宿主及發射材料可為小的非聚合物或聚合材料，諸如聚萸類及聚乙烯基亞芳基類(例如，聚(對-亞苯基亞乙烯基)，PPV)。在聚合物的實例中，小分子發射材料可分子地分散進入聚合宿主中，或該發射材料可藉由將較少的成分共聚合進入宿主聚合物中而加入。宿主材料可一起混合以改良薄膜形成、電性質、光發射效率、壽命或製造能力。該宿主可包含一具有好的電洞傳輸性質之材料及一具有好的電子傳輸性質之材料。

已知可使用的宿主及發射材料包括(但不限於)揭示在US-A-4,768,292、5,141,671、5,150,006、5,151,629、5,405,709、5,484,922、5,593,788、5,645,948、5,683,823、5,755,999、5,928,802、5,935,720、5,935,721及6,020,078中的那些。

8-羥基喹啉之金屬錯合物及類似的衍生物(式E)構成一種能支持電致發光的有用宿主化合物種類，及其特別合適於波長比500奈米長的光發射，例如，綠色、黃色、橙色及紅色。



，其中M代表金屬；v為整數從1至4；及ZZ

在每個事件中各自獨立地代表完成具有至少二個并合的芳香環之核子的原子。從前述可明瞭，該金屬可為單價、二價、三價或四價金屬。該金屬可例如為鹼金屬，諸如鋰、鈉或鉀；鹼土金屬，諸如鎂或鈣；土金屬，諸如鋁或鎵；或過渡金屬，諸如鋅或銨。大體而言，可使用任何已知為有用的螯合金屬之單價、二價、三價或四價金屬。ZZ完成一包含至少二個并合的芳香環(其至少一個為吡啶或吡喃環)之雜環核子。若需要時，其它環(包括脂肪族及芳香環二者)可與該二個需要的環并合。為了避免加入分子主體而沒有在功能上改良，環原子數通常維持在18或較少。

有用的螯合類奧辛(oxinoid)化合物之闡明有下列：

CO-1：三奧辛鋁[別名，三(8-羥基喹啉)鋁(III)]

CO-2：二奧辛鎂[別名，雙(8-羥基喹啉)鎂(II)]

CO-3：雙[苯并{f}-8-羥基喹啉]鋅(II)

CO-4：雙(2-甲基-8-羥基喹啉)鋁(III)-貢-側氧-雙(2-甲基-8-羥基喹啉)鋁(III)

CO-5：三奧辛鈹[別名，三(8-羥基喹啉)鈹]

CO-6：三(5-甲基奧辛)鋁[別名，三(5-甲基-8-羥基喹啉)鋁(III)]

CO-7：奧辛鋰[別名，(8-羥基喹啉)鋰(I)]

CO-8：奧辛鎵[別名，三(8-羥基喹啉)鎵(III)]

CO-9：奧辛銨[別名，四(8-羥基喹啉)銨(IV)]

有用的螢光發射材料包括(但不限於)蔥、稠四苯、咕噸、芘、紅螢烯、香豆素、若丹明及喹吖酮之衍生物、二

氰基亞甲基吡喃化合物、噻吡喃化合物、聚甲川化合物、吡錠(pyrylium)及硫吡錠(thiapyrylium)化合物、蒽衍生物、佩利弗蘭辛(periflanthene)衍生物、茛并茛衍生物、雙(吡啶基)胺硼化合物、雙(吡啶基)甲烷化合物及羧苯乙烯基(carbostyryl)化合物。有用的材料之闡明性實施例包括(但不限於)描述在US 7,090,930B2中的化合物L1至L52。

電子傳輸層(ETL)

使用在形成本發明之有機EL裝置的電子傳輸層上的較佳薄膜形成材料有金屬螯合的類奧辛化合物，包括奧辛其自身(亦通常指為8-喹啉醇或8-羥基喹啉)的螯合物。此等化合物幫助注入及傳輸電子並讓二者具有高性能程度且容易以薄膜形式製造。典型預期的類奧辛化合物有滿足先前描述的結構式(E)之那些。其它電子傳輸材料包括多種丁二烯衍生物(如揭示在US 4,356,429中)及多種雜環光學增白劑(如描述在US 4,539,507中)。滿足結構式(G)的苯并吡啶類亦為有用的電子傳輸材料。三吡啶類亦已知可有用作為電子傳輸材料。可使用摻雜來提高導電度。AlQ₃為本徵電子傳輸層的實施例。n-摻雜的電子傳輸層之實施例有以1:1的莫耳比率摻雜Li之Bphen，如揭示在美國6,337,102中。

有機層之沉積

可合適地藉由任何合適於有機材料形成之方法來沉積上述提及的有機材料。在小分子的實例中，它們合宜地經由熱蒸發沉積，但是可藉由其它方法沉積(諸如從含有選擇性的黏著劑之溶劑)以改良薄膜形成。若該材料可溶或呈寡

聚/聚合形式時，溶液加工通常較佳(例如旋轉塗佈、噴墨印刷)。可使用樹狀分子(dendrimer)取代基來提高小分子進行溶液加工的能力。可使用屏蔽、整合屏蔽(US 5,294,870)、來自供應片的空間限定熱染料轉移(US 5,688,551、5,851,709及6,066,357)及噴墨方法(US 6,066,357)達成圖形化沉積。

密封

大部分OLED裝置對濕氣或氧或二者敏感，因此它們通常在惰性環境(諸如氮或氬)中與去濕劑(諸如氧化鋁、鋁礬土、硫酸鈣、黏土、矽凝膠、沸石、鹼金屬氧化物、鹼土金屬氧化物、硫酸鹽或金屬鹵化物及過氯酸鹽)一起密封。密封及去濕的方法包括(但不限於)描述在US 6,226,890中的那些。此外，阻障層(諸如 SiO_x 、鐵弗龍(Teflon)及交替的無機/聚合層)在密封技藝中已知。

根據本發明的具體實例所製造之裝置可併入廣泛多種消費者產物中，包括平板顯示器、電腦監視器、電視、廣告牌、用於內部或外部照明及/或發出信號的燈、全透明顯示器、可撓性顯示器、雷射印表機、蜂窩式行動電話、個人數位助理(PDA)、膝上型輕便電腦、數位照相機、攝錄影機、取景器、微顯示器、傳播工具、電影院或體育場螢幕或招牌。可使用多種控制機制來控制根據本發明所製造的裝置，包括被動陣列及主動陣列。

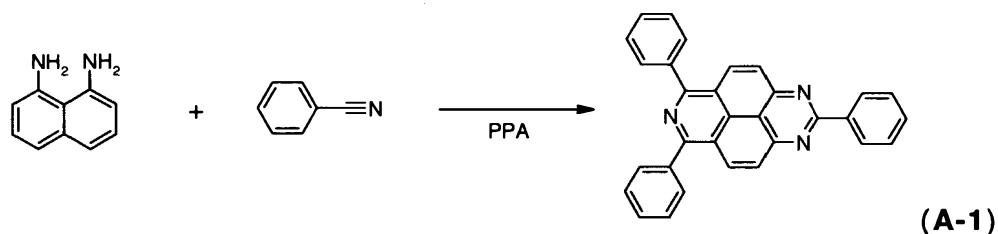
【實施方式】

較佳實施例之詳細說明

本發明的多種特徵及觀點闡明進一步在下列實施例中。雖然顯現出這些實施例以對熟習該項技術者顯示出如何在本發明之範圍內操作，但它們未在本發明的範圍上提供作為限制，其中該範圍僅在申請專利範圍中定義。除非在下列實施例中及在專利說明書與申請專利範圍中別處有指示出，否則全部的份及百分比皆以重量計、溫度以攝氏度計及壓力在或接近大氣壓下。

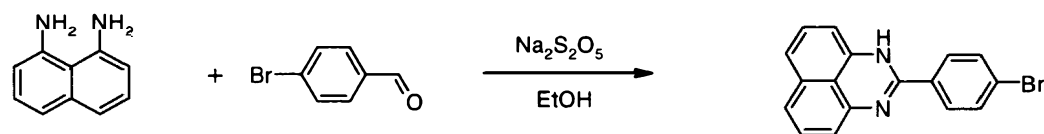
實施例

實施例1



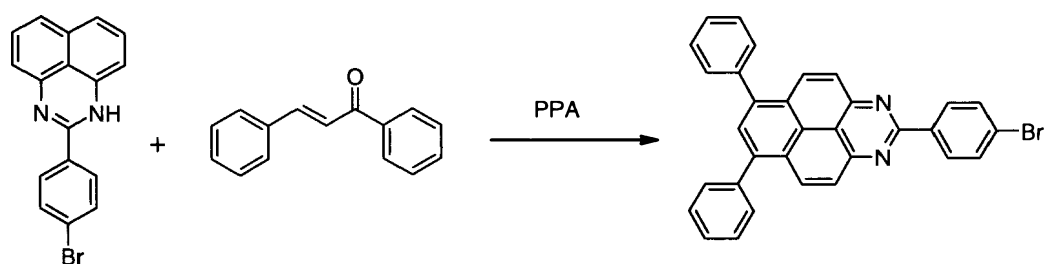
產物根據雜環化合物化學43(2007)665製備：將50克多磷酸加入至5.00克(31.6毫莫耳)的萘-1,8-二胺及16.3克(158毫莫耳)的苯甲腈。在氮氣中，於180°C下加熱該反應混合物18小時。移除加熱槽及加入50毫升乙醇。將反應混合物傾入水中及以氨水溶液中中和。過濾出產物且以水及水/乙醇1/1清洗。將產物溶解在甲苯中及在矽凝膠上過濾。在真空中移除溶劑及以醋酸乙酯對產物進行索司勒(soxhlet)萃取(產率：1.26克(9.2%))。熔點：295.0-296.0°C。

實施例2

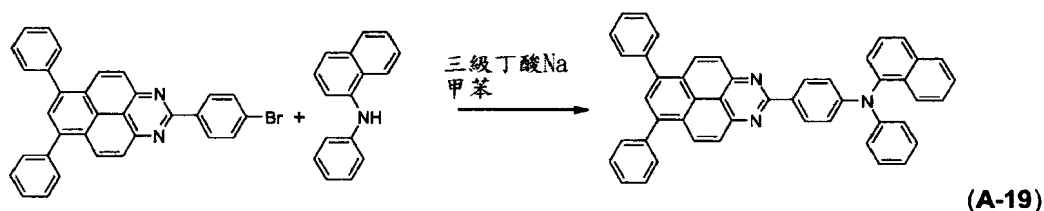


a) 將10.0克(63.2毫莫耳)的萘-1,8-二胺、12.9克(69.5毫

莫耳)的4-溴-苯甲醛及13.2克(69.5毫莫耳)的二亞硫酸鈉溶解在150毫升的乙醇中。在氮氣中迴流該反應混合物3小時及冷卻至25°C。過濾出產物並以水及乙醇清洗(產率：14.4克(71%))。



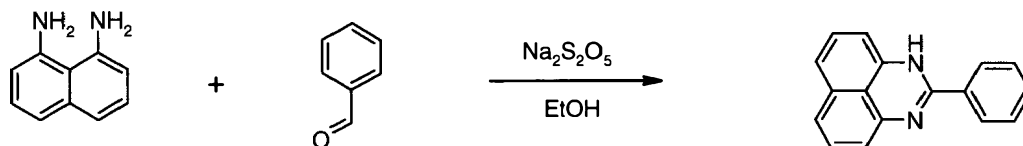
b) 將1.00克(3.09毫莫耳)實施例2a的產物及0.710克(3.40毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至10克多磷酸與5毫升甲苯之混合物。在氮氣中，於90°C下攪拌該反應混合物6小時。加入20毫升乙醇及30毫升水。將懸浮液傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物，以水、乙醇及再次水清洗(產率：0.66克(42%))。



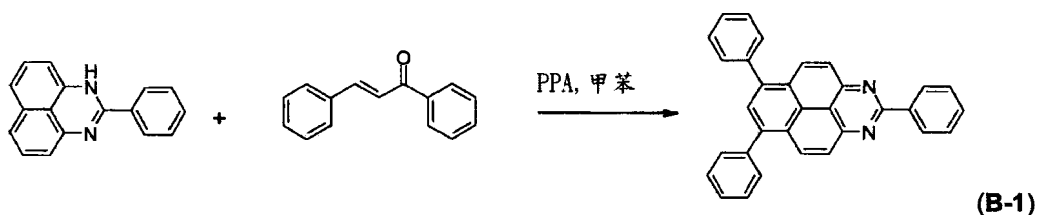
c) 將3.00克(5.86毫莫耳)實施例2b的產物、1.41克(6.45毫莫耳)的萘-1-基-苯基-胺及620毫克(6.45毫莫耳)的三級丁酸鈉溶解在80毫升的甲苯中。以氫除氣該反應混合物。加入66毫克(0.29毫莫耳)醋酸鈹(II)。以氫除氣該反應混合物。加入119毫克(0.59毫莫耳)的三三級丁基-磷烷(phosphane)。以氫除氣該反應混合物，在90°C下在氮氣中攪拌3小時，然後冷卻至25°C及以1%氰化鈉水溶液清洗。分

離有機相及移除溶劑。在矽凝膠上以甲苯/己烷3/7管柱層析，以產生產物(產率：870毫克(23%))。熔點：309.5°C。

實施例3

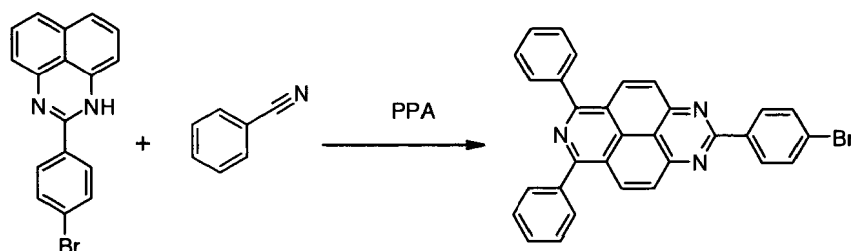


a) 將50毫升乙醇加入至3.60克(22.8毫莫耳)的萘-1,8-二胺、2.66克(25.0毫莫耳)的苯甲醛及4.76克(25.0毫莫耳)的二亞硫酸鈉。迴流該反應混合物2.5小時。過濾出產物並以乙醇及水清洗(產率：89%)。



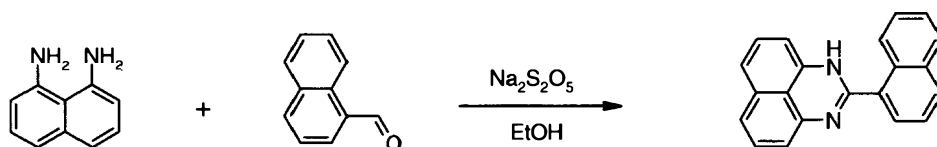
b) 將20克的多磷酸及10毫升的甲苯加入至2.00克(8.19毫莫耳)實施例1a的產物及1.88克(9.01毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮。在氮氣中，於80°C下攪拌該反應混合物18小時。移除加熱槽及加入60毫升水。將懸浮液傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物及以乙醇清洗及以醋酸乙酯索司勒萃取(產率：1.10克(31%))。熔點：273.0-274.5°C。

實施例4

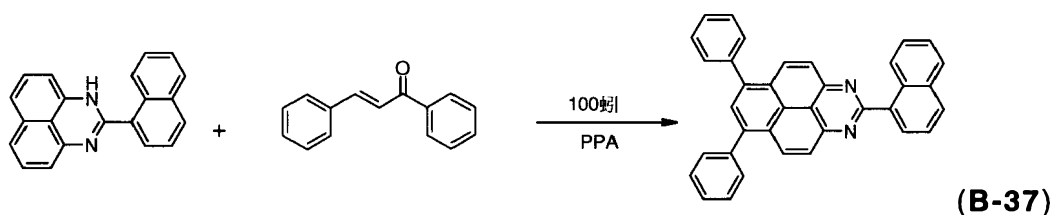


將20克多磷酸加入至2.00克(6.19毫莫耳)實施例2a的產物及2.55克(24.8毫莫耳)的苯甲腈。在180°C下，於氮氣中攪拌該反應混合物17小時。移除加熱槽及加入20毫升乙醇及30毫升水。將懸浮液傾入水中及以氨水溶液中和水相。過濾出產物，以水、乙醇及再次水清洗及以醋酸乙酯索司勒萃取(產率：1.83克(58%))。

實施例5



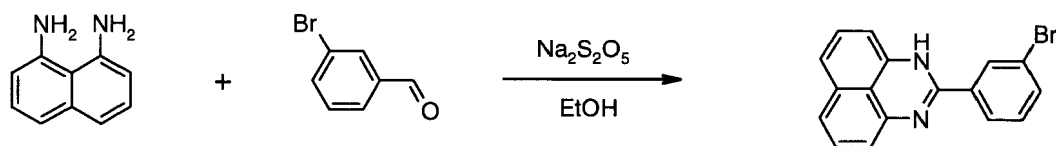
a) 將100毫升乙醇加入至20.0克(126毫莫耳)的萘-1,8-二胺、21.7克(139毫莫耳)的萘-1-羧醛(carbaldehyde)及26.4克(139毫莫耳)的二亞硫酸鈉。在氮氣下迴流該反應混合物6小時。過濾出產物及以乙醇及水清洗(產率：25.6克(69%))。沒有進一步純化將該產物使用在下一個反應步驟中。



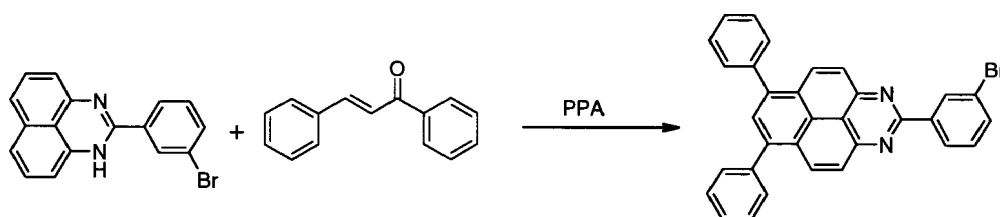
b) 將2克(6.79毫莫耳)實施例5a的產物、1.56克(7.47毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至20克多磷酸與3毫升甲苯之混合物。在100°C下加熱該反應混合物57小時及將其傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物，以水及乙醇清洗，以醋酸乙酯煎煮二次，以醋酸乙酯索司勒萃取，在矽凝膠上以甲苯過濾及以二乙基醚煎煮(產率：830毫克)

(25%))。熔點：260-261°C。

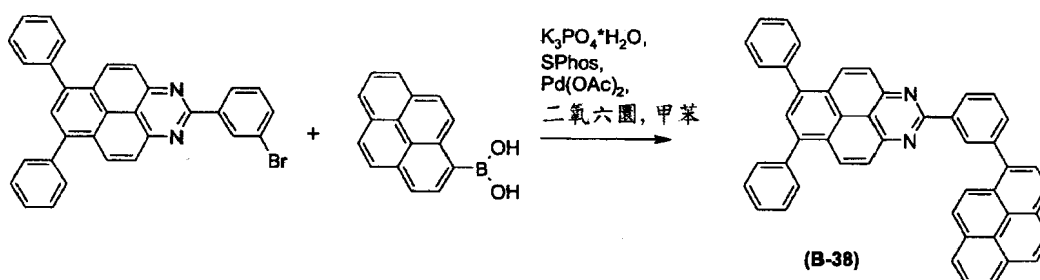
實施例6



a) 將300毫升乙醇加入至9.00克(56.9毫莫耳)的萘-1,8-二胺、11.6克(62.6毫莫耳)的3-溴-苯甲醛及11.9克(62.6毫莫耳)的二亞硫酸鈉。在氮氣下迴流該反應混合物14小時及熱過濾。以乙醇清洗固體。收集乙醇相。部分蒸餾掉乙醇及將乙醇溶液傾入水中。過濾出產物及以水清洗。沒有進一步純化將該產物使用在下一個反應步驟中(產率：17.0克(93%))。



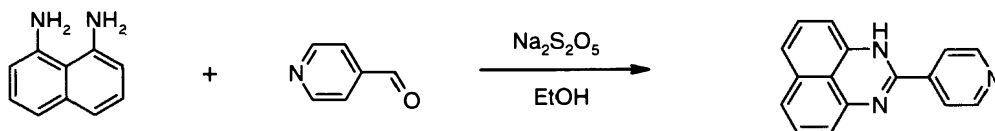
b) 將5克(15.5毫莫耳)實施例6a的產物、3.54克(17.0毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至50克多磷酸與2毫升甲苯的混合物。在氮氣中，在100°C下加熱該反應混合物22小時及將其傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物，以水及乙醇清洗及以乙醇煎煮。產率3.82克(48%)。



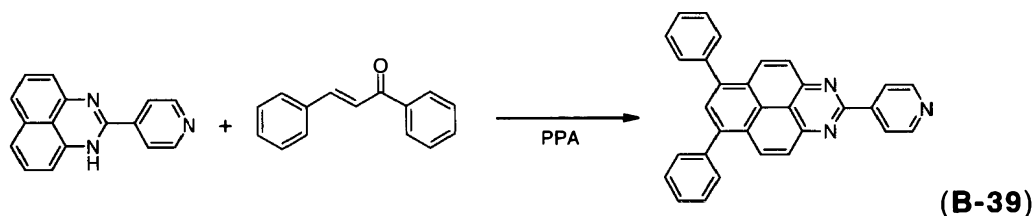
c) 以氫除氣2.00克(39.1毫莫耳)實施例6b的產物、1.15

克(4.69毫莫耳)的1-萘硼酸及2.84克(11.7毫莫耳)的磷酸三鉀單水合物。加入10毫升的1,4-二氧六環、40毫升的甲苯及8毫升的水。以氫除氣該反應混合物。加入96毫克(0.24毫莫耳)的2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(Sphos)及8.8毫克(0.039毫莫耳)的醋酸鈮(II)，及在氫氣中加熱該反應混合物4小時。蒸餾掉溶劑，過濾出產物及以水及乙醇清洗。在矽凝膠上以甲苯/環己烷7/3管柱層析而產生產物，以二乙基醚煎煮(產率：820毫克(33%))。熔點：240°C。

實施例7



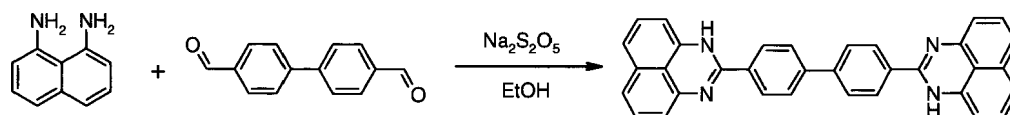
a) 將50毫升乙醇加入至5.00克(31.6毫莫耳)的萘-1,8-二胺、3.72克(34.8毫莫耳)的吡啶-4-羧醛及6.61克(34.8毫莫耳)的二亞硫酸鈉。在氫氣下迴流該反應混合物17小時及熱過濾。以乙醇清洗固體。收集乙醇相。部分蒸餾掉乙醇及將乙醇溶液傾入水中。過濾出產物，以水清洗及沒有純化將其使用在下一個反應步驟中(產率：7.33克(95%))。



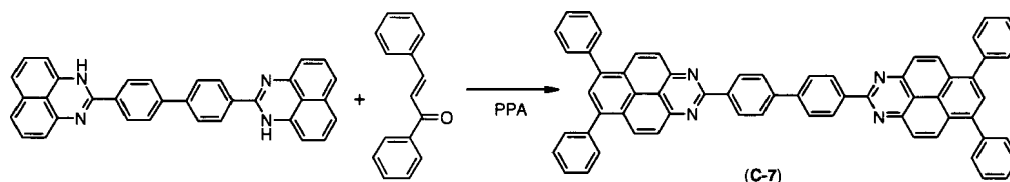
b) 將5克(20.4毫莫耳)實施例8a的產物、4.67克(22.4毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至50克多磷酸與3毫升甲苯之混合物。在氫氣下將該反應混合物加熱至100°C 26小時及將其傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物及以

水、乙醇及再次水清洗。在矽凝膠上以甲苯/醋酸乙酯管柱層析而產生產物，以二乙基醚索司勒萃取(產率：2.00克(23%))。熔點280-284°C。

實施例8



a) 在氮氣下迴流在80毫升乙醇中之5.00克(31.6毫莫耳)的萘-1,8-二胺、24.0克(126毫莫耳)的二亞硫酸鈉及2.99克(14.2毫莫耳)的聯苯基-4,4'-二羧醛之混合物22小時。將該反應混合物冷卻至25°C，過濾出產物，以水及乙醇清洗且沒有進一步純化使用在下一個反應步驟中(產率：6.90克(100%))。

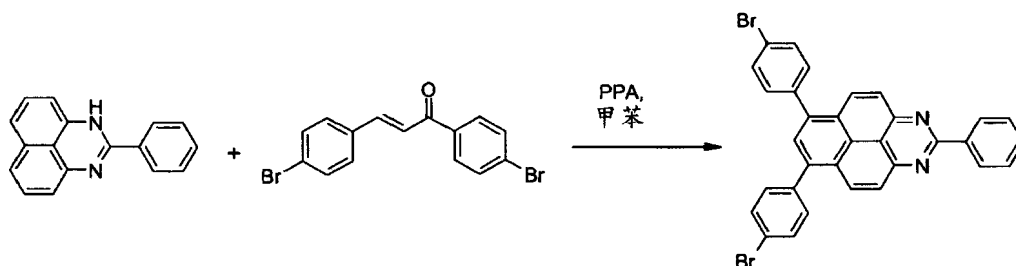


b) 將1.50克(3.08毫莫耳)實施例9a的產物、2.89克(13.9毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至20克多磷酸與5毫升甲苯之混合物。在氮氣中將該反應混合物加熱至100°C 94小時及將其傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物，以水、乙醇及再次水清洗及以丁-2-酮煎煮。在矽凝膠上以甲苯/醋酸乙酯100/1管柱層析，以產生產物(產率：230毫克(9%))。

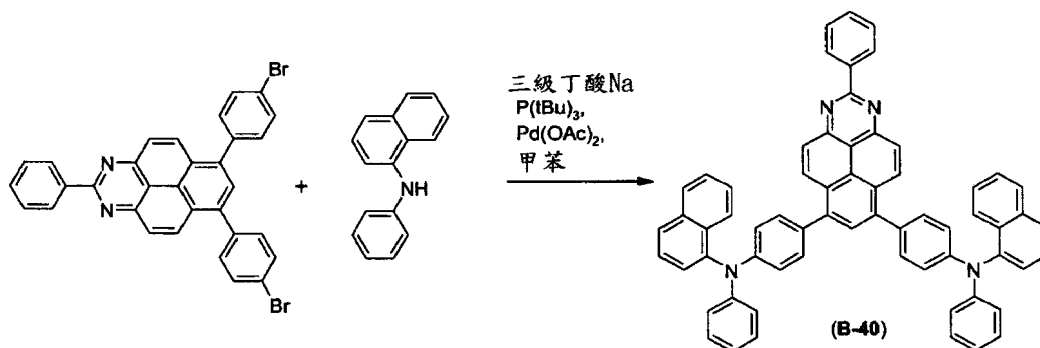
^1H NMR(300 MHz, CDCl_3): δ =8.94(d, J=8.4赫茲, 4H), 8.66(d, J=9.4赫茲, 4H), 8.31(d, J=9.4赫茲, 4H), 8.08(s,

2H), 7.92(d, 8.5赫茲, 4H), 7.48-7.65 ppm(m, 20H)。

實施例9



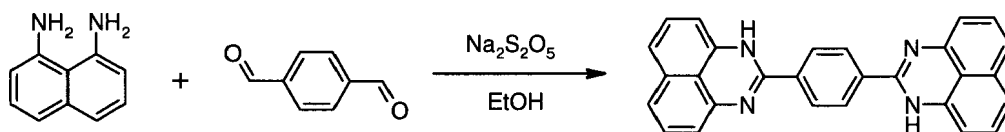
a) 將3.50克(14.3毫莫耳)實施例3a的產物及6.29克(17.2毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至35克多磷酸與5毫升甲苯之混合物。在氮氣中，於100°C下加熱該反應混合物45小時及將其傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物，以水、乙醇及再次水清洗及以氯仿索司勒萃取。將二乙基醚加入至氯仿層及過濾出產物(產率：2.75克(33%))。



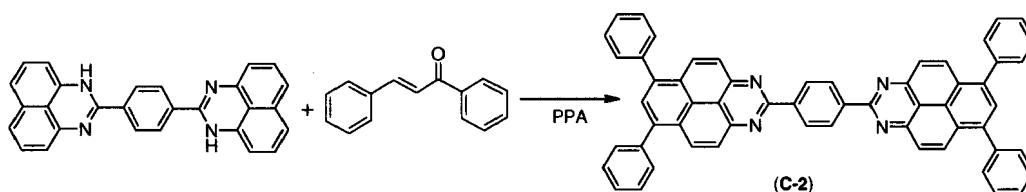
b) 將2.00克(3.39毫莫耳)實施例9a的產物、1.63克(7.45毫莫耳)的萘-1-基-苯基-胺及980毫克(10.2毫莫耳)的三級丁酸鈉溶解在50毫升甲苯中。以氮除氣該反應混合物。加入38毫克(0.17毫莫耳)的醋酸鈹(II)。以氮除氣反應混合物。加入69毫克(0.34毫莫耳)的三三級丁基-磷烷。以氮除氣反應混合物及在氮氣中於100°C下攪拌28小時。過濾出產物及以甲苯、乙醇、水及再次乙醇清洗(產率：2.65克(90%))。

^1H NMR(300 MHz, CDCl_3): δ =8.84(d, J =6.7 赫茲, 2H), 8.78(d, J =9.4 赫茲, 2H), 8.27(d, J =3 赫茲, 2H), 8.12(s, 1H), 8.07(d, J =8.4 赫茲, 2H), 7.96(d, J =7.9 赫茲, 2H), 7.86(d, J =8.1 赫茲, 2H), 7.44-7.68(m, 15H), 6.90-7.37 ppm(m, 16H)。

實施例 10



a) 在氮氣下，在 120 毫升乙醇中迴流 10.0 克 (63.2 毫莫耳) 的萘-1,8-二胺、361 克 (190 毫莫耳) 的二亞硫酸鈉及 3.82 克 (28.5 毫莫耳) 的苯-1,4-二羧醛之混合物 22 小時。將反應混合物冷卻至 25°C ，過濾出產物，以乙醇、水及乙醇清洗。以乙醇索司勒萃取而產生產物 (產率 6.90 克 (100%))。

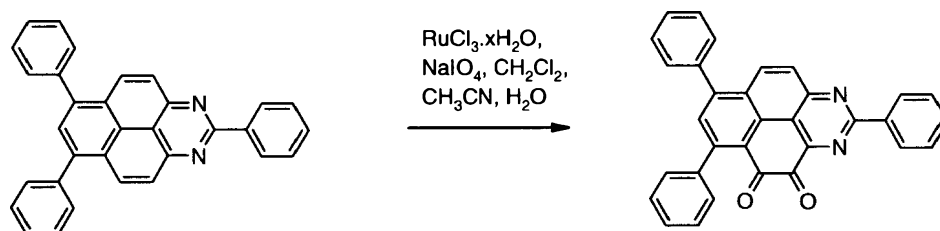


b) 將 5.70 克 (13.9 毫莫耳) 實施例 9a 的產物及 13.0 克 (62.5 毫莫耳) 的 (E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至 60 克多磷酸與 5 毫升甲苯之混合物。在氮氣中，於 100°C 下加熱反應混合物 47 小時及將其傾入水中。過濾出產物及以水及乙醇清洗。以氨水溶液中中和在水中的產物懸浮液。過濾出產物，以水、乙醇及再次水清洗及以丁-2-酮煎煮。在矽凝膠上以甲苯/醋酸乙酯 100/1 管柱層析而產生產物 (產率：230 毫克 (8%))。

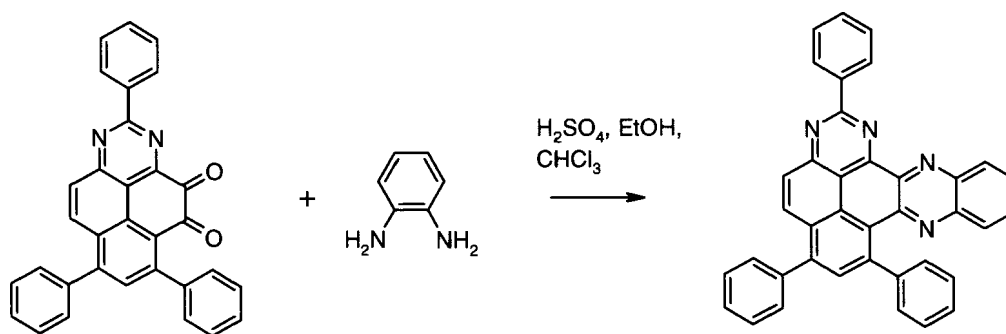
^1H NMR(300 MHz, CDCl_3): δ =9.10(s, 4H), 8.72(d,

2H, $J=9.5$ 赫茲, 4H), 8.34(d, $J=9.5$ 赫茲, 4H), 8.15(s, 2H), 7.53-7.78 ppm(m, 24H)。

實施例11



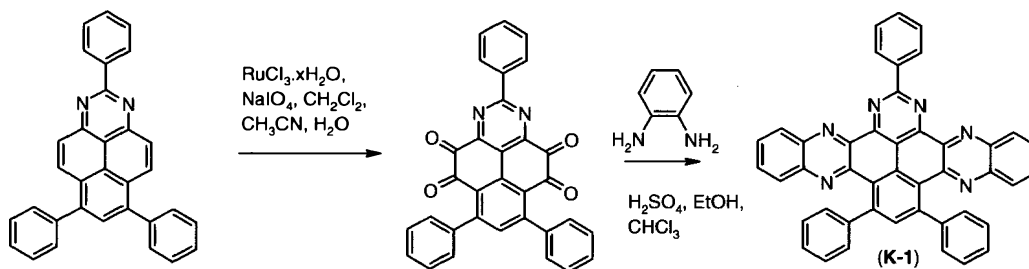
a) 在氮氣中，於60°C下攪拌5.00克(11.6毫莫耳)實施例3b的產物、550毫克(2.66毫莫耳)的氯化鈦(III)水合物(~41% Ru)、20.3克(94.9毫莫耳)的過碘酸鈉在50毫升二氯甲烷、50毫升乙腈及60毫升水中之混合物15小時。將反應混合物傾入水中。過濾出產物，以水及乙醇清洗，在亥孚洛(Hyflo)上以氯仿過濾及沒有進一步純化使用在下一個反應步驟中(產率2.70克(48%))。



b) 將2.70克(5.48毫莫耳)實施例11a的產物及1.42克(13.2毫莫耳)的苯-1,2-二胺溶解在15毫升氯仿及30毫升乙醇中。加入5滴硫酸(97%)。迴流該反應混合物16小時及冷卻至25°C。過濾出產物，以乙醇、水及再次乙醇清洗。在矽凝膠上以二氯甲烷管柱層析導致產率10%的產物。

^1H NMR(300 MHz, CDCl_3): $\delta=8.63-8.67(\text{m}, 2\text{H})$, $8.42(\text{d}, J=9.4$ 赫茲, $1\text{H})$, $8.05(\text{d}, J=9.4$ 赫茲, $1\text{H})$, $7.77(\text{s}, 1\text{H})$, $7.42-7.60$ ppm(m, $17\text{H})$ 。

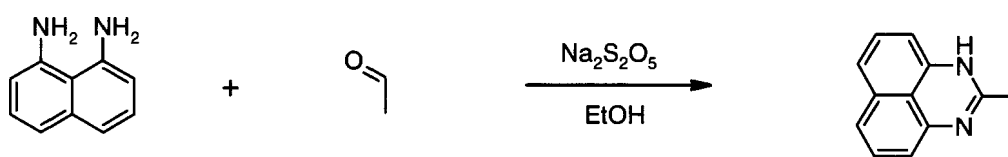
實施例12



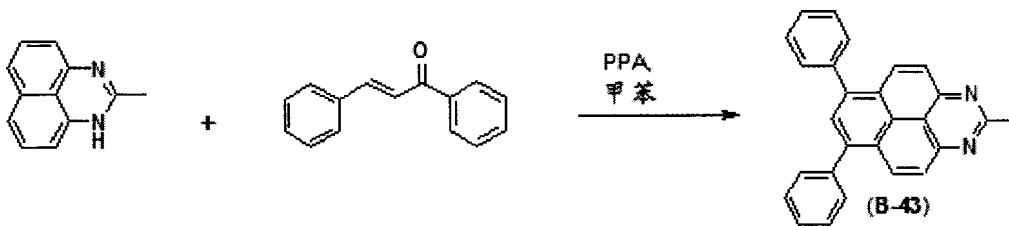
重覆實施例11，除了在第一反應步驟中使用更多氧化劑及較長的反應時間外。

^1H NMR(300 MHz, CDCl_3): $\delta=9.13(\text{d}, J=6.9$ 赫茲, $2)$, $8.53(\text{d}, J=8.4$ 赫茲, $2\text{H})$, $8.03(\text{s}, 1\text{H})$, $7.84(\text{dd}, J=8.4$ 赫茲, $J=1.4$ 赫茲, $2\text{H})$, $7.76(\text{dd}, J=8.4$ 赫茲, $J=1.3$ 赫茲, $2\text{H})$, $7.72-7.43(\text{m}, 13\text{H})$, 7.35 ppm(d, $J=8.6$ 赫茲, $2\text{H})$ 。

實施例13



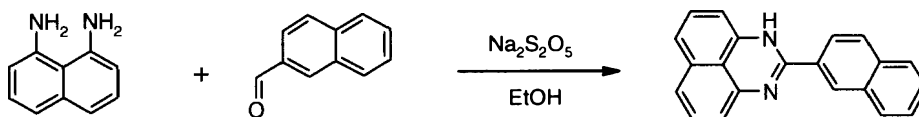
a) 將100毫升乙醇加入至10.0克(63.2毫莫耳)的萘-1,8-二胺、3.34克(75.9毫莫耳)的乙醛及24.0克(126毫莫耳)的二亞硫酸鈉。在氮氣中，在 40°C (油浴)下攪拌該反應混合物4小時及將其傾入水中。以二氯甲烷萃取水相。以硫酸鎂乾燥有機相及在真空中移除溶劑(產率：6.55克(57%))。



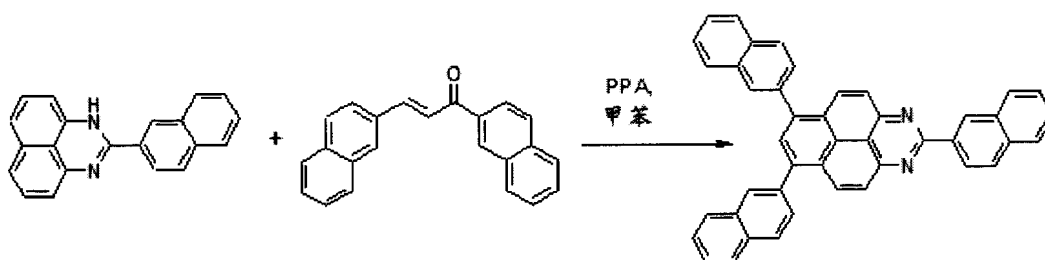
b)將4.00克(22.0毫莫耳)實施例13a的產物、5.03克(24.2毫莫耳)的(E)-1,3-二苯基-丙烯酮加入至40克多磷酸(PPA)與3毫升甲苯之混合物。在氮氣下將反應混合物加熱至100°C 31小時及將其傾入水中。過濾出產物及以水、乙醇及再次水清洗。以氨水溶液中中和在水中的產物懸浮液。過濾出產物及以乙醇清洗(產率：2.12克(26%))。

¹H NMR(300 MHz, CDCl₃): δ=8.70(d, J=9.4 赫兹, 2H), 8.18(d, J=9.4 赫兹, 2H), 8.15(s, 1H), 7.52-7.71(m, 10h), 3.20(s, 3H)。

實施例 14

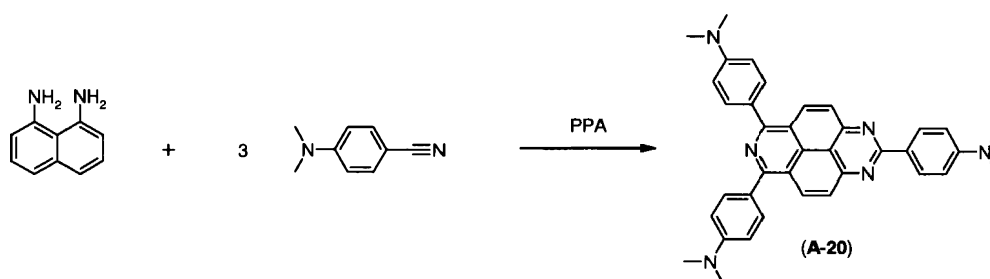


a) 將100毫升乙醇加入至7.00克(44.3毫莫耳)的萘-1,8-二胺、7.60克(48.7毫莫耳)的萘-2-羧醛及9.25克(48.7毫莫耳)的二亞硫酸鈉。在氮氣下迴流該反應17小時。過濾出產物及以乙醇及水清洗(產率：7.27克(56%))。沒有純化將產物使用在下一個反應步驟中。



b)將5克(17.0毫莫耳)實施例14a的產物、6.29克(20.4毫莫耳)的(E)-1,3-二-萘-2-基-丙烯酮加入至50克多磷酸與2毫升甲苯之混合物。在氮氣下將反應混合物加熱至100°C 28小時及將其傾入水中。以氨水溶液中和水相。過濾出產物及以水、乙醇及再次水清洗。以醋酸乙酯及水與甲苯索司勒萃取以獲得產物，以醋酸乙酯煎煮(產率：2.16克(22%))。熔點：267-270°C。

實施例15



將2.94克(18毫莫耳)的萘-1,8-二胺及9.40克(63毫莫耳)的4-(二甲基胺基)-苯甲腈攪拌進入100克包含83%五氧化磷的多磷酸中。將反應混合物加熱至最高180°C及保持在此溫度下3小時。在向下冷卻至90°C後，將反應物料傾入2.5升冰/水混合物中及強烈攪拌3小時。過濾出沉澱物及在200毫升水中漿體化，以稀氫氧化鈉水溶液將懸浮液中和至pH 7，攪拌2小時及過濾。在減壓下，在50°C下乾燥壓濾餅15小時。以150毫升醋酸乙酯索司勒萃取經充分研磨的粉末5小時。在旋轉蒸發器上，於稍微減壓下將萃取物濃縮至體積60毫升及將其遺留在室溫下18小時。藉由過濾分離產物，將其再次溶解在300毫升的沸騰醋酸乙酯中，在旋轉蒸發器上於稍微減壓下濃縮至體積30毫升及遺留在室溫下24小

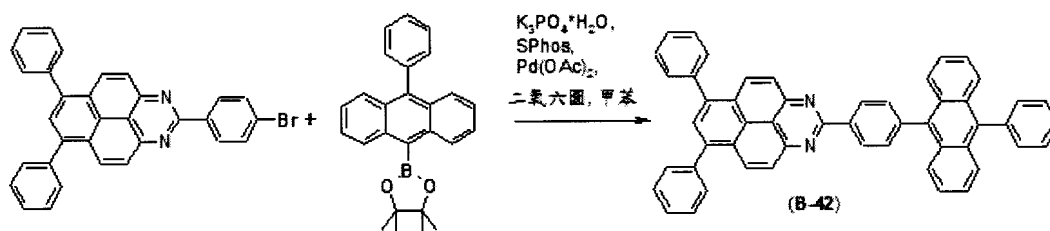
時。藉由過濾分離出最後產物(產率：0.39克(4%))。

元素組成物： 76.28%C 5.95%H 13.50%N

計算對 $C_{37}H_{34}N_6 \times H_2O$ ： 76.53%C 6.25%H 14.47%N

計算對 $C_{37}H_{34}N_6$ ： 78.98%C 6.09%H 14.93%N

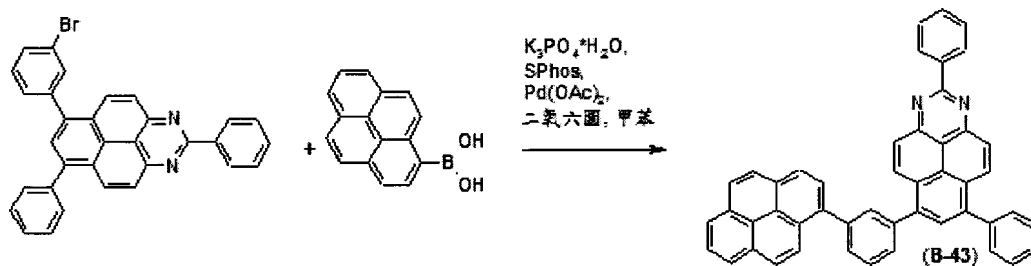
實施例16



以氫除氣3.00克(5.87毫莫耳)實施例2b的產物、2.12克(5.57毫莫耳)的4,4,5,5-四甲基-2-(10-苯基-蒽-9-基)-1,3,2-二氧環戊硼烷及2.84克(11.7毫莫耳)的磷酸三鉀單水合物。加入200毫升的1,4-二氧六圓、50毫升的甲苯及10毫升的水。以氫除氣反應混合物。加入145毫克(0.35毫莫耳)的2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(Sphos)及13毫克(0.059毫莫耳)的醋酸鈮(II)。以氫除氣反應混合物及在氫氣中於 $100^\circ C$ 下加熱4小時。類似於實施例6c進行逐漸完成(產率：1.47克；(17%))。

^1H NMR(300 MHz, $CDCl_3$): δ =9.06(d, J =8.3赫茲, 2H), 8.76(d, J =9.4赫茲, 2H), 8.37(d, J =9.4Hz, 2H), 8.19(s, 1H), 7.52-7.90(m, 21H), 7.34-7.40(m, 4H)。

實施例17



類似於實施例6c來製備產物。

^1H NMR(300 MHz, $CDCl_3$, δ): 8.92(d, $J=9.4$ 赫茲, 2H), 8.87(d, $J=8.4$ 赫茲, 2H), 7.71(d, $J=9.4$ 赫茲, 2H), 7.48-7.40(m, 22H)。

應用實施例1

藉由在高真空($<10^{-6}$ 毫巴)下熱蒸鍍來製造裝置。陽極由約120奈米已預先沉積在玻璃基材上的氧化銦錫(ITO)組成。陰極由1奈米LiF接著100奈米Al組成。全部裝置在製備後立即在手套工作箱的氮環境(<1 ppm H_2O 及 O_2)中測試，沒有密封。

該有機疊堆從該ITO表面開始相繼地由60奈米的2-TNATA(4,4',4''-三(N-(石油脂-2-基)-N-苯基-胺基)三苯基胺)作為電洞注入層(HIL)、30奈米的4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD)作為電洞傳輸層、30奈米摻雜以10%紅色發射劑(雙(1-苯基異喹啉))(乙醯丙酮酸鹽)銦(III))的雙(2-甲基-8-羥基喹啉)-4-苯基酚鋁(III)(BalQ)作為發射層組成。該電子傳輸層(ETL)的組成物顯示在下列表中。

對裝置1-1、1-2及1-3所測量的發光效率與開始電壓(@1000燭光/平方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中：

	ETL	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方公 尺	最大亮度/ 燭光/平方 公尺
1-1	實施例1的化 合物(10奈米) /AlQ ₃ (30奈米)	5.4	1.6	10.4	8200
1-2	TPBI(10奈米)/ 實施例1的化 合物(30奈米)	6.3	1.5	13.4	1100
1-3	實施例6的化 合物(30奈米)	7.6	2.3	10.3	6000

TPBI=1,3,5-三(N-苯基苯并咪唑-2-基)苯

應用實施例2

使用與應用實施例1相同的方法來製造裝置2-1及2-2，除了使用實施例2的化合物作為宿主取代BalQ及電子傳輸層的組成物(其顯示在下列表中)不同外。

對裝置2-1及2-2所測量的發光效率與開始電壓(@1000燭光/平方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中：

	ETL	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方公 尺	最大亮度/ 燭光/平方 公尺
2-1	BalQ(10奈米) /AlQ ₃ (30奈米)	2.5	0.6	13	1300
2-2	AlQ ₃ (30奈米)	1.8	0.5	10.9	1600

應用實施例3

使用與裝置1-2相同的方法來製造裝置3-1，除了使用實施例1之化合物作為宿主取代BalQ及電子傳輸層的組成物(其顯示在下列表中)不同外。

對裝置3-1所測量的發光效率與開始電壓(@1000燭光/

平方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中。

	ETL(奈米)	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方 公尺	最大亮度 /燭光/平方 公尺
3-1	TPBI(10奈米)/AlQ ₃ (30奈米)	2.7	0.8	10.3	4000

應用實施例4

藉由在高真空($<10^{-6}$ 毫巴)中熱蒸鍍來製造裝置。陽極由約120奈米已預先沉積在玻璃基材上的氧化銦錫(ITO)組成。陰極由1奈米LiF接著100奈米Al組成。

該有機堆疊從ITO表面開始相繼地由摻雜以MoO_x的 α -NPD(60奈米)作為電洞注入/電洞傳輸層、 α -NPD(10奈米)作為電子阻障層、摻雜以10%紅色發射劑(雙(1-苯基異喹啉)(乙醯丙酮酸鹽)鉍(III))的 α -NPD作為發射層(20奈米)組成。對裝置4-1所測量的電子傳輸層(ETL)之組成物、發光效率與開始電壓(@1000燭光/平方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中。

	ETL(奈米)	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方 公尺	最大亮度/ 燭光/平方 公尺
4-1	實施例6的化合物(30奈米)	6.7	2.4	8.6	2700

(NHT5及NDP2由追思登(Dresden)的諾伐雷德(NovaLED)AG提供)

應用實施例5

使用與裝置4-1相同的方法來製造裝置5-1,除了陰極由100奈米的Al組成及使用實施例2之化合物作為宿主取代 α -NPD外。對裝置5-1所測量的電子傳輸層(ETL)之組成物、

發光效率與開始電壓(@1000燭光/平方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中。

	ETL(奈米)	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方 公尺	最大亮度/ 燭光/平方 公尺
5-1	BalQ(10奈米)/摻雜以Cs ₂ CO ₃ 的BCP(60奈米)	2.6	2	4.1	1900

應用實施例6

使用與裝置5-1相同的方法來製造裝置6-1及6-2，除了使用雙-(2-甲基二苯并[f,h]喹啉)(乙醯丙酮酸鹽)銦(III)作為發射劑及 α -NPD作為宿主外。對裝置6-1及6-2所測量的電子傳輸層(ETL)的組成物、發光效率與開始電壓(@1000燭光/平方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中。

	ETL(奈米)	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方 公尺	最大亮度/ 燭光/平方 公尺
6-1	BalQ(10奈米)/摻雜以Cs ₂ CO ₃ 之實施例1的化合物(60奈米)	1.2	0.6	6.3	1800
6-2	BalQ(10奈米)/摻雜以Cs ₂ CO ₃ 之實施例6的化合物(60奈米)	1.2	0.5	6.8	1500

應用實施例7

使用與裝置1-1相同的方法來製造裝置7-1、7-2及7-3，除了使用雙-(2-甲基二苯并[f,h]喹啉)(乙醯丙酮酸鹽)銦(III)作為發射劑外。對裝置7-1、7-2及7-3所測量的電子傳輸層(ETL)之組成物、發光效率與開始電壓(@1000燭光/平

方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中。

	ETL(奈米)	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方 公尺	最大亮度/ 燭光/平方 公尺
7-1	實施例3的化合物(30奈米)	8	1.8	14	1000
7-2	實施例7的化合物(30奈米)	4	0.9	14	1000
7-3	BalQ(10奈米)/實施例3的化合物(30奈米)	6.5	1.4	14	1000

實施例8

使用與裝置4-1相同的方法來製造裝置8-1、8-2及8-3，除了使用雙-(2-甲基二苯并[f,h]喹啉)(乙醯丙酮酸鹽)鉍(III)作為發射劑外。對裝置8-1、8-2及8-3所測量的電子傳輸層(ETL)之組成物、發光效率與開始電壓(@1000燭光/平方公尺)及最大亮度一起報導在下列表中。

	ETL(奈米)	電流效率 @1000燭光/ 平方公尺	功率效率 @1000燭光/ 平方公尺	電壓@1000 燭光/平方 公尺	最大亮度/ 燭光/平方 公尺
8-1	實施例3的化合物(30奈米)	10.4	3.9	8.3	2000
8-2	實施例7的化合物(30奈米)	2.8	1	9.1	2900
8-3	BalQ(10奈米)/實施例3的化合物(30奈米)	4.4	1.5	9.2	3200

【圖式簡單說明】

(無)

【主要元件符號說明】

(無)

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：98120989

G07D 41/22 (2006.01)

※申請日：98.6.23

※IPC 分類：G07D 239/70 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

G07D 41/04 (2006.01)

G07D 487/22 (2006.01)

用於電子應用之氮芴

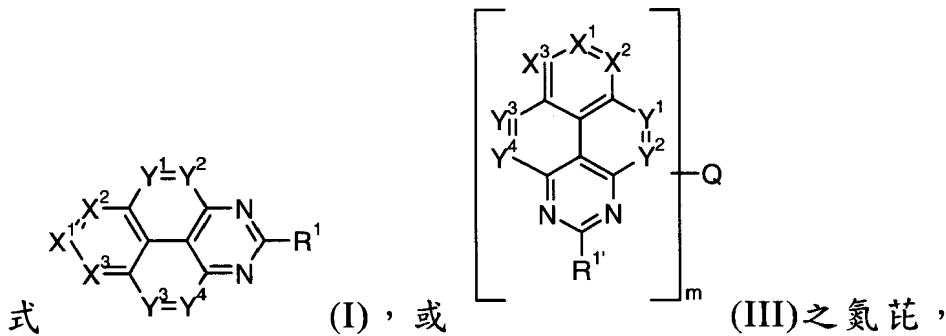
C09K 1/06 (2006.01)

AZAPYRENES FOR ELECTRONIC APPLICATIONS

H01L 5/00 (2006.01)

二、中文發明摘要：

本發明係關於一種電子裝置，特別是一種電致發光裝置，其包含



其中 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 X^1 、 X^2 及 X^3 彼此各自獨立地為N或 CR^4 ；

附帶條件為基團 X^1 、 X^2 及 X^3 之至少一個為基團 CR^4 ；

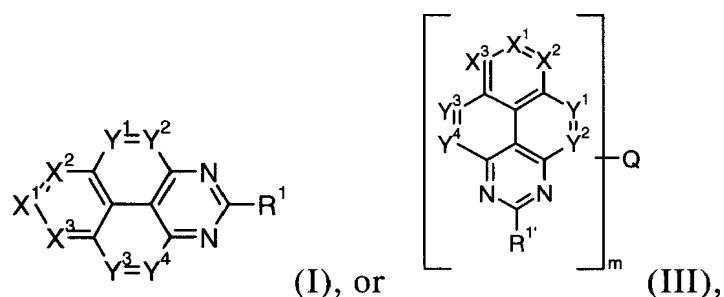
R^1 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；

R^4 為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；或

彼此毗連的任何取代基 R^1 、 $R^{1'}$ 及 R^4 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統； m 為整數1至6；及 R^{100} 、 R^{101} 及 R^{102} 彼此各自獨立地為可選擇性經取代的 C_1 - C_8 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_7 - C_{12} 芳烷基；及 Q 為連結基團；附帶條件為在式III之化合物中，取代基 $R^{1'}$ 或 R^4 之至少一個為基團 Q ；其特別作為磷光發射劑的宿主、電子傳輸材料或發射材料。該宿主可與磷光材料作用以提供電致發光裝置改良的效率、穩定性、製造能力或光譜特徵。

三、英文發明摘要：

The present invention relates to electronic devices, especially electroluminescent devices, comprising azapyrenes of formula



wherein Y^1 , Y^2 , Y^3 , Y^4 , X^1 , X^2 and X^3 are independently each other N, or CR^4 ,

with the proviso that at least one of the groups X^1 , X^2 and X^3 is a group CR^4 ,

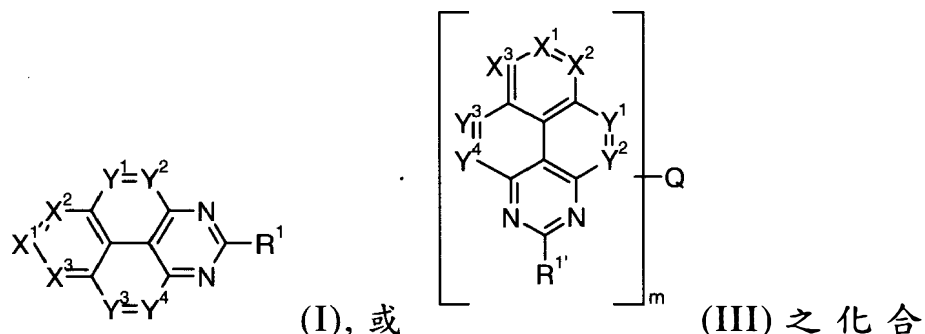
R^1 is hydrogen, F, $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$, or an organic substituent,

R^4 is hydrogen, F, $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$, or an organic substituent, or

any of the substituents R^1 , $R^{1'}$ and R^4 , which are adjacent to each other, together form an aromatic, or heteroaromatic ring, or ring system, which can optionally be substituted, m is an integer of 1 to 6, and R^{100} , R^{101} and R^{102} are independently of each other a C_1 - C_8 alkyl group, a C_6 - C_{24} aryl group, or a C_7 - C_{12} aralkyl group, which may optionally be substituted, and Q is a linking group; with the proviso that in the compound of formula III at least one of the substituents $R^{1'}$, or R^4 is a group Q ; especially as host for phosphorescent emitters, electron transporting materials, or emitter materials. The hosts may function with phosphorescent materials to provide improved efficiency, stability, manufacturability, or spectral characteristics of electroluminescent devices.

七、申請專利範圍：

1. 一種電子裝置，其包含式



物，其中：

Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 X^1 、 X^2 及 X^3 彼此各自獨立地為N或 CR^4 ；

附帶條件為基團 X^1 、 X^2 及 X^3 之至少一個為基團 CR^4 ；

R^1 為氫、F、 $-\text{SiR}^{100}\text{R}^{101}\text{R}^{102}$ 或有機取代基；

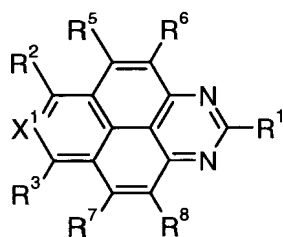
$R^{1'}$ 及 R^4 彼此各自獨立地為氫、F、 $-\text{SiR}^{100}\text{R}^{101}\text{R}^{102}$ 或有機取代基；或

彼此毗連的任何取代基 R^1 、 $R^{1'}$ 及 R^4 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統；

m 為整數1至6；及

R^{100} 、 R^{101} 及 R^{102} 彼此各自獨立地為 C_1 - C_8 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_7 - C_{12} 芳烷基，其可選擇性經取代；及 Q 為連結基團；附帶條件為在式III之化合物中，取代基 $R^{1'}$ 或 R^4 之至少一個為基團 Q 。

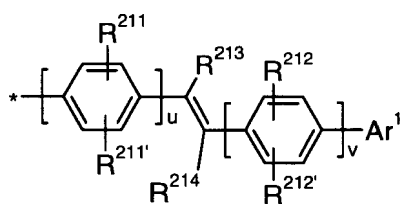
2. 如申請專利範圍第1項之電子裝置，其包含式



(II)之化合物，其中：

X^1 為 N 或 CR^4 ；

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 彼此各自獨立地為 H、 C_1 - C_{18} 烷基、由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基、 C_2 - C_{18} 烯基、 C_2 - C_{18} 炔基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基、 C_7 - C_{25} 芳烷基、 $-\text{CO}-R^{28}$ 、 $-\text{CN}$ 、



或基團 $-\text{L}^1-\text{NR}^{25'}\text{R}^{26'}$ ，其中：

u 為 0 或 1； v 為 0 或 1；

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為 H、 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基；

R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18} 烷基；

Ar^1 為 $-\text{NR}^{25'}\text{R}^{26'}$ 、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基或由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基；

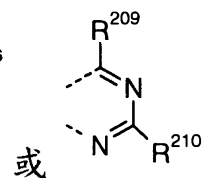
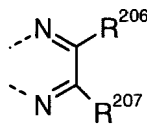
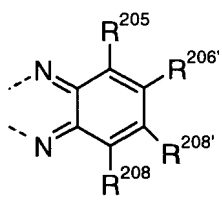
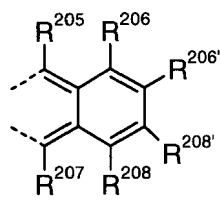
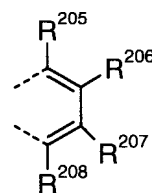
$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為 C_1 - C_{18} 烷基、由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基；或

$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們所鍵結的氮原子一起形成一可選

擇性經取代之雜芳香族環或環系統；

L^1 為單鍵或橋接單元BU；

R^5 及 R^6 及 / 或 R^7 及 R^8 一起形成基團



或 R^{209} 及 R^{210} ，其中

$R^{206'}$ 、 $R^{208'}$ 、 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 、 R^{208} 、 R^{209} 及 R^{210} 彼此各自獨立地為 H、 C_1 - C_{18} 烷基、由 E 取代及 / 或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、或由 E 取代及 / 或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由 G 取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由 G 取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基、 C_2 - C_{18} 烯基、 C_2 - C_{18} 炔基、 C_7 - C_{25} 芳烷基、CN 或 $-CO-R^{28}$ ；

Y 為 O 或 $N-R^{25}$ ；

D 為 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR^{25}-$ 、 $-SiR^{30}R^{31}-$ 、 $-POR^{32}-$ 、 $-CR^{23}=CR^{24}-$ 或 $-C\equiv C-$ ；及

E 為 $-OR^{29}$ 、 $-SR^{29}$ 、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-COR^{28}$ 、 $-COOR^{27}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、CN 或鹵素；

G 為 E、 C_1 - C_{18} 烷基、由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_1 - C_{18} 全氟烷基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、或由 E 取代及 / 或由 D 岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基，其中

R^{23} 及 R^{24} 彼此各自獨立地為 H、 C_6 - C_{18} 芳基；由 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基取代的 C_6 - C_{18} 芳基； C_1 - C_{18} 烷基；或

由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；

R²⁵及R²⁶彼此各自獨立地為C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基或C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；或R²⁵及R²⁶一起形成一五或六員環或環系統；

R²⁷為C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基或C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；

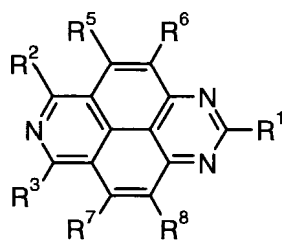
R²⁸為H；C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基或C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；

R²⁹為C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基或C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；

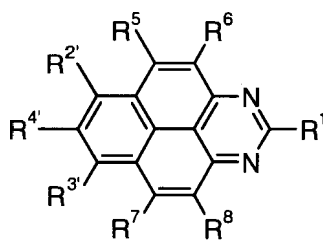
R³⁰及R³¹彼此各自獨立地為C₁-C₁₈烷基、C₆-C₁₈芳基或由C₁-C₁₈烷基取代的C₆-C₁₈芳基；及

R³²為C₁-C₁₈烷基、C₆-C₁₈芳基或由C₁-C₁₈烷基取代的C₆-C₁₈芳基。

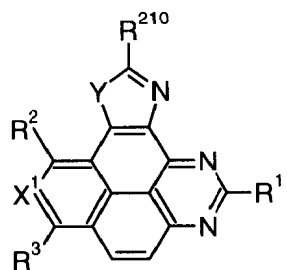
3. 如申請專利範圍第2項之電子裝置，其包含下式之化合物：



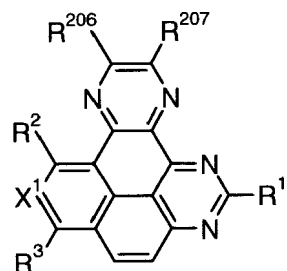
(IIa),



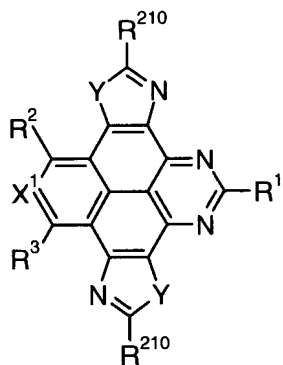
(IIb),



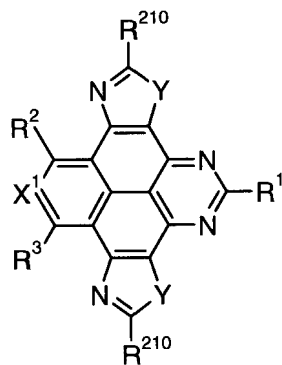
(Iva),



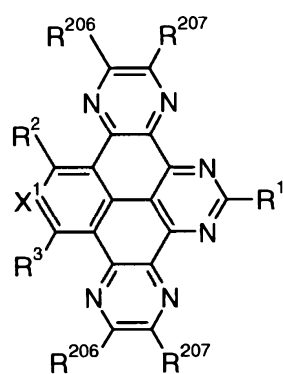
(Ivb),



(Va),



(Vb), 或



(Vc),

其中

X^1 為 N 或 CH ;

Y 為 O 或 NR^{25} , 其中

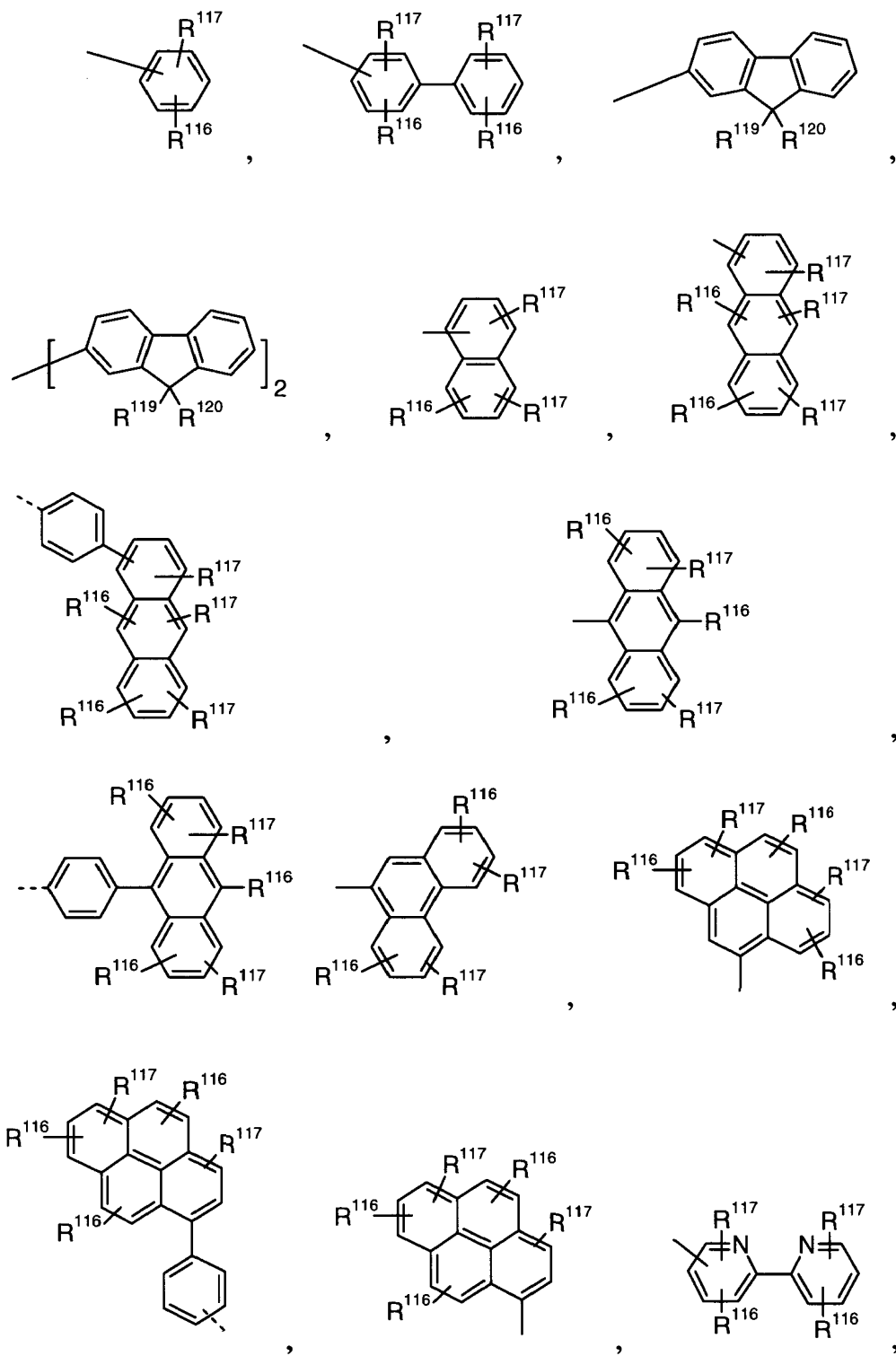
R^{25} 為 C_6-C_{18} 芳基 ; 由 C_1-C_{18} 烷基或 C_1-C_{18} 烷氧基取代的 C_6-C_{18} 芳基 ; C_1-C_{18} 烷基 ; 或由 -O- 岔斷的 C_1-C_{18} 烷基 ;

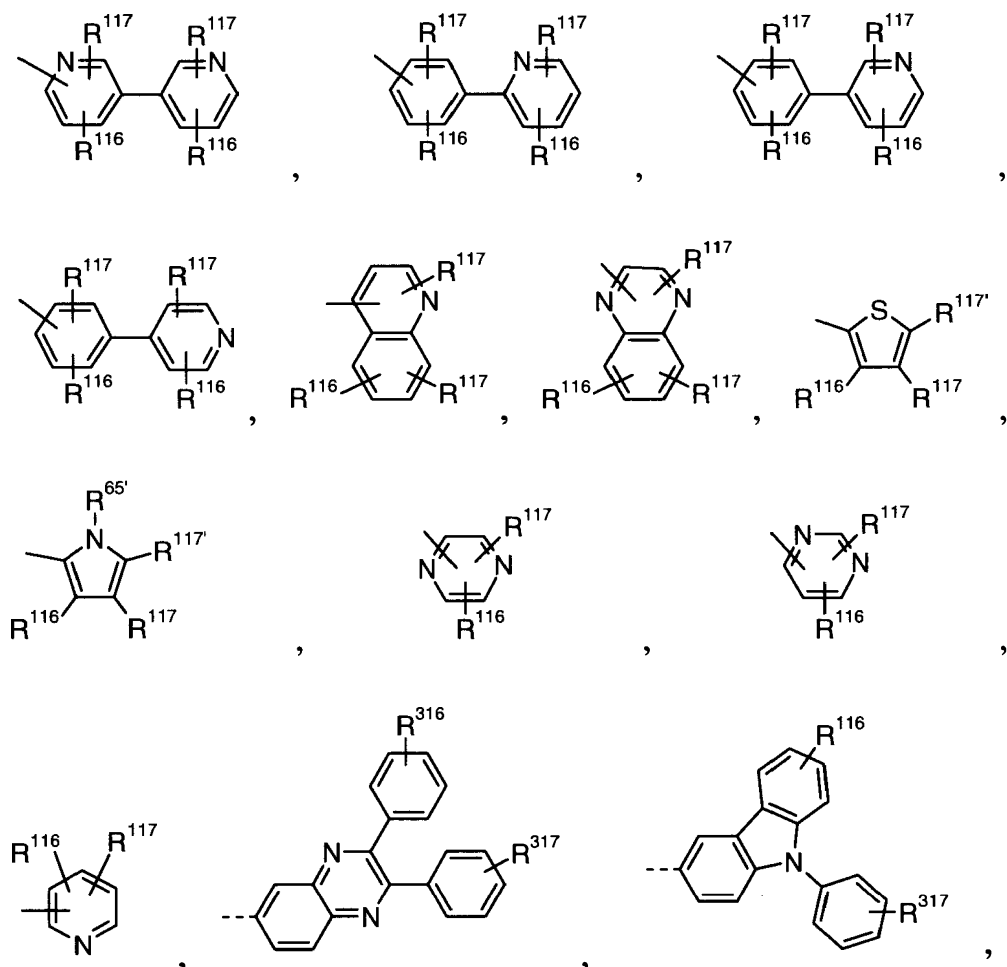
R^{206} 、 R^{207} 、 R^{210} 如在申請專利範圍第 2 項中所定義 ;

R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫 ;

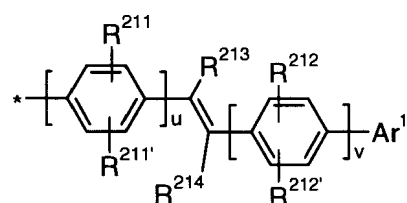
R^1 、 R^2 、 R^3 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 及 $R^{4'}$ 彼此各自獨立地為 H、 C_1-C_{18} 烷基、由 E 取代及 / 或由 D 岔斷的 C_1-C_{18} 烷基、 C_6-C_{24}

芳基、由G取代的C₆-C₂₄芳基、C₂-C₂₀雜芳基、由G取代的C₂-C₂₀雜芳基，諸如





C_1 - C_{18} 烷氧基、由E取代及/或由D岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基、



或 $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$ ，其中

u 為0或1； v 為0或1；

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為H、 C_1 - C_{18} 烷基或 C_1 - C_{18} 烷氧基；

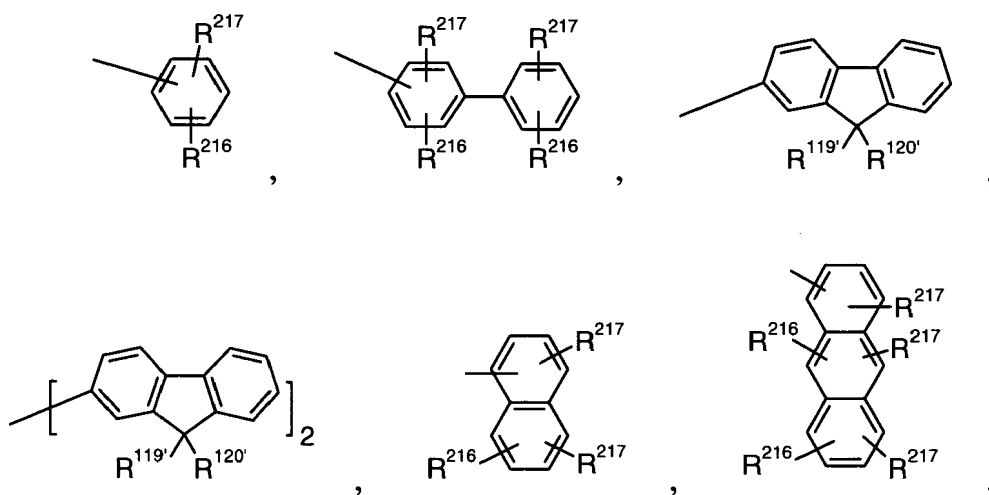
R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為H或 C_1 - C_{18} 烷基；

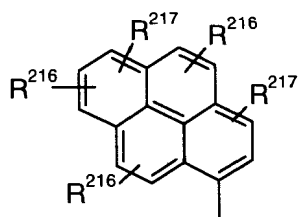
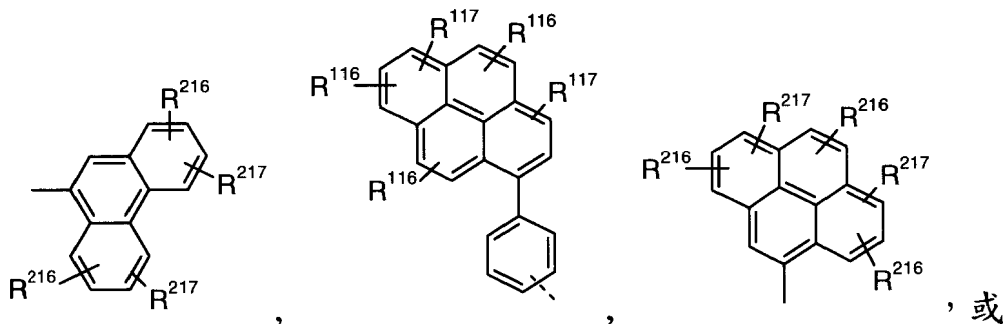
Ar^1 為 $-NR^{25'}R^{26'}$ 、 C_6 - C_{24} 芳基、由G取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基或由G取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基；

Chemical structure of a para-substituted benzene ring. The ring has a substituent $(R^{41})_{m1}$ at the top position and a bond extending to the left.



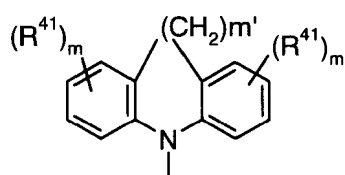

R^{25'}及R^{26'}彼此各自獨立地為苯基、萘基、蔥基、聯苯基、2-萸基、菲基或芘基，其可選擇性經取代，諸如





，或 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它們所鍵結的氮原子一

起形成一雜芳香族環或環系統，諸如



； m' 為0、1或2；

m 在每個事件中可相同或不同及為0、1、2或3，特別是0、1或2，非常特別為0或1；

$m1$ 在每個事件中可相同或不同及為0、1、2、3或4，特別是0、1或2，非常特別為0或1；

R^{41} 在每個事件中可相同或不同及為Cl、F、CN、 $N(R^{45})_2$ 、 C_1 - C_{25} 烷基、 C_4 - C_{18} 環烷基、 C_1 - C_{25} 烷氧基，其中一或多個未在彼此鄰近區域中的碳原子可由 $-NR^{45}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-C(=O)-O-$ 置換，及/或其中一或多個氫原子可由F、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_6 - C_{24} 芳氧基(其中一或多個碳原子可由O、S或N置換)置換，及/或其可由一或多個非芳香族基團 R^{41} 取代；或

二或更多個基團 R^{41} 形成一環系統；

R^{45} 為 C_1 - C_{25} 烷基、 C_4 - C_{18} 環烷基，其中一或多個未在彼此鄰近區域中的碳原子可由 $-NR^{45''}$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 或 $-O-C(=O)-O-$ 置換，及/或其中一或多個氮原子可由F、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_6 - C_{24} 芳氧基(其中一或多個碳原子可由O、S或N置換)置換，及/或其可由一或多個非芳香族基團 R^{41} 取代；及

$R^{45''}$ 為 C_1 - C_{25} 烷基或 C_4 - C_{18} 環烷基；

R^{216} 、 R^{217} 、 R^{116} 、 R^{117} 及 $R^{117'}$ 彼此各自獨立地為H、鹵素、 $-CN$ 、 C_1 - C_{18} 烷基、由E'取代及/或由D'岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由G'取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由G'取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基、 C_2 - C_{18} 烯基、 C_2 - C_{18} 炔基、 C_1 - C_{18} 烷氧基、由E'取代及/或由D'岔斷的 C_1 - C_{18} 烷氧基、 C_7 - C_{25} 芳烷基、 $-C(=O)-R^{127}$ 、 $-C(=O)OR^{127}$ 或 $-C(=O)NR^{127}R^{126}$ ；或

彼此毗連的取代基 R^{116} 、 R^{117} 及 $R^{117'}$ 可形成一環；

R^{316} 及 R^{317} 具有 R^{116} 的意義及較佳為可選擇性由 $-O-$ 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；

$R^{119'}$ 及 $R^{120'}$ 彼此各自獨立地為 C_1 - C_{18} 烷基、由E'取代及/或由D'岔斷的 C_1 - C_{18} 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基、由G'取代的 C_6 - C_{24} 芳基、 C_2 - C_{20} 雜芳基、由G'取代的 C_2 - C_{20} 雜芳基、 C_2 - C_{18} 烯基、 C_2 - C_{18} 炔基或 C_7 - C_{25} 芳烷基；或

$R^{119'}$ 及 $R^{120'}$ 一起形成式 $=CR^{121'}R^{122'}$ 之基團，其中

$R^{121'}$ 及 $R^{122'}$ 彼此各自獨立地為H、 C_1 - C_{18} 烷基、由E'

取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷基、C₆-C₂₄芳基、由G'取代的C₆-C₂₄芳基、或C₂-C₂₀雜芳基、或由G'取代的C₂-C₂₀雜芳基；或

R^{119'}及R^{120'}一起形成一五或六員環，其可選擇性由下列取代：C₁-C₁₈烷基、由E'取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷基、C₆-C₂₄芳基、由G'取代的C₆-C₂₄芳基、C₂-C₂₀雜芳基、由G'取代的C₂-C₂₀雜芳基、C₂-C₁₈烯基、C₂-C₁₈炔基、C₁-C₁₈烷氧基、由E'取代及/或由D'岔斷的C₁-C₁₈烷氧基、C₇-C₂₅芳烷基或-C(=O)-R¹²⁷；及

R¹²⁶及R¹²⁷彼此各自獨立地為C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基或C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；

D'為-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO₂-、-O-、-NR⁶⁵-、-SiR⁷⁰R⁷¹-、-POR⁷²-、-CR⁶³=CR⁶⁴-或-C≡C-；及

E'為-OR⁶⁹、-SR⁶⁹、-NR⁶⁵R⁶⁶、-COR⁶⁸、-COOR⁶⁷、-CONR⁶⁵R⁶⁶、-CN或鹵素；

G'為E'或C₁-C₁₈烷基；

R⁶³及R⁶⁴彼此各自獨立地為H；C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基、C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；

R⁶⁵、R^{65'}及R⁶⁶彼此各自獨立地為C₆-C₁₈芳基；由C₁-C₁₈烷基、C₁-C₁₈烷氧基取代的C₆-C₁₈芳基；C₁-C₁₈烷基；或由-O-岔斷的C₁-C₁₈烷基；或

R⁶⁵及R⁶⁶一起形成一五或六員環；或

R^{65} 及 R^{66} 一起形成一五或六員環；

R^{67} 及 R^{68} 彼此各自獨立地為 C_6-C_{18} 芳基；由 C_1-C_{18} 烷基或 C_1-C_{18} 烷氧基取代的 C_6-C_{18} 芳基； C_1-C_{18} 烷基；或由-O-岔斷的 C_1-C_{18} 烷基；

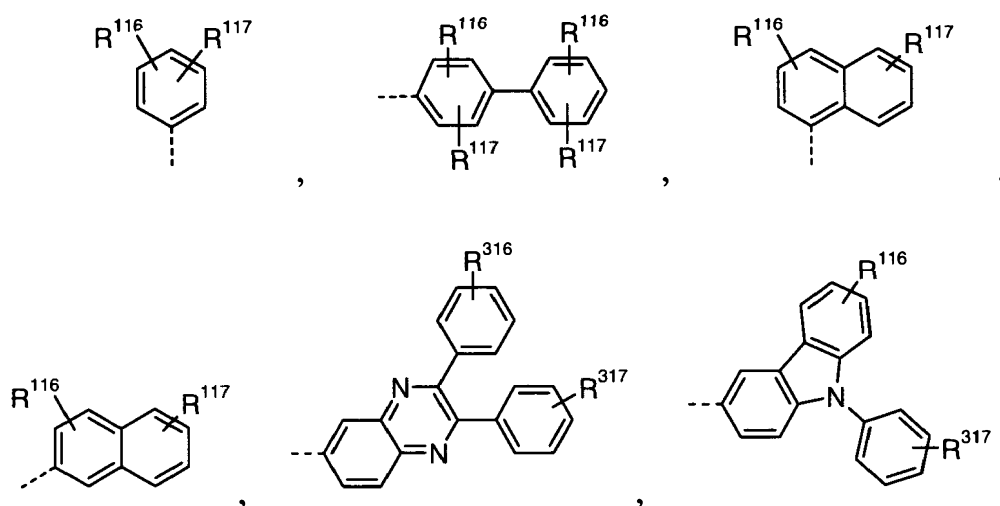
R^{69} 為 C_6-C_{18} 芳基；由 C_1-C_{18} 烷基、 C_1-C_{18} 烷氧基取代的 C_6-C_{18} 芳基； C_1-C_{18} 烷基；或由-O-岔斷的 C_1-C_{18} 烷基；

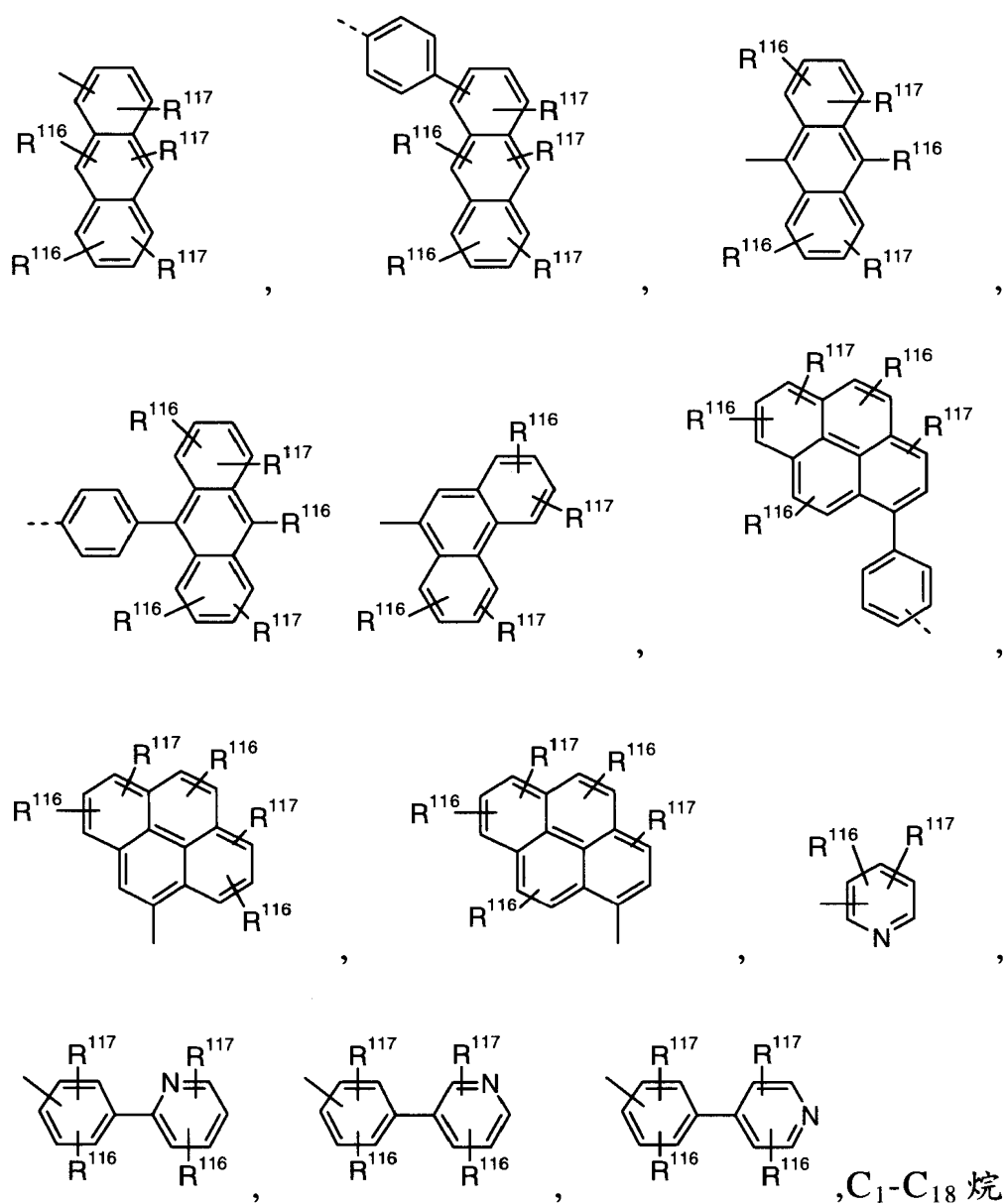
R^{70} 及 R^{71} 彼此各自獨立地為 C_1-C_{18} 烷基、 C_6-C_{18} 芳基或由 C_1-C_{18} 烷基取代的 C_6-C_{18} 芳基；及

R^{72} 為 C_1-C_{18} 烷基、 C_6-C_{18} 芳基或由 C_1-C_{18} 烷基取代的 C_6-C_{18} 芳基。

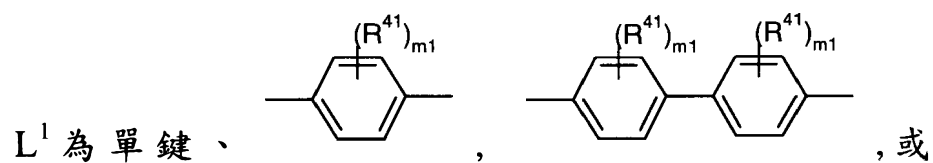
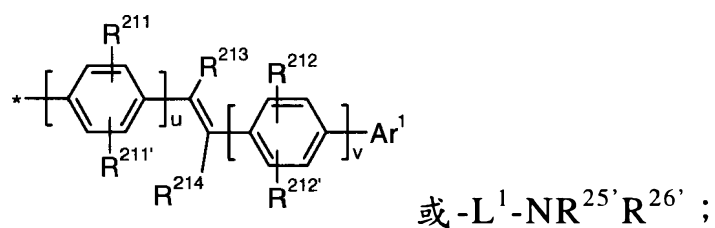
4. 如申請專利範圍第3項之電子裝置，其包含式IIa之化合物，其中 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫；

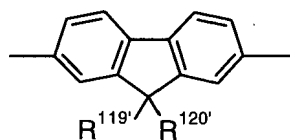
R^1 、 R^2 及 R^3 彼此各自獨立地為下列基團：





氧基、由E取代及/或由D岔斷的C₁-C₁₈烷氧基、





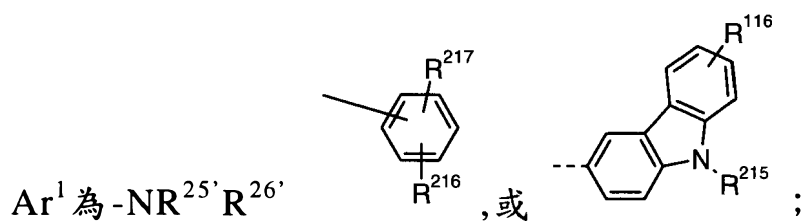
; m1 為 0 或 1 ;

u 為 0 或 1 ; v 為 0 或 1 ;

R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18}

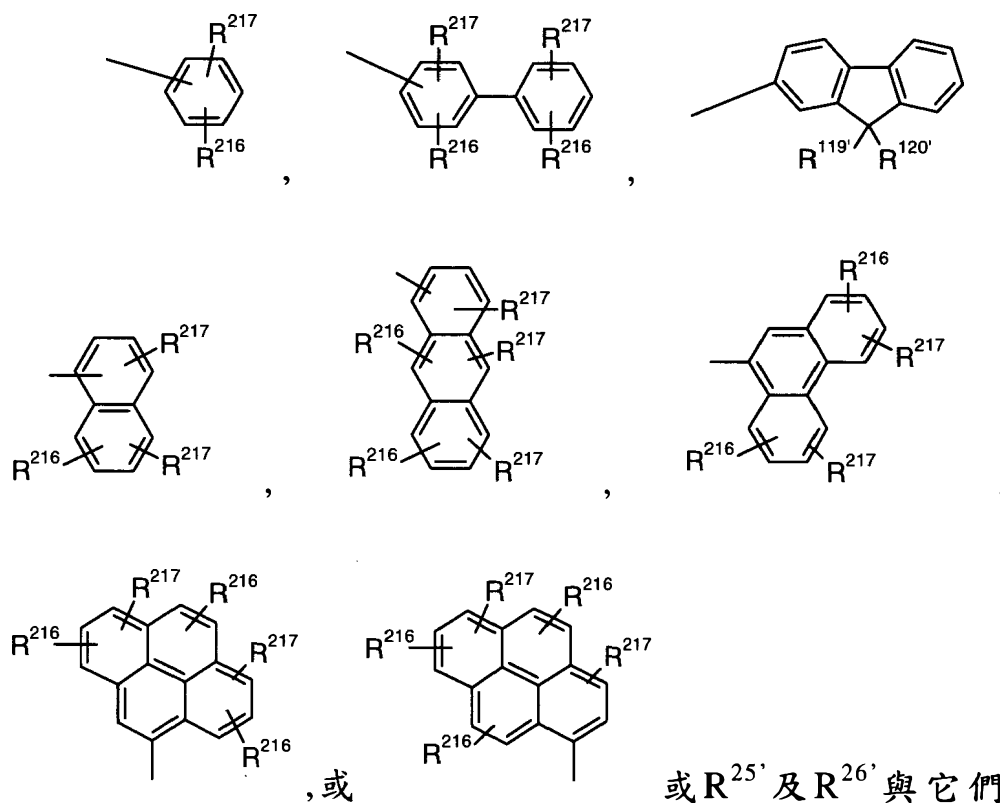
烷基 ;

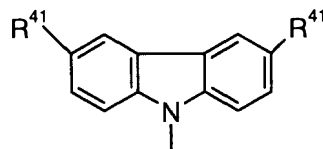
R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18} 烷基 ;



R^{215} 為 C_1 - C_{25} 烷基 或 C_6 - C_{18} 芳基 ;

$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為





所鍵結的氮原子一起形成基團，其中

R^{41} 為 H 或 C_1 - C_8 烷基；及

R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基、1-萘基、2-萘基、苯基、或吡啶(其可選擇性由 C_1 - C_{25} 烷基(其可選擇性由 -O- 岔斷)或苯基取代)；

R^{119} 及 R^{120} 彼此各自獨立地為 C_1 - C_{25} 烷基或由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基；

R^{216} 及 R^{217} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；

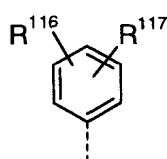
R^{316} 及 R^{317} 具有 R^{116} 的意義及較佳為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；

D 為 -O- 或 -NR²⁵-；

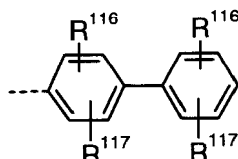
E 為 -OR²⁹、-NR²⁵R²⁶、-CN 或 F； R^{29} 、 R^{25} 及 R^{26} 如在申請專利範圍第 2 項中所定義。

5. 如申請專利範圍第 3 項之電子裝置，其包含式 IIb 之化合物，其中 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫；

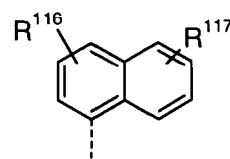
R^1 、 $R^{2'}$ 及 $R^{3'}$ 彼此各自獨立地為下列基團：



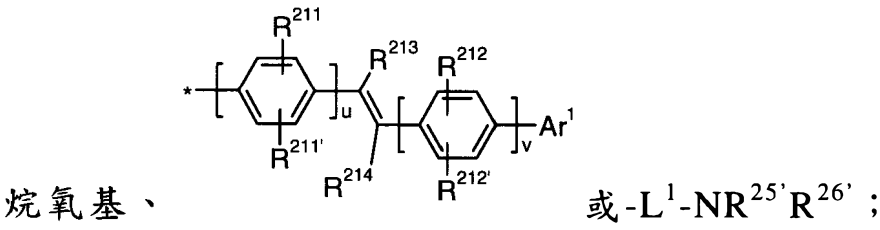
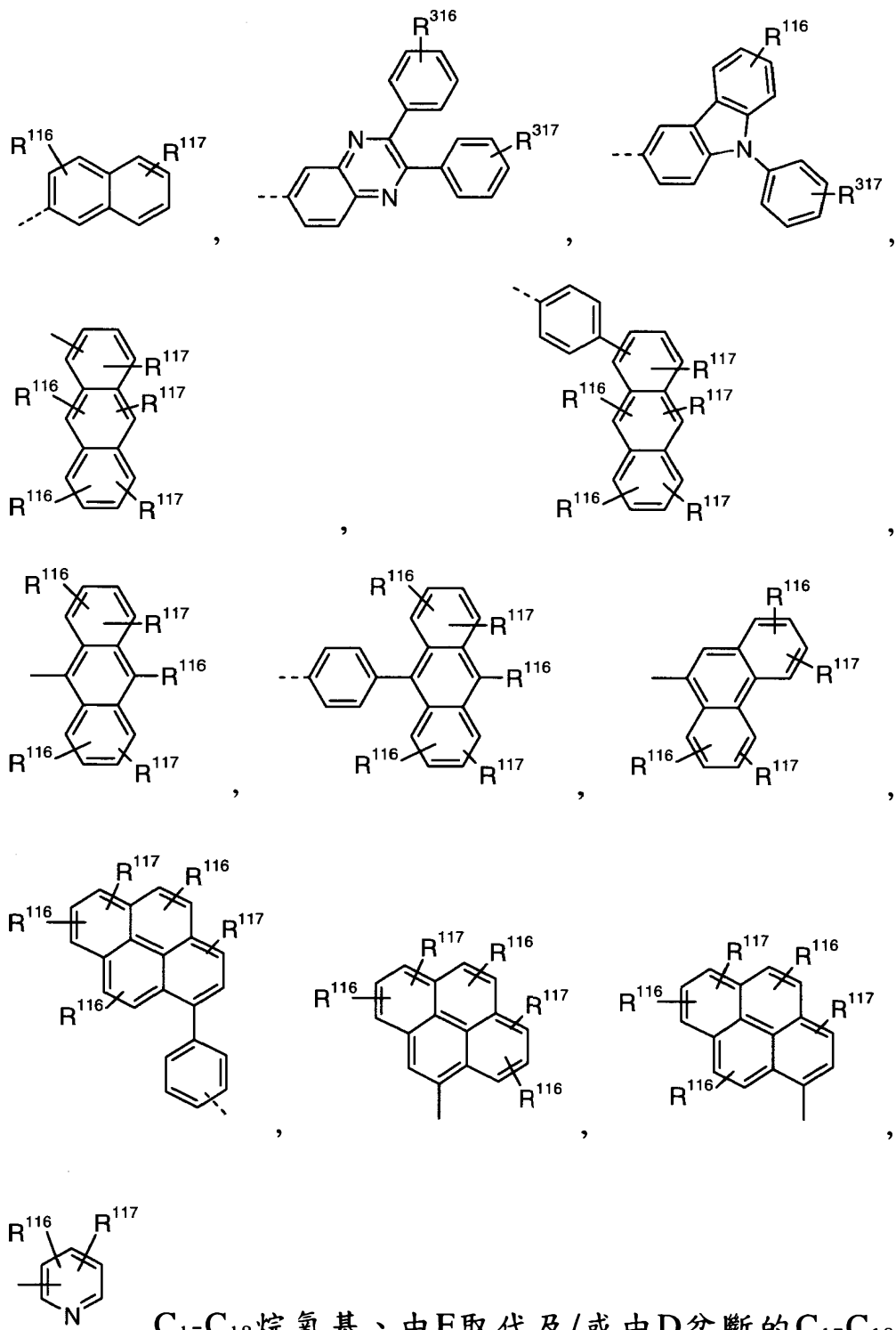
,

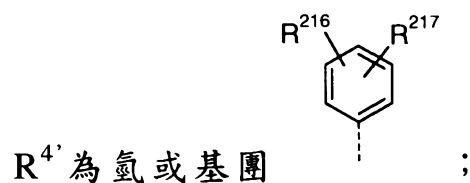
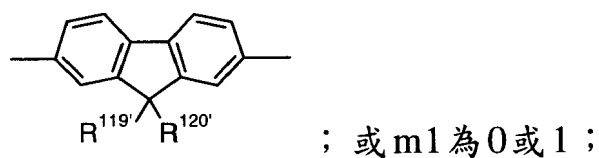
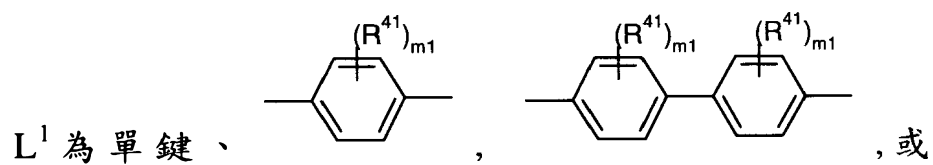


,



,



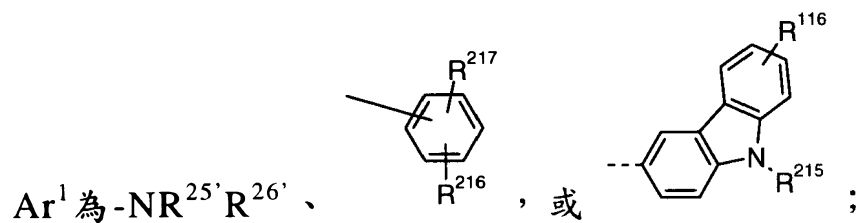


u 為 0 或 1 ; v 為 0 或 1 ;

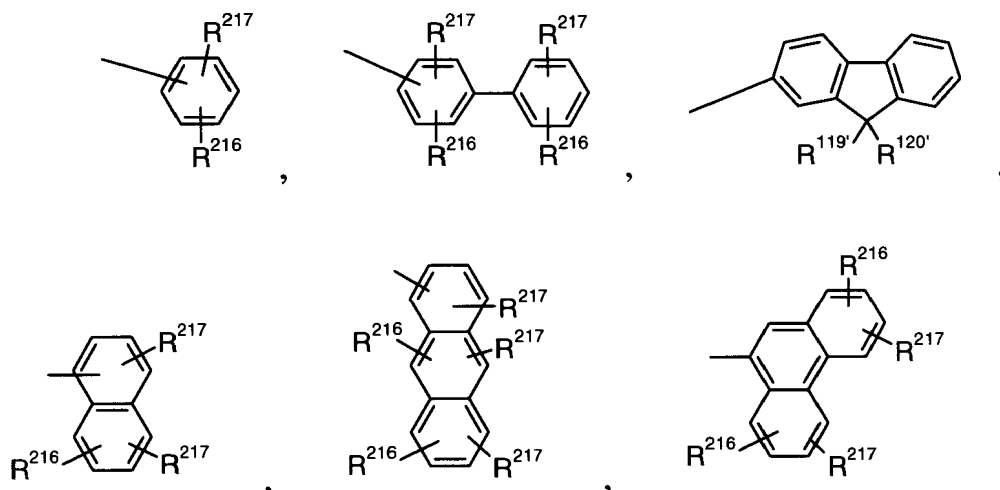
R^{211} 、 $R^{211'}$ 、 R^{212} 及 $R^{212'}$ 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18}

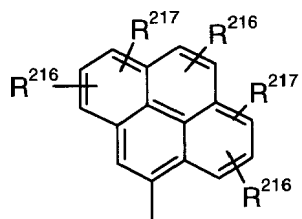
烷基 ;

R^{213} 及 R^{214} 彼此各自獨立地為 H 或 C_1 - C_{18} 烷基 ;

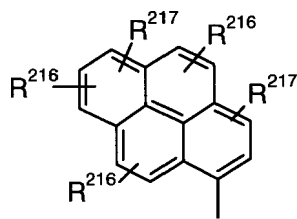
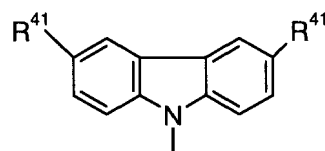


$R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 彼此各自獨立地為





, 或

或 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 與它

們所鍵結的氮原子一起形成基團

, 其

中 R^{41} 為 H 或 C_1 - C_8 烷基；及

R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基、1-萘基、2-萘基、苯基、或吡啶(其可選擇性由 C_1 - C_{25} 烷基(其可選擇性由 -O- 岔斷)或苯基取代)；及

$R^{119'}$ 及 $R^{120'}$ 彼此各自獨立地為 C_1 - C_{25} 烷基或由 E 取代及/或由 D 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基；

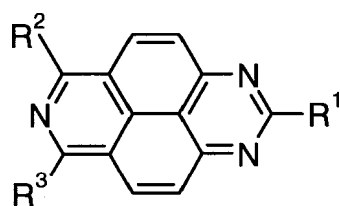
R^{216} 及 R^{217} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；

R^{316} 及 R^{317} 具有 R^{116} 的意義及較佳為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；

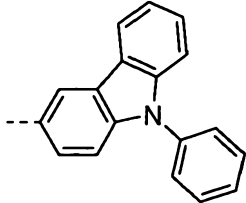
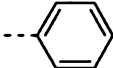
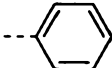
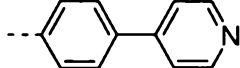
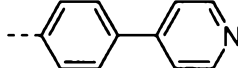
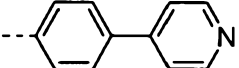
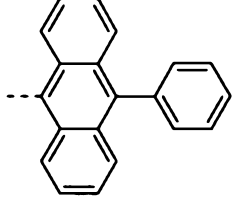
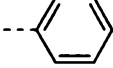
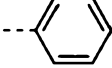
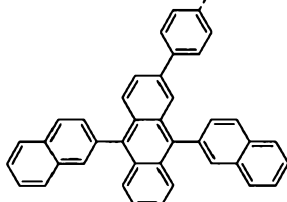
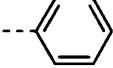
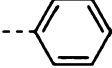
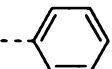
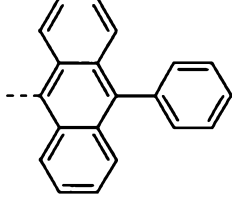
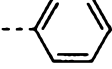
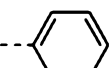
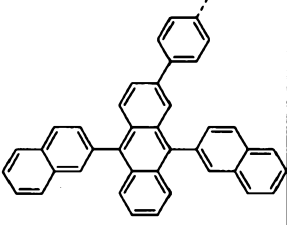
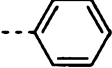
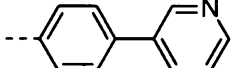
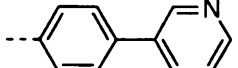
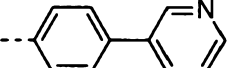
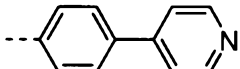
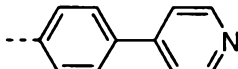
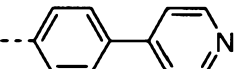
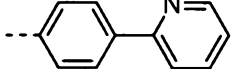
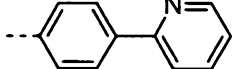
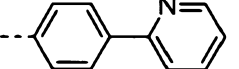
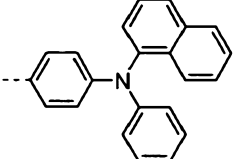
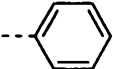
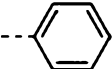
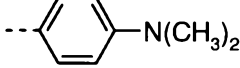
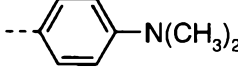
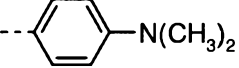
D 為 -O- 或 -NR²⁵-；

E 為 -OR²⁹、-NR²⁵R²⁶、-CN 或 F； R^{29} 、 R^{25} 及 R^{26} 如在申請專利範圍第 2 項中所定義。

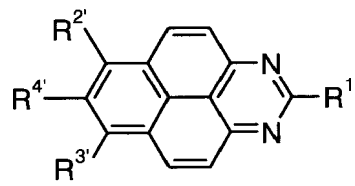
6. 如申請專利範圍第 4 或 5 項之電子裝置，其包含下式之化合物：



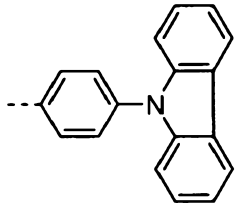
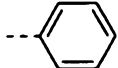
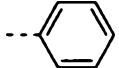
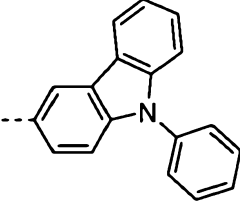
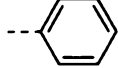
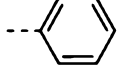
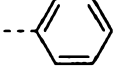
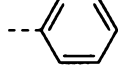
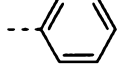
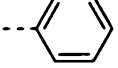
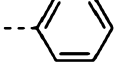
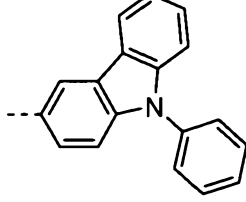
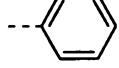
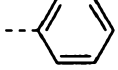
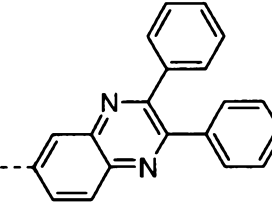
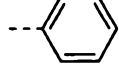
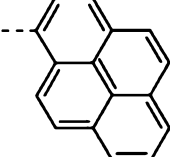
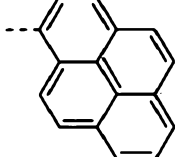
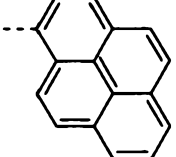
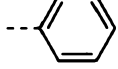
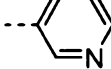
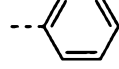
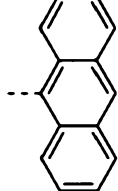
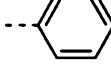
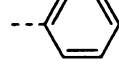
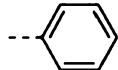
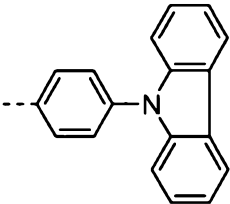
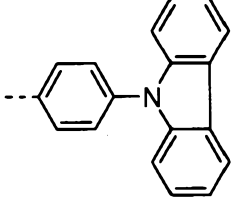
Cpd.	R ¹	R ²	R ³
A-1			
A-2			
A-3			
A-4			
A-5			
A-6			
A-7			
A-8			
A-9			

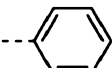
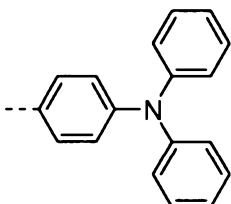
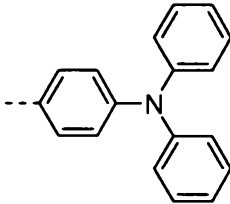
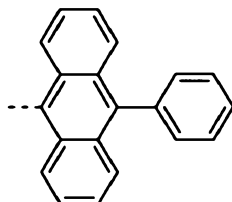
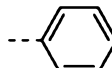
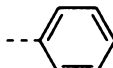
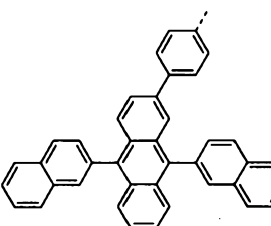
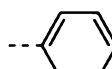
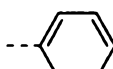
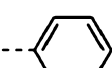
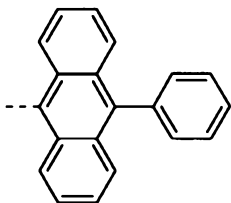
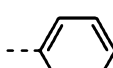
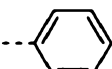
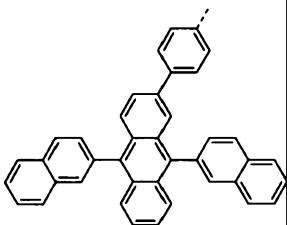
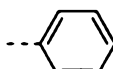
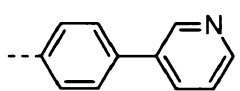
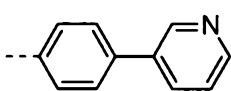
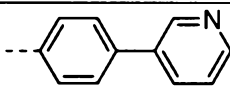
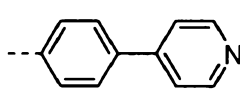
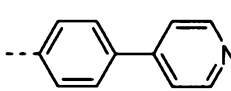
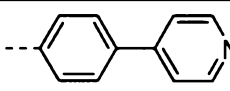
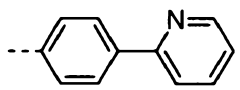
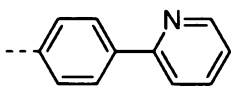
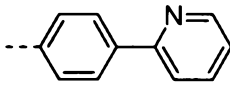
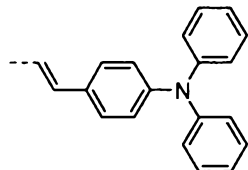
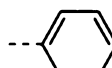
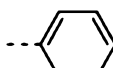
A-10			
A-11			
A-12			
A-13			
A-14			
A-15			
A-16			
A-17			
A-18			
A-19			
A-20			

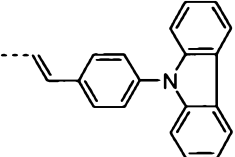
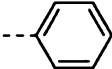
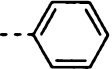
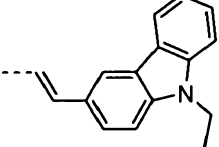
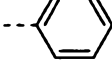
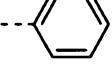
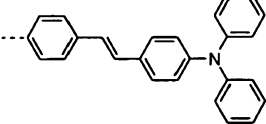
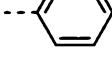
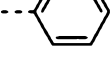
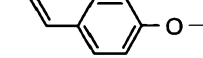
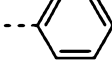
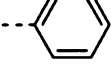
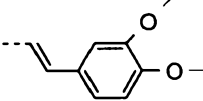
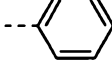
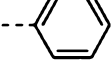
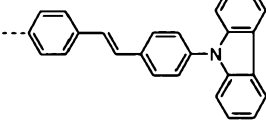
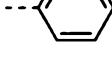
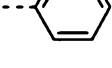
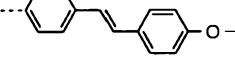
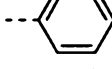
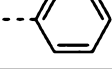
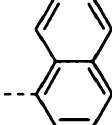
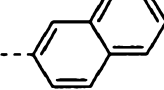
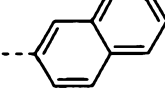
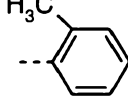
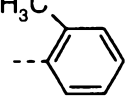
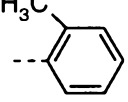
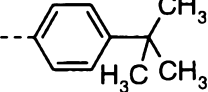
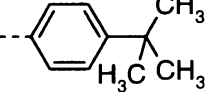
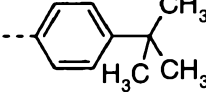
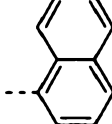
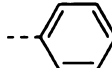
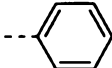
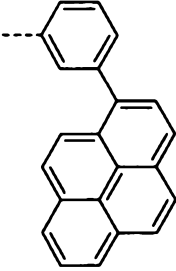
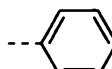
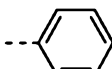
及/或下式之化合物：



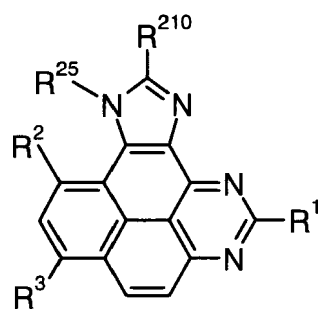
Cpd.	R^1	$R^{2'}$	$R^{3'}$	$R^{4'}$
B-1				H
B-2				H
B-3				H
B-4				H
B-5				H
B-6				H
B-7				H
B-8				H

B-9				H
B-10				H
B-11				
B-12				H
B-13				H
B-14				H
B-15				H
B-16				H
B-17				H

B-18				H
B-19				H
B-20				H
B-21				H
B-22				H
B-23				H
B-24				H
B-25				H
B-26				H

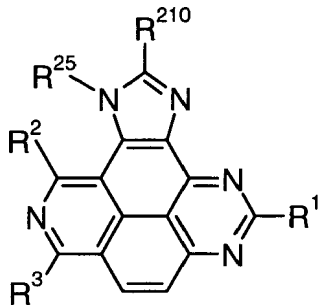
B-27				H
B-28				H
B-29				H
B-30				H
B-31				H
B-32				H
B-33				H
B-34				H
B-35				H
B-36				H
B-37				H
B-38				H

B-39				H
B-40		2)	2)	H
B-41				H
B-42				H
B-43	--CH ₃			H

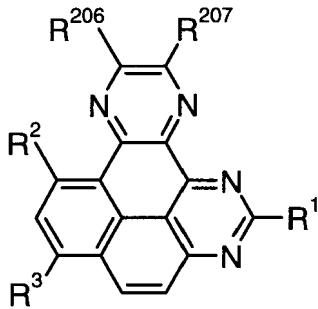


Cpd.	R¹	R²	R³	R²⁵	R²¹⁰
E-1					
E-2					
E-3					
E-4					
E-5	1)				
E-6	2)				

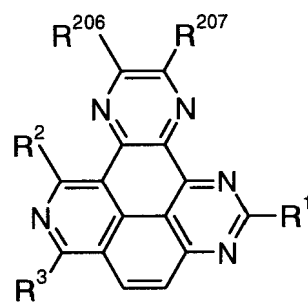
E-7	3)				
E-8					4)



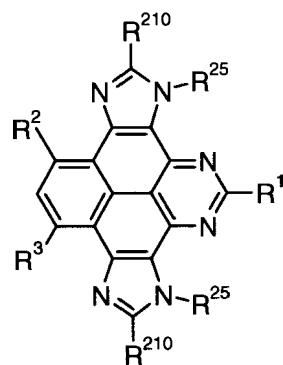
Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ²⁵	R ²¹⁰
F-1					
F-2					



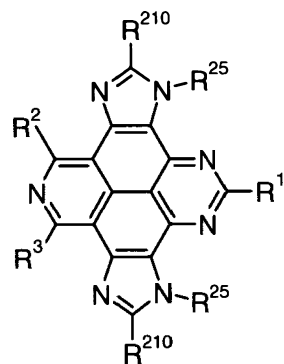
Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ²⁰⁶	R ²⁰⁷
G-1				CN	CN
G-2				H	CH ₃
G-3				H	H
G-4				5)	5)
G-5				6)	6)

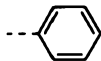
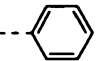
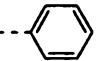
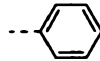
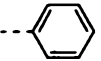
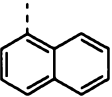
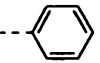
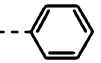
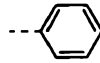
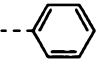
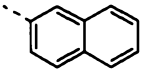
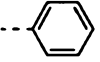
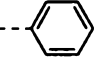
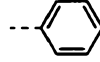
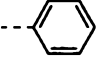
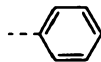
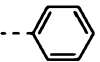
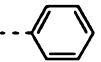
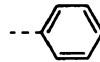
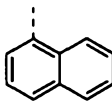


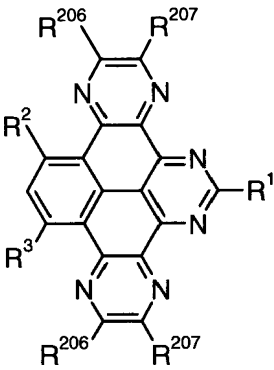
Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ²⁰⁶	R ²⁰⁷
H-1				H	H
H-2				5)	5)

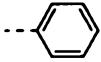
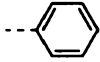
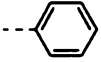
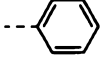
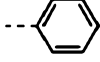
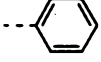
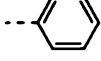
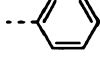
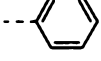
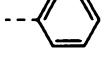
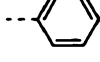
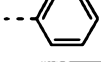
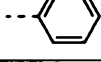
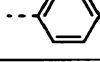
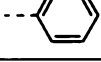
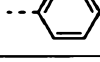
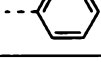
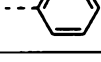
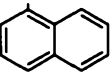
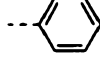
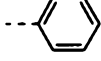


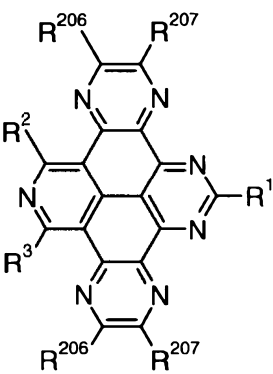
Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ²⁵	R ²¹⁰
I-1					
I-2					
I-3					
I-4					



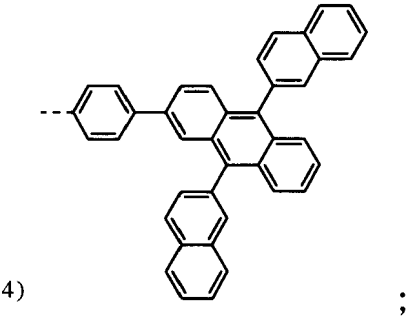
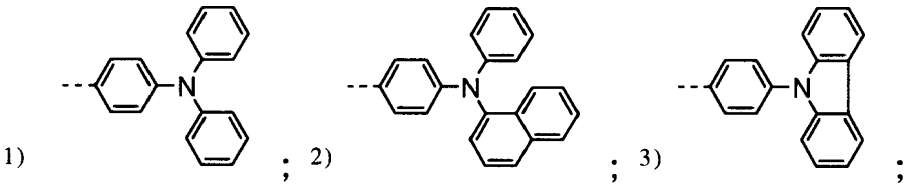
Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ²⁵	R ²¹⁰
J-1					
J-2					
J-3					
J-4					



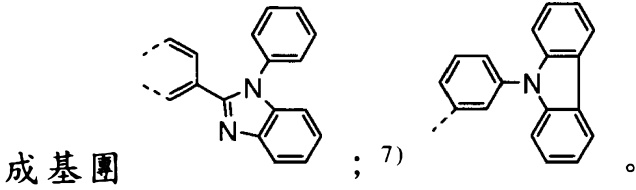
Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ²⁰⁶	R ²⁰⁷
K-1				5)	5)
K-2				CN	CN
K-3				H	CH ₃
K-4				CH ₃	H
K-5				H	H
K-6	3)			H	H
K-7	7)			H	H
K-8				5)	5)



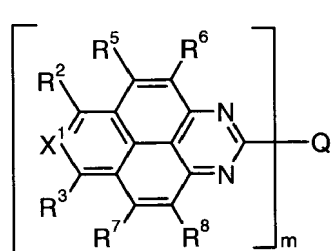
Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ²⁰⁶	R ²⁰⁷
L-1				5)	5)
L-2				CH ₃	H



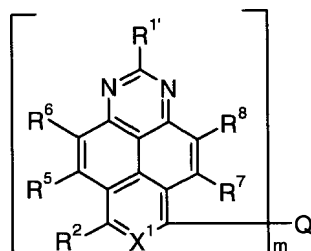
5) R²⁰⁶及R²⁰⁷一起形成基團 ; 6) R²⁰⁶及R²⁰⁷一起形



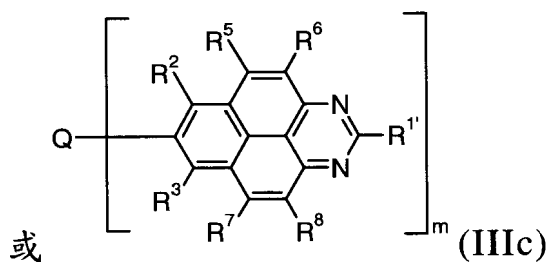
7. 如申請專利範圍第1項之電子裝置，其包含下式之化合物：



(IIIa),

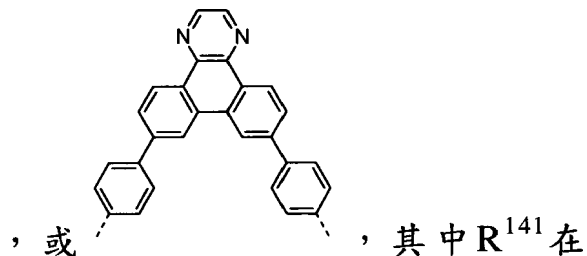
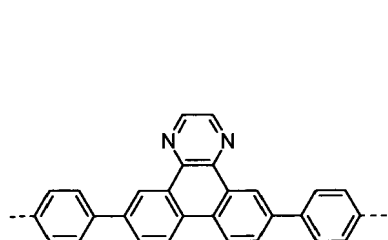
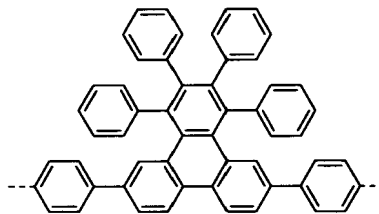
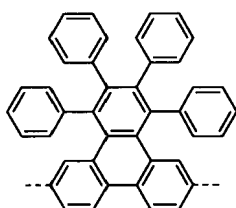
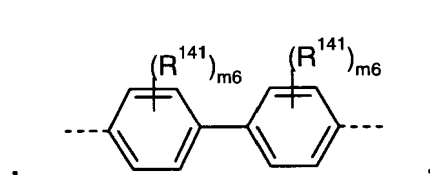
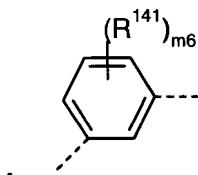
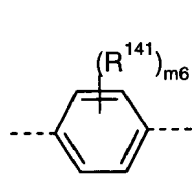


(IIIb),



(IIIc)

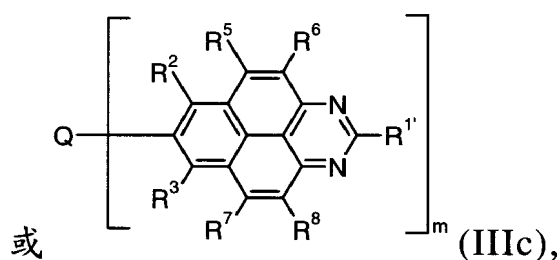
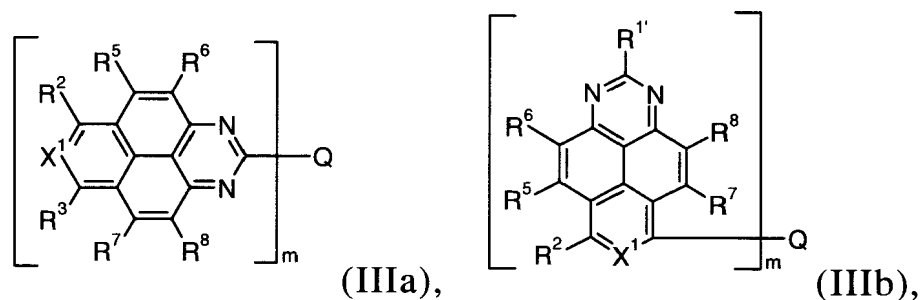
其中 m 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 R^3 、 X^1 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 如在申請專利範圍第1項中所定義；及 Q 為下式之基團：



每個事件中可相同或不同及為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基； m_6 為 0、1 或 2。

8. 如申請專利範圍第7項之電子裝置，其包含下式之化合

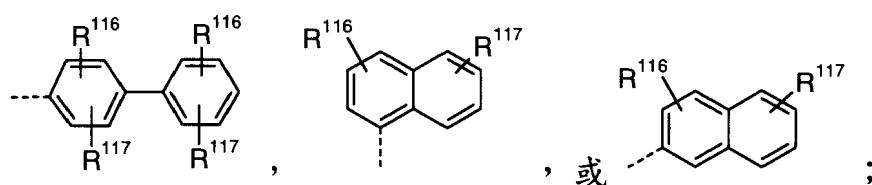
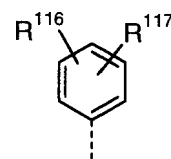
物：



其中 X^1 為 CH 或 N；

R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 為氫；

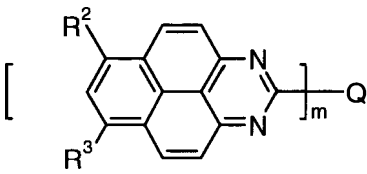
$R^{1'}$ 、 R^2 、 R^3 彼此各自獨立地為



R^{116} 及 R^{117} 彼此各自獨立地為可選擇性由 -O- 岔斷的 C_1 - C_{25} 烷基、或 C_1 - C_{25} 烷氧基；及

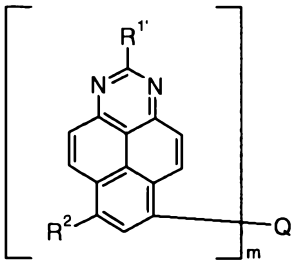
Q 及 m 如在申請專利範圍第 7 項中所定義。

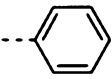
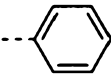
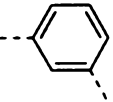
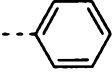
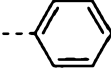
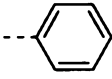
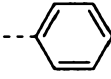
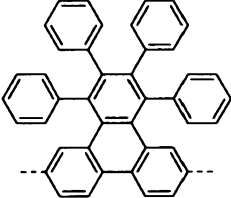
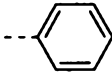
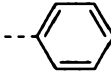
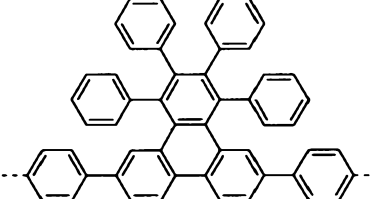
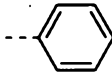
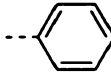
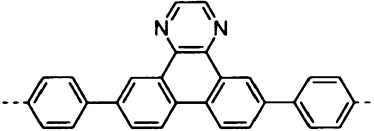
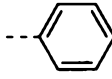
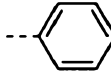
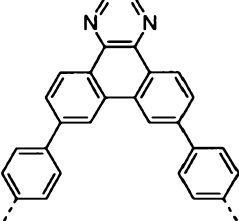
9. 如申請專利範圍第 8 項之電子裝置，其包含下式之化合物：



Cpd.	R ²	R ³	Q	m
C-1				2
C-2				2
C-3				2
C-4				2
C-5				2
C-6				2
C-6				2

及/或下式之化合物



Cpd.	R ²	R ^{1'}	Q	m
D-1				2
D-2				2
D-3				2
D-4				2
D-5				2
D-6				2

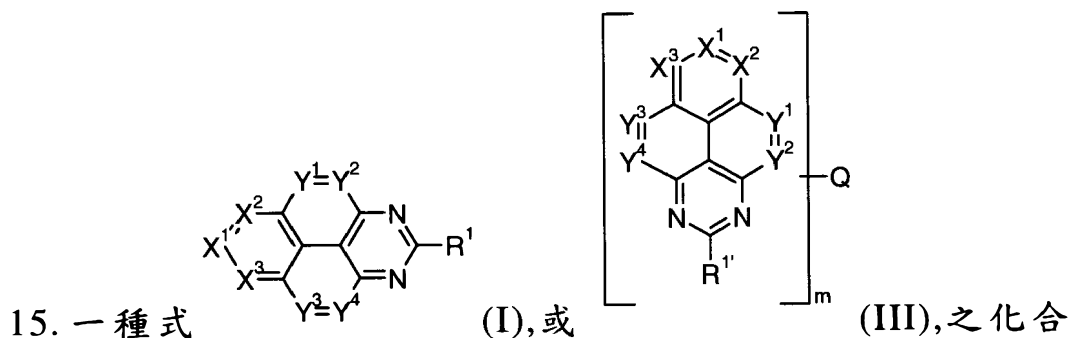
10. 如申請專利範圍第1至9項之任何一項的電子裝置，其中該電子裝置為一種電致發光裝置。

11. 如申請專利範圍第10項之電子裝置，其包含一陰極、一陽極及一於此之間包含宿主材料與磷光發射材料的發光層，其中該宿主材料為如申請專利範圍第1項的式I或III之化合物。

12. 如申請專利範圍第10項之電子裝置，其包含一陰極、一陽極及一電子傳輸材料，其中該電子傳輸材料為如申請專利範圍第1項的式I或III之化合物或包含其。

13. 如申請專利範圍第10項之電子裝置，其包含一陰極、一陽極及一發射層，其中該發射層由如申請專利範圍第1項的式I或III之化合物組成或包含其。

14. 一種如申請專利範圍第1項的式I或III之化合物的用途，其使用於電子顯像感光器、光電整流器、太陽能電池、影像感應器、染料雷射及電致發光裝置。



其中 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 X^1 、 X^2 及 X^3 彼此各自獨立地為 N 或 CR^4 ；

附帶條件為基團 X^1 、 X^2 及 X^3 之至少一個為基團 CR^4 ；

R^1 為 F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；

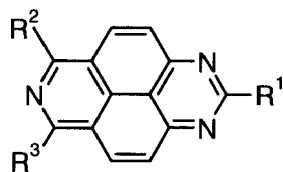
$R^{1'}$ 及 R^4 彼此各自獨立地為氫、F、 $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$ 或有機取代基；或

彼此毗連的任何取代基 R^1 、 $R^{1'}$ 及 R^4 一起形成一可選擇性經取代之芳香族或雜芳香族環或環系統；

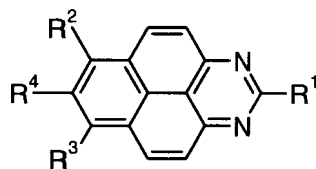
m 為整數 1 至 6；及

R^{100} 、 R^{101} 及 R^{102} 彼此各自獨立地為可選擇性經取代的 C_1 - C_8 烷基、 C_6 - C_{24} 芳基或 C_7 - C_{12} 芳烷基；及 Q 為連結基團；附帶條件為在式 III 之化合物中，取代基 $R^{1'}$ 或 R^4

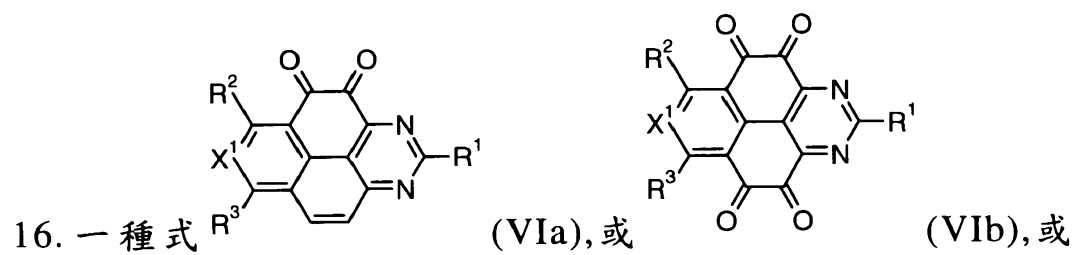
之至少一個為基團Q；及進一步附帶條件為排除下列化合物1至12：



Cpd.	R ¹	R ²	R ³
1			
2			
3			
4	-CH ₃	H	H
5		H	H
6	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃



Cpd.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴
7	-CH ₃			H
8				H
9	-CH ₃	H	-CH ₃	-CO ₂ C ₂ H ₅
10				H
11	-CH ₃	-CH ₃		H
12		-CH ₃		H



之化合物，其中 X^1 、 R^1 、 R^2 及 R^3 如在申請專利範圍第2項中所定義。

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第 () 圖。(無)

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

