



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I775086 B

(45)公告日：中華民國 111 (2022) 年 08 月 21 日

(21)申請案號：109117911

(22)申請日：中華民國 104 (2015) 年 07 月 09 日

(51)Int. Cl. : C07D251/24 (2006.01)

C07D409/04 (2006.01)

C07D409/10 (2006.01)

C07D421/10 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/00 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30)優先權：2014/07/09 美國 62/022,300

2014/08/19 美國 62/038,925

2014/10/06 美國 62/060,192

2014/11/24 美國 62/083,490

2015/06/09 美國 14/734,712

(71)申請人：美商環球展覽公司(美國) UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION (US)

美國

(72)發明人：曾禮昌 ZENG, LICHANG (CN)；拉擲克 蘇曼 LAYEK, SUMAN (IN)；博瑞奧雷

皮瑞 路克 T BOUDREAU, PIERRE-LUC T. (CA)；艾樹納維 傑納柏

ELSHENAWY, ZEINAB (US)；寇塔司 葛雷格 KOTTAS, GREGG (US)；迪亞金

艾雷西 波里索維奇 DYATKIN, ALEXEY BORISOVICH (US)；喬瑟夫 史考

特 JOSEPH, SCOTT (US)；亞當威區 瓦丁 ADAMOVICH, VADIM (US)；夏 傳

軍 XIA, CHUANJUN (US)；王婷芝 WANG, TING-CHIH (TW)；亞吉爾 渥特

YEAGER, WALTER (US)

(74)代理人：陳長文

(56)參考文獻：

TW 200602457A

TW 201332995A

TW 201516037A

CN 103380508A

審查人員：林佳慧

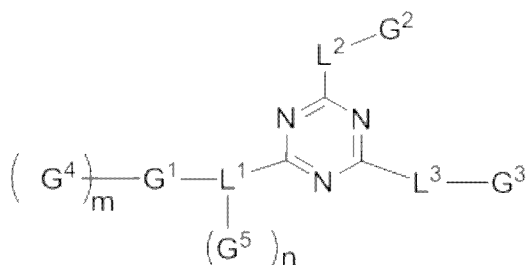
申請專利範圍項數：26 項 圖式數：6 共 164 頁

(54)名稱

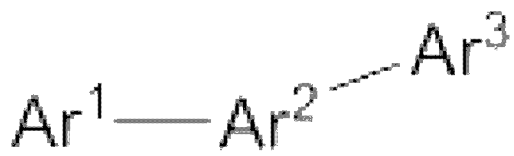
有機電致發光材料及裝置

(57)摘要

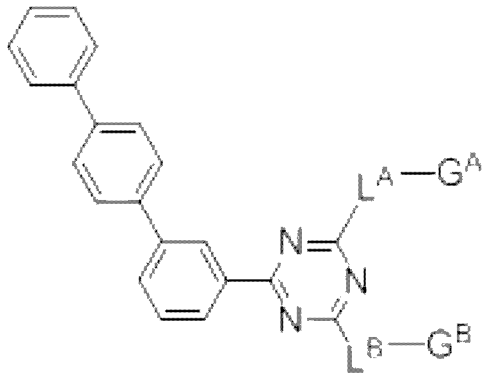
本發明描述一種包含第一化合物及第二化合物之組合物。該組合物可為具有根據式 I



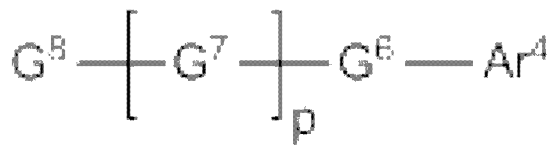
之結構的第一化合物與具有根據式 II



之結構的第二化合物之混合物。該組合物亦可為具有根據式 III

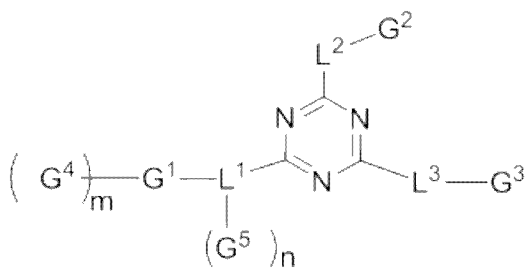


之結構的第一化合物與具有根據式 IV



之結構的第二化合物之混合物。本發明亦描述包括式 I 及式 II 或式 III 及式 IV 之組合物的裝置，諸如 OLED，以及製造該等裝置之方法。

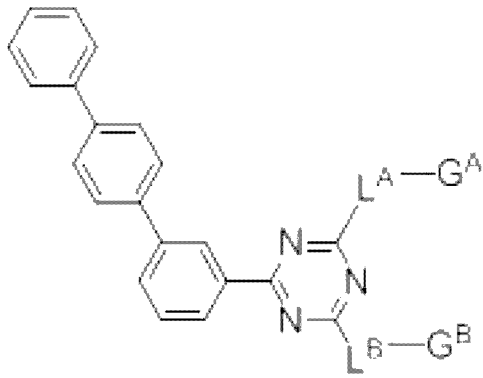
A composition comprising a first compound and a second compound is described. The composition can be a mixture of a first compound having a structure according to Formula I,



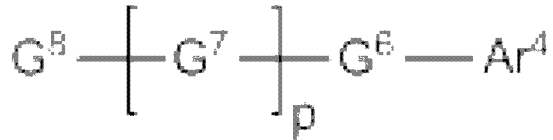
, and a second compound having a structure according to Formula II,



. The composition can also be a mixture of a first compound having a structure according to Formula III,

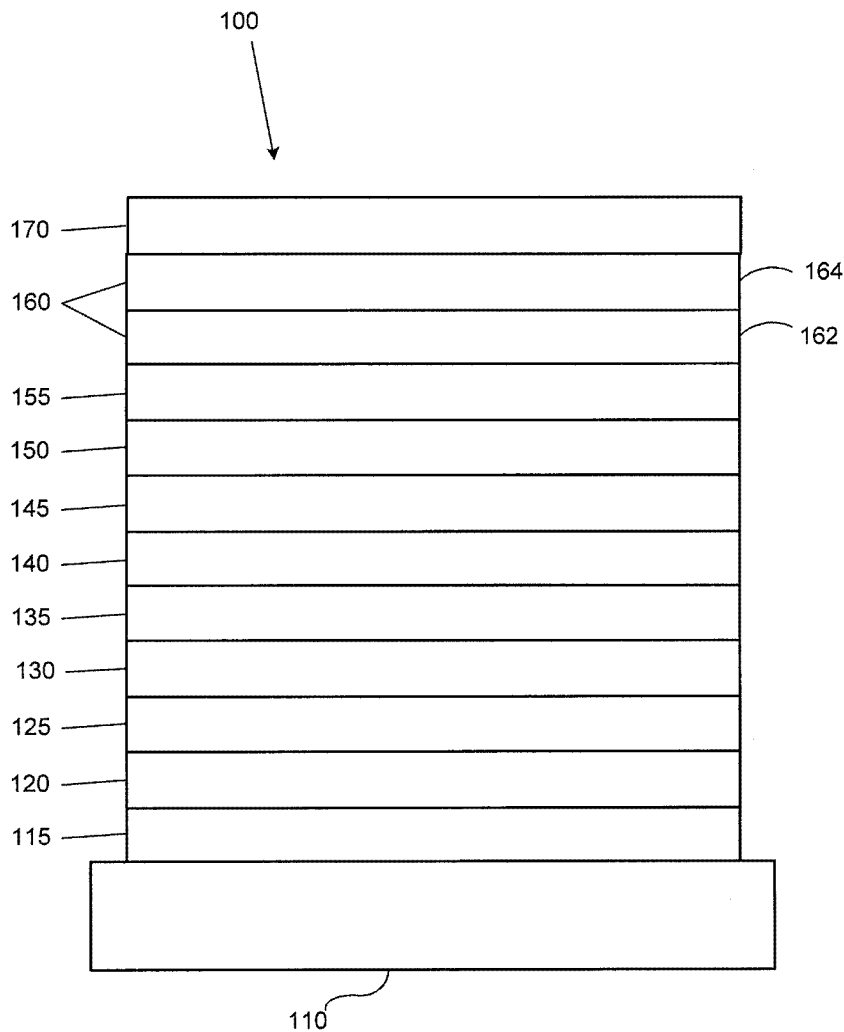


, and a second compound having a structure according to Formula IV,



. Devices, such as OLEDs, that include the compositions for Formulas I & II or Formulas III & IV, as well as, methods of making the same are also described.

指定代表圖：

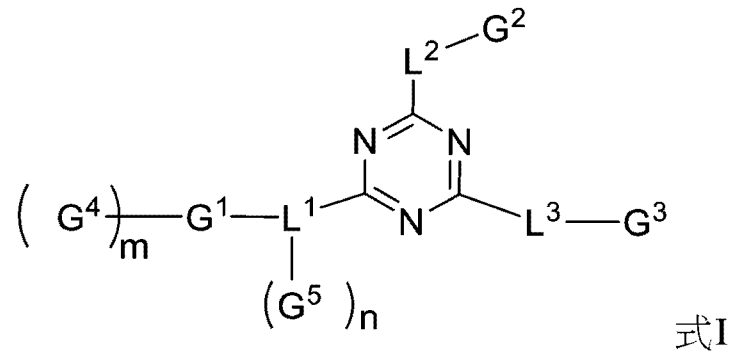


符號簡單說明：

- 100:裝置
- 110:基板
- 115:陽極
- 120:電洞注入層
- 125:電洞傳輸層
- 130:電子阻擋層
- 135:發射層
- 140:電洞阻擋層
- 145:電子傳輸層
- 150:電子注入層
- 155:保護層
- 160:陰極
- 162:第一導電層
- 164:第二導電層
- 170:阻擋層

【圖1】

特徵化學式：



I775086

【發明摘要】

【中文發明名稱】

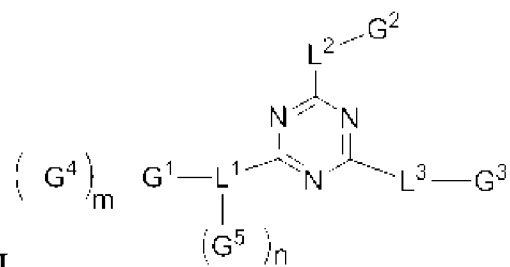
有機電致發光材料及裝置

【英文發明名稱】

ORGANIC ELECTROLUMINESCENT MATERIALS AND DEVICES

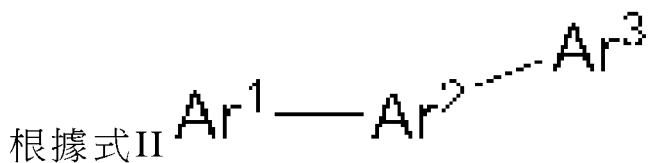
【中文】

本發明描述一種包含第一化合物及第二化合物之組合物。該組合物

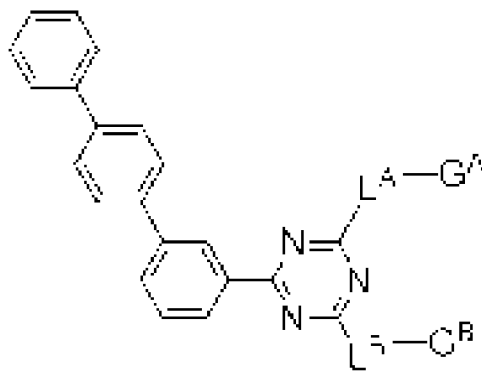


可為具有根據式I

之結構的第一化合物與具有

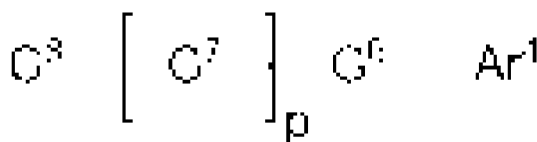


之結構的第二化合物之混合物。該



組合物亦可為具有根據式III

之結構的第一化



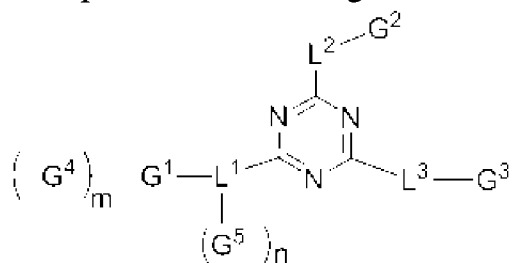
合物與具有根據式IV

之結構的第二化合物

之混合物。本發明亦描述包括式I及式II或式III及式IV之組合物的裝置，諸如OLED，以及製造該等裝置之方法。

【英文】

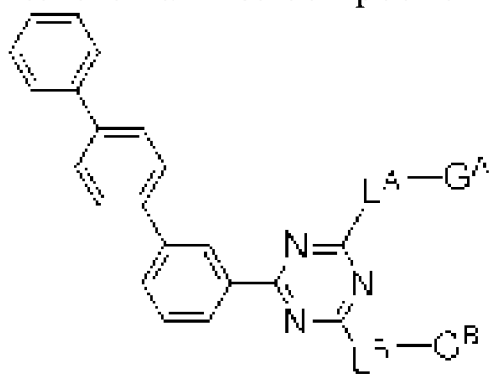
A composition comprising a first compound and a second compound is described. The composition can be a mixture of a first compound having a structure according to Formula I,



, and a second compound having a structure

according to Formula II, $Ar^1 - Ar^2 - Ar^3$. The composition

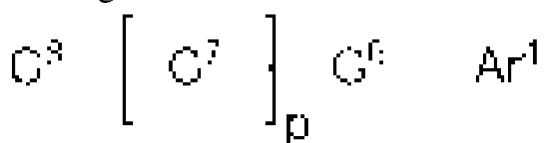
can also be a mixture of a first compound having a structure according



to Formula III,

, and a second compound

having a structure according to Formula IV,



. Devices, such as OLEDs, that include

the compositions for Formulas I & II or Formulas III & IV, as well as, methods of making the same are also described.

【指定代表圖】

圖1

【代表圖之符號簡單說明】

100:裝置

110:基板

115:陽極

120:電洞注入層

125:電洞傳輸層

130:電子阻擋層

135:發射層

140:電洞阻擋層

145:電子傳輸層

150:電子注入層

155:保護層

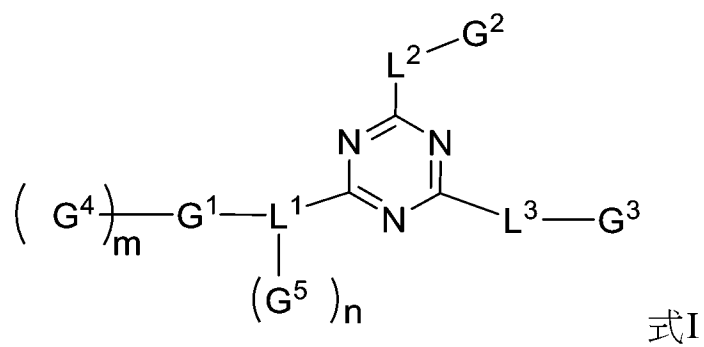
160:陰極

162:第一導電層

164:第二導電層

170:阻擋層

【特徵化學式】



【發明說明書】

【中文發明名稱】

有機電致發光材料及裝置

【英文發明名稱】

ORGANIC ELECTROLUMINESCENT MATERIALS AND DEVICES

【技術領域】

本發明係關於用作主體、阻擋材料及電子傳輸材料之化合物，及包括該等化合物之裝置，諸如有機發光二極體。

【先前技術】

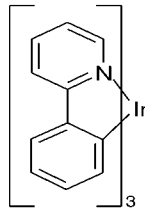
利用有機材料之光電裝置由於許多原因而日益變得合乎需要。用於製造該等裝置之許多材料相對便宜，因此有機光電裝置具有優於無機裝置之成本優勢的潛力。另外，有機材料之固有性質(諸如其可撓性)可使其非常適於特定應用，諸如在可撓性基板上的製造。有機光電裝置之實例包括有機發光裝置(OLED)、有機光敏晶體管、有機光伏打電池及有機光偵測器。對於OLED，有機材料可具有超過習知材料之效能優勢。舉例而言，有機發射層發光所處之波長一般可容易地用適當摻雜劑來調節。

當跨越裝置施加電壓時，OLED利用發光之有機薄膜。OLED正成為用於諸如平板顯示器、照明及背光之應用的日益受關注之技術。若干OLED材料及構造描述於美國專利第5,844,363號、第6,303,238號及第5,707,745號中，該等專利係以全文引用的方式併入本文中。

磷光發射分子之一種應用為全顏色顯示器。關於該種顯示器之行業標準需要適合於發射特定色彩(稱為「飽和」色)之像素。詳言之，該等標準需要飽和紅色、綠色及藍色像素。色彩可使用此項技術中熟知之CIE座

標量測。

綠色發射性分子之一實例為參(2-苯基吡啶)銱，表示為 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ ，其具有以下結構：



在此圖及下文之圖中，吾等以直線描繪氮至金屬(此處為Ir)之配位鍵(dative bond)。

如本文中所用之術語「有機」包括可用於製造有機光電裝置之聚合材料以及小分子有機材料。「小分子」係指不為聚合物之任何有機材料，且「小分子」實際上可能相當大。在一些情況下，小分子可包括重複單元。舉例而言，使用長鏈烷基作為取代基並不會將某一分子自「小分子」類別中移除。小分子亦可例如作為聚合物主鏈上之側基或作為主鏈之一部分併入聚合物中。小分子亦可充當樹狀體之核心部分，該樹狀體由一系列化學殼層組合於該核心部分上組成。樹狀體之核心部分可為螢光或磷光小分子發射體。樹狀體可為「小分子」，且威信目前用於OLED領域之所有樹狀體均為小分子。

如本文中所用，「頂部」意謂離基板最遠，而「底部」意謂距基板最近。在將第一層描述為「置於」第二層「上方」時，第一層係置於離基板較遠處。除非指定第一層與第二層「接觸」，否則在第一層與第二層之間可能存在其他層。舉例而言，即使陰極與陽極之間存在各種有機層，陰極亦可被描述為「置於」陽極「上方」。

如本文中所使用，「溶液可處理」意謂能夠溶解、分散或輸送於液體

介質中及/或自液體介質沈積，該液體介質呈溶液或懸浮液形式。

當咸信配位體直接促成發射材料之光敏性質時，配位體可稱為「光敏性」配位體。當咸信配位體並不促成發射材料之光敏性質時，配位體可稱為「輔助性」配位體，但輔助性配位體可能改變光敏性配位體之性質。

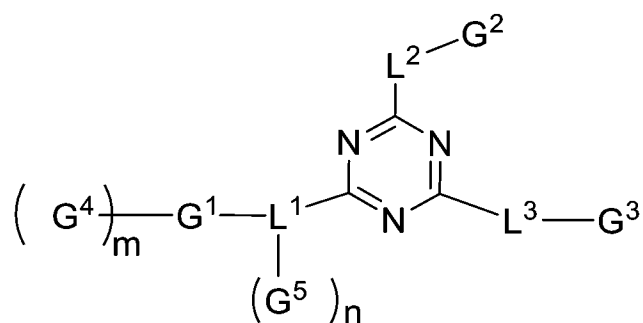
如本文中所用且如熟習此項技術者通常所將瞭解，若第一能階較接近於真空能階，則第一「最高佔用分子軌域」(Highest Occupied Molecular Orbital, HOMO)或「最低未佔用分子軌域」(Lowest Unoccupied Molecular Orbital, LUMO)之能階「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO能階。由於游離電位(IP)經量測相對於真空能階為負能量，故較高HOMO能階對應於具有較小絕對值之IP(IP為較不負的負值(less negative))。類似地，較高LUMO能階對應於具有較小絕對值之電子親和力(EA)(EA為較不負的負值)。在頂部為真空能階之習知能階圖上，一種材料之LUMO能階高於同一材料之HOMO能階。「較高」HOMO或LUMO能階呈現比「較低」HOMO或LUMO能階接近於該圖頂部。

如本文中所用且如熟習此項技術者通常所將瞭解，若第一功函數具有較高絕對值，則第一功函數「大於」或「高於」第二功函數。由於功函數通常經量測相對於真空能階為負數，故此意謂「較高」功函數為更負之負值(more negative)。在頂部為真空能階之習知能階圖上，「較高」功函數經圖標為在向下方向上離真空能階較遠。因此，HOMO及LUMO能階之定義遵循與功函數不同的慣例。

關於OLED之更多詳情及上述定義可見於美國專利第7,279,704號中，其以全文引用的方式併入本文中。

【發明內容】

根據一個實施例，提供一種材料組合物，其包含第一化合物。第一



化合物具有下式之結構：

，式I。在

式I中：

G^1 選自由以下組成之群：二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩及萸；

L^1 、 L^2 及 L^3 各自獨立地選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶、嘧啶及其組合；

G^4 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉及其組合；

G^2 、 G^3 及 G^5 各自獨立地選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萸、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉、氮雜萸及其組合；

G^2 、 G^3 、 G^4 及 G^5 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氫、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合；

m 為0至7之整數；

n 為0至4之整數；

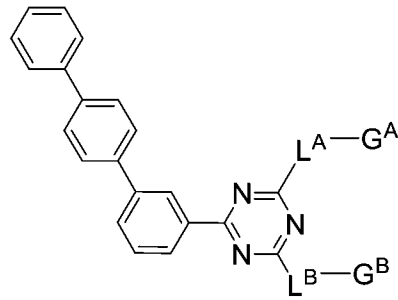
當 m 或 n 大於1時，各 G^4 或 G^5 可相同或不同；

當 n 為0時， m 等於或大於1，且各 G^4 選自由苯基及聯苯組成之群；

當 n 等於或大於1時， L^1 不為直接鍵；且

當 m 及 n 均為0時， L^1 為聯苯。

根據本發明之另一實施例，提供包含具有以下結構之第一化合物之



材料之組合物：

，式III。在式III結構中，

L^A 及 L^B 選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、吡啶及其組合；

G^A 及 G^B 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、吡啶、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩及萘；且

G^A 及 G^B 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氬、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合。

根據本發明之另一態樣，亦提供一種包括一或多個有機發光裝置之裝置。一或多個有機發光裝置中之至少一者可包括陽極；陰極；及安置在陽極與陰極之間的有機層。有機層可包括一種組合物，該組合物包含根據式I或式III之結構或本文所述的其變化中之任一者之化合物。

在本發明之另一態樣中，提供一種用於製造有機發光裝置之方法。有機發光裝置可包括第一電極、第二電極及安置在第一電極與第二電極之間的第一有機層，其中第一有機層包含第一組合物，第一組合物包含第一化合物與第二化合物之混合物。

【圖式簡單說明】

圖1展示一種有機發光裝置。

圖2展示不具有獨立電子傳輸層之倒置式有機發光裝置。

圖3展示如本文中所揭示之式I。

圖4展示如本文中所揭示之式II。

圖5展示如本文中所揭示之式III。

圖6展示如本文中所揭示之式IV。

【實施方式】

相關申請案之交叉參考

本申請案為2014年7月9日申請之美國專利申請案第62/022,300號；2014年8月19日申請之美國專利申請案第62/038,925號；2014年10月6日申請之美國專利申請案第62/060,192號；及2014年11月24日申請之美國專利申請案第62/083,490號之非臨時申請案，該等申請案之全部內容以引用的方式併入本文中。

聯合研究協議之各方

所主張之發明係代表及/或聯合以下一或多方共同大學法人研究協議當事者而創製：密歇根大學委員會 (Regents of the University of Michigan)、普林斯頓大學 (Princeton University)、南加州大學 (University of Southern California) 及環球顯示器公司 (Universal Display Corporation)。該協議在所主張之發明創製之日及之前有效且所主張之發明係由於在該協議範疇內所進行之活動而創製。

一般而言，OLED包含至少一個有機層，其安置於陽極與陰極之間且與陽極及陰極電連接。當施加電流時，陽極注入電洞且陰極注入電子於該有機層中。所注入之電洞及電子各自朝帶相反電荷之電極遷移。當電子及電洞定位於同一分子上時，形成「激子」，其為具有激發態之定域電子-

電洞對。當激子經由光發射機制弛豫時，發射光。在一些情況下，激子可定位於準分子或激基複合物(exciplex)上。亦可能出現諸如熱弛豫之非輻射機制，但通常認為其為不合需要的。

最初的OLED使用自單重態發光(「螢光」)之發射分子，如例如美國專利第4,769,292號中所揭示，該專利以全文引用的方式併入本文中。螢光發射通常在小於10奈秒(nanosecond)之時段內發生。

最近已說明具有自三重態發光(「磷光」)之發射材料的OLED。以引用方式全部併入之Baldo等人發表在Nature，第395卷，151-154, 1998上之「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」(「Baldo-I」)及Baldo等人發表在Appl. Phys. Lett,第75卷，第3期，4-6, (1999)上之「Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence」(「Baldo-II」)。在美國專利第7,279,704號，第5-6欄中更詳細地描述磷光，該專利以引用的方式併入。

圖1展示一有機發光裝置100。該等圖並不一定按比例繪製。裝置100可包括基板110、陽極115、電洞注入層120、電洞傳輸層125、電子阻擋層130、發射層135、電洞阻擋層140、電子傳輸層145、電子注入層150、保護層155、陰極160及阻擋層170。陰極160為具有第一導電層162及第二導電層164之複合陰極。裝置100可藉由依序沈積所描述之層來製造。在以引用之方式併入之US 7,279,704的第6-10行中更詳細地描述此等各種層以及實例材料之特性及功能。

可獲知此等層各自的更多實例。舉例而言，可撓且透明之基板-陽極組合揭示於美國專利第5,844,363號中，該專利以全文引用的方式併入。p

摻雜之電洞傳輸層的實例為按 50:1 之莫耳比摻雜 F₄-TCNQ 之 m-MTDATA，如美國專利申請公開案第 2003/0230980 號中所揭示，該案以全文引用的方式併入。發射材料及主體材料之實例揭示於 Thompson 等人之美國專利第 6,303,238 號中，其以全文引用的方式併入。n 摻雜之電子傳輸層的實例為按 1:1 之莫耳比摻雜 Li 之 BPhen，如美國專利申請公開案第 2003/0230980 號中所揭示，該案以全文引用的方式併入。美國專利第 5,703,436 號及第 5,707,745 號(其以全文引用的方式併入)揭示陰極實例，包括具有金屬薄層之複合陰極，諸如上覆透明、導電、濺鍍沈積之 ITO 層的 Mg:Ag。關於阻擋層之理論及用途更詳細地描述於美國專利第 6,097,147 號及美國專利申請公開案第 2003/0230980 號中，該等文獻以全文引用的方式併入。注入層之實例提供於美國專利申請公開案第 2004/0174116 號中，該案以全文引用的方式併入。關於保護層之說明可見於美國專利申請公開案第 2004/0174116 號，該案以全文引用的方式併入。

圖 2 展示倒置式 OLED 200。該裝置包括基板 210、陰極 215、發射層 220、電洞傳輸層 225 及陽極 230。裝置 200 可以通過依序沈積所描述之層來製造。由於最常見之 OLED 構造具有置於陽極上方之陰極，而裝置 200 中陰極 215 置於陽極 230 下方，故裝置 200 可稱為「倒置式」OLED。可將與關於裝置 100 所述之彼等材料相似之材料用於裝置 200 之相應層中。圖 2 提供如何自裝置 100 之結構省略某些層的一個實例。

圖 1 及 2 中所說明之簡單分層結構係作為非限制實例而提供，且應理解，可以結合各種各樣之其他結構使用本發明的實施例。所描述之具體材料及結構本質上為例示性的，且可使用其他材料及結構。可藉由以不同方

式組合所述各個層來獲得功能性OLED，或可根據設計、效能及成本因素完全省去各層。亦可包括未具體描述之其他層。可使用除具體描述之彼等材料以外的材料。儘管本文中所提供之許多實例將各個層描述為包含單一材料，但應瞭解可使用材料之組合，諸如主體與摻雜劑之混合物，或更一般的混合物。該等層亦可具有各個子層。本文中對各個層給出之名稱並不意欲具有嚴格限制性。舉例而言，在裝置200中，電洞傳輸層225傳輸電洞且注入電洞至發射層220中，且可描述為電洞傳輸層或電洞注入層。在一個實施例中，OLED可描述為具有「有機層」，其置於陰極與陽極之間。如(例如)關於圖1及2所述，該有機層可包含單一層，或可進一步包含具有不同有機材料之多個層。

亦可使用未具體描述之結構及材料，諸如包含聚合物材料之OLED(PLED)，諸如Friend等人之美國專利第5,247,190號中所揭示，該案以全文引用的方式併入。另舉例而言，可使用具有單一有機層之OLED。可堆棧OLED，如例如Forrest等人之美國專利第5,707,745號中所述，該案以全文引用的方式併入。OLED結構可偏離圖1及圖2中說明之簡單層狀結構。舉例而言，基板可包括成角反射表面以改良向外耦合，諸如Forrest等人之美國專利第6,091,195號中所述之台面結構，及/或如Bulovic等人之美國專利第5,834,893號中所述之坑形結構，該等專利係以引用之方式全部併入。

除非另有說明，否則各種實施例之任何層均可藉由任何適合的方法來沈積。對於有機層，較佳方法包括熱蒸發、噴墨(諸如以全文引用之方式併入的美國專利第6,013,982號及第6,087,196號中所述)、有機氣相沈積(OVPD)(諸如以全文引用之方式併入的頒予Forrest等人之美國專利第

6,337,102號中所述)及藉由有機蒸氣噴射印刷(OVJP)的沈積(諸如以全文引用之方式併入的美國專利第7,431,968號中所述)。其他適合的沈積方法包括旋塗及其他基於溶液之方法。基於溶液之方法較佳在氮氣或惰性氛圍中進行。對於其他層，較佳方法包括熱蒸發。較佳之圖案化方法包括經由光罩沈積、冷熔接(諸如美國專利第6,294,398號及第6,468,819號中所述，該等專利以全文引用的方式併入)，及聯合諸如噴墨及OVJD之一些沈積方法的圖案化。亦可使用其他方法。欲沈積之材料可經改質以使其與特定沈積方法相適合。舉例而言，可在小分子中使用分支或未分支且較佳含有至少3個碳之取代基(諸如烷基及芳基)以增強其經受溶液加工的能力。可使用具有20或20個以上碳之取代基，且3-20個碳為較佳範圍。由於不對稱材料可具有較低之再結晶傾向，故具有不對稱結構之材料之溶液可加工性可優於具有對稱結構之彼等材料。樹狀體取代基可用於增強小分子經受溶液加工之能力。

根據本發明實施例製造之裝置可以進一步視情況包含阻擋層。阻擋層之一個用途系保護電極及有機層免於因暴露於環境中之有害物質(包括水分、蒸氣及/或氣體等)而受損。阻擋層可以沈積在基板、電極上，沈積在基板、電極下或沈積在基板、電極旁，或沈積在裝置之任何其他部分(包括邊緣)上。阻擋層可包含單個層或多個層。阻擋層可藉由各種已知的化學氣相沈積技術形成，且可以包括具有單一相之組合物以及具有多個相之組合物。任何適合材料或材料組合都可用於阻擋層。阻擋層可併有無機化合物或有機化合物或兩者。較佳之障壁層包含聚合材料與非聚合材料之混合物，如以全文引用之方式併入本文中之美國專利第7,968,146號、PCT專利申請第PCT/US2007/023098號及第PCT/US2009/042829號中所

述。為了被視為「混合物」，構成障壁層之前述聚合材料及非聚合材料應在相同反應條件下及/或在同時沈積。聚合材料與非聚合材料之重量比率可以在95:5至5:95之範圍內。聚合材料及非聚合材料可以由同一前驅體材料產生。在一個實例中，聚合材料與非聚合材料之混合物基本上由聚合矽及無機矽組成。

根據本發明之實施例製造之裝置可併入至多種多樣的電子組件模組(或單元)中，該等電子組件模組可併入至多個電子產品或中間組件中。此類電子產品或中間組件的實例包括可以為終端用戶產品製造商所利用之顯示螢幕、照明裝置(諸如離散光源裝置或照明面板)等。此類電子組件模組可視情況包括驅動電子裝置及/或電源。根據本發明之實施例製造之裝置可併入至多種多樣的消費型產品中，該等消費型產品中併有一或多種電子組件模組(或單元)。此類消費型產品將包括含一或多個光源及/或某種類型之視覺顯示器中之一或多者的任何種類之產品。此類消費型產品之一些實例包括平板顯示器、電腦監視器、醫療監視器、電視機、告示牌、用於內部或外部照明及/或發信號的燈、平視顯示器、全透明或部分透明顯示器、可撓性顯示器、雷射印刷機、電話、蜂巢式電話、平板電腦、平板手機、個人數位助理(PDA)、膝上型電腦、數位相機、攝錄像機、取景器、微顯示器、3-D顯示器、交通工具、大面積牆壁、劇院或體育館螢幕或指示牌。可使用各種控制機制來控制根據本發明製造之裝置，包括被動型矩陣及主動型矩陣。意欲將該等裝置中之許多裝置用於對人類而言舒適的溫度範圍中，諸如18攝氏度至30攝氏度，且更佳在室溫(20-25攝氏度)下，但可在此溫度範圍以外(例如-40攝氏度到+80攝氏度)使用。

本文所述之材料及結構可應用於除OLED以外之裝置。舉例而言，諸

如有機太陽能電池及有機光偵測器之其他光電裝置可使用該等材料及結構。更一般而言，諸如有機晶體管之有機裝置可使用該等材料及結構。

如本文所用，術語「鹵基」、「鹵素」或「鹵化物」包括氟、氯、溴及碘。

如本文所用之術語「烷基」涵蓋直鏈及分支鏈烷基。較佳烷基部分為含有一至十五個碳原子之烷基部分且包括甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、第三丁基及其類似基團。另外，烷基可視情況經取代。

如本文所用之術語「環烷基」涵蓋環狀烷基。較佳環烷基為含有3至7個碳原子之環烷基，且包括環丙基、環戊基、環己基及其類似基團。另外，環烷基可視情況經取代。

如本文所用之術語「烯基」涵蓋直鏈及分支鏈烯基。較佳烯基為含有二至十五個碳原子之烯基。另外，烯基可視情況經取代。

如本文所用之術語「炔基」涵蓋直鏈及分支鏈炔基。較佳炔基為含有二至十五個碳原子之炔基。另外，炔基可視情況經取代。

如本文所用，術語「芳烷基」或「芳基烷基」可互換使用且涵蓋具有作為取代基之芳族基的烷基。另外，芳烷基可視情況經取代。

如本文所用之術語「雜環基」涵蓋芳族及非芳族環狀基團。雜芳環基亦意調雜芳基。較佳非芳族雜環基為含有包括至少一個雜原子之3或7個環原子之雜環基，且包括環胺，諸如嗎啉基、哌啶基、吡咯啶基及其類似者，及環醚，諸如四氫呋喃、四氫哌喃及其類似者。另外，雜環基可視情況經取代。

如本文所用之術語「芳基」或「芳族基」涵蓋單環基團及多環環系統。多環可具有兩個或兩個以上環，其中2個碳原子為2個鄰接環(環為

「稠合的」)所共用，其中至少一個環為芳族，例如其他環可為環烷基、環烯基、芳基、雜環及/或雜芳基。另外，芳基可視情況經取代。

如本文所用之術語「雜芳基」涵蓋可包括1至3個雜原子之單環雜芳族基，例如吡咯、呋喃、噻吩、咪唑、噁唑、噻唑、三唑、吡唑、吡啶、吡嗪及嘧啶及其類似者。術語雜芳基亦包括具有兩個或兩個以上環之多環雜芳族系統，其中2個原子為2個鄰接環(環為「稠合的」)所共用，其中至少一個環為雜芳基，例如其他環可為環烷基、環烯基、芳基、雜環及/或雜芳基。另外，雜芳基可視情況經取代。

烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基、雜環基、芳基以及雜芳基可視情況經一或多個選自由以下組成之群的取代基取代：氫、氖、鹵素、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、環胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、醚、酯、腈、異腈、硫基、亞磺醯基、磺醯基、膦基以及其組合。

如本文所使用，「經取代」指示除H以外之取代基鍵結至相關位置，諸如碳。因此，舉例而言，在 R^1 經單取代時，則一個 R^1 必須不為H。類似地，在 R^1 經二取代時，則兩個 R^1 必須不為H。類似地，在 R^1 未經取代時， R^1 對於所有可用位置而言均為氫。

本文所述之片段(亦即氮雜二苯并呋喃、氮雜二苯并噻吩等)中之「氮雜」名稱意謂各別片段中之一或多個C-H基團可經氮原子置換，例如且無任何限制性地，氮雜聯伸三苯涵蓋二苯并[f,h]喹啉及二苯并[f,h]喹啉。一般熟習此項技術者可容易地預想上文所描述之氮雜衍生物之其他氮類似物，且所有此類類似物意欲由如本文所闡述之術語涵蓋。

應理解，當將分子片段描述為取代基或另外連接至另一部分時，其

名稱可如同其為片段(例如苯基、伸苯基、萘基、二苯并呋喃基)一般或如同其為整個分子(例如苯、萘、二苯并呋喃)一般書寫。如本文所用，此等不同命名取代基或連接片段之方式被視為等效的。

展現良好壽命及效率之OLED裝置之發射層(EML)通常需要兩種以上組分(例如3或4種組分)。使用真空熱蒸發(VTE)方法製造此類EML則需要在單獨VTE昇華坩堝中蒸發3或4種蒸發源材料，其與具有單個主體及發射極之標準雙組分EML相比極複雜且成本高，該標準雙組分EML僅需要兩種蒸發源。

預混合兩種或兩種以上材料且將其自一個VTE昇華坩堝蒸發可降低製造方法之複雜度。然而，共蒸發必須為穩定的且產生組成貫穿蒸發方法保持恆定之蒸發膜。膜之組成變化可不利地影響裝置效能。為了獲得在真空下自化合物混合物之穩定共蒸發，吾人將假定材料在相同條件下必須具有相同蒸發溫度。然而，此可能並非吾人必須考慮的唯一參數。當兩種化合物混合在一起時，其可與彼此相互作用且混合物之蒸發特性可不同於其個別特性。另一方面，蒸發溫度略微不同之材料可形成穩定共蒸發混合物。因此，極其難以獲得穩定共蒸發混合物。迄今為止，穩定共蒸發混合物實例非常少。材料之「蒸發溫度」在真空沈積工具中在通常介於 1×10^{-7} 托至 1×10^{-8} 托之間的恆定壓力下、在 2 \AA/s 沈積速率下在與經蒸發之材料之蒸發源相距設定距離定位的表面(例如VTE工具中之昇華坩堝)上進行量測。如一般熟習此項技術者所理解，預期本文所揭示之各種量測值(諸如溫度、壓力、沈積速率等)由於產生此等定量值之量測中之預期公差而具有標稱變化。

除溫度之外的許多因素可促進達成穩定共蒸發之能力，諸如不同材

料之混溶性及不同材料之相轉變溫度。本發明人發現，當兩種材料具有類似蒸發溫度及類似質量損失速率或類似蒸氣壓時，兩種材料可一致地共蒸發。材料之「質量損失速率」定義為隨時間推移損失之質量的百分比（「百分比/分鐘」或「%/min」）且藉由量測損失材料樣品質量之前10%所花費的時間來測定，如在達到穩定蒸發狀態之後藉由在既定實驗條件下在既定恆定溫度下對於既定材料進行熱重分析(TGA)來量測。既定恆定溫度為經選擇以使得質量損失速率值在約0.05到0.50%/min之間的一個溫度點。熟習此項技術者應理解，為了比較兩個參數，實驗條件應為一致的。量測質量損失速率及蒸氣壓之方法在此項技術中為熟知的且可例如見於Bull等人 Mater. Sci. 2011, 34, 7中。

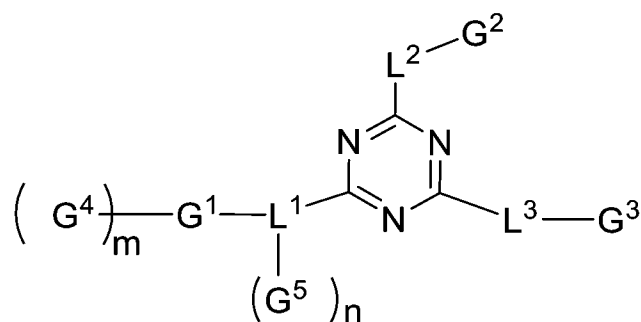
在目前先進技術之OLED裝置中，EML可由三種或三種以上組分組成。在一個實例中，EML可由兩種主體型化合物及一種發射極組合(例如電洞傳輸共主體(h主體)、電子傳輸共主體(e主體)及一種能夠在室溫下充當OLED中之發射極的化合物)組成。在另一實例中，EML可由一種主體型化合物及兩種發射極型化合物(例如一種主體化合物及兩種各自能夠在室溫下充當OLED中之發射極的化合物)組成。習知地，為了使用VTE方法製造具有三種或三種以上組分之此類EML，需要三種或三種以上蒸發源，每種組分各一種。由於組分之濃度對於裝置效能至關重要，通常在沈積過程期間個別地量測各組分之沈積速率。此使得VTE方法複雜且成本高。因此，需要預混合此類EML之組分中之至少兩者以減少VTE蒸發源的數目。

若EML之三種或三種以上組分中之任兩者可預混合且形成共蒸發源之穩定混合物，則EML層製造所需的蒸發源之數目將減少。為了使材料

可預混合至蒸發源中，其應共蒸發且均一地沈積而不改變比率。混合物中之組分比率應與自此等預混合材料蒸發沈積之膜中之組分比率相同。因此，所沈積之膜中之兩種組分的濃度藉由其在預混合蒸發源中之濃度來控制。

本發明描述一種新類別之h主體及e主體，其可預混合且自單個源穩定地共蒸發。

根據一個實施例，揭示一種材料組合物，其包含第一化合物。第一



化合物具有下式之結構：

，式I。在

式I中：

G^1 選自由以下組成之群：二苯并咪喃、二苯并噻吩、二苯并噻吩及萸；

L^1 、 L^2 及 L^3 各自獨立地選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶、嘧啶及其組合；

G^4 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉及其組合；

G^2 、 G^3 及 G^5 各自獨立地選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萸、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉、氮雜萸及其組合；

G^2 、 G^3 、 G^4 及 G^5 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氬、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝

基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合；

m 為 0 至 7 之整數；

n 為 0 至 4 之整數；

當 m 或 n 大於 1 時，各 G^4 或 G^5 可相同或不同；

當 n 為 0 時， m 等於或大於 1，且各 G^4 選自由苯基及聯苯組成之群；

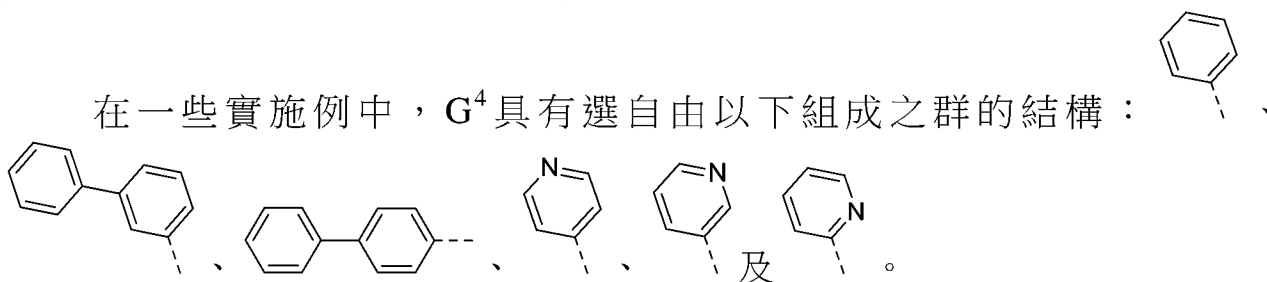
當 n 等於或大於 1 時， L^1 不為直接鍵；且

當 m 及 n 均為 0 時， L^1 為聯苯。

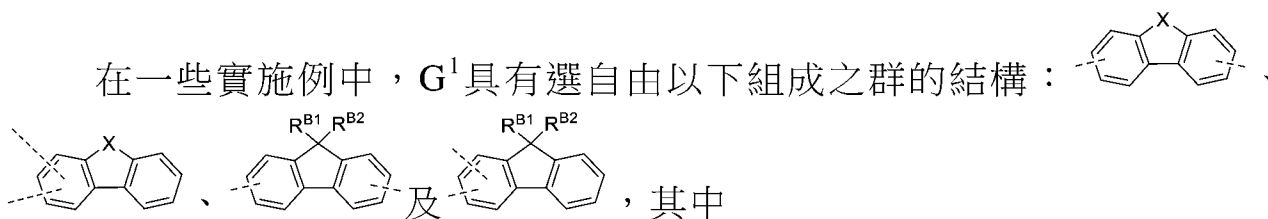
在一些實施例中， L^1 、 L^2 及 L^3 中之一或多者可為直接鍵，且直接鍵可為單鍵或雙鍵。當 L^1 為直接鍵時， $n = 0$ 。

在一些實施例中， n 為 0，而在其他實施例中 n 等於或大於 1。在一些實施例中， m 及 n 均為 0。在一些實施例中， m 等於或大於 1。

在一些實施例中， G^4 具有選自由以下組成之群的結構：



在一些實施例中， G^1 具有選自由以下組成之群的結構：

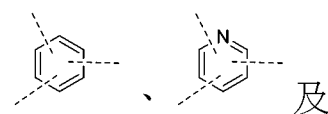


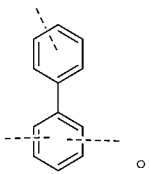
X 選自由 O、S 及 Se 組成之群；

R^{B1} 及 R^{B2} 獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、烷基、環烷基、烷氧基、芳基、雜芳基、鹵素及其組合；且

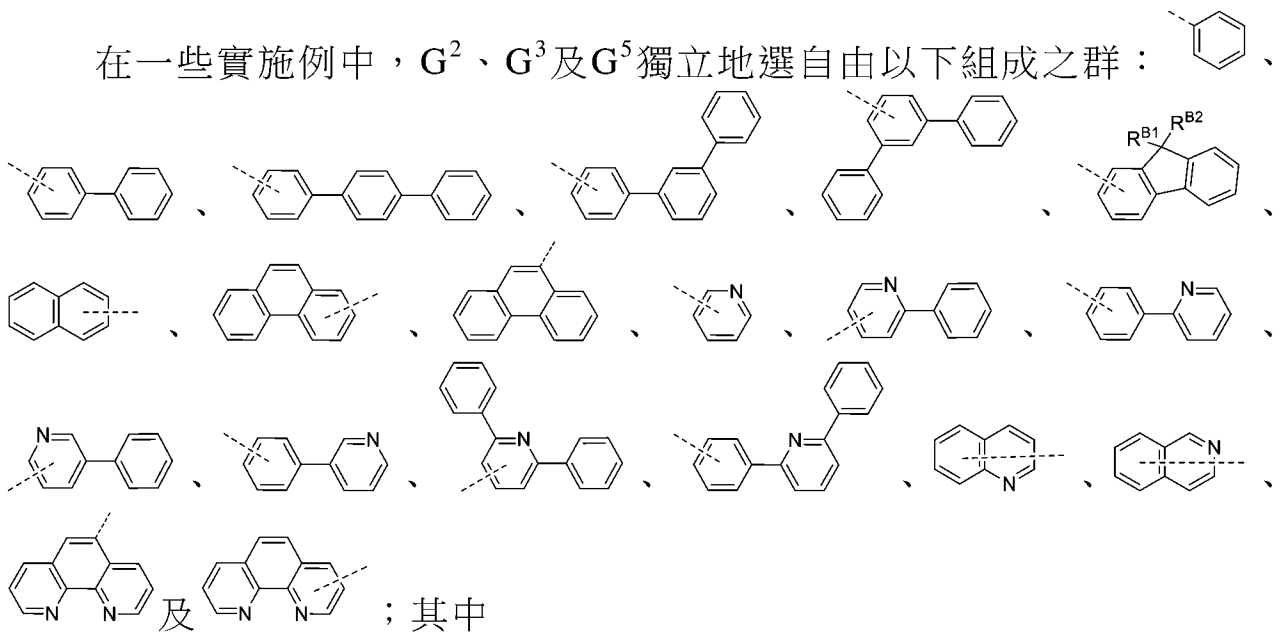
R^{B1} 及 R^{B2} 視情況接合以形成環。

在一些實施例中， L^1 選自由以下組成之群：





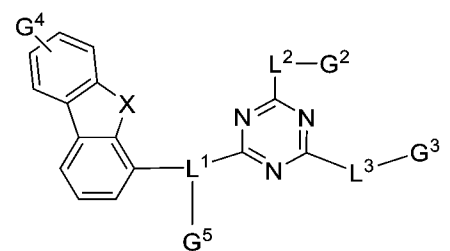
在一些實施例中， G^2 、 G^3 及 G^5 獨立地選自由以下組成之群：



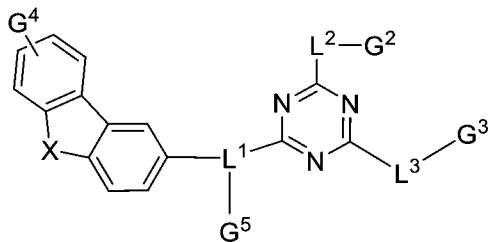
R^{B1} 及 R^{B2} 獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、烷基、環烷基、烷氧基、芳基、雜芳基、鹵素及其組合；且

R^{B1} 及 R^{B2} 視情況接合以形成環。

在一些實施例中， G^2 、 G^3 、 G^4 及 G^5 中之至少一者經至少一個氟原子取代。



在一些實施例中，第一化合物具有下式：

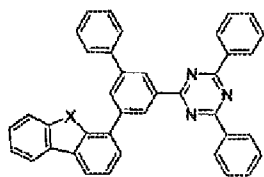


或

，其中X選自由O、S及Se組成之群。

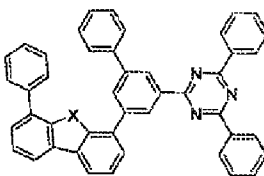
在一些實施例中，第一化合物係選自由以下組成之群：

化合物A1至A3，其各自由下式表示：



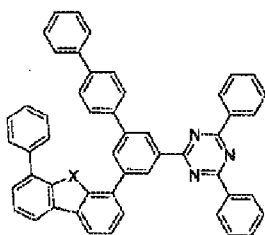
其中在化合物A1中：X=O，
在化合物A2中：X=S，
在化合物A3中：X=Se、

化合物A10至A12，其各自由下式表示：



其中在化合物A10中：X=O，
在化合物A11中：X=S，
在化合物A12中：X=Se、

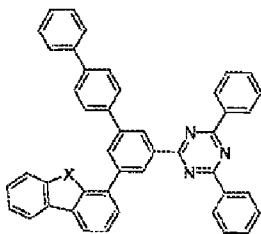
化合物A18至A21，其各自由下式表示：



其中在化合物A19中：X=O，
在化合物A20中：X=S，
在化合物A21中：X=Se、

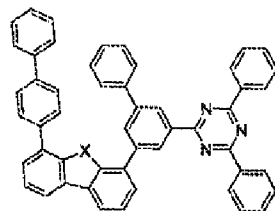
化合物A28至A30，其各自由

化合物A4至A8，其各自由下式表示：



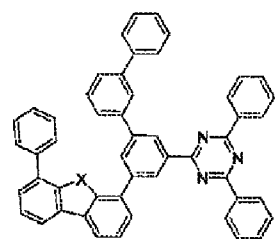
其中在化合物A4中：X=O，
在化合物A5中：X=S，
在化合物A6中：X=Se、

化合物A13至A15，其各自由下式表示：



其中在化合物A13中：
X=O，
在化合物A14中：X=S，
在化合物A15中：X=Se、

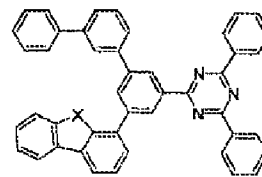
化合物A22至A24，其各自由下式表示：



其中在化合物A22中：
X=O，
在化合物A23中：X=S，
在化合物A24中：X=Se、

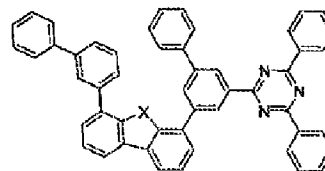
化合物A31至A33，其各自由

化合物A7至A9，其各自由下式表示：



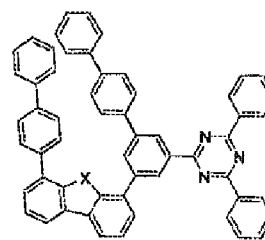
其中在化合物A7中：X=O，
在化合物A8中：X=S，
在化合物A9中：X=Se、

化合物A16至A18，其各自由下式表示：



其中在化合物A16中：
X=O，
在化合物A17中：X=S，
在化合物A18中：X=Se、

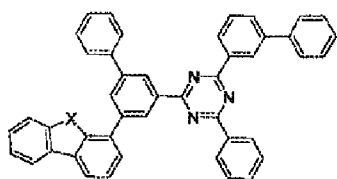
化合物A25至A27，其各自由下式表示：



其中在化合物A25中：
X=O，
在化合物A26中：X=S，
在化合物A27中：X=Se、

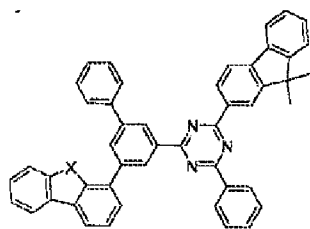
化合物A34至A36，其各自由

下式表示：



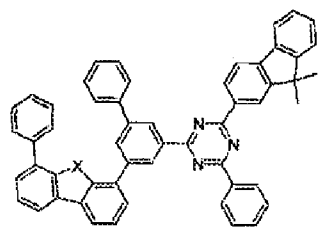
其中在化合物A28中：X=O，
在化合物A29中：X=S，
在化合物A30中：X=Se、

化合物A37至A39，其各自由
下式表示：



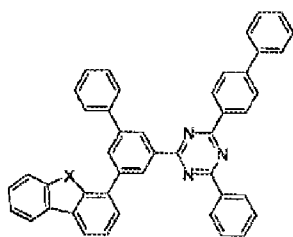
其中在化合物A37中：X=O，
在化合物A38中：X=S，
在化合物A39中：X=Se、

化合物A46至A48，其各自由
下式表示：



其中在化合物A46中：X=O，
在化合物A47中：X=S，
在化合物A48中：X=Se、

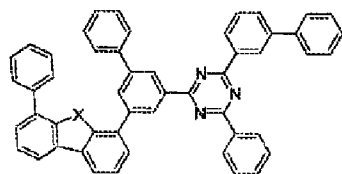
下式表示：



其中在化合物A31中：
X=O，

在化合物A32中：X=S，
在化合物A33中：X=Se、

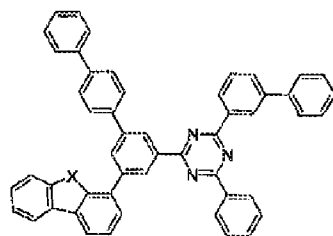
化合物A40至A42，其各自由
下式表示：



其中在化合物A40中：
X=O，

在化合物A41中：X=S，
在化合物A42中：X=Se、

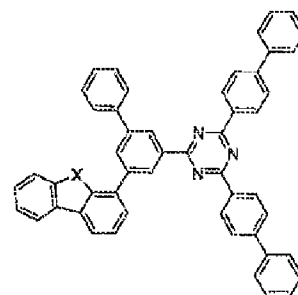
化合物A49至A51，其各自由
下式表示：



其中在化合物A49中：
X=O，

在化合物A50中：X=S，

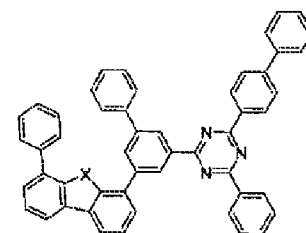
下式表示：



其中在化合物A34中：
X=O，

在化合物A35中：X=S，
在化合物A36中：X=Se、

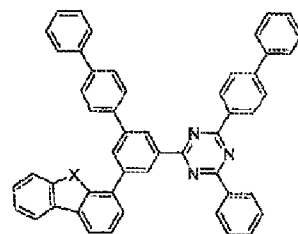
化合物A43至A45，其各自由
下式表示：



其中在化合物A43中：
X=O，

在化合物A44中：X=S，
在化合物A45中：X=Se、

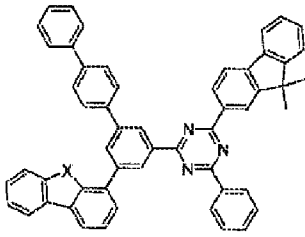
化合物A52至A54，其各自由
下式表示：



其中在化合物A52中：
X=O，

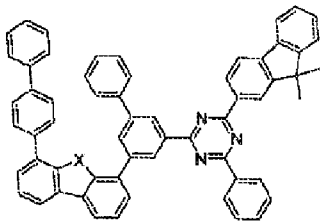
在化合物A53中：X=S，

化合物A55至A57，其各自由下式表示：



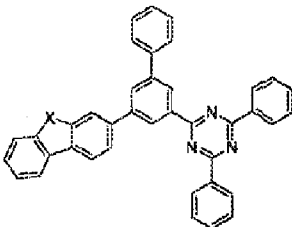
其中在化合物A55; X=O，
在化合物A56中：X=S，
在化合物A57中：X=Se、

化合物A64至A66，其各自由下式表示：



其中在化合物A64中：X=O，
在化合物A65中：X=S，
在化合物A66中：X=Se、

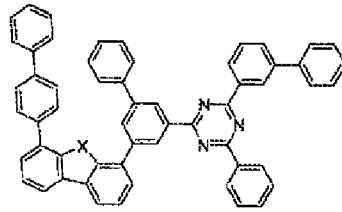
化合物A73至A75，其各自由下式表示：



其中在化合物A73中：X=O，
在化合物A74中：X=S，

在化合物A51中：X=Se、

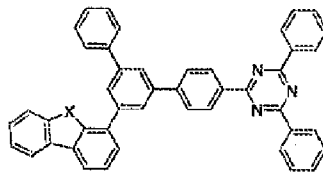
化合物A58至A60，其各自由下式表示：



其中在化合物A58中：
X=O，

在化合物A59中：X-S，
在化合物A60中：X=Se、

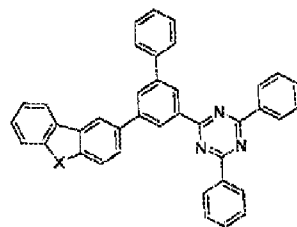
化合物A67至A69，其各自由下式表示：



其中在化合物A67中：
X=O，

在化合物A68中：X=S，
在化合物A69中：X=Se、

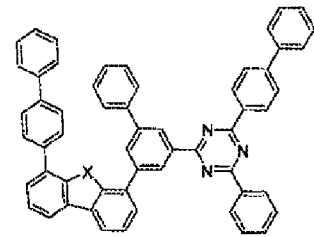
化合物A76至A78，其各自由下式表示：



其中在化合物A76中：
X=O，

在化合物A54中：X=Se、

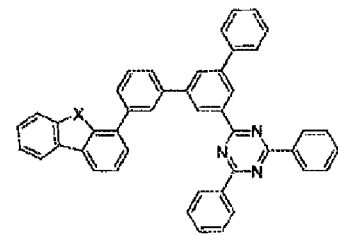
化合物A61至A63，其各自由下式表示：



其中在化合物A61中：
X=O，

在化合物A62中：X=S，
在化合物A63中：X=Se、

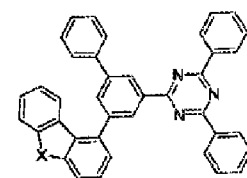
化合物A70至A72，其各自由下式表示：



其中在化合物A70中：
X=O，

在化合物A71中：X=S，
在化合物A72中：X=Se、

化合物A79至A81，其各自由下式表示：



其中在化合物A79中：
X=O，

在化合物A75中：X=Se、

在化合物A77中：X=S、

在化合物A80中：X=S、

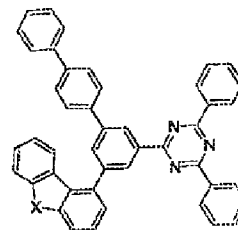
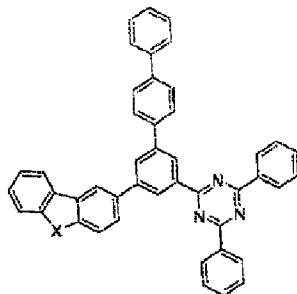
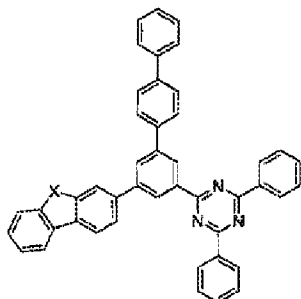
在化合物A78中：X=Se、

在化合物A81中：X=Se、

化合物A82至A84，其各自由下式表示：

化合物A85至A87，其各自由下式表示：

化合物A88至A90，其各自由下式表示：



其中在化合物A82中：X=O、

其中在化合物A85中：

其中在化合物A88中：

在化合物A83中：X=S、

X=O、

X=O、

在化合物A84中：X=Se、

在化合物A86中：X-S、

在化合物A89中：X=S、

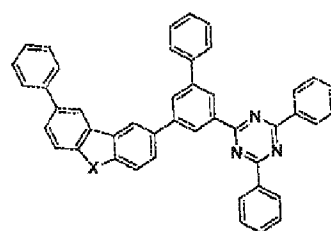
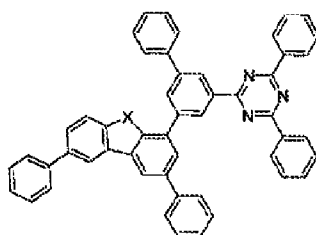
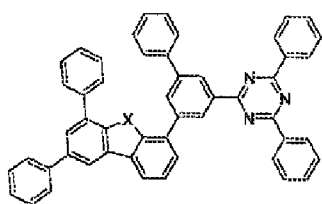
在化合物A87中：X=Se、

在化合物A90中：X=Se、

化合物A91至A93，其各自由下式表示：

化合物A94至A96，其各自由下式表示：

化合物A97至A99，其各自由下式表示：



其中在化合物A91中：X=O、

其中在化合物A94中：

其中在化合物A97中：

在化合物A92; X=S、

X=O、

X=O、

在化合物A93中：X=Se、

在化合物A95中：X=S、

在化合物A98中：X=S、

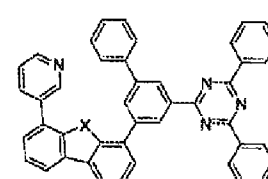
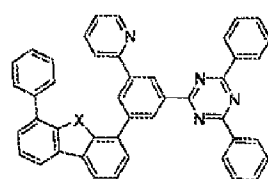
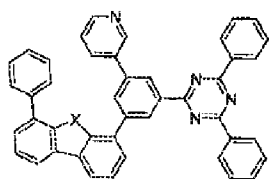
在化合物A96中：X=Se、

在化合物A99中：X=Se、

化合物A100至A102，其各自由下式表示：

化合物A103至A105，其各自由下式表示：

化合物A106至A108，其各自由下式表示：



其中在化合物A100中：

其中在化合物A103中：

其中在化合物A106中：

X=O、

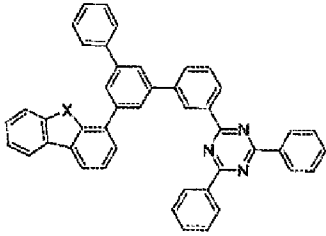
X=O、

X=O、

在化合物A101中：X=S，

在化合物A102中：X=Se、

化合物A109至A111，其各自
自由下式表示：



其中在化合物A109中：

X=O，

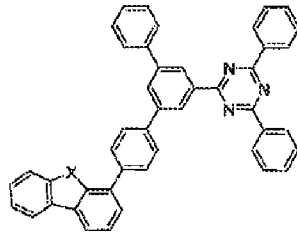
在化合物A110中：X=S，

在化合物A111中：X=Se、

在化合物A104中：X=S，

在化合物A105中：X=Se、

化合物A112至A114，其各自
自由下式表示：



其中在化合物A112中：

X=O，

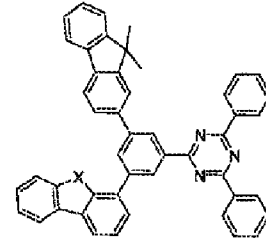
在化合物A113中：X=S，

在化合物A114中：X=Se、

在化合物A107中：X=S，

在化合物A108中：X=Se、

化合物A115至A117，其各自
自由下式表示：

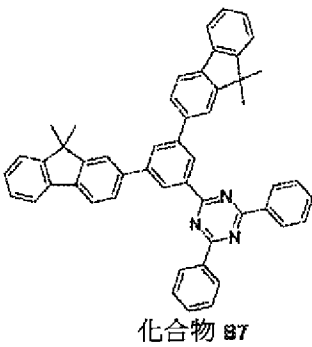
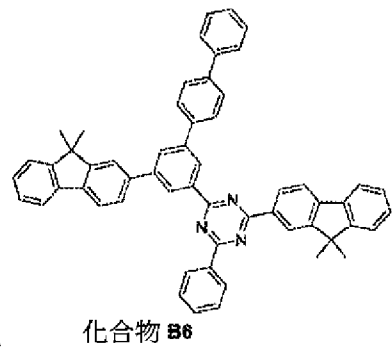
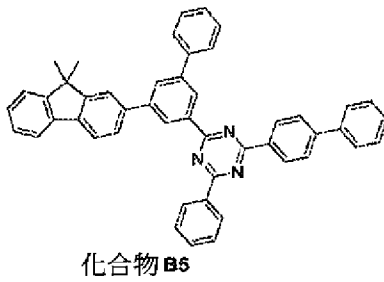
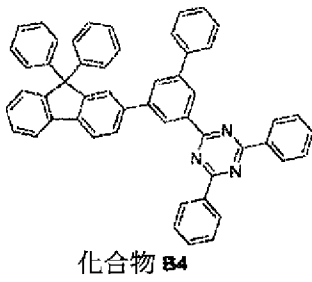
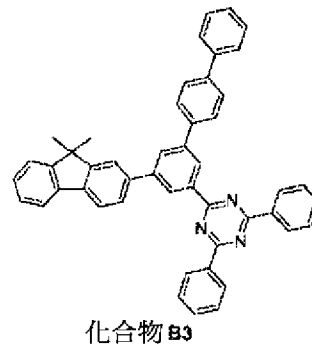
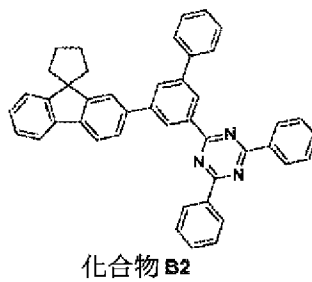
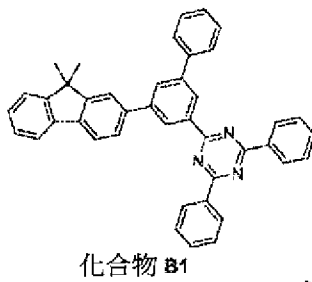


其中在化合物A115中：

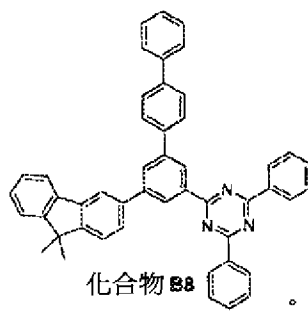
X=O，

在化合物A116中：X=S，

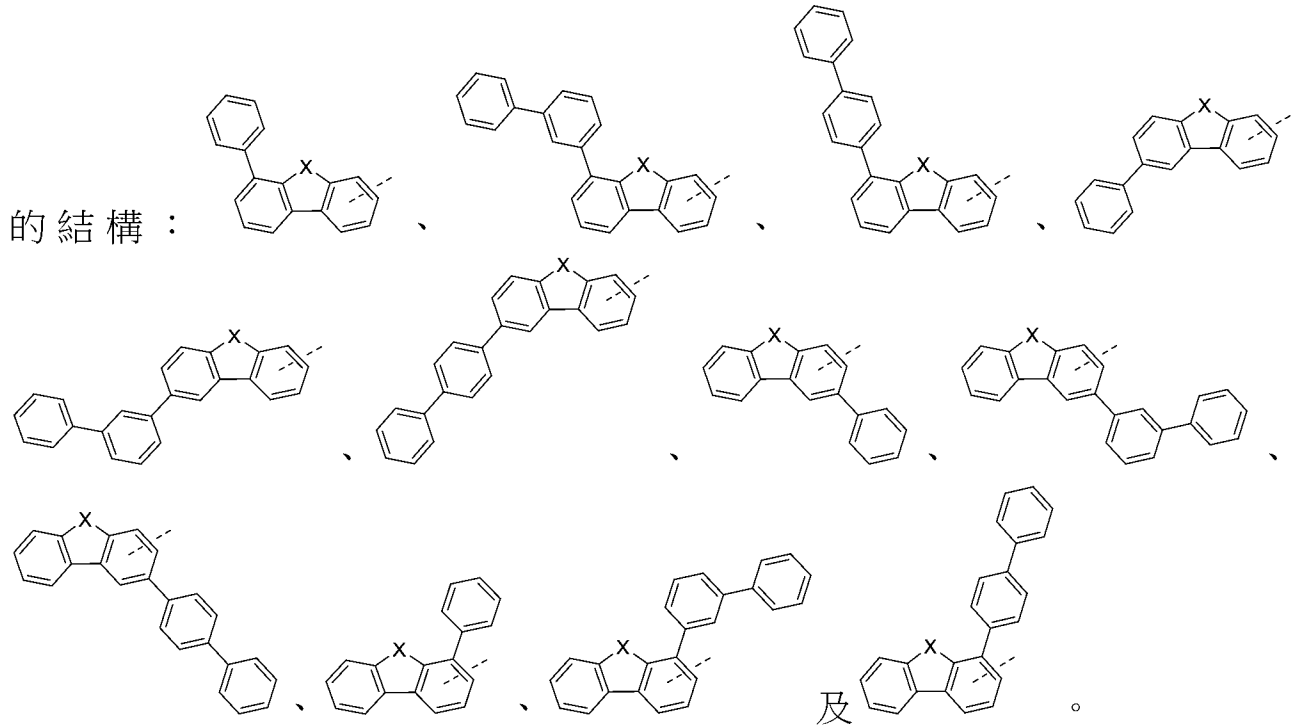
在化合物A117中：X=Se、



及

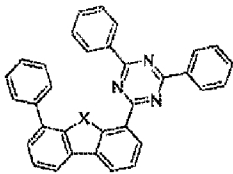


在一些實施例中，n為0，m為1，且G⁴-G¹具有選自由以下組成之群



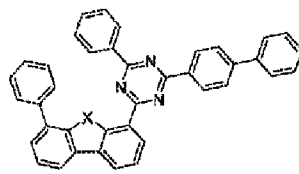
在一些實施例中，第一化合物係選自由以下組成之群：

化合物C1至C3，其各自由下式表示：



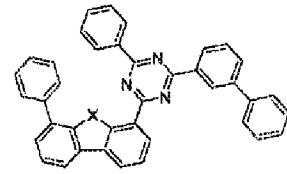
其中在化合物C1中：X=O，
在化合物C2中：X=S，
在化合物C3中：X=Se、

化合物C4至C6，其各自由下式表示：



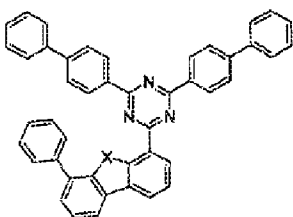
其中在化合物C4中：
X=O，
在化合物C5中：X=S，
在化合物C6中：X=Se、

化合物C7至C9，其各自由下式表示：

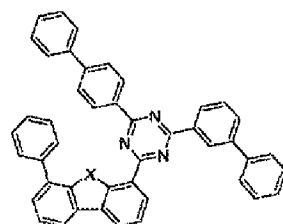


其中在化合物C7中：
X=O，
在化合物C8中：X=S，
在化合物C9中：X=Se、

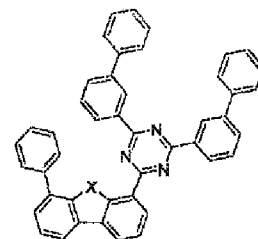
化合物C10至C12，其各自由下式表示：



化合物C13至C15，其各自由下式表示：



化合物C16至C18，其各自由下式表示：

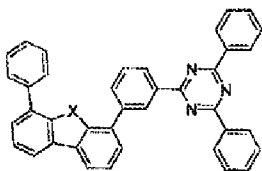


其中在化合物C10中：X=O，

在化合物C11中：X=S，

在化合物C12中：X=Se、

化合物C19至C21，其各自由下式表示：

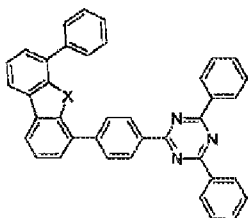


其中在化合物C19中：X=O，

在化合物C20中：X=S，

在化合物C21中：X=Se、

化合物C28至C30，其各自由下式表示：

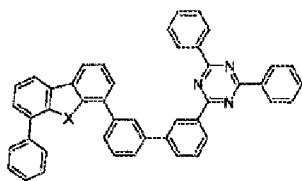


其中在化合物C28中：X=O，

在化合物C29中：X=S，

在化合物C30中：X=Se、

化合物C37至C39，其各自由下式表示：



其中在化合物C37中：X=O，

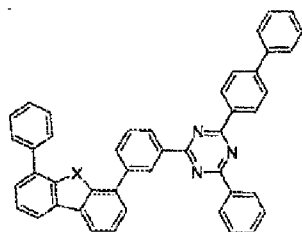
其中在化合物C13中：

X=O，

在化合物C14中：X=S，

在化合物C15中：X=Se、

化合物C22至C24，其各自由下式表示：



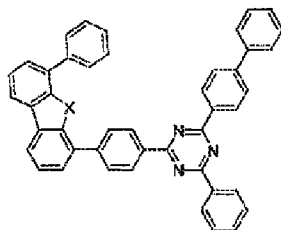
其中在化合物C22中：

X=O，

在化合物C23中：X=S，

在化合物C24中：X=Se、

化合物C31至C33，其各自由下式表示：



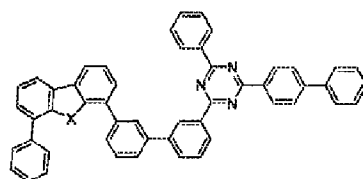
其中在化合物C31中：

X=O，

在化合物C32中：X=S，

在化合物C33中：X=Se、

化合物C40至C42，其各自由下式表示：



其中在化合物C40中：

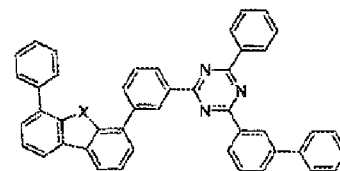
其中在化合物C16中：

X=O，

在化合物C17中：X=S，

在化合物C18中：X=Se、

化合物C25至C27，其各自由下式表示：



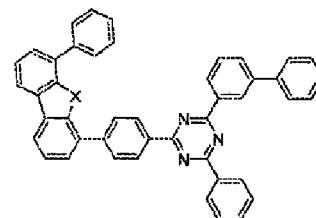
其中在化合物C25中：

X=O，

在化合物C26中：X=S，

在化合物C27中：X=Se、

化合物C34至C36，其各自由下式表示：



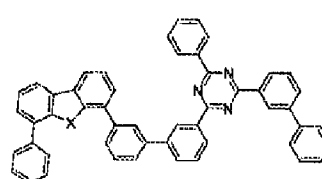
其中在化合物C34中：

X=O，

在化合物C35中：X=S，

在化合物C36中：X=Se、

化合物C43至C45，其各自由下式表示：

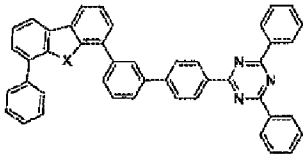


其中在化合物C43中：

在化合物C38中：X=S，

在化合物C39中：X=Se、

化合物C46至C48，其各自由下式表示：

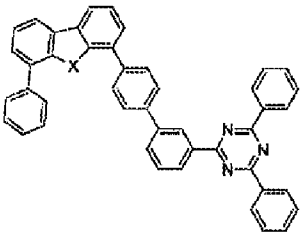


其中在化合物C48; X=O，

在化合物C47中：X=S，

在化合物C48中：X=Se、

化合物C55至C57，其各自由下式表示：

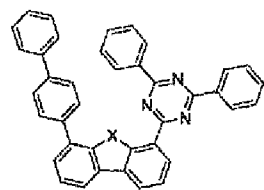


其中在化合物C55中：X=O，

在化合物C56中：X=S，

在化合物C57中：X=Se、

化合物C64至C66，其各自由下式表示：



其中在化合物C64中：X=O，

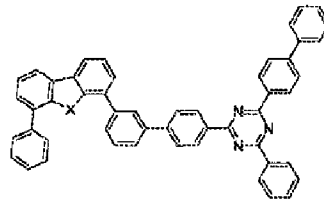
在化合物C65中：X=S，

X=O，

在化合物C41中：X=S，

在化合物C42中：X=Se、

化合物C49至C51，其各自由下式表示：



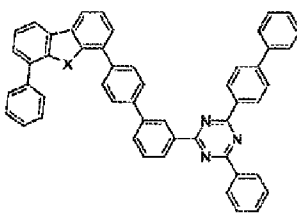
其中在化合物C49中：

X=O，

在化合物C50中：X=S，

在化合物C51中：X=Se、

化合物C58至C60，其各自由下式表示：



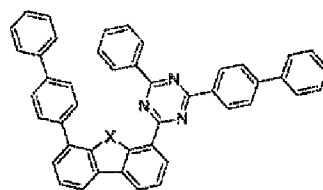
其中在化合物C58中：

X=O，

在化合物C59中：X=S，

在化合物C60中：X=Se、

化合物C67至C69，其各自由下式表示：



其中在化合物C67; X=O，

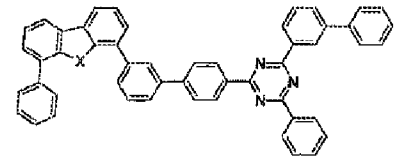
在化合物C68中：X=S，

X=O，

在化合物C44中：X=S，

在化合物C45中：X=Se、

化合物C52至C54，其各自由下式表示：



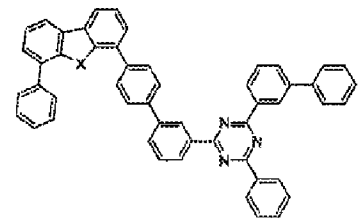
其中在化合物C52中：

X=O，

在化合物C53中：X=S，

在化合物C54中：X=Se、

化合物C61至C63，其各自由下式表示：



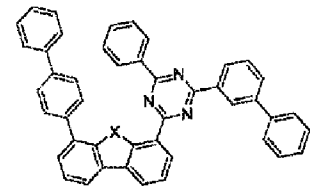
其中在化合物C61中：

X=O，

在化合物C62; X=S，

在化合物C63; X=Se、

化合物C70至C72，其各自由下式表示：



其中在化合物C70中：

X=O，

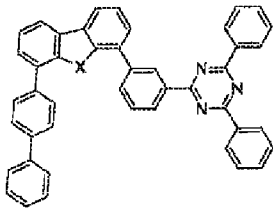
在化合物C66中：X=Se、

在化合物C69中：X=Se、

在化合物C71中：X=S、

在化合物C72中：X=Se、

化合物C73至C75，其各自由下式表示：

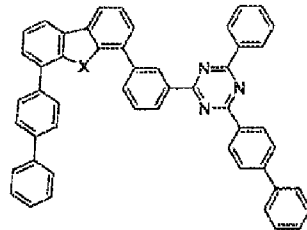


其中在化合物C73中：X=O、

在化合物C74中：X=S、

在化合物C75中：X=Se、

化合物C76至C78，其各自由下式表示：



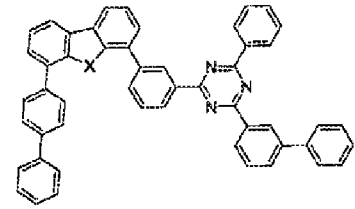
其中在化合物C76中：

X=O、

在化合物C77中：X=S、

在化合物C78中：X=Se、

化合物C79至C81，其各自由下式表示：

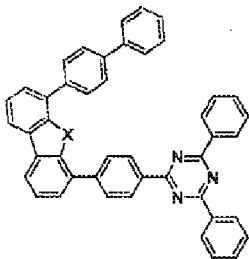


其中在化合物C79; X=O、

在化合物C80中：X=S、

在化合物C81中：X=Se、

化合物C82至C84，其各自由下式表示：

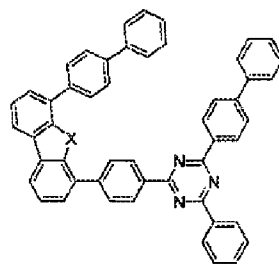


其中在化合物C82中：X=O、

在化合物C83中：X=S、

在化合物C84中：X=Se、

化合物C85至C87，其各自由下式表示：



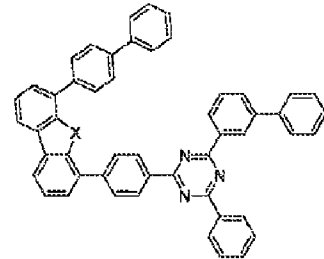
其中在化合物C85中：

X=O、

在化合物C86中：X=S、

在化合物C87中：X=Se、

化合物C88至C90，其各自由下式表示：



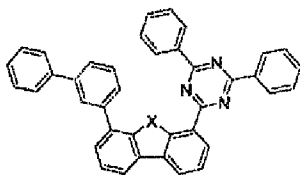
其中在化合物C88中：

X=O、

在化合物C89中：X=S、

在化合物C90中：X=Se、

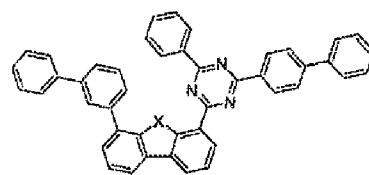
化合物C91至C93，其各自由下式表示：



其中在化合物C91中：X=O、

在化合物C92中：X=S、

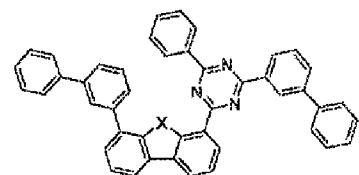
化合物C94至C96，其各自由下式表示：



其中在化合物C94中：

X=O、

化合物C97至C99，其各自由下式表示：



其中在化合物C97中：

X=O、

在化合物C93中：X=Se、

在化合物C95中：X=S、

在化合物C98中：X=S、

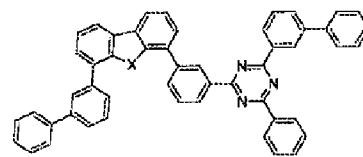
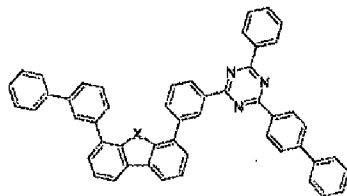
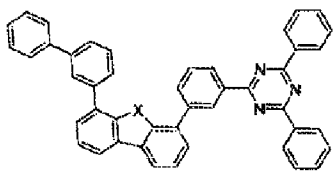
在化合物C96中：X=Se、

在化合物C99中：X=Se、

化合物C100至C102，其各自由下式表示：

化合物C103至C105，其各自由下式表示：

化合物C106至C108，其各自由下式表示：



其中在化合物C100中：X=O、

其中在化合物C103中：

其中在化合物C106中：

在化合物C101中：X=S、

X=O、

X=O、

在化合物C102中：X=Se、

在化合物C104中：X=S、

在化合物C107中：X=S、

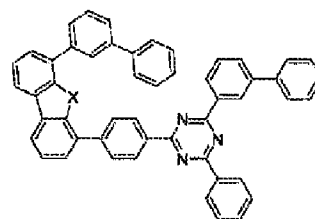
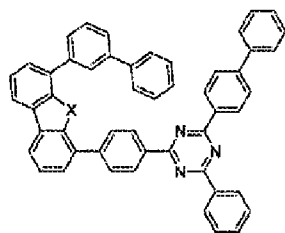
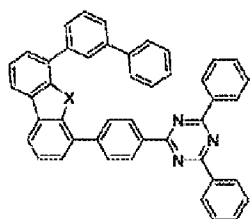
在化合物C105中：X=Se、

在化合物C108中：X=Se、

化合物C109至C111，其各自由下式表示：

化合物C112至C114，其各自由下式表示：

化合物C115至C117，其各自由下式表示：



其中在化合物C109中：X=O、

其中在化合物C112中：

其中在化合物C115中：

在化合物C110中：X=S、

X=O、

X=O、

在化合物C111中：X=Se、

在化合物C113中：X=S、

在化合物C116中：X=S、

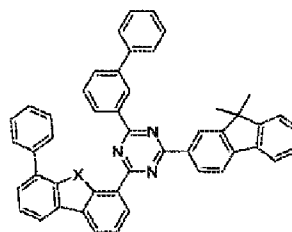
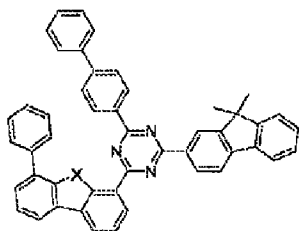
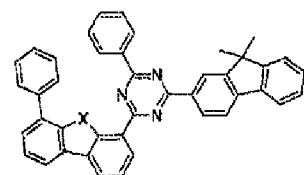
在化合物C114中：X=Se、

在化合物C117中：X=Se、

化合物C118至C120，其各自由下式表示：

化合物C121至C123，其各自由下式表示：

化合物C124至C126，其各自由下式表示：



其中在化合物C118中：X=O、

其中在化合物C121中：

其中在化合物C124中：

在化合物C119中：X=S、

X=O、

X=O、

在化合物C120中：X=Se、

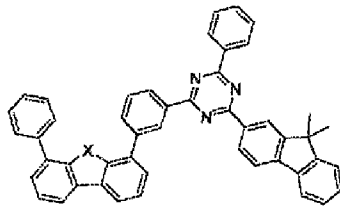
在化合物C122中：X=S、

在化合物C125中：X=S、

在化合物C123中：X=Se、

在化合物C126中：X=Se、

化合物C127至C129，其各自由下式表示：

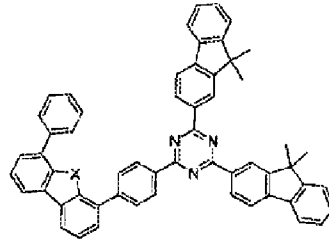


其中在化合物C127中：X=O、

在化合物C128中：X=S、

在化合物C129中：X=Se、

化合物C130至C132，其各自由下式表示：



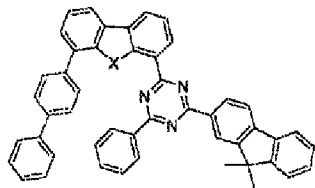
其中在化合物C130中：

X=O、

在化合物C131中：X=S、

在化合物C132中：X=Se、

化合物C133至C135，其各自由下式表示：

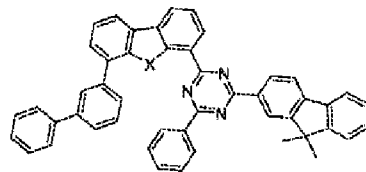


其中在化合物C133中：X=O、

在化合物C134中：X=S、

在化合物C135中：X=Se、

化合物C136至C138，其各自由下式表示：



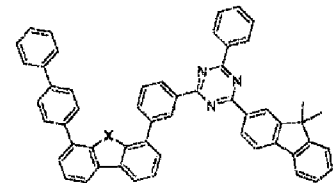
其中在化合物C136中：

X=O、

在化合物C137中：X=S、

在化合物C138中：X=Se、

化合物C139至C141，其各自由下式表示：



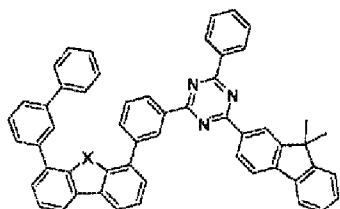
其中在化合物C139中：

X=O、

在化合物C140中：X=S、

在化合物C141中：X=Se、

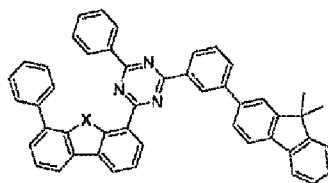
化合物C142至C144，其各自由下式表示：



其中在化合物C142中：X=O、

在化合物C143中：X=S、

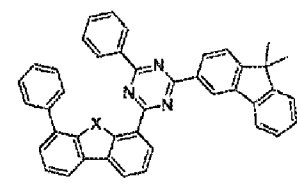
化合物C145至C147，其各自由下式表示：



其中在化合物C145; X=O、

在化合物C146中：X=S、

化合物C148至C150，其各自由下式表示：



其中在化合物C148中：

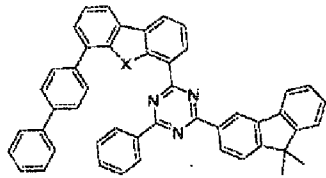
X=O、

在化合物C144中：X=Se、

在化合物C147中：X=Se、

在化合物C149中：X=S、

化合物C151至C153，其各自由下式表示：

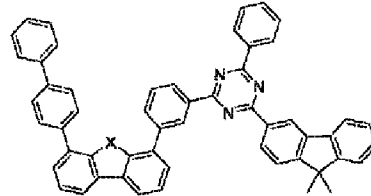


其中在化合物C151中：X=O、

在化合物C152中：X=S、

在化合物C153中：X=Se

化合物C154至C156，其各自由下式表示：



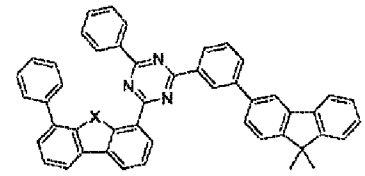
其中在化合物C154中：

X=O、

在化合物C155中：X=S、

在化合物C156中：X=Se

化合物C157至C159，其各自由下式表示：



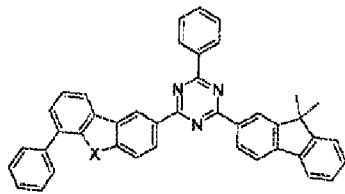
其中在化合物C157中：

X=O、

在化合物C158中：X=S、

在化合物C159中：X=Se、

化合物C160至C162，其各自由下式表示：

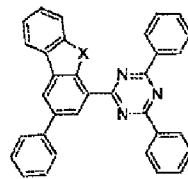


其中在化合物C160中：X=O、

在化合物C161中：X=S、

在化合物C162中：X=Se、

化合物C163至C165，其各自由下式表示：



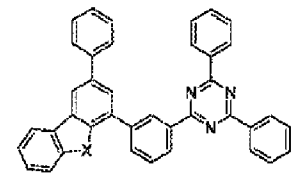
其中在化合物C163中：

X=O、

在化合物C164中：X=S、

在化合物C165中：X=Se、

化合物C166至G168，其各自由下式表示：



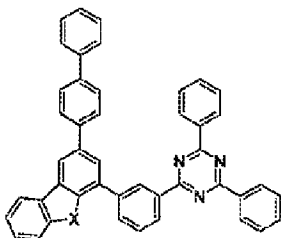
其中在化合物C166中：

X=O、

在化合物C167中：X=S、

在化合物C168中：X=Se、

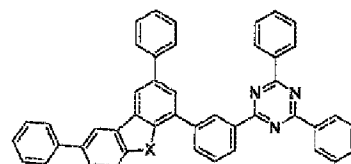
化合物C169至C171，其各自由下式表示：



其中在化合物C169中：X=O、

在化合物C170中：X=S、

化合物C172至C174，其各自由下式表示：



其中在化合物C172中：

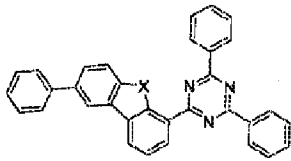
X=O、

在化合物C173中：X=S、

第 30 頁(發明說明書)

在化合物C171中：X=Se、

化合物C175至C177，其各自由下式表示：

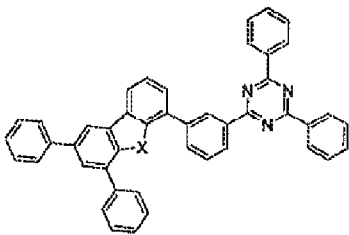


其中在化合物C175中：X=O、

在化合物C176中：X=S、

在化合物C177中：X=Se、

化合物C184至C186，其各自由下式表示：

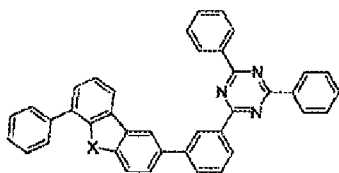


其中在化合物C184中：X=O、

在化合物C185中：X=S、

在化合物C186中：X=Se、

化合物C193至C195，其各自由下式表示：



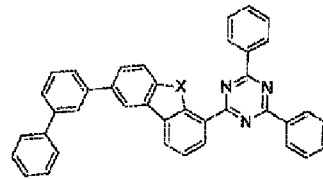
其中在化合物C193中：X=O、

在化合物C194中：X=S、

在化合物C195中：X=Se、

在化合物C174中：X=Se、

化合物C178至C180，其各自由下式表示：



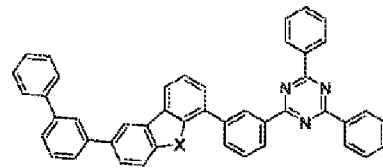
其中在化合物C178中：

X=O、

在化合物C179中：X=S、

在化合物C180中：X=Se、

化合物C187至C189，其各自由下式表示：



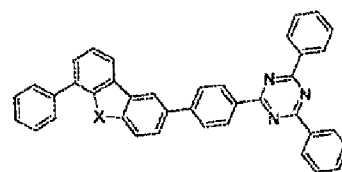
其中在化合物C187中：

X=O、

在化合物C188中：X=S、

在化合物C189中：X=Se、

化合物C196至C198，其各自由下式表示：



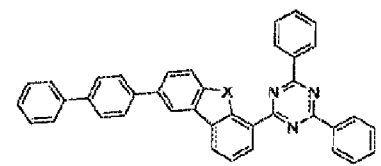
其中在化合物C196中：

X=O、

在化合物C197中：X=S、

在化合物C198中：X=Se、

化合物C181至C183，其各自由下式表示：



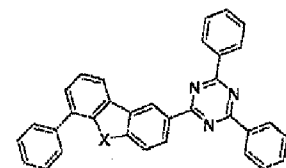
其中在化合物C181中：

X=O、

在化合物C182中：X=S、

在化合物C183中：X=Se、

化合物C190至C192，其各自由下式表示：



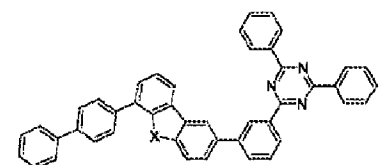
其中在化合物C190中：

X=O、

在化合物C191；X=S、

在化合物C192中：X=Se、

化合物C199至C201，其各自由下式表示：



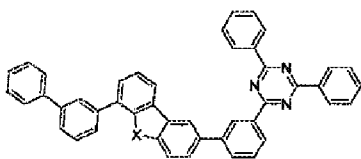
其中在化合物C199中：

X=O、

在化合物C200中：X=S、

在化合物C201中：X=Se、

化合物C202至C204，其各自由下式表示：

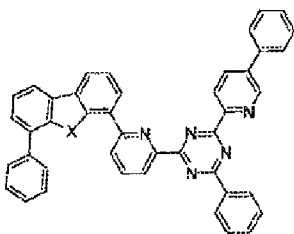


其中在化合物C202中：X=O，

在化合物C203中：X=S，

在化合物C204中：X=Se、

化合物C211至C213，其各自由下式表示：

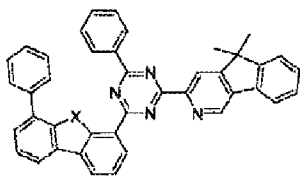


其中在化合物C211中：X=O，

在化合物C212中：X=S，

在化合物C213中：X=Se、

化合物C220至C222，其各自由下式表示：



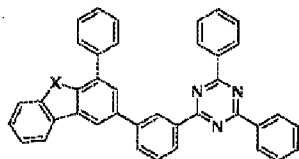
其中在化合物C220中：X=O，

在化合物C221中：X=S，

在化合物C222中：X=Se、

化合物C229至C231，其各自由下

化合物C205至C207，其各自由下式表示：



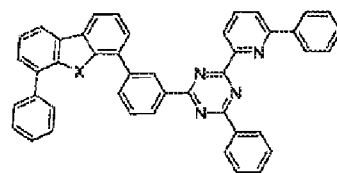
其中在化合物C205中：

X=O，

在化合物C206中：X=S，

在化合物C207中：X=Se、

化合物C214至C216，其各自由下式表示：



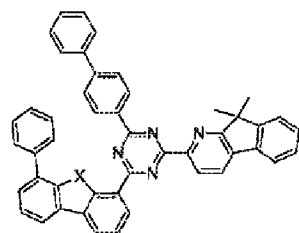
其中在化合物C214中：

X=O，

在化合物C215中：X=S，

在化合物C216中：X=Se、

化合物C223至C225，其各自由下式表示：



其中在化合物C223中：

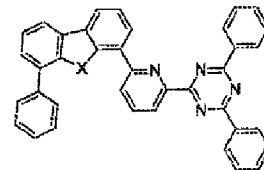
X=O，

在化合物C224中：X=S，

在化合物C225中：X=Se、

化合物C232至C234，其各

化合物C208至C210，其各自由下式表示：



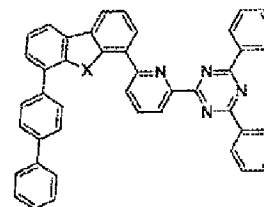
其中在化合物C208中：

X=O，

在化合物C209中：X=S、

在化合物C210中：X=Se、

化合物C217至C219，其各自由下式表示：



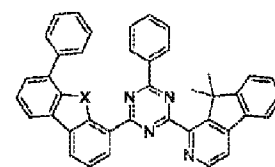
其中在化合物C217中：

X=O，

在化合物C218中：X=S，

在化合物C219中：X=Se、

化合物C226至C228，其各自由下式表示：



其中在化合物C226中：

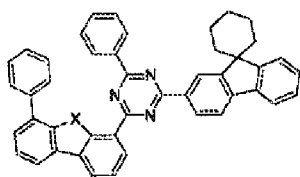
X=O，

在化合物C227中：X=S，

在化合物C228中：X=Se、

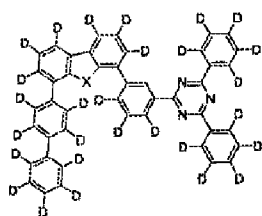
化合物C235至C237，其各

式表示：



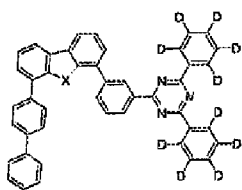
其中在化合物C229中：X=O，
 在化合物C230中：X=S，
 在化合物C231中：X=Se、

化合物C238至C240，其各自由下式表示：



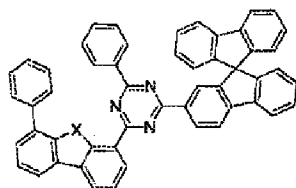
其中在化合物C238中：X=O；
 在化合物C239中：X=S，
 在化合物C240中：X=Se、

化合物C247至C249，其各自由下式表示：



其中在化合物C247中：X=O，
 在化合物C248中：X=S，
 在化合物C249中：X=Se、

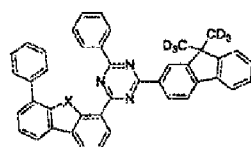
自由下式表示：



其中在化合物C232中：
 X=O，

在化合物C233中：X=S，
 在化合物C234中：X=Se、

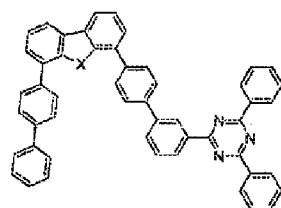
化合物C241至C243，其各自由下式表示：



其中在化合物C241中：
 X=O，

在化合物C242中：X=S，
 在化合物C243中：X=Se、

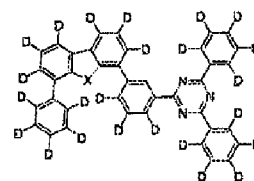
化合物C250至C252，其各自由下式表示：



其中在化合物C250中：
 X=O，

在化合物C251中：X=S，
 在化合物C252中：X=Se、
 及

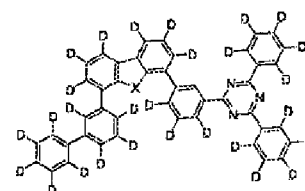
自由下式表示：



其中在化合物C235中：
 X=O，

在化合物C236中：X=S，
 在化合物C237中：X=Se、

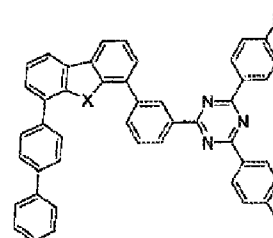
化合物C244至C246，其各自由下式表示：



其中在化合物C244中：
 X=O，

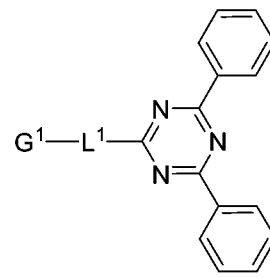
在化合物C245中：X=S，
 在化合物C246中：X=Se、

化合物C253至C255，其各自由下式表示：



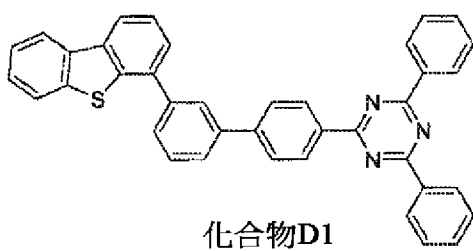
其中在化合物C253中：
 X=O，

在化合物C254中：X=S，
 在化合物C255中：X=Se。

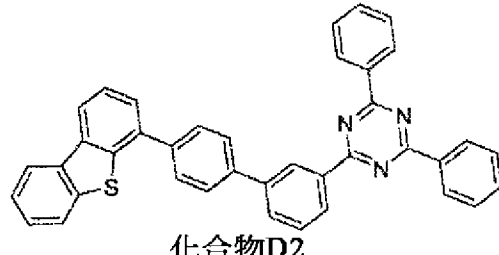


在一些實施例中，第一化合物具有下式：
聯苯。

在一些實施例中，第一化合物係選自由以下組成之群：

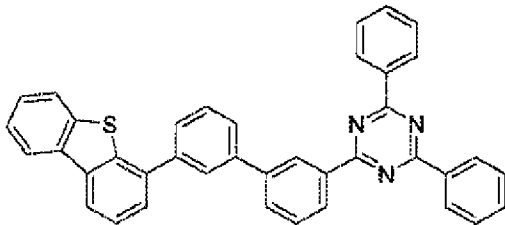


化合物D1



化合物D2

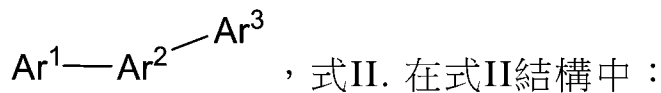
及



化合物D3

。

在一些實施例中，組合物包含具有式II結構之第二化合物：



Ar^1 選自由聯伸三苯及氮雜聯伸三苯組成之群；

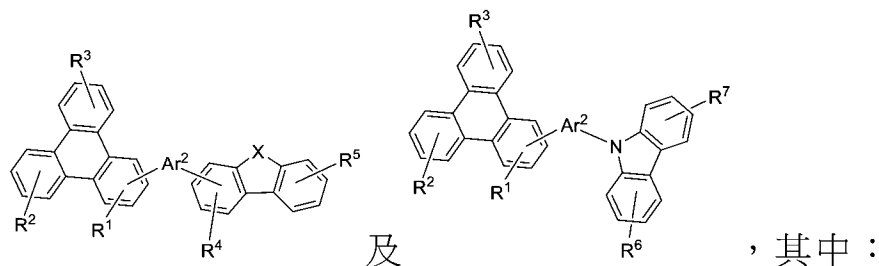
Ar^2 選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、萘、吡啶、二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩、氮雜二苯并呋喃、氮雜二苯并噻吩、氮雜二苯并硒吩及其組合；

Ar^3 選自由以下組成之群：苯、聯苯、聯三苯、萘、吡啶、二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩、氮雜二苯并呋喃、氮雜二苯并噻吩、氮雜二苯并硒吩、咪唑、氮雜咪唑及其組合；且

Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 各自獨立地、視情況進一步經一或多個選自由以下組

成之群的取代取代：氫、鹵素、烷基、芳基、雜芳基及其組合。

在一些實施例中，第二化合物選自由以下組成之群：



，其中：

X選自由O、S及Se組成之群；

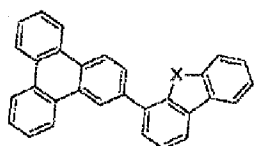
R¹及R⁴各自獨立地表示單取代、二取代或三取代、或無取代；

R²、R³、R⁵及R⁶各自獨立地表示單取代、二取代、三取代或四取代、或無取代；且

R¹至R⁶各自獨立地選自由以下組成之群：氫、鹵、苯、聯苯、聯三苯、萘、蒽、聯伸三苯、菲、二苯并呋喃、二苯并噻吩、吡啶及其組合。

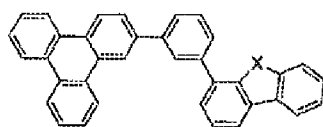
在一些實施例中，第二化合物選自由以下組成之群：

化合物E1至E3，其各自由下式表示：



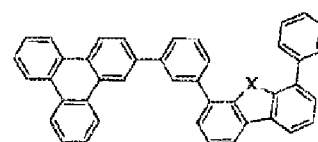
其中在化合物E1中：X=O，
在化合物E2中：X=S，
在化合物E3中：X=Se、

化合物E4至E6，其各自由下式表示：



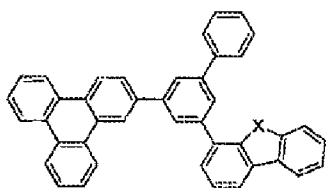
其中在化合物E4中：X=O，
在化合物E5中：X=S，
在化合物E6中：X=Se、

化合物E7至E9，其各自由下式表示：

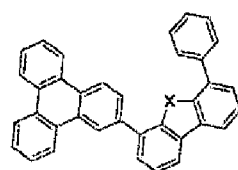


其中在化合物E7中：X=O，
在化合物E8中：X=S，
在化合物E9中：X=Se、

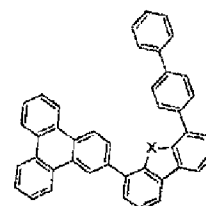
化合物E10至E12，其各自由下式表示：



化合物E13至E15，其各自由下式表示：



化合物E16至E18，其各自由下式表示：

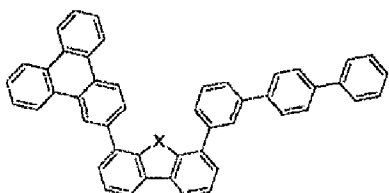


其中在化合物E10中：X=O，

在化合物E11中：X=S，

在化合物E12中：X=Se、

化合物E19至E21，其各自由下式表示：



其中在化合物E19中：X=O，

在化合物E20中：X=S，

在化合物E21中：X=Se、

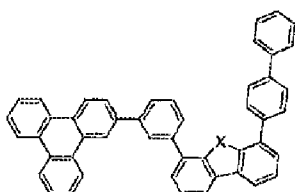
其中在化合物E13中：

X=O，

在化合物E14中：X=S，

在化合物E15中：X=Se、

化合物E22至E24，其各自由下式表示：



其中在化合物E22中：

X=O，

在化合物E23中：X=S，

在化合物E24中：X=Se、

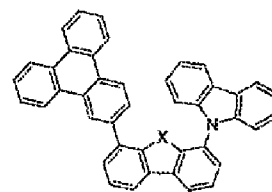
其中在化合物E16中：

X=O，

在化合物E17中：X=S，

在化合物E18中：X=Se、

化合物E25至E27，其各自由下式表示：

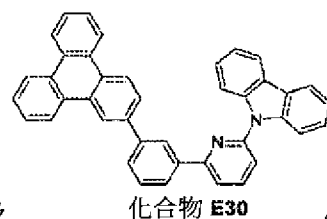
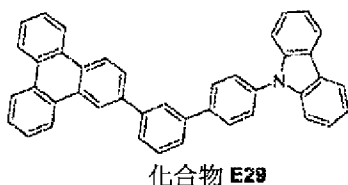
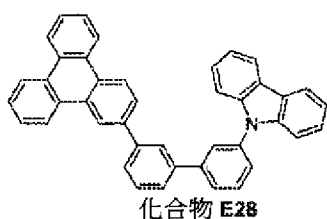


其中在化合物E25中：

X=O，

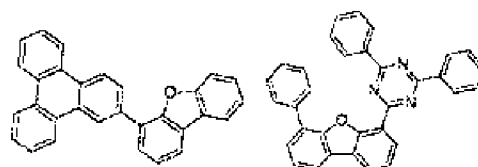
在化合物E26中：X=S，

在化合物E27中：X=Se、



及

在一些實施例中，第一化合物與第二化合物之混合物選自由

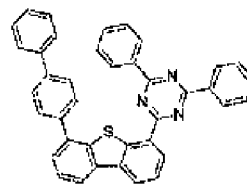
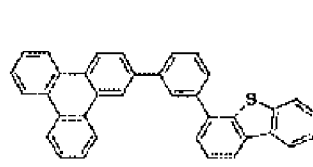
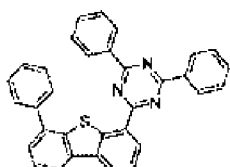
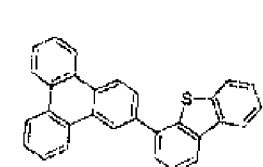


化合物 E1

化合物 C1

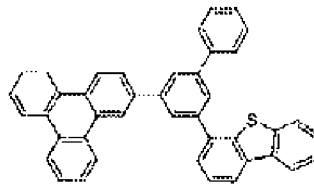
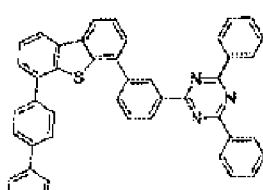
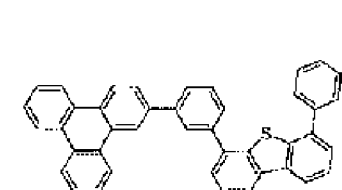
);

以下組成之群：



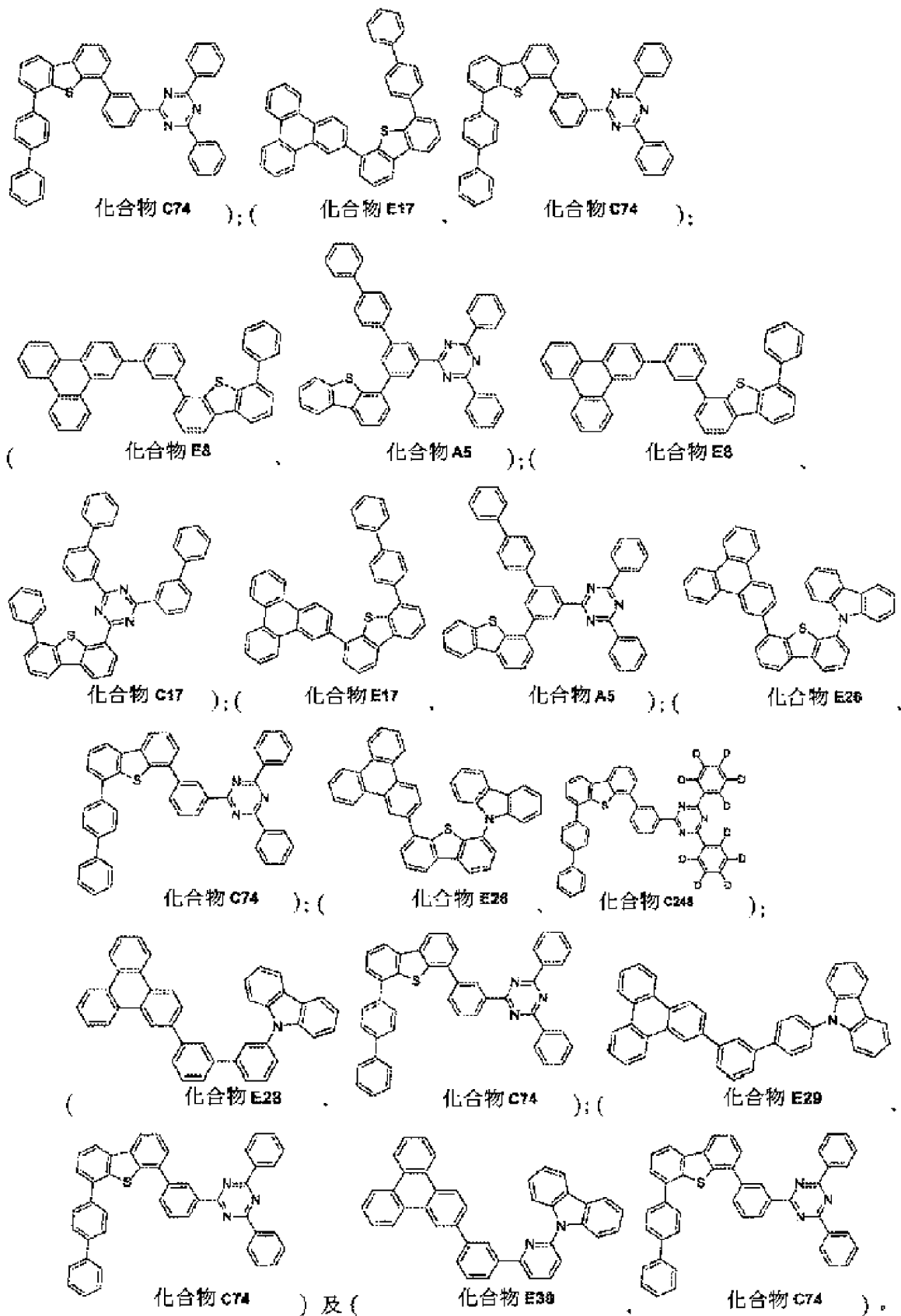
(化合物 E2 , 化合物 C2);

(化合物 E5 , 化合物 C65);

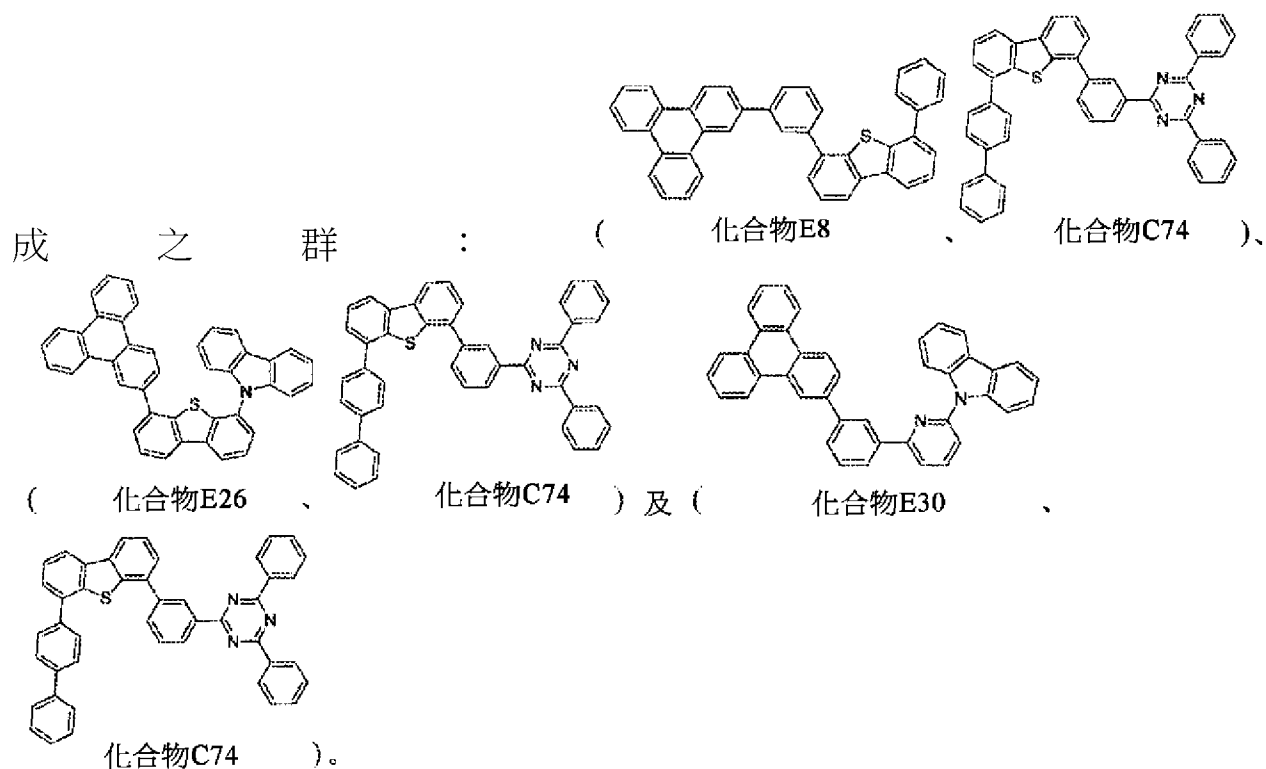


(化合物 E8 , 化合物 C74);

(化合物 E11 ,

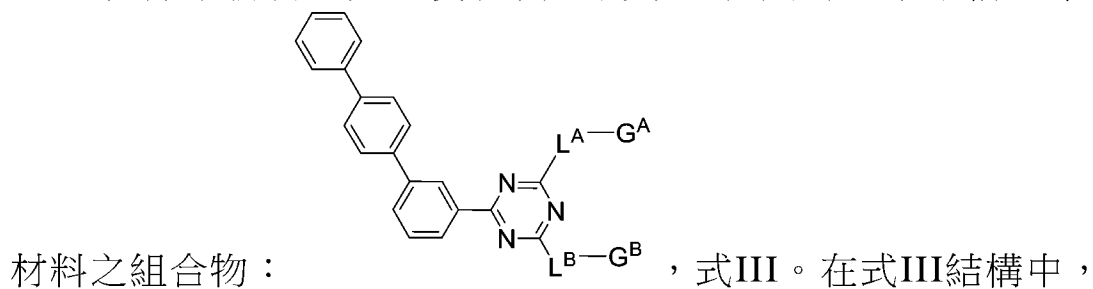


在一些實施例中，第一化合物與第二化合物之混合物選自由以下組



在一些實施例中，組合物包含第二化合物，其中第二化合物為具有至少一個選自由以下組成之群的取代基之磷光發射Ir錯合物：烷基、環烷基、其部分或完全氙化之變異體、其部分或完全氟化之變異體及其組合。

根據本發明之另一實施例，揭示包含具有以下結構之第一化合物之



L^A 及 L^B 選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、吡啶及其組合；

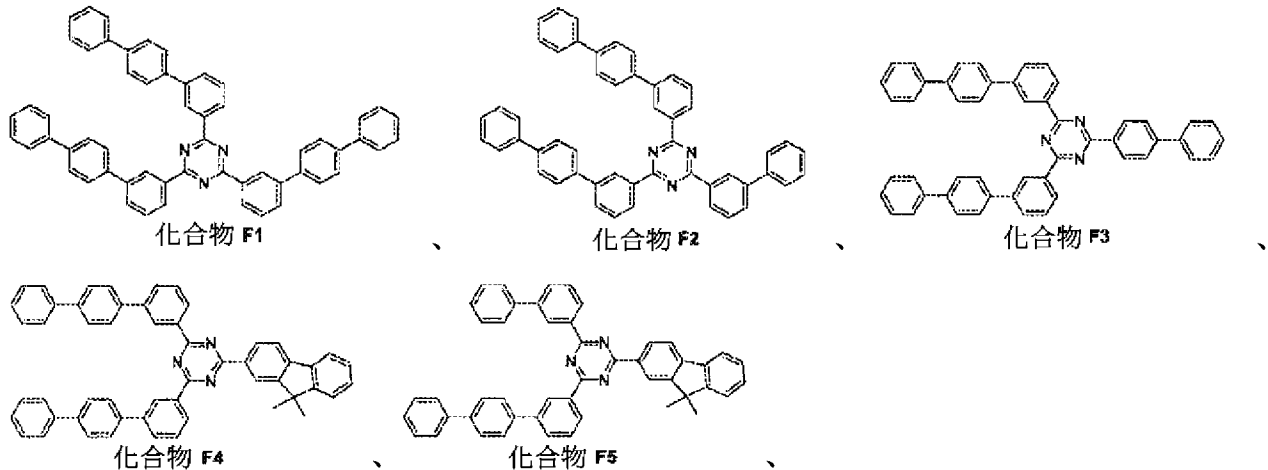
G^A 及 G^B 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、吡啶、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩及萘；且

G^A 及 G^B 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氙、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、

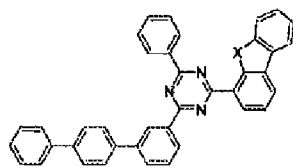
矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合。

在一些實施例中， L^A 及 L^B 中之一或多者可為直接鍵，且直接鍵可為單鍵或雙鍵。

在一些實施例中，第一化合物係選自由以下組成之群：

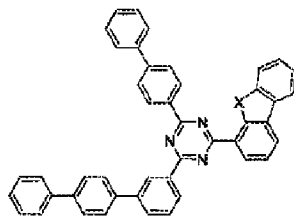


化合物F6至F8，其各自由下式表示：



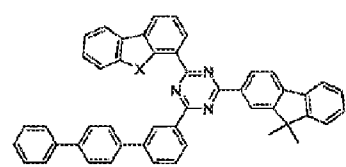
其中在化合物F6中： $X=O$ ，
在化合物F7中： $X=S$ ，
在化合物F8中： $X=Se$ ，

化合物F9至F11，其各自由下式表示：



其中在化合物F9中： $X=O$ ，
在化合物F10中： $X=S$ ，
在化合物F11中： $X=Se$ ，
及

化合物F12至F14，其各自由下式表示：



其中在化合物F12中： $X=O$ ，
在化合物F13中： $X=S$ ，
在化合物F14中： $X=Se$ 。

在一些實施例中，第一化合物之蒸發溫度 T_1 為 150°C 至 350°C ；第二化合物之蒸發溫度 T_2 為 150°C 至 350°C ； T_1-T_2 之絕對值小於 20°C ；第一化合物在該混合物中具有濃度 C_1 ，且在藉由在真空沈積工具中在介於 1×10^{-6} 托至 1×10^{-9} 托之間的恆定壓力下、在 2 \AA/s 沈積速率下在與經蒸發之混合物相距預定距離定位之表面上使該混合物蒸發而形成的膜中具有濃度 C_2 ；

且(C1-C2)/C1之絕對值小於5%。

在一些實施例中，第一化合物在T1下之蒸氣壓P1為1 atm，第二化合物在T2下之蒸氣壓P2為1 atm；且P1/P2之比率在0.90至1.10範圍內。

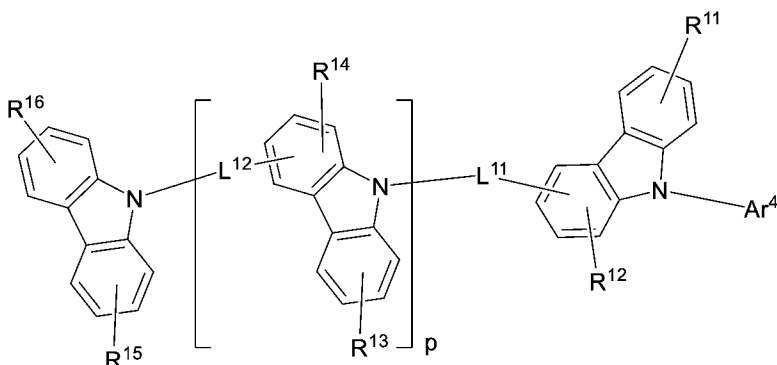
在一些實施例中，第一化合物具有第一質量損失速率且第二化合物具有第二質量損失速率，其中第一質量損失速率與第二質量損失速率之間的比率在0.90至1.10範圍內。

在一些實施例中，如藉由高壓液相層析所測定，第一化合物及第二化合物各自之純度超過99%。

在一些實施例中，組合物亦包含第三化合物。在一些實施例中，第三化合物之化學結構與第一及第二化合物不同。在一些實施例中，第三化合物具有第三質量損失速率，且第一質量損失速率與第三質量損失速率之間的比率在0.90至1.10範圍內。在一些實施例中，第三化合物之蒸發溫度T3為150°C至350°C，且T1-T3之絕對值小於20°C。

在一些實施例中，組合物在小於T1及T2之溫度下呈液體形式。

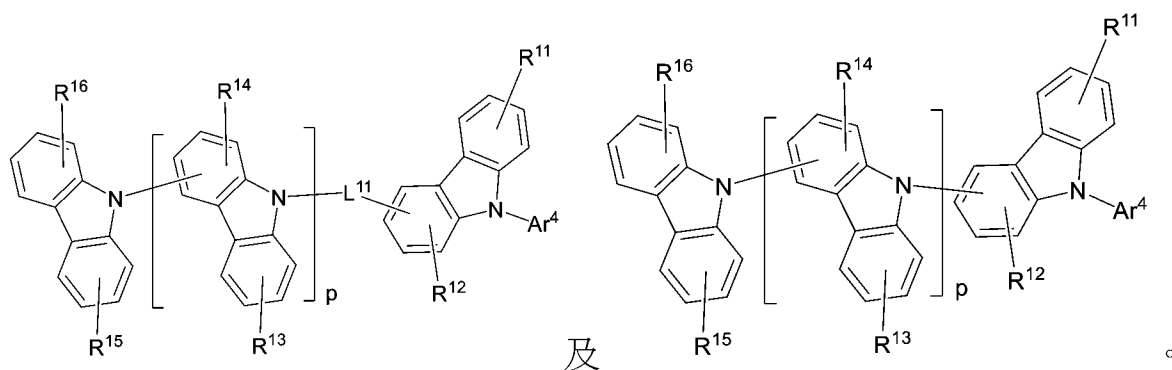
在一些實施例中，組合物包含第二化合物，其中第二化合物具有式



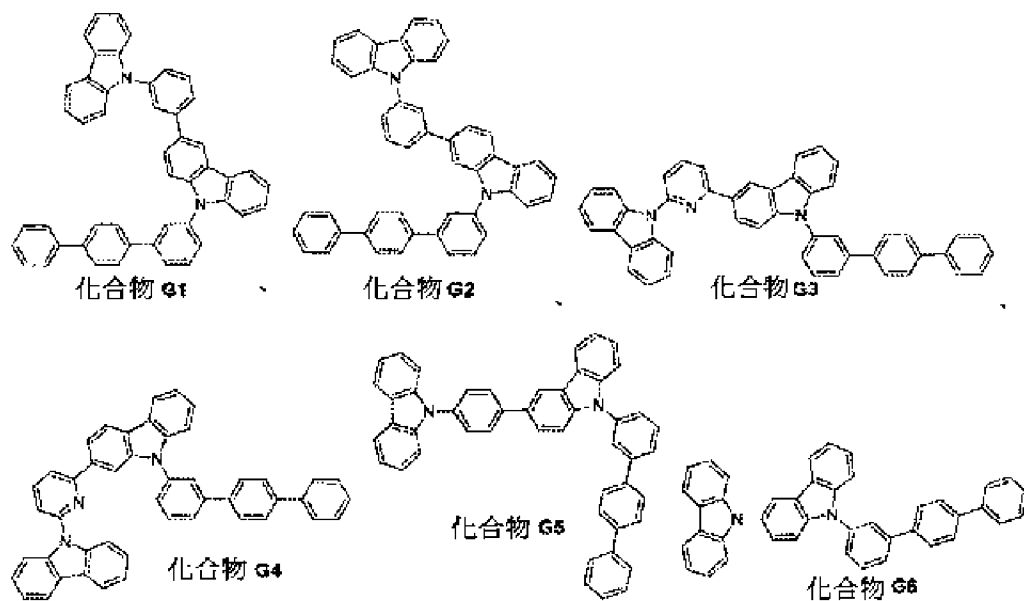
。在此類實施例中，Ar⁴選自由以下組成之群：芳基、雜芳基、烷基、環烷基及其組合；L¹¹及L¹²各自獨立地選自由以下組成之群：直接鍵、芳基、雜芳基、烷基、烷氧基及其

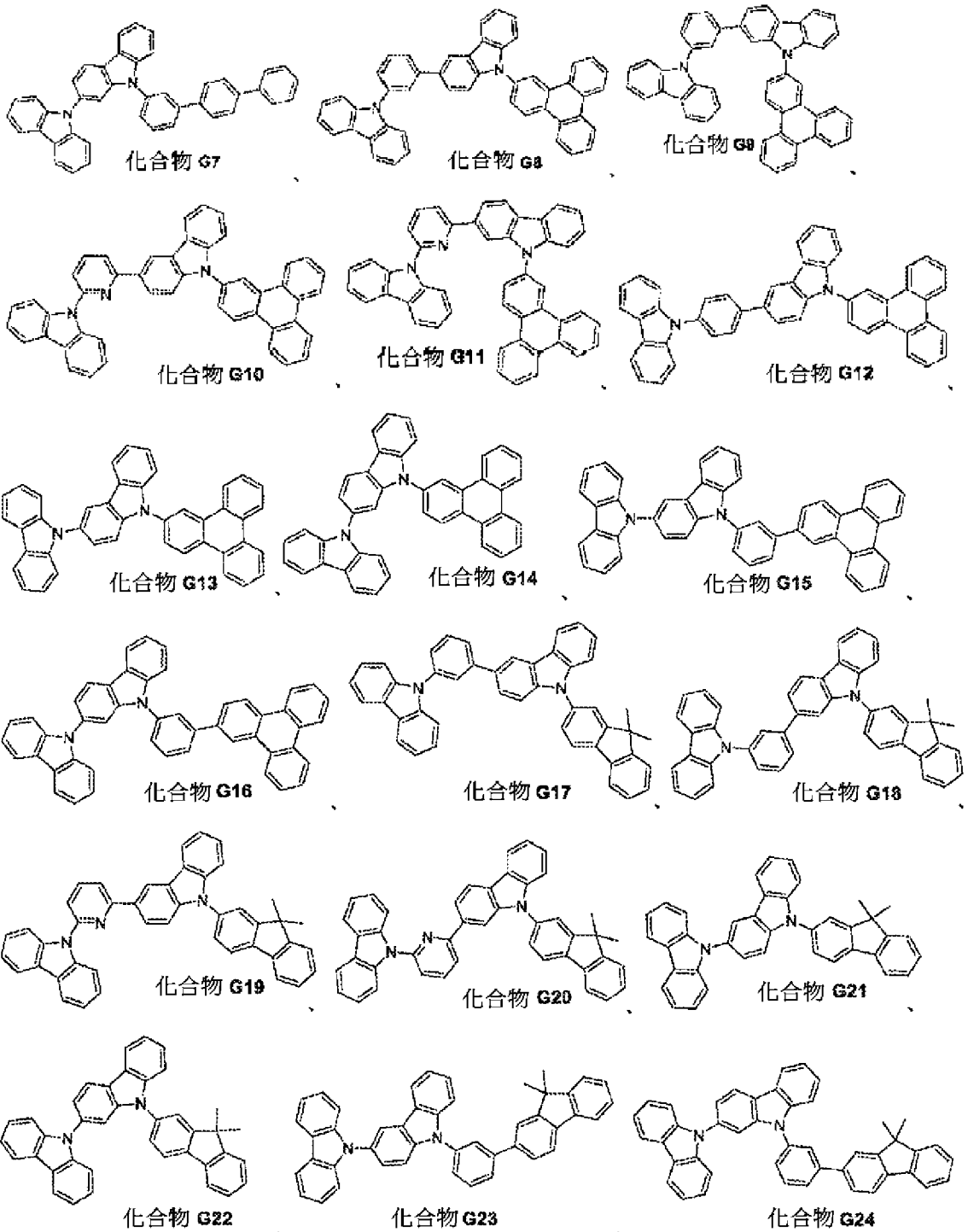
組合； p 為0至20之整數；當 p 大於1時，各 G^7 可相同或不同； R^{11} 、 R^{13} 、 R^{15} 及 R^{16} 各自獨立地表示單取代、二取代、三取代或四取代、或無取代； R^{12} 及 R^{14} 各自獨立地表示單取代、二取代或三取代、或無取代； R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 及 R^{16} 各自獨立地選自由以下組成之群：氫、氖、鹵素、烷基、環烷基、矽烷基、羰基、烷氧基、腈、異腈、芳基、雜芳基及其組合；且 L^{11} 、 L^{12} 及 Ar^4 各自獨立地、視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的取代基取代：氖、鹵素、烷基、環烷基、矽烷基、羰基、烷氧基、腈、異腈、芳基、雜芳基及其組合。

在一些實施例中，第二化合物係選自由以下組成之群：

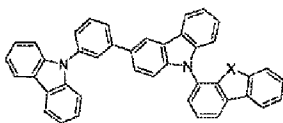


在一些實施例中，第二化合物係選自由以下組成之群：



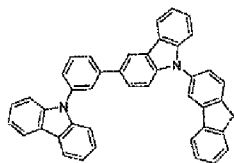


化合物G25至G27，其各自由下式表示：



其中在化合物G25中：X=O，

化合物G28至G30，其各自由下式表示：

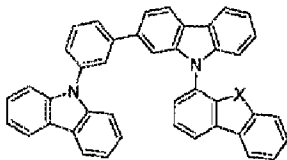


其中在化合物G28中：

在化合物G26中：X=S，

在化合物G27中：X=Se、

化合物G31至G33，其各自由下式表示：

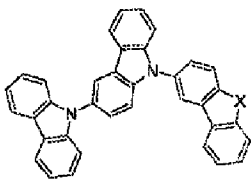


其中在化合物G31中：X=O，

在化合物G32中：X=S，

在化合物G33中：X=Se、

化合物G40至G42，其各自由下式表示：

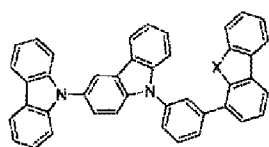


其中在化合物G40中：X=O，

在化合物G41中：X=S，

在化合物G42中：X=Se、

化合物G49至G51，其各自由下式表示：



其中在化合物G49中：X=O，

在化合物G50中：X=S，

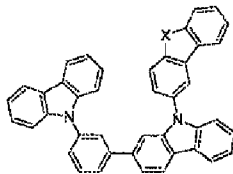
在化合物G51中：X=Se、

X=O，

在化合物G29中：X=S，

在化合物G30中：X=Se、

化合物G34至G36，其各自由下式表示：



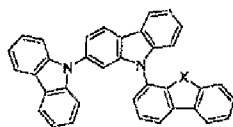
其中在化合物G34中：

X=O，

在化合物G35中：X=S，

在化合物G36中：X=Se、

化合物G43至G45，其各自由下式表示：



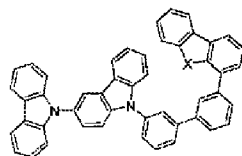
其中在化合物G43中：

X=O，

在化合物G44中：X=S，

在化合物G45中：X=Se、

化合物G52至G54，其各自由下式表示：



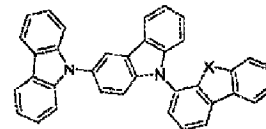
其中在化合物G52中：

X=O，

在化合物G53中：X=S，

在化合物G54中：X=Se、

化合物G37至G39，其各自由下式表示：

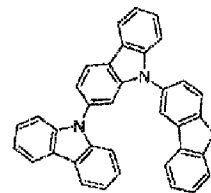


其中在化合物G37中：X=O，

在化合物G38中：X=S，

在化合物G39中：X=Se、

化合物G46至G48，其各自由下式表示：

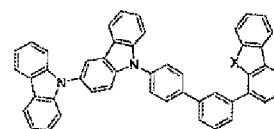


其中在化合物G46中：X=O，

在化合物G47中：X=S，

在化合物G48中：X=Se、

化合物G55至G57，其各自由下式表示：

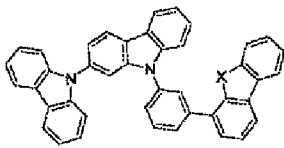


其中在化合物G55中：X=O，

在化合物G56中：X=S，

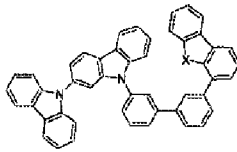
在化合物G57中：X=Se、

化合物G58至G60，其各自由下式表示：



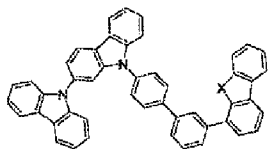
其中在化合物G58中：X=O，
 在化合物G59中：X=S，
 在化合物G60中：X=Se、

化合物G61至G63，其各自由下式表示：



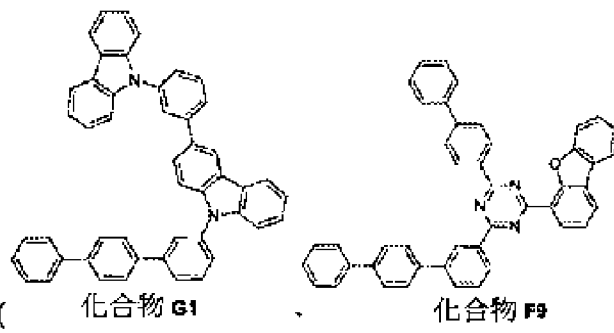
其中在化合物G61中：
 X=O，
 在化合物G62中：X=S，
 在化合物G63中：X=Se及

化合物G64至G66，其各自由下式表示：

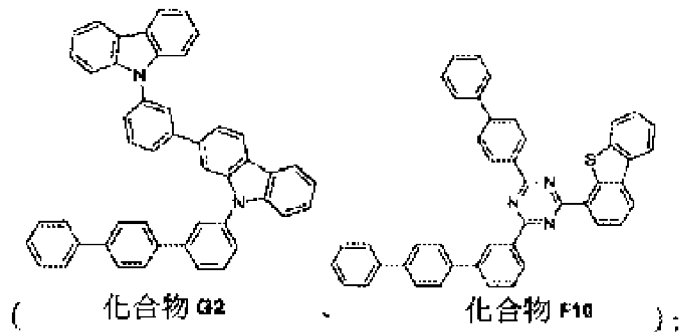


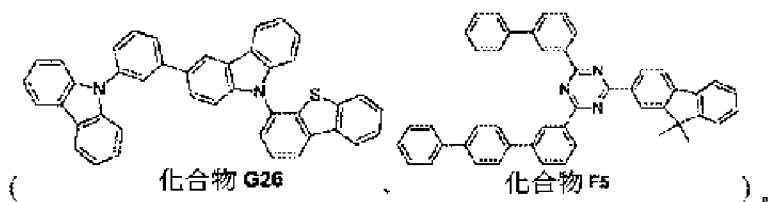
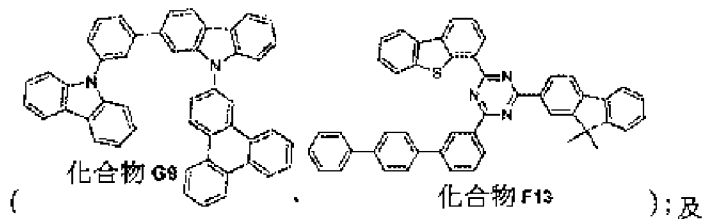
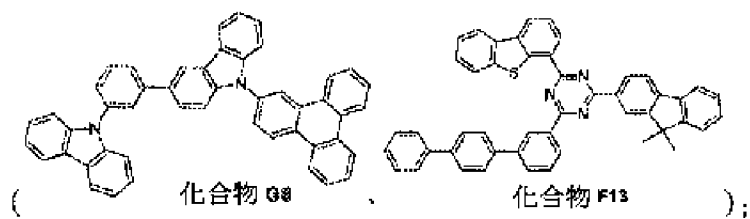
其中在化合物G64中：X=O，
 在化合物G65中：X=S，
 在化合物G66中：X=Se。

在一些實施例中，第一化合物與第二化合物之混合物選自由

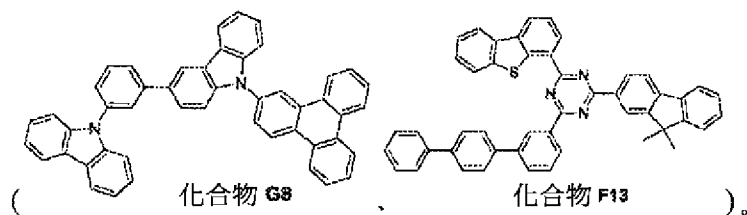


以下組成之群：





在一些實施例中，第一化合物與第二化合物之混合物為



在一些實施例中，第一化合物之蒸發溫度T1為150°C至350°C，第二化合物之蒸發溫度T2為150°C至350°C，或兩者。在一些實施例中，T1-T2之絕對值小於20°C。在一些實施例中，第一化合物在該混合物中具有濃度C1，且在藉由在真空沈積工具中在介於 1×10^{-6} 托至 1×10^{-9} 托之間的恆定壓力下、在2 Å/s沈積速率下在與經蒸發之混合物相距預定距離定位的表面上使該混合物蒸發而形成之膜中具有濃度C2。在一些實施例中，(C1-C2)/C1之絕對值小於5%。

在一些實施例中，第一化合物在T1下之蒸氣壓P1為1 atm，第二化合物在T2下之蒸氣壓P2為1 atm；且P1/P2之比率在0.90至1.10範圍內。

在一些實施例中，第一化合物具有第一質量損失速率且第二化合物具有第二質量損失速率，其中第一質量損失速率與第二質量損失速率之間

的比率在0.90至1.10範圍內。

在一些實施例中，如藉由高壓液相層析所測定，第一化合物及第二化合物各自之純度超過99%。

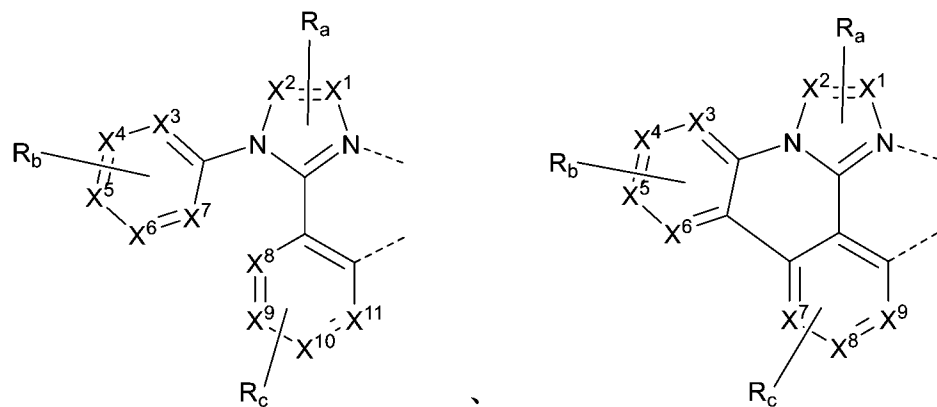
在一些實施例中，組合物進一步包含第三化合物，其中第三化合物之化學結構與第一及第二化合物不同。在一些實施例中，第三化合物之蒸發溫度T3為150°C至350°C，且其中T1-T3之絕對值小於20°C。在一些實施例中，第三化合物具有第三質量損失速率，且第一質量損失速率與第三質量損失速率之間的比率在0.90至1.10範圍內。

在一些實施例中，組合物在小於T1及T2之溫度下呈液體形式。

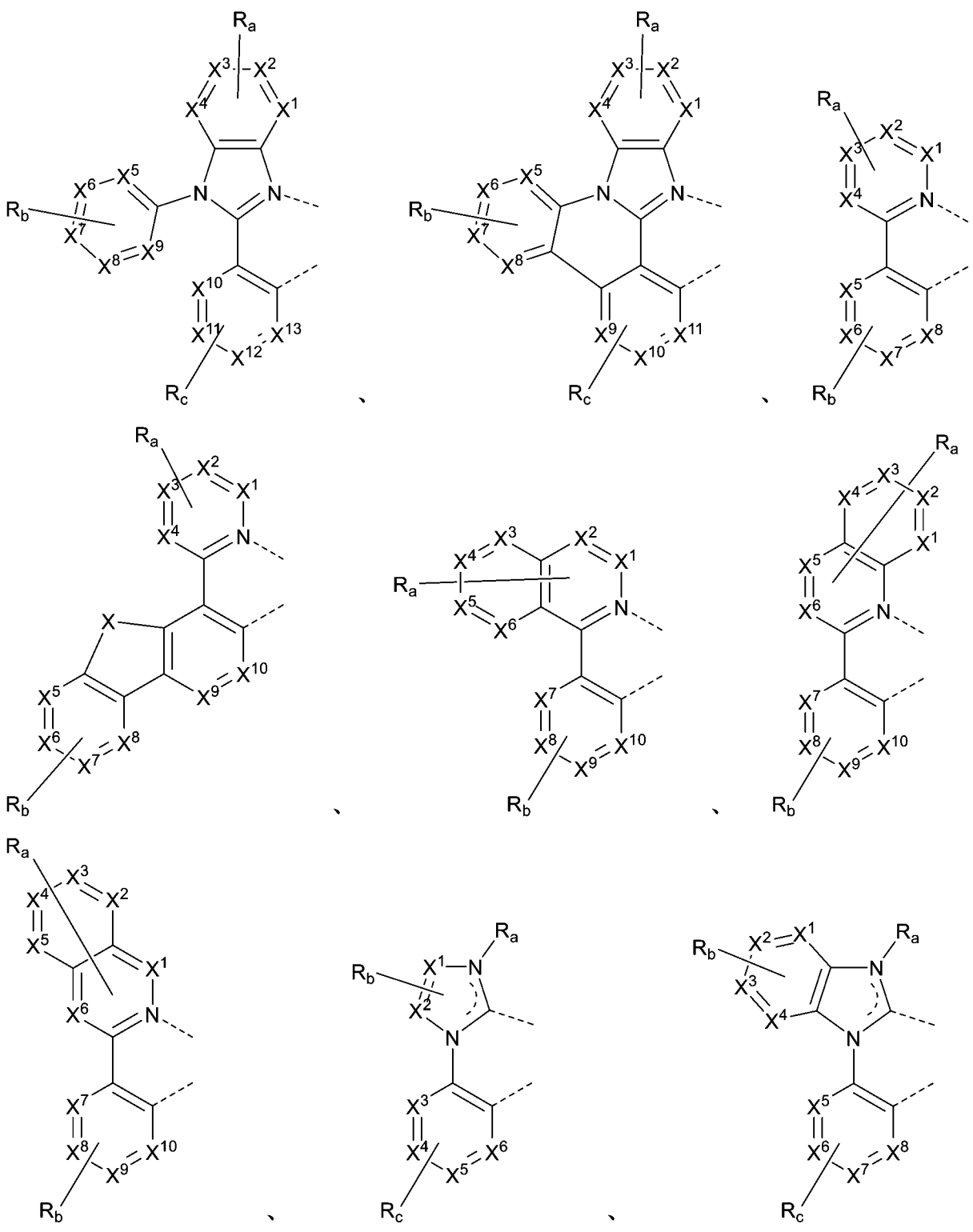
根據本發明之另一態樣，亦提供一種包括一或多個有機發光裝置之裝置。一或多個有機發光裝置中之至少一者可包括陽極；陰極；及安置在陽極與陰極之間的有機層。有機層可包括一種組合物，該組合物包含根據式I或式III之結構或本文所述的其變化中之任一者之化合物。

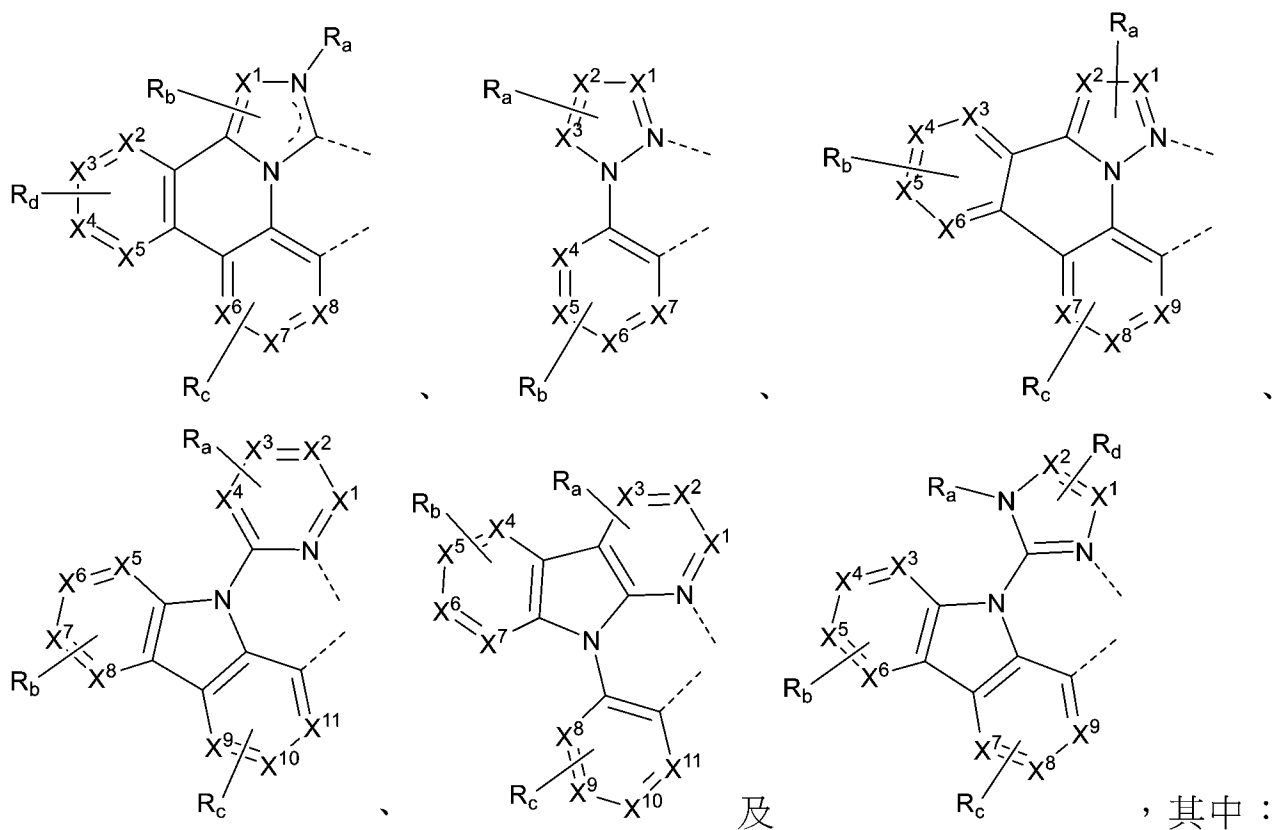
在一些實施例中，有機層為發射層且組合物包含主體。

在一些實施例中，有機層亦包括磷光發射摻雜劑。在一些實施例中，該磷光發射摻雜劑為具有至少一個配位體，或在該配位體為雙齒以上時，具有該配位體之一部分的過渡金屬錯合物，該配位體選自由以下組成



之 群 ：





，其中：

各 X^1 至 X^{13} 獨立地選自由碳及氮組成之群；

X 選自由以下組成之群： BR' 、 NR' 、 PR' 、 O 、 S 、 Se 、 $C=O$ 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 及 $GeR'R''$ ；

R' 及 R'' 視情況稠合或接合以形成環；

各 R_a 、 R_b 、 R_c 及 R_d 可表示單取代至可能最大數目之取代或無取代；

R' 、 R'' 、 R_a 、 R_b 、 R_c 及 R_d 各自獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合；且

R_a 、 R_b 、 R_c 及 R_d 之任何兩個相鄰取代基視情況稠合或接合以形成環或形成多齒配位體。

在一些實施例中，有機層為阻擋層，且組合物為有機層中之阻擋材料。在一些實施例中，有機層為電子傳輸層，且組合物為有機層中之電子

傳輸材料。

在一些實施例中，第一裝置選自由以下組成之群：消費型產品、電子組件模組、有機發光裝置及照明面板。

在一些實施例中， R_a 、 R_b 、 R_c 及 R_d 中之至少一者選自由以下組成之群：烷基、環烷基、其部分或完全氫化之變異體、其部分或完全氟化之變異體，及其組合。

在本發明之另一態樣中，提供一種用於製造有機發光裝置之方法。有機發光裝置可包括第一電極、第二電極及安置在第一電極與第二電極之間的第一有機層，其中第一有機層包含第一組合物，第一組合物包含第一化合物與第二化合物之混合物。

在一些實施例中，該方法包括：提供其上安置有第一電極之基板；將第一組合物沈積在第一電極上方；及將第二電極沈積在第一有機層上方。在一些實施例中，第一組合物選自由調配物I及調配物II組成之群，其中調配物I包含式I之第一化合物及式II之第二化合物，且其中調配物II包含式III之第一化合物及式IV之第二化合物。

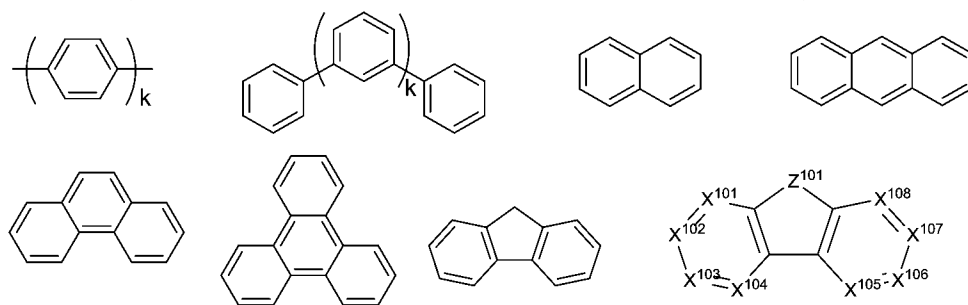
與其他材料之組合

本文描述的適用於有機發光裝置之特定層的材料可與存在於該裝置中之多種其他材料組合使用。舉例而言，本文所揭示之發射性摻雜劑可與多種主體、傳輸層、阻擋層、注入層、電極及其他可能存在之層結合使用。下文描述或涉及之材料為可與本文所揭示之化合物組合使用之材料的非限制性實例，且熟習此項技術者容易查閱文獻以鑑別可組合使用之其他材料。

HIL/HTL：

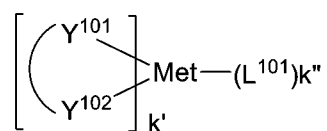
喹啉、嘧啶、酞嗪、喋啶、二苯并呋喃、吡啶、吩嗪、啡嗪、啡噁嗪、苯并呋喃并吡啶、呋喃并二吡啶、苯并噻吩并吡啶、噻吩并二吡啶、苯并噻吩并吡啶及噻吩并二吡啶；及由2至10個環狀結構單元組成之群，該等結構單元為選自芳族烴環狀基團及芳族雜環基團之相同類型或不同類型之基團，且直接相互鍵結或經由氧原子、氮原子、硫原子、矽原子、磷原子、硼原子、鏈結構單元及脂族環狀基團中之至少一者鍵結。其中各Ar進一步經選自由以下組成之群之取代基取代：氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、脛、異脛、硫基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一態樣中， Ar^1 至 Ar^9 係獨立地選自由以下組成之群：



其中k為1至20之整數； X^{101} 至 X^{108} 為C(包括CH)或N； Z^{101} 為 NAr^1 、O或S； Ar^1 具有以上定義之相同基團。

用於HIL或HTL之金屬錯合物之實例包括(但不限於)以下通式：



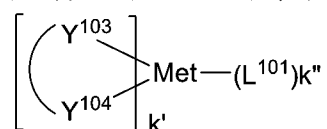
其中Met為原子量可大於40之金屬； $(Y^{101}-Y^{102})$ 為雙齒配位體， Y^{101} 及 Y^{102} 獨立地選自C、N、O、P以及S； L^{101} 為輔助性配位體； k' 為1至可與金屬連接之最大配位體數之整數值；且 $k'+k''$ 為可與金屬連接之最大配位體數。

在一態樣中， $(Y^{101}-Y^{102})$ 為2-苯基吡啶衍生物。在另一態樣中， $(Y^{101}-Y^{102})$ 為碳烯配位體。在另一態樣中，Met選自Ir、Pt、Os以及Zn。在另一態樣中，金屬錯合物具有小於約0.6 V之相對於 Fc^+/Fc 對之溶液態最小氧化電位。

主體：

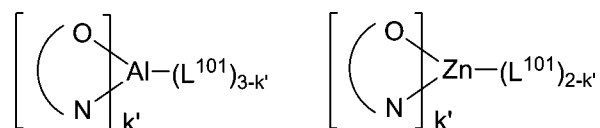
本發明之有機EL裝置之發光層較佳含有至少一種金屬錯合物作為發光材料，且可含有將金屬錯合物用作摻雜劑材料之主體材料。主體材料之實例不受特別限制，且可使用任何金屬錯合物或有機化合物，只要主體之三重態能量大於摻雜劑之三重態能量即可。雖然下表將較佳用於發射各種顏色之裝置的主體材料加以分類，但任何主體材料可以與任何摻雜劑一起使用，只要三重態準則滿足即可。

用作主體之金屬錯合物之實例較佳具有以下通式：



其中Met為金屬； $(Y^{103}-Y^{104})$ 為雙齒配位體， Y^{103} 及 Y^{104} 獨立地選自C、N、O、P及S； L^{101} 為另一配位體； k' 為1至可與金屬連接之最大配位體數之整數值；且 $k'+k''$ 為可與金屬連接之最大配位體數。

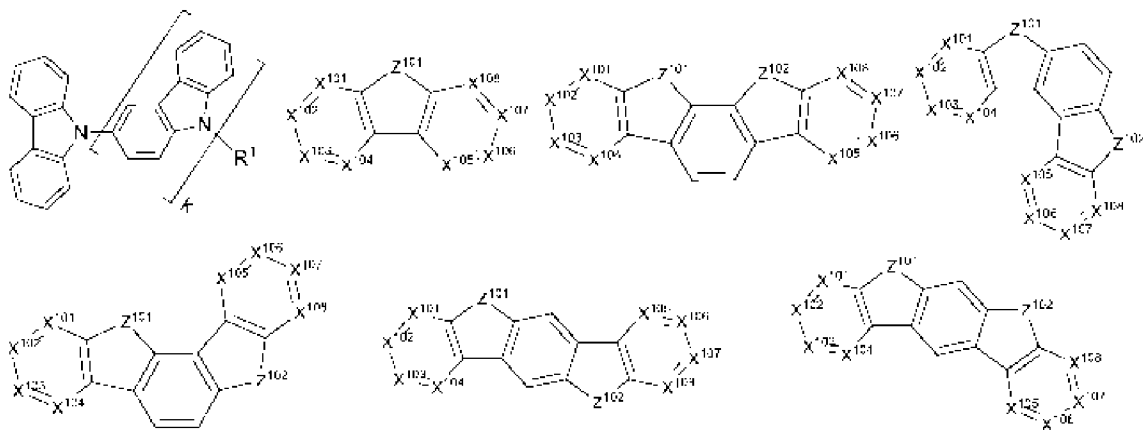
在一個態樣中，金屬錯合物為：



其中(O-N)為具有與O及N原子配位之金屬的雙齒配位體。

在另一態樣中，Met選自Ir及Pt。在另一態樣中， $(Y^{103}-Y^{104})$ 為碳烯配位體。

用作主體之有機化合物之實例係選自組成芳族烴環狀化合物之基



其中R¹⁰¹至R¹⁰⁷獨立地選自由以下組成之群：氫、氖、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合，當其為芳基或雜芳基時，其具有與上述Ar類似之定義。k為0至20或1至20之整數；k'為0至20之整數。X¹⁰¹至X¹⁰⁸選自C (包括CH)或N。

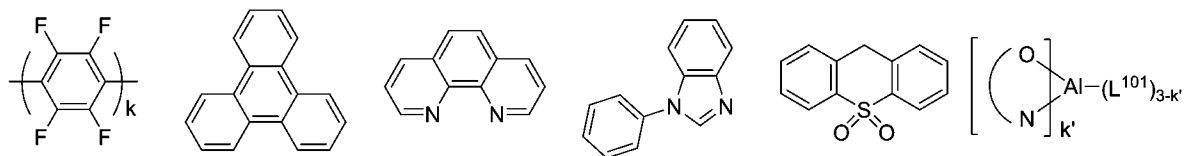
Z¹⁰¹及Z¹⁰²選自NR¹⁰¹、O或S。

HBL：

電洞阻擋層(HBL)可用以減少離開發射層之電洞及/或激子之數量。當與缺乏阻斷層之相似裝置比較時，該阻斷層在裝置中之存在可產生大體上更高之效率。又，阻斷層可用以將發射限制於OLED之所要區域。

在一態樣中，用於HBL中之化合物含有與用作上文所描述之主體相同的分子或相同的官能基。

在另一態樣中，用於HBL中之化合物在分子中含有以下基團中之至少一者：

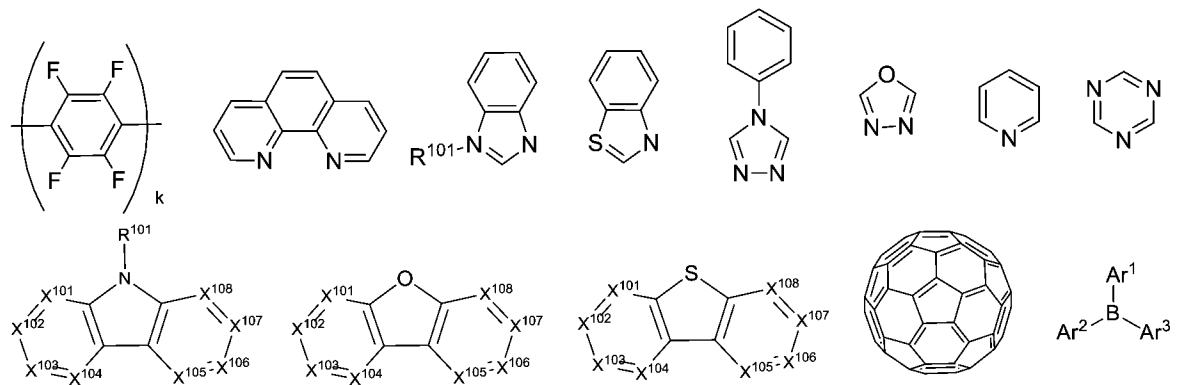


其中k為1至20之整數；L¹⁰¹為另一配位體，k'為1至3之整數。

ETL :

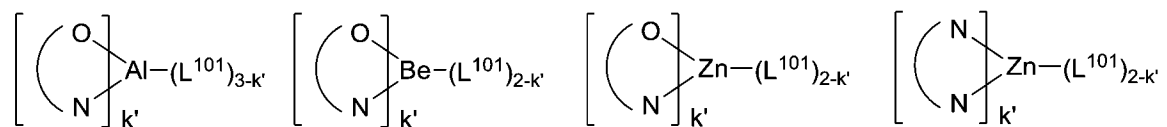
電子傳輸層(ETL)可包括能傳輸電子之材料。電子傳輸層可為本質的(未經摻雜的),或為經摻雜的。摻雜可用以增強電導率。ETL材料之實例不受特別限制,且可使用任何金屬錯合物或有機化合物,只要其通常用以傳輸電子即可。

在一態樣中,用於ETL中之化合物在分子中含有以下基團中之至少一者:



其中 R^{101} 係選自由以下組成之群:氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合,當其為芳基或雜芳基時,其具有與上文提及之 Ar 類似之定義。 Ar^1 至 Ar^3 具有與上文所提及之 Ar 類似的定義。 k 為1至20之整數。 X^{101} 至 X^{108} 選自 C (包括 CH)或 N 。

在另一態樣中,ETL中所用之金屬錯合物包括(但不限於)以下通式:

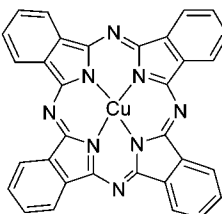
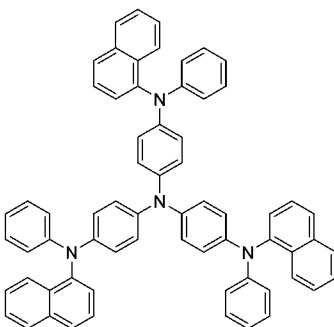


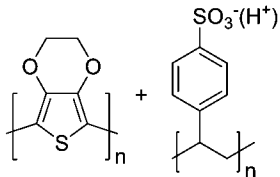
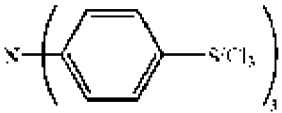
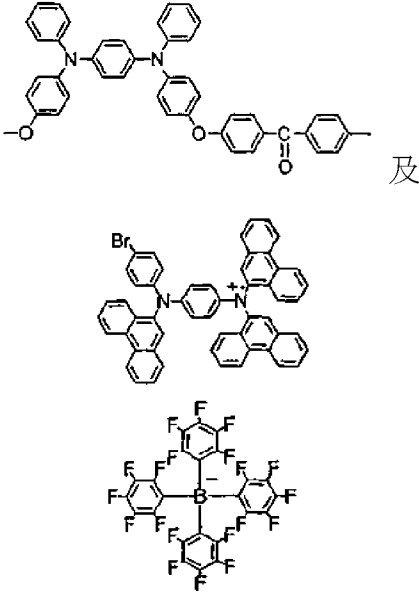
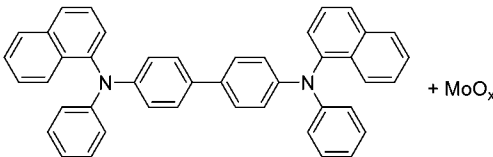
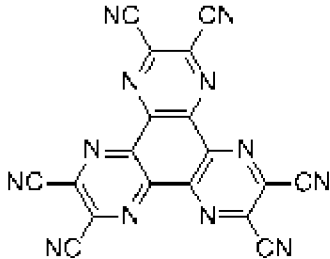
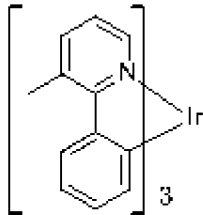
其中(O-N)或(N-N)為具有與原子O、N或N,N配位之金屬的雙齒配位體; L^{101} 為另一配位體; k' 為自1至可與金屬連接之最大配位體數目的整數值。

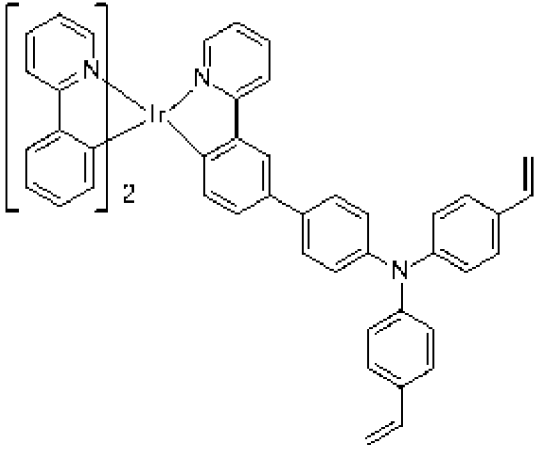
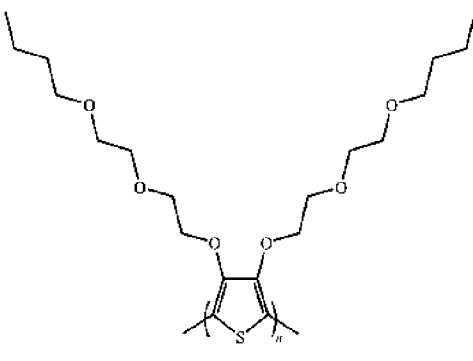
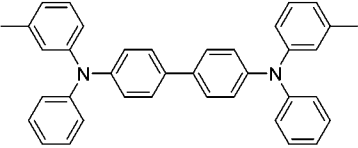
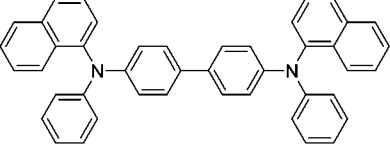
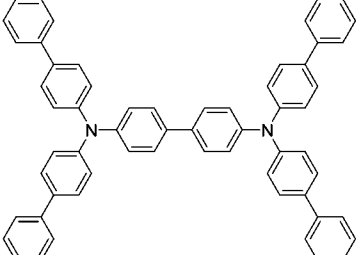
在OLED裝置之每個層中所用之任何上述化合物中，氫原子可部分或完全氙化。因此，任何具體列出之取代基，諸如(但不限於)甲基、苯基、吡啶基等涵蓋其非氙化、部分氙化以及完全氙化形式。類似地，取代基類別，諸如(但不限於)烷基、芳基、環烷基、雜芳基等亦涵蓋其非氙化、部分氙化以及完全氙化形式。

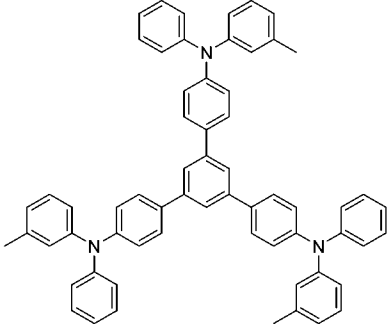
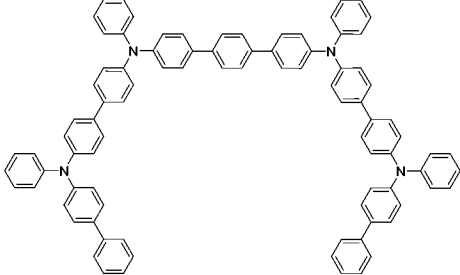
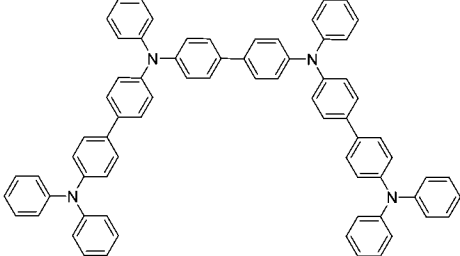
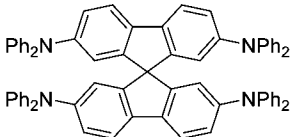
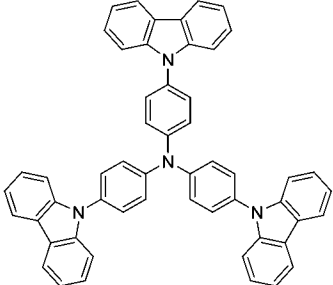
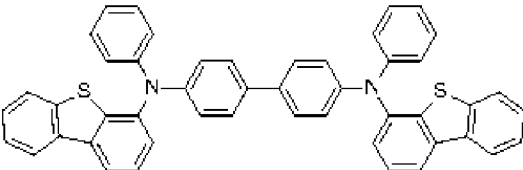
除本文所揭示之材料外及/或與本文所揭示的材料組合，OLED中還可以使用許多電洞注入材料、電洞傳輸材料、主體材料、摻雜劑材料、激子/電洞阻擋層材料、電子傳輸材料及電子注入材料。可與本文所揭示之材料組合用於OLED中之該等材料的非限制性實例列於以下表A中。表A列舉材料之非限制性類別、用於各類別之化合物的非限制性實例以及揭示該等材料之參考文獻。

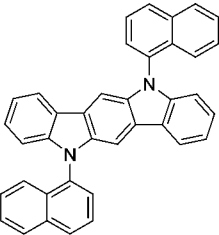
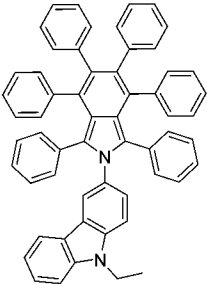
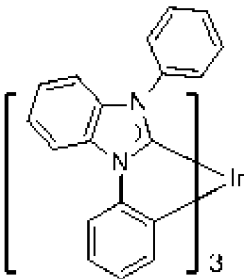
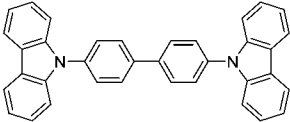
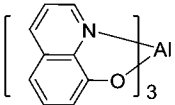
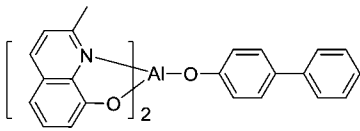
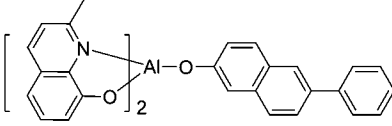
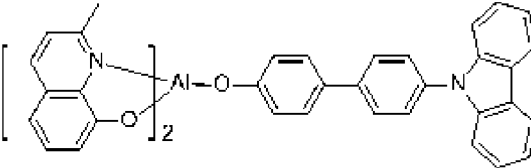
表A

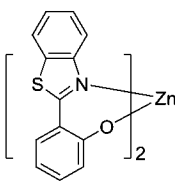
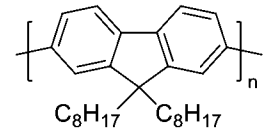
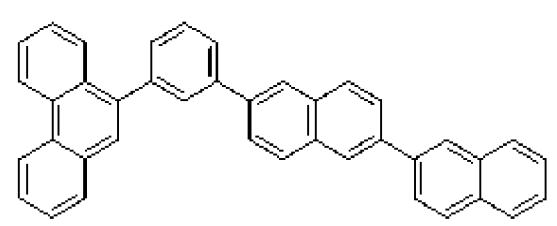
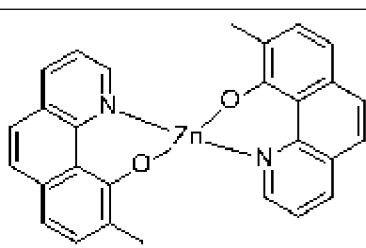
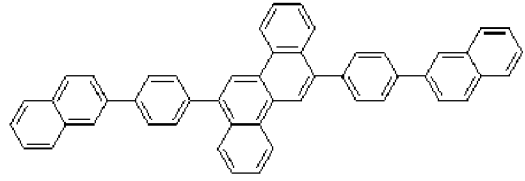
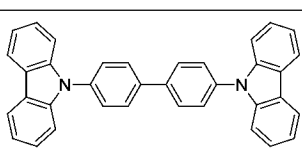
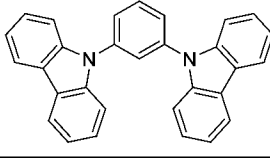
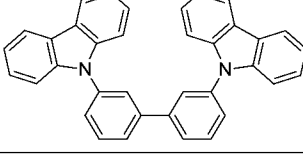
材料	材料之實例	出版物
電洞注入材料		
酞菁及卟啉化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
星爆流三芳基胺		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF _x 氟代烴聚合物	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)

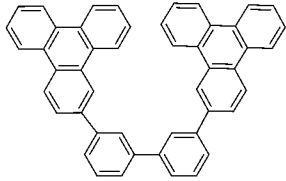
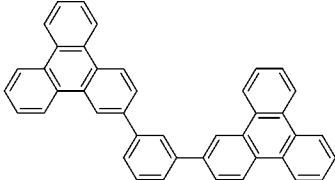
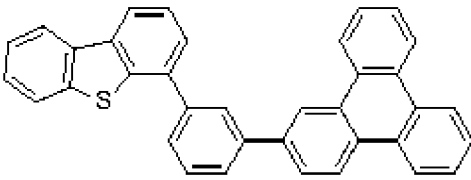
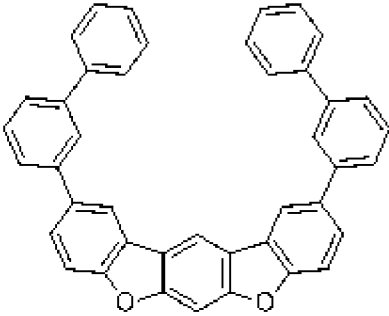
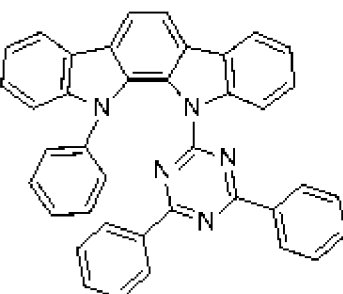
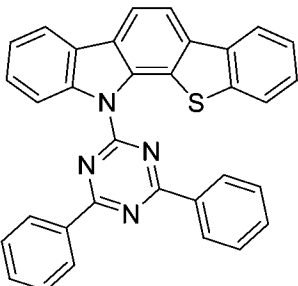
材料	材料之實例	出版物
導電聚合物(例如 PEDOT:PSS、聚苯胺、聚噻吩)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683
磷酸及矽烷SAM		US20030162053
具有導電性摻雜劑之三芳基胺或聚噻吩聚合物		EP1725079A1
具有導電無機化合物(諸如氧化鉬及氧化鎢)之有機化合物		US20050123751 SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO2009018009
n型半導體有機錯合物		US20020158242
金屬有機金屬錯合物		US20060240279

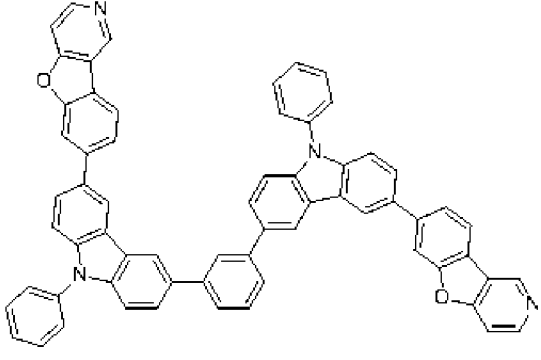
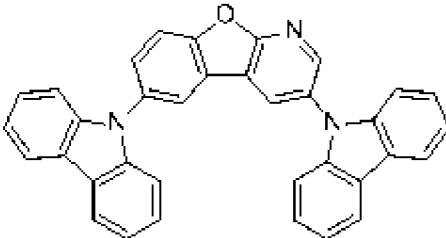
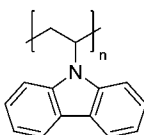
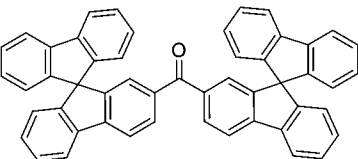
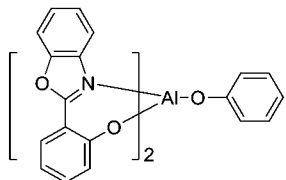
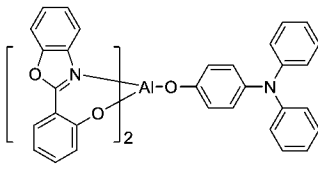
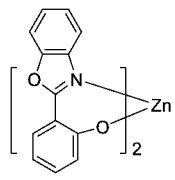
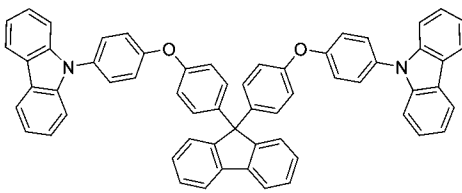
材料	材料之實例	出版物
可交聯化合物		US20080220265
基於聚噻吩的聚合物及共聚物		WO 2011075644 EP2350216
電洞傳輸材料		
三芳基胺(例如TPD、 α -NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		US5061569
		EP650955

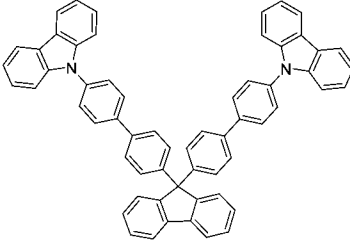
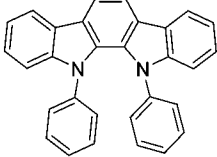
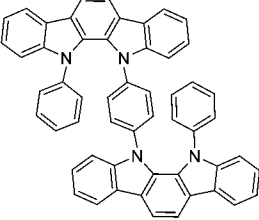
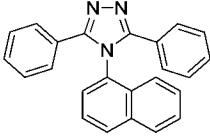
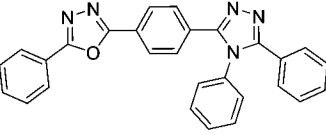
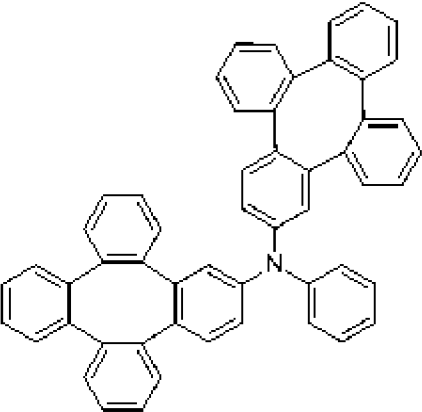
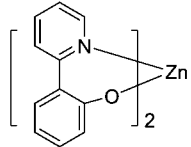
材料	材料之實例	出版物
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
在螺萸核心上之三芳基胺		Synth. Met. 91, 209 (1997)
芳基胺吡啶化合物		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US20080124572
具有(二)苯并噻吩/(二)苯并咪喃之三芳基胺		US20070278938、 US20080106190 US20110163302

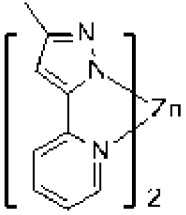
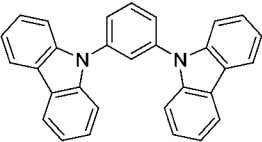
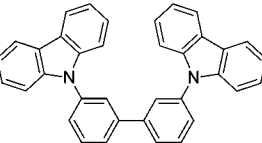
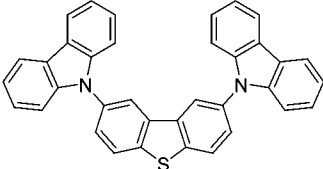
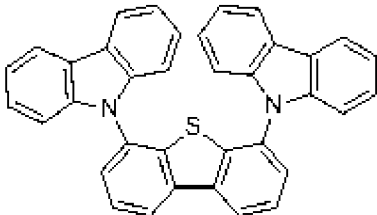
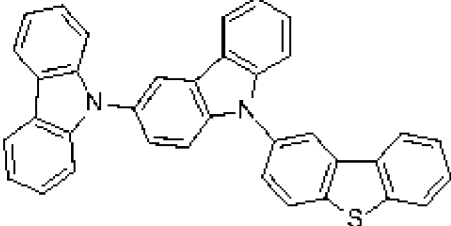
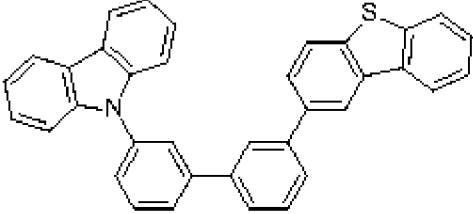
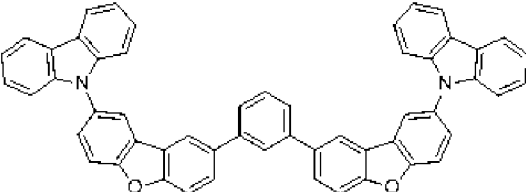
材料	材料之實例	出版物
吡啶并咪唑		Synth. Met. 111, 421 (2000)
異吡啶化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
金屬碳烯錯合物		US20080018221
磷光OLED主體材料		
紅色主體		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
8-羥基喹啉基金屬(例 如Alq ₃ 、BAIq)		Nature 395, 151 (1998)
		US20060202194
		WO2005014551
		WO2006072002

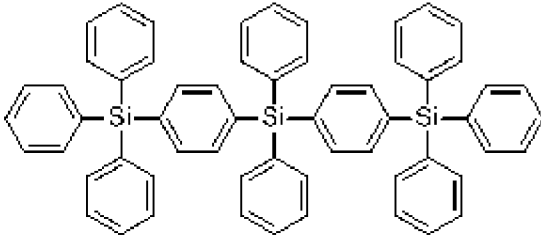
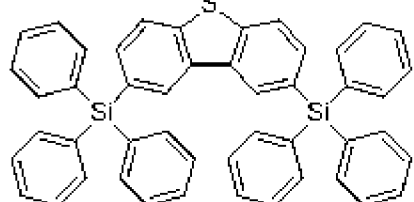
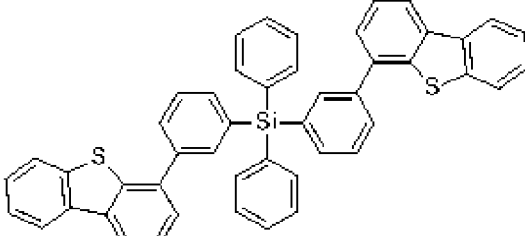
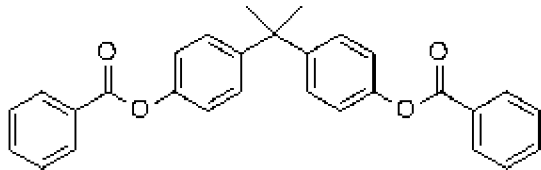
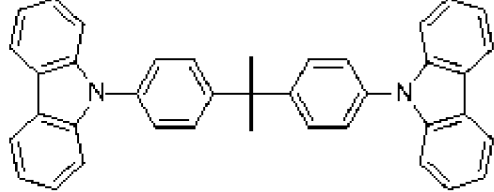
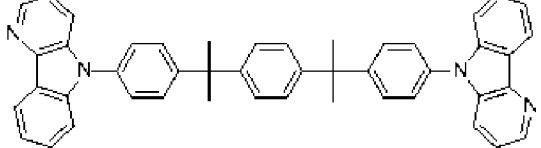
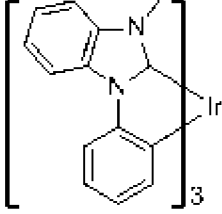
材料	材料之實例	出版物
金屬苯氧基苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
共軛寡聚物及聚合物 (例如聚萘)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
芳族稠合環		WO2009066779、 WO2009066778、 WO2009063833、 US20090045731、 US20090045730、 WO2009008311、 US20090008605、 US20090009065
鋅錯合物		WO2010056066
基於[蒽]之化合物		WO2011086863
綠色主體		
芳基吡啶		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US20030175553
		WO2001039234

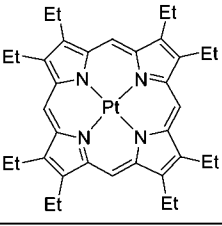
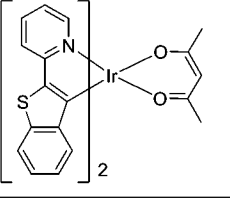
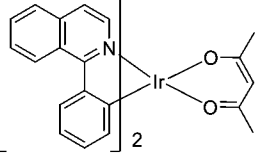
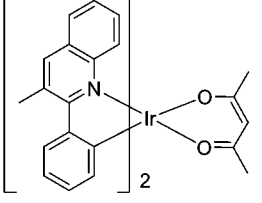
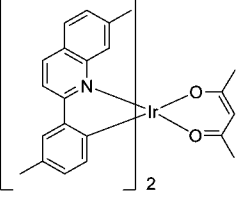
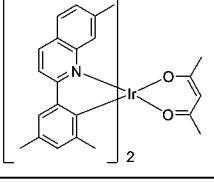
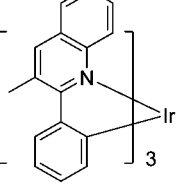
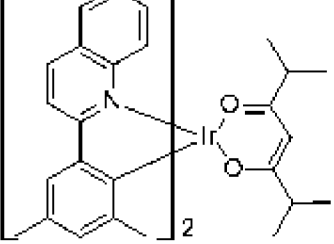
材料	材料之實例	出版物
芳基聯伸三苯化合物		US20060280965
		US20060280965
		WO2009021126
多稠合雜芳基化合物		US20090309488 US20090302743 US20100012931
供體受體型分子		WO2008056746
		WO2010107244

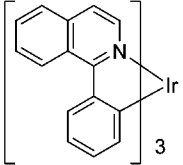
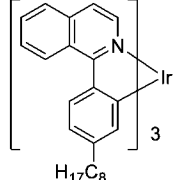
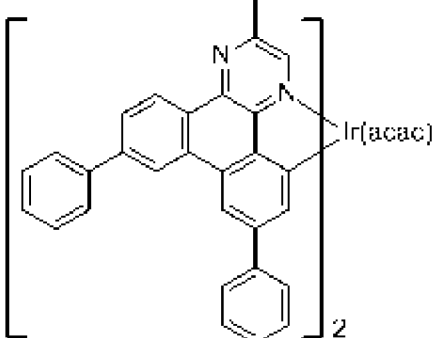
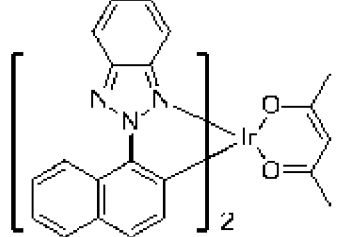
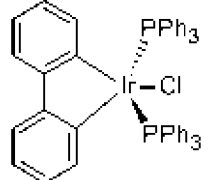
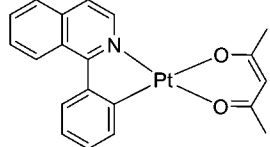
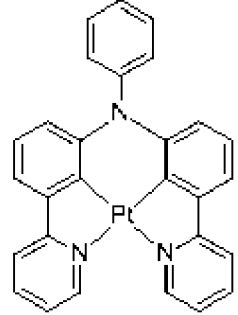
材料	材料之實例	出版物
氮雜呋啉/DBT/DBF		JP2008074939
		US20100187984
聚合物(例如PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
螺萘化合物		WO2004093207
金屬苯氧基苯并噁唑化合物		WO2005089025
		WO2006132173
		JP200511610
螺萘-呋啉化合物		JP2007254297

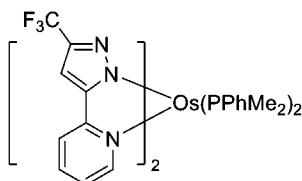
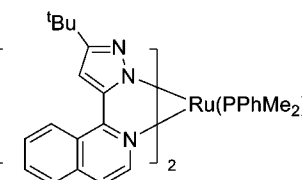
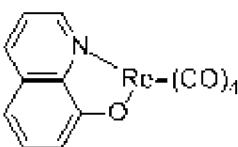
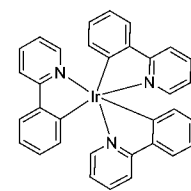
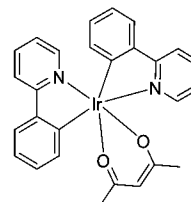
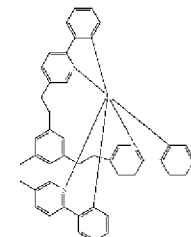
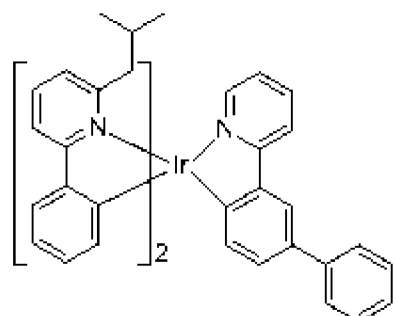
材料	材料之實例	出版物
		JP2007254297
吲哚并吡啶		WO2007063796
		WO2007063754
5員環缺電子雜環(例如三唑、噁二唑)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO2004107822
聯伸四苯錯合物		US20050112407
金屬苯氧基吡啶化合物		WO2005030900

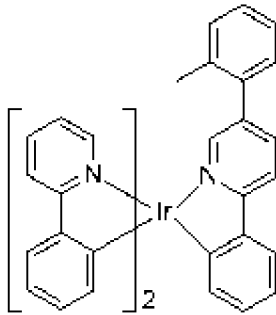
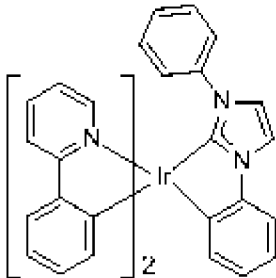
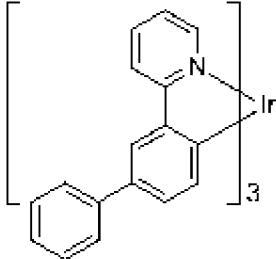
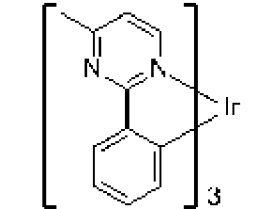
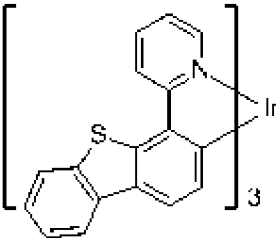
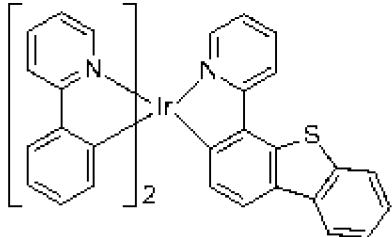
材料	材料之實例	出版物
金屬配位錯合物(例如具有N [^] N配位體之Zn、Al)		US20040137268、 US20040137267
藍色主體		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
二苯并噻吩/二苯并咪唑-咪唑化合物		WO2006114966、 US20090167162
		US20090167162
		WO2009086028
		US20090030202、 US20090017330
		US20100084966

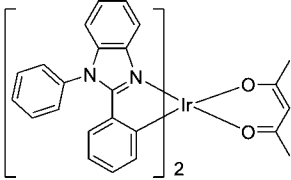
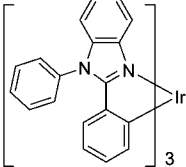
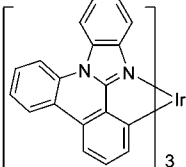
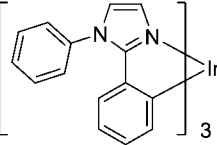
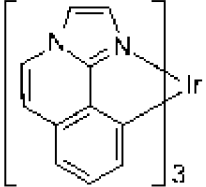
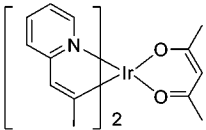
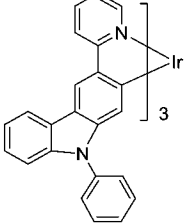
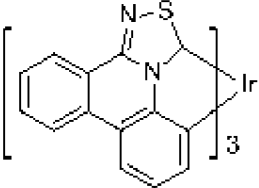
材料	材料之實例	出版物
矽芳基化合物		US20050238919
		WO2009003898
矽/鍺芳基化合物		EP2034538A
芳基苯甲醯基酯		WO2006100298
由非共軛基團鍵聯之咪唑		US20040115476
氮雜咪唑		US20060121308
高三重態金屬有機金屬錯合物		US7154114
磷光摻雜劑		
紅色摻雜劑		

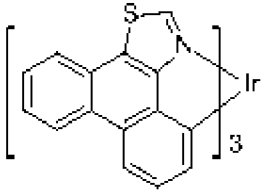
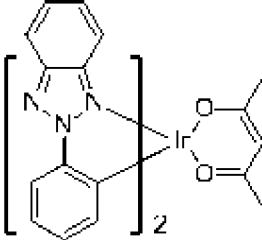
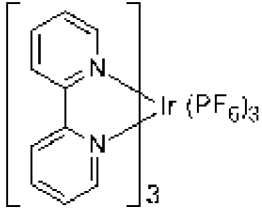
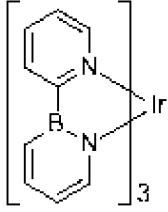
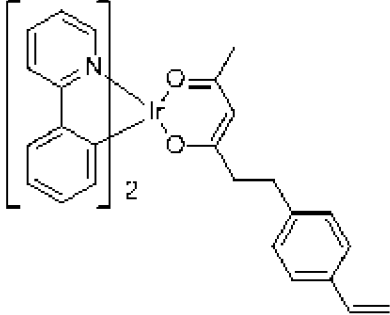
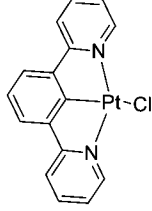
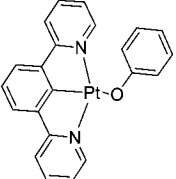
材料	材料之實例	出版物
重金屬卟啉 (例如 PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
銱(III)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US20030072964
		US20030072964
		US20060202194
		US20060202194
		US20070087321
		US20080261076 US20100090591

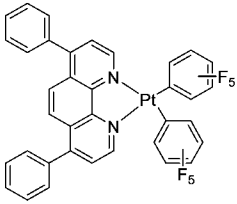
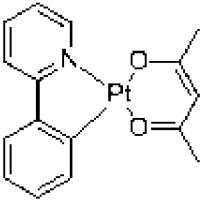
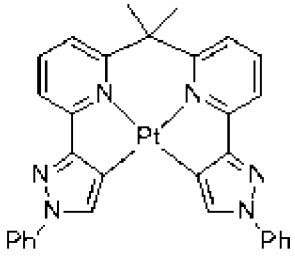
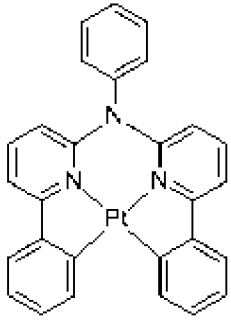
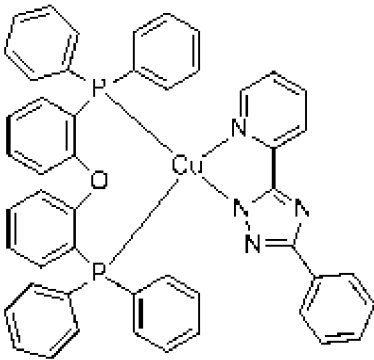
材料	材料之實例	出版物
		US20070087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
		WO2009100991
		WO2008101842
		US7232618
鉑(II)有機金屬錯合物		WO2003040257
		US20070103060

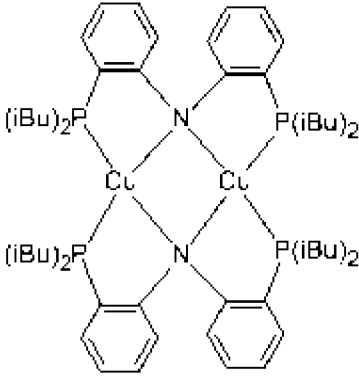
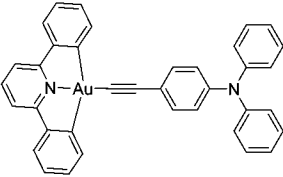
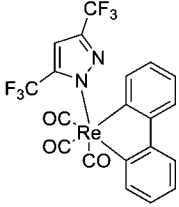
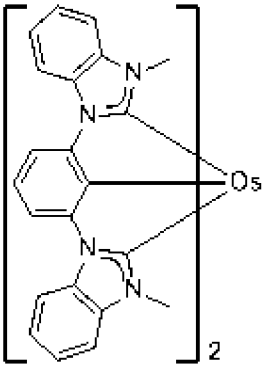
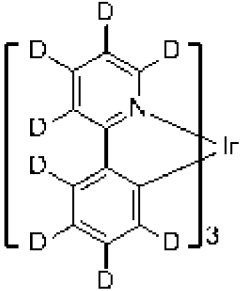
材料	材料之實例	出版物
鐵(III)錯合物		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
鈦(II)錯合物		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
銻(I)、(II)及(III)錯合物		US20050244673
綠色摻雜劑		
銥(III)有機金屬錯合物	 <p>及其衍生物</p>	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US20020034656
		US7332232
		US20090108737

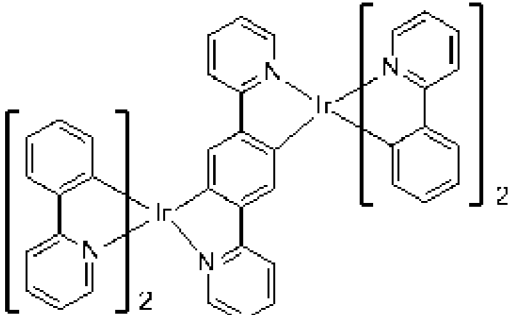
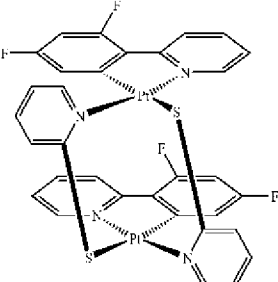
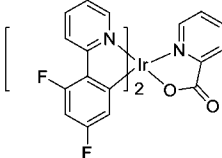
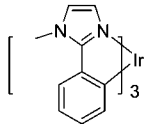
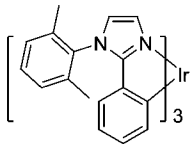
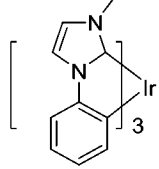
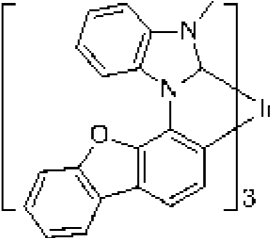
材料	材料之實例	出版物
		WO2010028151
		EP1841834B
		US20060127696
		US20090039776
		US6921915
		US20100244004

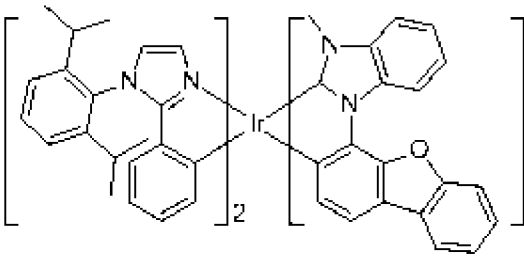
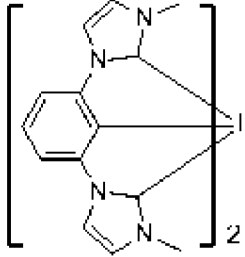
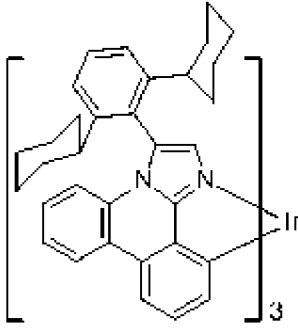
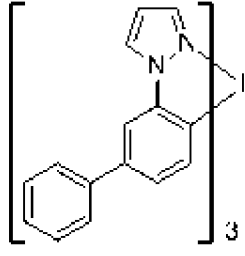
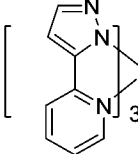
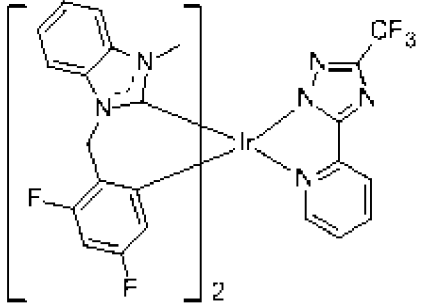
材料	材料之實例	出版物
		US6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
		WO2010086089、 WO2011044988
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO2009050290

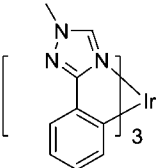
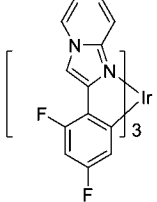
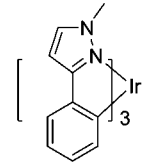
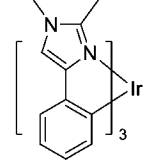
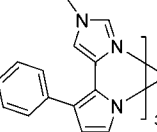
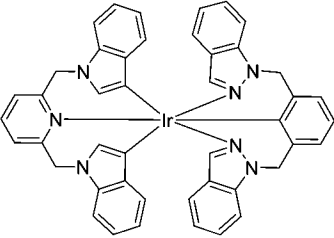
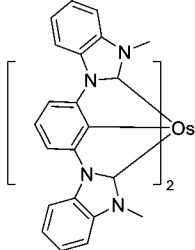
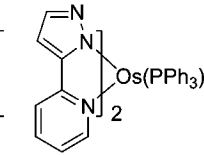
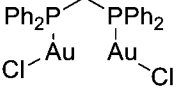
材料	材料之實例	出版物
		US20090165846
		US20080015355
		US20010015432
		US20100295032
聚合金屬有機金屬化合物之單體		US7250226、 US7396598
Pt(II) 有機金屬錯合物，包括多齒配位體		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)

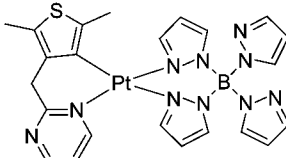
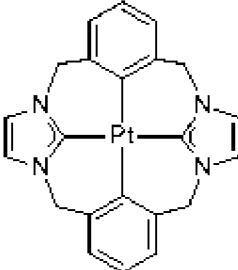
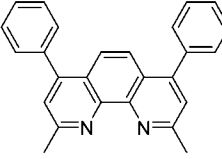
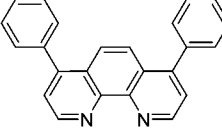
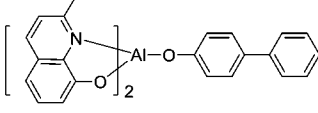
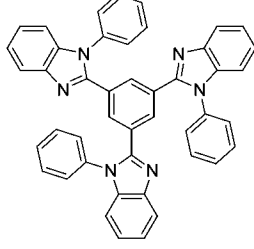
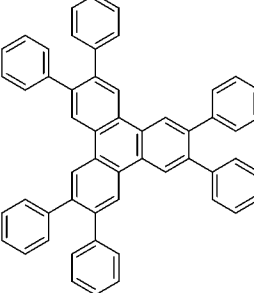
材料	材料之實例	出版物
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO2002015645
		US20060263635
		US20060182992 US20070103060
Cu錯合物		WO2009000673

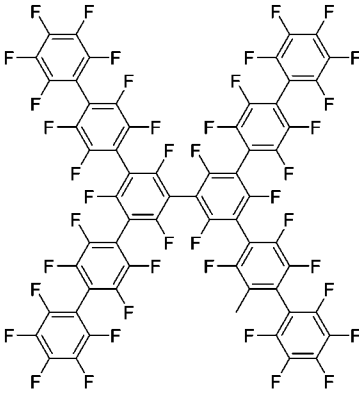
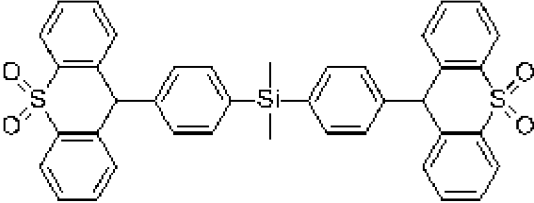
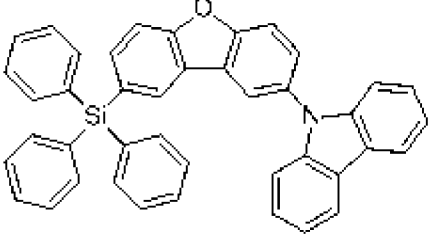
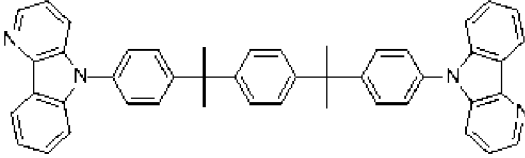
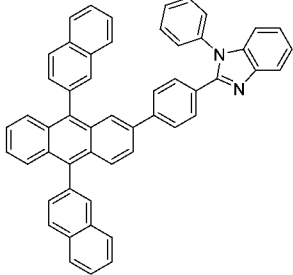
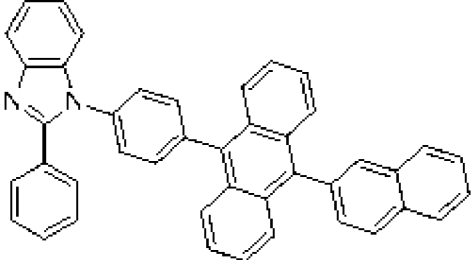
材料	材料之實例	出版物
		US20070111026
金錯合物		Chem. Commun. 2906 (2005)
銦(III)錯合物		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
鐵(II)錯合物		US7279704
氘化有機金屬錯合物		US20030138657

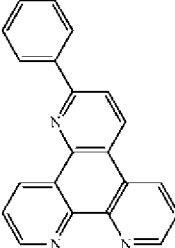
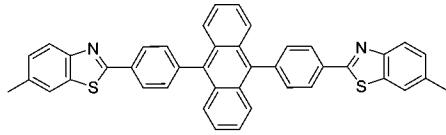
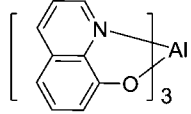
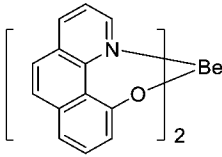
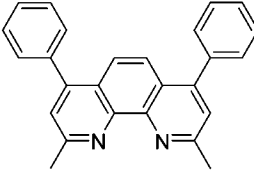
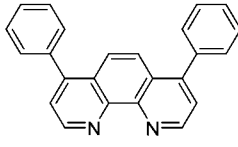
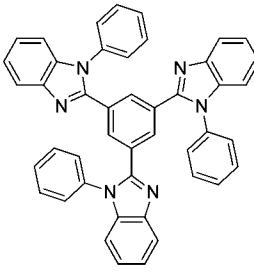
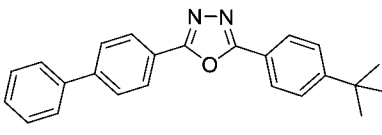
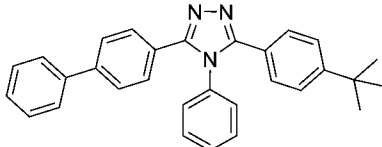
材料	材料之實例	出版物
具有兩個或兩個以上金屬中心之有機金屬錯合物		US20030152802
		US7090928
藍色摻雜劑		
銱(III)有機金屬錯合物		WO2002002714
		WO2006009024
		US20060251923 US20110057559 US20110204333
		US7393599、 WO2006056418、 US20050260441、 WO2005019373
		US7534505

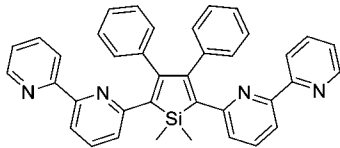
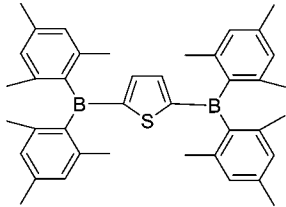
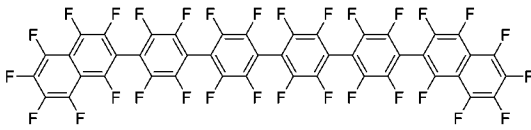
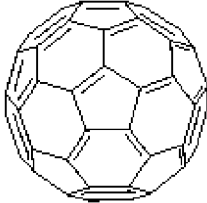
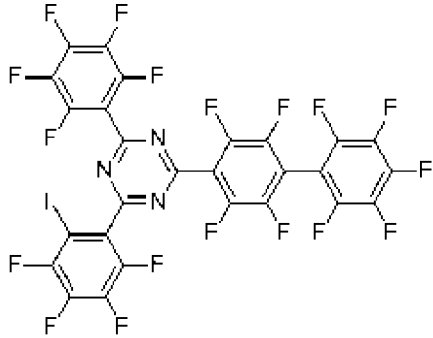
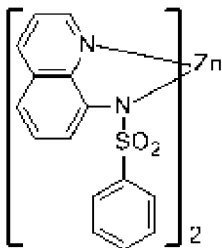
材料	材料之實例	出版物
		WO2011051404
		US7445855
		US20070190359、 US20080297033 US20100148663
		US7338722
		US20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 4542 (2008)

材料	材料之實例	出版物
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO2005123873
		WO2005123873
		WO2007004380
		WO2006082742
鐵(II)錯合物		US7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
金錯合物		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)

材料	材料之實例	出版物
鉑(II)錯合物		WO2006098120、 WO2006103874
具有至少一個金屬-碳烯鍵之Pt四齒錯合物		US7655323
激子/電洞阻擋層材料		
浴銅靈化合物(例如 BCP、BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
8-羥基喹啉基金屬(例如 BAiq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5員環缺電子雜環，諸如三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
聯伸三苯化合物		US20050025993

材料	材料之實例	出版物
氟化芳族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
啡噻嗪-S-氧化物		WO2008132085
甲矽烷基化五員氮、氧、硫或磷二苯并雜環		WO2010079051
氮雜呋唑		US20060121308
電子傳輸材料		
蔥-苯并咪唑化合物		WO2003060956
		US20090179554

材料	材料之實例	出版物
氮雜聯伸三苯衍生物		US20090115316
蒽-苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
8-羥基喹啉基金屬(例如 Alq ₃ 、Zr _q ₄)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US7230107
經基苯并喹啉基金屬		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
浴銅靈化合物，諸如 BCP、BPhen等		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5員環缺電子雜環(例如 三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)

材料	材料之實例	出版物
矽羅化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)
芳基硼烷化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
氟化芳族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
富勒烯(例如C ₆₀)		US20090101870
三嗪錯合物		US20040036077
Zn (N^N)錯合物		US6528187

實驗

合成實例

在整個本文檔中所用之化學縮寫如下：

SPhos為二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦，

Pd₂(dba)₃為參(二亞苄基丙酮)二鈣(0)，

$\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 為肆(三苯基膦)鈀(0)，

DCM 為二氯甲烷，

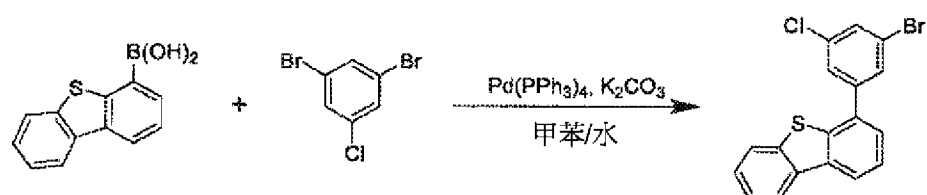
EtOAc 為乙酸乙酯，

DME 為二甲氧基乙烷，且

THF 為四氫呋喃。

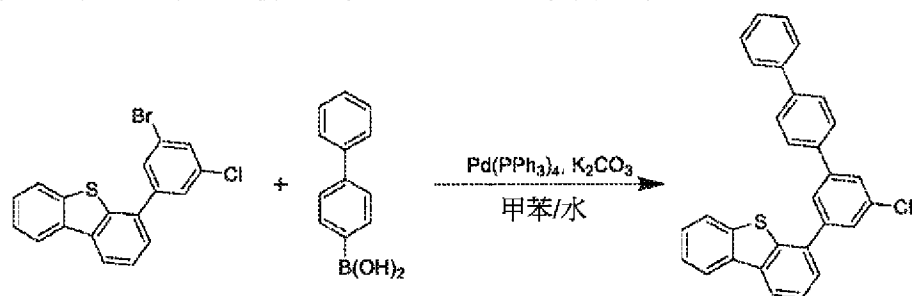
合成化合物A5

合成4-(3-溴-5-氯苯基)二苯并[b,d]噻吩



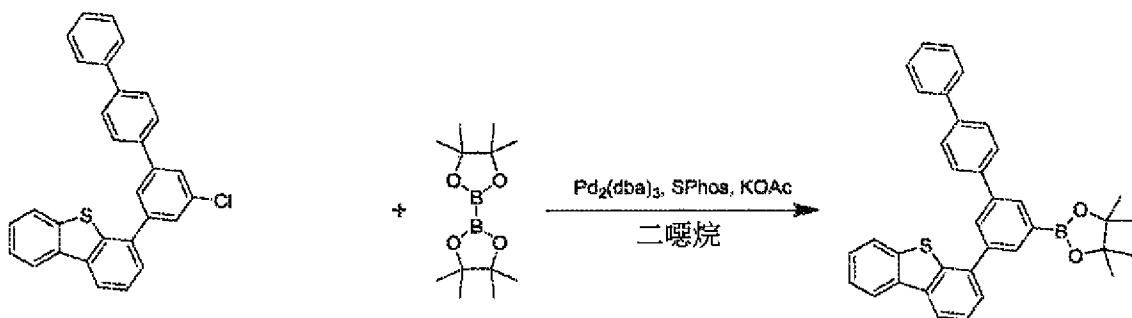
在氮氣氛圍下在經氮氣吹掃之 250 mL 雙頸圓底燒瓶中將二苯并[b,d]噻吩-4-基硼酸 (3.0 g, 13.15 mmol) 及 1,3-二溴-5-氯苯 (10.67 g, 39.5 mmol) 溶解於甲苯 (150 ml) 中以得到無色溶液。向反應混合物中添加含 K_2CO_3 (7.27 g, 52.6 mmol) 之水 (50 ml)，接著添加 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.304 g, 0.263 mmol)。隨後將反應混合物在氮氣下加熱至回流隔夜 (約 12 小時)。在冷卻至室溫 (約 22°C) 之後，分離有機相，蒸發溶劑，且在減壓下蒸餾出未反應之 1,3-二溴-5-氯苯。用庚烷/DCM (9/1, v/v) 作為溶離劑對殘餘物進行矽膠管柱層析，獲得呈白色固體狀之 4-(3-溴-5-氯苯基)二苯并[b,d]噻吩 (3.5 g, 71.2%)。

合成4-(5-氯-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩



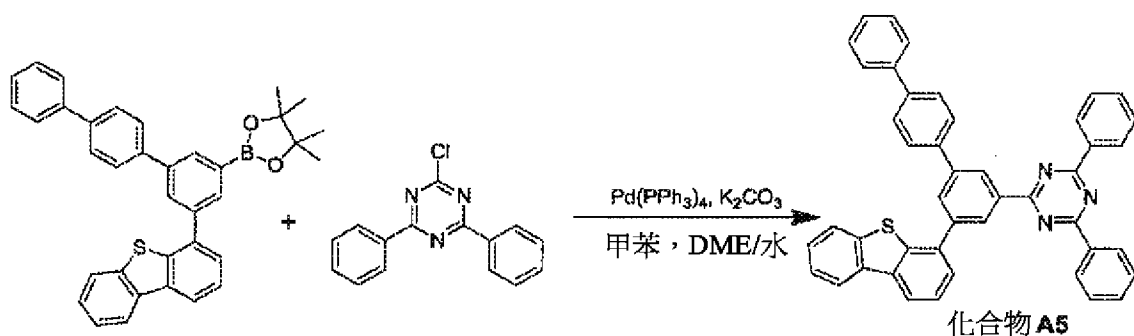
將4-(3-溴-5-氯苯基)二苯并[b,d]噻吩(4.0 g, 10.70 mmol)、[1,1'-聯苯]-4-基硼酸(2.120 g, 10.70 mmol)、 K_2CO_3 (3.0 g, 21.4 mmol)及 $Pd(PPh_3)_4$ (0.37 g, 0.32 mmol)於甲苯(150 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機層，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/DCM (4/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，分離出呈白色固體狀之4-(5-氯-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩(1.4 g, 29%)。

合成2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶



將4-(5-氯-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩(1.40 g, 3.13 mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-八甲基-2,2'-雙(1,3,2-二氧雜硼啶) (1.59 g, 6.26 mmol)、乙酸鉀(0.92 g, 9.40 mmol)、SPhos (0.25 g, 0.61 mmol)及 $Pd_2(dba)_3$ (0.11 g, 0.12 mmol)於二噁烷(150 ml)中之混合物在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用EtOAc稀釋反應混合物，用鹽水及水洗滌，且經 Na_2SO_4 乾燥。在蒸發溶劑後，藉由用庚烷/EtOAc (9/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(1.1 g, 65%)。

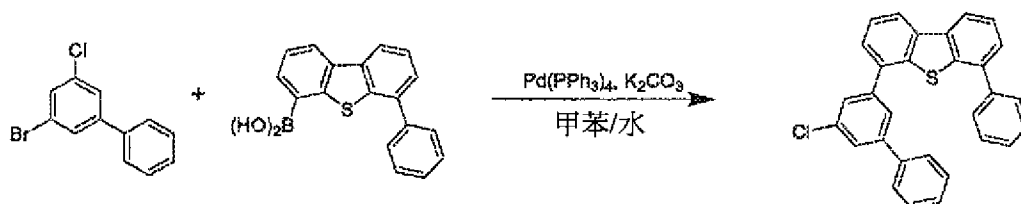
合成化合物A5



將2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(1.84 g, 6.87 mmol)、2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.70 g, 6.87 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.16 g, 0.137 mmol)及K₂CO₃ (2.85 g, 20.61 mmol)於DME (150 ml)、甲苯(100 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾分離固體，且連續用水、甲醇及EtOAc洗滌。將粗產物溶解於熱甲苯中，經由短矽膠塞過濾，且自甲苯再結晶，產生呈白色固體狀之化合物A5 (3.1 g, 70%)。

合成化合物A11

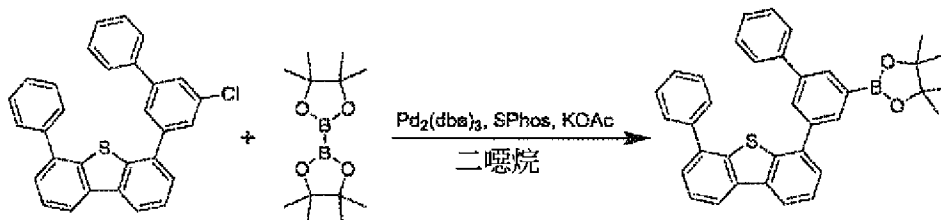
合成4-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)-6-苯基二苯并[b,d]噻吩



將3-溴-5-氯-1,1'-聯苯(10 g, 37.4 mmol)、(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)硼酸(11.37 g, 37.4 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.432 g, 0.374 mmol)及K₂CO₃ (10.33 g, 74.8 mmol)於甲苯(150 ml)及水(30 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機相，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/DCM (4/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之4-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)-6-苯基二苯并

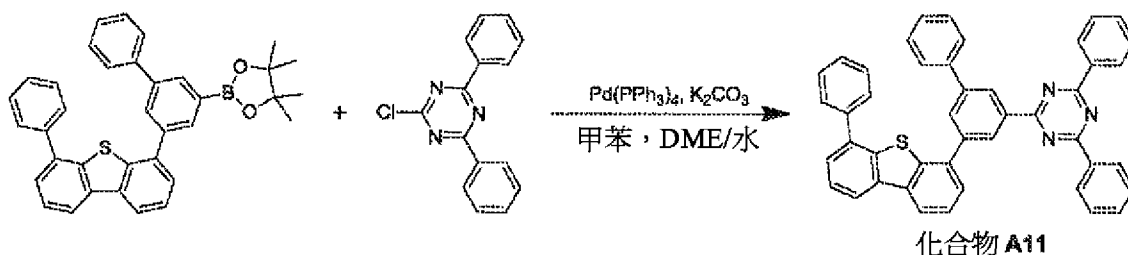
[*b,d*]噻吩(12.1 g, 72.4%)。

合成4,4,5,5-四甲基-2-(5-(6-苯基二苯并[*b,d*]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-1,3,2-二氧雜硼啶



將4-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)-6-苯基二苯并[*b,d*]噻吩(13.0 g, 29.1 mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-八甲基-2,2'-雙(1,3,2-二氧雜硼啶)(14.77 g, 58.2 mmol)、Pd₂(dba)₃(0.20 g, 0.22 mmol)、SPhos(0.35 g, 0.85 mmol)及乙酸鉀(8.56 g, 87 mmol)於二噁烷(200 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用水使反應溶液淬滅，且用EtOAc萃取。合併之有機萃取物經Na₂SO₄乾燥，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/EtOAc(9/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之4,4,5,5-四甲基-2-(5-(6-苯基二苯并[*b,d*]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-1,3,2-二氧雜硼啶(13.2 g, 84%)。

合成化合物A11

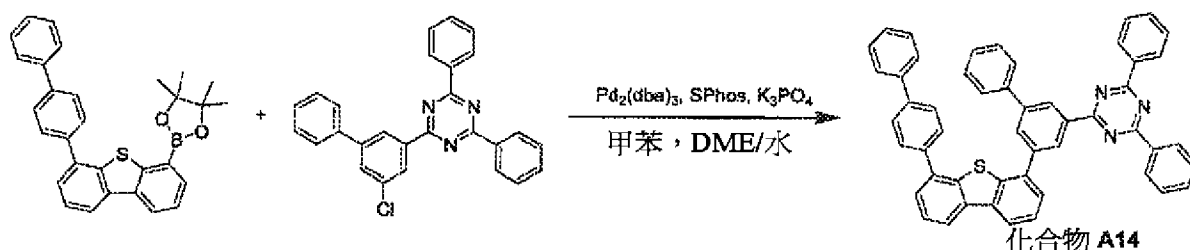


將4,4,5,5-四甲基-2-(5-(6-苯基二苯并[*b,d*]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-1,3,2-二氧雜硼啶(3.55 g, 6.59 mmol)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(1.765 g, 6.59 mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.152 g, 0.132 mmol)及K₂CO₃(1.822 g, 13.18 mmol)於甲苯(100 ml)、DME(100 ml)及水(50 ml)中之

溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機層，經由短矽膠塞過濾且濃縮。收集沈澱，連續用庚烷、乙醇及庚烷洗滌，產生呈白色固體狀之化合物A11 (3.9 g, 92%)。

合成化合物A14

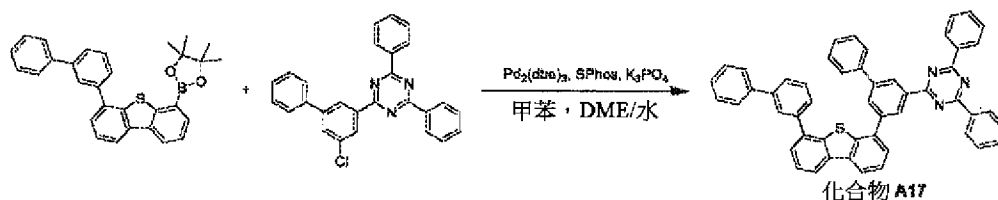
合成化合物A14



將2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.44 g, 7.44 mmol)、2-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.92 g, 6.95 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.159 g, 0.174 mmol)、SPhos (0.4 g, 0.976 mmol)及K₃PO₄ (4.80 g, 20.9 mmol)於甲苯(125 ml)、DME (100 ml)及水(25 ml)中之溶液在氮氣下回流18小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，將其溶解於沸騰的甲苯(800 ml)中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發掉溶劑後，自甲苯再結晶化合物A14 (3.50 g, 70%)，產生白色固體。

合成化合物A17

合成化合物A17

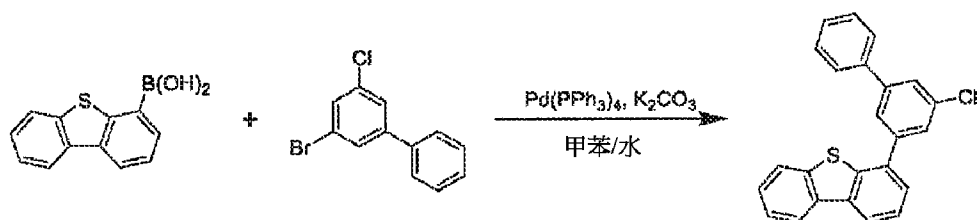


將2-(6-([1,1'-聯苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.51 g, 7.60 mmol)、2-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,6-二

苯基-1,3,5-三嗪(2.9 g, 6.91 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.190 g, 0.207 mmol)、SPhos (0.5 g, 1.220 mmol)及 K_3PO_4 (4.77 g, 20.7 mmol)於甲苯(125 ml)、DME (100 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約 22°C)之後，藉由過濾收集固體，將其溶解於沸騰的甲苯(800 ml)中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發掉溶劑後，自甲苯再結晶化合物 **A17** (3.75 g, 76%)，產生白色固體。

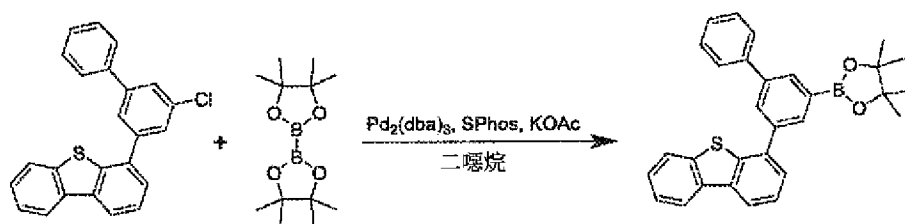
合成化合物A32

合成4-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩



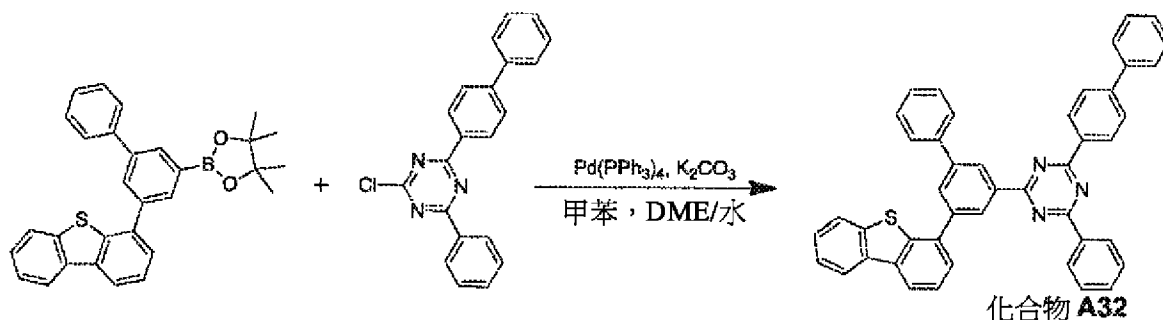
將3-溴-5-氯-1,1'-聯苯(14.8 g, 55.3 mmol)、二苯并[b,d]噻吩-4-基硼酸(12.62 g, 55.3 mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.639 g, 0.553 mmol)及 K_2CO_3 (15.29 g, 111 mmol)於甲苯(150 ml)及水(30 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約 22°C)之後，分離有機相。在蒸發掉溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (85/15, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之4-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩(15.4 g, 70%)。

合成2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉



將4-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩(11.88 g, 32.0 mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-八甲基-2,2'-雙(1,3,2-二氧雜硼啶)(16.27 g, 64.1 mmol)、Pd₂(dba)₃(280 mg)、SPhos(0.32 g, 0.78 mmol)及乙酸鉀(9.43 g, 96 mmol)於二噁烷(200 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22℃)之後，用水使反應混合物淬滅，且用EtOAc萃取。在蒸發掉溶劑之後，通過用庚烷/EtOAc(9/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，且自庚烷再結晶，產生呈白色固體狀之2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(11.1 g, 74.9%)。

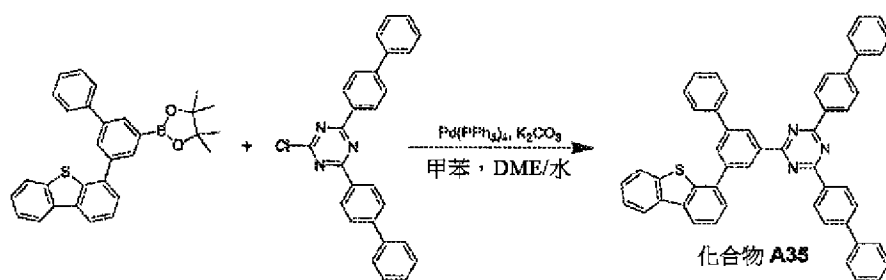
合成化合物A32



將2-([1,1'-聯苯]-4-基)-4-氯-6-苯基-1,3,5-三嗪(2.24 g, 6.52 mmol)、2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.01 g, 6.52 mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.151 g, 0.130 mmol)及K₂CO₃(1.801 g, 13.03 mmol)於甲苯(180 ml)、DME(30 ml)及水(30 ml)中之溶液在氮氣下回流12小時。在冷卻至室溫(約22℃)之後，藉由過濾收集固體，且連續用乙醇、水及乙醇洗滌。自甲苯再結晶粗產物，產生呈白色固體狀之化合物**A32**(2.7 g, 64%)。

合成化合物A35

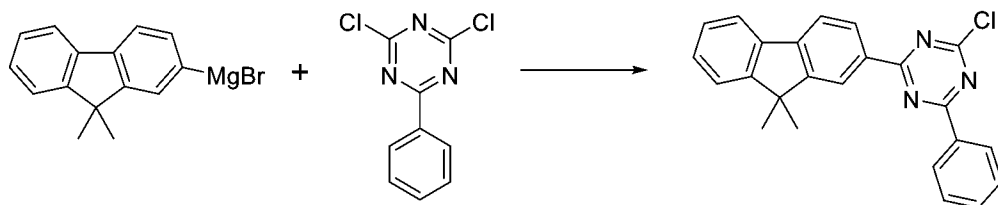
合成化合物A35



將2,4-二([1,1'-聯苯]-4-基)-6-氯-1,3,5-三嗪(3.0 g, 7.14 mmol)及2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.30 g, 7.14 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.164 g, 0.14 mmol)及K₂CO₃ (1.975 g, 14.29 mmol)於甲苯(100 ml)、DME (100 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，且連續用乙醇、水、乙醇及庚烷洗滌。將粗產物溶解於熱甲苯中，經由短矽膠塞過濾，且自甲苯再結晶，產生呈白色固體狀之化合物A35 (3.7 g, 72%產率)。

合成化合物A38

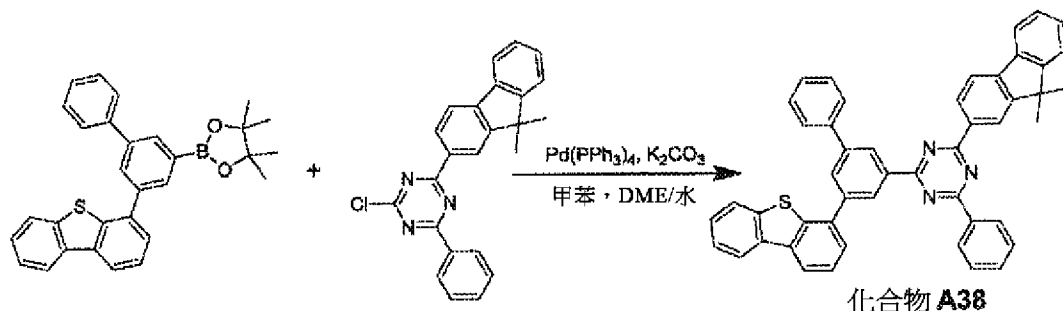
合成2-氯-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪



在室溫(約22°C)下將藉由在氮氣下在無水THF (100 ml)中使2-溴-9,9-二甲基-9H-芴(19.33 g, 70.8 mmol)及Mg (2.58 g, 106 mmol)回流2小時製備之格林納試劑(Grignard reagent)溶液逐滴轉移至2,4-二氯-6-苯基-1,3,5-三嗪(8.0 g, 35.4 mmol)於無水THF (50 ml)中之溶液中。將反應混合物在氮氣下攪拌隔夜(約12小時)，用濃HCl溶液淬滅，且用EtOAc萃取。分離有機相，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/DCM (9/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，且自庚烷再結晶，產生呈黃色晶體狀之

2-氯-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(11 g, 81%)。

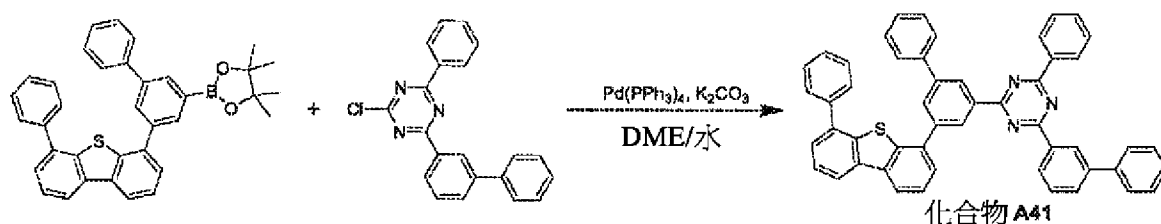
合成化合物A38



將2-氯-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(3.0 g, 7.82 mmol)、2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.61 g, 7.82 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.18 g, 0.156 mmol) 及K₂CO₃ (2.16 g, 15.63 mmol)於甲苯(100 ml)、DME (100 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流12 h。在冷卻至室溫(約22°C)後，分離有機相，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/DCM (6/4, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析及用庚烷濕磨來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之化合物A38 (4.3 g, 80%)。

合成化合物A41

合成化合物A41

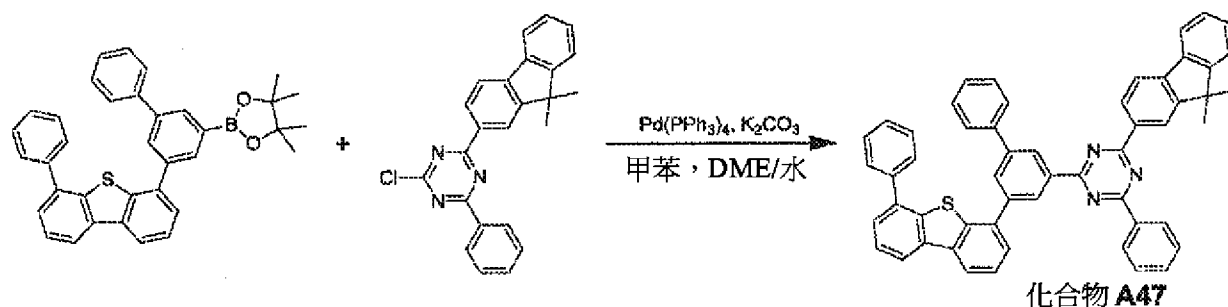


4,4,5,5-四甲基-2-(5-(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-1,3,2-二氧雜硼啶(1.98 g, 3.68 mmol)、2-([1,1'-聯苯]-3-基)-4-氯-6-苯基-1,3,5-三嗪(1.264 g, 3.68 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.085 g, 0.074 mmol)及K₂CO₃ (1.016 g, 7.35 mmol)於DME (150 ml)及水(5 ml)中之溶

液在氮氣下回流12小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，連續用乙醇、水、乙醇及庚烷洗滌，隨後將其溶解於沸騰的甲苯中且經由短矽膠塞過濾。在蒸發掉溶劑後，自甲苯再結晶化合物A41 (2.3 g, 87%)，產生白色固體。

合成化合物A47

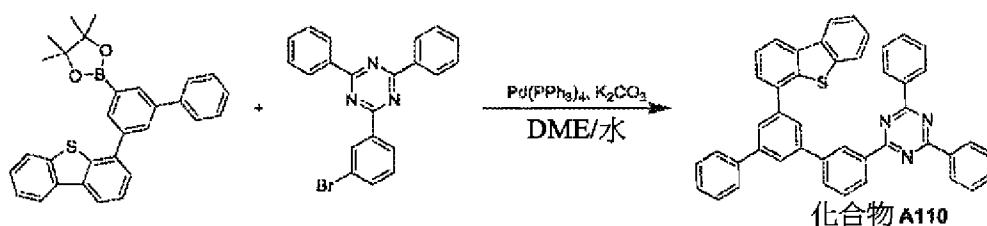
合成化合物A47



將4,4,5,5-四甲基-2-(5-(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-1,3,2-二氧雜硼啉(3.18 g, 5.91 mmol)、2-氯-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(2.267 g, 5.91 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.136 g, 0.118 mmol)及碳酸鉀(1.632 g, 11.81 mmol)於甲苯(30 ml)、DME (100 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機層，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/DCM (1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之化合物A47 (2.1 g, 47%)。

合成化合物A110

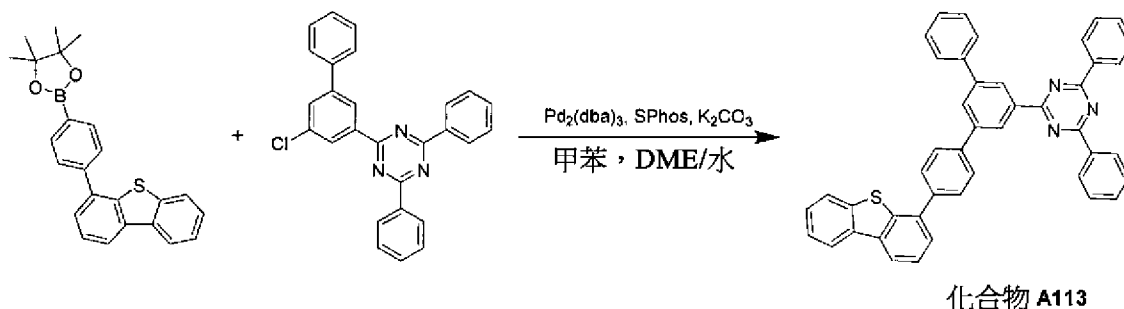
合成化合物A110



將2-(5-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(1.70 g, 3.68 mmol)、2-(3-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(1.43 g, 3.68 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.085 g, 0.074 mmol)及K₂CO₃ (1.02 g, 7.35 mmol)於DME (120 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流14小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集沈澱，連續用乙醇、水、乙醇及庚烷洗滌，產生呈白色固體狀之**化合物A110** (2.1 g, 產率89%)。

合成化合物A113

合成化合物A113



將2-(5-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(3.4 g, 8.10 mmol)、2-(4-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.28 g, 8.50 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.222 g, 0.243 mmol)、SPhos (0.199 g, 0.486 mmol)及K₂CO₃ (3.36 g, 24.29 mmol)於甲苯(16 ml)、DME (48 ml)及水(16 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾來收集固體，且用乙醇濕磨。將粗產物溶解於沸騰的甲苯中，隨後經由短矽膠塞過濾，且自甲苯再結晶，產生呈白色固體狀之**化合物A113** (4.25 g, 82%)。

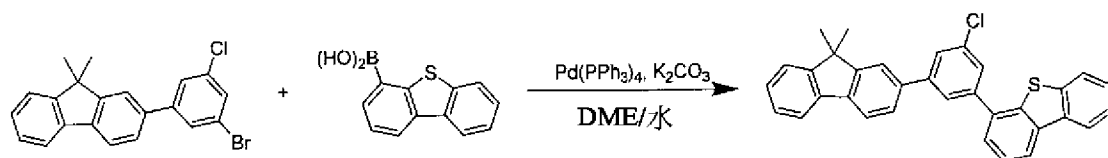
合成化合物A116

合成2-(3-溴-5-氯苯基)-9,9-二甲基-9H-菲



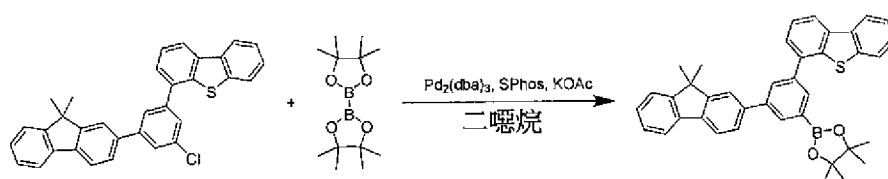
將(9,9-二甲基-9*H*-萸-2-基)硼酸(5.0 g, 21.0 mmol)、1,3-二溴-5-氯苯(14.19 g, 52.5 mmol)、(PPh₃)₄ (0.49 g, 0.42 mmol)及K₂CO₃ (5.80 g, 42.0 mmol)於甲苯(200 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流18小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機層，且蒸餾出過量的1,3-二溴-5-氯苯。藉由用庚烷/DCM (9/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈無色結晶固體狀之2-(3-溴-5-氯苯基)-9,9-二甲基-9*H*-萸(6.2 g, 77%)。

合成4-(3-氯-5-(9,9-二甲基-9*H*-萸-2-基)苯基)二苯并[*b,d*]噻吩



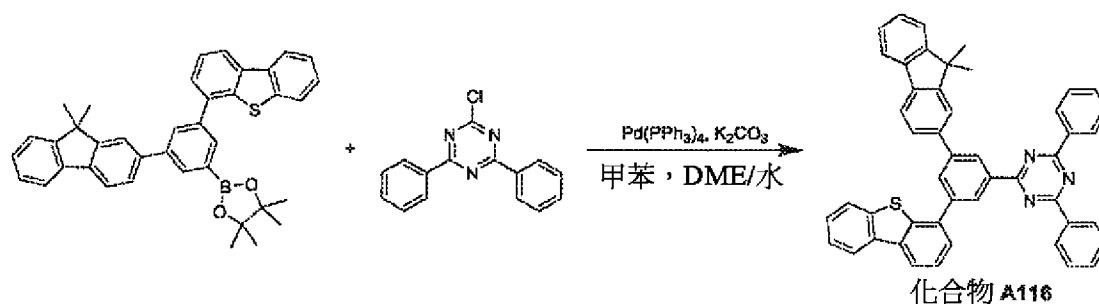
將2-(3-溴-5-氯苯基)-9,9-二甲基-9*H*-萸(7.7 g, 20.07 mmol)、二苯并[*b,d*]噻吩-4-基硼酸(4.58 g, 20.07 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.464 g, 0.401 mmol)及K₂CO₃ (5.55 g, 40.1 mmol)於DME (150 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流12小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機相，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/DCM (9/1到4/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化粗產物，產生呈白色結晶固體狀之4-(3-氯-5-(9,9-二甲基-9*H*-萸-2-基)苯基)二苯并[*b,d*]噻吩(9.0 g, 92%)。

合成2-(3-(二苯并[*b,d*]噻吩-4-基)-5-(9,9-二甲基-9*H*-萸-2-基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶



將4-(3-氯-5-(9,9-二甲基-9*H*-芴-2-基)苯基)二苯并[*b,d*]噻吩(9.5 g, 19.51 mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-八甲基-2,2'-雙(1,3,2-二氧雜硼啶) (9.91 g, 39.0 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.268 g, 0.293 mmol)、SPhos (0.240 g, 0.585 mmol)及乙酸鉀(5.74 g, 58.5 mmol)於二噁烷中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用水稀釋反應混合物，且用乙酸乙酯萃取。過濾且蒸發合併之有機萃取物。藉由用庚烷/DCM (1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化粗產物，產生呈白色結晶固體狀之2-(3-(二苯并[*b,d*]噻吩-4-基)-5-(9,9-二甲基-9*H*-芴-2-基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(7.8 g, 69.1%)。

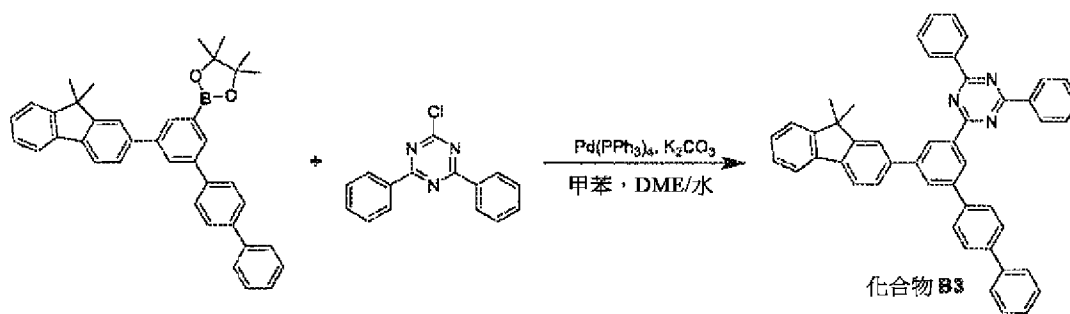
合成化合物A116



將2-(3-(二苯并[*b,d*]噻吩-4-基)-5-(9,9-二甲基-9*H*-芴-2-基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(5.84 g, 10.09 mmol)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.70 g, 10.09 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.233 g, 0.202 mmol)及K₂CO₃ (3.49 g, 25.2 mmol)於DME (100 ml)、甲苯(100 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集沈澱，隨後連續用水、乙醇及庚烷洗滌，產生呈白色固體狀之化合物A116 (5.5 g, 80%)

合成化合物B3

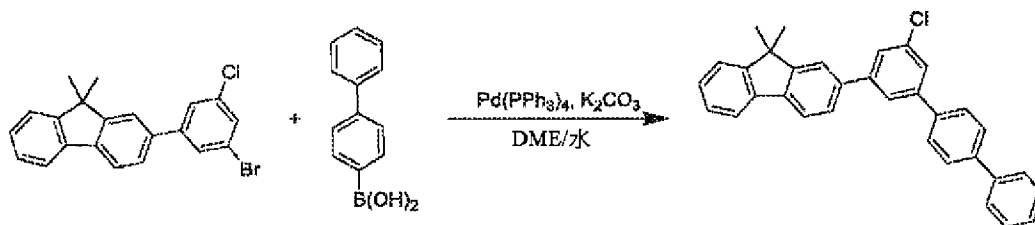
合成化合物B3



將2-(5-(9,9-二甲基-9H-萸-2-基)-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(3 g, 5.47 mmol)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(1.464 g, 5.47 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.126 g, 0.109 mmol)及K₂CO₃ (1.512 g, 10.94 mmol)於甲苯(75 ml)、DME (75 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流6小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集沈澱，隨後連續用水、乙醇、庚烷及乙醇洗滌，產生呈白色固體狀之化合物**B3** (2.8 g, 78%)。

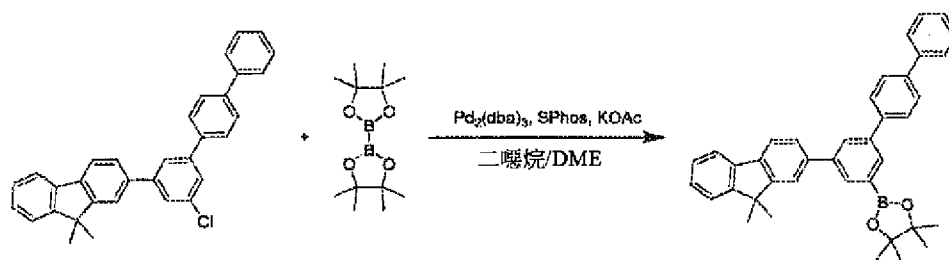
合成化合物B6

合成2-(5-氯-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-9,9-二甲基-9H-萸



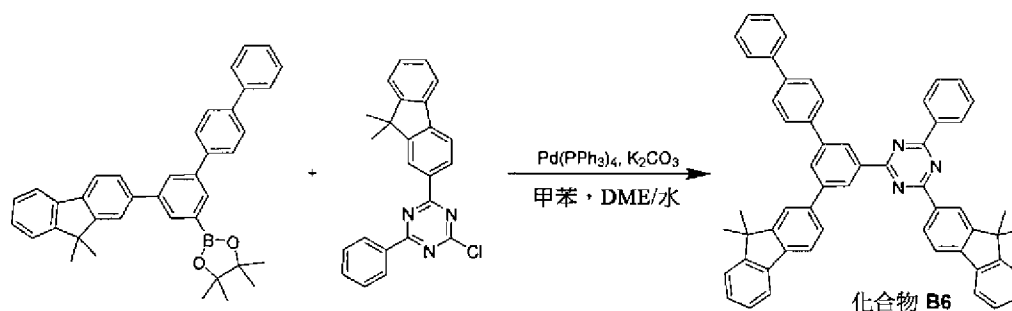
將2-(3-溴-5-氯苯基)-9,9-二甲基-9H-萸(5 g, 13.03 mmol)、[1,1'-聯苯]-4-基硼酸(2.58 g, 13.03 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.301 g, 0.261 mmol)及K₂CO₃ (5.40 g, 39.1 mmol)於DME (150 ml)及水(25 ml)中之溶液在氮氣下回流12小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機相，且蒸發溶劑。藉由用庚烷/DCM (1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化粗產物，且自庚烷再結晶，產生呈無色晶體狀之2-(5-氯-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-9,9-二甲基-9H-萸(3.6 g, 60.5%)。

合成2-(5-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶



將2-(5-氯-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-9,9-二甲基-9H-芴(6.8 g, 14.88 mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-八甲基-2,2'-雙(1,3,2-二氧雜硼啶) (7.56 g, 29.8 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.273 g, 0.298 mmol)、SPhos (0.244 g, 0.595 mmol)及乙酸鉀(2.92 g, 29.8 mmol)於二噁烷(100 ml)及DME (100 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，過濾出固體。在蒸發掉溶劑後，藉由用庚烷/DCM (1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之2-(5-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(5.0 g, 61.3%)。

合成化合物B6

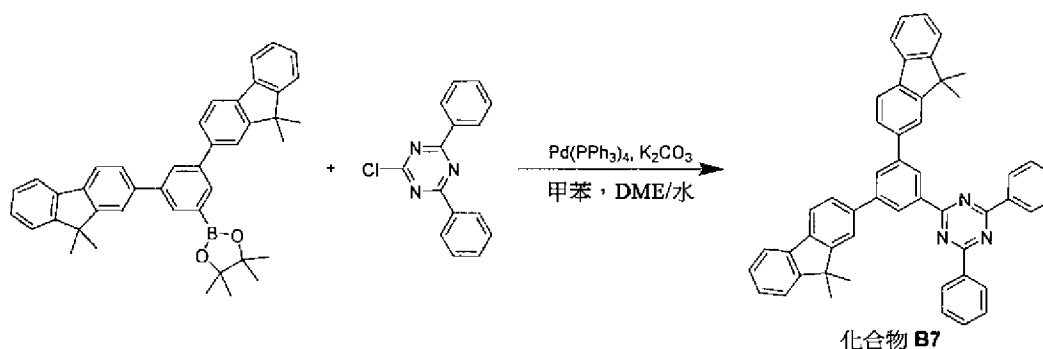


將2-(5-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-[1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(5.17 g, 9.43 mmol)、2-氯-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(3.62 g, 9.43 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.218 g, 0.189 mmol)及碳酸鉀(2.61 g, 18.85 mmol)於DME (75 ml)、甲苯(75

ml)及水(10 ml)中之溶液在氮氣下回流15小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，隨後連續用乙醇、水、乙醇及庚烷洗滌，產生呈白色結晶固體狀之化合物**B6** (4.2 g, 58%)。

合成化合物B7

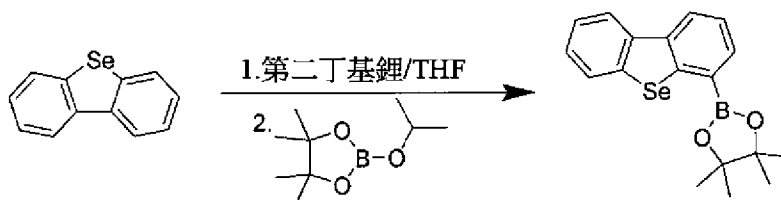
合成化合物B7



將2-(3,5-雙(9,9-二甲基-9*H*-芴-2-基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(4 g, 6.80 mmol)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(1.819 g, 6.80 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.079 g, 0.068 mmol)及K₂CO₃ (1.878 g, 13.59 mmol)於DME (75 ml)、甲苯(75 ml)及水(10 mL)中之溶液在氮氣下回流18小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，隨後連續用乙醇、水、乙醇及庚烷洗滌，產生呈白色結晶固體狀之化合物**B7** (3.5 g, 74%)。

合成化合物C21

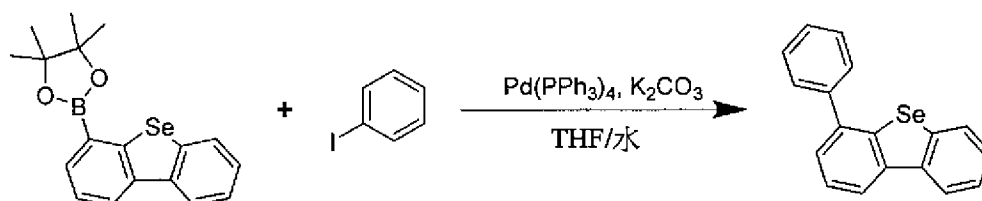
合成2-(二苯并[b,d]硒吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶



在-78°C下向二苯并[b,d]硒吩(7 g, 30.3 mmol)於無水THF (151 ml)中之溶液中逐滴添加第二丁基鋰(23.79 ml, 33.3 mmol)之溶液。在此溫

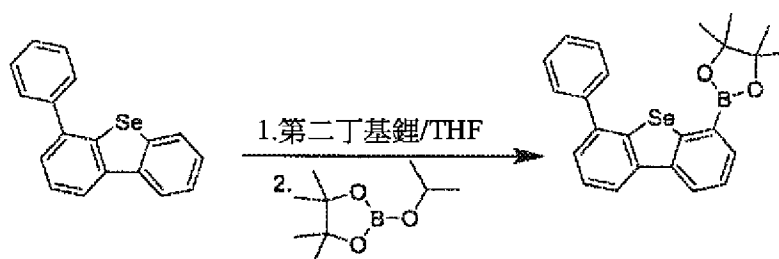
度下攪拌所得混合物2小時，且升溫至室溫(約22°C)。在將混合物冷卻到-78°C之後，經約1分鐘藉由注射器用2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(7.72 ml, 37.9 mmol)使混合物淬滅，隨後逐步升溫至室溫(約22°C)且攪拌隔夜(約12小時)。用甲醇使所得混合物淬滅，且在真空中移除溶劑。藉由用庚烷/DCM (4/1到1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化粗產物，產生呈黃色油狀之2-(二苯并[b,d]硒吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(7 g, 65%)。

合成4-苯基二苯并[b,d]硒吩



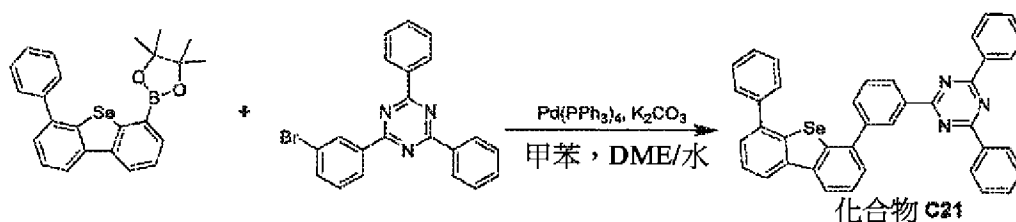
將2-(二苯并[b,d]硒吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(7.0 g, 19.60 mmol)、碘苯(2.62 ml, 23.52 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.453 g, 0.392 mmol)及K₂CO₃ (8.13 g, 58.8 mmol)於THF (78 ml)及水(19.60 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用乙酸乙酯及水分配反應混合物。分離有機相，隨後用鹽水洗滌且經Na₂SO₄乾燥。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (9/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈無色油狀之4-苯基二苯并[b,d]硒吩(5.3 g, 88%)。

合成4,4,5,5-四甲基-2-(6-苯基二苯并[b,d]硒吩-4-基)-1,3,2-二氧雜硼啉



將4-苯基二苯并[b,d]硒吩(5.3 g, 17.25 mmol)於THF (108 ml)中之溶液冷卻至-78°C, 且用第二丁基鋰於環己烷中之1.4 M溶液(16.63 ml, 23.29 mmol)緩慢處理。在此-78°C下攪拌所得混合物1小時, 隨後使之升溫至室溫(約22°C)。將深紅色溶液冷卻至-78°C, 且藉由注射器用2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(5.28 ml, 25.9 mmol)淬滅。使反應混合物逐步升溫至室溫(約22°C), 且攪拌16小時。用甲醇使所得混合物淬滅, 隨後在真空中移除溶劑。將殘餘物溶解於DCM中, 用水及鹽水洗滌, 且隨後經Na₂SO₄乾燥。在蒸發溶劑之後, 自庚烷再結晶粗產物, 產生呈淺黃色固體狀之4,4,5,5-四甲基-2-(6-苯基二苯并[b,d]硒吩-4-基)-1,3,2-二氧雜硼啶(5 g, 67%)。

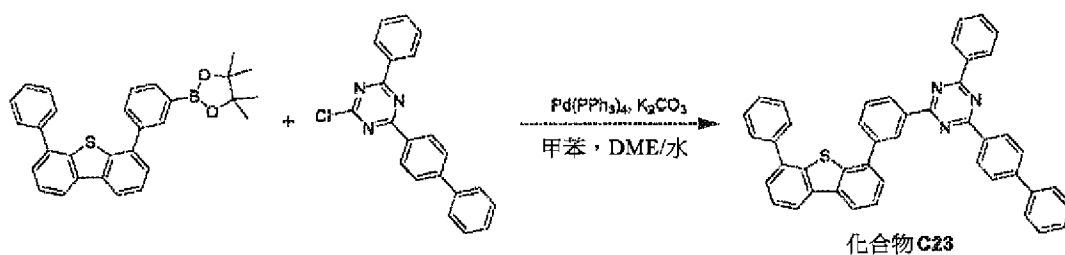
合成化合物C21



將4,4,5,5-四甲基-2-(6-苯基二苯并[b,d]硒吩-4-基)-1,3,2-二氧雜硼啶(2.0 g, 4.62 mmol)、2-(3-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(1.882 g, 4.85 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.160 g, 0.139 mmol)及K₂CO₃ (1.914 g, 13.85 mmol)於DME (28 ml)、甲苯(9 ml)及水(9 ml)中之溶液在氮氣下回流8小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後, 藉由過濾收集固體, 隨後用水及乙醇洗滌, 溶解於沸騰的甲苯中, 且最後經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後, 自甲苯再結晶呈白色固體狀之化合物C21 (2.6 g, 74%)。

合成化合物C23

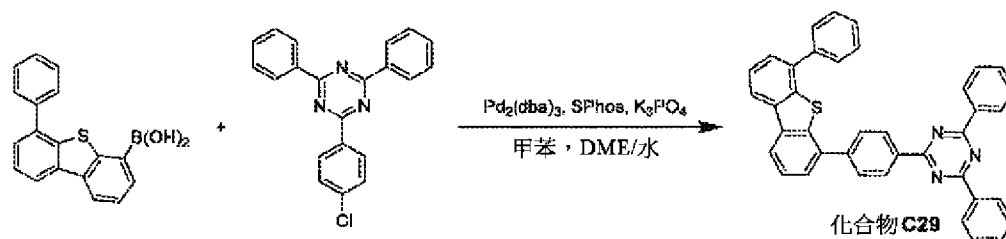
合成化合物C23



將4,4,5,5-四甲基-2-(3-(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)苯基)-1,3,2-二氧雜硼啶(3.0 g, 6.49 mmol)、2-([1,1'-聯苯]-4-基)-4-氯-6-苯基-1,3,5-三嗪(2.454 g, 7.14 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.375 g, 0.324 mmol)及K₂CO₃ (2.69 g, 19.46 mmol)於甲苯(13 ml)、DME (39 ml)及水(13 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，隨後用乙醇濕磨，溶解於沸騰的甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自甲苯再結晶呈白色固體狀之化合物C23 (3.78 g, 91%)。

合成化合物C29

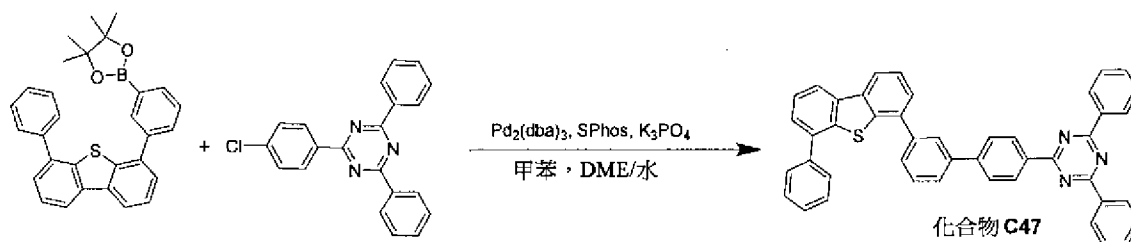
合成化合物C29



將2-(4-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.75 g, 8.00 mmol)、6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基硼酸(2.68 g, 8.80 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.20 g, 0.22 mmol)及SPhos (0.40 g, 0.98 mmol)及K₃PO₄ (5.52 g, 24.00 mmol)於甲苯(150 ml)、DME (125 ml)及水(30 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集沈澱，且用水及DCM洗滌，隨後將其溶解於沸騰的甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自甲苯再結晶化合物C29 (2.42 g, 53%)，得到白色固體。

合成化合物C47

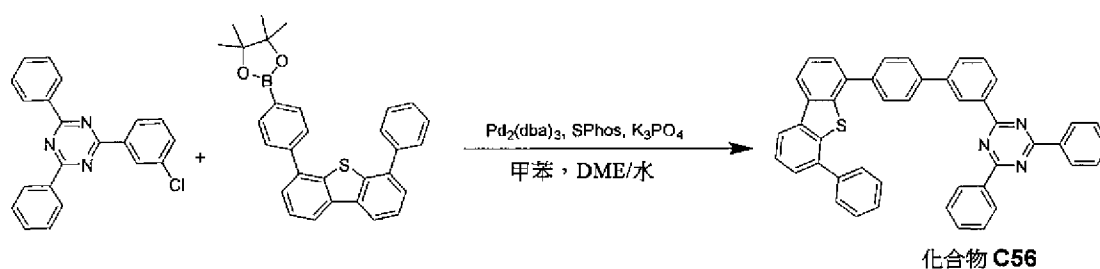
合成化合物C47



將4,4,5,5-四甲基-2-(3-(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)苯基)-1,3,2-二氧雜硼啉(3.09 g, 6.69 mmol)、2-(4-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.3 g, 6.69 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.123 g, 0.134 mmol)及SPhos (0.110 g, 0.268 mmol)及K₃PO₄ (4.26 g, 20.07 mmol)於甲苯(20 ml)、DME (30 ml)及水(10 ml)中之懸浮液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，隨後將其溶解於沸騰的甲苯中，經由短矽膠塞過濾，且自甲苯再結晶，產生呈白色固體狀之化合物C47 (3.51 g, 81%)。

合成化合物C56

合成化合物C56

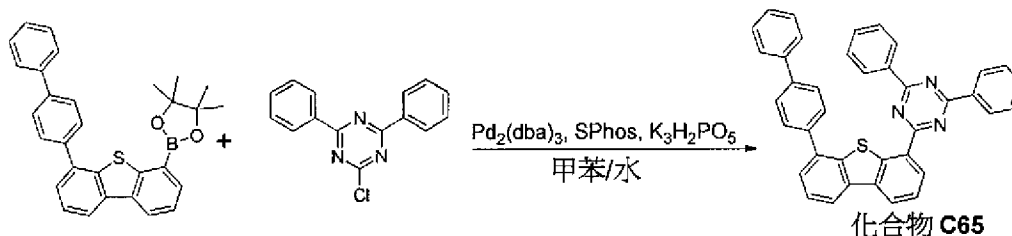


將4,4,5,5-四甲基-2-(4-(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)苯基)-1,3,2-二氧雜硼啉(3.5 g, 7.57 mmol)、2-(3-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.169 g, 6.31 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.17 g, 0.19 mmol)、SPhos (0.23 g, 0.57 mmol)及K₃PO₄ (4.02 g, 18.9 mmol)於甲苯(100 ml)、DME (100 ml)及水(10 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，經由矽膠塞過濾反應混合物。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM

(9/1到4/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析及自DCM再結晶來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之化合物**C56** (2.2 g, 54%)。

合成化合物C65

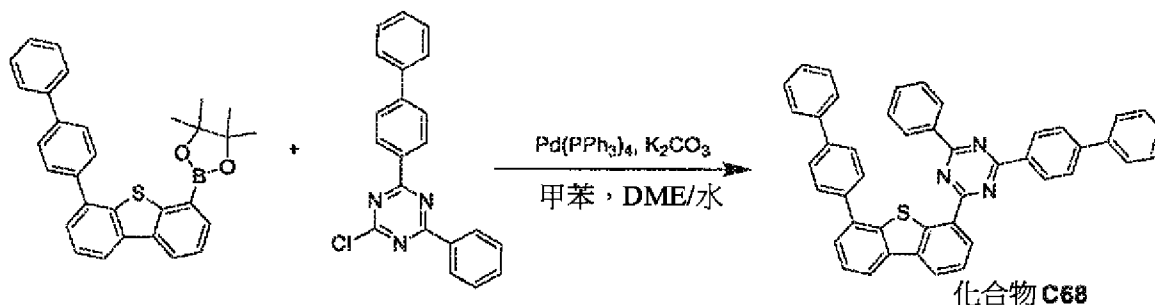
合成化合物C65



將2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(3.75 g, 8.11 mmol)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.61 g, 9.73 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.149 g, 0.162 mmol)、SPhos (0.266 g, 0.649 mmol)及磷酸鉀水合物(3.74 g, 16.22 mmol)於甲苯(90 mL)及水(10 mL)中之混合物溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在完成後，蒸發甲苯，且用二氯甲烷萃取混合物(不完全可溶)，且用鹽水及水洗滌。合併有機層，經Na₂SO₄乾燥，且在真空下濃縮。用乙醇且隨後用甲苯濕磨粗物質，產生呈淡黃色固體狀之化合物**C65** (3.0 g, 65%)。

合成化合物C68

合成化合物C68

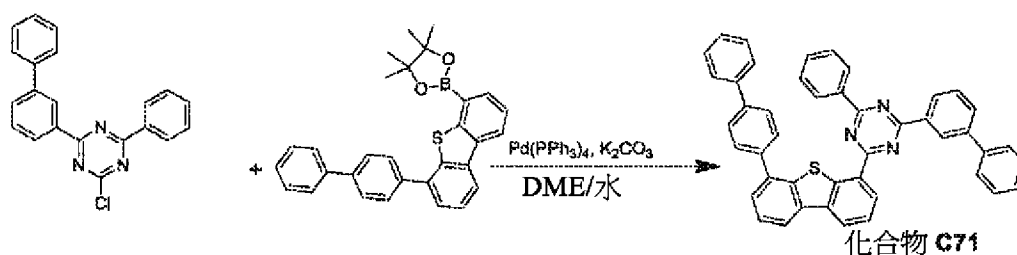


將2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(4 g, 8.65 mmol)、2-([1,1'-聯苯]-4-基)-4-氯-6-苯基-

1,3,5-三嗪(2.75 g, 8.00 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.28 g, 0.24 mmol)及K₂CO₃ (3.31 g, 24 mmol)於甲苯(125 ml)、DME (100 ml)及水(25 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集沈澱，隨後用甲苯沖洗。用甲苯及甲醇連續濕磨粗產物，隨後在真空下昇華，產生呈白色固體狀之化合物C68 (4.25 g, 83%)。

合成化合物C71

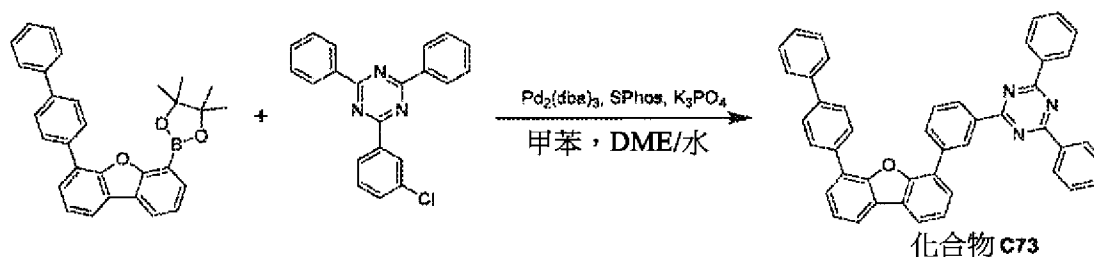
合成化合物C71



將2-([1,1'-聯苯]-3-基)-4-氯-6-苯基-1,3,5-三嗪(2.1 g, 6.11 mmol)、2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(2.82 g, 6.11 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.141 g, 0.122 mmol)及K₂CO₃ (2.53 g, 18.32 mmol)於DME (150 ml)及水(20 ml)中之懸浮液在氮氣下回流3小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，隨後用水及乙醇洗滌。將固體溶解於沸騰的甲苯中，經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自甲苯再結晶粗產物，產生呈淡黃色固體狀之化合物C71 (2.9 g, 74%)。

合成化合物C73

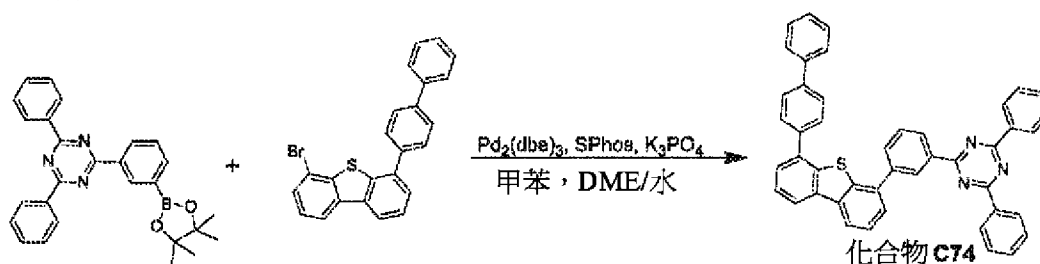
合成化合物C73



將2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]呋喃-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(4.2 g, 9.41 mmol)、2-(3-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(3.46 g, 10.07 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.258 g, 0.282 mmol)、SPhos (0.463 g, 1.129 mmol)及K₃PO₄ (6.49 g, 28.2 mmol)於甲苯(125 ml)、DME (100 ml)及水(25 ml)中之溶液在氮氣下回流18小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，將其溶解於沸騰的甲苯中，經由短矽膠塞過濾，且自甲苯再結晶，產生呈白色固體狀之化合物C73 (4.5 g, 76%)。

合成化合物C74

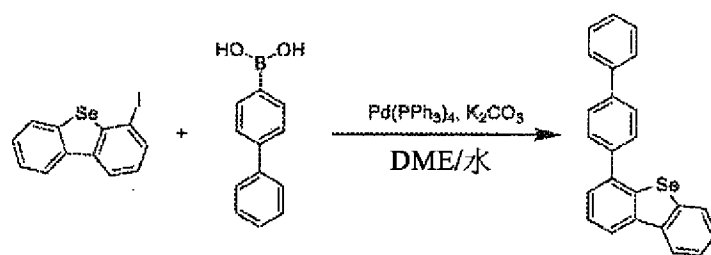
合成化合物C74



2,4-二苯基-6-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶-2-基)苯基)-1,3,5-三嗪(2.64 g, 6.07 mmol)、4-([1,1'-聯苯]-4-基)-6-溴二苯并[b,d]噻吩(2.53 g, 6.10 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.139 g, 0.152 mmol)、SPhos (0.187 g, 0.455 mmol)及K₃PO₄ (2.146 g, 10.11 mmol)於甲苯(75 ml)、DME (75 ml)及水(7.50 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，用庚烷/DCM (4/1到7/3, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析及自庚烷再結晶來純化，產生呈白色固體狀之化合物C74 (2.0 g, 61%)。

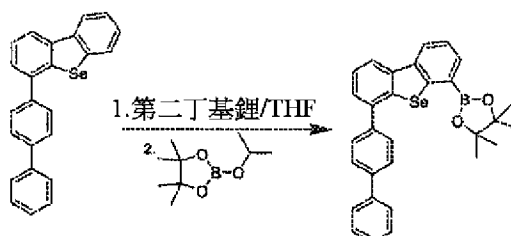
合成化合物C75

合成4-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩



將4-碘-二苯并[b,d]硒吩(10 g, 28.0 mmol)、[1,1'-聯苯]-4-基硼酸(8.32 g, 42.0 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (1.624 g, 1.400 mmol)及K₂CO₃ (7.74 g, 56.0 mmol)於DME (200 ml)及水(40 ml)中之溶液在氮氣下回流24小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，用水及庚烷洗滌，隨後溶解於沸騰的甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自甲苯再結晶呈白色固體狀之4-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]硒吩(8.0 g, 74%)。

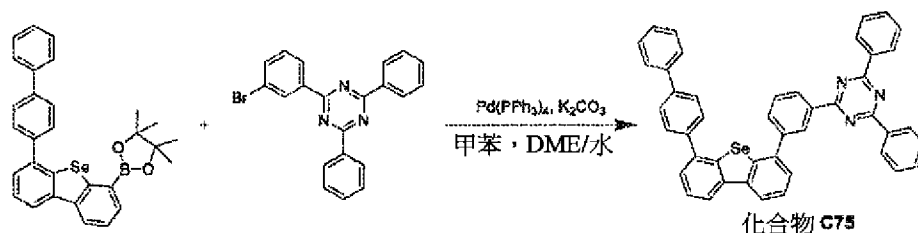
合成2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]硒吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶



在-78°C下向4-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]硒吩(5.5 g, 14.35 mmol)於THF (150 ml)中之溶液中逐滴添加第二丁基鋰之溶液(18.45 ml, 25.8 mmol)。將所得混合物在-78°C下攪拌5小時，隨後一次性添加2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(5.12 ml, 25.1 mmol)。將反應混合物逐步升溫至室溫(約22°C)且攪拌16小時，隨後用水淬滅。所得混合物用乙酸乙酯萃取，隨後經Na₂SO₄乾燥。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (4/1到3/2, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]硒吩-4-基)-4,4,5,5-四

甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(2.6 g, 36%)。

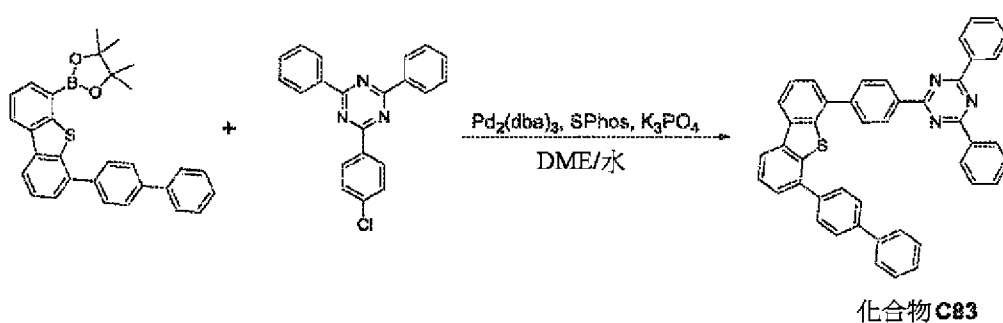
合成化合物C75



將2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]硒吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(2.62 g, 5.15 mmol)、2-(3-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2 g, 5.15 mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.179 g, 0.155 mmol)及K₂CO₃(1.424 g, 10.30 mmol)於DME(150 ml)、甲苯(50 ml)及水(40 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，連續用水及庚烷洗滌，隨後將其溶解於沸騰的甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。藉由連續自庚烷及甲苯再結晶來進一步純化粗產物，產生呈白色晶體狀之化合物C75(2.1 g, 59%)。

合成化合物C83

合成化合物C83



將2-(4-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.409 g, 7.01 mmol)、2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(2.7 g, 5.84 mmol)、Pd₂(dba)₃(0.107 g, 0.117 mmol)、SPhos(0.096 g, 0.234 mmol)及K₂CO₃(2.421 g, 17.52 mmol)於甲苯(20 ml)、DME

(65 ml)及水(15 ml)中之懸浮液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用水稀釋反應混合物。藉由過濾收集固體，用水及乙醇洗滌，將其再溶解於熱甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自EtOAc再結晶殘餘物，產生呈白色固體狀之化合物**C83** (3.2 g, 85%)。

合成化合物C101

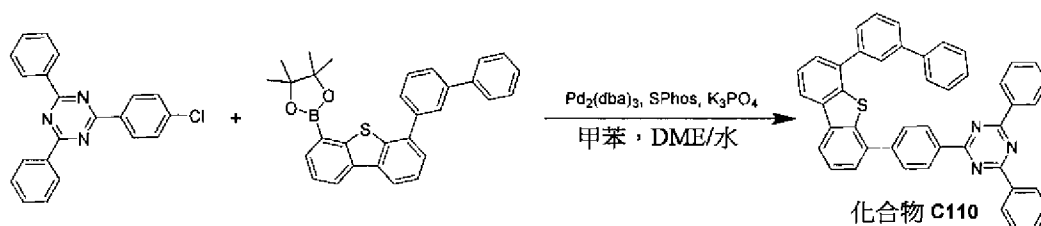
合成化合物C101



將2-(6-([1,1'-聯苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(4.03 g, 8.73 mmol)、2-(3-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.50 g, 7.27 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.20 g, 0.22 mmol)、SPhos (0.27 g, 0.65 mmol)及K₃PO₄ (4.63 g, 21.8 mmol)於甲苯(100 ml)、DME (100 ml)及水(10 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用DCM稀釋反應混合物，且經由矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (4/1至3/2, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析及自DCM再結晶來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之化合物**C101** (1.6 g, 43%)。

合成化合物C110

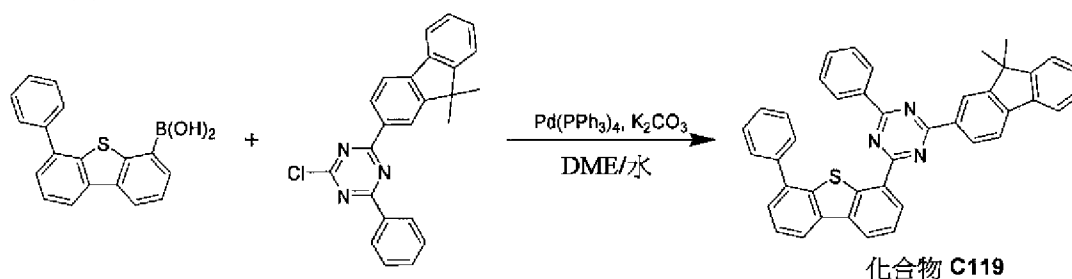
合成化合物C110



將2-(6-([1,1'-聯苯]-3-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.1 g, 6.70 mmol)、2-(4-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.54 g, 7.37 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.123 g, 0.134 mmol)及SPhos (0.110 g, 0.268 mmol)及K₃PO₄ (4.27 g, 20.11 mmol)於甲苯(20.00 ml)、DME (30.0 ml)及水(10 ml)中之懸浮液在氮氣下回流隔夜。在冷卻至室溫之後，將其用水稀釋，且藉由過濾收集固體且用乙醇洗滌。將粗產物溶解於沸騰的甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發掉溶劑後，自甲苯再結晶呈白色固體狀之化合物**C110** (4.2 g, 97%)。

合成化合物C119

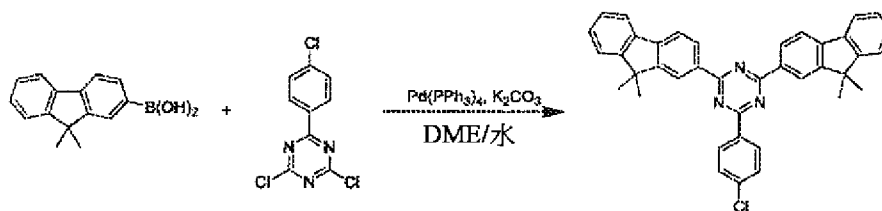
合成化合物C119



將(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)硼酸(3.14 g, 10.32 mmol)、2-氯-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(3.6 g, 9.38 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.217 g, 0.188 mmol)及K₂CO₃ (3.89 g, 28.1 mmol)於DME (180 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流14小時。在冷卻至室溫(約22 °C)之後，藉由過濾收集固體，連續用甲醇、水、乙醇、乙酸乙酯及庚烷洗滌，隨後將其溶解於二氯甲烷中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，用乙醇及庚烷濕磨粗產物，產生呈白色固體狀之化合物**C119** (4.0 g, 70%)。

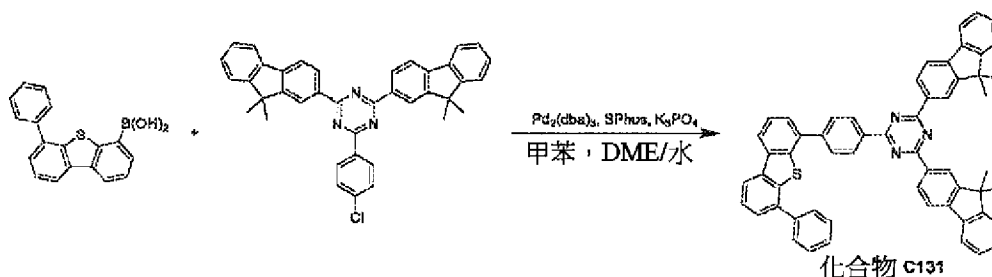
合成化合物C131

合成2-(4-氯苯基)-4,6-雙(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-1,3,5-三嗪



將2,4-二氯-6-(4-氯苯基)-1,3,5-三嗪(5 g, 19.19 mmol)、(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)硼酸(9.14 g, 38.4 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.444 g, 0.384 mmol)及K₂CO₃ (7.96 g, 57.6 mmol)於DME (150 ml)及水(15 ml)中之溶液在氮氣下回流13小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機相。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (4/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之2-(4-氯苯基)-4,6-雙(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-1,3,5-三嗪(5.43 g, 49.1%)。

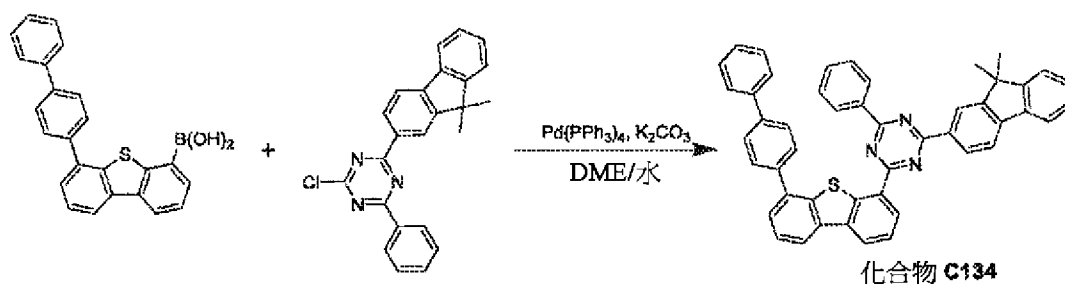
合成化合物C131



2-(4-氯苯基)-4,6-雙(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-1,3,5-三嗪(5.43 g, 9.42 mmol)、(6-苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)硼酸(2.87 g, 9.42 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.129 g, 0.141 mmol)、SPhos (0.116 g, 0.283 mmol)及K₃PO₄ (4.34 g, 18.85 mmol)於DME (200 ml)及水(25 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，分離有機相且藉由用庚烷/DCM (1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化，產生呈白色固體狀之化合物C131。

合成化合物C134

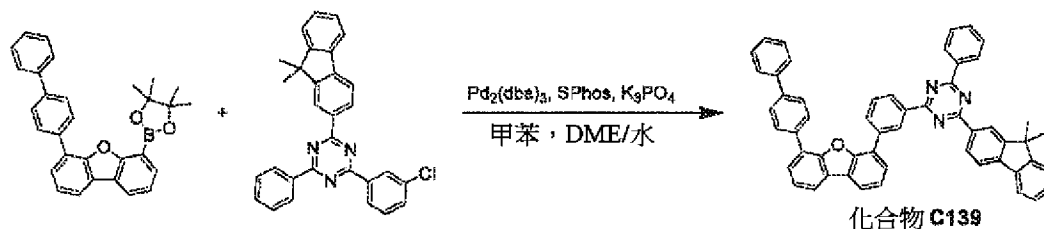
合成化合物C134



將(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)硼酸(2.25 g, 5.92 mmol)、2-氯-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(2.4 g, 6.25 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.137 g, 0.118 mmol)及K₂CO₃ (2.453 g, 17.75 mmol)於DME (200 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流14小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，連續用甲醇、水、乙醇、乙酸乙酯及庚烷洗滌，隨後將其溶解於沸騰的甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，用乙醇及庚烷濕磨粗產物，產生化合物C134 (3.0 g, 75%)。

合成化合物C139

合成化合物C139

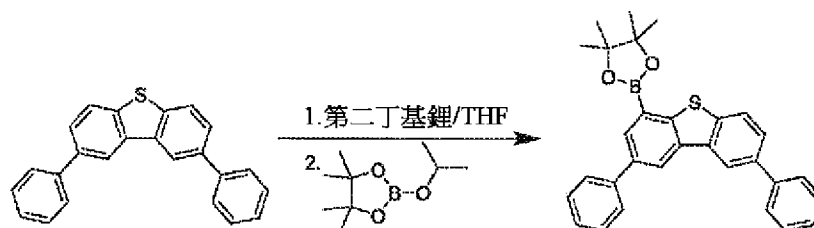


將2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]呋喃-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(4.41 g, 9.89 mmol)、2-(3-氯苯基)-4-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(4.25 g, 9.24 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.211 g, 0.231 mmol)、SPhos (0.379 g, 0.924 mmol)及K₃PO₄ (6.38 g, 27.7 mmol)於甲苯(125 ml)、DME (100 ml)及水(30 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用甲苯萃取反應混合物。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/甲苯(4/1到1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層

析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之化合物C139 (4.1 g, 59.7%)。

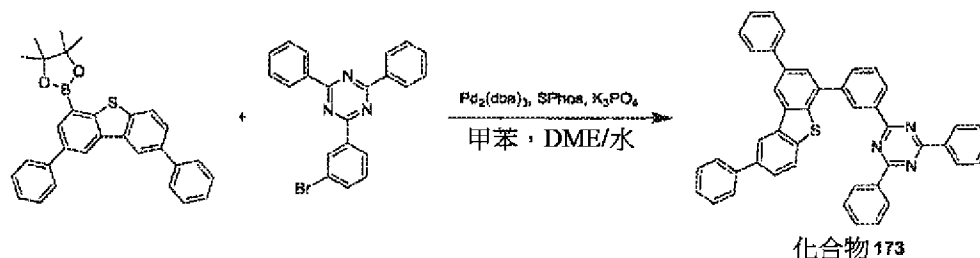
合成化合物C173

合成2-(2,8-二苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶



在 -78°C 下向2,8-二苯基二苯并[b,d]噻吩(7.45 g, 22.14 mmol)於無水THF中的溶液中逐滴添加第二丁基鋰於環己烷中的溶液(28.5 ml, 39.9 mmol)。將反應混合物在 -78°C 下攪拌2小時，同時以1 mL/min之速率添加2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(7.21 g, 38.8 mmol)。使反應混合物逐步升溫至室溫(約 22°C)，且攪拌16小時，隨後用10% NH_4Cl 水溶液淬滅。用乙酸乙酯萃取所得混合物。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，且隨後自庚烷再結晶，產生呈白色晶體狀之2-(2,8-二苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(5.5 g, 53.7%)。

合成化合物173

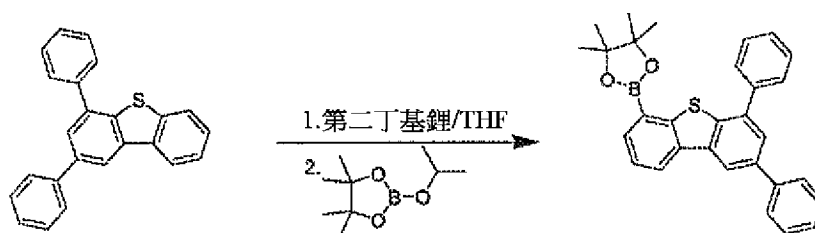


將2-(2,8-二苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.03 g, 6.55 mmol)、2-(3-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(2.54 g, 6.55 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.090 g, 0.098 mmol)、SPhos (0.081 g, 0.197

mmol)及 K_3PO_4 (3.02 g, 13.11 mmol)於DME (100 ml)、甲苯(100 ml)及水(10 ml)中之溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，連續用乙醇、水、乙醇及庚烷洗滌，且隨後用沸騰的甲苯濕磨，產生呈白色固體狀之化合物**173** (4.0 g, 95%)。

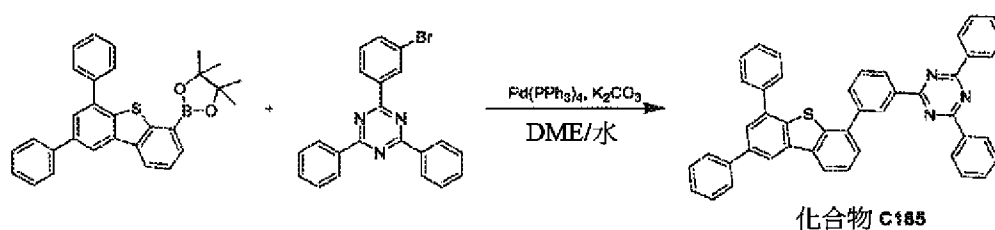
合成化合物C185

合成2-(6,8-二苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶



在-78°C下向2,4-二苯基二苯并[b,d]噻吩(10 g, 29.7 mmol)於無水THF中之溶液中逐滴添加第二丁基鋰於環己烷中之溶液(38.2 ml, 53.5 mmol)。將反應混合物在-78°C下攪拌2小時，同時以1 mL/min之速率添加2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(10.61 ml, 52.0 mmol)。使反應混合物逐步升溫至室溫(約22°C)，且攪拌16小時，隨後用10% NH_4Cl 水溶液淬滅。用乙酸乙酯萃取所得混合物。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (4/1到0/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，隨後自庚烷再結晶，得到呈白色晶體狀之2-(6,8-二苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(9.5 g, 69%)。

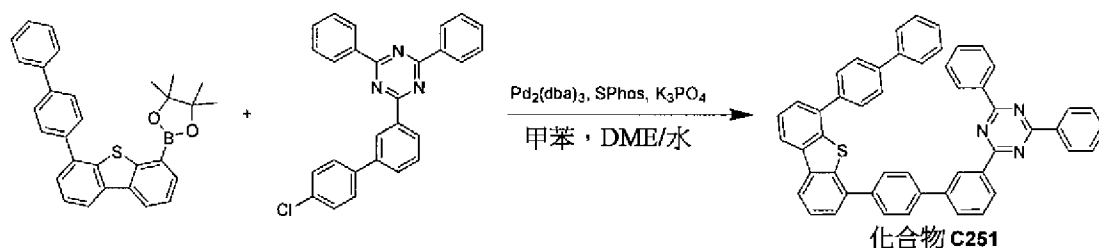
合成化合物C185



將2-(6,8-二苯基二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(4.29 g, 9.27 mmol)、2-(3-溴苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(3 g, 7.73 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.269 g, 0.232 mmol)及K₂CO₃ (2.14 g, 15.45 mmol)於DME (200 ml)及水(40.0 ml)中之溶液在氮氣下回流5小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，將其溶解於沸騰的二甲苯中，隨後經由短矽膠塞過濾，且自二甲苯再結晶，產生呈白色固體狀之化合物C185 (2.6 g, 52.3%)。

合成化合物C251

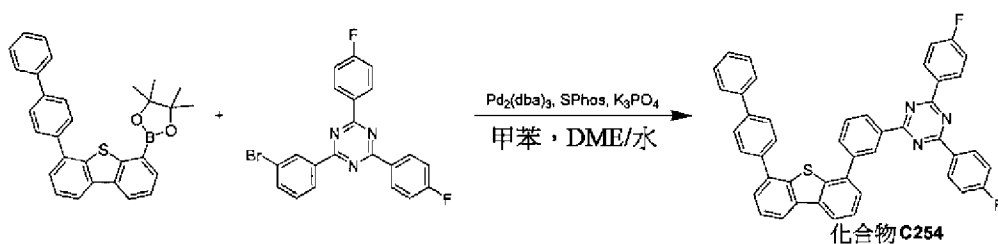
合成化合物C251



將2-(4'-氯-[1,1'-聯苯]-3-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(3.0 g, 7.14 mmol)、2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.53 g, 7.64 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.196 g, 0.214 mmol)、SPhos (0.40 g, 0.976 mmol)及K₃PO₄ (4.93 g, 21.43 mmol)於DME (80 ml)、甲苯(160 ml)及水(25 ml)中之溶液回流18小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，用水洗滌，隨後將其溶解於沸騰的甲苯中且經由短矽膠塞過濾，且自甲苯再結晶，產生呈白色固體狀之化合物C251 (3.43 g, 67%)。

合成化合物C254

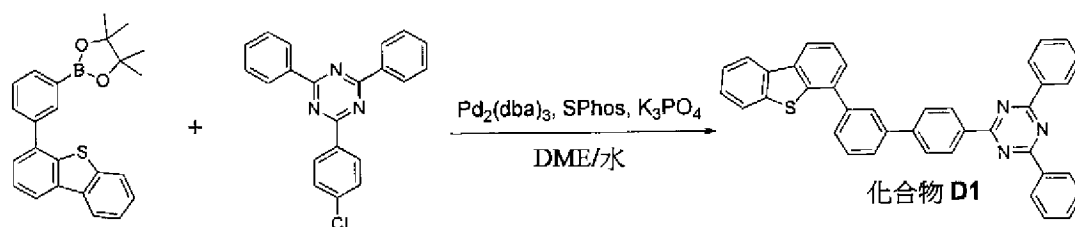
合成化合物C254



將2-(6-([1,1'-聯苯]-4-基)二苯并[b,d]噻吩-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(2.72 g, 5.89 mmol)、2-(3-溴苯基)-4,6-雙(4-氟苯基)-1,3,5-三嗪(2.5 g, 5.89 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.081 g, 0.088 mmol)、SPhos (0.073 g, 0.177 mmol)及K₃PO₄ (2.71 g, 11.79 mmol)於DME (200 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流18小時。在冷卻至室溫(約22 °C)之後，藉由過濾收集固體，且藉由用庚烷/DCM (1/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化，且自庚烷再結晶，產生呈白色晶體狀之化合物 C254 (2.5 g, 62%)。

合成化合物D1

合成化合物D1

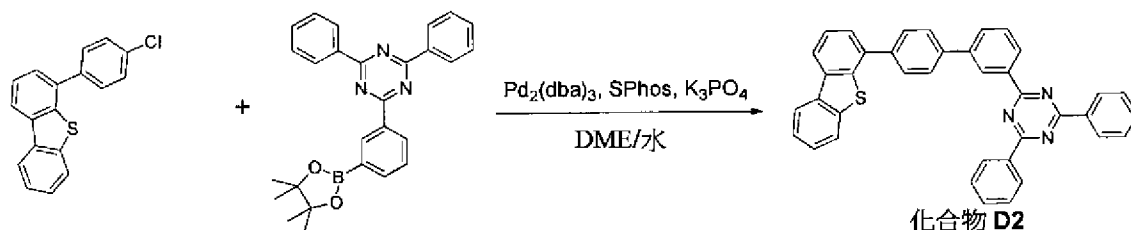


將2-(3-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶(3.5 g, 9.06 mmol)、2-(4-氯苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪(3.43 g, 9.97 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.166 g, 0.181 mmol)、SPhos (0.149 g, 0.362 mmol)及K₃PO₄ (5.77 g, 27.2 mmol)於DME (70)及水(15 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22 °C)之後，用水稀釋反應混合物。藉由過濾收集固體，用甲醇洗滌，將其溶解於熱甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自甲苯再結晶呈白色固體狀之化合物

D1 (4.20 g, 82%)。

合成化合物D2

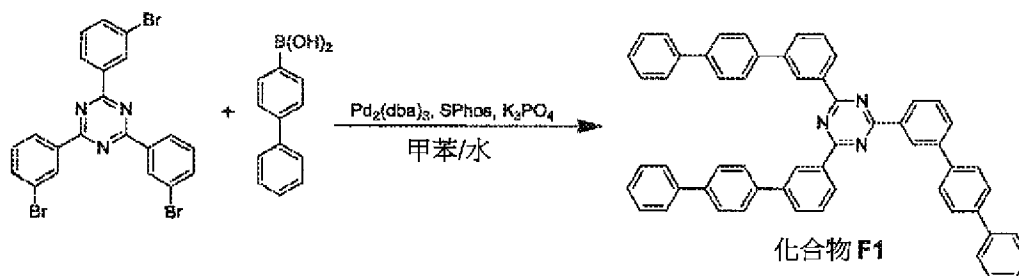
合成化合物D2



將4-(4-氯苯基)二苯并[b,d]噻吩(2.46 g, 8.35 mmol)、2,4-二苯基-6-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶-2-基)苯基)-1,3,5-三嗪(4.0 g, 9.19 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.15 g, 0.17 mmol)、SPhos (0.27 g, 0.67 mmol)及K₃PO₄ (2.89 g, 16.7 mmol)於DME (90 ml)及水(10 ml)中之溶液在氮氣下回流6小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用水稀釋反應混合物。藉由過濾收集固體，連續用水及甲醇洗滌，將其再溶解於熱甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自甲苯再結晶呈白色固體狀之化合物248 (2.1 g, 50%)。

合成化合物F1

合成化合物F1

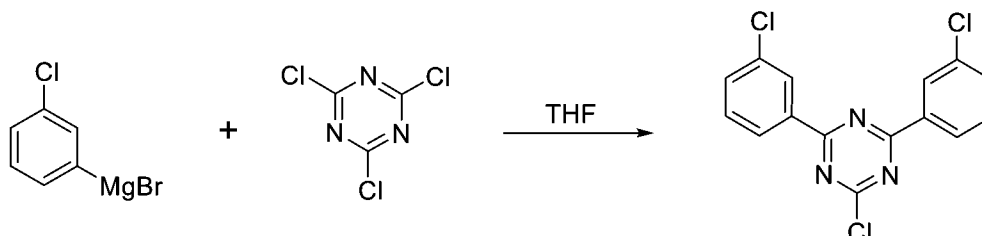


將2,4,6-三(3-溴苯基)-1,3,5-三嗪(3 g, 5.49 mmol)、[1,1'-聯苯]-4-基硼酸(3.48 g, 17.58 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.101 g, 0.110 mmol)、SPhos (0.180 g, 0.440 mmol)及K₃PO₄ (2.332 g, 10.99 mmol)於甲苯(54 ml)及水(6 ml)中之溶液在氮氣下回流12小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由

過濾收集固體，連續用水、甲醇及甲苯洗滌。藉由昇華來純化粗產物，產生呈白色固體狀之化合物**F1** (1.7 g, 40%)。

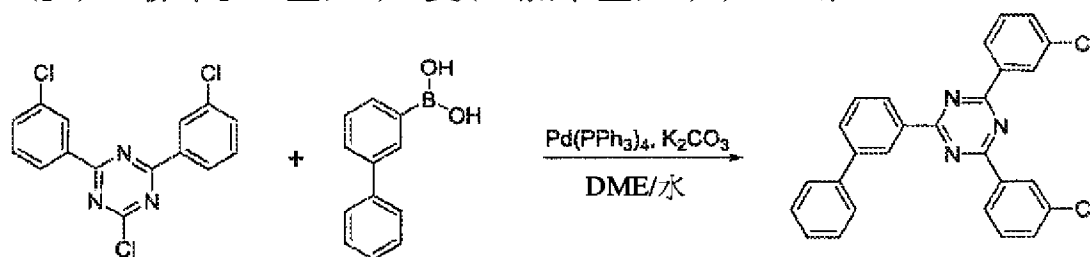
合成化合物**F2**

合成2-氯-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪



在0°C下向2,4,6-三氯-1,3,5-三嗪(3.1 g, 16.7 mmol)於THF (50 ml)中之溶液中逐滴添加溴化(3-氯苯基)鎂之溶液(50 ml, 50.0 mmol)。將其緩慢升溫至室溫(約22°C)，且攪拌2小時。用甲苯稀釋反應混合物，且倒入至HCl水溶液(1M, 200 ml)中。分離有機層，用水洗滌，且隨後經Na₂SO₄乾燥。在蒸發溶劑之後，藉由矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈淺黃色固體狀之2-氯-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪(2.1 g, 37%)。

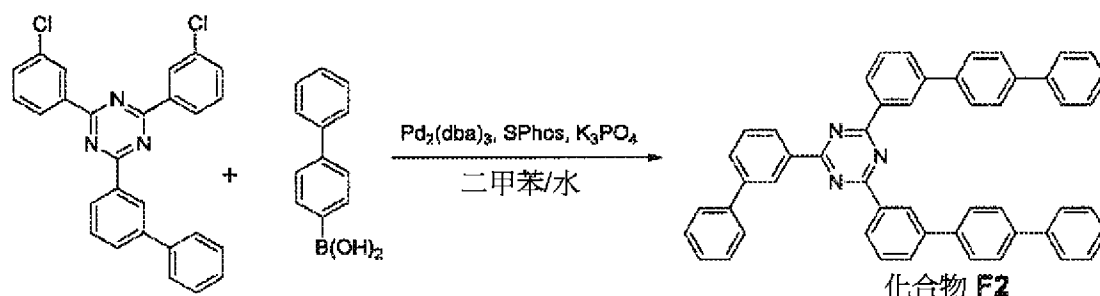
合成2-([1,1'-聯苯]-3-基)-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪



將2-氯-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪(3.6 g, 10.7 mmol)、[1,1'-聯苯]-3-基硼酸(3.2 g, 16.0 mmol)、K₂CO₃ (4.4 g, 32.1 mmol)及Pd(PPh₃)₄ (0.62 g, 0.54 mmol)於DME (60 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，經由矽膠塞過濾反應混合物。蒸發濾液，且藉由用庚烷/DCM (9/1到7/3, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析及用甲醇自DCM沈澱來純化殘餘物，得到呈白色固體

狀之2-([1,1'-聯苯]-3-基)-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪(3.7 g, 76%)。

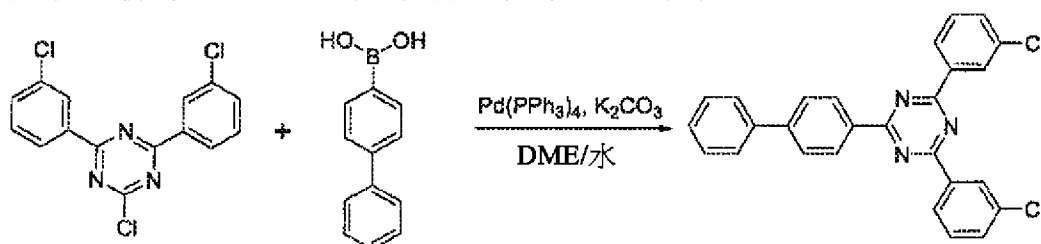
合成化合物F2



將2-([1,1'-聯苯]-3-基)-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪(3.7 g, 8.1 mmol)、[1,1'-聯苯]-4-基硼酸(4.0 g, 20.4 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.15 g, 0.16 mmol)、SPhos (0.27 g, 0.65 mmol)及K₃PO₄單水合物(5.6 g, 24.4 mmol)於間二甲苯(200 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，且用水及甲苯洗滌。隨後將固體溶解於沸騰的鄰二甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，自鄰二甲苯再結晶呈白色固體狀之化合物F2 (4.5 g, 80%)。

合成化合物F3

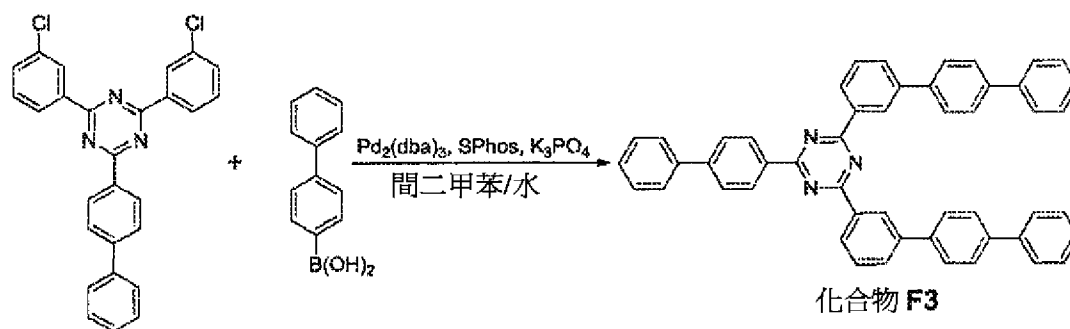
合成2-([1,1'-聯苯]-4-基)-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪



將2-氯-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪(0.2 g, 0.59 mmol)、[1,1'-聯苯]-4-基硼酸(0.14 g, 0.71 mmol)、K₂CO₃ (0.25 g, 1.78 mmol)及Pd(PPh₃)₄ (0.034 g, 0.030 mmol)於DME (21 ml)及水(7 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，經由矽膠塞過

濾反應混合物。有機層經分離，用水洗滌，且隨後經 Na_2SO_4 乾燥。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/DCM (9/1到7/3, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化粗產物，產生呈白色固體狀之2-([1,1'-聯苯]-4-基)-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪(0.2 g, 74%)。

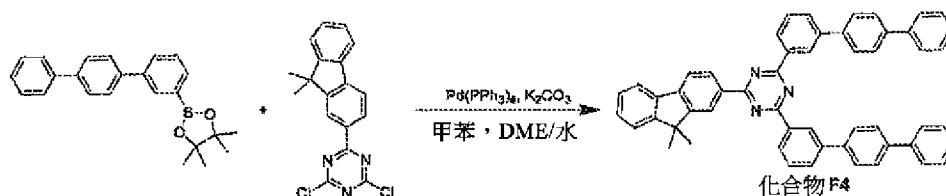
合成化合物F3



將2-([1,1'-聯苯]-4-基)-4,6-雙(3-氯苯基)-1,3,5-三嗪(2.3 g, 5.1 mmol)、[1,1'-聯苯]-4-基硼酸(3.0 g, 15.2 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.093 g, 0.10 mmol)、SPhos (0.17 g, 0.41 mmol)及 K_3PO_4 單水合物(3.5 g, 15.2 mmol)於間二甲苯(200 ml)及水(20 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約 22°C)之後，藉由過濾來收集固體，且用沸騰的鄰二甲苯濕磨。藉由昇華來純化粗產物，產生呈白色固體狀之化合物F3 (2.1 g, 60%)。

合成化合物F4

合成化合物F4

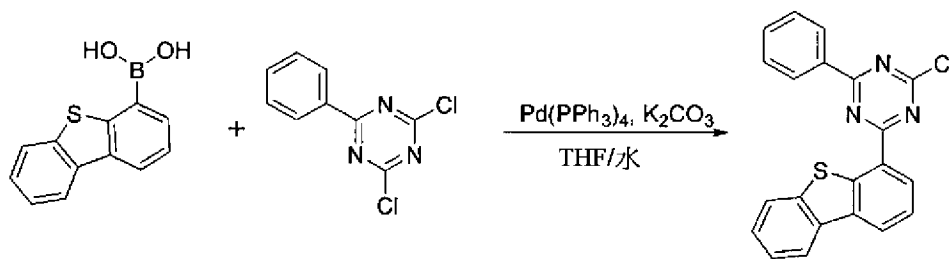


將2,4-二氯-6-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-1,3,5-三嗪(2.2 g, 6.43 mmol)、2-([1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啶

(2.75 g, 7.71 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.223 g, 0.193 mmol)及K₂CO₃ (2.67 g, 19.29 mmol)於DME (100 ml)、甲苯(100 ml)及水(20 ml)中的溶液在氮氣下回流16小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，隨後連續用水及甲苯洗滌，產生呈白色固體狀之化合物F4 (1.7 g, 36%)。

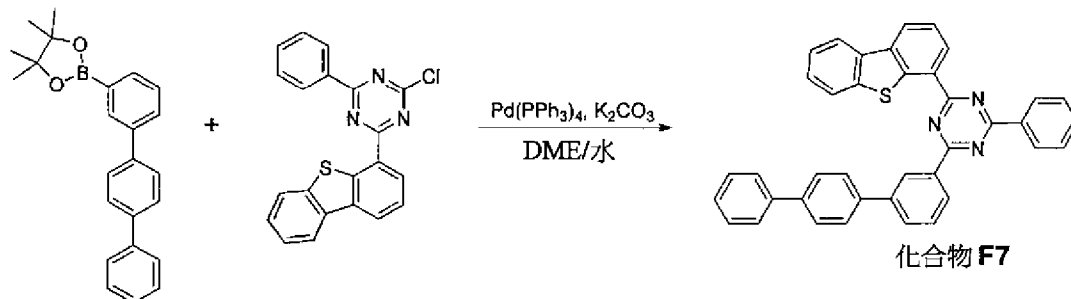
合成化合物F7

合成2-氯-4-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪



將二苯并[b,d]噻吩-4-基硼酸(5.0 g, 21.92 mmol)、2,4-二氯-6-苯基-1,3,5-三嗪(12.39 g, 54.8 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (1.267 g, 1.096 mmol)及K₂CO₃ (9.09 g, 65.8 mmol)於THF (比率：10.0，體積：199 ml)及水(比率：1.000，體積：19.93 ml)中之溶液在氮氣下回流隔夜(約12小時)。在冷卻至室溫(約22°C)之後，經由短矽膠塞過濾反應溶液。通過矽膠管柱層析及昇華來純化粗產物，產生呈黃色固體狀之2-氯-4-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪(7.1 g, 72%)。

合成化合物F7

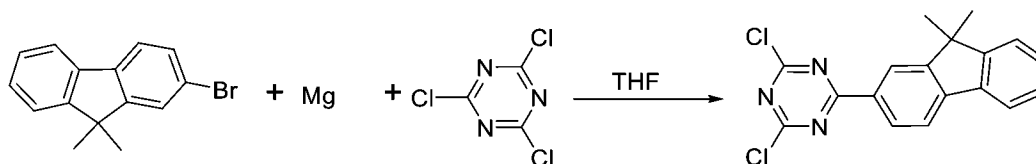


將2-([1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(2.359 g, 6.62 mmol)、2-氯-4-(二苯并[b,d]噻吩-4-基)-6-苯基-1,3,5-三

嗪 (2.25 g, 6.02 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.348 g, 0.301 mmol) 及 K₂CO₃ (2.495 g, 18.05 mmol) 於 DME (比率: 10.0, 體積: 54.7 ml) 及水 (比率: 1.000, 體積: 5.47 ml) 中之溶液在氮氣下回流隔夜 (約 12 小時)。在冷卻至室溫 (約 22°C) 之後, 用水及 THF 稀釋反應混合物。藉由過濾收集固體, 連續用水、THF 及乙醇洗滌, 連續用熱乙醇、DCM 及甲苯濕磨, 且隨後昇華, 產生呈白色固體狀之化合物 **F7** (3.24 g, 77%)。

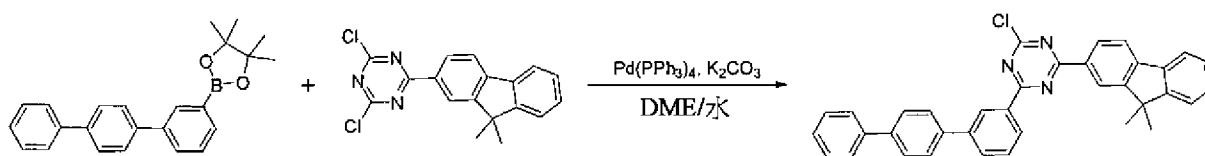
合成化合物 F13

合成 2,4-二氯-6-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-1,3,5-三嗪



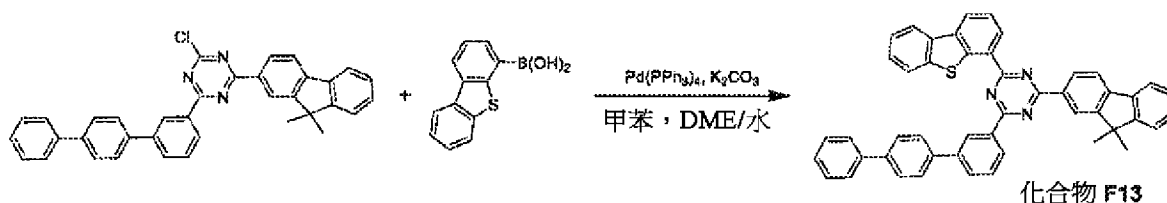
在 60°C 下在氮氣下向用碘活化之 Mg (1.6 g, 65.9 mmol) 於 THF (50 ml) 中之懸浮液中逐滴添加 2-溴-9,9-二甲基-9H-芴 (12.0 g, 43.9 mmol) 於 THF (100 ml) 中之溶液。在添加之後, 使反應混合物回流 3 小時, 隨後在 0°C 下將其轉移到 2,4,6-三氯-1,3,5-三嗪 (8.10 g, 43.9 mmol) 於 THF (50 ml) 中之溶液中。隨後使反應混合物升溫至室溫 (約 22°C), 且攪拌隔夜 (約 12 小時), 隨後用 HCl 水溶液淬滅。用 EtOAc 萃取所得混合物。經 Na₂SO₄ 乾燥經合併之有機萃取物。在蒸發溶劑之後, 藉由用庚烷/EtOAc (9/1, v/v) 作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物, 產生呈白色固體狀之 2,4-二氯-6-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-1,3,5-三嗪 (8.0 g, 53%)。

合成 2-([1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4-氯-6-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-1,3,5-三嗪



將2-([1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼啉(4.00 g, 11.23 mmol)、2,4-二氯-6-(9,9-二甲基-9*H*-芴-2-基)-1,3,5-三嗪(10.76 g, 31.4 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.259 g, 0.225 mmol)及K₂CO₃ (4.66 g, 33.7 mmol)於DME (150 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流18小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，用水稀釋反應混合物，隨後用EtOAc萃取，且經Na₂SO₄乾燥有機萃取物。在蒸發溶劑之後，藉由用庚烷/EtOAc (4/1, v/v)作為溶離劑進行矽膠管柱層析來純化殘餘物，產生呈白色固體狀之2-([1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4-氯-6-(9,9-二甲基-9*H*-芴-2-基)-1,3,5-三嗪(4.5 g, 8.39 mmol, 74.8%產率)。

合成化合物F13



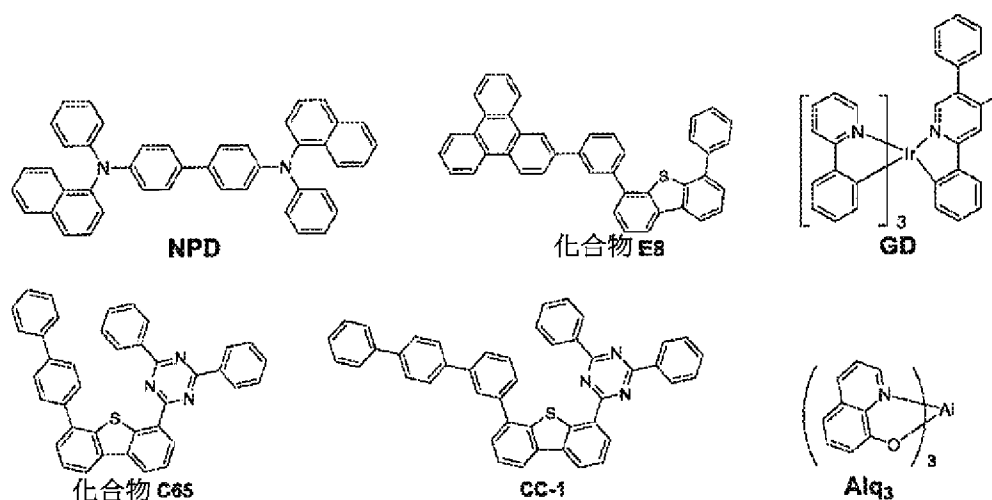
將2-([1,1':4',1''-聯三苯]-3-基)-4-氯-6-(9,9-二甲基-9*H*-芴-2-基)-1,3,5-三嗪(2.7 g, 5.04 mmol)、二苯并[*b,d*]噻吩-4-基硼酸(1.72 g, 7.56 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.116 g, 0.101 mmol)及K₂CO₃ (2.1 g, 15.11 mmol)於甲苯(200 ml)、DME (300 ml)及水(50 ml)中之溶液在氮氣下回流14小時。在冷卻至室溫(約22°C)之後，藉由過濾收集固體，且連續用水、甲醇、EtOAc及庚烷洗滌。將粗產物溶解於沸騰的甲苯中，且經由短矽膠塞過濾。在蒸發溶劑之後，化合物F13 (16.5 g, 48%)呈白色固體狀地沈澱。

裝置實例

OLED中之應用. 所有裝置均藉由高真空(約10⁻⁷托)熱蒸發製造。陽極電極為80 nm之氧化銦錫(ITO)。陰極電極由1 nm之LiF接著為100 nm之

Al組成。直接在製造之後在一氮手套工作箱(<1 ppm之H₂O及O₂)內使用以環氧樹脂密封的一玻璃蓋來囊封所有裝置，且一濕氣吸氣劑包括於該封包內。

裝置實例-第1組. 第一組裝置實例具有自ITO表面開始依次由以下組成之有機堆疊：10 nm之LG101 (來自LG Chem)作為電洞注入層(HIL)、45 nm之4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基聯苯(NPD)作為電洞傳輸層(HTL)、及30 nm之化合物E8與20重量%本發明化合物(化合物C65)或比較性化合物(CC-1)及10重量%之發射極GD一起作為發射層(EML)。在EML之頂部上，沈積50 nm之化合物C65或CC-1作為電洞阻擋層(HBL)，接著為40 nm之參(8-羥基喹啉基)鋁(Alq₃)作為電子傳輸層(ETL)。所用化合物之結構展示如下。



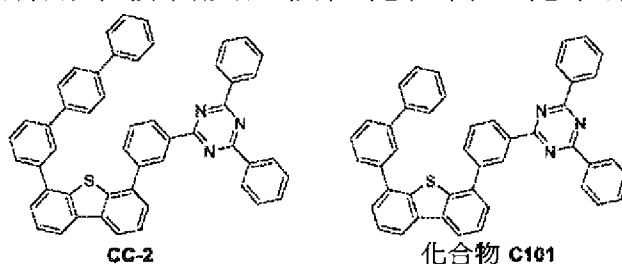
以下**表D1**為在9000尼特(nit)下記錄之裝置實例1之裝置資料、電壓(V)、外部效率(EQE)及功率效率(PE)的概述。

表D1

裝置	EML	HBL	顏色	V (V)	EQE (%)	PE (lm/W)
裝置C-1	E8: CC-1: GD	CC-1	綠色	8.1	14.5	20.5
裝置1	E8: C65: GD	C65	綠色	7.6	15.1	22.5

表D1中之資料展示，使用本發明化合物(化合物C65)作為共主體及HBL之裝置1在較低驅動電壓下達成比使用比較性化合物CC-1作為共主體及HBL之裝置C-1更高的效率。

裝置實例-第2組. 第二組裝置實例具有與裝置實例1中相同之結構，除了使用摻雜有15% GD之本發明化合物C101或比較性化合物CC-2作為雙組分EML之外。所用本發明及比較性化合物之化學結構呈現如下。



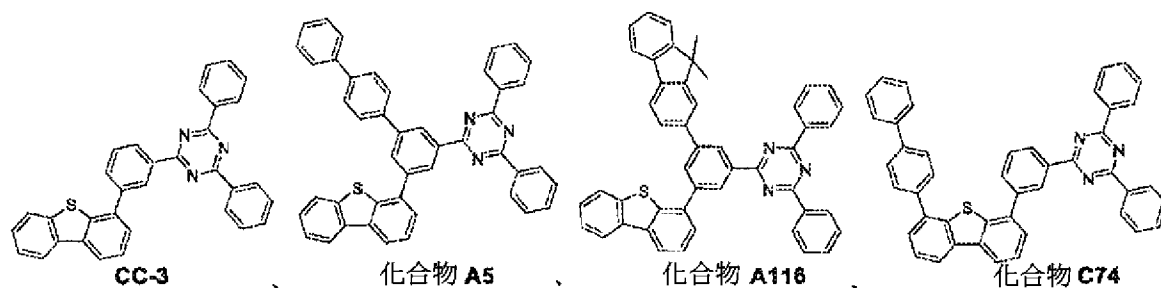
以下表D2為在9000尼特下記錄之裝置實例2之相對裝置資料的概述。裝置壽命LT97定義為裝置在恆定電流密度下在初始亮度為9000尼特的情況下衰減至其原始亮度之97%所需的時間，且該等值相對於裝置C-2之值標準化。

表D2

裝置	EML	HBL	顏色	V (V)	EQE (%)	PE (lm/W)	LT97
裝置C-2	CC-2: GD	CC-2	綠色	7.5	14.7	22	100
裝置2	C101: GD	C101	綠色	7.6	14.7	23	130

表D2中之資料展示，使用本發明化合物(化合物C101)作為主體及HBL之裝置2達成比使用比較性化合物CC-2作為主體及HBL之裝置C-2更高的效率及更長的壽命。

裝置實例-第3組. 第三組裝置實例具有與裝置實例1中相同之結構。所用本發明及比較性化合物之化學結構呈現如下。



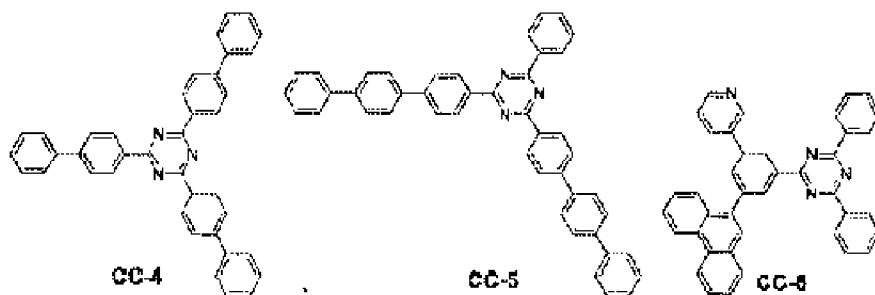
以下表D3為在1000尼特下記錄之裝置實例3之相對裝置記錄的概述。由在50 mA/cm²之電流密度下量測之值計算裝置壽命LT95，其定義為裝置在恆定電流密度下在初始亮度為1000尼特的情況下衰減至其原始亮度之95%所需的時間，同時加速度因子為1.8，且將其相對於裝置C-3之壽命標準化。

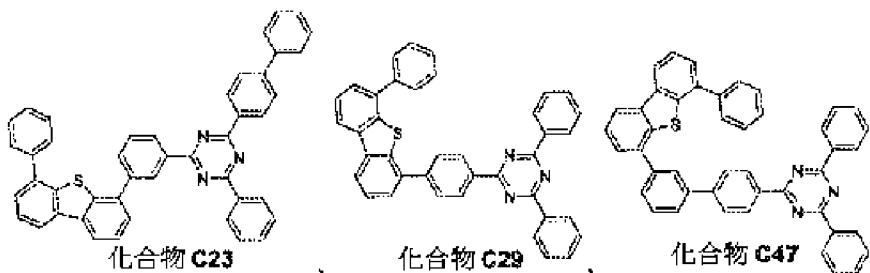
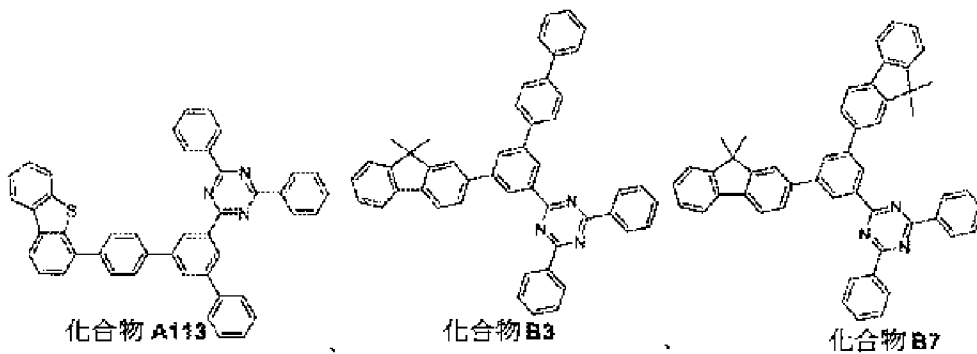
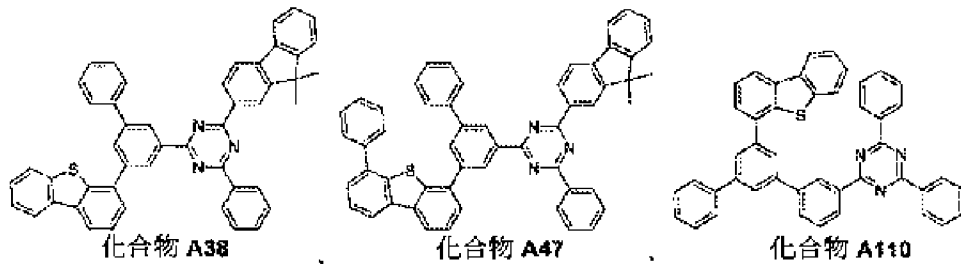
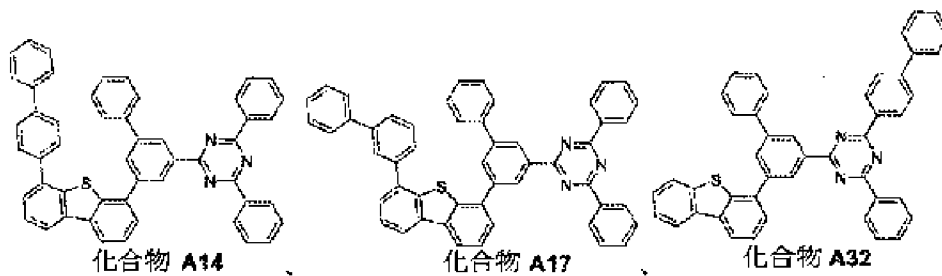
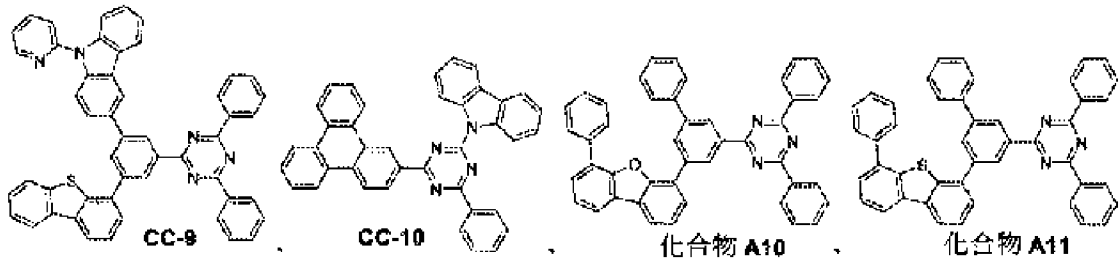
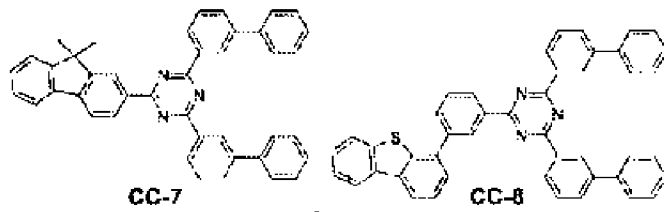
表D3

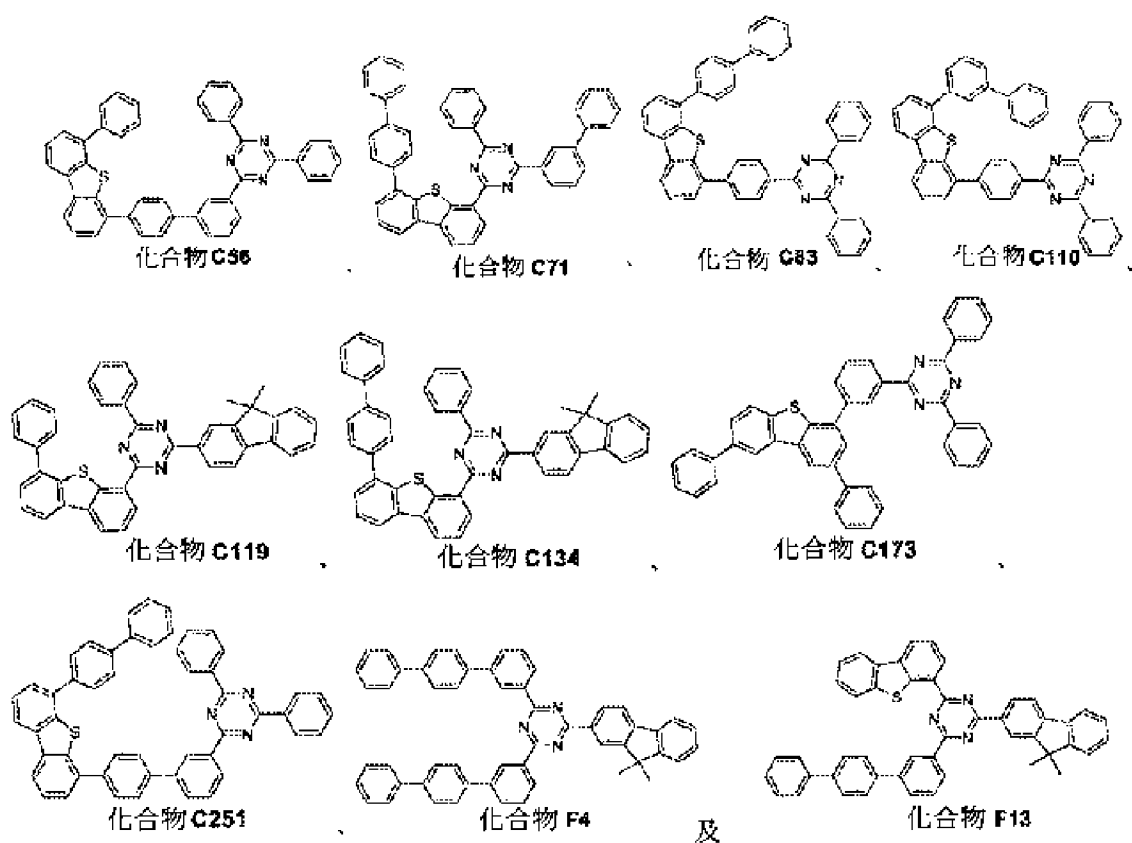
裝置	EML	HBL	顏色	LT95
裝置C-3	E8:CC-3:GD	CC-3	綠色	100
裝置3	E8:A5:GD	A5	綠色	694
裝置4	E8:A116:GD	A116	綠色	529
裝置5	E8:C74:GD	C74	綠色	537

表D3中之資料展示，在與E8一起在EML中用作共主體及用作EBL的情況下，在二苯并噻吩或橋接苯基上具有取代之本發明化合物展現比不具有此等取代之比較性化合物更長的壽命。

裝置實例-第4組。第四組裝置具有與裝置實例2中相同之結構。所用本發明及比較性化合物之化學結構呈現如下。







以下表D4為在1000尼特下記錄之裝置實例4之相對裝置資料的概述。裝置壽命LT95相對於裝置C-4之壽命標準化。

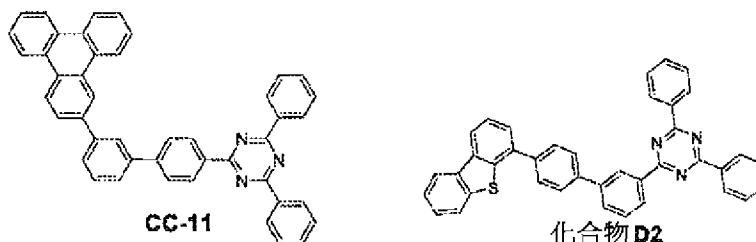
表D4

裝置	EML	HBL	顏色	LT95
裝置C-4	CC-4:GD	CC-4	綠色	100
裝置C-5	CC-5:GD	CC-5	綠色	3
裝置C-6	CC-6:GD	CC-6	綠色	3
裝置C-7	CC-7:GD	CC-7	綠色	147
裝置C-8	CC-8:GD	CC-8	綠色	93
裝置C-9	CC-9:GD	CC-9	綠色	62
裝置C-10	CC-10:GD	CC-10	綠色	88
裝置6	A10:GD	A10	綠色	899
裝置7	A11:GD	A11	綠色	602

裝置8	A14:GD	A14	綠色	1029
裝置9	A17:GD	A17	綠色	848
裝置10	A32:GD	A32	綠色	969
裝置11	A38:GD	A38	綠色	721
裝置12	A47:GD	A47	綠色	859
裝置13	A110:GD	A110	綠色	902
裝置14	A113:GD	A113	綠色	1248
裝置15	B3:GD	B3	綠色	1136
裝置16	B7:GD	B7	綠色	849
裝置17	C23:GD	C23	綠色	1466
裝置18	C29:GD	C29	綠色	344
裝置19	C47:GD	C47	綠色	915
裝置20	C56:GD	C56	綠色	287
裝置21	C71:GD	C71	綠色	181
裝置22	C83:GD	C83	綠色	444
裝置23	C110:GD	C110	綠色	477
裝置24	C119:GD	C119	綠色	285
裝置25	C134:GD	C134	綠色	192
裝置26	C140:GD	C140	綠色	824
裝置27	C173:GD	C173	綠色	760
裝置28	C251:GD	C251	綠色	1830
裝置29	F4:GD	F4	綠色	314
裝置30	F13:GD	F13	綠色	223

表D4中之資料展示，使用本發明化合物作為主體及HBL之OLED裝置具有比使用比較性化合物之裝置更長的壽命。

裝置實例-第5組. 第五組裝置具有與裝置實例1中相同之結構。所用本發明及比較性化合物之化學結構呈現如下。



以下**表D5**為在9000尼特下記錄之裝置實例5之相對裝置資料的概述。裝置壽命LT97定義為裝置在恆定電流密度下在初始亮度為9000尼特的情況下衰減至其原始亮度之97%所需的時間，且該等值相對於裝置C-11之值標準化。

表D5

裝置	EML	HBL	顏色	V (V)	EQE (%)	PE (lm/W)	LT97
裝置C-11	E8: CC-11: GD	CC-11	綠色	8.1	13.9	19.4	100
裝置31	E8: D2: GD	D2	綠色	7.7	14.8	21.8	123

表D5中之資料展示，使用本發明化合物(化合物D2)作為主體及HBL之裝置31達成比使用比較性化合物CC-11作為主體及HBL之裝置C-11更高的效率及更長的壽命。

表D1至D5中之裝置資料一起展示，具有獨特化學結構之本發明化合物在其用作OLED中之主體或共主體及EBL時優於比較性化合物。公認的是，OLED裝置效能高度取決於材料特性，其可歸因於材料化學結構。

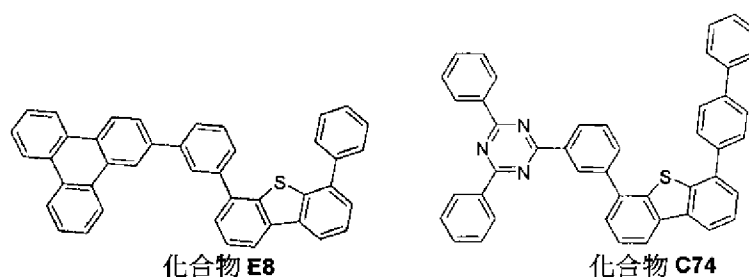
預混合物實例

所選擇h主體及e主體之相容性藉由經此兩種組分之預混合物之單源共蒸發製造之膜的組成分析來評估。所選擇h主體及e主體之第一組潛在預混合物呈現在表PM1中。

表PM1：包含所選擇h主體及e主體之潛在預混合物

預混合物	h主體	e主體
PM-A1	化合物E1	化合物C1
PM-A2	化合物E2	化合物C2
PM-A3	化合物E5	化合物C65
PM-A4	化合物E8	化合物C74
PM-A5	化合物E11	化合物C74
PM-A6	化合物E17	化合物C74
PM-A7	化合物E8	CC-1
PM-A8	化合物E8	化合物A5
PM-A9	化合物E8	化合物C17
PM-A10	化合物E17	化合物A5
PM-A11	化合物E25	CC-1
PM-A12	化合物E26	化合物C74
PM-A13	化合物E26	化合物C248
PM-A14	化合物E28	化合物C74
PM-A15	化合物E29	化合物C74
PM-A16	化合物E30	化合物C74

預混合物實例-第1組：對於預混合物PM-A4，以7:3之重量比率提供化合物E8及化合物C74，隨後將其以物理方式混合，磨碎且裝入蒸發源中。在真空腔室中在小於 10^{-7} 托之壓力下以 $2 \text{ \AA}/\text{s}$ 之速率使預混合的組合物熱共蒸發，且沈積至玻璃基板上。在沈積 500 \AA 之膜之後連續地置換基板而不停止沈積及冷卻該源。藉由高效液相層析(HPLC)來分析膜之組成，且結果展示在表2中。



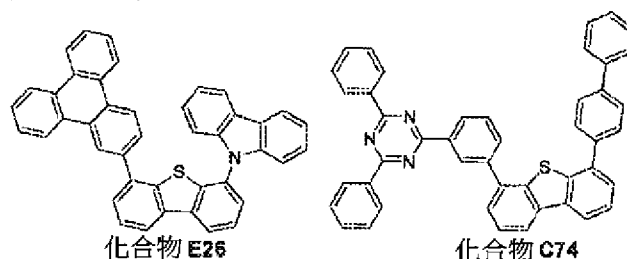
表PM2：由以重量比率7:3包含化合物E8及化合物C74之預混合物 (PM-A4)依次沈積之膜的HPLC組成(%)。(HPLC條件C18，100 45分鐘，偵測波長254 nm) (歸因於不同吸收係數，HPLC組成可能或可能不與重量比率一致)。

膜	化合物E8	化合物C74
板1	69.5	30.5
板2	68.4	31.6
板3	68.2	31.8
板4	68.2	31.8
板5	68.4	31.6
板6	69.3	30.7
板7	70.6	29.4
板8	71.7	28.3
板9	73.0	27.0

如表PM2中所示，組分化合物E8及化合物C74之組成在板1至板9中並不明顯變化。濃度之較小波動並不揭示任何傾向，且可由HPLC分析之精確性來解釋。通常，在整個過程期間在5%內之沈積前後濃度變化視為良好且適用於商業OLED應用。

預混合物實例-第2組：對於預混合物PM-A12，以3:2之重量比率提供化合物E26及化合物C74，隨後將其以物理方式混合，磨碎且裝入蒸發

源中。在真空腔室中在小於 10^{-7} 托之壓力下以 2 \AA/s 之速率使預混合的組合物熱共蒸發，且沈積至玻璃基板上。在沈積 500 \AA 之膜之後連續地置換基板而不停止沈積及冷卻該源。藉由高效液相層析(HPLC)來分析膜之組成，且結果展示在表PM3中。



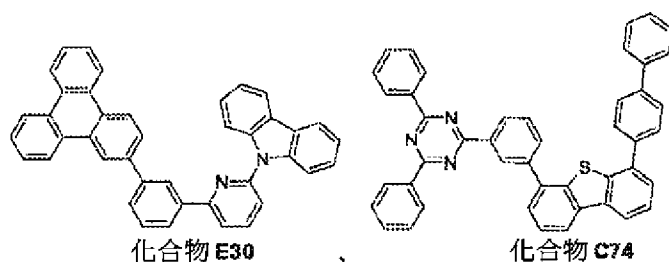
表PM3：由以重量比率3:2包含化合物E26及化合物C74之預混合物(PM-A12)依次沈積之膜的HPLC組成(%)。(HPLC條件 C18，100 45分鐘，偵測波長254 nm) (歸因於不同吸收係數，HPLC組成可能或可能不與重量比率一致)。

膜	化合物E26	化合物C74
板1	67.1	32.9
板2	67.3	32.7
板3	68.4	31.6
板4	69.6	30.4
板5	70.8	29.2
板6	71.9	28.1
板7	72.9	27.1
板8	73.9	26.1

再次，板1至8之結果僅展示較小變化，且將視為良好且適用於商業OLED應用。

預混合物實例-第3組. 對於預混合物PM-A16，以1:1之重量比率提供

化合物E30及化合物C74，隨後將其以物理方式混合，磨碎且裝入蒸發源中。在真空腔室中在小於 10^{-7} 托之壓力下以 2 \AA/s 之速率使預混合的組合物熱共蒸發，且沈積至玻璃基板上。在沈積 500 \AA 之膜之後連續地置換基板而不停止沈積及冷卻該源。藉由高效液相層析(HPLC)來分析膜之組成，且結果展示在表PM4中。



表PM4：由以重量比率1:1包含化合物E30及化合物C74之預混合物(PM-A16)依次沈積之膜的HPLC組成(%)。(HPLC條件 C18，100 45分鐘，偵測波長254 nm) (歸因於不同吸收係數，HPLC組成可能或可能不與重量比率一致)。

膜	化合物E30	化合物C74
板1	52.3	47.7
板2	51.6	48.4
板3	52.1	47.9
板4	52.9	47.1
板5	53.9	46.1
板6	54.6	45.4
板7	51.8	48.2

表PM2、PM3及PM4中之資料展示，預混合物PM-A4、PM-A12及PM-A16中兩種組分之比率在連續單源共蒸發期間並不明顯變化。濃度之較小波動並不揭示任何傾向，且可由HPLC分析之精確性來解釋。通常，

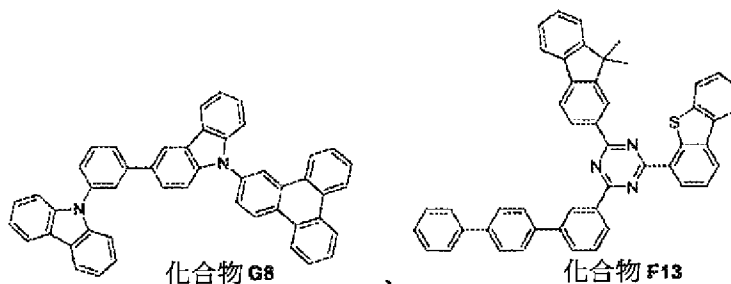
在整個過程期間在5%內之沈積前後濃度變化視為良好且適用於商業OLED應用。此等實驗得出結論，PM-A4、PM-A12及PM-A16為用於共蒸發之穩定預混合物。認為此等預混合物之共蒸發穩定性可追溯至與此兩類材料相關聯之獨特化學結構。

所選擇h主體及e主體之第二組潛在預混合物呈現在表PM5中。

表PM5：包含所選擇h主體及e主體之潛在預混合物

預混合物	h主體	e主體
PM-B1	化合物G1	化合物F9
PM-B2	化合物G2	化合物F10
PM-B3	化合物G8	化合物F13
PM-B4	化合物G9	化合物F13
PM-B5	化合物G26	化合物F5

實例1. 對於預混合物PM-B3，以9:1之重量比率提供化合物G8及化合物F13，隨後將其以物理方式混合，磨碎且裝入蒸發源中。在真空腔室中在小於 10^{-7} 托之壓力下以 $2 \text{ \AA}/\text{s}$ 之速率使預混合的組合物熱共蒸發，且沈積至玻璃基板上。在沈積 500 \AA 之膜之後連續地置換基板而不停止沈積或冷卻該源。在材料耗盡後停止沈積。藉由高效液相層析(HPLC)來分析膜之組成，且結果展示在表PM6中。



表PM6：由以重量比率9:1包含化合物G8及化合物F13之預混合物

(PM-B3)依次沈積之膜的HPLC組成(%)。(HPLC條件 C18，100 45分鐘，偵測波長254 nm) (歸因於不同吸收係數，HPLC組成可能或可能不與重量比率一致)。

表PM6

膜	化合物G8	化合物F13
板1	95.9	4.1
板2	96.0	4.0
板3	96.5	3.5
板4	96.8	3.2

組分化合物G8及化合物F13之組成在板1至板4中並不明顯變化。濃度之較小波動並不揭示任何傾向，且可由HPLC分析之精確性來解釋。通常，在整個過程期間在5%內之沈積前後濃度變化視為良好且適用於商業OLED應用。此等結果展現，PM3為用於共蒸發之穩定預混合物。認為此預混合物之共蒸發穩定性可追溯至與此兩類材料相關聯之獨特化學結構。

應瞭解本文中所述之各種實施例僅作為實例且不意欲限制本發明之範疇。舉例而言，在不背離本發明精神的情況下，本文中所述之許多材料及結構可經其他材料及結構取代。如熟習此項技術者將顯而易見，如所主張之本發明可因此包括相對於本文中所描述之特定實例及較佳實施例的變體。應理解，關於為何本發明起作用之各種理論並不意欲為限制性的。

【符號說明】

100:裝置

110:基板

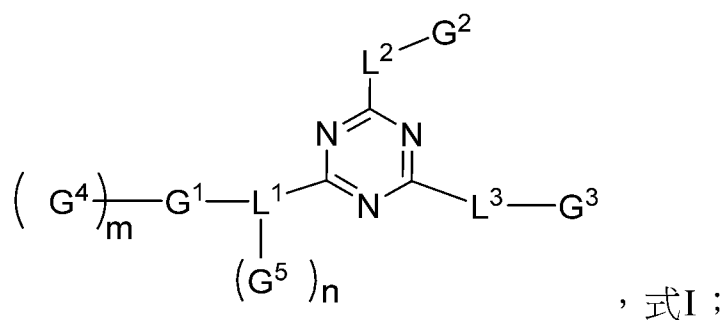
115:陽極

- 120:電洞注入層
- 125:電洞傳輸層
- 130:電子阻擋層
- 135:發射層
- 140:電洞阻擋層
- 145:電子傳輸層
- 150:電子注入層
- 155:保護層
- 160:陰極
- 162:第一導電層
- 164:第二導電層
- 170:阻擋層
- 200:倒置式OLED
- 210:基板
- 215:陰極
- 220:發射層
- 225:電洞傳輸層
- 230:陽極

【發明申請專利範圍】

【請求項1】

一種用於有機發光裝置(OLED)之主體材料，該主體材料包含具有式 I 之化合物：



其中 G^1 選自由以下組成之群：二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并噻吩及萸；

其中 L^1 、 L^2 及 L^3 各自獨立地選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶、嘧啶及其組合；

其中 G^4 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉及其組合；

其中 G^2 、 G^3 及 G^5 各自獨立地選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萸、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉、氮雜萸及其組合；

其中 G^2 、 G^3 、 G^4 及 G^5 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氫、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合；

其中 m 為 0 至 7 之整數，

其中 n 為 0 至 4 之整數；

其中當 m 或 n 大於 1 時，各 G^4 或 G^5 可相同或不同；

其中當 n 為 0 且 m 等於或大於 1 時，各 G^4 選自由苯基及聯苯組成之群；

其中當 n 等於或大於 1 時， L^1 不為直接鍵；且

其中當 m 及 n 均為 0 時， L^1 為聯苯；

其限制條件為當 L^1 為苯基或聯苯且 n 不為 0 時， $-L^2-G^2$ 之結構與 $-L^3-G^3$ 不同；且

其限制條件為當 L^1 為苯基、聯苯或苯基與吡啶之組合且 G^1 為二苯并呋喃或二苯并噻吩時， m 不為 0。

【請求項2】

如請求項1之主體材料，其中 n 為 0。

【請求項3】

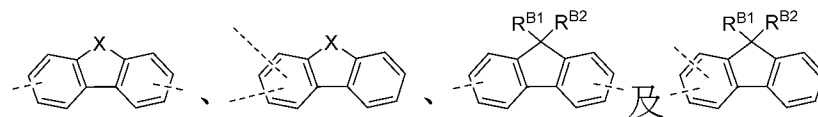
如請求項1之主體材料，其中 n 等於或大於 1。

【請求項4】

如請求項1之主體材料，其中 m 及 n 均為 0。

【請求項5】

如請求項1之主體材料，其中 G^1 具有選自由以下組成之群的結構：



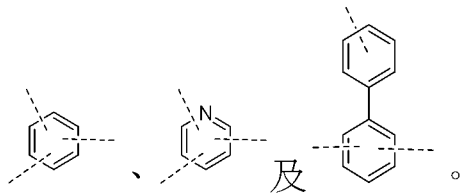
其中 X 選自由 O、S 及 Se 組成之群；

其中 R^{B1} 及 R^{B2} 獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、烷基、環烷基、烷氧基、芳基、雜芳基、鹵素及其組合；且

其中 R^{B1} 及 R^{B2} 視情況接合以形成環。

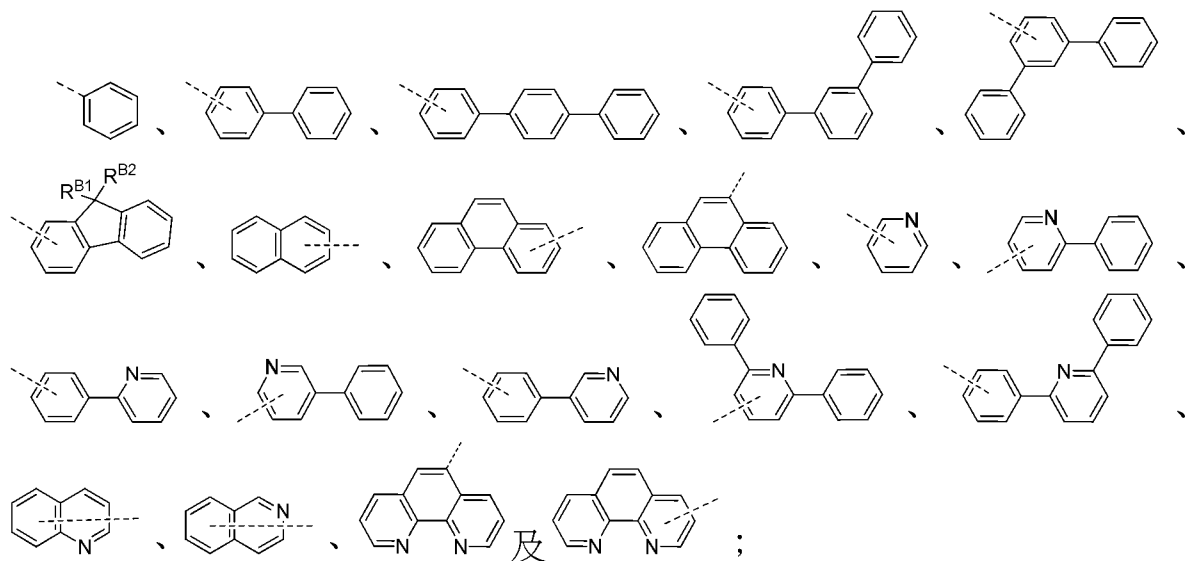
【請求項6】

如請求項1之主體材料，其中 L^1 選自由以下組成之群：



【請求項7】

如請求項1之主體材料，其中 G^2 、 G^3 及 G^5 獨立地選自由以下組成之群：



其中 R^{B1} 及 R^{B2} 獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、烷基、環烷基、烷氧基、芳基、雜芳基、鹵素及其組合；且

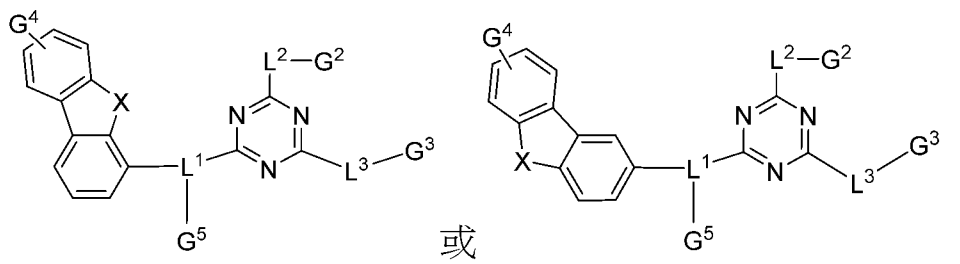
其中 R^{B1} 及 R^{B2} 視情況接合以形成環。

【請求項8】

如請求項1之主體材料，其中 G^2 、 G^3 、 G^4 及 G^5 中之至少一者經至少一個氟原子取代。

【請求項9】

如請求項1之主體材料，其中該化合物具有下式：

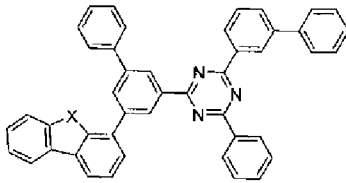


其中X選自由O、S及Se組成之群。

【請求項10】

如請求項1之主體材料，其中該化合物係選自由以下組成之群：

化合物A28至A30，其各自由下式表示：

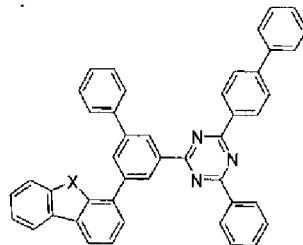


其中在化合物A28中：
X=O，

在化合物A29中：X=S，

在化合物A30中：X=Se、

化合物A31至A33，其各自由下式表示：

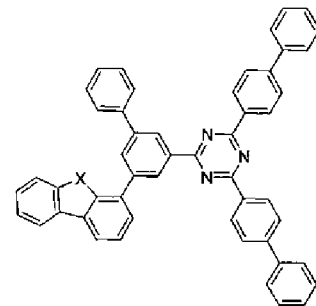


其中在化合物A31中：
X=O，

在化合物A32中：X=S，

在化合物A33中：X=Se、

化合物A34至A36，其各自由下式表示：

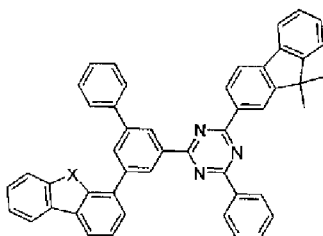


其中在化合物A34中：X=O，

在化合物A35中：X=S，

在化合物A36中：X=Se、

化合物A37至A39，其各自由下式表示：

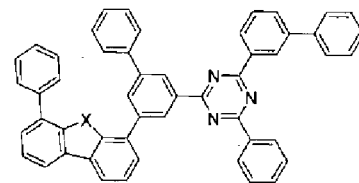


其中在化合物A37中：
X=O，

在化合物A38中：X=S，

在化合物A39中：X=Se、

化合物A40至A42，其各自由下式表示：

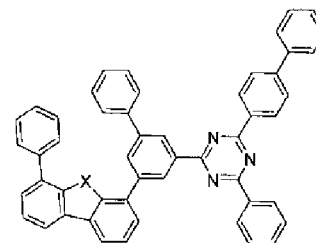


其中在化合物A40中：
X=O，

在化合物A41中：X=S，

在化合物A42中：X=Se、

化合物A43至A45，其各自由下式表示：

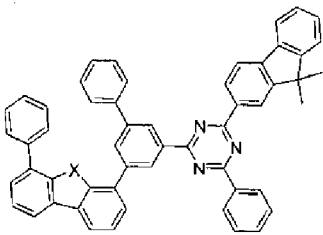


其中在化合物A43中：X=O，

在化合物A44中：X=S，

在化合物A45中：X=Se、

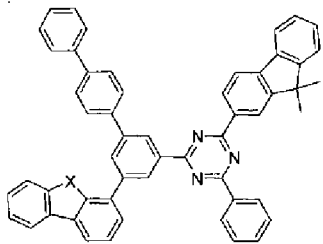
化合物A46至A48，其各自由下式表示：



其中在化合物A46中：
X=O，

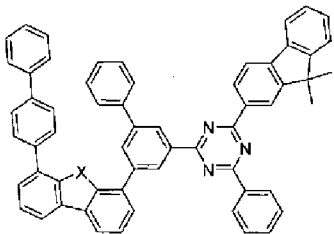
在化合物A47中：X=S，
在化合物A48中：X=Se、

化合物A55至A57，其各自由下式表示：



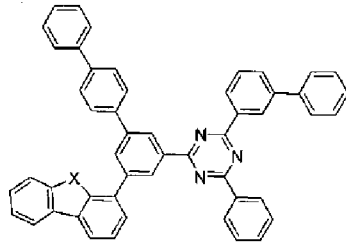
其中在化合物A55中：
X=O，
在化合物A56中：X=S，
在化合物A57中：X=Se、

化合物A64至A66，其各自由下式表示：



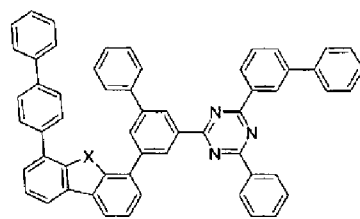
其中在化合物A64中：
X=O，
在化合物A65中：X=S，
在化合物A66中：X=Se、

化合物A49至A51，其各自由下式表示：



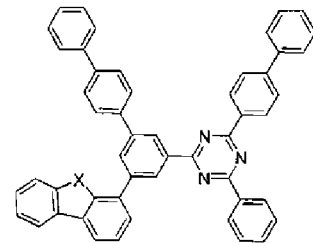
其中在化合物A49中：
X=O，
在化合物A50中：X=S，
在化合物A51中：X=Se、

化合物A58至A60，其各自由下式表示：



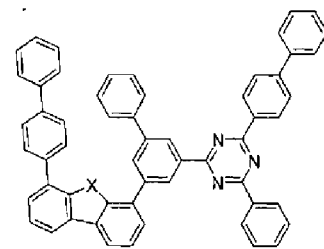
其中在化合物A58中：
X=O，
在化合物A59中：X=S，
在化合物A60中：X=Se、

化合物A52至A54，其各自由下式表示：

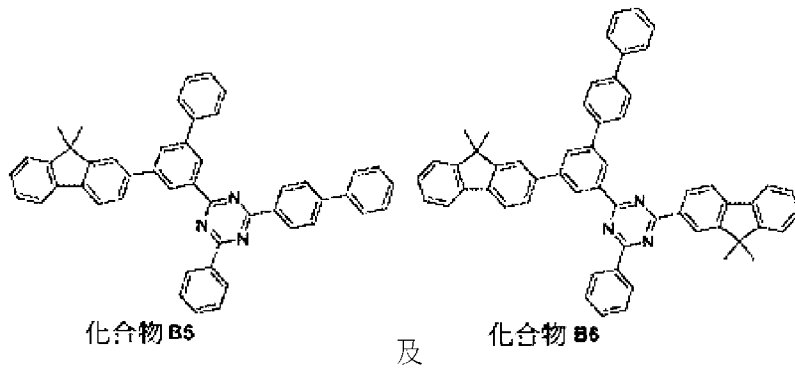


其中在化合物A52中：X=O，
在化合物A53中：X=S，
在化合物A54中：X=Se、

化合物A61至A63，其各自由下式表示：

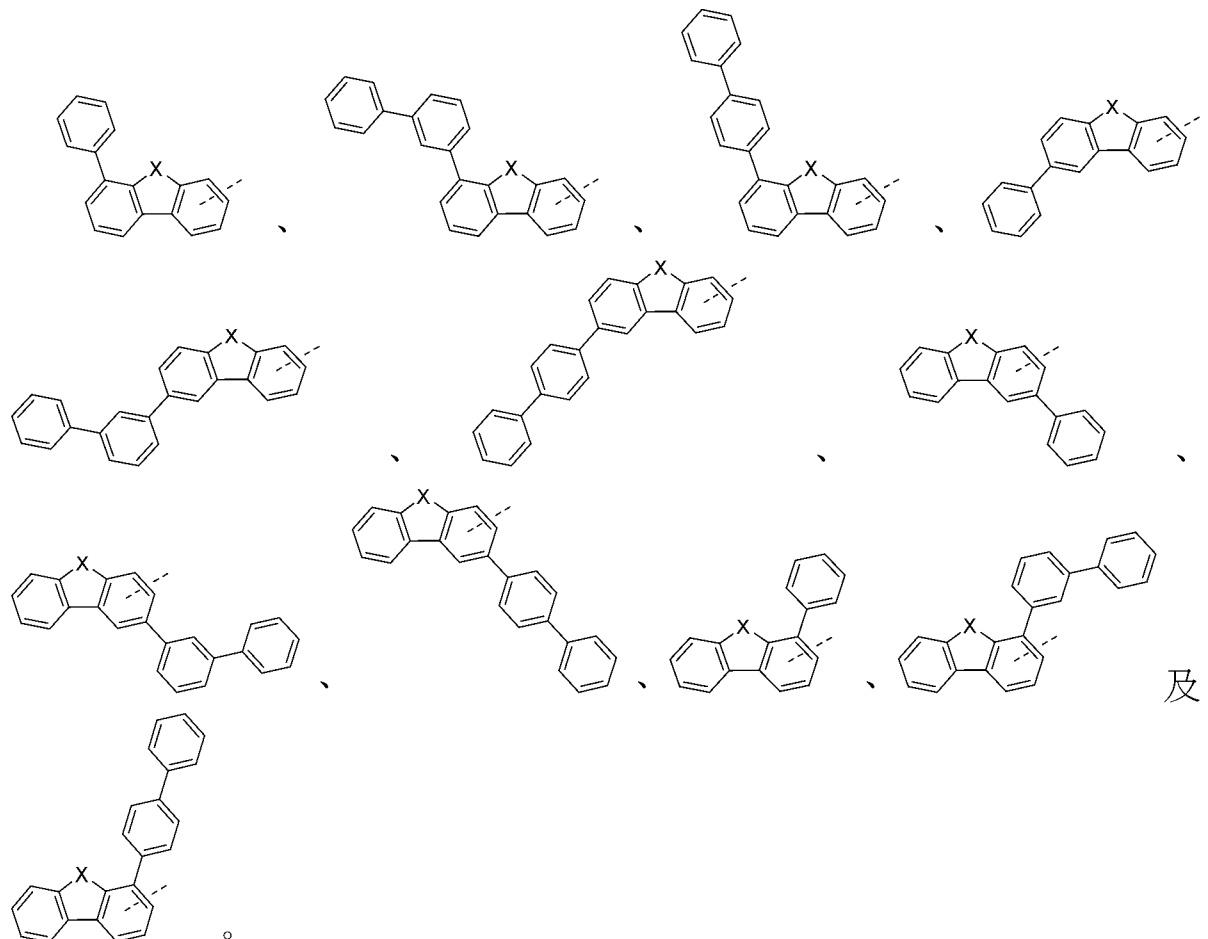


其中在化合物A61中：X=O，
在化合物A62中：X=S，
在化合物A63中：X=Se、



【請求項11】

如請求項1之主體材料，其中，當n為0且m為1時，G⁴-G¹具有選自由以下組成之群的結構：

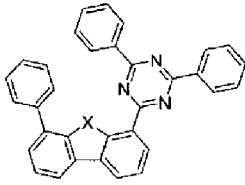


【請求項12】

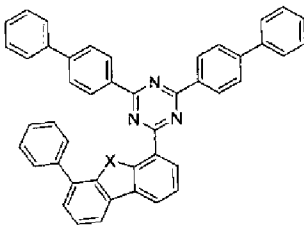
如請求項1之主體材料，其中該化合物選自由以下組成之群：

化合物C1至C3，其各自由 化合物C4至C6，其各自由下 化合物C7至C9，其各自由下

下式表示：

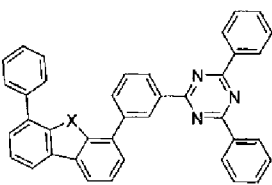


其中在化合物C1中：X=O，
在化合物C2中：X=S，
在化合物C3中：X=Se、
化合物C10至C12，其各自
自由下式表示：



其中在化合物C10中：
X=O，
在化合物C11中：X=S，
在化合物C12中：X=Se、

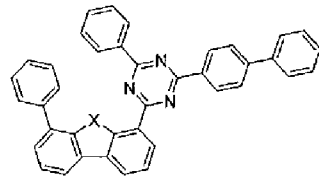
化合物C19至C21，其各自
自由下式表示：



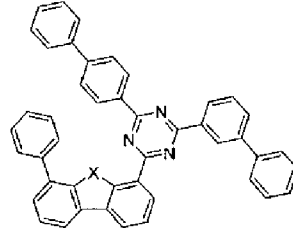
其中在化合物C19中：
X=O，
在化合物C20中：X=S，
在化合物C21中：X=Se、

化合物C28至C30，其各自
自由下式表示：

式表示：

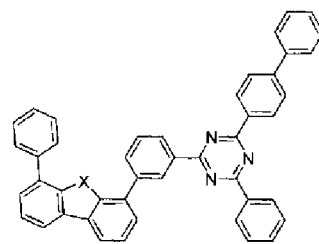


其中在化合物C4中：X=O，
在化合物C5中：X=S，
在化合物C6中：X=Se、
化合物C13至C15，其各自
自由下式表示：



其中在化合物C13中：X=O，
在化合物C14中：X=S，
在化合物C15中：X=Se、

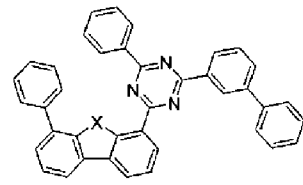
化合物C22至C24，其各自
自由下式表示：



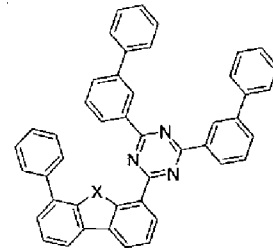
其中在化合物C22中：X=O，
在化合物C23中：X=S，
在化合物C24中：X=Se、

化合物C31至C33，其各自
自由下式表示：

式表示：

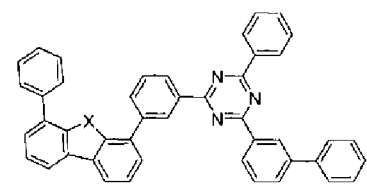


其中在化合物C7中：X=O，
在化合物C8中：X=S，
在化合物C9中：X=Se、
化合物C16至C18，其各自
自由下式表示：



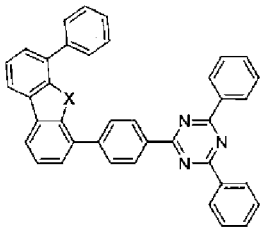
其中在化合物C16中：X=O，
在化合物C17中：X=S，
在化合物C18中：X=Se、

化合物C25至C27，其各自
自由下式表示：



其中在化合物C25中：X=O，
在化合物C26中：X=S，
在化合物C27中：X=Se、

化合物C34至C36，其各自
自由下式表示：

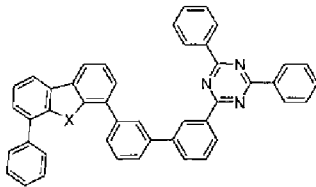


其中在化合物C28中：
X=O，

在化合物C29中：X=S，

在化合物C30中：X=Se、

化合物C37至C39，其各自自由下式表示：

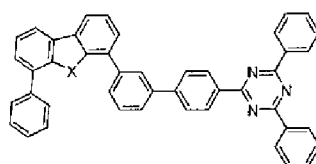


其中在化合物C37中：
X=O，

在化合物C38中：X=S，

在化合物C39中：X=Se、

化合物C46至C48，其各自自由下式表示：

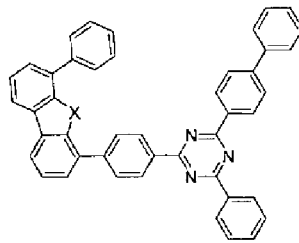


其中在化合物C46中：
X=O，

在化合物C47中：X=S，

在化合物C48中：X=Se、

化合物C55至C57，其各自自由下式表示：

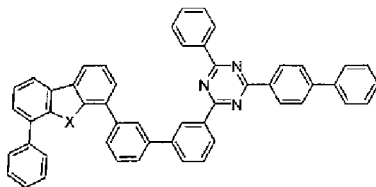


其中在化合物C31中：X=O，

在化合物C32中：X=S，

在化合物C33中：X=Se、

化合物C40至C42，其各自自由下式表示：

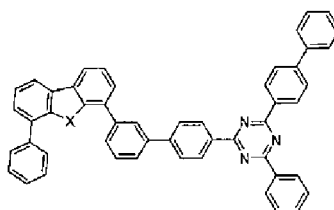


其中在化合物C40中：X=O，

在化合物C41中：X=S，

在化合物C42中：X=Se、

化合物C49至C51，其各自自由下式表示：

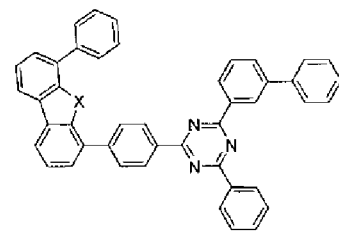


其中在化合物C49中：X=O，

在化合物C50中：X=S，

在化合物C51中：X=Se、

化合物C58至C60，其各自自由下式表示：

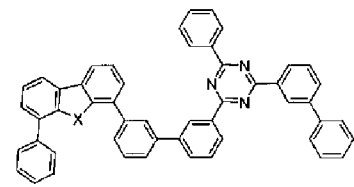


其中在化合物C34中：X=O，

在化合物C35中：X=S，

在化合物C36中：X=Se、

化合物C43至C45，其各自自由下式表示：

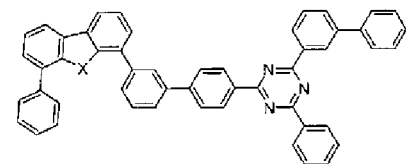


其中在化合物C43中：X=O，

在化合物C44中：X=S，

在化合物C45中：X=Se、

化合物C52至C54，其各自自由下式表示：

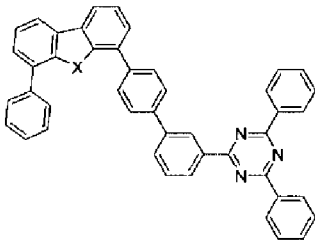


其中在化合物C52中：X=O，

在化合物C53中：X=S，

在化合物C54中：X=Se、

化合物C61至C63，其各自自由下式表示：

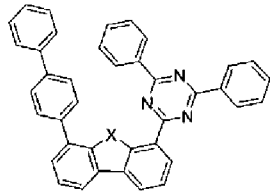


其中在化合物C55中：
X=O，

在化合物C56中：X=S，

在化合物C57中：X=Se、

化合物C64至C66，其各自
自由下式表示：

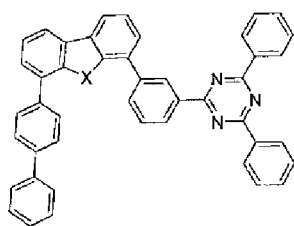


其中在化合物C64中：
X=O，

在化合物C65中：X=S，

在化合物C66中：X=Se、

化合物C73至C75，其各自
自由下式表示：

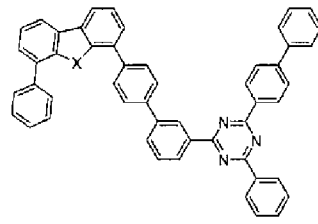


其中在化合物C73中：
X=O，

在化合物C74中：X=S，

在化合物C75中：X=Se、

化合物C82至C84，其各自
自由下式表示：

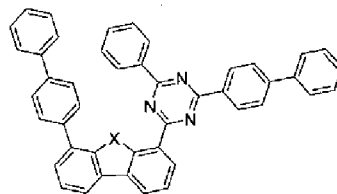


其中在化合物C58中：X=O，

在化合物C59中：X=S，

在化合物C60中：X=Se、

化合物C67至C69，其各自
自由下式表示：

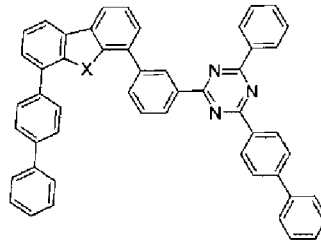


其中在化合物C67中：X=O，

在化合物C68中：X=S，

在化合物C69中：X=Se、

化合物C76至C78，其各自
自由下式表示：

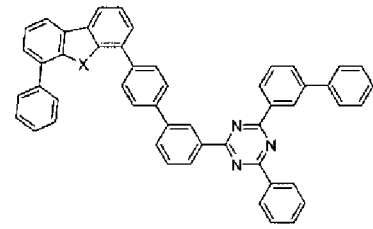


其中在化合物C76中：X=O，

在化合物C77中：X=S，

在化合物C78中：X=Se、

化合物C85至C87，其各自
自由下式表示：

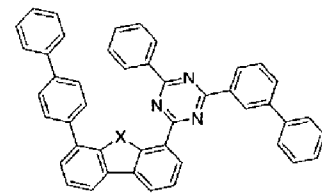


其中在化合物C61中：X=O，

在化合物C62中：X=S，

在化合物C63中：X=Se、

化合物C70至C72，其各自
自由下式表示：

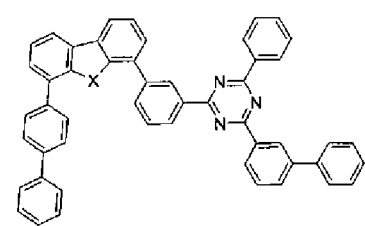


其中在化合物C70中：X=O，

在化合物C71中：X=S，

在化合物C72中：X=Se、

化合物C79至C81，其各自
自由下式表示：

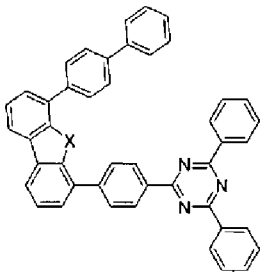


其中在化合物C79中：X=O，

在化合物C80中：X=S，

在化合物C81中：X=Se、

化合物C88至C90，其各自
自由下式表示：



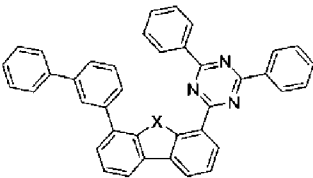
其中在化合物C82中：

X=O，

在化合物C83中：X=S，

在化合物C84中：X=Se、

化合物C91至C93，其各自自由下式表示：



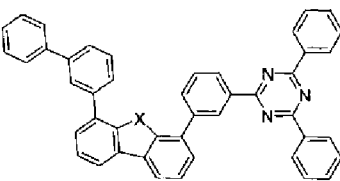
其中在化合物C91中：

X=O，

在化合物C92中：X=S，

在化合物C93中：X=Se、

化合物C100至C102，其各自自由下式表示：



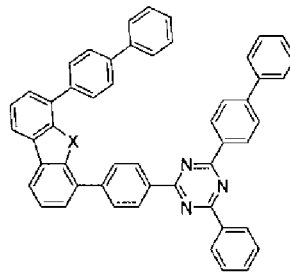
其中在化合物C100中：

X=O，

在化合物C101中：X=S，

在化合物C102中：X=Se、

化合物C109至C111，其各自自由下式表示：

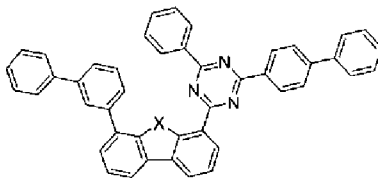


其中在化合物C85中：X=O，

在化合物C86中：X=S，

在化合物C87中：X=Se、

化合物C94至C96，其各自自由下式表示：

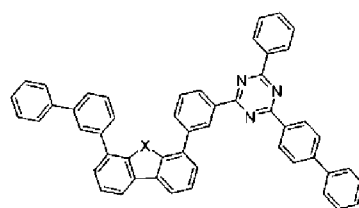


其中在化合物C94中：X=O，

在化合物C95中：X=S，

在化合物C96中：X=Se、

化合物C103至C105，其各自自由下式表示：

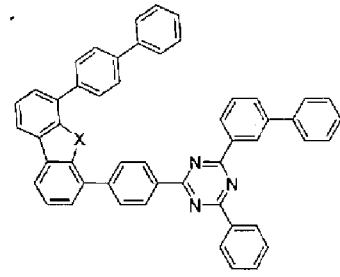


其中在化合物C103中：X=O，

在化合物C104中：X=S，

在化合物C105中：X=Se、

化合物C112至C114，其各自自由下式表示：

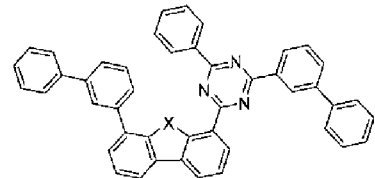


其中在化合物C88中：X=O，

在化合物C89中：X=S，

在化合物C90中：X=Se、

化合物C97至C99，其各自自由下式表示：

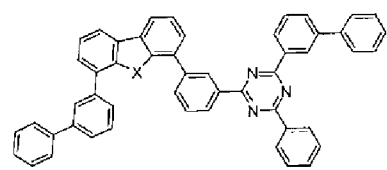


其中在化合物C97中：X=O，

在化合物C98中：X=S，

在化合物C99中：X=Se、

化合物C106至C108，其各自自由下式表示：



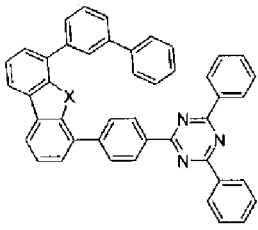
其中在化合物C106中：

X=O，

在化合物C107中：X=S，

在化合物C108中：X=Se、

化合物C115至C117，其各自自由下式表示：



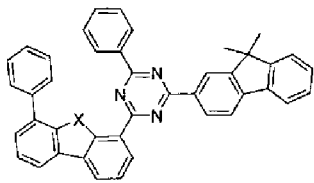
其中在化合物C109中：

X=O，

在化合物C110中：X=S，

在化合物C111中：X=Se、

化合物C118至C120，其各自自由下式表示：



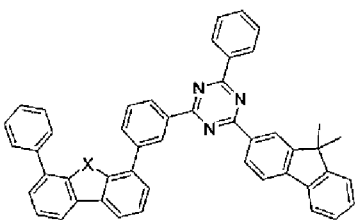
其中在化合物C118中：

X=O，

在化合物C119中：X=S，

在化合物C120中：X=Se、

化合物C127至C129，其各自自由下式表示：

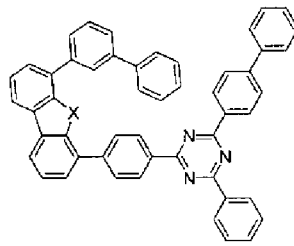


其中在化合物C127中：

X=O，

在化合物C128中：X=S，

在化合物C129中：X=Se、

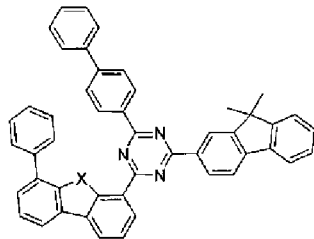


其中在化合物C112中：X=O，

在化合物C113中：X=S，

在化合物C114中：X=Se、

化合物C121至C123，其各自自由下式表示：

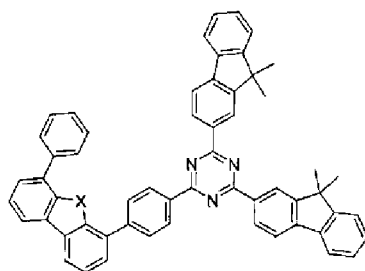


其中在化合物C121中：X=O，

在化合物C122中：X=S，

在化合物C123中：X=Se、

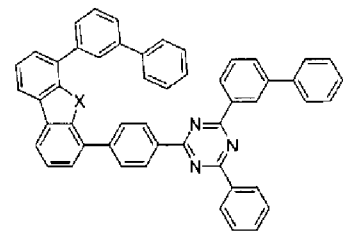
化合物C130至C132，其各自自由下式表示：



其中在化合物C130中：X=O，

在化合物C131中：X=S，

在化合物C132中：X=Se、



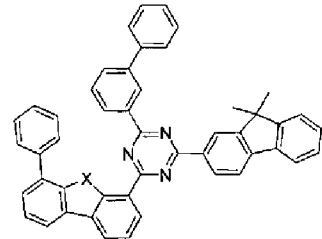
其中在化合物C115中：

X=O，

在化合物C116中：X=S，

在化合物C117中：X=Se、

化合物C124至C126，其各自自由下式表示：



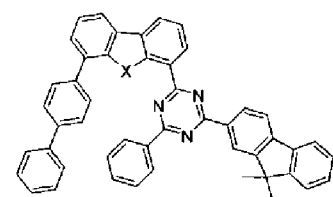
其中在化合物C124中：

X=O，

在化合物C125中：X=S，

在化合物C126中：X=Se、

化合物C133至C135，其各自自由下式表示：



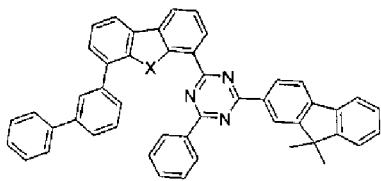
其中在化合物C133中：

X=O，

在化合物C134中：X=S，

在化合物C135中：X=Se、

化合物C136至C138，其各自自由下式表示：

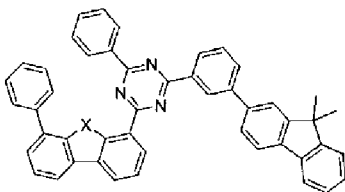


其中在化合物C136中：
X=O，

在化合物C137中：X=S，

在化合物C138中：X=Se、

化合物C145至C147，其各自自由下式表示：

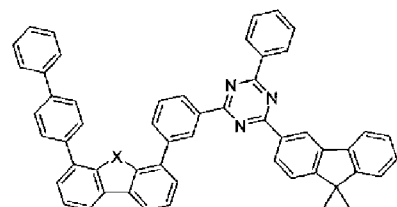


其中在化合物C145中：
X=O，

在化合物C146中：X=S，

在化合物C147中：X=Se、

化合物C154至C156，其各自自由下式表示：

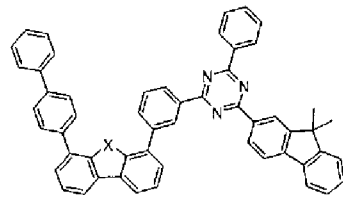


其中在化合物C154中：
X=O，

在化合物C155中：X=S，

在化合物C156中：X=Se、

化合物C139至C141，其各自自由下式表示：

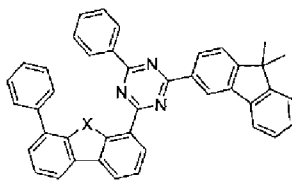


其中在化合物C139中：X=O，

在化合物C140中：X=S，

在化合物C141中：X=Se、

化合物C148至C150，其各自自由下式表示：

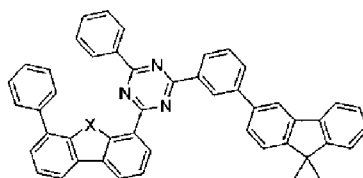


其中在化合物C148中：X=O，

在化合物C149中：X=S，

在化合物C150中：X=Se、

化合物C157至C159，其各自自由下式表示：

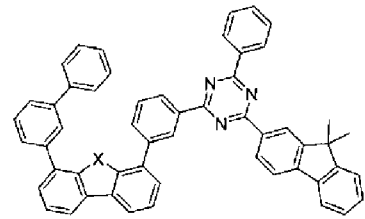


其中在化合物C157中：X=O，

在化合物C158中：X=S，

在化合物C159中：X=Se、

化合物C142至C144，其各自自由下式表示：

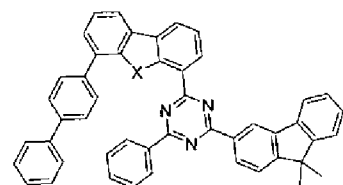


其中在化合物C142中：
X=O，

在化合物C143中：X=S，

在化合物C144中：X=Se、

化合物C151至C153，其各自自由下式表示：

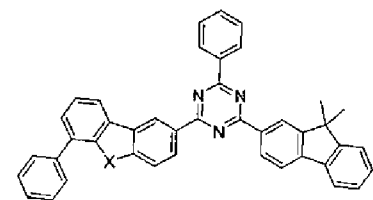


其中在化合物C151中：
X=O，

在化合物C152中：X=S，

在化合物C153中：X=Se、

化合物C160至C162，其各自自由下式表示：

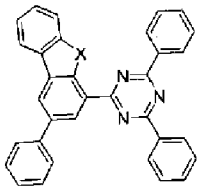


其中在化合物C160中：
X=O，

在化合物C161中：X=S，

在化合物C162中：X=Se、

化合物C163至C165，其各自自由下式表示：

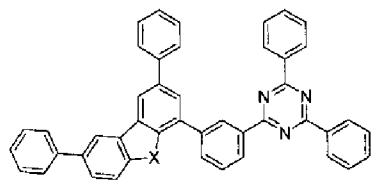


其中在化合物C163中：
X=O，

在化合物C164中：X=S，

在化合物C165中：X=Se、

化合物C172至C174，其各自自由下式表示：

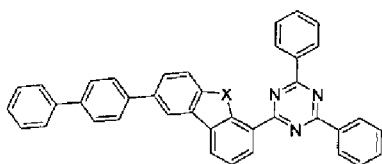


其中在化合物C172中：
X=O，

在化合物C173中：X=S，

在化合物C174中：X=Se、

化合物C181至C183，其各自自由下式表示：

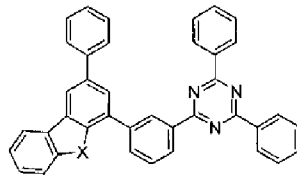


其中在化合物C181中：
X=O，

在化合物C182中：X=S，

在化合物C183中：X=Se、

化合物C166至C168，其各自自由下式表示：

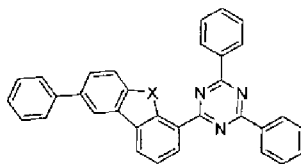


其中在化合物C166中：X=O，

在化合物C167中：X=S，

在化合物C168中：X=Se、

化合物C175至C177，其各自自由下式表示：

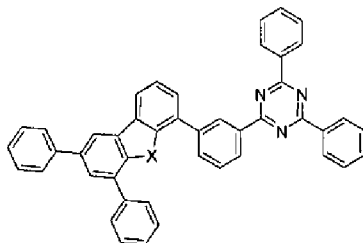


其中在化合物C175中：X=O，

在化合物C176中：X=S，

在化合物C177中：X=Se、

化合物C184至C186，其各自自由下式表示：

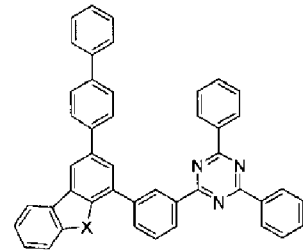


其中在化合物C184中：X=O，

在化合物C185中：X=S，

在化合物C186中：X=Se、

化合物C169至C171，其各自自由下式表示：

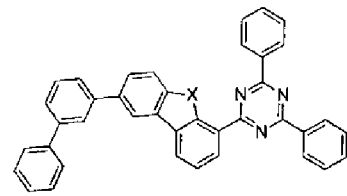


其中在化合物C169中：
X=O，

在化合物C170中：X=S，

在化合物C171中：X=Se、

化合物C178至C180，其各自自由下式表示：

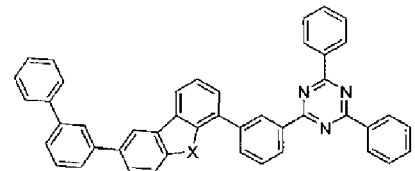


其中在化合物C178中：
X=O，

在化合物C179中：X=S，

在化合物C180中：X=Se、

化合物C187至C189，其各自自由下式表示：

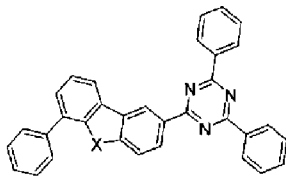


其中在化合物C187中：
X=O，

在化合物C188中：X=S，

在化合物C189中：X=Se、

化合物C190至C192，其各自自由下式表示：

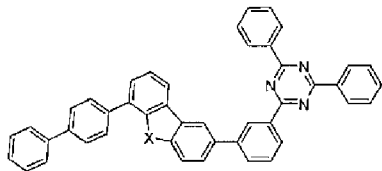


其中在化合物C190中：
X=O，

在化合物C191中：X=S，

在化合物C192中：X=Se、

化合物C199至C201，其各自自由下式表示：

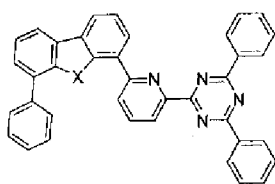


其中在化合物C199中：
X=O，

在化合物C200中：X=S，

在化合物C201中：X=Se、

化合物C208至C210，其各自自由下式表示：



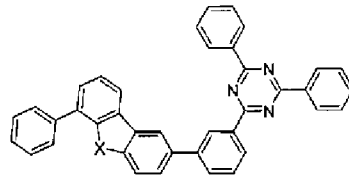
其中在化合物C208中：
X=O，

在化合物C209中：X=S，

在化合物C210中：X=Se、

化合物C217至C219，其各自自由下式表示：

化合物C193至C195，其各自自由下式表示：

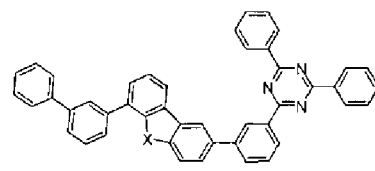


其中在化合物C193中：X=O，

在化合物C194中：X=S，

在化合物C195中：X=Se、

化合物C202至C204，其各自自由下式表示：

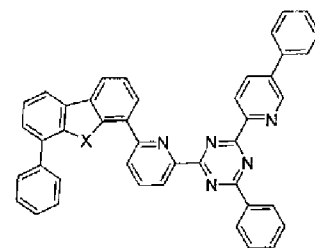


其中在化合物C202中：X=O，

在化合物C203中：X=S，

在化合物C204中：X=Se、

化合物C211至C213，其各自自由下式表示：



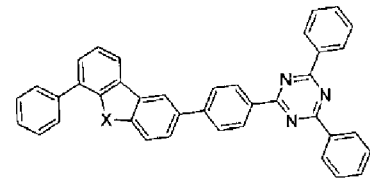
其中在化合物C211中：X=O，

在化合物C212中：X=S，

在化合物C213中：X=Se、

化合物C220至C222，其各自自由下式表示：

化合物C196至C198，其各自自由下式表示：

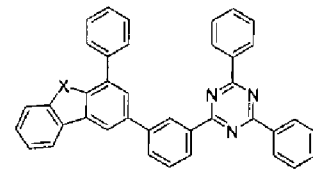


其中在化合物C196中：
X=O，

在化合物C197中：X=S，

在化合物C198中：X=Se、

化合物C205至C207，其各自自由下式表示：

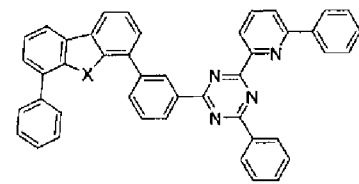


其中在化合物C205中：
X=O，

在化合物C206中：X=S，

在化合物C207中：X=Se、

化合物C214至C216，其各自自由下式表示：

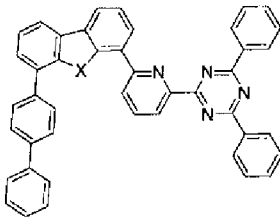


其中在化合物C214中：
X=O，

在化合物C215中：X=S，

在化合物C216中：X=Se、

化合物C223至C225，其各自自由下式表示：

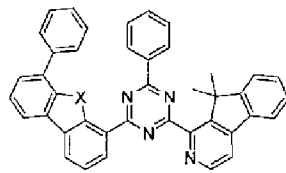


其中在化合物C217中：
X=O，

在化合物C218中：X=S，

在化合物C219中：X=Se、

化合物C226至C228，其各自自由下式表示：

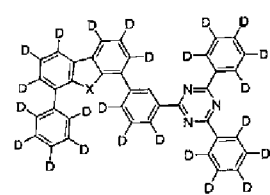


其中在化合物C226中：
X=O，

在化合物C227中：X=S，

在化合物C228中：X=Se、

化合物C235至C237，其各自自由下式表示：

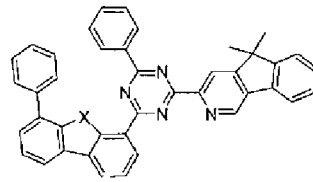


其中在化合物C235中：
X=O，

在化合物C236中：X=S，

在化合物C237中：X=Se、

化合物C244至C246，其各自自由下式表示：

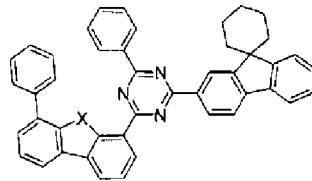


其中在化合物C220中：X=O，

在化合物C221中：X=S，

在化合物C222中：X=Se、

化合物C229至C231，其各自自由下式表示：

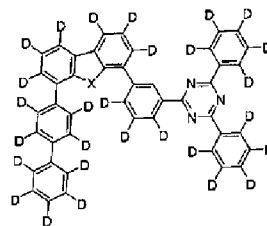


其中在化合物C229中：X=O，

在化合物C230中：X=S，

在化合物C231中：X=Se、

化合物C238至C240，其各自自由下式表示：

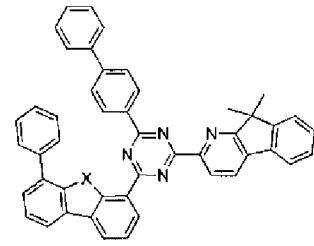


其中在化合物C238中：X=O，

在化合物C239中：X=S，

在化合物C240中：X=Se、

化合物C247至C249，其各自自由下式表示：

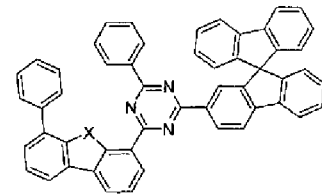


其中在化合物C223中：
X=O，

在化合物C224中：X=S，

在化合物C225中：X=Se、

化合物C232至C234，其各自自由下式表示：

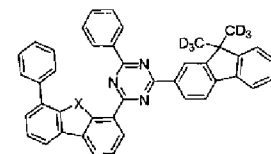


其中在化合物C232中：
X=O，

在化合物C233中：X=S，

在化合物C234中：X=Se、

化合物C241至C243，其各自自由下式表示：

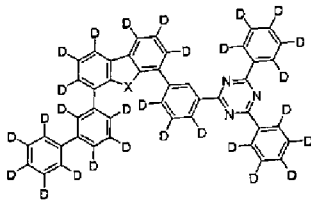


其中在化合物C241中：
X=O，

在化合物C242中：X=S，

在化合物C243中：X=Se、

化合物C250至C252，其各自自由下式表示：



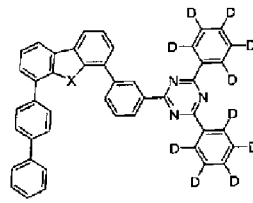
其中在化合物C244中：

X=O，

在化合物C245中：X=S，

在化合物C246中：X=Se、

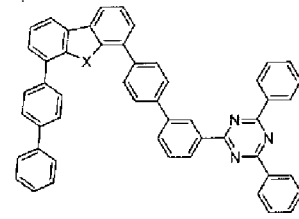
化合物C253至C255，其各自自由下式表示：



其中在化合物C247中：X=O，

在化合物C248中：X=S，

在化合物C249中：X=Se、

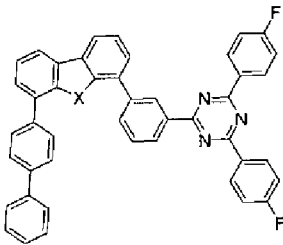


其中在化合物C250中：

X=O，

在化合物C251中：X=S，

在化合物C252中：X=Se、及



其中在化合物C253中：

X=O，

在化合物C254中：X=S，

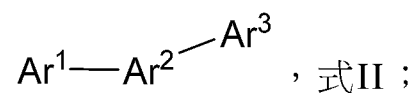
在化合物C255中：X=Se。

【請求項13】

一種材料組合物，其包含如請求項1至12中任一項之主體材料。

【請求項14】

如請求項13之材料組合物，其進一步包含第二化合物，其中該第二化合物具有式II：



其中Ar¹選自由聯伸三苯及氮雜-聯伸三苯組成之群；

其中Ar²選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、萘、吡啶、二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩、氮雜二苯并呋

喃、氮雜二苯并噻吩、氮雜二苯并硒吩及其組合；

其中 Ar^3 選自由以下組成之群：苯、聯苯、聯三苯、萘、吡啶、二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩、氮雜-二苯并呋喃、氮雜-二苯并噻吩、氮雜-二苯并硒吩、咪唑、氮雜-咪唑及其組合；且

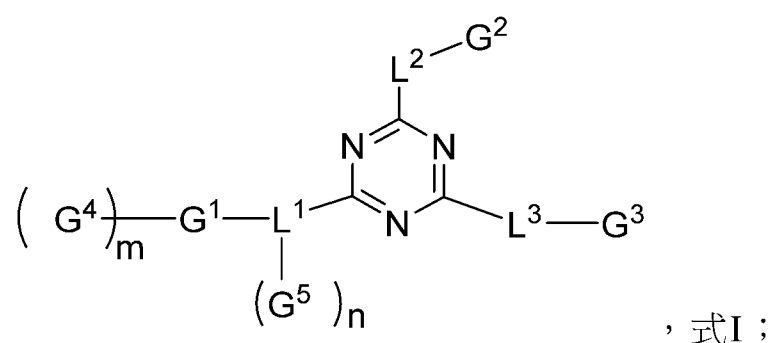
其中 Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 各自獨立地視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的取代基取代：氬、鹵素、烷基、芳基、雜芳基及其組合。

【請求項15】

一種發光裝置，其包含如請求項13或14之材料組合物。

【請求項16】

一種發光裝置，其包括包含第一化合物及第二化合物之組合物，其中該第一化合物具有式I：



其中 G^1 選自由以下組成之群：二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩及萸；

其中 L^1 、 L^2 及 L^3 各自獨立地選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶、嘧啶及其組合；

其中 G^4 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉及其組合；

其中 G^2 、 G^3 及 G^5 各自獨立地選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萸、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉、氮雜萸及

其組合；

其中 G^2 、 G^3 、 G^4 及 G^5 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氬、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合；

其中 m 為 0 至 7 之整數，

其中 n 為 0 至 4 之整數；

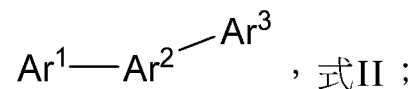
其中當 m 或 n 大於 1 時，各 G^4 或 G^5 可相同或不同；

其中當 n 為 0 且 m 等於或大於 1 時，各 G^4 選自由苯基及聯苯組成之群；

其中當 n 等於或大於 1 時， L^1 不為直接鍵；且

其中當 m 及 n 均為 0 時， L^1 為聯苯；且

其中該第二化合物具有式 II：



其中 Ar^1 選自由聯伸三苯及氮雜-聯伸三苯組成之群；

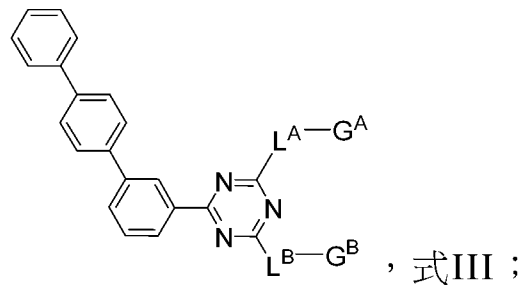
其中 Ar^2 選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、萘、吡啶、二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩、氮雜二苯并呋喃、氮雜二苯并噻吩、氮雜二苯并硒吩及其組合；

其中 Ar^3 選自由以下組成之群：苯、聯苯、聯三苯、萘、吡啶、二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩、氮雜-二苯并呋喃、氮雜-二苯并噻吩、氮雜-二苯并硒吩、咪唑、氮雜-咪唑及其組合；且

其中 Ar^1 、 Ar^2 及 Ar^3 各自獨立地視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的取代基取代：氬、鹵素、烷基、芳基、雜芳基及其組合。

【請求項 17】

一種用於有機發光裝置(OLED)之主體材料，其中該主體材料包含具有式III之化合物：

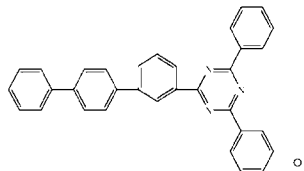


其中 L^A 及 L^B 選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、吡啶及其組合；

其中 G^A 及 G^B 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、吡啶、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩及萸；且

其中 G^A 及 G^B 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氬、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合；

其限制條件為該第一化合物不為下式之化合物：

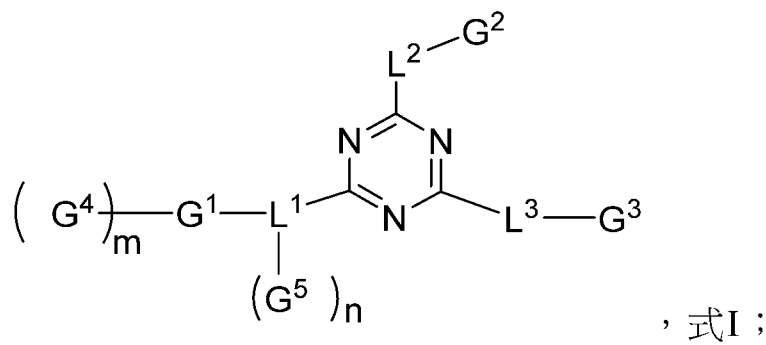


【請求項18】

一種調配物，其包含如請求項1至12及17中任一項之主體材料。

【請求項19】

一種包含第一化合物及第二化合物之組合物，其中該第一化合物具有式I：



其中 G^1 選自由以下組成之群：二苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并硒吩及萸；

其中 L^1 、 L^2 及 L^3 各自獨立地選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶、嘧啶及其組合；

其中 G^4 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉及其組合；

其中 G^2 、 G^3 及 G^5 各自獨立地選自由以下組成之群：苯基、聯苯、聯三苯、萸、萘、菲、吡啶、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、啡啉、氮雜萸及其組合；

其中 G^2 、 G^3 、 G^4 及 G^5 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氬、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合；

其中 m 為0至7之整數，

其中 n 為0至4之整數；

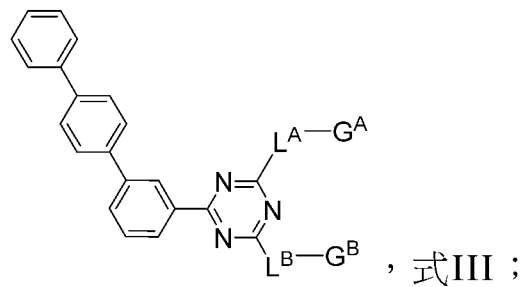
其中當 m 或 n 大於1時，各 G^4 或 G^5 可相同或不同；

其中當 n 為0且 m 等於或大於1時，各 G^4 選自由苯基及聯苯組成之群；

其中當 n 等於或大於1時， L^1 不為直接鍵；且

其中當 m 及 n 均為0時， L^1 為聯苯；且

其中該第二化合物具有式III：



其中 L^A 及 L^B 選自由以下組成之群：直接鍵、苯基、聯苯、吡啶及其組合；

其中 G^A 及 G^B 選自由以下組成之群：苯基、聯苯、吡啶、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩及萸；且

其中 G^A 及 G^B 各自視情況進一步經一或多個選自由以下組成之群的非稠合取代基取代：氫、烷基、烷氧基、環烷基、環烷氧基、鹵素、硝基、腈、矽烷基、苯基、聯苯、聯三苯、吡啶及其組合。

【請求項20】

一種發光裝置，其包含如請求項19之組合物。

【請求項21】

一種有機發光裝置 (OLED)，該有機發光裝置包含：

陽極；

陰極；及

安置在該陽極與該陰極之間的有機層，該有機層包含如請求項1至12及17中任一者之主體材料、如請求項13或14之材料組合物或如請求項19之組合物。

【請求項22】

一種消費型產品，該消費型產品包含如請求項21之有機發光裝置。

【請求項23】

如請求項22之消費型產品，其中該消費型產品係選自由以下組成之

群：平板顯示器、全透明或部分透明顯示器及可撓性顯示器。

【請求項24】

如請求項22之消費型產品，其中該消費型產品係選自由以下組成之群：電腦監視器、醫療監視器、電視機、平視顯示器、雷射印刷機、膝上型電腦及平板顯示器。

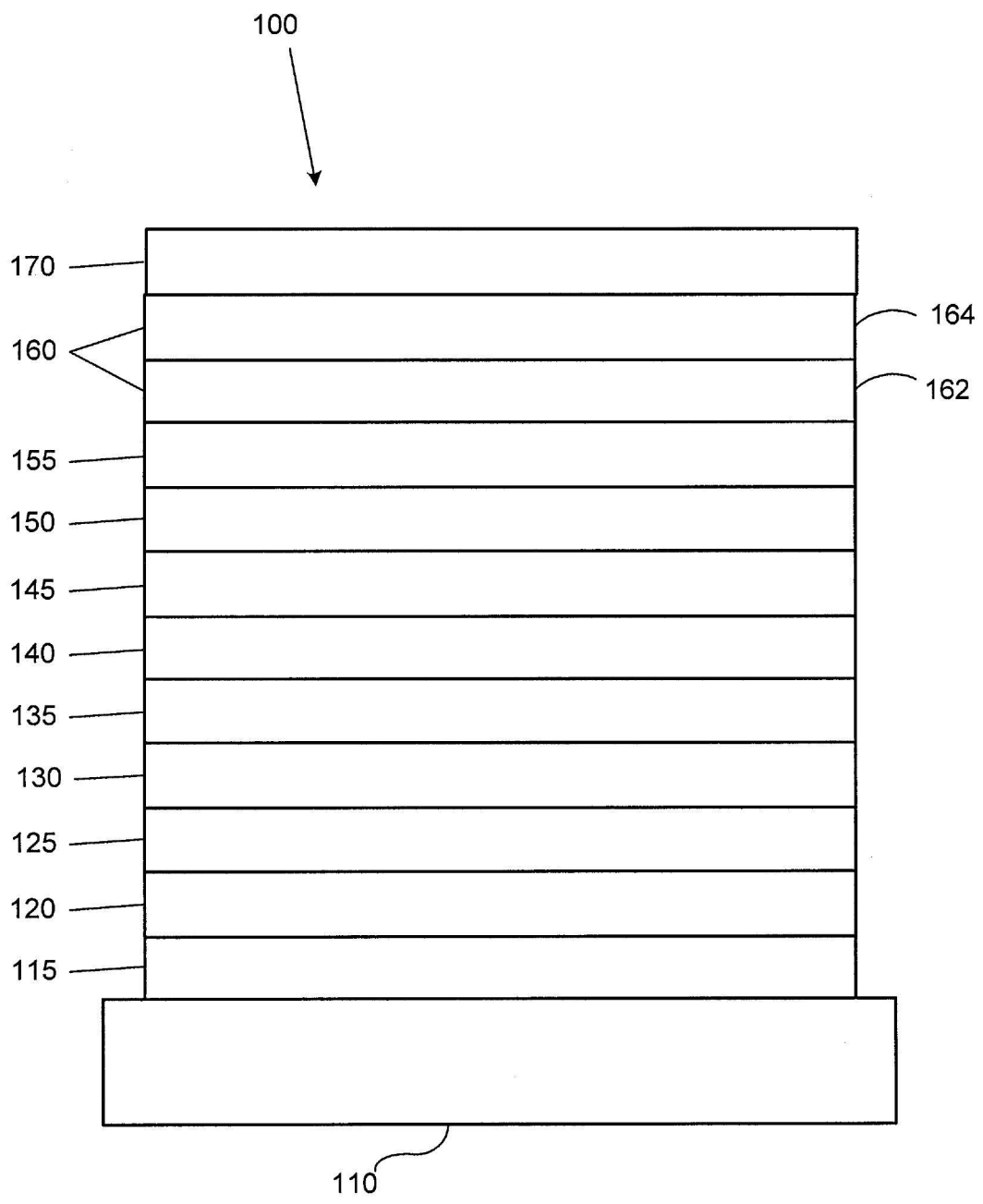
【請求項25】

如請求項22之消費型產品，其中該消費型產品係選自由以下組成之群：電話、蜂巢式電話、平板電腦、平板手機、個人數位助理(PDA)、數位相機、攝錄像機、取景器、微顯示器及3-D顯示器。

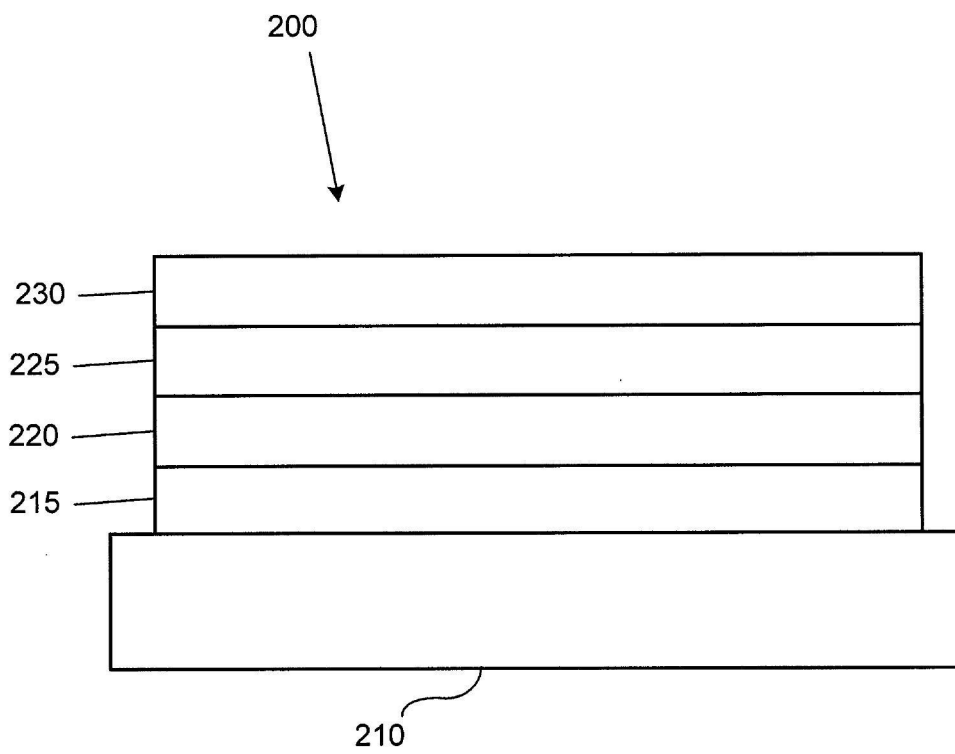
【請求項26】

如請求項22之消費型產品，其中該消費型產品係選自由以下組成之群：告示牌、用於內部或外部照明及/或發信號的燈、交通工具、大面積牆壁、劇院或體育館螢幕及指示牌。

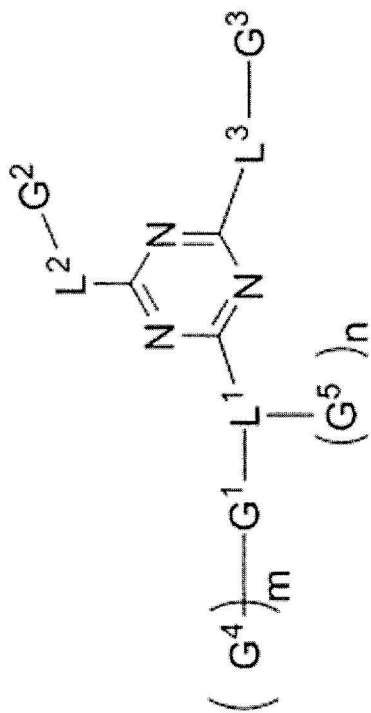
【發明圖式】



【圖1】

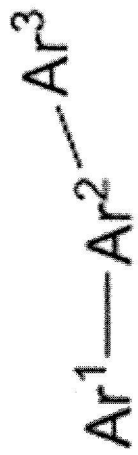


【圖2】



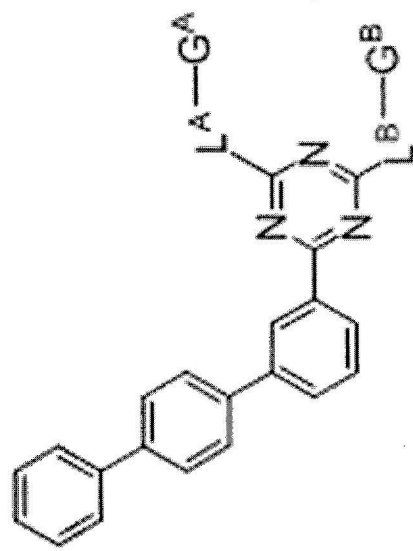
式I

【圖3】



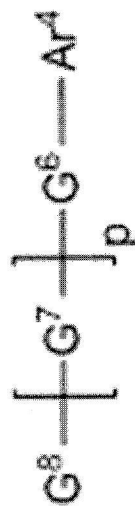
式II

【圖4】



式III

【圖5】



式IV

【圖6】