

公告本**發明專利說明書**

(本申請書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：97119383

※申請日期：97年05月26日

※IPC分類：C09K 11/06 (2006.01)

一、發明名稱：

H01L 51/54 (2006.01)

(中) 有機電發光裝置用的新穎材料

H01L 51/30 (2006.01)

(英) Novel materials for organic electroluminescent devices

二、申請人：(共 1 人)

1. 姓 名：(中) 麥克專利有限公司

(英) MERCK PATENT GMBH

代表人：(中) 1. 瑞赫德 史卡特勒 2. 安娜特 華格納

(英) 1. SCHUTTLE, REINHARD 2. WAGNER, ANNETTE

地 址：(中) 德國達木士塔法蘭克福特路 2 5 0 號

(英) Frankfurter Strasse 250, D-64293 Darmstadt Germany

國籍：(中英) 德國 GERMANY

三、發明人：(共 3 人)

1. 姓 名：(中) 菲利普 史托希爾

(英) STOESSEL, PHILIPP

國 籍：(中) 德國

(英) GERMANY

2. 姓 名：(中) 雅恩 布辛

(英) BUESING, ARNE

國 籍：(中) 德國

(英) GERMANY

3. 姓 名：(中) 荷葛 海爾

(英) HEIL, HOLGER

國 籍：(中) 德國

(英) GERMANY

四、聲明事項：◎本案申請前已向下列國家(地區)申請專利 ☐ 主張國際優先權：

【格式請依：受理國家（地區）；申請日；申請案號數 順序註記】

1. 德國 ; 2007/05/29 ; 102007024850.6 ☒有主張優先權

五、中文發明摘要

發明之名稱：有機電發光裝置用的新穎材料

本發明係有關式(1)化合物和有機電發光裝置，特別是藍色發光裝置，其中使用這些化合物作為發光層中之主體材料或摻雜劑及/或作為電洞傳輸材料及/或作為電子傳輸材料。

六、英文發明摘要

發明之名稱：Novel materials for organic electroluminescent devices

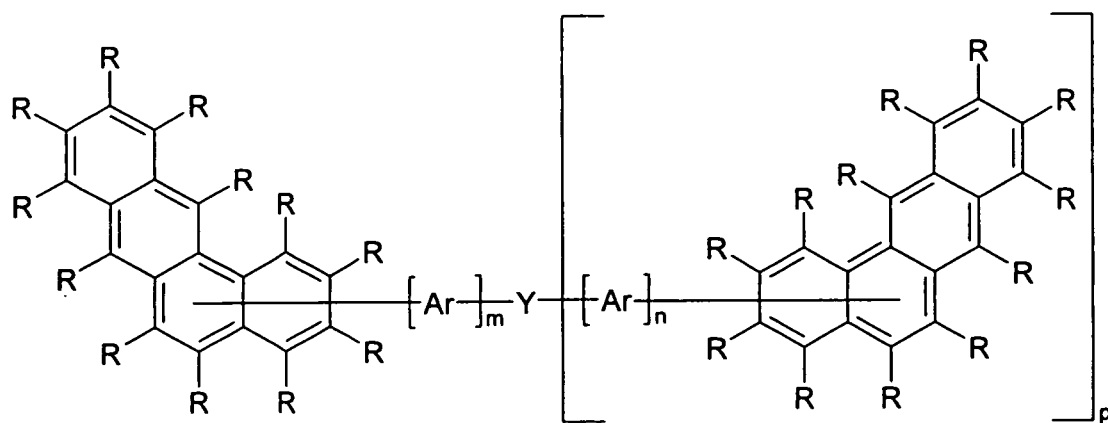
The present invention relates to the compounds of the formula (1) and to organic electroluminescent devices, in particular blue-emitting devices, in which these compounds are used as host material or dopant in the emitting layer and/or as hole-transport material and/or as electron-transport material.

七、指定代表圖：

(一)、本案指定代表圖為：無

(二)、本代表圖之元件代表符號簡單說明：無

八、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：式(1)



式 (1)

九、發明說明

【發明所屬之技術領域】

本發明係有關有機半導體和其於有機電子裝置之用途。有機半導體正被發展許多不同類型的電子應用。

【先前技術】

有機電發光裝置（OLED）之結構（其中使用這些有機半導體作為功能材料）描述於例如 US 4539507、US 5151629、EP 0676461 和 WO 98/27136。然而，在這些裝置可使用於高品質和長命的顯示器之前需要進一步改良。因此，特別是，藍色-發光有機電發光裝置之不適當壽命和不適當效率目前仍然表現還沒有被滿意地解決的問題。此外，化合物必須具有高熱安定性和高玻璃轉移溫度且可被昇華的而不分解。特別是對於高溫之使用，為了要達成長壽命，高玻璃轉移溫度是必要的。

對於螢光 OLED，根據先前技藝主要地使用縮合芳族化合物（特別是蔥衍生物）作為主體材料，特別是用於藍色-發光電發光裝置，例如 9,10-雙（2-萘基）蔥（US 5935721）。WO 03/095445 和 CN 1362464 描述用於 OLED 中之 9,10-雙（1-萘基）蔥衍生物。另外蔥衍生物係描述於 WO 01/076323、WO 01/021729、WO 04/013073、WO 04/018588、WO 03/087023 或 WO 04/018587 中。以芳基-經取代之芘類和蒽類為主之主體材料係描述於 WO 04/016575 中。為了高品質應用，其必須具有可得之

改良主體材料。

在藍色-發光化合物之情形中可提及的先前技術為芳基乙烯基胺類之用途（例如 WO 04/013073、WO 04/016575、WO 04/018587）。然而，這些化合物為熱不穩定且不能被蒸發而不會被分解，其需要用於 OLED 製備之高技術複雜性和因此代表技術缺點。因此高品質應用需要具有可利用的改良發光體，特別是有關裝置和昇華穩定性及發光顏色。

因此仍持續有改良材料（特別是用於螢光發光體，尤其是用於藍色螢光發光體）之主體材料，以及在有機電子裝置中為熱穩定性、產生良好效率和同時長的壽命、在裝置之製備及操作期間產生可再現的結果且合成上是容易地可處理之螢光材料的需求。在電洞-和電子傳輸材料情形中也需要進一步改良。

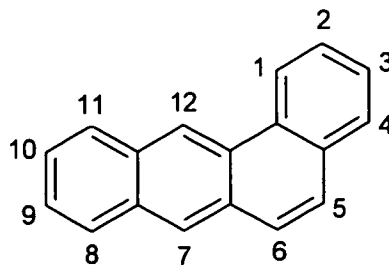
令人驚訝地，頃發現在 2、3、4、5 或 6 位置之至少一個經芳族或雜芳族基團、經二芳胺基基團或經一個下述定義之其他基團取代之苯并[a]蒽衍生物非常適合使用於有機電發光裝置。與根據先前技藝之材料比較，這些化合物能夠增加有機電子裝置的效率和尤其是壽命。此特別適用於藍色-螢光裝置。此外，這些化合物具有高熱穩定性。一般，這些材料非常適合使用於有機電子裝置，因為他們具有高玻璃轉移溫度。本發明因此有關這些材料和有關其在有機電子裝置中之用途。

在這些位置經芳族取代基取代之苯并[a]蒽衍生物已零

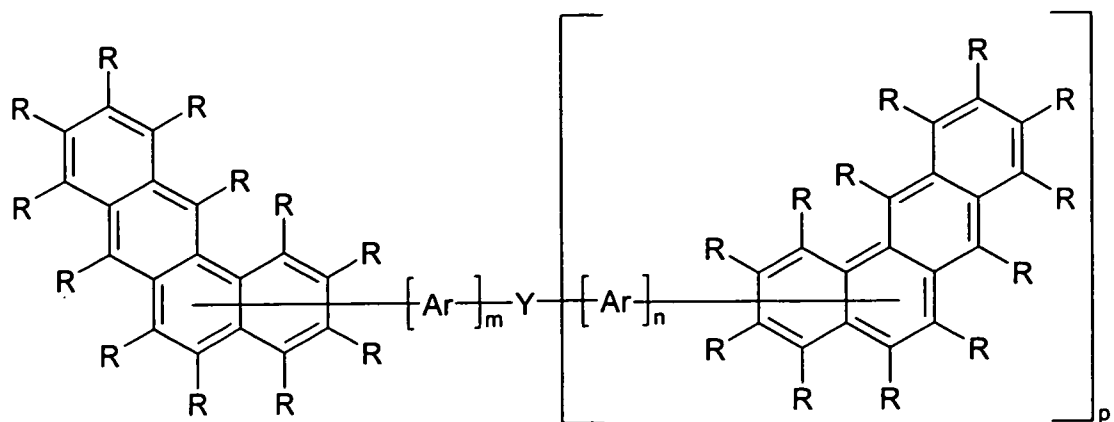
星地描述於文獻中（例如 K. Maruyama 等人，Chem. Lett. 1975, (1), 87-88；C. L. L. Chai 等人，Austr. J. Chem. 1995, 48(3), 577-591, M. C. Kloetzel 等人，J. Org. Chem. 1961, 26, 1748-1754 等等）。然而，只有這些化合物之合成和反應性已經被研究。這些化合物在有機電子裝置之用途沒有被提議。此外，WO 05/090365 已揭示多數的包含多環芳族基團之有機矽烷化合物，特別是使用於有機電發光裝置，除很多其他化合物之外，也包括芳基-經取代之苯并蔥之化合物。這些化合物的特別效果在此歸因於有機矽基團之存在而非歸因於經取代之苯并蔥骨架。

【發明內容】

爲了清楚起見，苯并[a]蔥之結構和編號顯示於下：



本發明係有關一種式（1）之不帶電化合物



式 (1)

其中基團 Ar 或 Y 經由苯并[a]蔥的 2、3、4、5 或 6 位置之一鍵結且對應地沒有基團 R 在此位置鍵結，和其中下列適用於該等符號和指標：

Ar 在每次發生時相同或不同地表示具有 5 至 40 個芳族環原子之二價芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個基團 R 取代；

Y 視指標 p 而定，為具有 5 至 40 個芳族環原子之單 -、二 -、三 -、四 -、五 - 或六價芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個基團 R 取代；或如果 $p = 0$ ，則 Y 為 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 或 $P(=O)(Ar^1)_2$ 基團；或如果 $p = 1$ ，則 Y 為單鍵或 $C=O$ 、 O 、 S 、 SO 、 SO_2 、 NR^1 、 NAr^1 、 PAr^1 、 $P(=O)Ar^1$ 、 $P(=S)Ar^1$ 、 $O-B(Ar^1)-O$ 、 $O-BR^1-O$ 、 BAr^1 、 $-CR^1=CR^1-$ 、 $-C\equiv C-$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之伸烷基或亞烷基基團，其每個也可經一或更多個基團 R^1 取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $R^1C=CR^1$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $Ge(R^1)_2$ 、 $Sn(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^1$ 、

$P(=O)(R^1)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^1 、 O 、 S 或 $CONR^1$ 替換和其中一或多個 H 原子可經 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替換；或，如果 $p = 2$ ，則 Y 等於 B 、 B_3O_3 、 CR^1 、 CAr^1 、 N 、 P 、 $P=O$ 或 $P=S$ ；

R 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CHO 、 $N(Ar^1)_2$ 、 $N(R^2)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(Ar^1)_2$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、 $S(=O)Ar^1$ 、 $S(=O)_2Ar^1$ 、 $CR^1=CR^1Ar^1$ 、 CN 、 NO_2 、 $Si(R^1)_3$ 、 $B(OAr^1)_2$ 、 $B(OR^1)_2$ 、 OSO_2R^1 、 OH 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基或硫烷基基團或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烷氧基基團或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基基團，其每個可經一或更多個基團 R^1 取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $R^1C=CR^1$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $Ge(R^1)_2$ 、 $Sn(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^1$ 、 $P(=O)(R^1)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^1 、 O 、 S 或 $CONR^1$ 替換和其中一或多個 H 原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替換，或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個非-芳族基團 R 取代、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基或雜芳氧基基團，其可經一或多個非-芳族基團 R 取代、或這些系統之組合；二或多個相鄰取代基 R 在此也可彼此形成單-或多環脂族環系統；

Ar^1 在每次發生時相同或不同地為具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個非-芳族基團 R 取代；二個鍵結至相同氮或磷原子上之 Ar^1 基團也

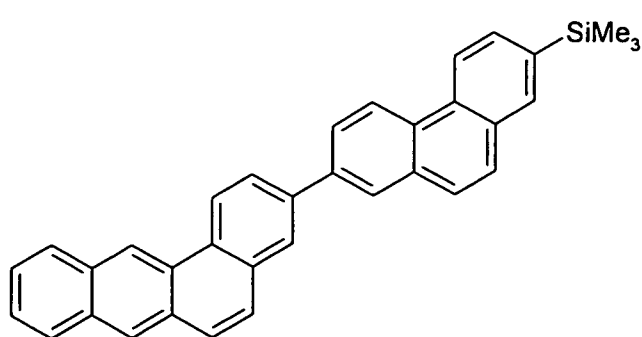
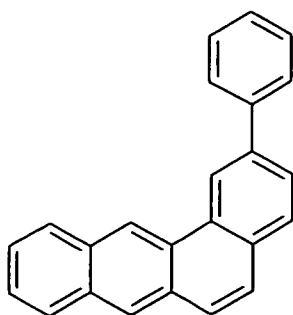
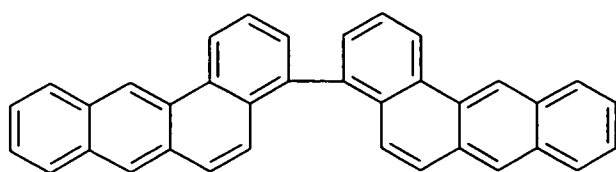
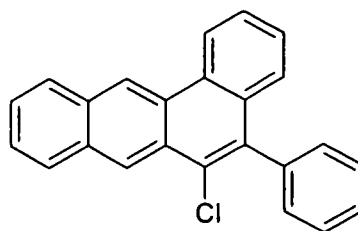
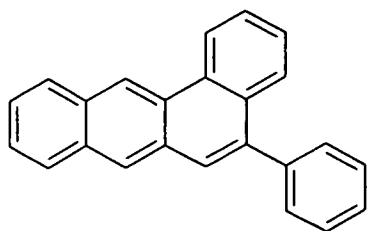
可以單鍵或選自 $B(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、 O 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^1)$ 、 $P(R^1)$ 和 $P(=O)R^1$ 之橋聯彼此連接；

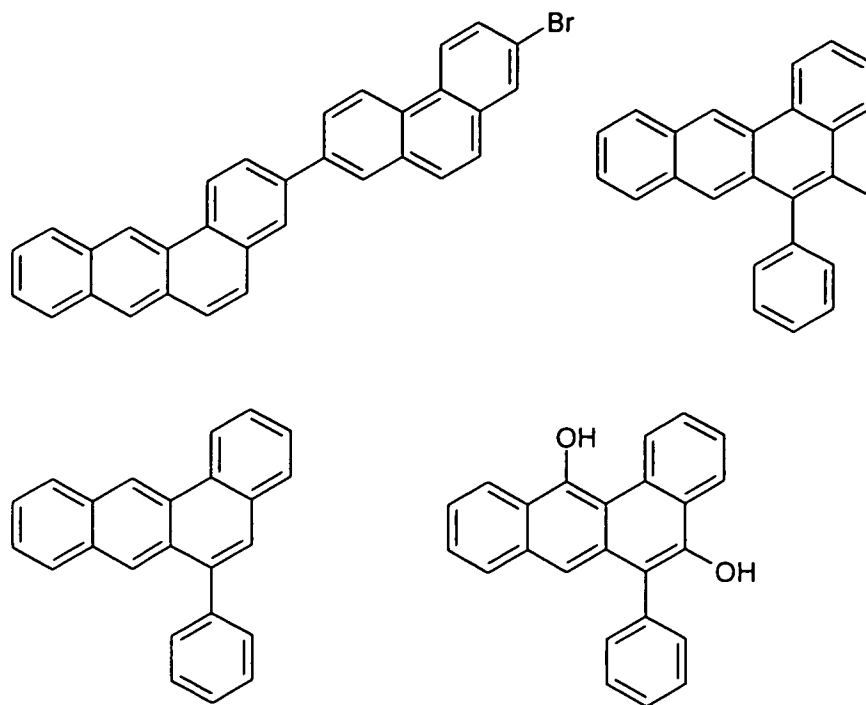
R^1 在每次發生時相同或不同地為 H 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂族、芳族及 / 或雜芳族烴基團，其中，除此之外，一或多個 H 原子可經 F 替換；二或多個相鄰取代基 R^1 在此也可彼此形成單 - 或多環脂族或芳族環系統；

m 、 n 在每次發生時相同或不同地為 0、1、2 或 3；

p 為 0、1、2、3、4 或 5；

下列化合物從本發明排除：





式 (1) 化合物較佳地具有大於 70°C , 特佳大於在 100°C , 非常特佳大於 130°C 之玻璃轉移溫度 T_g 。

爲了本發明, 芳基基團包含 6 至 60 個 C 原子; 爲了本發明, 雜芳基基團包含 2 至 60 個 C 原子和至少一種雜原子, 其先決條件爲 C 原子和雜原子之總和爲至少 5。雜原子較佳係選自 N、O 及 / 或 S。芳基基團或雜芳基基團在此表示簡單芳族環, 也就是苯, 或簡單雜芳族環, 例如吡啶、嘧啶、噻吩、等等、或縮合芳基或雜芳基基團, 例如萘、蒽、芘、喹啉、異喹啉、苯并咪唑、菲、等等。

爲了本發明, 芳族環系統在環系統中包含 6 至 40 個 C 原子。爲了本發明, 雜芳族環系統在環系統中包含 2 至 40 個 C 原子和至少一種雜原子, 其先決條件爲 C 原子和雜原子之總和爲至少 5。雜原子較佳係選自 N、O 及 / 或 S。爲了本發明, 芳族或雜芳族環系統意欲表示一種系統, 其不一定只包含芳族或雜芳族基基團, 而改爲其中多

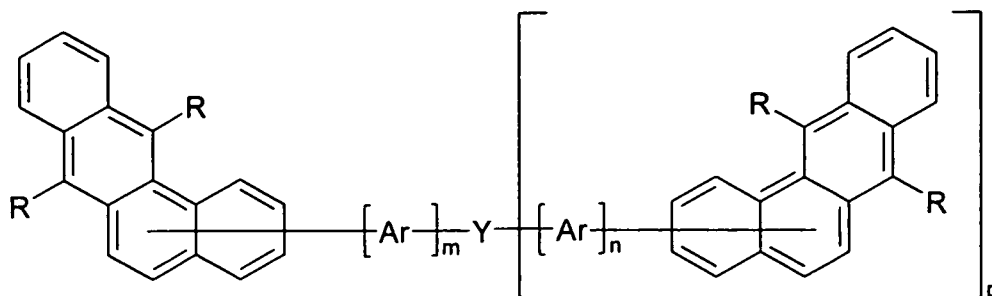
數個芳族或雜芳族基基團也可被短非芳族單元（較佳 <10% 之非 H 的原子），例如 sp^3 -混成之 C、N 或 O 原子中斷。因此，例如 9,9'-螺-二芴、9,9-二芳基芴、三芳胺、二芳基醚類、二苯乙烯、二苯基酮、等等系統爲了本發明也意欲表示芳族環系統。同樣地，芳族或雜芳族環系統表示其中多數個芳基或雜芳基基團藉由單鍵彼此連接之系統，例如聯苯、聯三苯或聯吡啶。

爲了本發明， C_1 -至 C_{40} -烷基基團，其中，除此之外，個別 H 原子或 CH_2 基也可經上述基團取代，特佳表示基團甲基、乙基、正丙基、異-丙基、正丁基、異-丁基、第二-丁基、第三-丁基、2-甲基丁基、正戊基、第二-戊基、環戊基、正己基、環己基、正庚基、環庚基、正辛基、環辛基、2-乙基己基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、庚烯基、環庚烯基、辛烯基、環辛烯基、乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基或辛炔基。 C_1 -至 C_{40} -烷氧基基團特佳表示甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異-丙氧基、正丁氧基、異-丁氧基、第二-丁氧基、第三-丁氧基或 2-甲基丁氧基。具有 5-40 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情形中也可經上述基團 R 取代和其可經由芳族或雜芳族環上之任何所要位置鍵聯，表示（特別是）衍生自下列之基團：苯、萘、蒽、菲、芘、蒎（chrysene）、苝、丙二烯合芴（fluoranthene）、稠四苯（naphthacene）、稠五苯

(pentacene)、苯并蒽、二苯并蒽、苯并芘、聯苯、聯伸二苯 (biphenylene)、聯三苯、聯伸三苯 (terphenylene)、萸、螺二萸、二氫萸、二氫芘、四氫芘、順式-或反式-茛並萸、三聚茛 (truxene)、異三聚茛 (isotruxene)、螺三聚茛、螺異三聚茛、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、咪唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻嗪、啡噻嗪、吡唑、吡唑、咪唑、苯并咪唑、萸並咪唑 (naphthimidazole)、啡咪唑 (phenanthroimidazole)、吡啶並咪唑 (pyridimidazole)、吡嗪並咪唑 (pyrazinimidazole)、喹噻啉並咪唑 (quinoxalinimidazole)、噻唑、苯并噻唑、萸噻唑 (naphthoxazole)、蒽噻唑 (anthroxazole)、菲噻唑 (phenanthroxazole)、異噻唑、1,2-噻唑、1,3-噻唑、苯并噻唑、噻嗪、苯并噻嗪、嘧啶、苯并嘧啶、喹噻啉、1,5-二氮雜蒽、2,7-二氮雜芘、2,3-二氮雜芘、1,6-二氮雜芘、1,8-二氮雜芘、4,5-二氮雜芘、4,5,9,10-四氮雜茛、吡嗪、啡嗪、啡噻嗪、啡噻嗪、熒紅環 (fluorubin)、吡啶、氮雜咪唑、苯并咪唑、啡啉、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯并三唑、1,2,3-噻二唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二唑、1,2,3-噻二唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二唑、1,3,5-三嗪、1,2,4-三嗪、1,2,3-三嗪、四唑、1,2,4,5-四嗪、1,2,3,4-四嗪、1,2,3,5-四嗪、嘧

吩、噻吩、吡嗪和苯并噻二唑。

本發明之一較佳體系係有關式 (2) 之化合物



式 (2)

其中基團 Ar 或 Y 經由苯并[a]蒽的 2、3、4、5 或 6 位置之一鍵結且其中符號和指標具有如上述相同之意義。如果在式 (2) 中二個在苯并[a]蒽上之取代基 R 只有一個不等於氫，則此較佳為在苯并[a]蒽之 7-位置的取代基。

如上所述，基團 Ar 或 Y 經由 2、3、4、5 或 6 位置鍵結至苯并[a]蒽。如果式 (1) 或 (2) 之化合物包含多數個苯并[a]蒽單元，也就是如果指數 p 為 1 或更大，這些單元之各個可經由苯并[a]蒽之相同位置或經由苯并[a]蒽之不同位置鍵結。經由苯并[a]蒽之相同位置鍵結具有化合物合成上更容易可處理的優點。經由苯并[a]蒽之不同位置鍵結產生不對稱化合物，其通常具有它們更穩定且具有較高玻璃轉移溫度的優點。

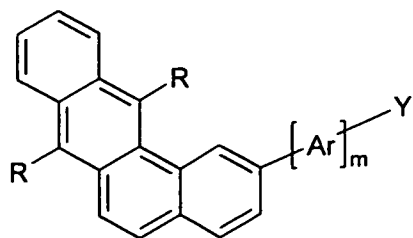
在本發明一較佳體系中，在式 (1) 或式 (2) 中基團 Ar 或 Y 經由苯并[a]蒽之 2 或 3 位置鍵結，意謂苯并[a]蒽在 Ar 或 Y 之近位 (peri-position) 沒有取代基或質子。在

這些情形中，有關苯并[a]蒽-Ar 或苯并[a]蒽-Y 鍵的阻轉異構體（atropisomers）之形成是不可能的，即使在龐大基團 Ar 或 Y（如例如，蒽）的情況。

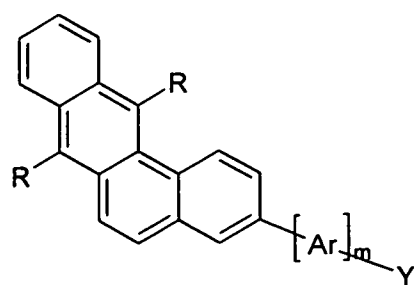
在本發明另一較佳體系中，在式（1）或式（2）中基團 Ar 或 Y 經由苯并[a]蒽之 4、5 或 6 位置鍵結，意謂苯并[a]蒽在 Ar 或 Y 之近位具有取代基或質子。在這些情形中，有關苯并[a]蒽-Ar 或苯并[a]蒽-Y 鍵的阻轉異構體之形成在龐大基團基團 Ar 或 Y（如例如，蒽）的情況是可能的。

爲了本發明，在苯并[a]蒽之近位意欲類似地於蔡所定義。

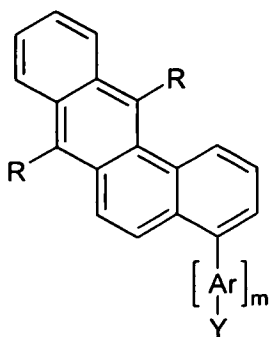
式（1）結構之特佳體系爲式（3）至（24）之結構：



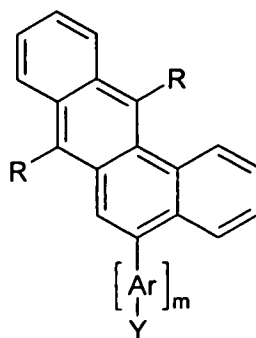
式 (3)



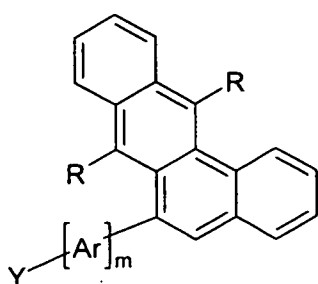
式 (4)



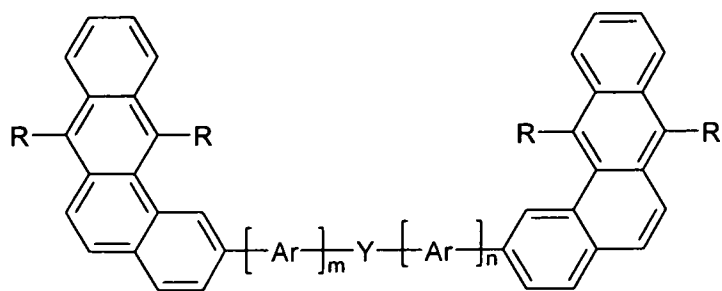
式 (5)



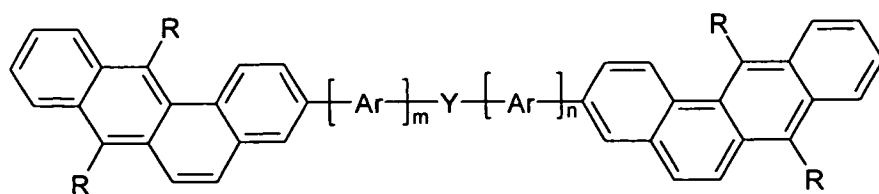
式 (6)



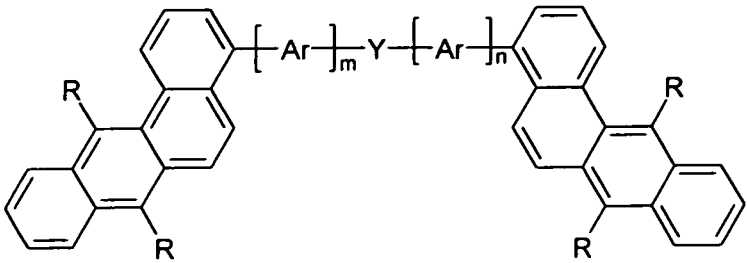
式 (7)



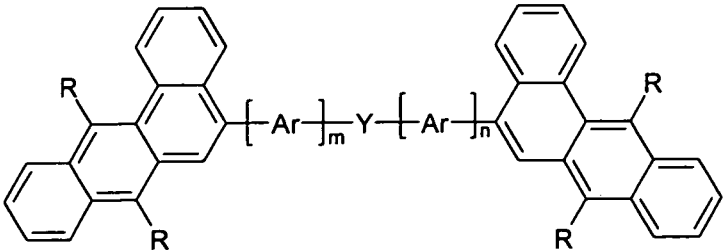
式 (8)



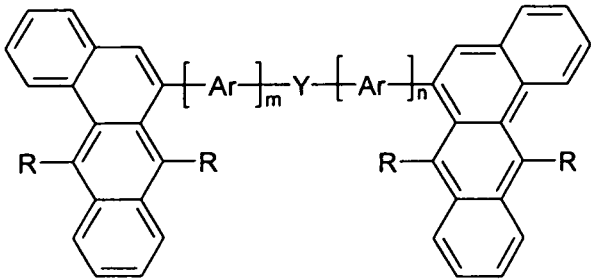
式 (9)



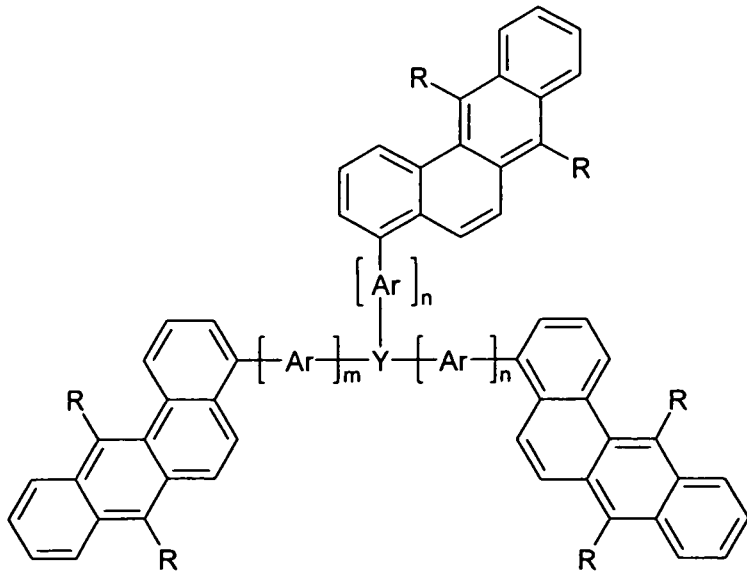
式 (10)



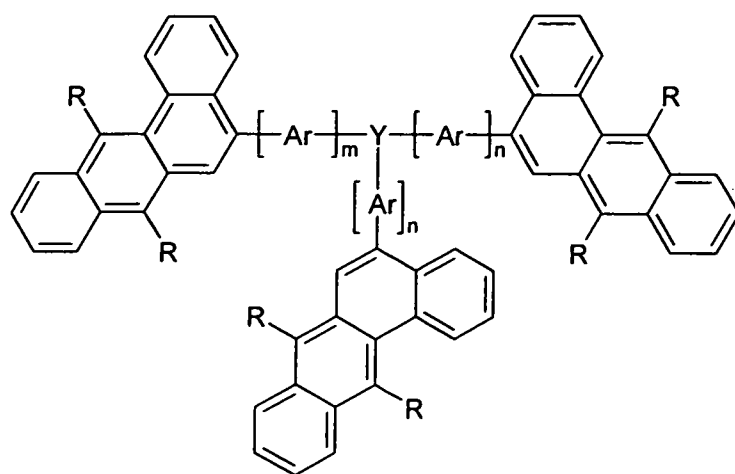
式 (11)



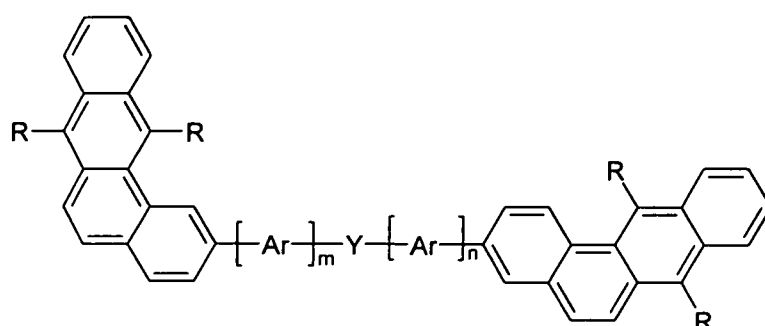
式 (12)



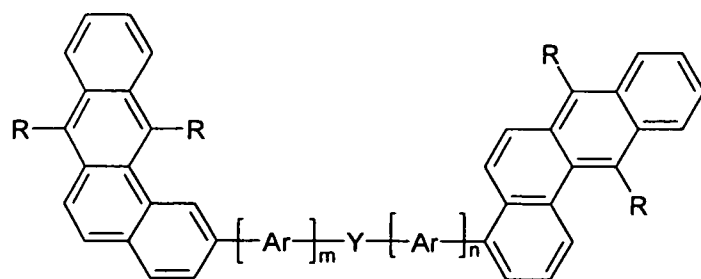
式 (13)



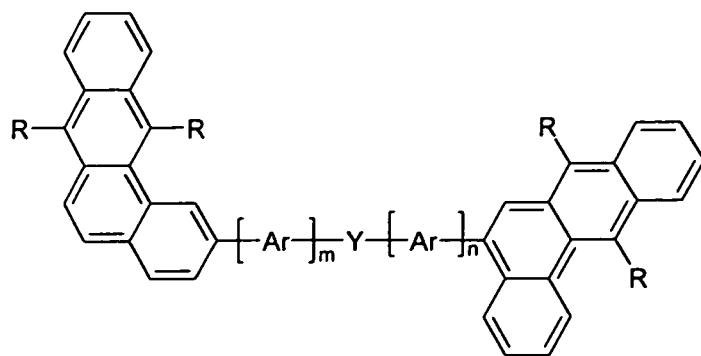
式 (14)



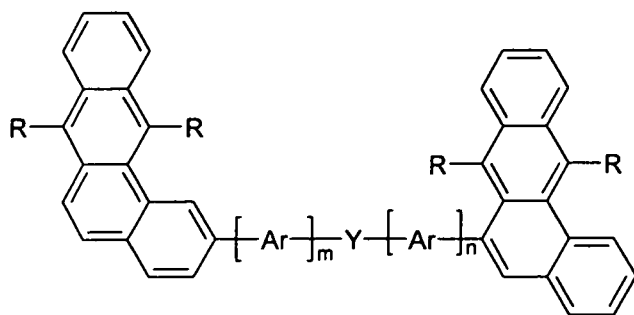
式 (15)



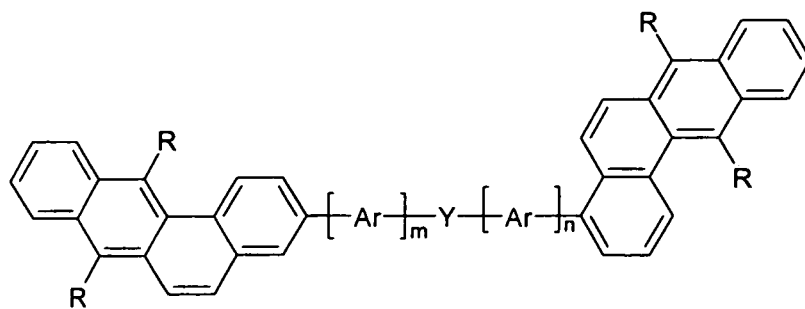
式 (16)



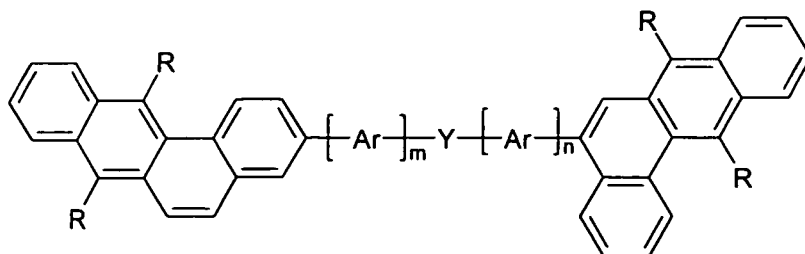
式 (17)



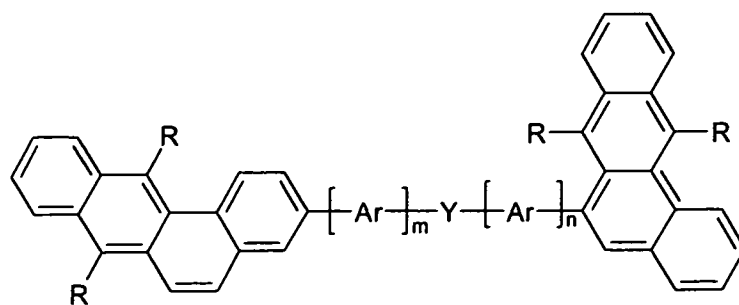
式 (18)



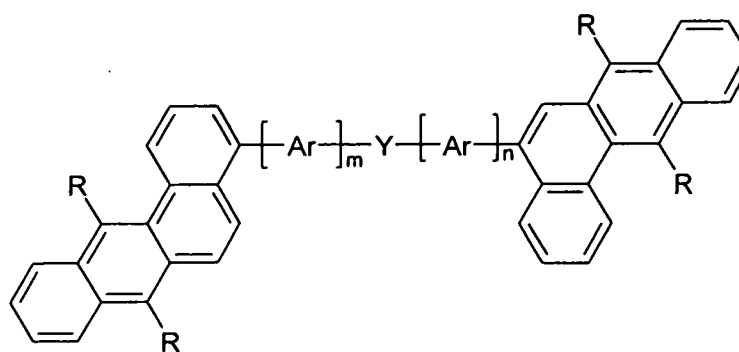
式 (19)



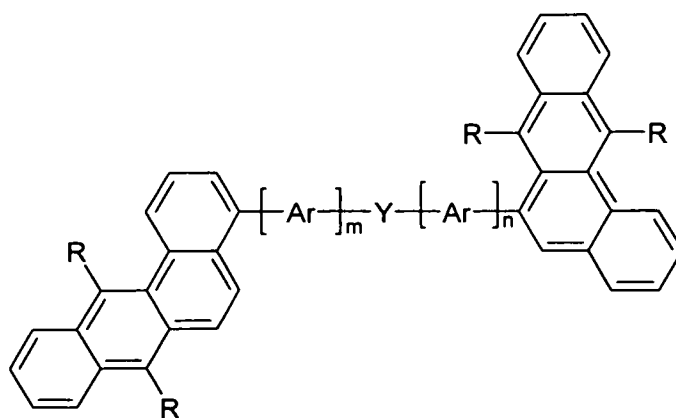
式 (20)



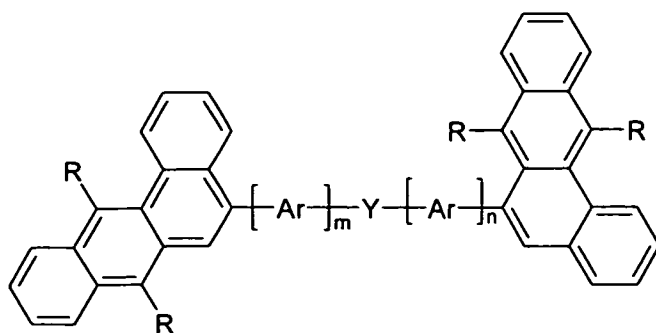
式 (21)



式 (22)



式 (23)

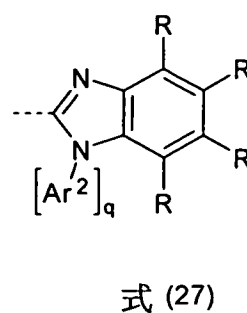
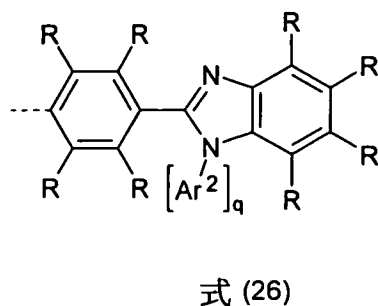
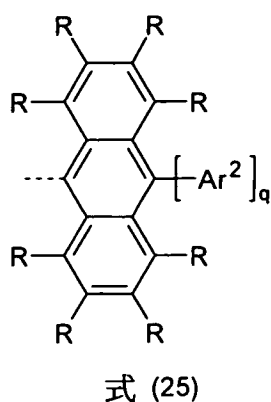


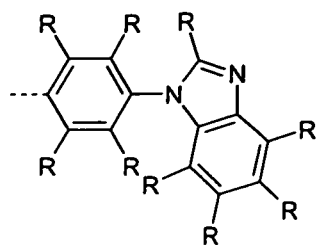
式 (24)

其中符號和指標具有與上述相同之意義，其中苯并[a]蔥骨架也可具有替代氫之氘和其中在式(3)至(7)中基團 Y 表示單價芳族或雜芳族環系統或 $N(Ar^1)_2$ 基團。

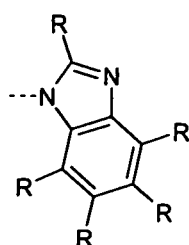
在式(3)至(24)之結構中，在 12-位置之取代基 R 較佳為氫或氘，特別是氫。二取代基 R，也就是在 7-和 12-位置之取代基特佳為氫或氘，特別是氫。

此外較佳者為式(1)之化合物或式(3)至(7)之化合物，其中符號 Y 表示不包含非芳族基團且其可縮合或非縮合之純芳族或雜芳族系統或表示芳族胺基基團。基團 Y 特佳係由芳基或雜芳基基團苯、萘、蔥、吡啶、菲、苯并蔥、蒽、芘、吡啶、1,3,5-三嗪、苯并咪唑和吡啶並咪唑組合或，如果 $p = 0$ ，則 Y 表示 $N(Ar^1)_2$ 基團。對於 $p = 0$ 或在式(3)至(7)之化合物中非常特佳之基團 Y 係選自下列式(25)至(33)之基團：

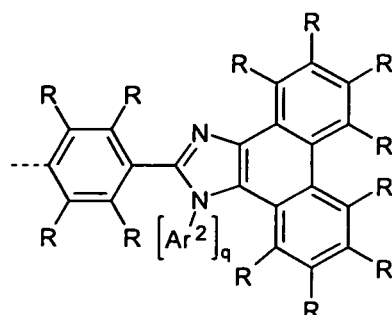




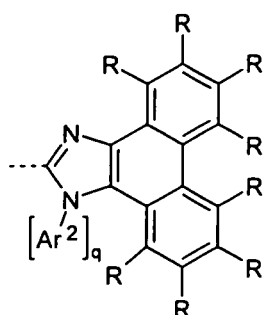
式 (28)



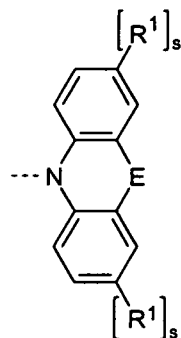
式 (29)



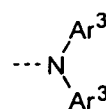
式 (30)



式 (31)



式 (32)



式 (33)

其中 R 和 R¹ 具有上示之意義，以及：

Ar² 為具有 5 至 16 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團，較佳為苯基、1-萘基、2-萘基、9-蒽基、蒽基、1-芘基、2-芘基、2-菲基、3-菲基、9-菲基、2-苯并咪唑或丙二烯合萘基 (fluoranthenyl)，其每個可經一或更多個基團 R¹ 取代，或在式 (25) 中，為式 (32) 或 (33) 之基團；

Ar³ 在每次發生時相同或不同地為具有 5 至 20 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團或具有 15 至 30 個芳族環原子之三芳胺基團，其每個可經一或更多個基團 R¹ 取代，較佳為具有 6 至 14 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團或具有 18 至 30 個芳族環原子（較佳具有 18 至 22 個芳族環原子）之三芳胺基團，其每個可經一或更多個基團 R¹ 取

代；

E 表示單鍵、O、S、 $N(R^1)$ 或 $C(R^1)_2$ ，其中二個基團 R^1 透過環形成可形成螺系統；

q 為 1、2 或 3；

s 在每次發生時相同或不同地為 0 或 1。

q = 2 之特佳系統為鄰-聯苯基、間-聯苯基、對-聯苯基、伸苯基-1-萘基、伸苯基-2-萘基、N-苯基-2-苯并咪唑、2-萘基和 2-螺聯萘基。

在式 (33) 中 Ar^3 特佳在每次發生時相同或不同地表示苯基、1-萘基、2-萘基、2-、3-或 4-三苯胺、1-或 2-萘基二苯胺，其每個經由萘基或苯基基團鍵結，或 1-或 2-二萘基苯胺，其每個經由萘基或苯基基團鍵結。這些基團各可經一或多個具有 1 至 4 個 C 原子之烷基基團或經一或多個具有 3 至 8 個 C 原子之環或二環烷基基團或經氟取代。

此外較佳者為式 (1) 至 (24) 之化合物，其中符號 Ar 在每次發生時相同或不同地表示選自 1,2-伸苯基、1,3-伸苯基、1,4-伸苯基、1,4-伸萘基、9,10-伸蒽基、2,7-伸菲基、3,6-伸菲基、1,6-伸芘基、2,7-伸芘基、2,6-伸吡啶基、2,5-伸吡啶基、2,2'-聯苯基、3,3'-聯苯基、4,4'-聯苯基、2,7-萘基和 2,7-螺聯萘基之二價芳族或雜芳族環系統。應該明白地強調在此位置 Ar 基團在式 (1) 中或在式 (2) 中或在式 (8) 至 (24) 中可選擇為相同或不同。

此外較佳者為式 (1) 和式 (2) 之化合物，其中 p = 1 或式 (8) 至 (12) 和式 (15) 至 (24) 之化合物，其中

符號 Y 表示單鍵或表示選自 $C=O$ 、 O 、 NAr^2 、 $POAr^2$ 、 $O-B(Ar^2)-O$ 、具有 1 至 6 個 C 原子之二價伸烷基或亞烷基基團或具有 5 至 14 個芳族環原子之二價芳族或雜芳族環系統之二價基團。此外較佳者為式 (1) 和式 (2) 之化合物，其中 $p = 2$ 或式 (13) 和 (14) 之化合物，其中符號 Y 表示 N 或具有 5 至 14 個芳族環原子之三價芳族或雜芳族環系統，特別地表示 1,3,5-苯或 1,3,5-三嗪。在式 (1) 和 (2) 之化合物（其中 $p > 2$ ）中，Y 較佳地表示具有 5 至 14 個芳族環原子之對應多價芳族或雜芳族環系統。

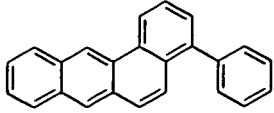
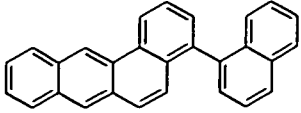
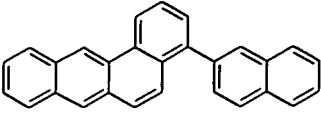
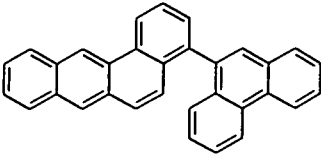
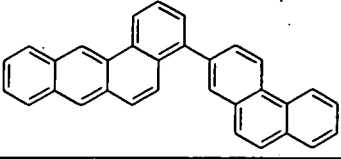
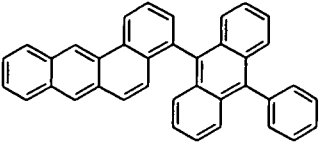
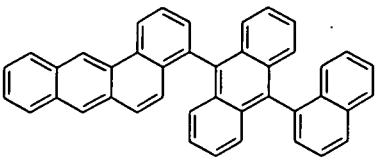
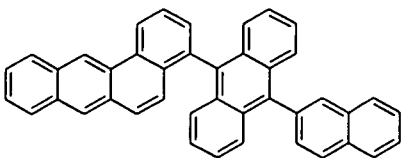
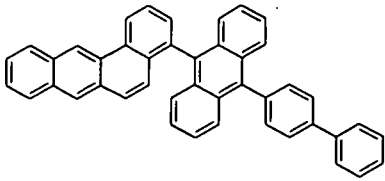
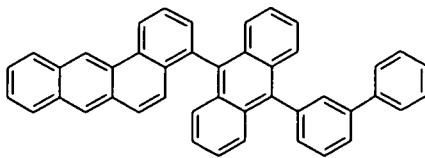
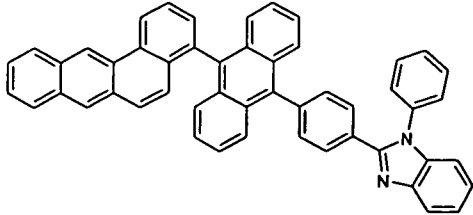
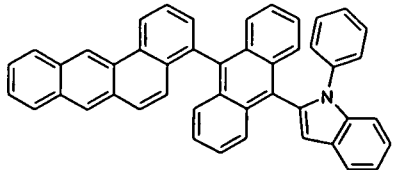
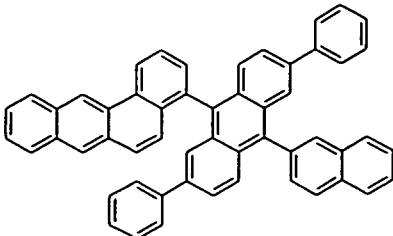
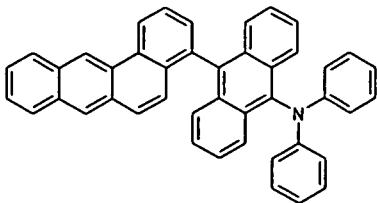
在式 (1) 或 (2) 之化合物或式 (8) 至 (24) 之化合物中，所有指標 m 和 n 可選擇為相同，其產生對稱化合物，或它們可選擇為不同，其產生不對稱化合物。如上述已提及者，對稱化合物具有更容易的合成可及性之優點和不對稱化合物具有更適當的物理性質之優點。

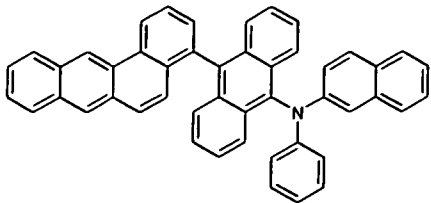
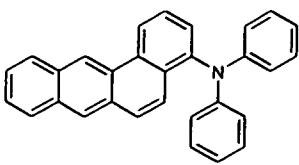
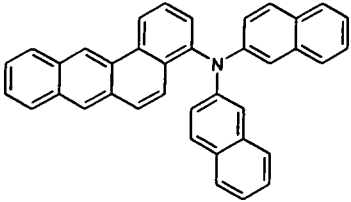
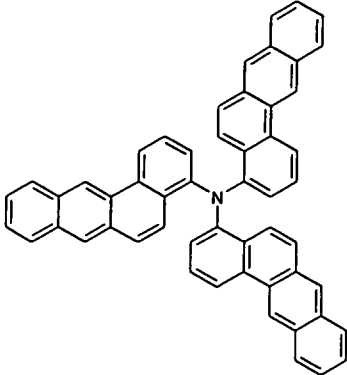
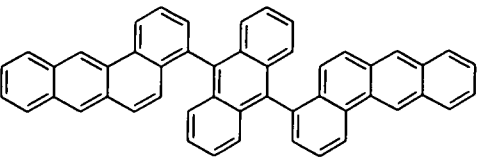
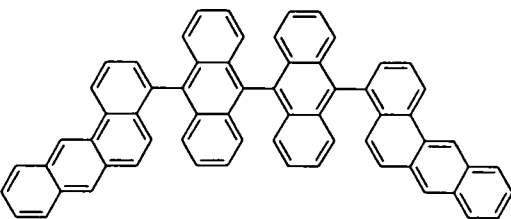
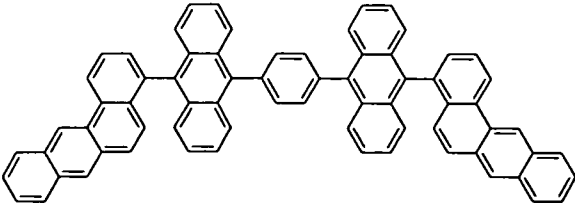
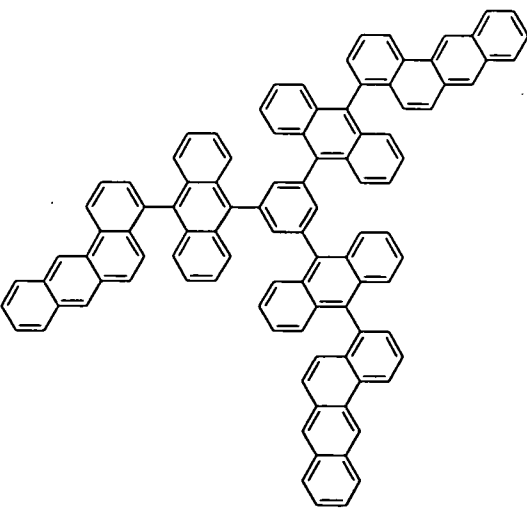
此外較佳者為式 (1) 或 (2) 之化合物或式 (3) 至 (24) 之化合物，其中指標 m 和 n 表示 0 或 1。

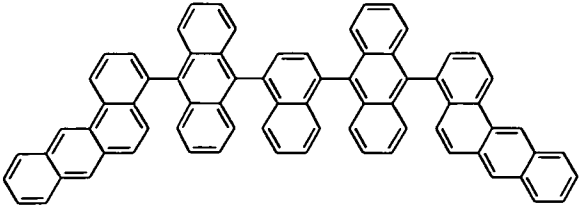
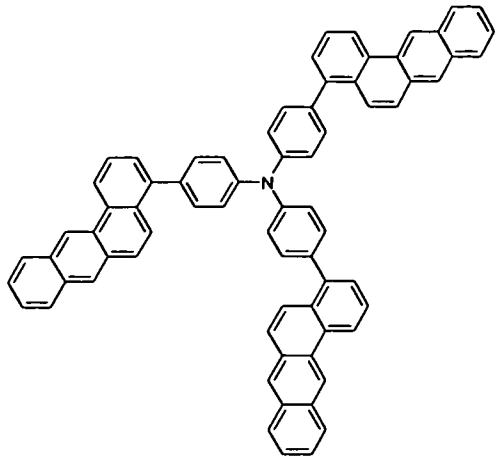
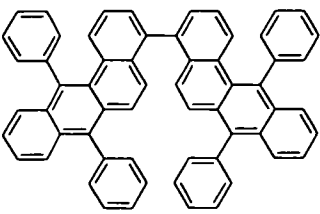
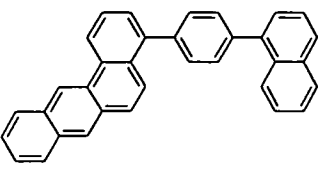
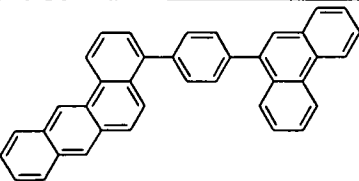
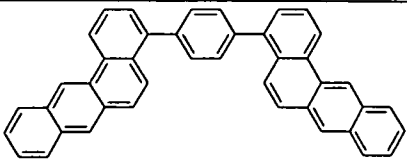
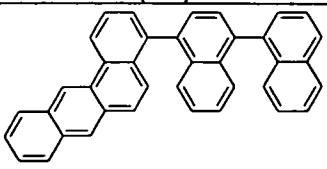
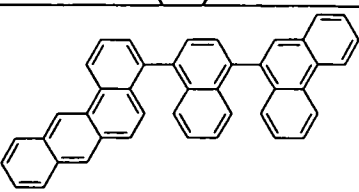
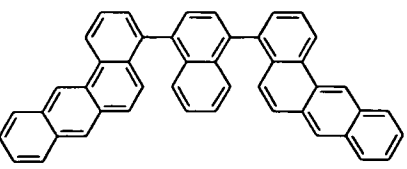
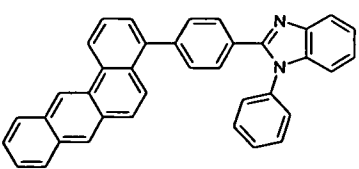
此外較佳者為式 (1) 或 (2) 之化合物或式 (3) 至 (24) 之化合物，其中指標 p 表示 0、1 或 2，特佳表示 0 或 1。

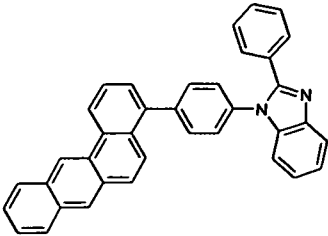
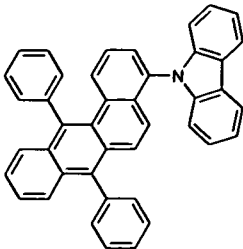
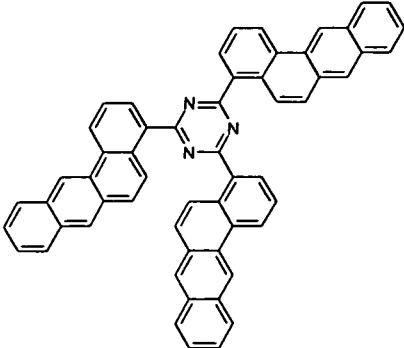
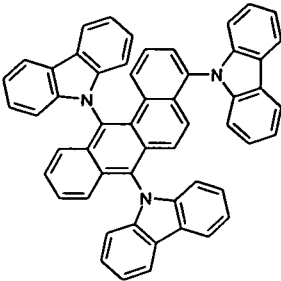
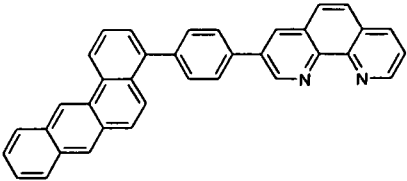
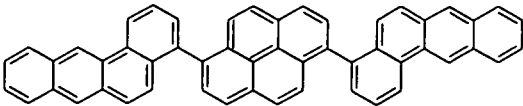
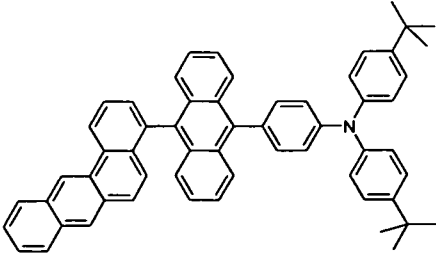
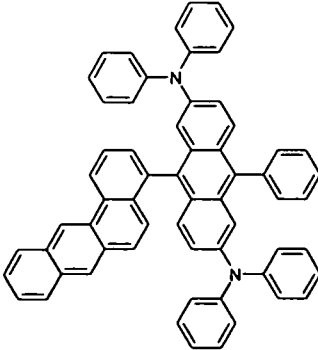
如果基團 R 表示 $N(Ar^1)_2$ 基團，則此基團較佳選自上述式 (32) 之基團或式 (33) 之基團。

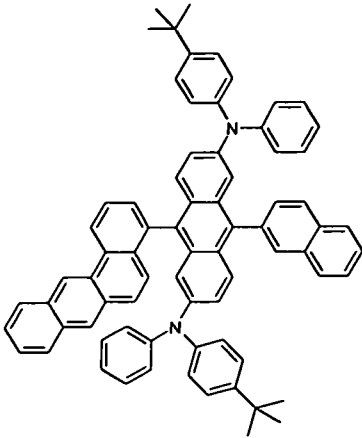
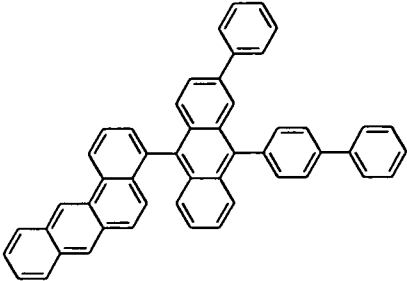
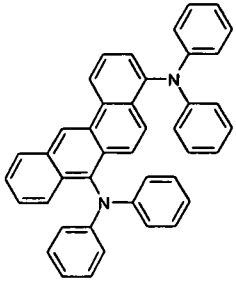
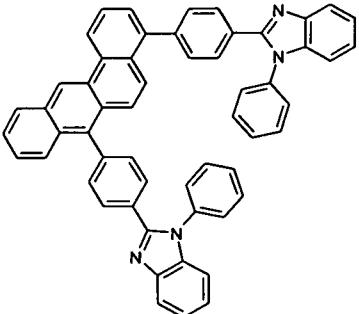
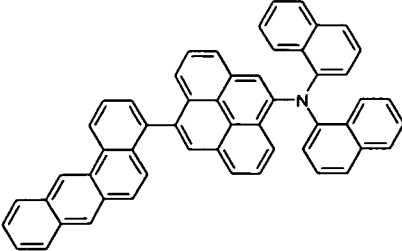
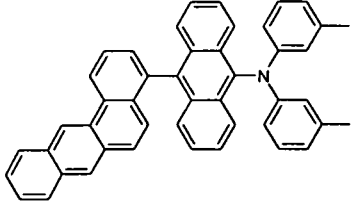
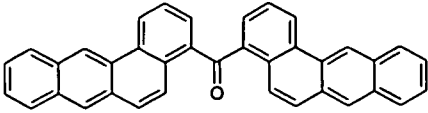
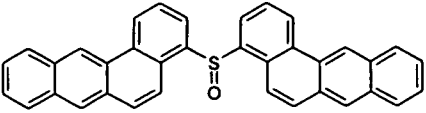
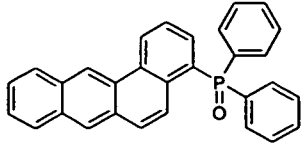
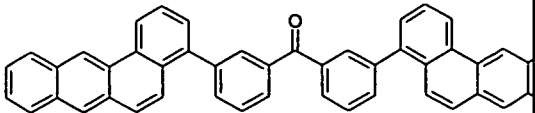
式 (1) 之較佳化合物的例子為下述結構 (1) 至 (338)。

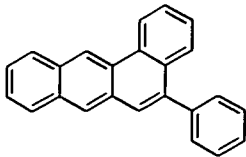
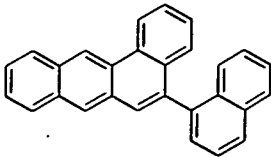
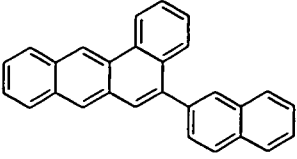
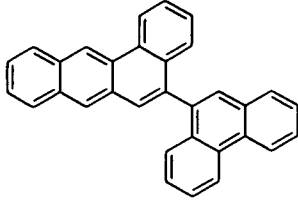
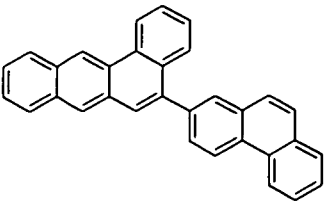
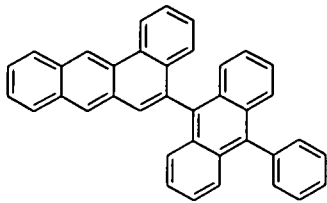
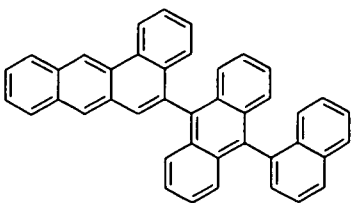
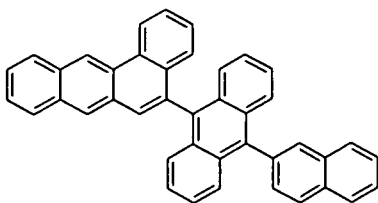
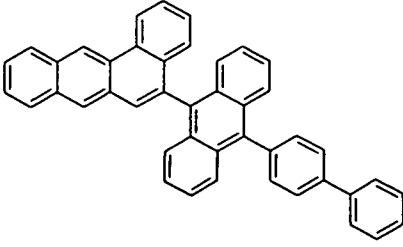
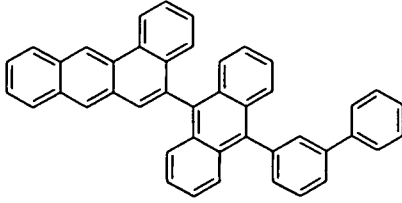
	
(1)	(2)
	
(3)	(4)
	
(5)	(6)
	
(7)	(8)
	
(9)	(10)
	
(11)	(12)
	
(13)	(14)

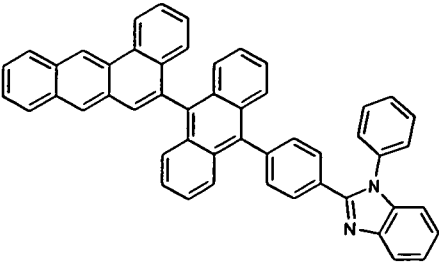
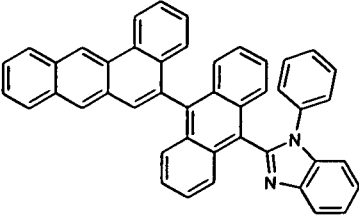
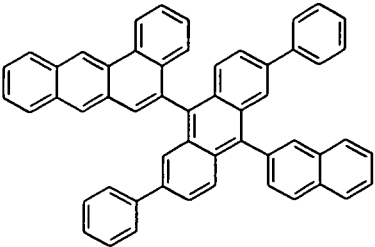
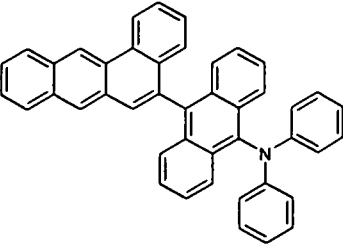
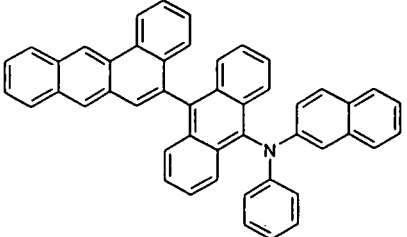
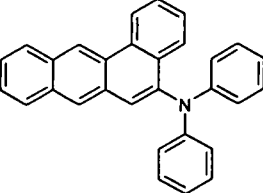
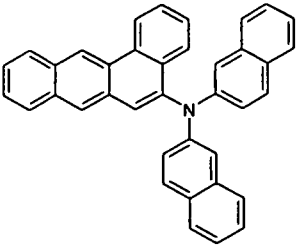
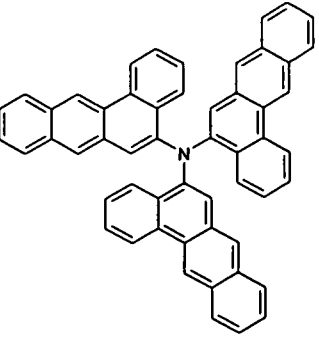
	
(15)	(16)
	
(17)	(18)
	
(19)	(20)
	
(21)	(22)

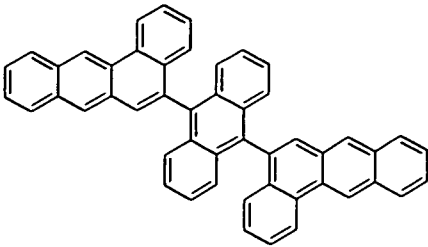
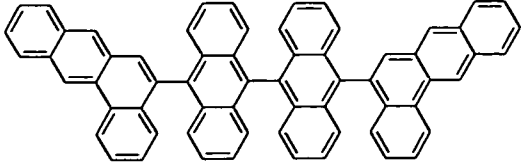
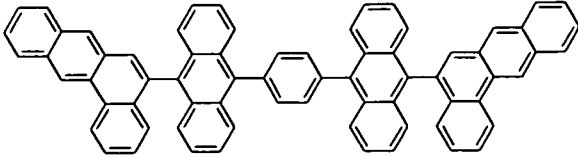
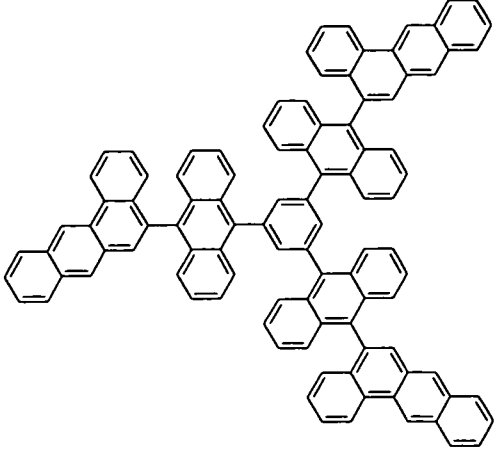
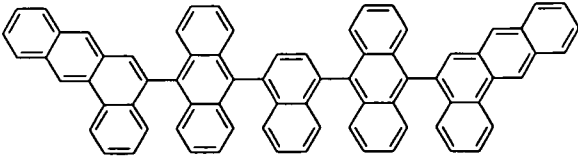
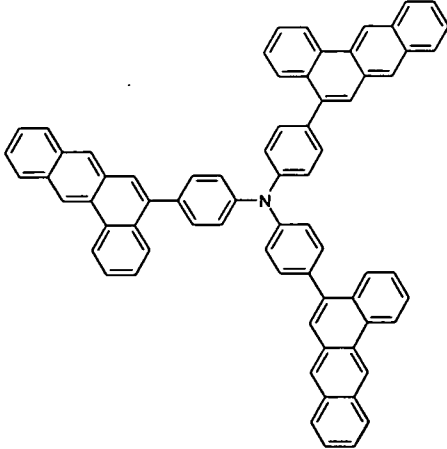
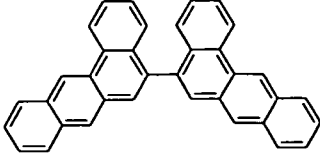
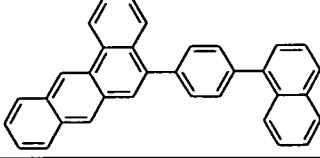
	
(23)	(24)
	
(25)	(26)
	
(27)	(28)
	
(29)	(30)
	
(31)	(32)

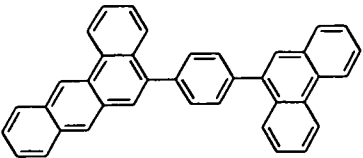
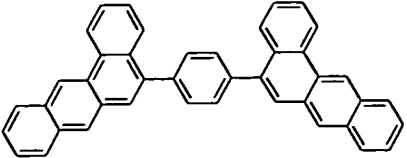
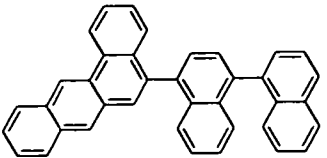
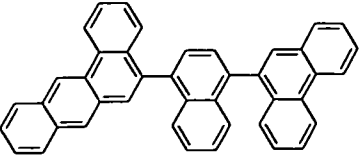
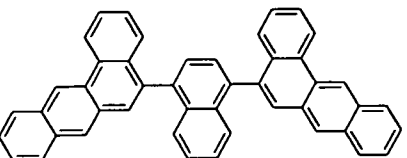
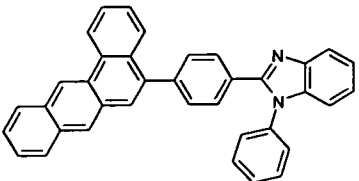
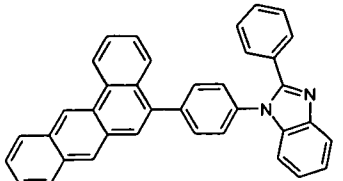
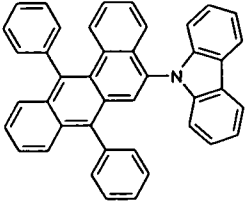
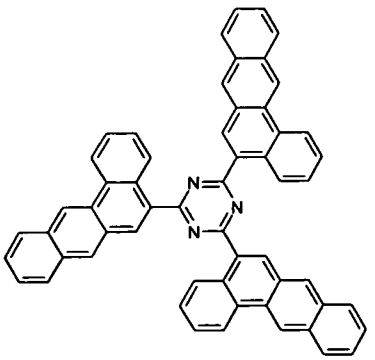
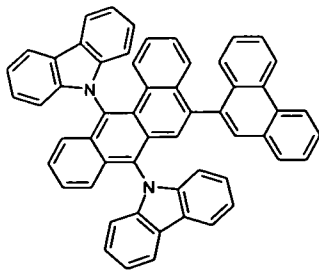
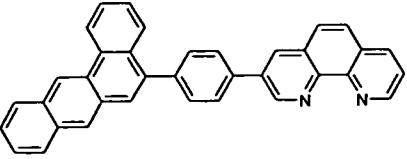
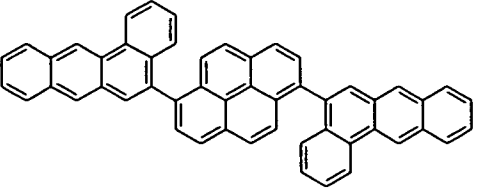
	
(33)	(34)
	
(35)	(36)
	
(37)	(38)
	
(39)	(40)

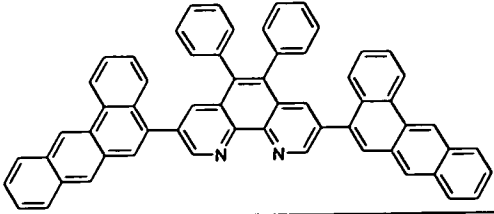
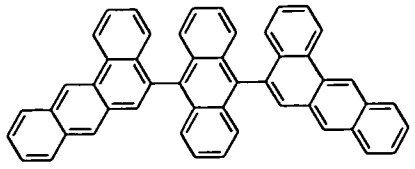
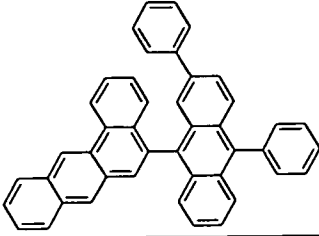
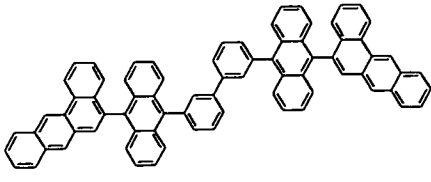
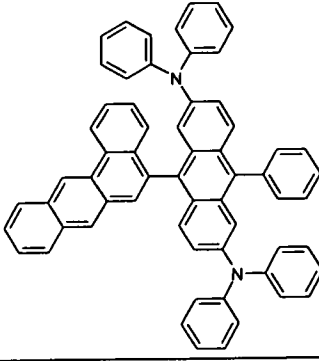
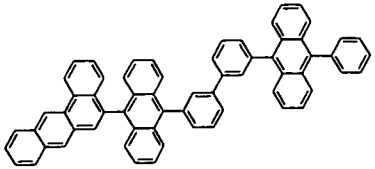
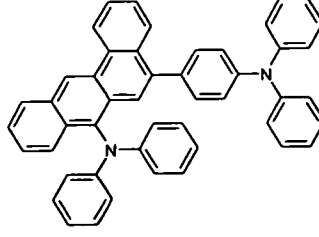
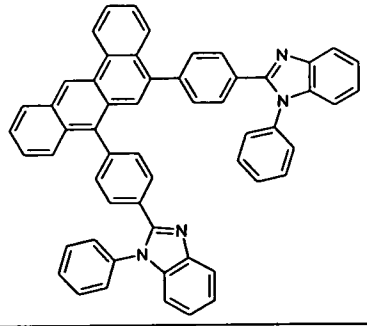
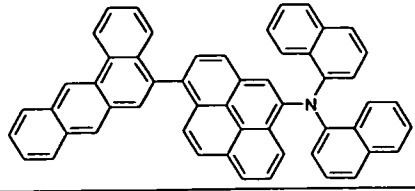
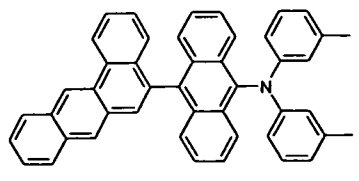
	
(41)	(42)
	
(43)	(44)
	
(45)	(46)
	
(47)	(48)
	
(49)	(50)

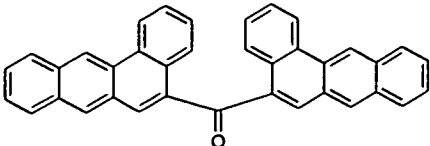
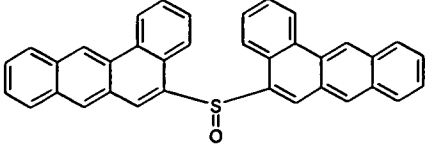
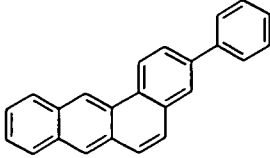
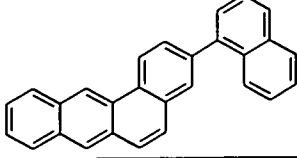
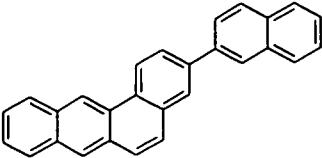
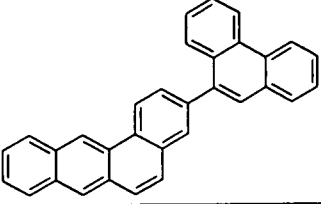
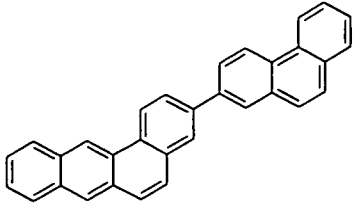
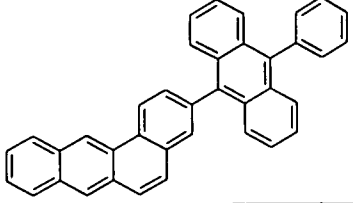
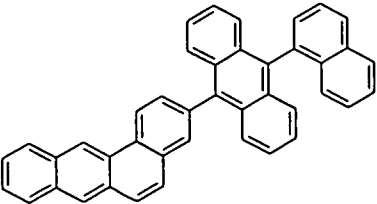
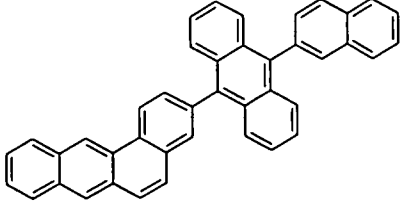
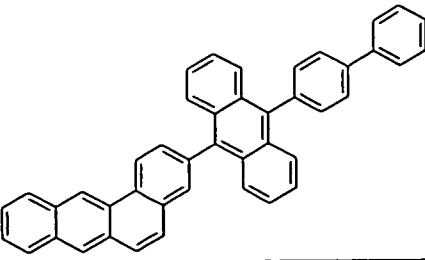
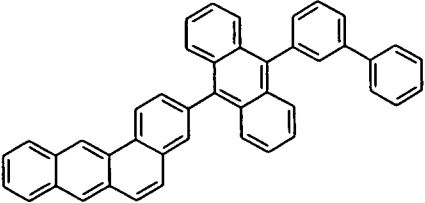
	
(51)	(52)
	
(53)	(54)
	
(55)	(56)
	
(57)	(58)
	
(59)	(60)

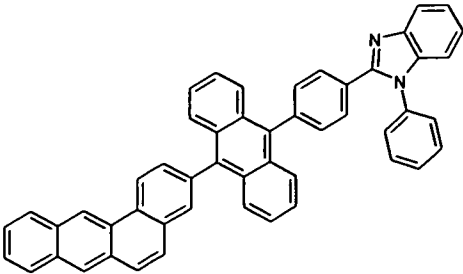
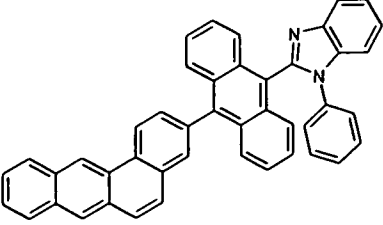
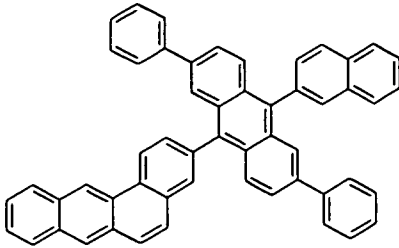
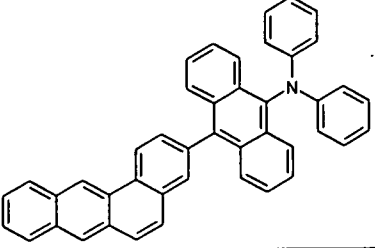
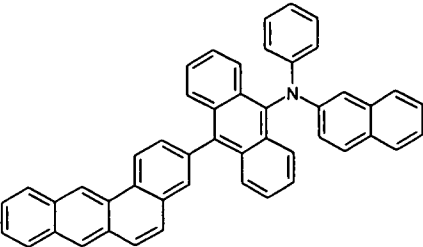
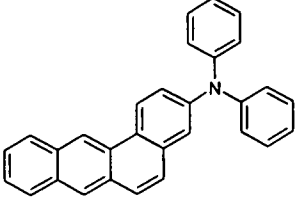
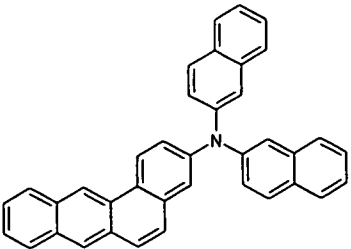
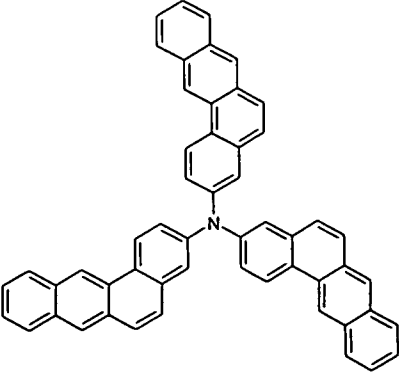
	
(61)	(62)
	
(63)	(64)
	
(65)	(66)
	
(67)	(68)

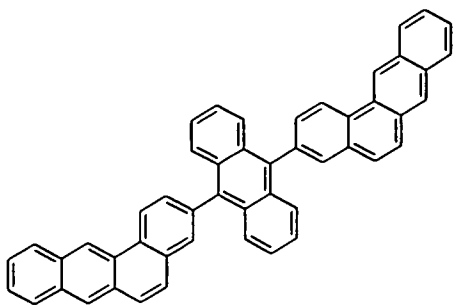
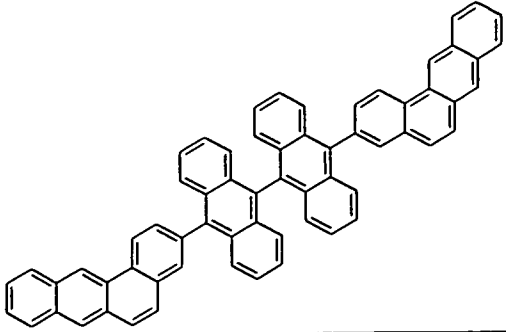
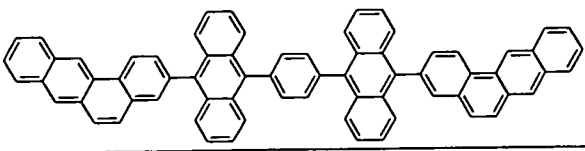
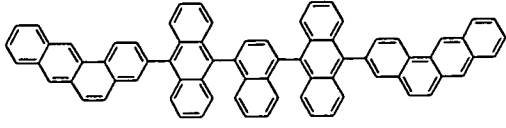
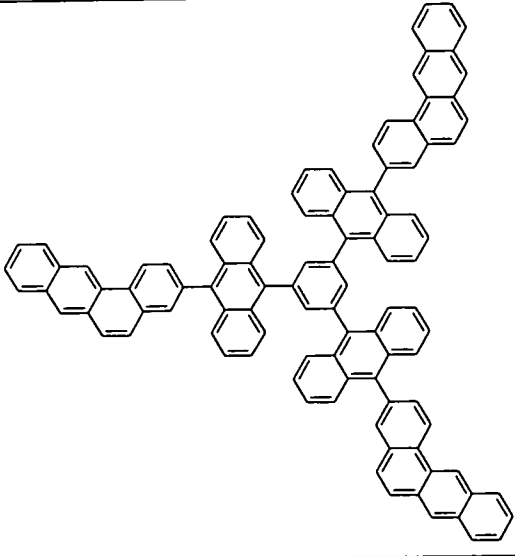
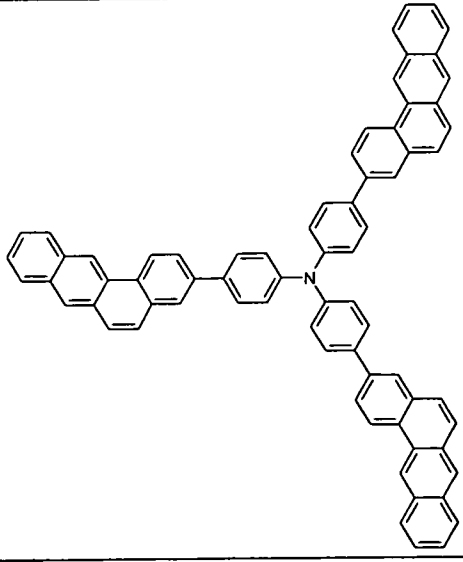
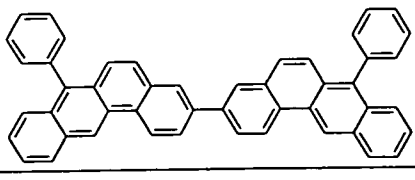
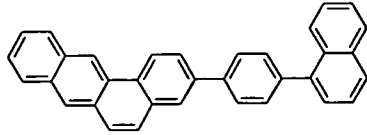
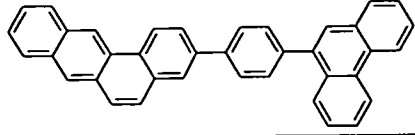
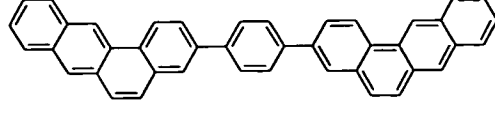
	
(69)	(70)
	
(71)	(72)
	
(73)	(74)
	
(75)	(76)

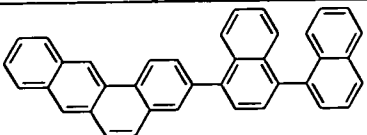
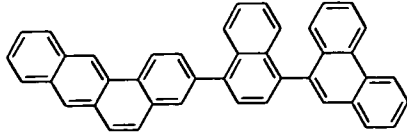
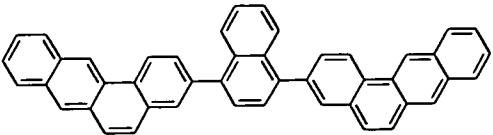
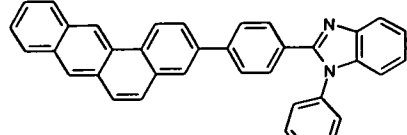
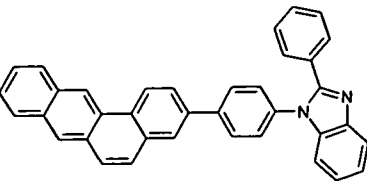
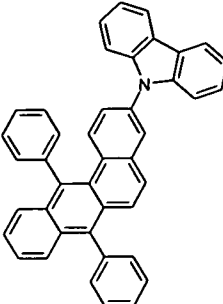
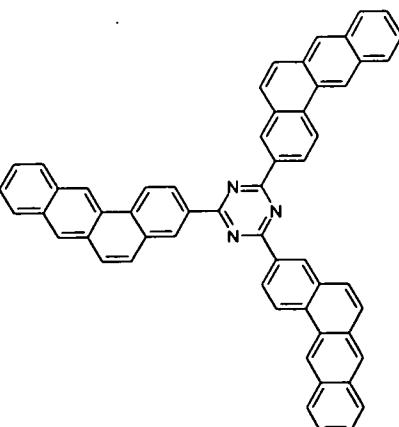
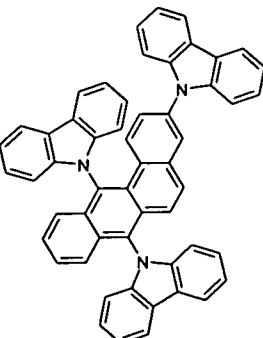
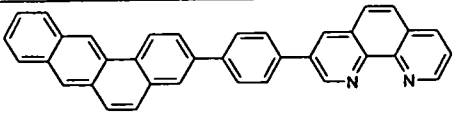
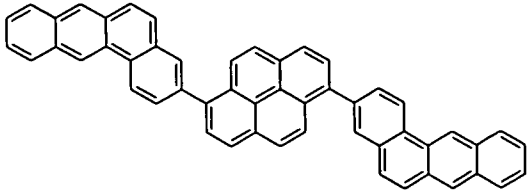
	
(77)	(78)
	
(79)	(80)
	
(81)	(82)
	
(83)	(84)
	
(85)	(86)
	
(87)	(88)

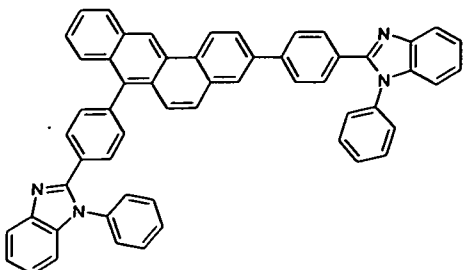
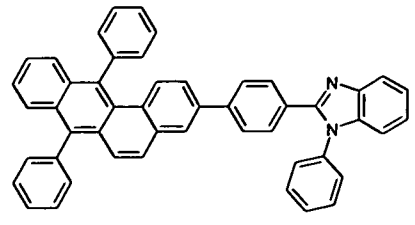
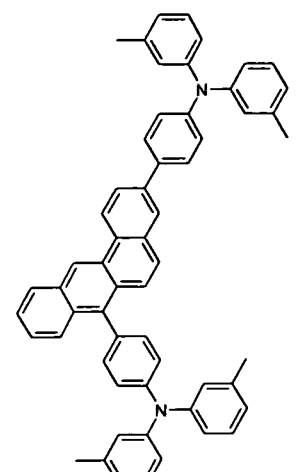
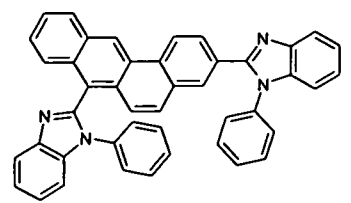
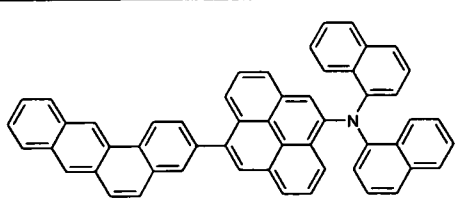
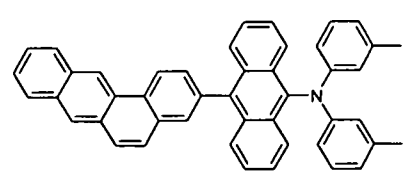
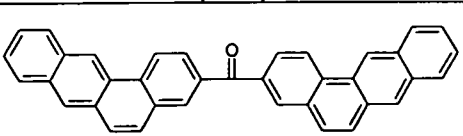
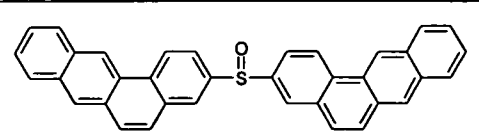
	
(89)	(90)
	
(91)	(92)
	
(93)	(94)
	
(95)	(96)
	
(97)	(98)

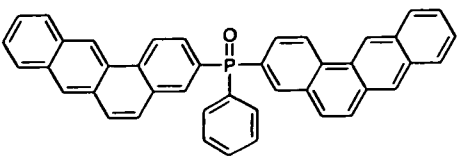
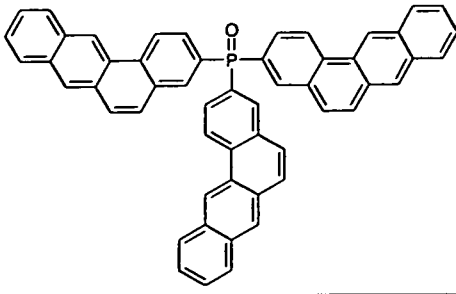
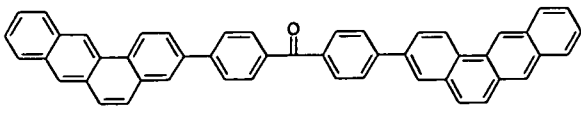
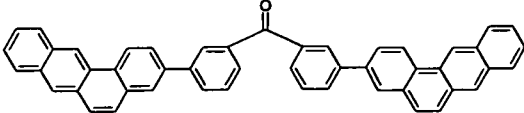
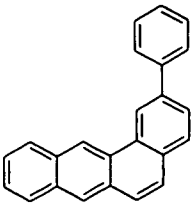
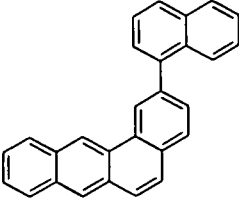
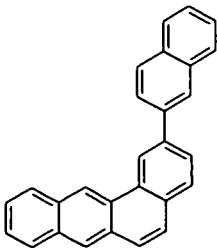
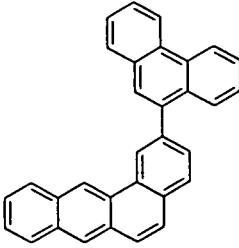
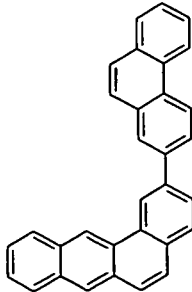
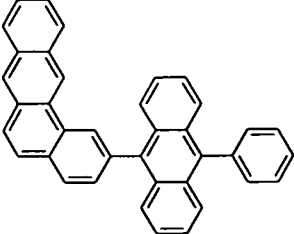
	
(99)	(100)
	
(101)	(102)
	
(103)	(104)
	
(105)	(106)
	
(107)	(108)
	
(109)	(110)

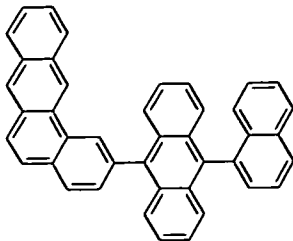
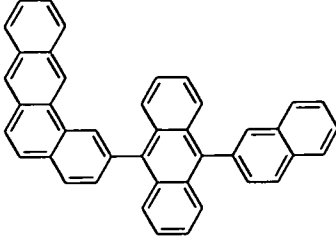
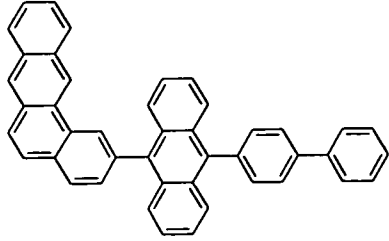
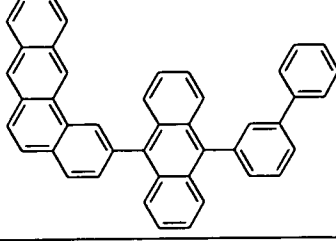
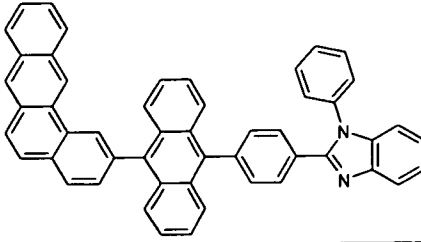
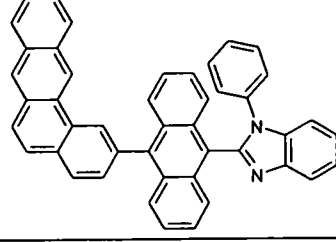
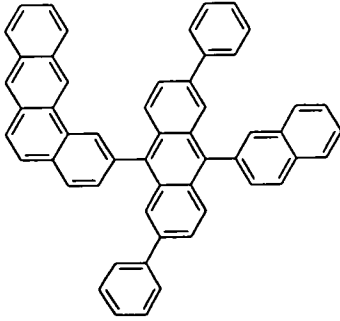
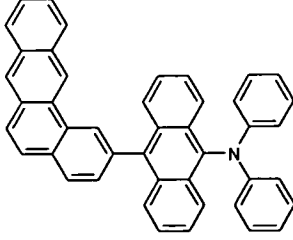
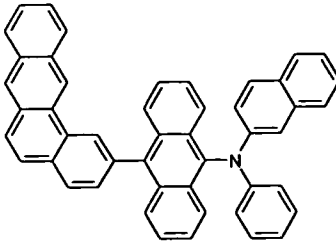
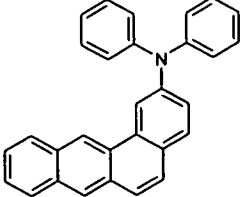
	
(111)	(112)
	
(113)	(114)
	
(115)	(116)
	
(117)	(118)

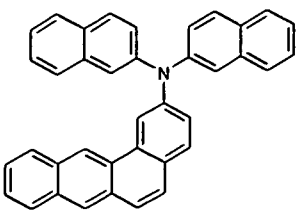
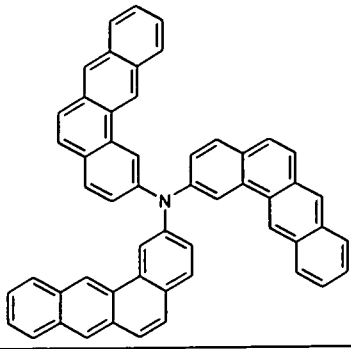
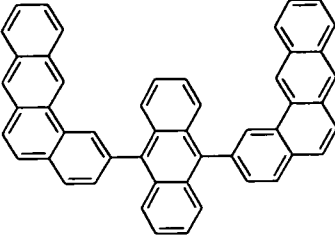
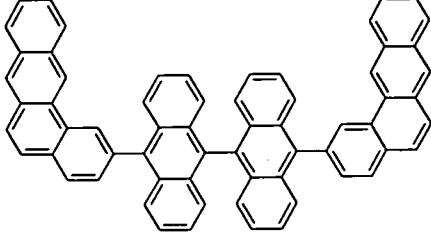
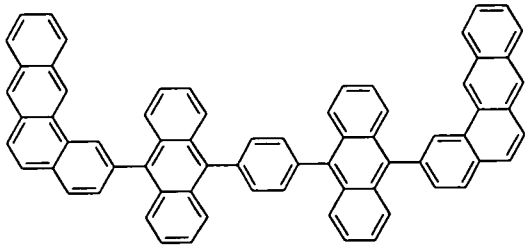
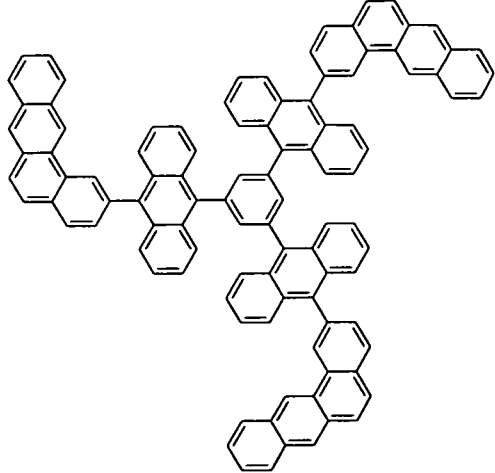
	
(119)	(120)
	
(121)	(122)
	
(123)	(124)
	
(125)	(126)
	
(127)	(128)

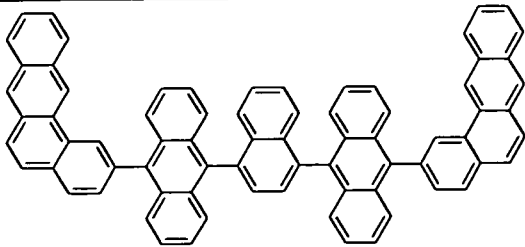
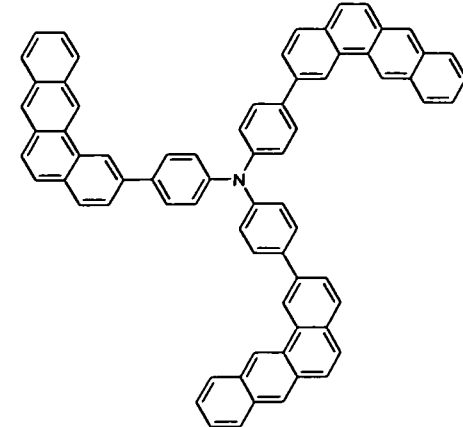
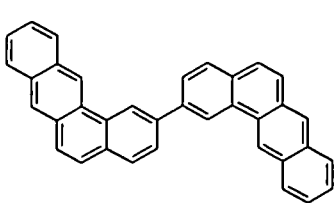
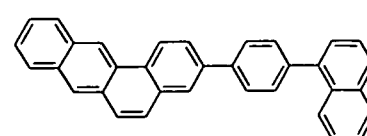
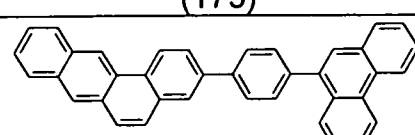
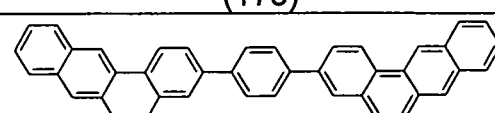
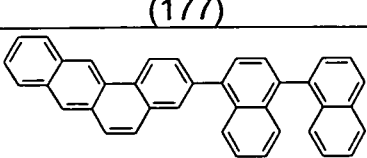
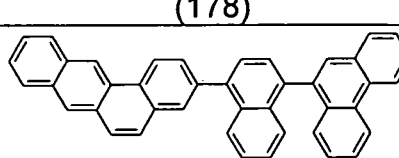
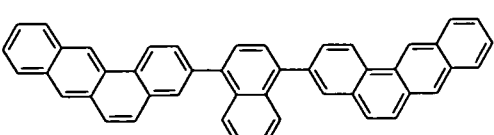
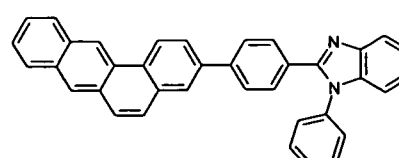
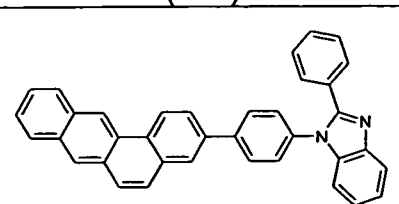
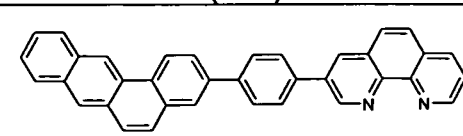
	
(129)	(130)
	
(131)	(132)
	
(133)	(134)
	
(135)	(136)
	
(137)	(138)

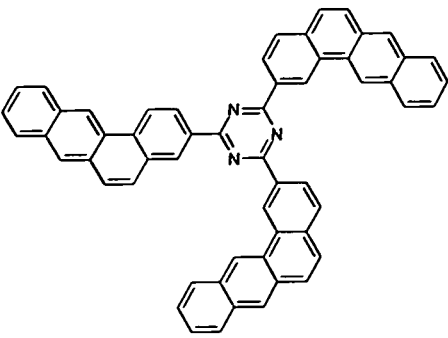
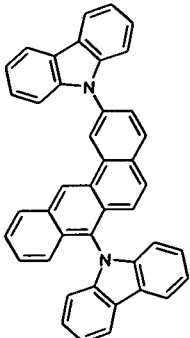
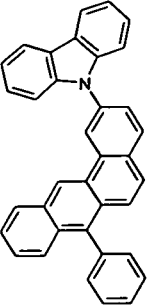
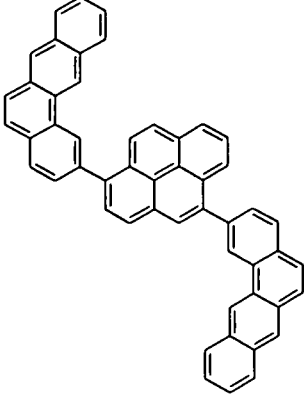
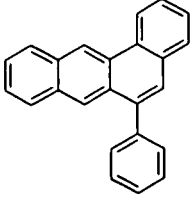
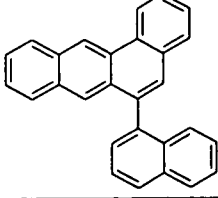
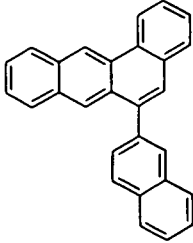
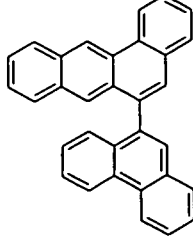
	
(139)	(140)
	
(141)	(142)
	
(143)	(144)
	
(145)	(146)

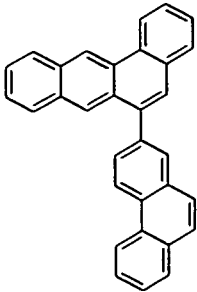
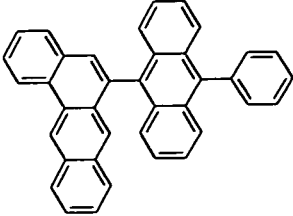
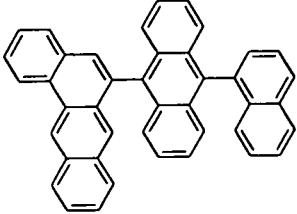
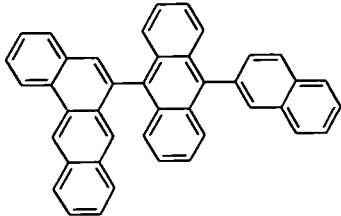
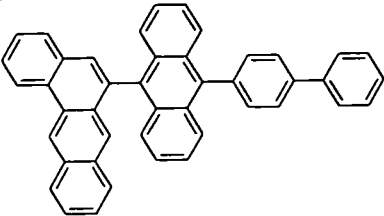
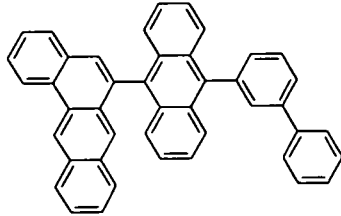
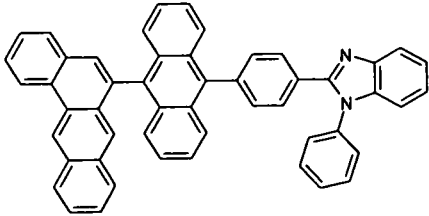
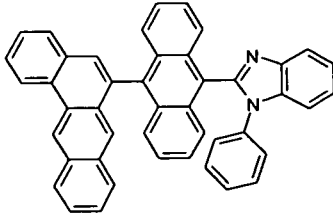
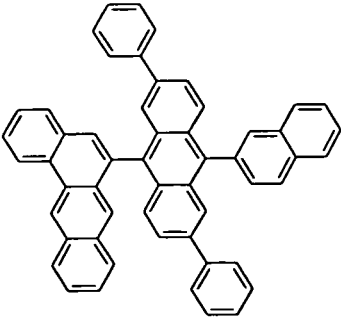
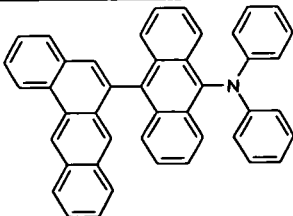
	
(147)	(148)
	
(149)	(150)
	
(151)	(152)
	
(153)	(154)
	
(155)	(156)

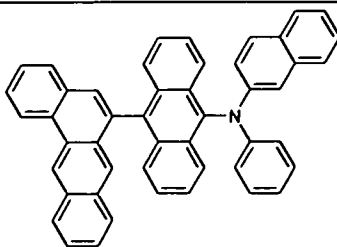
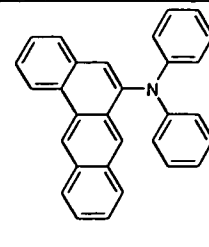
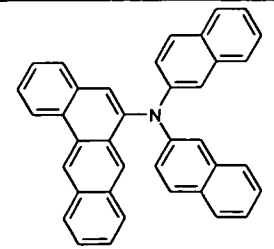
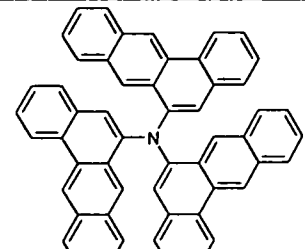
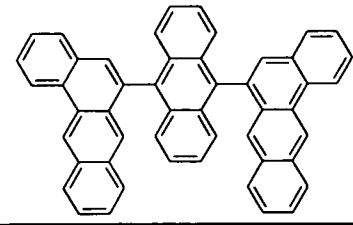
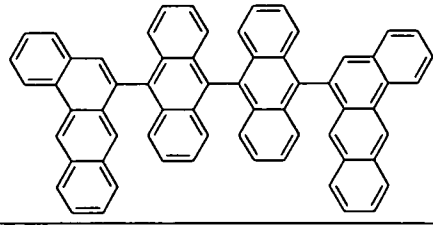
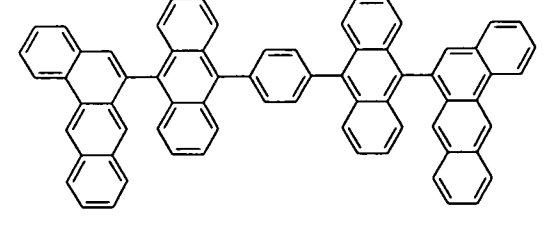
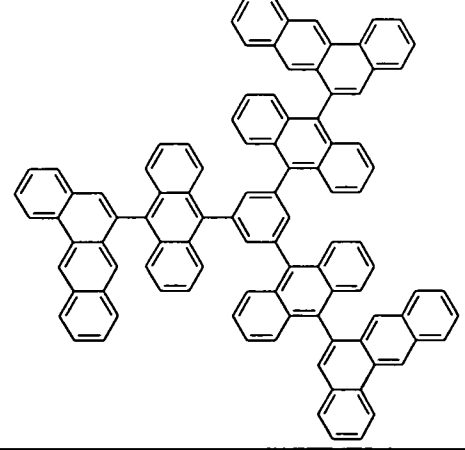
	
(157)	(158)
	
(159)	(160)
	
(161)	(162)
	
(163)	(164)
	
(165)	(166)

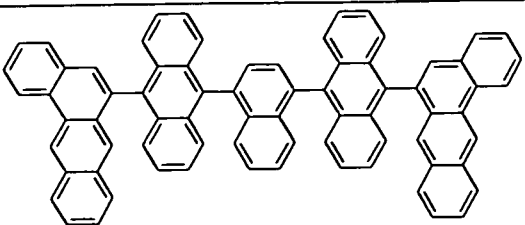
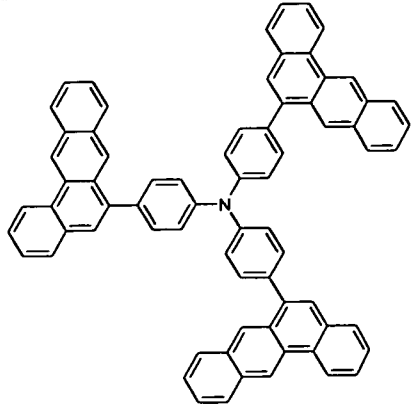
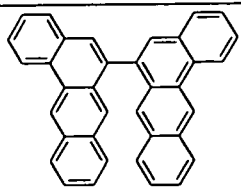
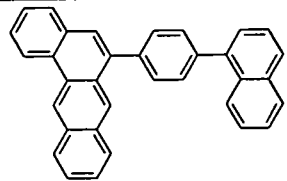
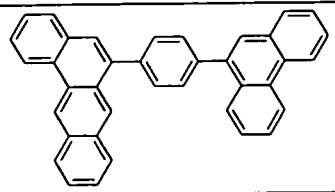
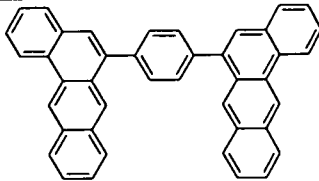
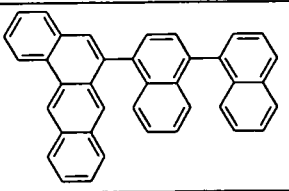
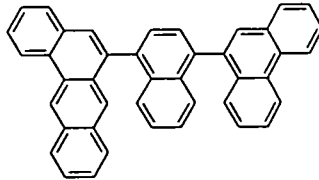
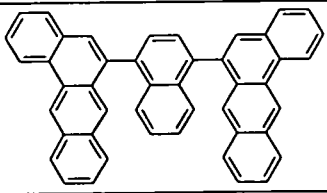
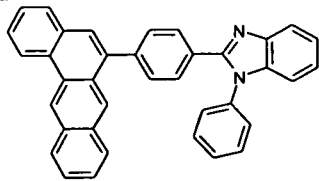
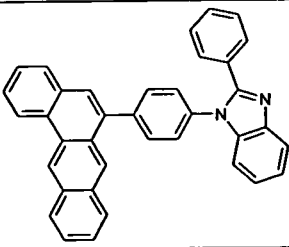
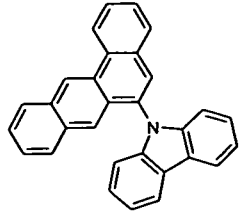
	
(167)	(168)
	
(169)	(170)
	
(171)	(172)

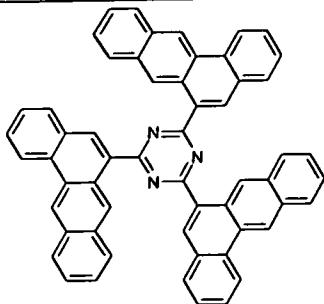
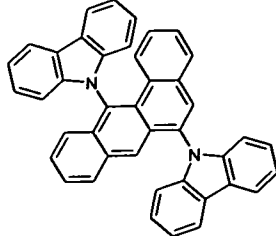
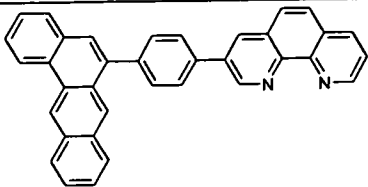
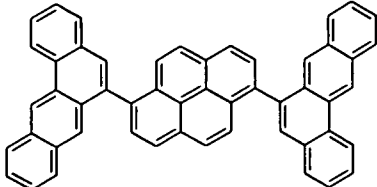
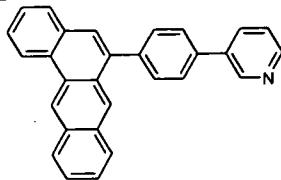
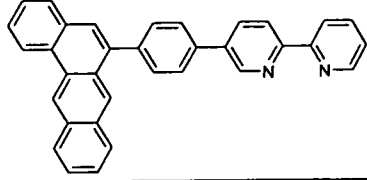
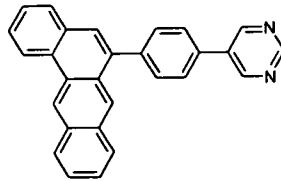
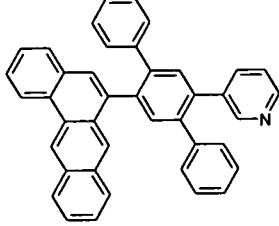
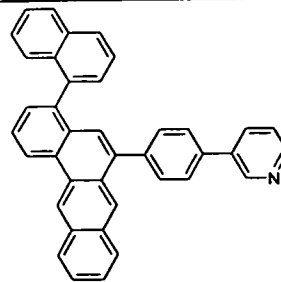
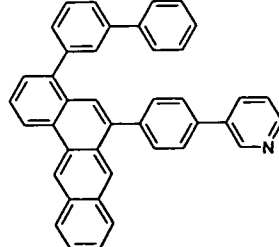
	
(173)	(174)
	
(175)	(176)
	
(177)	(178)
	
(179)	(180)
	
(181)	(182)
	
(183)	(184)

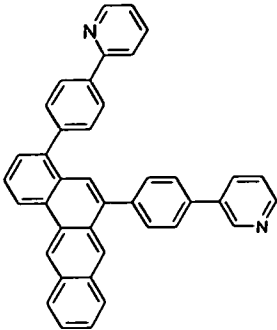
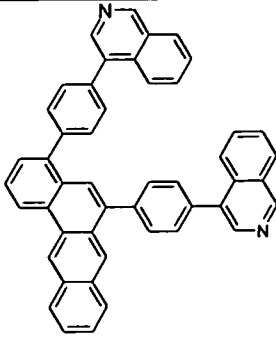
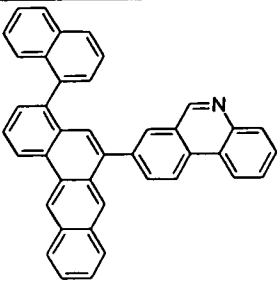
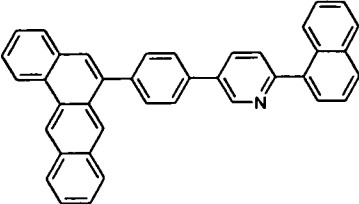
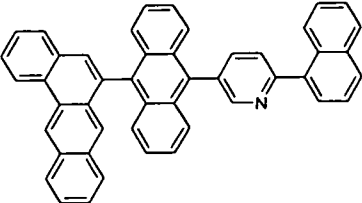
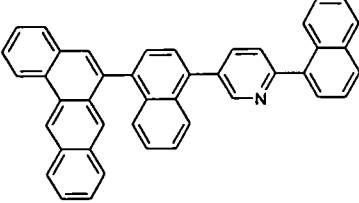
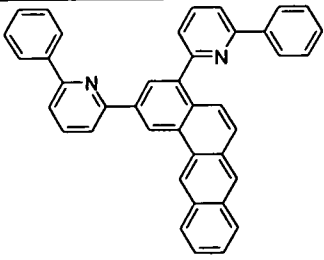
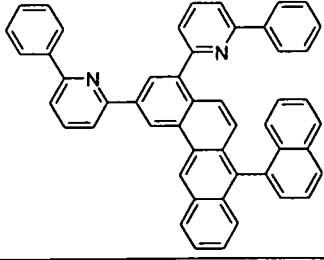
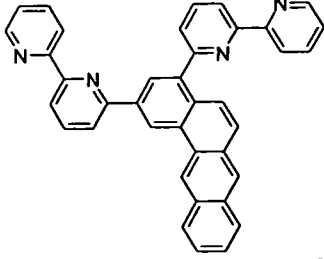
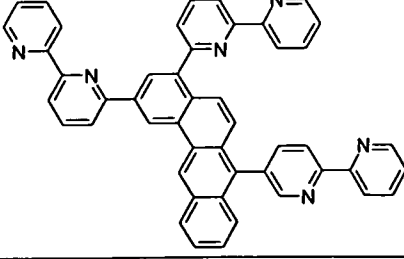
	
(185)	(186)
	
(187)	(188)
	
(189)	(190)
	
(191)	(192)

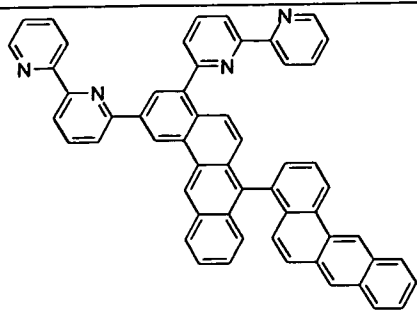
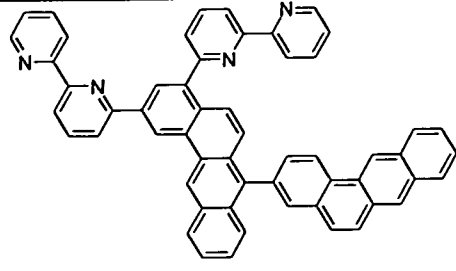
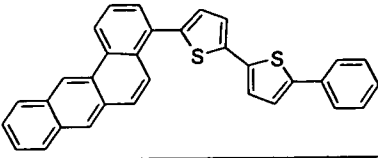
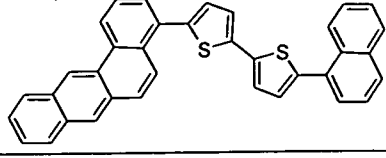
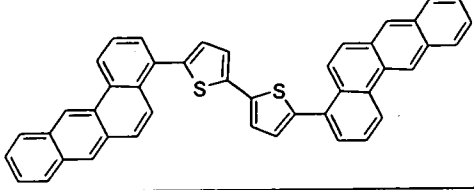
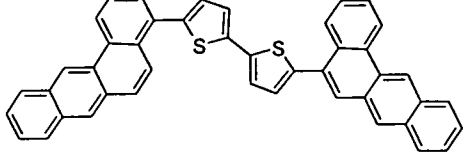
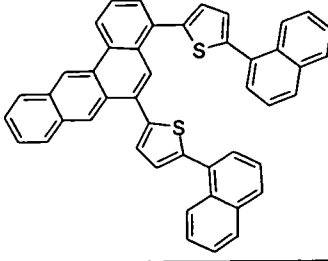
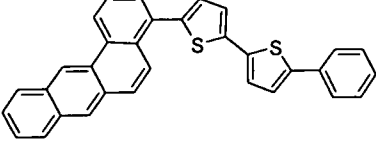
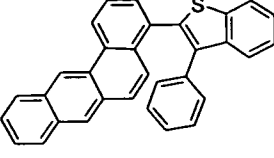
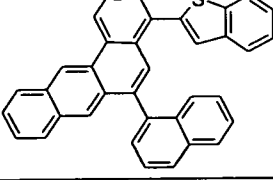
	
(193)	(194)
	
(195)	(196)
	
(197)	(198)
	
(199)	(200)
	
(201)	(202)

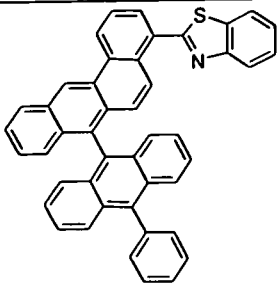
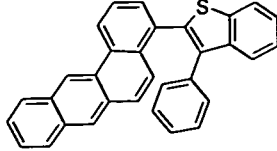
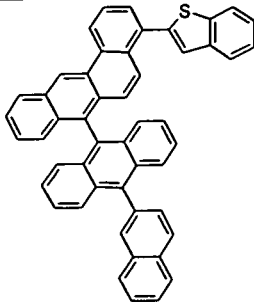
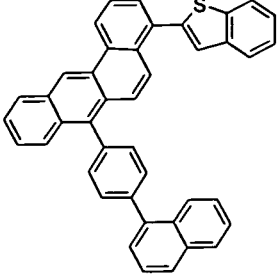
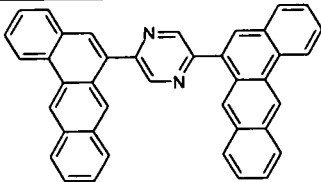
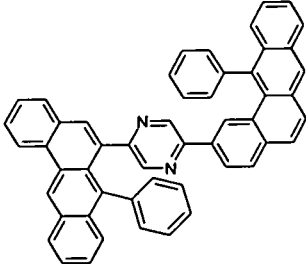
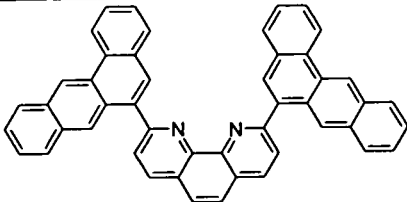
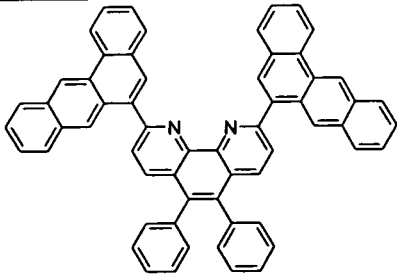
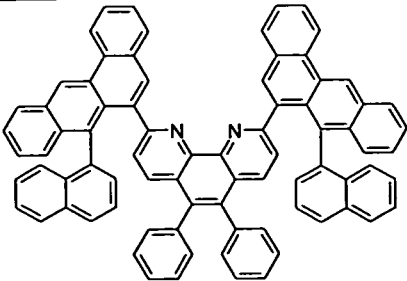
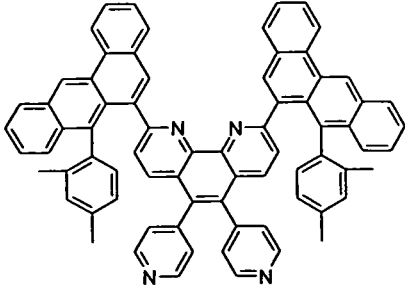
	
(203)	(204)
	
(205)	(206)
	
(207)	(208)
	
(209)	(210)

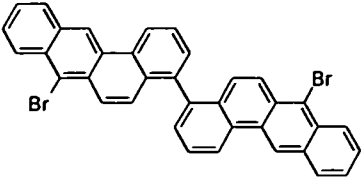
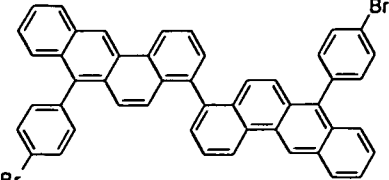
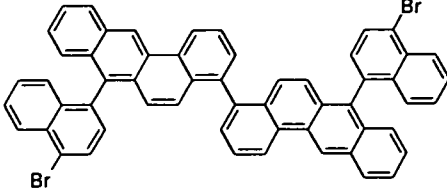
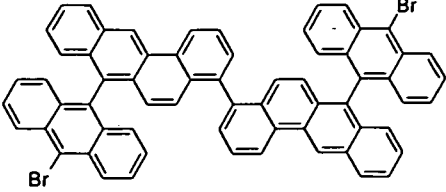
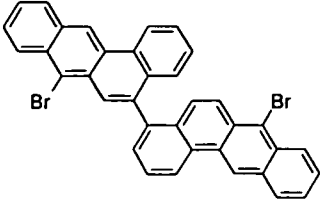
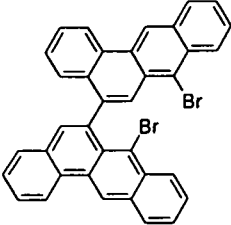
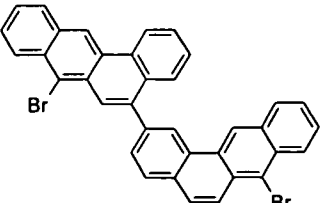
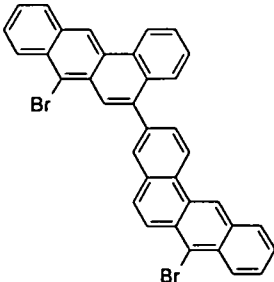
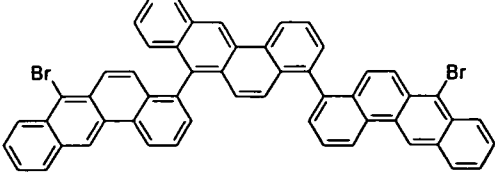
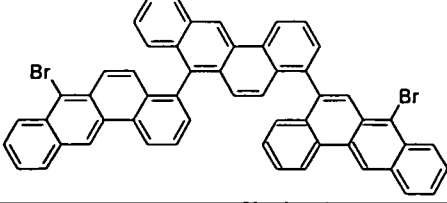
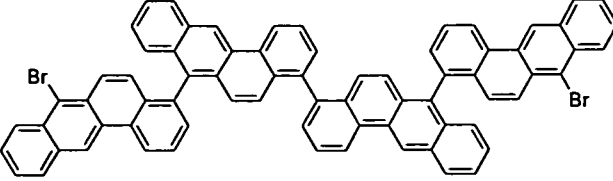
	
(211)	(212)
	
(213)	(214)
	
(215)	(216)
	
(217)	(218)
	
(219)	(220)
	
(221)	(222)

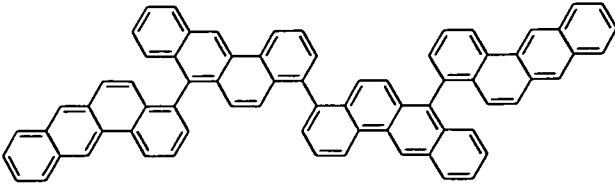
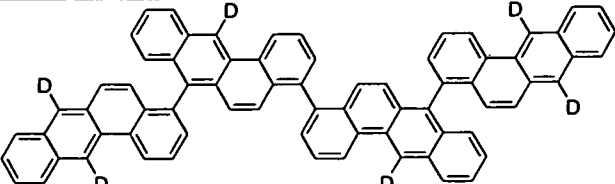
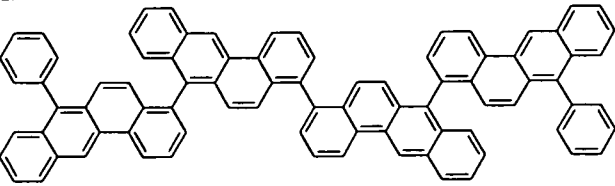
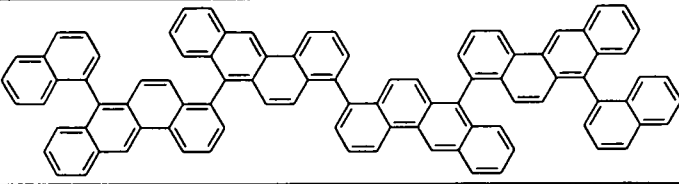
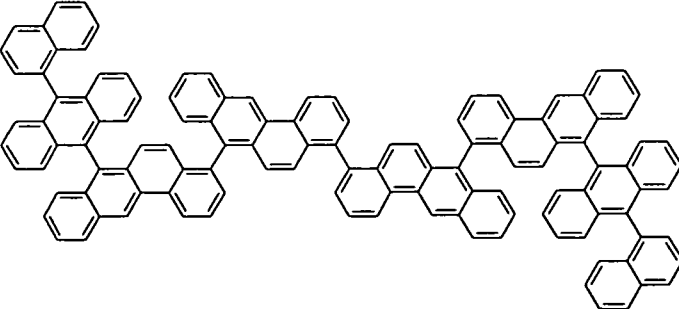
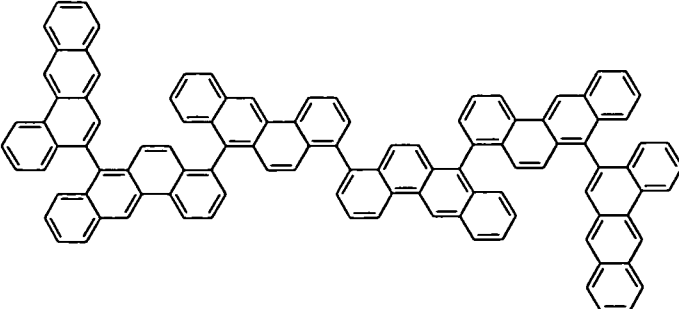
	
(223)	(224)
	
(225)	(226)
	
(227)	(228)
	
(229)	(230)
	
(231)	(232)

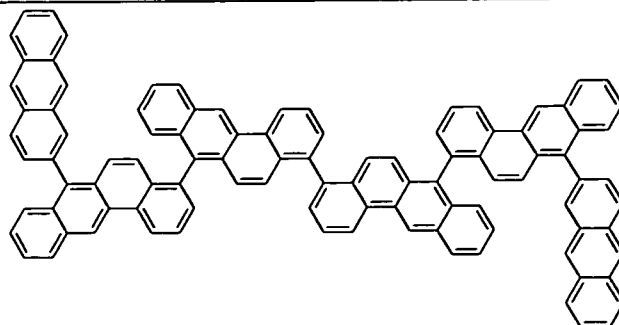
	
(233)	(234)
	
(235)	(236)
	
(237)	(238)
	
(239)	(240)
	
(241)	(242)

	
(243)	(244)
	
(245)	(246)
	
(247)	(248)
	
(249)	(250)
	
(251)	(252)

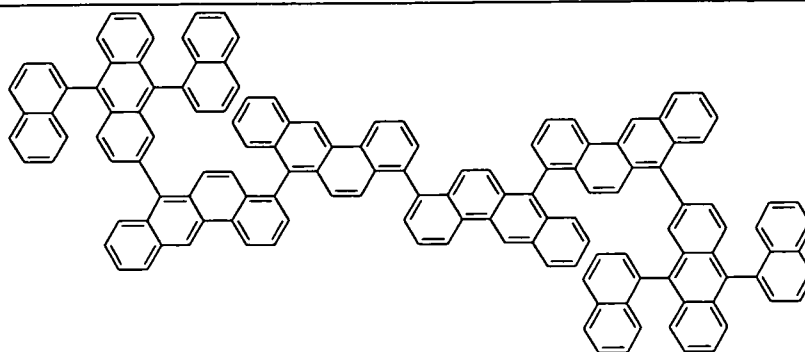
	
(253)	(254)
	
(255)	(256)
	
(257)	(258)
	
(259)	(260)
	
(261)	(262)

	
(263)	(264)
	
(265)	(266)
	
(267)	(268)
	
(269)	(270)
	
(271)	(272)
	
(273)	

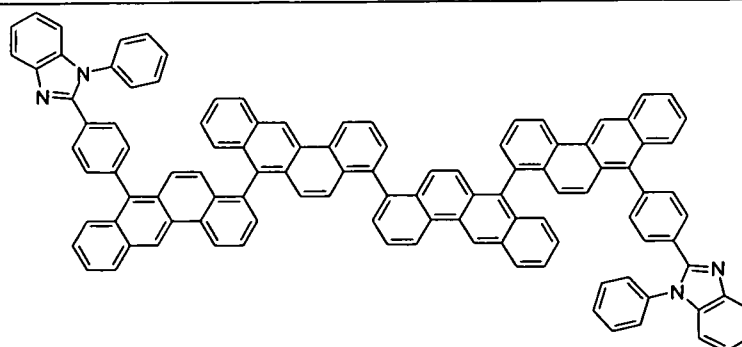

(274)

(275)

(276)

(277)

(278)

(279)



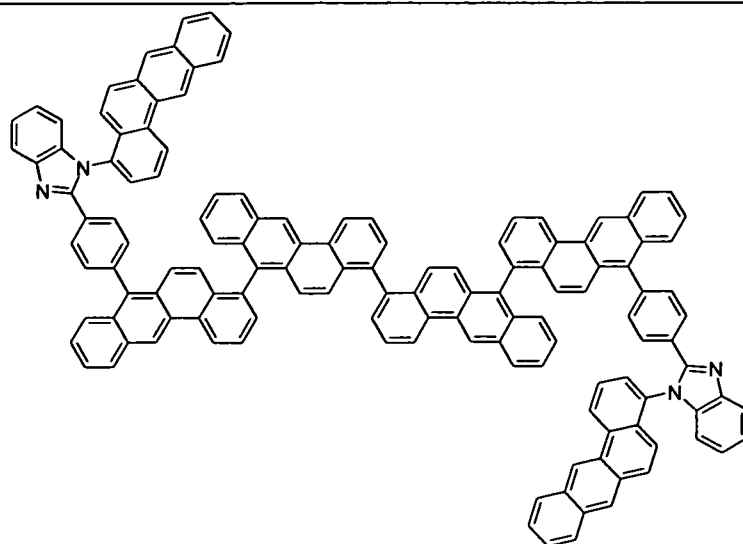
(280)



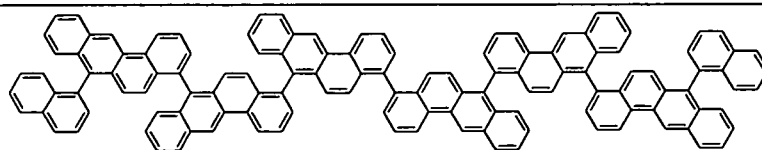
(281)



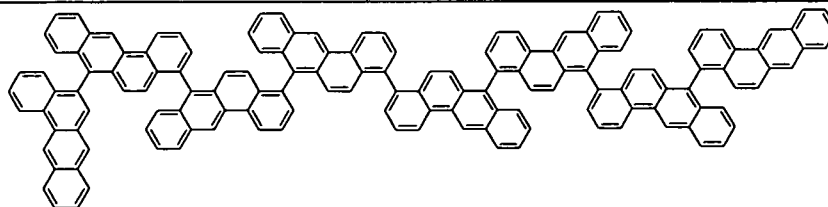
(282)



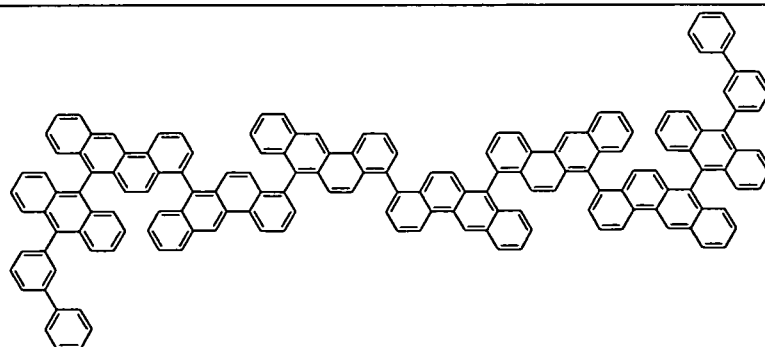
(283)



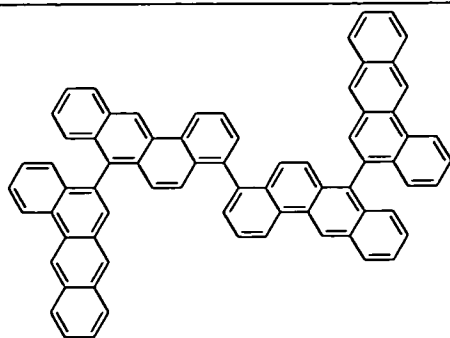
(284)



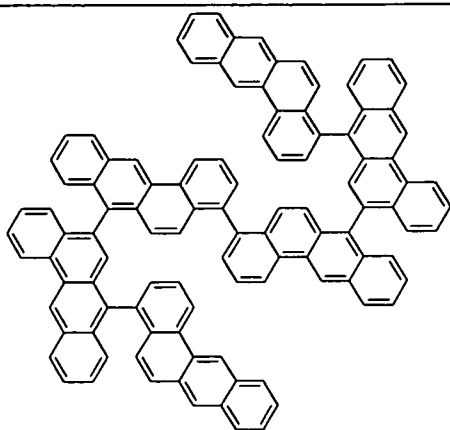
(285)



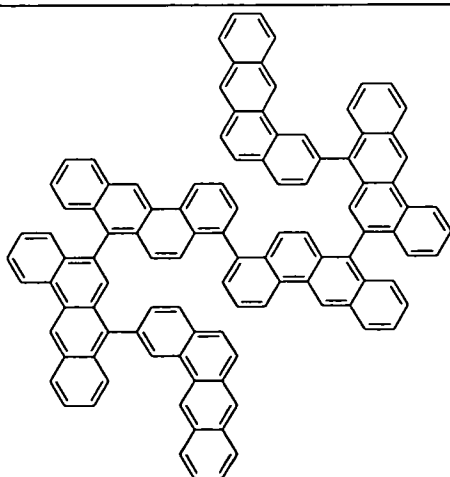
(286)



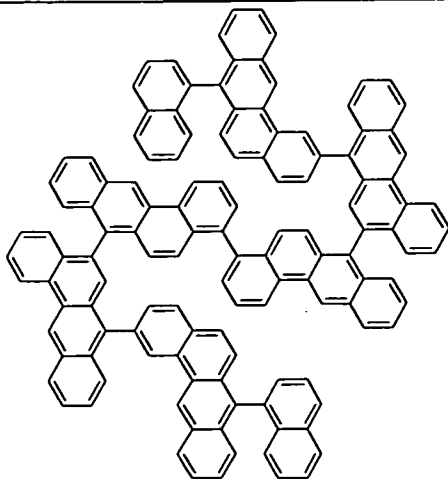
(287)



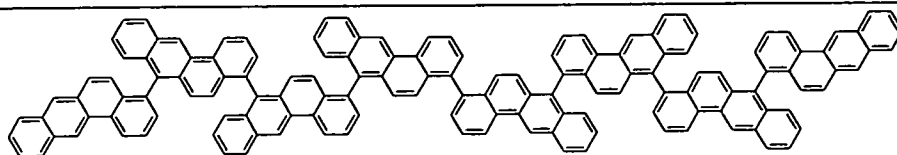
(288)



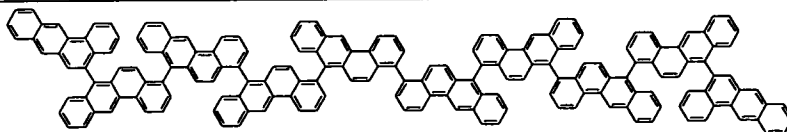
(289)



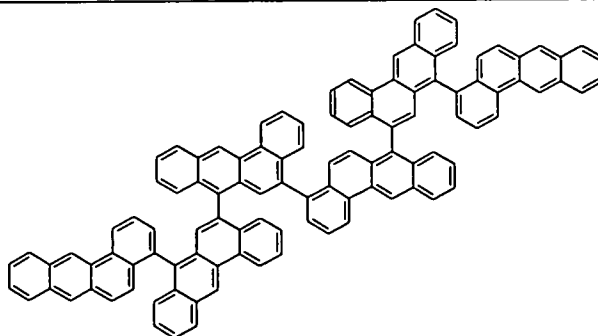
(290)



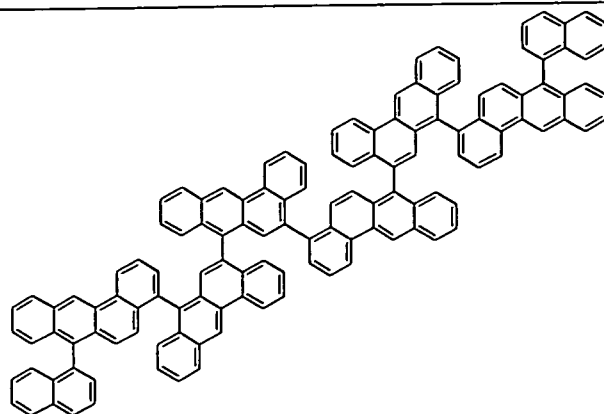
(291)



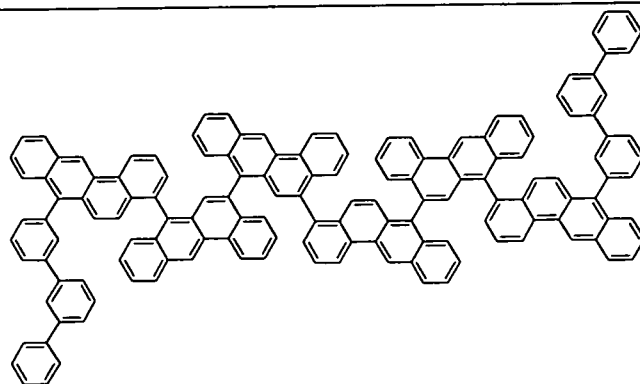
(292)



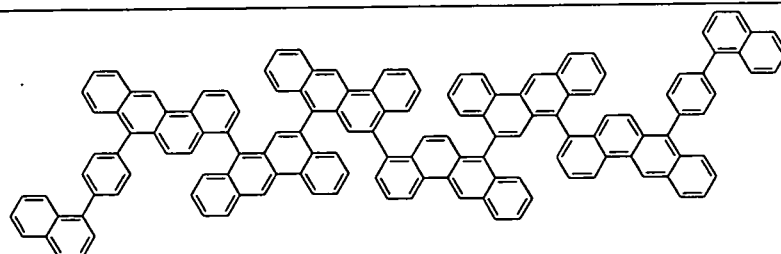
(293)



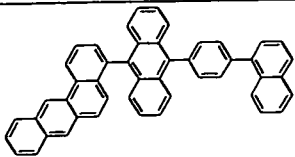
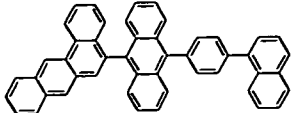
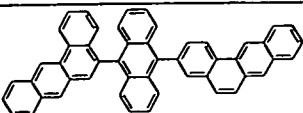
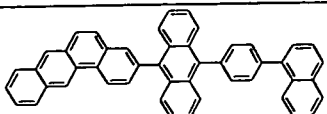
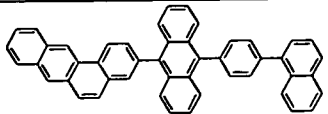
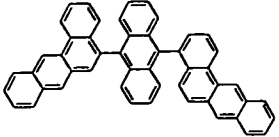
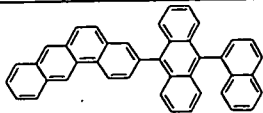
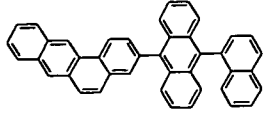
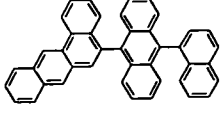
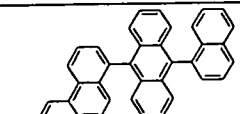
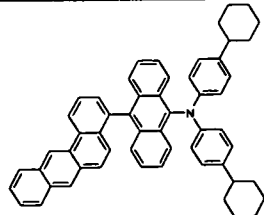
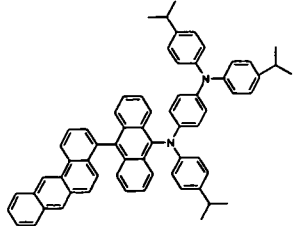
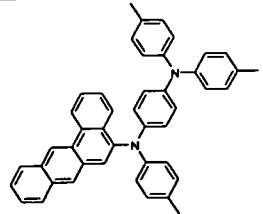
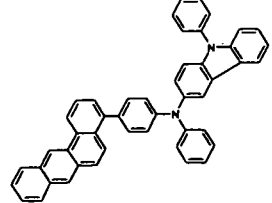
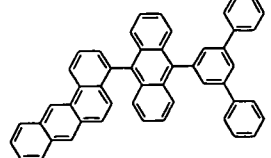
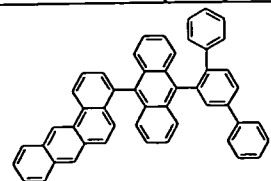
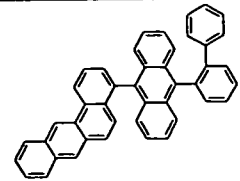
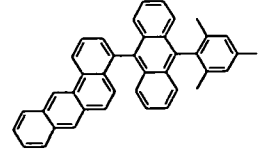
(294)

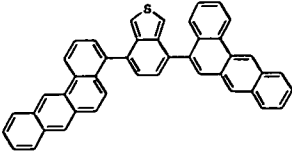
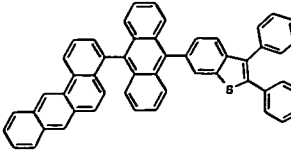
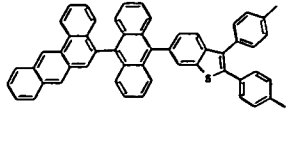
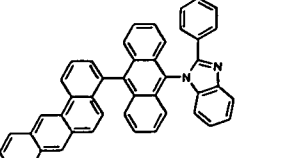
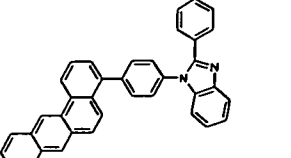
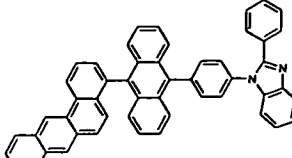
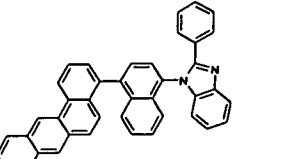
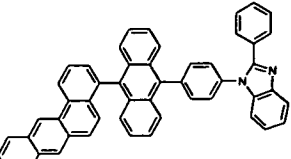
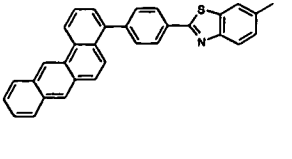
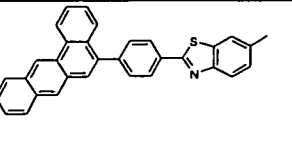
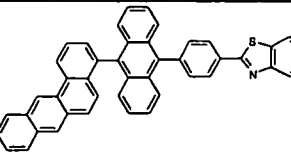
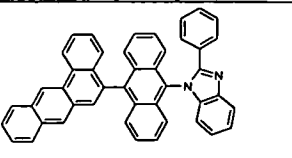
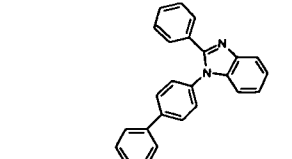
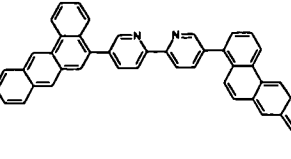
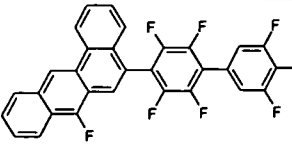
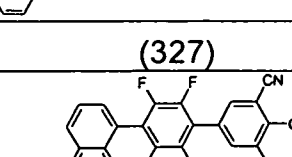
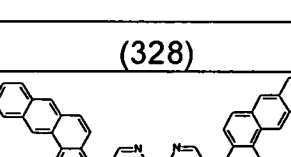
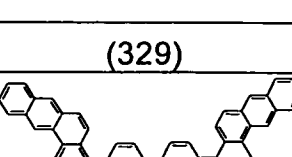


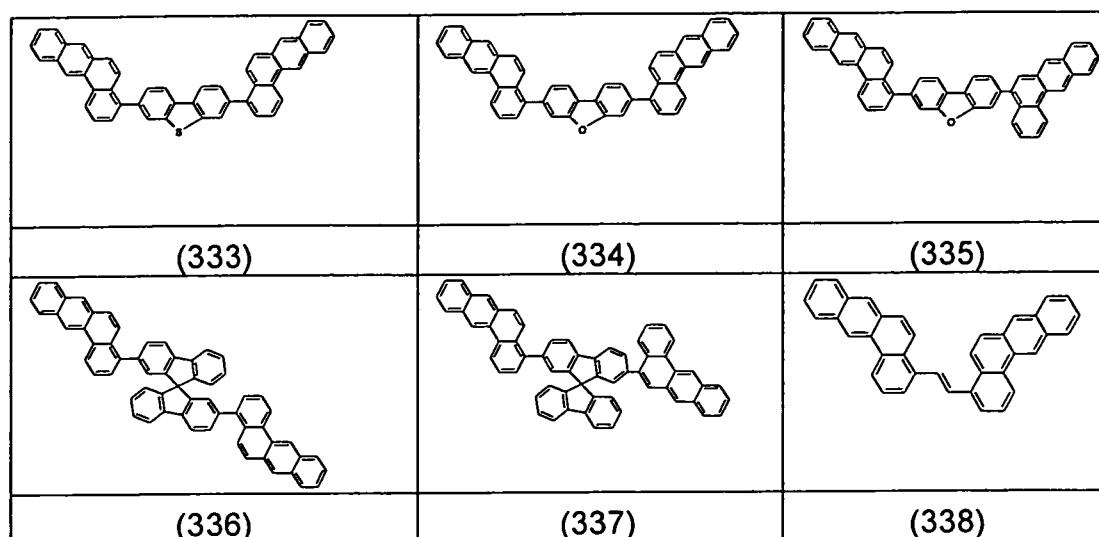
(295)



(296)

		
(297)	(298)	(299)
		
(300)	(301)	(302)
		
(303)	(304)	(305)
		
(306)	(307)	(308)
		
(309)	(310)	(311)
		
(312)	(313)	(314)

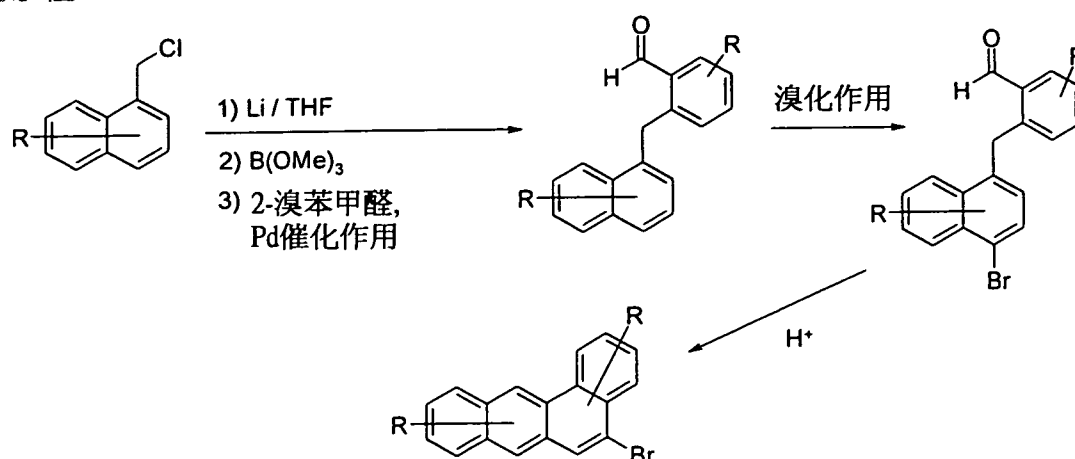
		
(315)	(316)	(317)
		
(318)	(319)	(320)
		
(321)	(322)	(323)
		
(324)	(325)	(326)
		
(327)	(328)	(329)
		
(330)	(331)	(332)



根據本發明之式 (1) 化合物可藉由熟習該技藝者一般說來已知的合成步驟製備。起始化合物可為 (例如) 對應溴苯并[a]蒽類，其之合成為已知的 (2-和 3-溴苯并[a]蒽：Hallmark 等人，J. Lab. Comp. Radiopharm. 1981，18(3)，331；4-溴苯并[a]蒽：Badgar 等人，J. Chem. Soc. 1949，799；5-溴苯并[a]蒽：Newman 等人，J. Org. Chem. 1982，47(15)，2837)。經對應離去基團 (例如氯、碘、三氟甲基磺酸酯或甲苯磺酸酯) 取代之苯并[a]蒽同樣地可作為起始化合物。經取代或未經取代的 5-溴苯并[a]蒽或者也可根據流程 1 從 2-溴-苯甲醛和 1-氯甲基萘獲得。在流程 1 中 R 表示一或更多個如式 (1) 所定義之基團。替代鋰化作用，與另外反應金屬 (例如鎂) 反應可在第一步驟中發生。在第一步驟中 Suzuki 偶合在如熟習該有機化學技藝者已知的標準條件下進行，例如在高溫下使用在甲苯/水中之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 且加入一種鹼。在第二步驟中溴化作用可 (例如) 使用元素溴或使用 NBS 進行。在第三步驟

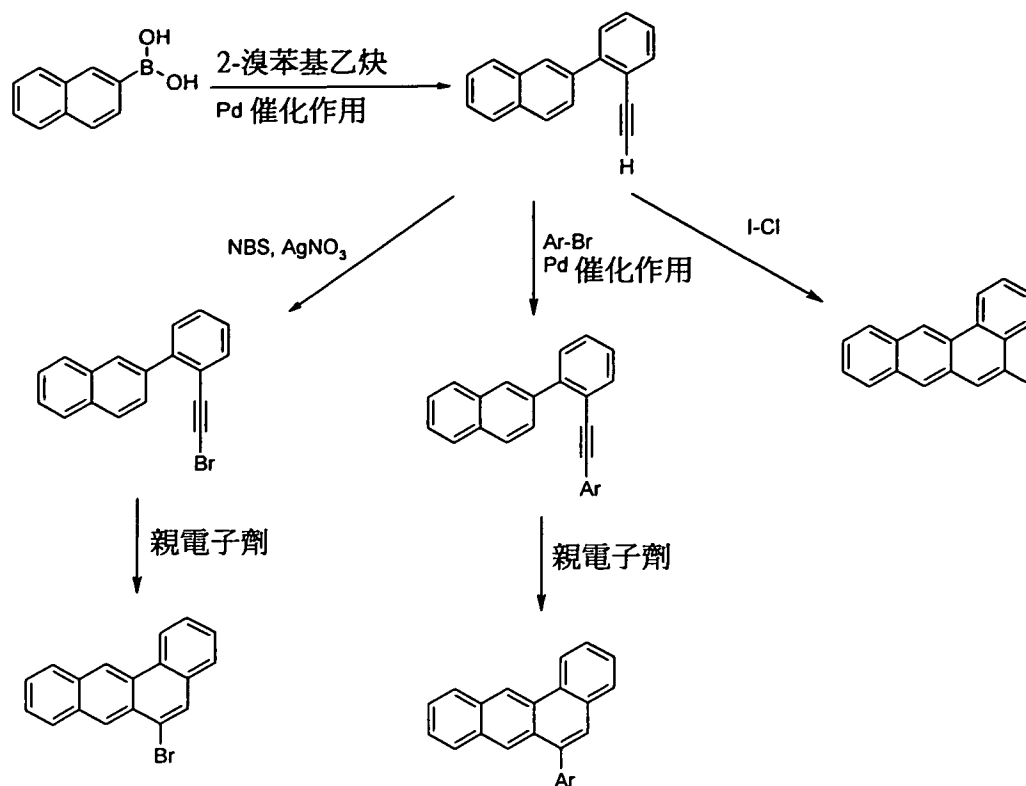
中之閉環（例如）藉由多磷酸之作用進行。

流程 1



至經取代之苯并[a]蒽的另外方法在於蒽-2-硼酸偶合至 2-溴苯基乙炔。以此方式獲得之乙炔可直接在閉環反應中反應或可在鹵化之後環化或可在 Sonogashira 偶合中與芳族化合物反應和隨後環化。在各情形中乙炔之閉環係使用親電子劑進行。在流程 2 中化合物也可經一或更多個基團 R 取代，其中 R 具有如上述式（1）項下所述之相同意義。Ar 表示芳族或雜芳族環系統。Suzuki 偶合和 Sonogashira 偶合是在標準條件下進行，如熟知有機合成技藝者所已知的。用於閉環反應之較佳親電子劑為強酸，例如 CF₃COOH、鹵化鋰，例如 InCl₃ 或 InBr₃、鹵化鉑，例如 PtCl₂，或鹵素間化合物，例如 I-Cl。

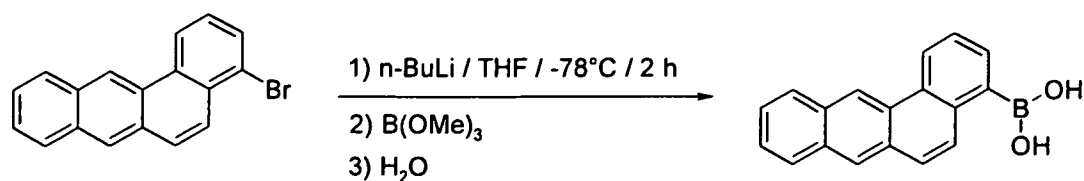
流程 2



本發明此外有關一種藉由隨意地經取代之 2- (2'-芳基乙炔) 苯基萘與親電子劑之反應製備隨意地經取代之 6-芳基苯并 [a] 蒽之方法。任何存在之取代基如類似於上述定義之基團 R 定義。

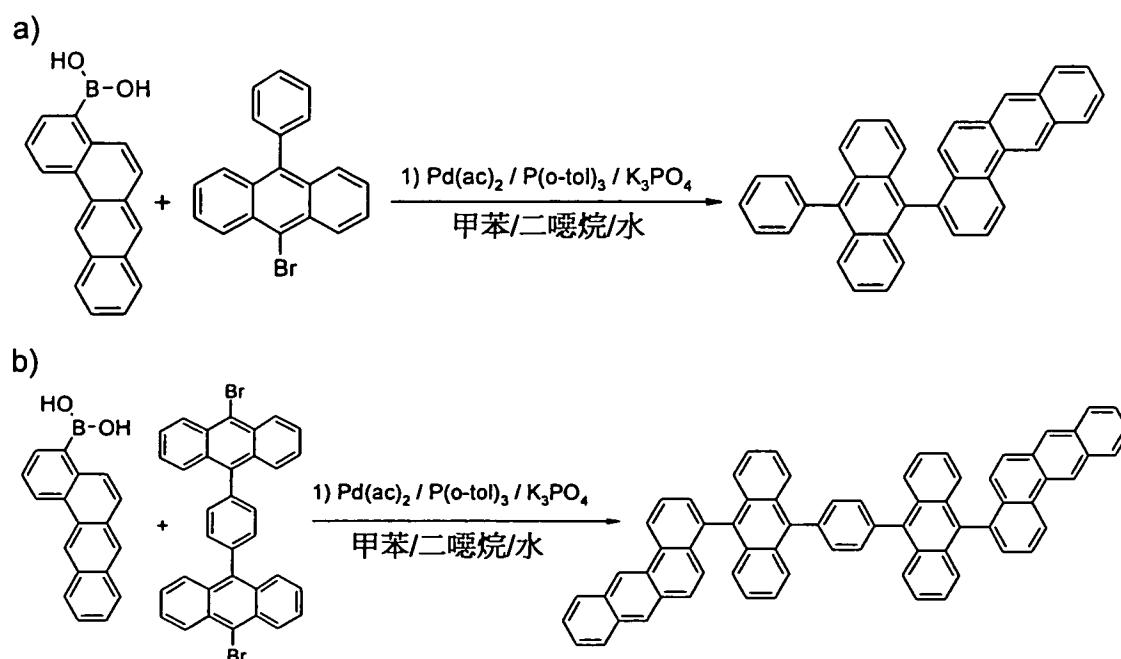
硼酸或衍生自這些化合物之硼酸衍生物可藉由金屬轉移獲得，例如於 -78℃ 下使用在 THF 中之正丁基鋰，接著以中間物形成之鋰苯并 [a] 蒽與硼酸三甲酯的反應，如藉流程 3 中之實例所示且參考 4-溴苯并 [a]-蒽之實例，隨意地接著酯化作用。鋰化合物此外可藉由與親電子劑（例如苯甲腈）之反應轉化成酮類，接著酸化作用或使用氯二芳磷類轉化成氧化磷類類接著氧化作用。鋰化合物與親電子劑之反應也是可能的。

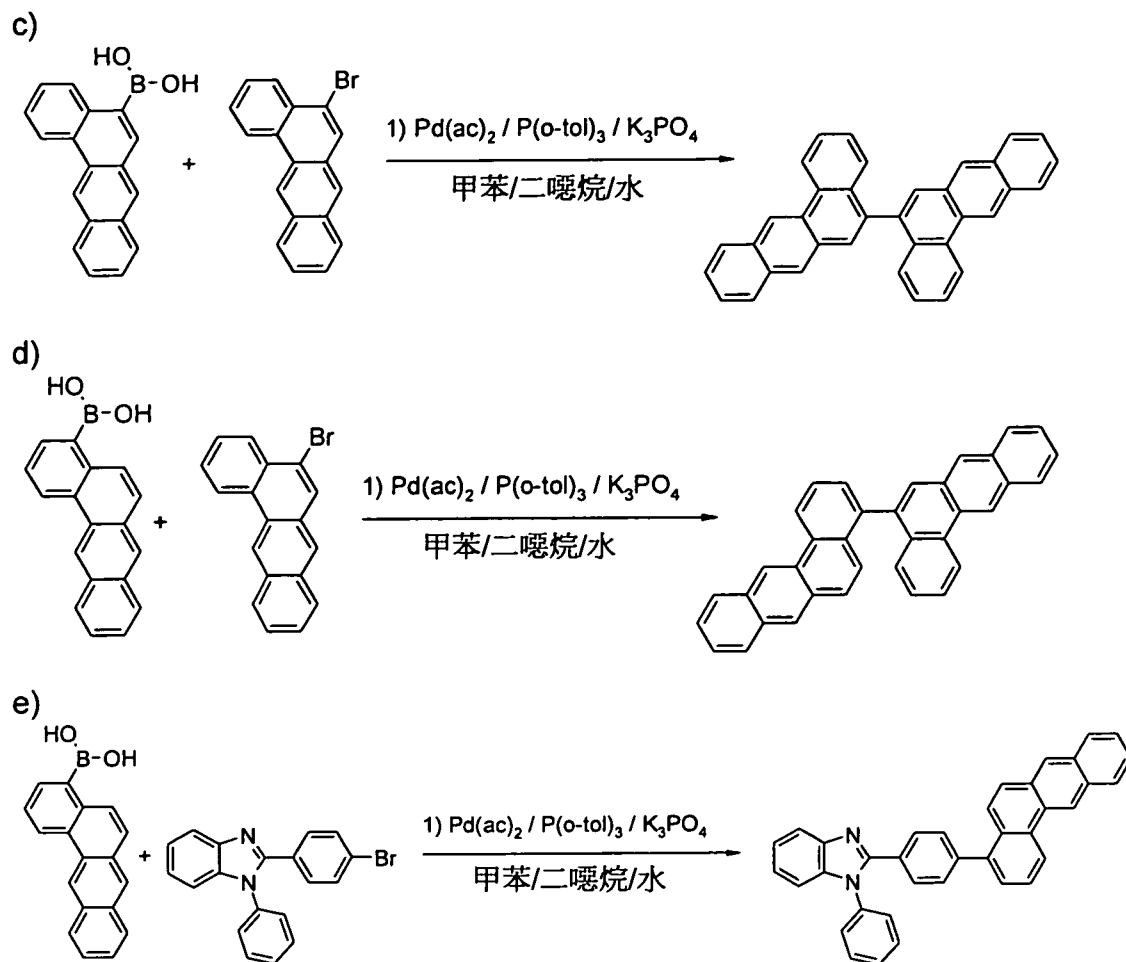
流程 3



在流程 3 中化合物也可經一或更多個基團 R 取代，其中 R 具有與上述式 (1) 項所述相同之意義。硼酸或硼酸衍生物至芳基溴之 Suzuki 偶合產生大量類別之不同芳族和雜芳族化合物。此藉流程 4 a) 至 e) 中之實例顯示，從苯并[a]蒽-4-硼酸開，但也同樣地適用於其他取代方式。此外，所有的結構也可經一或更多個基團 R 取代，其中 R 具有與上述式 (1) 項所述相同之意義。

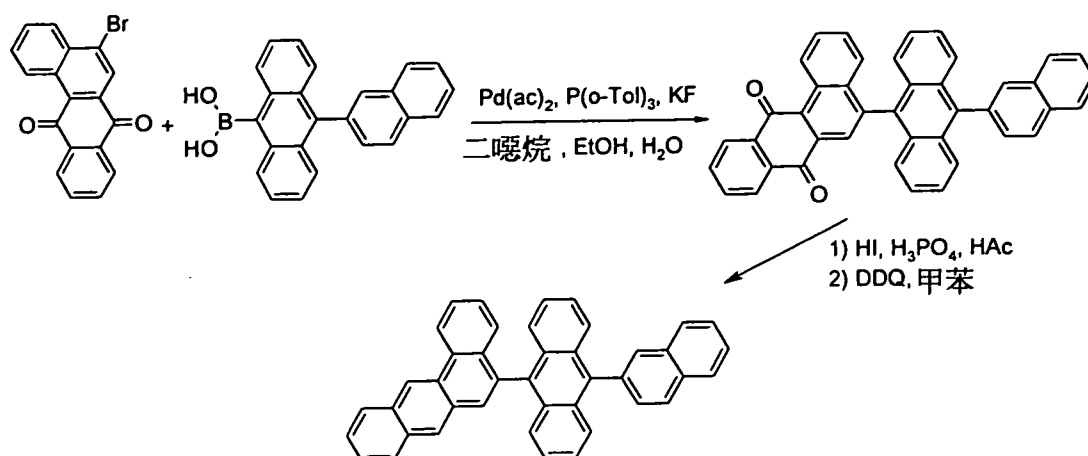
流程 4





或者，溴苯并[a]蒽醌類（合成根據 Newman 等人，J. Org. Chem. 1983，48，2926-8；Cho 等人，J. Org. Chem. 1987，52，2668-78；Becker 等人，J. Phys. Chem. 1993，97，344-9）首先可被偶合和然後遇原至對應烴類，如藉流程 5 中之 5-溴苯并[a]蒽醌的實例所示。替代簡單的芳化作用，對應 7,12-經取代之苯并[a]蒽衍生物在此藉由有機金屬試劑（例如有機鋰化合物或格任亞化合物）之加合反應，接著芳化作用也可被合成。

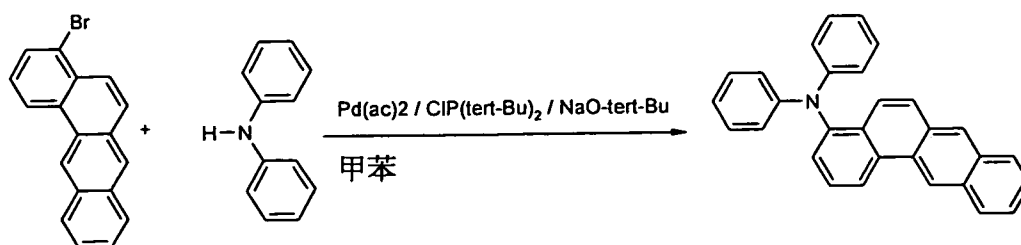
流程 5



在流程 5 中化合物也可經一或更多個基團 R 取代，其中 R 具有與上述式 (1) 項所述相同之意義。

藉由 Hartwig-Buchwald 方法之溴化物的鈀促進之胺化作用產生對應胺化之苯并[a]蔥類 (流程 6)。在苯并[a]蔥之其他位置的胺化作用為對應地可能的。與其他離去基團 (例如氯、碘、三氟甲基磺酸酯、甲苯磺酸酯、等等) 之對應反應是為可能。

流程 6



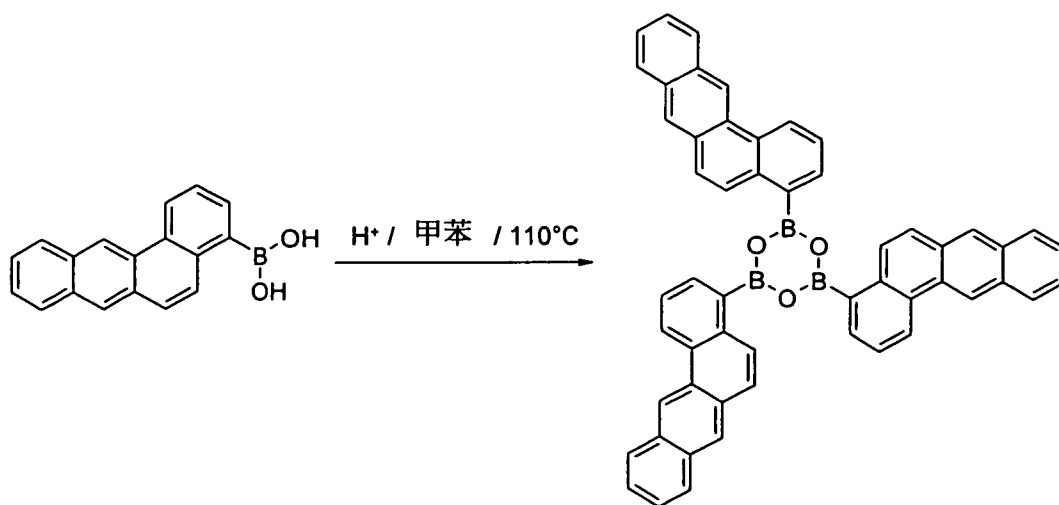
在流程 6 中化合物也可經一或更多個基團 R 取代，其中 R 具有與上述式 (1) 項所述相同之意義。

本發明此外係有關一種製備式 (1) 化合物之方法，

其係藉由將經反應性離去基（特別是氯、溴、碘、三氟甲基磺酸酯、甲苯磺酸酯、硼酸或硼酸酯）取代之苯并[a]蒽偶合至官能化芳族化合物或至單-或二取代之胺。反應性離去基較佳為溴。式（1）之骨架和芳基取代基之間的適當偶合反應（特別地）是過渡金屬催化之偶合反應，特別是使用鈀催化作用之 Suzuki 偶合，致使以便硼酸衍生物偶合至鹵素衍生物在此特別適合。至單-或二取代之胺的適當偶合反應（特別地）為藉由 Hartwig-Buchwald 方法的鈀催化之偶合。一般說來該反應之反應條件為熟習有機合成技藝者已知的。

硼酸此外藉由與二醇類、寡聚醇類和多元醇類之反應可轉化成硼酸酯或在水分離器中在甲苯中煮沸轉化成酐類（流程 7），其中在苯并[a]蒽之 2、3、5 和 6 位置之反應對應地進行。

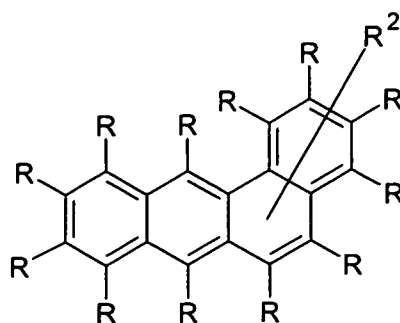
流程 7



在流程 7 中化合物也可經一或更多個基團 R 取代，其

中 R 具有與上述式 (1) 項所述相同之意義。

本發明此外係有關下式 (34) 之化合物，其代表式 (1) 化合物的合成中之重要中間物



式 (34)

其中 R、R¹ 和 Ar¹ 具有與上述式 (1) 之化合物所述相同之意義，和 R² 鍵結於苯并[a]蔥之 2、3、4、5 或 6 位置且對應地沒有基團 R 於此位置鍵結，以及：

R² 表示 B(OR¹)₂ 或 B(OAr¹)₂。

此外在有機電子裝置中也可能直接使用式 (20) 之硼酸衍生物作為活性化合物，一般說來如 WO 06/117052 中所述。

可使用上述根據本發明之化合物（特別是經反應性離去基，例如溴、碘、硼酸或硼酸酯取代之化合物）作為製備對應寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物之單體。寡聚合作用或聚合作用在此較佳經由鹵官能性或硼酸官能性發生。

本發明因此此外係有關寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其包含一或多個式 (1) 之化合物，其中一或更多個基團 R 或 Ar 或 Y 表示從式 (1) 化合物至聚合物、寡聚

物或樹枝狀聚合物之鍵。視式(1)化合物之連接而定，苯并[a]蔥單元因此形成寡聚物或聚合物之側鏈或連接於主鏈。爲了本發明，寡聚物表示一種化合物，其包含至少三個苯并[a]蔥單元。聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物可爲共軛、部分共軛或非-共軛。寡聚物或聚合物可爲直鏈、支鏈或樹枝狀。在以直鏈方式連接之結構中，式(1)之單元可直接彼此連接或經由二價基團(例如經由經取代或未經取代的伸烷基基團、經由雜原子或經由二價芳族或雜芳族基團)彼此連接。在支鏈和樹枝狀結構中，三或更多式(1)之單元可(例如)經由三價或多價基團(例如經由三價或多價芳族或雜芳族基團)連接，以產生支鏈或樹枝狀寡聚物或聚合物。式(1)之單元較佳經由苯并[a]蔥之7和12位置連接至寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物內。經由二個位置連接至基團R或至基團Y此外爲較佳的。

對於在寡聚物、樹枝狀聚合物和聚合物中式(1)之重複單元，適用如上所述之相同較佳選擇。

爲了製備寡聚物或聚合物，根據本發明之單體係與另外的共單體均聚合或共聚合。適當和較佳的共單體係選自萸類(例如根據EP 842208或WO 00/22026)、螺二萸類(例如根據EP 707020、EP 894107或WO 06/061181)、對-伸苯類(例如根據WO 92/18552)、呋啞類(例如根據WO 04/070772或WO 04/113468)、噻吩類(例如根據EP 1028136)、二氫萸類(例如根據WO 05/014689或WO 07/006383)、順式-和反式-茛并萸類(例如根據

WO 04/041901 或 WO 04/113412) 、 酮 類 (例 如 根 據 WO 05/040302) 、 菲 類 (例 如 根 據 WO 05/104264 或 WO 07/017066) 、 或 這 些 單 元 之 多 數 個 。 聚 合 物 、 寡 聚 物 或 樹 枝 狀 聚 合 物 通 常 也 包 含 另 外 的 單 元 ， 例 如 發 光 (螢 光 或 磷 光) 單 元 ， 例 如 ， 例 如 ， 乙 烯 基 三 芳 胺 類 (例 如 根 據 WO 07/068325) 或 磷 光 金 屬 錯 合 物 (例 如 根 據 WO 06/003000) 、 及 / 或 電 荷 傳 輸 單 元 ， 特 別 是 該 等 以 三 芳 胺 類 為 主 者 。

式 (1) 化 合 物 和 對 應 寡 聚 物 、 樹 枝 狀 聚 合 物 和 聚 合 物 適 合 使 用 於 電 子 裝 置 中 ， 特 別 是 使 用 於 有 機 電 發 光 裝 置 (OLED 、 PLED) 中 。 視 取 代 而 定 ， 化 合 物 被 使 用 在 不 同 的 功 能 和 層 中 。

因 此 本 發 明 此 外 係 有 關 式 (1) 的 化 合 物 和 對 應 寡 聚 物 、 樹 枝 狀 聚 合 物 或 聚 合 物 在 電 子 裝 置 中 ， 特 別 是 在 有 機 電 發 光 裝 置 中 的 用 途 。 上 述 式 (2) 至 (24) 之 較 佳 化 合 物 特 別 適 合 於 此 目 的 。

本 發 明 此 外 係 有 關 有 機 電 子 裝 置 ， 其 包 含 至 少 一 種 式 (1) 之 化 合 物 或 至 少 一 種 對 應 寡 聚 物 、 樹 枝 狀 聚 合 物 或 聚 合 物 ， 特 別 是 包 含 陽 極 、 陰 極 和 至 少 一 種 發 光 層 之 有 機 電 發 光 裝 置 ， 其 特 徵 在 於 至 少 一 種 有 機 層 (其 可 為 發 光 層 或 另 外 層) 包 含 至 少 一 種 式 (1) 之 化 合 物 或 至 少 一 種 對 應 寡 聚 物 、 樹 枝 狀 聚 合 物 或 聚 合 物 。 上 述 式 (2) 至 (24) 之 較 佳 化 合 物 特 別 適 合 於 此 目 的 。

除 了 陰 極 、 陽 極 和 發 光 層 之 外 ， 有 機 電 發 光 裝 置 也 可

包含另外的層。這些在各情形中可選自（例如）一或多個電洞注入層、電洞傳輸層、電子傳輸層、電子注入層及/或電荷產生層（IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer）。然而，應指出這些層之各個不一定必須存在。

熟習該有機電發光之技藝者知道其可採用材料於這些另外層。一般，所有根據先前技藝使用之材料適合於另外層，和熟習該技藝者將能夠將這些材料與根據本發明之材料組合於有機電發光裝置中而沒有進行發明步驟。可使用於根據本發明之電發光裝置中的電洞傳輸或電洞注入層之較佳電洞傳輸材料的例子為茛苳並茛苳胺類和相關衍生物（例如根據 WO 06/122630 或 WO 06/100896）、揭示於 EP 1661888 中之胺衍生物、六氮雜三伸苯基衍生物（例如根據 WO 01/049806）、具有縮合芳族環之胺衍生物（例如根據 US 5,061,569）、揭示於 WO 95/09147 中之胺衍生物、單苯并茛苳并茛苳胺類（例如根據 WO 08/006449）或二苯并茛苳并茛苳胺類（例如根據 WO 07/140847）。

在本發明另一較佳體系中，有機電發光裝置包含多數個之發光層，其中至少一層包含至少一種式（1）之化合物。這些發光層特佳具有總計多數個之介於 380 奈米和 750 奈米之間的發光最大值，所產生之全白色發光，也就是能夠發螢光或發磷光和發藍色和黃色、橘色或紅色光之

各種發光化合物，可被使用於發光層。在本文中式（1）較佳使用於藍色發光層。特佳者為三層系統，也就是具有三發光層之系統，其中這些層之至少一層包含至少一種式（1）之化合物和其中三層顯示藍色、綠色和橘色或紅色發光（基本結構參見例如 WO 05/011013）。同樣地適合於白色發光者為具有寬帶發光且因此顯示白色發光之發光體。

在本發明一體系中，使用式（1）至（24）之化合物作為螢光摻雜劑（特別是藍色-螢光摻雜劑）之主體材料。在此情形中，在式（1）和（3）至（7）中一或多個基團 Ar 及/或 Y 較佳選自簡單或縮合芳基或雜芳基，特別是苯基蒽基或 1-或 2-萘基蒽基。在式（1）和（8）至（24）中一或多個基團 Ar 及/或 Y 此外較佳選自縮合伸芳基基團，特別是 9,10-蒽。

在包含主體和摻雜劑之系統中的主體材料表示以較高比例存在於系統中之成分。在包含一種主體和多數個之摻雜劑的系統中，主體表示在混合物具有最高比例的成分。

式（1）之主體材料在發光層中的比例係介於 50.0 和 99.9 重量%之間，較佳介於 80.0 和 99.5 重量%之間，特佳介於 90.0 和 99.0 重量%之間。對應地，摻雜劑之比例係介於 0.01 和 50.0 重量%之間，較佳介於 0.1 和 20.0 重量%之間，特佳介於 0.5 和 15 重量%之間，非常特佳介於 1.0 和 10.0 重量%之間。

較佳摻雜劑係選自單苯乙烯胺類、二苯乙烯胺類、三

苯乙炔胺類、四苯乙炔胺類、苯乙炔膦類、苯乙炔基醚類、和芳胺類之種類。單苯乙炔胺表示一種包含一個經取代或未經取代的苯乙炔基和至少一個，較佳為芳族胺之化合物。二苯乙炔胺表示一種包含二個經取代或未經取代的苯乙炔基和至少一個，較佳為芳族胺之化合物。三苯乙炔胺表示一種包含三個經取代或未經取代的苯乙炔基和至少一個，較佳為芳族胺之化合物。四苯乙炔胺表示包含一種四個經取代或未經取代的苯乙炔基和至少一個，較佳為芳族胺之化合物。苯乙炔基特佳為芪類，其也可另外經取代。對應膦類和醚類類似胺類定義。為了本發明，芳胺或芳族胺表示一種包含三個經取代或未經取代的芳族或雜芳族環系統直接鍵結至氮之化合物。這些芳族或雜芳族環系統之至少一個特佳具有至少 14 個芳族環原子之縮合環系統。其較佳例子為芳族蔥胺類、芳族蔥二胺類、芳族芪胺類、芳族芪二胺類、芳族蒽胺類或芳族蒽二胺類。芳族蔥胺表示一種化合物，其中一個二芳胺基基團直接鍵結至蔥基團，較佳在 9-位置。芳族蔥二胺表示一種化合物，其中二個二芳胺基基團直接鍵結至蔥基團，較佳在 9,10-位置。芳族芪胺類、芪二胺類、蒽胺類和蒽二胺類對其類似地定義，其中二芳胺基基團較佳在 1-位置或在 1,6-位置鍵結至芪。另一較佳摻雜劑係選自茚并茚胺類或茚并茚二胺類，例如根據 WO 06/122630，苯并茚并茚胺類或苯并茚并茚二胺類，例如根據 WO 08/006449，和二苯并茚并茚胺類或二苯并茚并茚二胺類，例如根據 WO 07/140847。

選自此類苯乙炔胺的摻雜劑之例子為經取代或未經取代之三苈胺類或揭述於例如 WO 06/000388、WO 06/058737、WO 06/000389、WO 07/065549 和 WO 07/115610 中之摻雜劑。較佳者為下述根據本發明之摻雜劑。

在本發明另一體系中，使用式 (1) 化合物作為發光材料。化合物特別適合作為發光化合物，如果在式 (1) 和 (3) 至 (7) 之化合物中至少一個 Ar 及/或 Y 基團包含至少一種芳胺基單元。較佳芳胺基單元為上述式 (32) 和 (33) 之基團。化合物此外適合作為發光化合物，如果式 (1) 和 (8) 至 (24) 之化合物中基團 Y 表示 N 或 NAr¹。

式 (1) 之化合物在發光層之混合物中的比例係介於 0.1 和 50.0 重量%之間，較佳介於 0.5 和 20.0 重量%之間，特佳介於 1.0 和 10.0 重量%之間。對應地，主體材料的比例為介於 50.0 和 99.9 重量%之間，較佳介於 80.0 和 99.5 重量%之間，特佳介於 90.0 和 99.0 重量%之間。

用於此目的之適當主體材料係選自各種類之物質的材料。較佳主體材料係選自寡聚伸芳 (oligoarylene) 之種類 (例如如 EP 676461 中所述之 2,2',7,7'-肆苯基螺二茱或二萘基蒽)，特別是包含稠合芳族之寡聚伸芳、寡聚伸芳伸乙炔 (oligoarylene vinylenes) (例如如 EP 676461 中所述之 DPVBi 或螺-DPVBi)、多牙 (polypodal) 金屬錯合物 (例如如 WO 04/081017 中所述)、電洞傳導化合物 (例如如 WO 04/058911 中所述)，電子傳導化合物，

特別是酮類、氧化磷類、亞碲類等等（例如如 WO 05/084081 和 WO 05/084082 中所述）、位阻異構體（例如如 WO 06/048268 中所述）或硼酸衍生物（例如如 WO 06/117052 中所述）。適當的主體材料此外也為上述根據本發明之苯并[a]蒽化合物。除了根據本發明之化合物之外，特佳主體材料係選自包含萘、蒽及/或芘之寡聚伸芳或這些化合物之位阻異構體、寡聚伸芳伸乙烯、酮類、氧化磷類和亞碲類之種類。除了根據本發明之苯并[a]蒽化合物之外，非常特佳主體材料係選自包含蒽及/或芘之寡聚伸芳或這些化合物之位阻異構體、氧化磷類和亞碲類之種類。為了本發明，寡聚伸芳意欲表示一種其中至少三個芳基或伸芳基基團彼此鍵結之化合物。

仍在本發明另一體系中，使用式（1）化合物作為電洞傳輸材料或作電洞注入材料。化合物然後較佳被至少一個基 $N(Ar^1)_2$ 取代，至少一個基 R 特佳表示 $N(Ar^1)_2$ 基團。 $N(Ar^1)_2$ 基團較佳選自上述式（32）及（33）。此外如果在式（1）及（8）至（24）中基團 Y 表示 N 或 NAr^1 ，則化合物為較佳的。化合物較佳使用於電洞傳輸層或電洞注入層中。為了本發明，電洞注入層為一種直接相鄰於陽極之層。為了本發明，電洞傳輸層為一種位於電洞注入層和發光層之間的層。如果使用式（1）之化合物作為電洞傳輸材料或電洞注入材料，則它們較佳摻雜電子受體化合物，例如摻雜 F₄-TCNQ 或摻雜如 EP 1476881 或 EP 1596445 中所述之化合物。

仍在本發明另一體系中，使用式（1）之化合物作為電子傳輸材料。在此一個或更多取代基 R 及/或 R¹ 較佳包含至少一個基 C=O、P(=O)及/或 SO₂ 單元，其較佳為直接鍵結至苯并[a]蒽。在此同樣地較佳者為一或多個取代基 R 及/或 R¹ 包含貧電子雜環，如例如，咪唑、吡唑、噻唑、苯并咪唑、苯并噻唑、三唑、噁二唑、苯并噻二唑、啡啉、等等。同樣地較佳者為在式（1）和（8）至（24）之化合物中一或多個 Ar¹ 基團表示貧電子雜環，如例如，咪唑、吡唑、噻唑、苯并咪唑、苯并噻唑、三唑、噁二唑、苯并噻二唑、啡啉、等等、及/或基團 Y 表示此類型之貧電子雜環或表示 C=O、POAr¹、SO 或 SO₂。此外化合物較佳可摻雜電子予體化合物。

式（1）之重複單元也可使用於聚合物中作為聚合體骨架、作為發光單元、作為電洞傳輸單元及/或作為電子傳輸單元。較佳取代方式在此對應於該等如上所述者。

此外較佳者為一種有機電發光裝置，其特徵在於一或更多層藉由昇華法塗佈，其中材料係在真空昇華單元中於 10⁻⁵ 毫巴以下，較佳 10⁻⁶ 毫巴以下，特佳 10⁻⁷ 毫巴以下之壓力蒸氣沈積。

同樣地較佳者為有機電發光裝置，其特徵在於一或更多層藉由 OVPD（有機蒸氣相沈積）方法或借助於載體氣體昇華塗佈，其中該材料係於在 10⁻⁵ 毫巴和 1 巴之間的壓力施用。

此外較佳者為有機電發光裝置，其特徵在於一或更多

層係例如藉由旋轉塗佈，或藉任何所要印刷方法（例如網印、柔版印刷或平版印刷，但特佳為 LITI（光誘導熱成像、熱轉移印刷）或噴墨印刷）從溶液製備。為此目的可溶性化合物是必需的。經由化合物之適當取代作用可達成高溶解度。

根據本發明之化合物使用於有機電發光裝置時具有增加的效率和顯著較長壽命，使得根據本發明之有機電發光裝置比該等包含根據先前技藝之材料的有機電發光裝置更適合使用於高品質和長壽命顯示器。此外，根據本發明之化合物具有高熱穩定性和高玻璃轉移溫度且可昇華而沒有分解。

本申請案本文係有關根據本發明之化合物在有關 OLED 和 PLED 及對應顯示器之用途。雖然此說明的限制，熟習該項技術者無需另外的進步性也可能為了另外用途而將根據本發明之化合物使用於其他電子裝置中，例如用於有機場效電晶體（O-FET）、有機薄膜電晶體（O-TFT）、有機發光電晶體（O-LET）、有機積體電路（O-IC）、有機太陽能電池（O-SC）、有機場抑止裝置（field-quench devices）（O-FQD）、發光電化學電池（LEC）、有機雷射二極體（O-雷射）或有機光感受器（photo receptors）。

本發明同樣地係有關根據本發明之化合物於對應裝置之用途和有關這些裝置本身。

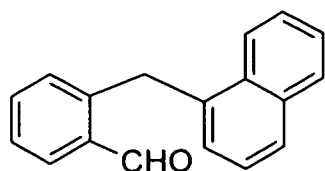
【實施方式】

實例

在正大氣壓下進行下列合成，除非另有指示。起始物質係購自 ALDRICH 或 ABCR 或如藉由文獻方製備。2-和3-溴苯并[a]蒽：Hallmark 等人，J. Lab. Comp. Radiopharm. 1981，18(3)，331；4-溴苯并[a]蒽：Badgar 等人，J. Chem. Soc. 1949，799；5-溴苯并[a]蒽：Newman 等人，J. Org. Chem. 1982，47(15)，2837。不可能經由 DSC 測量決定所有化合物之玻璃轉移溫度。

實例 1：5-溴苯并[a]蒽的合成

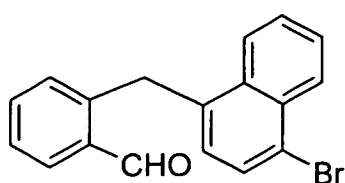
a) 2-(1-甲醯基苯基)-1-萘基甲烷



對應格任亞（Grignard）化合物係從 88.3 克（500 毫莫耳）的 1-氯甲基萘和 12.2 克（500 毫莫耳）的鎂在 500 毫升的乙醚中製備。格任亞溶液已冷卻至 -78°C 之後，加入 59 毫升（530 毫莫耳）的硼酸三甲酯，然後使混合物加熱至室溫，在真空中除去溶劑，將 500 毫升的甲苯、92.5 克（500 毫莫耳）的 2-溴苯甲醛、2.9 克（2.5 毫莫耳）的肆（三苯膦基）鈰（0）和 300 毫升的 2 M 碳酸鈉溶液加至殘餘物，和在回流下加熱反應混合物 16 小時。冷卻之

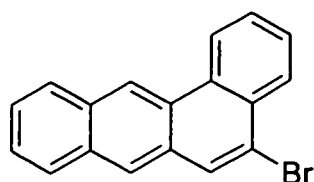
後，分離有機相，每次用 500 毫升的水洗滌二次，經過矽凝膠過濾和然後蒸發到乾，和從甲苯 / 乙腈再結晶殘餘物。產率：93.1 克（378 毫莫耳），75.6%，純度約 97%（NMR）。

b) 2-（1-甲醯基苯基）-1-（4-溴萘基）甲烷



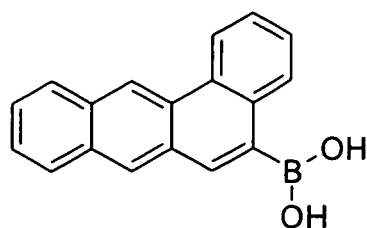
將 19.5 毫升（380 毫莫耳）的溴和 300 毫升的二氯甲烷的混合物逐滴加至 86.2 克（350 毫莫耳）的 2-（1-甲醯基苯基）-1-萘基甲烷在 1500 毫升的二氯甲烷中之冷卻至 0℃ 的溶液且排除光。攪拌 3 小時之後，加入 1000 毫升的 5% 亞硫酸鈉溶液，簡短地攪拌混合物，分離有機相，用 500 毫升的水洗滌三次且在真空中蒸發，和將殘餘物溶解在少量丙酮中。靜置 24 小時之後用吸濾過濾結晶，用丙酮：正己烷（1：1）洗滌和在真空中乾燥。產率：90.7 克（279 毫莫耳），79.7%，純度約 98%（NMR）。

c) 5-溴苯并[a]蒽



在 50°C 下將 32.5 克 (100 毫莫耳) 的 2-(1-甲醯基苯基)-1-(4-溴蔡基) 甲烷合併於 1000 克的多磷酸中。在 100°C 下加熱團塊 2 小時，冷卻後溶解在 5 升之冰水。用吸濾過濾固體，用大量水洗滌，乾燥和然後經過氧化鋁管柱在甲苯中過濾。產率：25.5 克 (83 毫莫耳)，83.0%，純度約 98% (NMR)。

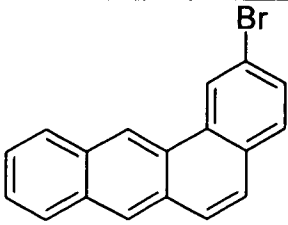
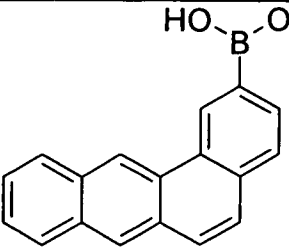
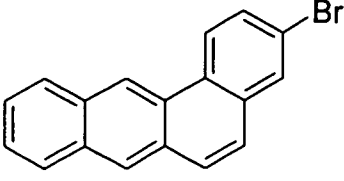
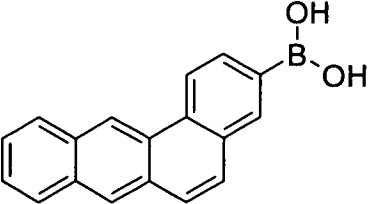
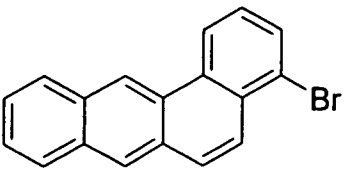
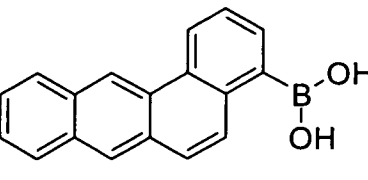
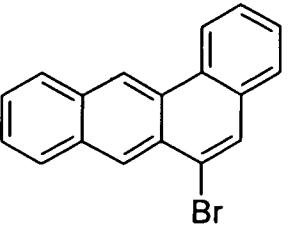
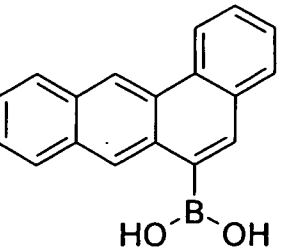
實例 2：苯并[a]蒽-5-硼酸的合成



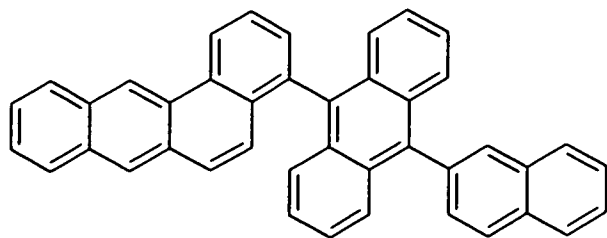
於 -78°C 下將 52 毫升 (130 毫莫耳) 的正-丁基鋰 (在正己烷中之 2.5 M) 逐滴加至 30.7 克 (100 毫莫耳) 的 5-溴苯并[a]蒽在 1000 毫升的 THF 中之懸浮液並攪拌，和攪拌混合物另 2 小時。以一整部分將 16.7 毫升 (150 毫莫耳) 的硼酸三甲酯加至紅色溶液並激烈攪拌，於 -78°C 下攪拌混合物另 30 分鐘，然後經 3 小時間加熱至室溫，加 300 毫升的水，和攪拌混合物 30 分鐘。分離有機相和在真空中蒸發到乾。將固體溶解在 100 毫升之正己烷中，用吸

濾過濾，用 100 毫升的己烷洗滌一次和在真空中乾燥。產率：24.8 克（91 毫莫耳），91%，純度約 90%（NMR）的硼酸，具有改變量之硼酸酐和硼酸。硼酸可以此形式使用而沒有進一步純化。

類似於實例 2 從對應溴化物獲得對應硼酸（實例 3 至 6）。

實例	溴化物	硼酸	產率
3			74.6%
4			78.3%
5			87.0%
6			88.5%

實例 7：9-（萘-2-基）-10-（苯并[a]蒽-4-基）-蒽的合成

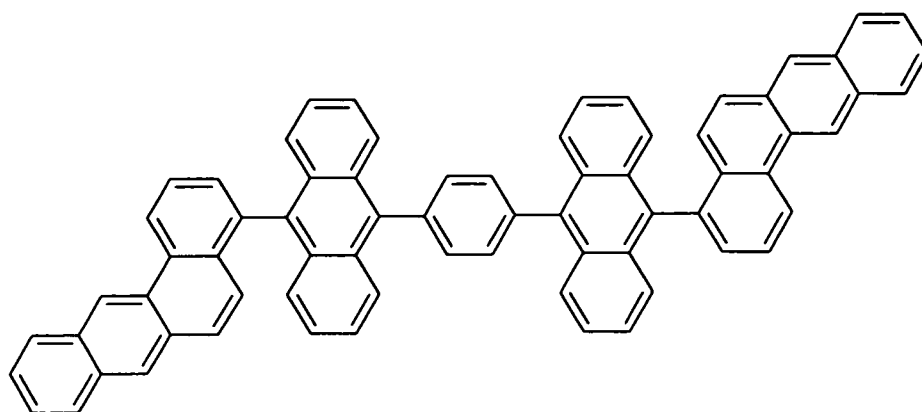


將 913 毫克 (3 毫莫耳) 的三 - 鄰 - 甲 苯 基 膦 和 然 後 112 毫克 (0.5 毫莫耳) 的 乙 酸 鈹 (II) 加 至 19.2 克 (50 毫莫耳) 的 9- 溴 -10- (2- 萘 基) 蒽 、 15.0 克 (55 毫莫耳) 的 苯 并 [a] 蒽 -4- 硼 酸 、 25.5 克 (120 毫莫耳) 的 磷 酸 三 鉀 在 300 毫 升 的 甲 苯 、 100 毫 升 的 二 噁 烷 和 400 毫 升 的 水 之 混 合 物 中 的 良 好 攪 拌 懸 浮 液 , 和 隨 後 在 回 流 下 加 熱 混 合 物 16 小 時 。 冷 卻 之 後 , 用 吸 濾 過 濾 沈 澱 之 固 體 , 用 50 毫 升 的 甲 苯 洗 滌 三 次 , 用 50 毫 升 的 乙 醇 : 水 (1 : 1 , 體 積 : 體 積) 洗 滌 三 次 和 用 100 毫 升 的 乙 醇 洗 滌 三 次 , 從 DMF (約 10 毫 升 / 克) 再 結 晶 三 次 和 隨 後 昇 華 二 次 ($p = 5 \times 10^{-5}$ 毫 巴 , $T = 330^{\circ}\text{C}$) 。 產 率 : 15.6 克 (29 毫莫耳) , 58.8% , 純 度 99.9% (HPLC) , $T_g = 168.9^{\circ}\text{C}$ 。

下 列 根 據 本 發 明 之 化 合 物 係 類 似 於 實 例 7 從 對 應 溴 化 物 和 硼 酸 獲 得 (實 例 8 至 13) 。

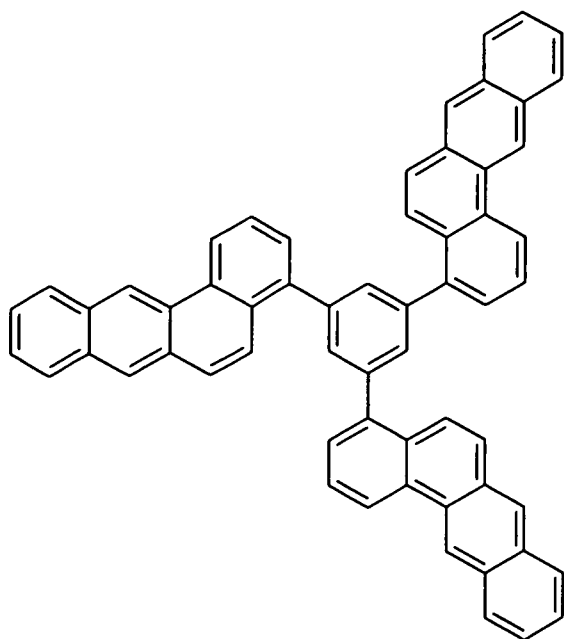
實例	硼酸	溴化物	產物	產率
8				61.3% $T_g = 147.9^{\circ}\text{C}$
9				64.9% $T_g = 161.4^{\circ}\text{C}$
10				55.7%
11				70.0% $T_g = 175.2^{\circ}\text{C}$
12				48.3%
13				59.6%

實例 14：1,4-雙（10-（苯并[a]蒽-4-基）蒽-10-基）苯的合成



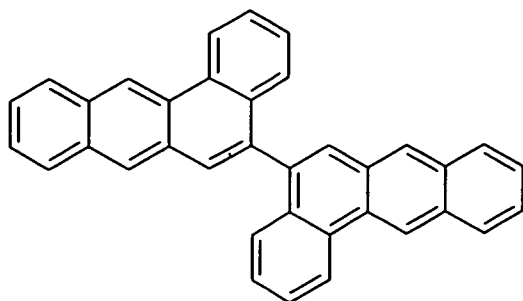
製備類似於實例 7。以 14.7 克（25 毫莫耳）的 1,4-雙（9-溴蒽-10-基）苯替代 19.2 克（50 毫莫耳）的 9-溴-10-（2-萘基）蒽。從 NMP（約 10 毫升/克）再結晶三次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 360^\circ\text{C}$ ）。產率：14.2 克（16 毫莫耳），64.3%，純度 99.9%（HPLC）。

實例 15：1,3,5-參（苯并[a]蒽-4-基）苯的合成



製備類似於實例 7。以 5.0 克（16 毫莫耳）的 1,3,5-三-溴苯替代 19.2 克（50 毫莫耳）的 9-溴-10-（2-萘基）蒽。從鄰-二氯苯（約 25 毫升/克）再結晶四次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 350^\circ\text{C}$ ）。產率：8.4 克（11 毫莫耳），69.3%，純度 99.9%（HPLC）。

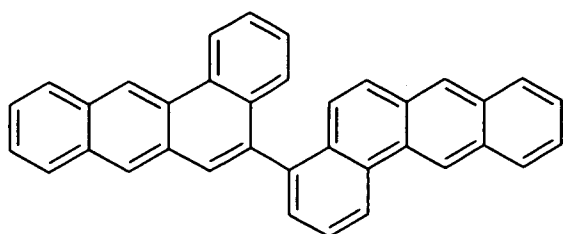
實例 16：5-（苯并[a]蒽-5-基）苯并[a]蒽的合成



製備類似於實例 7。以 15.4 克（50 毫莫耳）的 5-溴-苯并[a]蒽替代 19.2 克（50 毫莫耳）的 9-溴-10-（2-萘

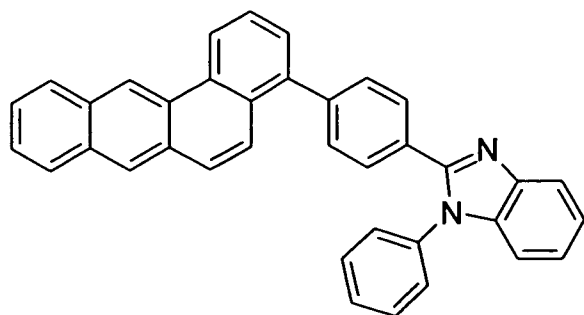
基) 蒽，和以苯并[a]蒽-5-硼酸替代苯并[a]蒽-4-硼酸。從鄰-二氯苯(約 15 毫升/克)再結晶四次；昇華($p=5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T=320^\circ\text{C}$)。產率：15.0 克(33 毫莫耳)，66.0%，純度 99.9% (HPLC)， $T_g=141.2^\circ\text{C}$ 。

實例 17：4-(苯并[a]蒽-5-基)苯并[a]蒽的合成



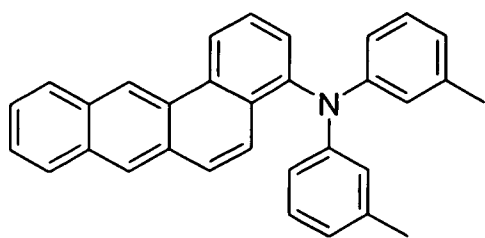
製備類似於實例 7。以 15.4 克(50 毫莫耳)的 5-溴-苯并[a]蒽替代 19.2 克(50 毫莫耳)的 9-溴-10-(2-萘基)蒽。從鄰-二氯苯(約 15 毫升/克)再結晶四次；昇華($p=5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T=310^\circ\text{C}$)。產率：16.4 克(36 毫莫耳)，72.1%，純度 99.9% (HPLC)。

實例 18：1-苯基-2-(4-苯并[a]蒽-4-基-苯基)苯并咪唑的合成



製備類似於實例 7。以 17.5 克 (50 毫莫耳) 的 1-苯基-2-(4-溴苯基) 苯并咪唑替代 19.2 克 (50 毫莫耳) 的 9-溴-10-(2-萘基) 蒽。在混合物已被冷卻之後，分離有機相，用 300 毫升的水洗滌三次，經過矽凝膠過濾和蒸發到乾。將玻璃狀殘餘物溶解在 50 毫升的沸氯仿中，和將 100 毫升的乙醇加至溶液中。靜置 12 小時之後，用吸濾過濾無色結晶和隨後在矽凝膠上用純二氯甲烷進行層析 ($R_f = 0.3$)。最後，再次從氯仿/乙醇再結晶產物。昇華 ($p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 310^\circ\text{C}$)。產率：15.5 克 (31 毫莫耳)，62.4%，純度 99.9% (HPLC)， $T_g = 110.9^\circ\text{C}$ 。

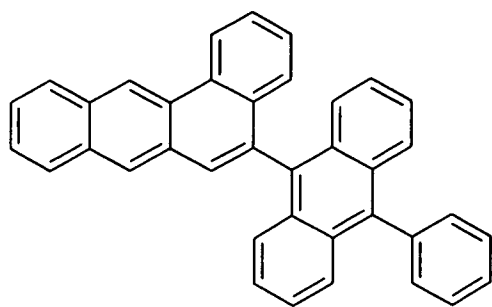
實例 19：4-(雙(3-甲基苯基)胺基) 苯并[a]-蒽的合成



將 190 微升 (1 毫莫耳) 的氯-二-三級-丁基磷和然後 112 毫克 (0.5 毫莫耳) 的乙酸鉍 (II) 加至 15.4 克 (50 毫莫耳) 的 4-溴苯并[a]蒽、11.8 克 (60 毫莫耳) 的雙(3-甲基苯基)胺和 7.7 克 (80 毫莫耳) 的三級-丁醇鈉在 500 毫升的甲苯中之懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 5 小時。混合物已冷卻至 60°C 之後，加 500 毫升的水，

分離有機相，經過矽凝膠過濾，在真空中於 80℃ 下事實上蒸發到乾和然後加 300 毫升的乙醇。冷卻之後，用吸濾過濾固體。從二噁烷（約 8 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 280^\circ\text{C}$ ）。產率：11.9 克（28 毫莫耳），56.1%，純度 99.9%（HPLC）。

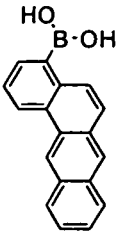
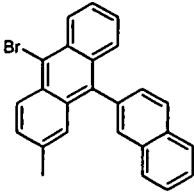
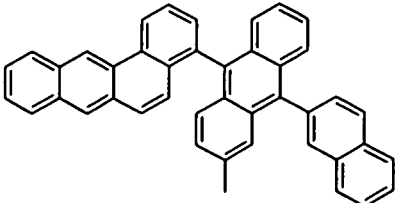
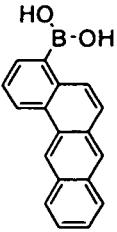
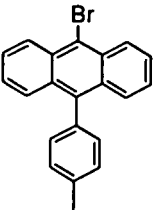
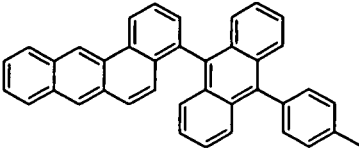
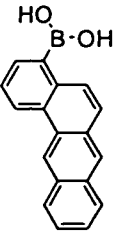
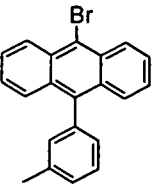
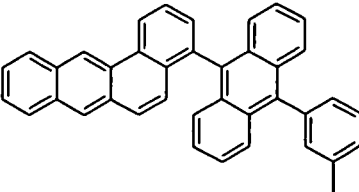
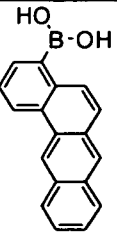
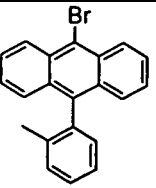
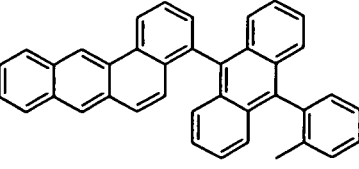
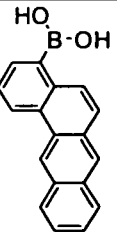
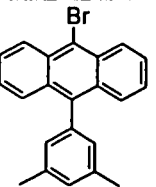
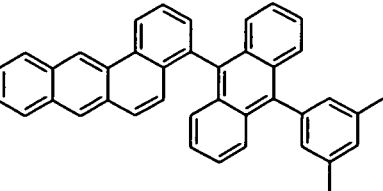
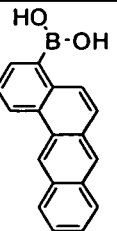
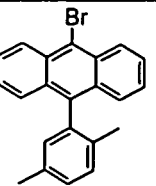
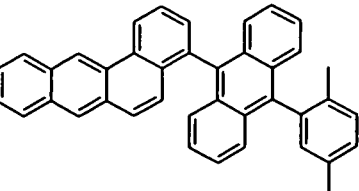
實例 20：9-（苯基）-10-（苯并[a]蒽-5-基）-蒽的合成



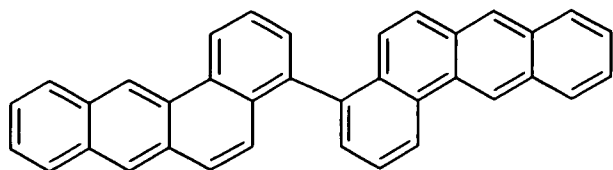
將 913 毫克（3 毫莫耳）的三-鄰-甲基磷和然後 112 毫克（0.5 毫莫耳）的乙酸鈮（II）加至 16.7 克（50 毫莫耳）的 9-溴-10-（苯基）蒽、15.0 克（55 毫莫耳）的苯并-[a]蒽-5-硼酸、25.5 克（120 毫莫耳）的磷酸三鉀在 300 毫升的甲苯、100 毫升的二噁烷和 400 毫升的水之混合物中的良好攪拌懸浮液，及隨後在回流下加熱混合物 16 小時。混合物已冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水（1：1，體積：體積）洗滌三次和用 100 毫升的乙醇洗滌三次，從 DMF（約 7 毫升/克）再結晶三次和隨後昇華二次（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 320^\circ\text{C}$ ）。產率：16.3 克（34 毫莫耳），

67.8%，純度 99.9%（HPLC）， $T_g = 150.0^{\circ}\text{C}$ 。

下列根據本發明之化合物係類似於實例 20 從對應溴化物和硼酸獲得（實例 21 至 26）。

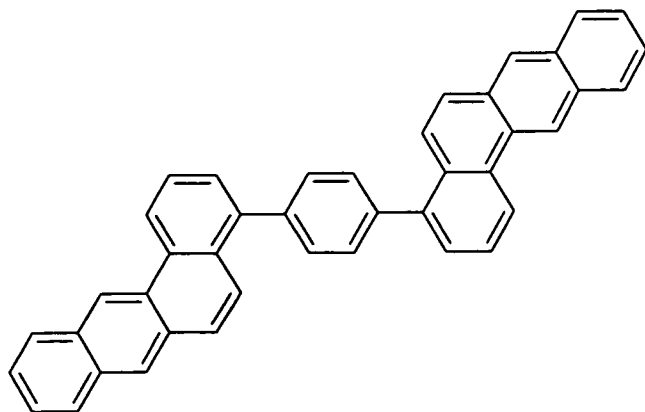
實例	硼酸	溴化物	產物	產率
21				51.0%
22				66.0%
23				59.5%
24				38.5%
25				63.2%
26				70.7%

實例 27：4-（苯并[a]蒽-4-基）苯并[a]蒽的合成



製備類似於實例 7。以 15.4 克（50 毫莫耳）的 4-溴苯并[a]蒽替代 9-溴-10-（2-萘基）蒽。從鄰-二氯苯（約 15 毫升/克）再結晶四次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 320^\circ\text{C}$ ）。產率：16.8 克（37 毫莫耳），74.0%，純度 99.9%（HPLC）， $T_g = 130.3^\circ\text{C}$ 。

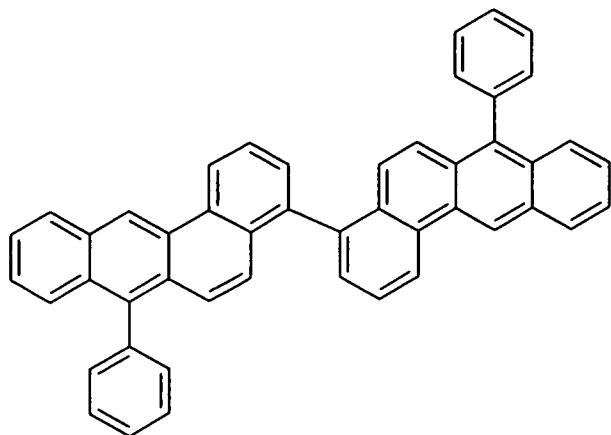
實例 28：1,4-雙（苯并[a]蒽-4-基）苯的合成



製備類似於實例 7。以 4.1 克（25 毫莫耳）的苯-1,4-二硼酸替代 9-溴-10-（2-萘基）蒽。從鄰-二氯苯（約 20 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 400^\circ\text{C}$ ）。產率：11.1 克（21 毫莫耳），84.0%，純度 99.9%

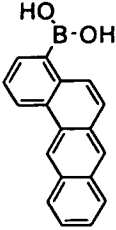
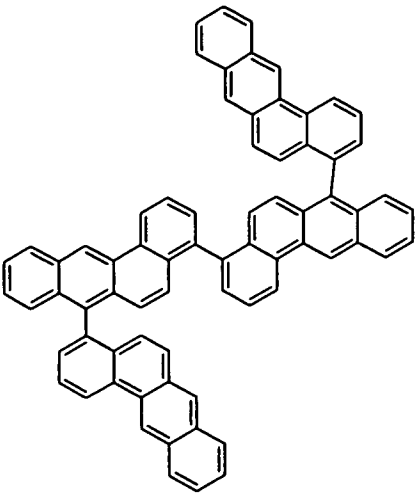
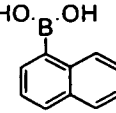
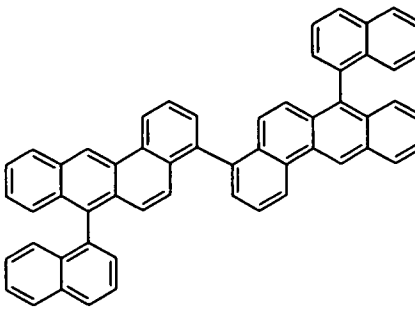
(HPLC) 。

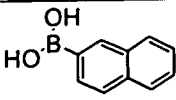
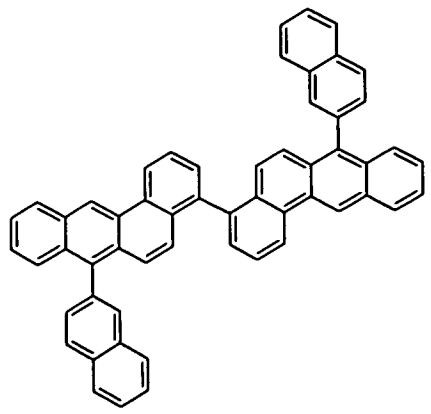
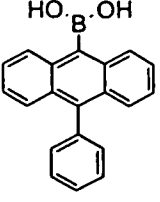
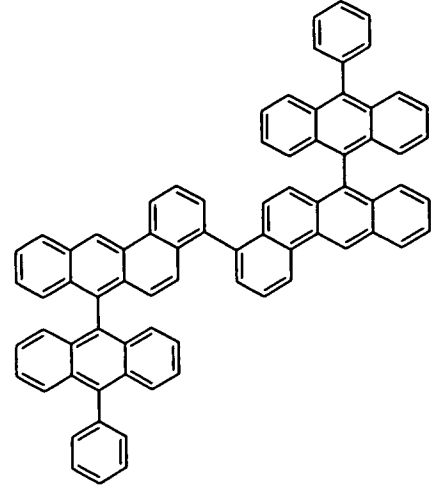
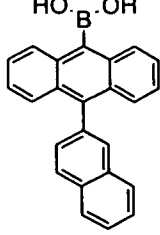
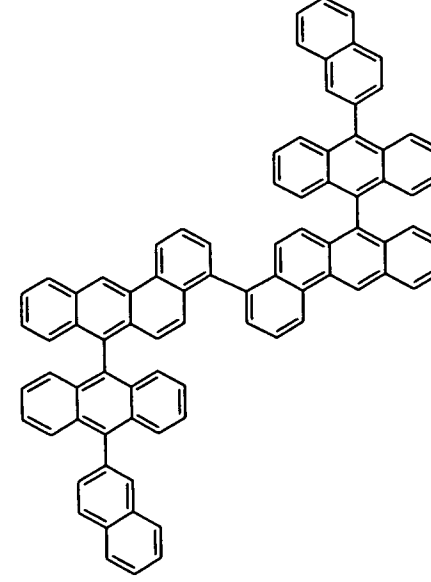
實例 29：4- (7-苯基苯并 [a] 蒽 -4-基) -7-苯基 - 苯并 [a] 蒽
的合成



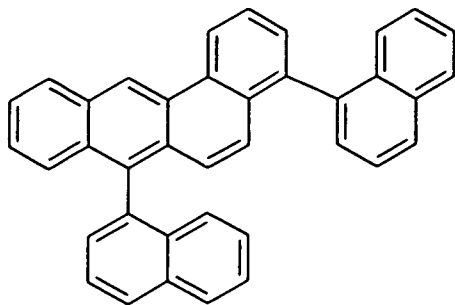
在 100℃ 下以一整部分將 19.6 克 (110 毫莫耳) 的 N-
溴琥珀醯亞胺加至 22.7 克 (50 毫莫耳) 的 4- (苯并 [a]
蒽 -4-基) 苯并 [a] 蒽在 1000 毫升的 DMF 中之懸浮液並激
烈攪拌。將懸浮液保持在 100℃ 下另 30 分鐘和冷卻，及然
後加入 1000 毫升的乙醇。用吸濾過濾沈澱之固體，每次
用 100 毫升的乙醇洗滌三次和在真空中乾燥。所得固體類
似於實例 7 與 15.9 克 (130 毫莫耳) 的苯硼酸反應。從
DMF (約 6 毫升 / 克) 再結晶五次；昇華 ($p = 5 \times 10^{-5}$ 毫
巴， $T = 360^\circ\text{C}$)。產率：21.8 克 (36 毫莫耳)，72.0%，
純度 99.9% (HPLC)， $T_g = 181.4^\circ\text{C}$ 。

下列根據本發明之化合物係類似於實例 29 從對應硼
酸獲得 (實例 30 至 34)。

實例	硼酸	產物	產率
30			39.0%
31			61.1%

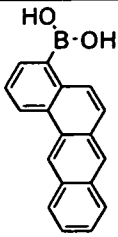
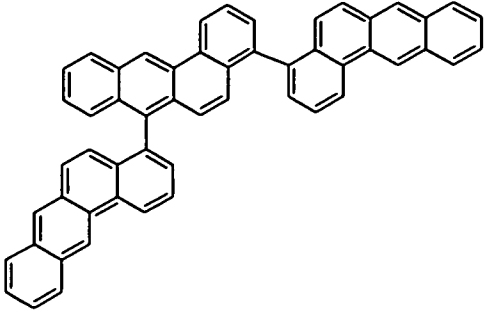
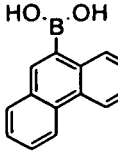
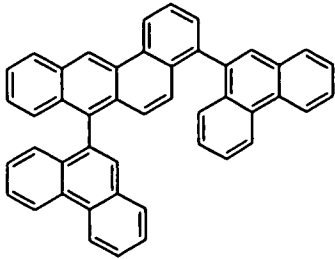
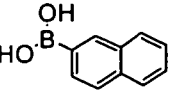
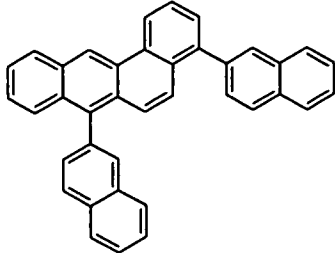
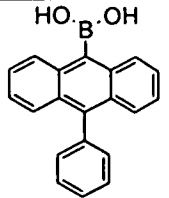
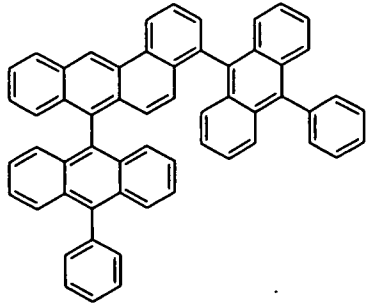
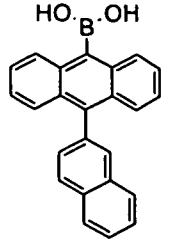
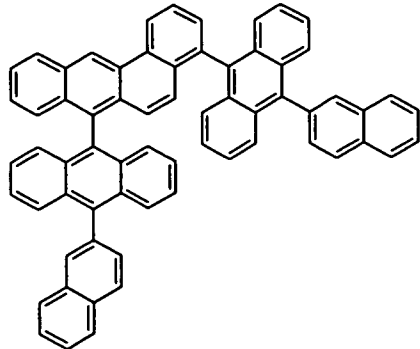
32			55.6%
33			21.3%
34			19.8%

實例 35：4,7-雙（萘-1-基）苯并[a]蒽的合成

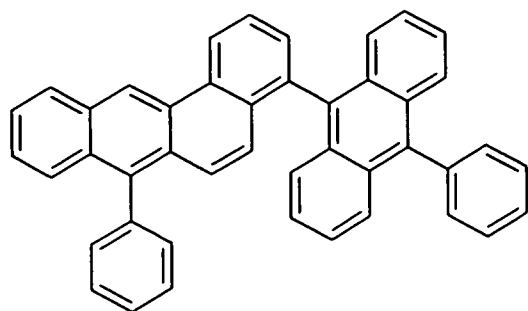


在 100℃ 下以一整部分將 19.6 克（110 毫莫耳）的 N-溴琥珀醯亞胺加至 15.4 克（50 毫莫耳）的 4-溴苯并[a]蒽在 300 毫升的 DMF 中之懸浮液並激烈攪拌。將懸浮液保持在 100℃ 下另 30 分鐘和冷卻，和加入 1000 毫升之乙醇。用吸濾過濾沈澱之固體，每次用 100 毫升的乙醇洗滌三次和在真空中乾燥。所得固體類似於實例 7 與 22.4 克（130 毫莫耳）的 1-萘硼酸反應。從 DMF（約 4 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 355^\circ\text{C}$ ）。產率：12.5 克（26 毫莫耳），52.0%，純度 99.9%（HPLC）， $T_g = 137.1^\circ\text{C}$ 。

下列根據本發明之化合物係類似於實例 35 從對應硼酸獲得（實例 36 至 40）。

實例	硼酸	產物	產率
36			44.4%
37			71.6%
38			53.6%
39			50.2%
40			57.5%

實例 41：9-（苯基）-10-（7-苯基苯并[a]蒽-4-基）蒽的合成



將 913 毫克（3 毫莫耳）的三-鄰-甲基磷和然後 112 毫克（0.5 毫莫耳）的乙酸鈮（II）加至 12.9 克（50 毫莫耳）的 9-溴蒽、15.0 克（55 毫莫耳）的苯并[a]蒽-4-硼酸、25.5 克（120 毫莫耳）的磷酸三鉀在 300 毫升的甲苯、100 毫升的二噁烷和 400 毫升的水中之混合物的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇-水（1：1，體積：體積）洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。

在 100℃ 下以一整部分將 16.9 克（95 毫莫耳）的 N-溴琥珀醯亞胺加至 18.2 克（45 毫莫耳）的所得 9-苯并[a]-蒽-4-基蒽在 500 毫升的 DMF 中之懸浮液。在 3 小時之後，在室溫下加入 500 毫升的乙醇，和用吸濾過濾固體，用乙醇洗滌和乾燥。

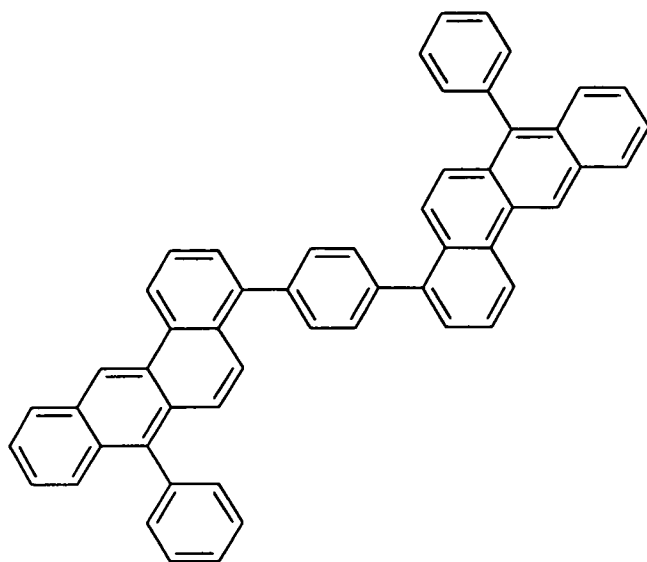
將 913 毫克（3 毫莫耳）的三-鄰-甲基磷和然後 112 毫克（0.5 毫莫耳）的乙酸鈮（II）加至 22.5 克（40 毫莫

耳) 的所得 9-溴-10-(7-溴苯并[a]蒽-4-基)-蒽、12.2 克 (100 毫莫耳) 的苯甲酸、25.5 克 (120 毫莫耳) 的磷酸三鉀在 300 毫升的甲苯、100 毫升的二噁烷和 400 毫升的水之混合物中的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水 (1：1，體積：體積) 洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。從 DMF (約 3 毫升/克) 再結晶五次；昇華 ($p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 350^\circ\text{C}$)。產率：12.6 克 (23 毫莫耳)，46.0%，純度 99.9% (HPLC)， $T_g = 171.8^\circ\text{C}$ 。

下列根據本發明之化合物係類似於實例 41 從對應硼酸獲得 (實例 42 至 46)。

實例	硼酸	產物	產率
42			68.5%
43			71.0%
44			56.4%
45			35.2%
46			47.1%

實例 48：1,4-雙（7-苯基（苯并[a]蒽-4-基））-苯的合成

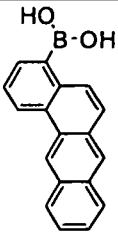
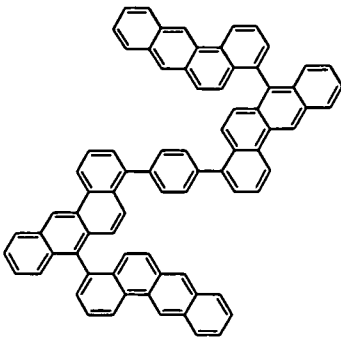
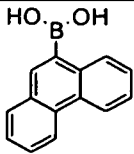
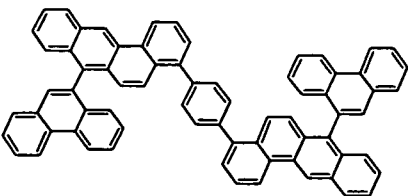
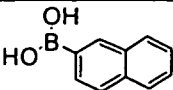
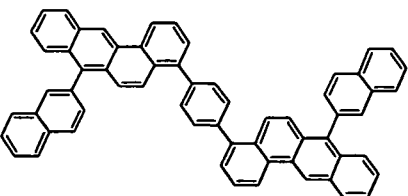
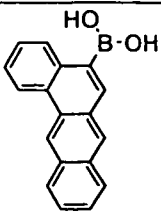
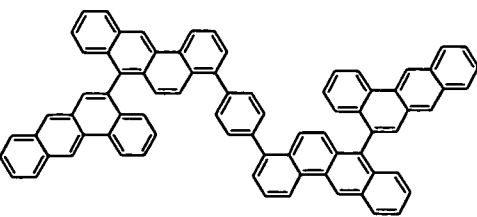
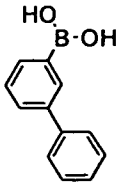
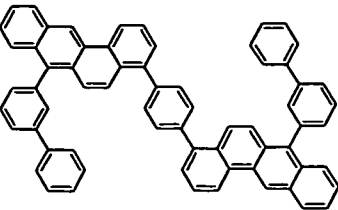


將 26.5 克（50 毫莫耳）的 1,4-雙（苯并[a]蒽-4-基）苯和 19.6 克（110 毫莫耳）的 N-溴琥珀醯亞胺在 500 毫升的鄰-二-氯苯中的懸浮液慢慢地加熱至沸騰並激烈攪拌。為隨後在回流下煮沸混合物 2 小時且使冷卻，和用吸濾過濾沈澱物，每次用 100 毫升的乙醇洗滌三次和在真空中乾燥。

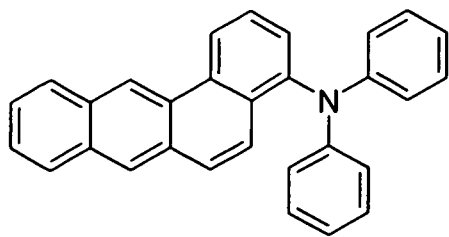
將 913 毫克（3 毫莫耳）的三-鄰-甲苯基磷和然後 112 毫克（0.5 毫莫耳）的乙酸鈮（II）加至 21.2 克（40 毫莫耳）的所得 1,4-雙（7-溴（苯并[a]蒽-4-基））苯、12.2 克（100 毫莫耳）的苯硼酸、25.5 克（120 毫莫耳）的磷酸三鉀在 300 毫升的甲苯、100 毫升的二噁烷和 400 毫升的水之混合物中的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水（1：1，

體積：體積）洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。從鄰-二氯苯（約 7 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 400^{\circ}\text{C}$ ）。產率：16.4 克（24 毫莫耳），48.0%，純度 99.9%（HPLC）， $T_g = 176.7^{\circ}\text{C}$ 。

下列根據本發明之化合物係類似於實例 48 從對應硼酸獲得（實例 49 至 53）。

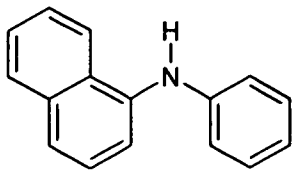
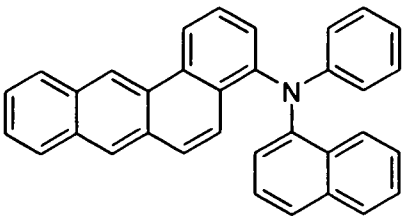
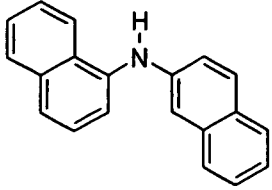
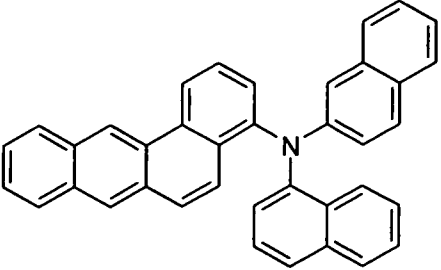
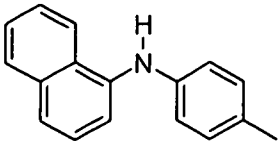
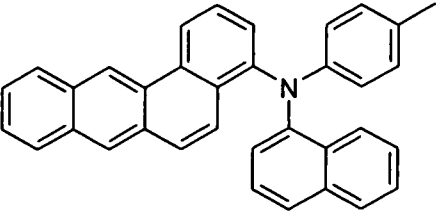
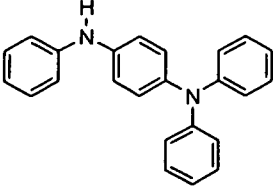
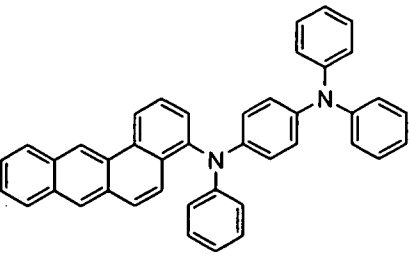
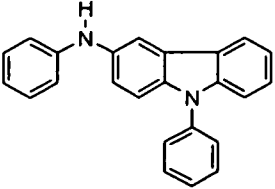
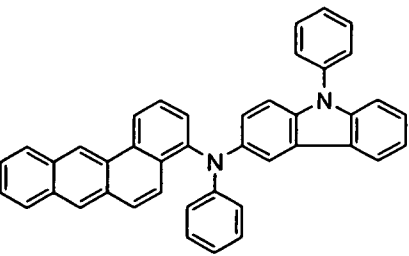
實例	硼酸	產物	產率
49			46.9%
50			46.4%
51			76.2%
52			65.8%
53			67.8%

實例 54：4-（二苯胺基）苯并[a]蔥的合成

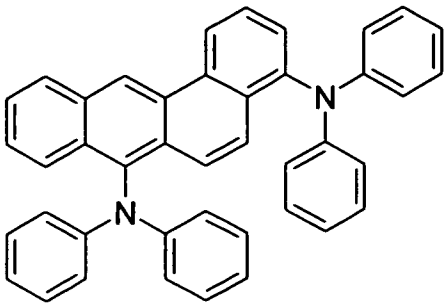


將 190 微升（1 毫莫耳）的氯二-三級-丁基膦和然後 112 毫克（0.5 毫莫耳）的乙酸鈮（II）加至 15.4 克（50 毫莫耳）的 4-溴苯并[a]蔥、10.2 克（60 毫莫耳）的二苯基-胺和 7.7 克（80 毫莫耳）的三級-丁醇鈉在 500 毫升的甲苯中之懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 5 小時。混合物已冷卻至 60℃ 之後，加入 500 毫升的水，分離有機相，經過矽凝膠過濾，在真空中於 80℃ 下事實上蒸發到乾，和然後加入 300 毫升的乙醇。冷卻之後，用吸濾過濾固體。從二噁烷（約 8 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 280^\circ\text{C}$ ）。產率：12.7 克（32 毫莫耳），64.1%，純度 99.9%（HPLC）， $T_g = 74.7^\circ\text{C}$ 。

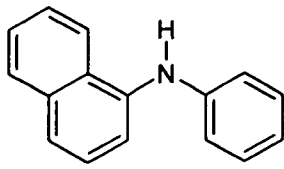
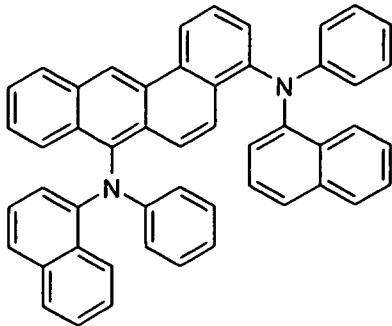
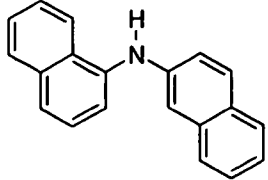
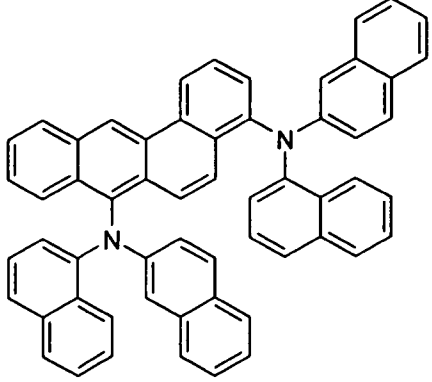
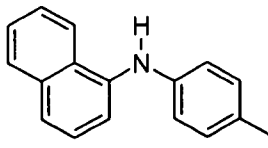
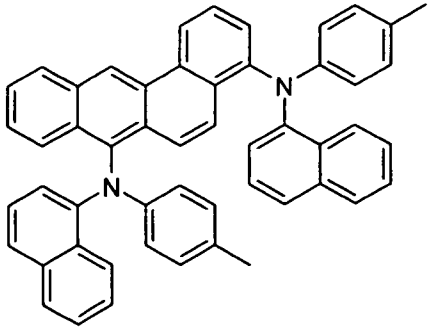
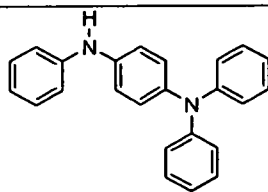
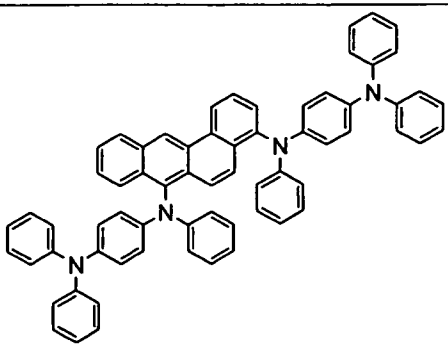
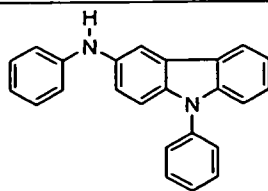
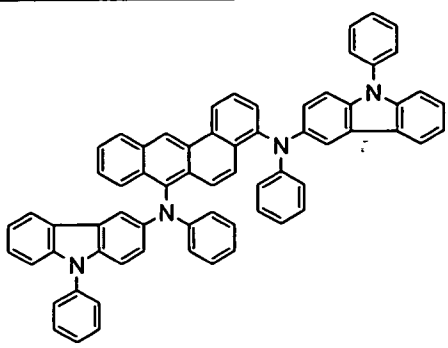
下列根據本發明之化合物係類似於實例 54 從對應硼酸獲得（實例 55 至 59）。

實例	胺	產物	產率
55			66.3%
56			44.0%
57			67.3%
58			62.1%
59			71.0%

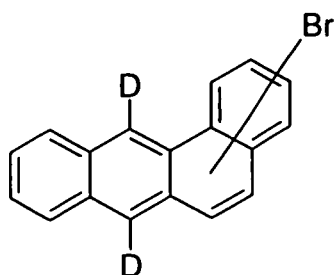
實例 60：4,7-雙（二苯胺基）苯并[a]蒽的合成



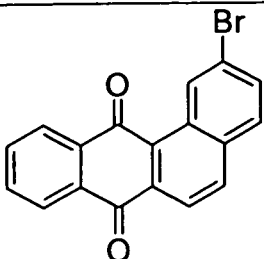
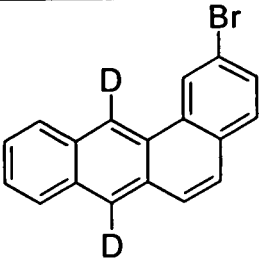
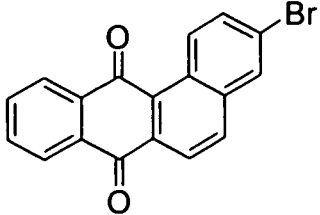
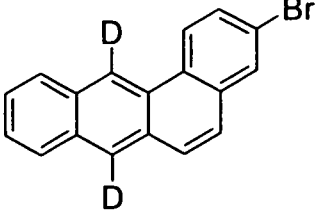
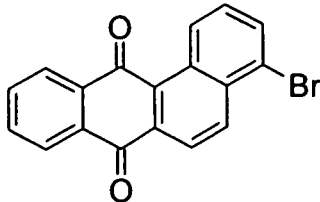
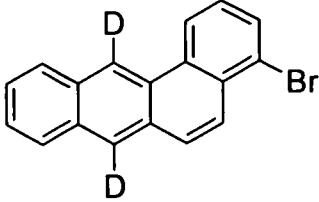
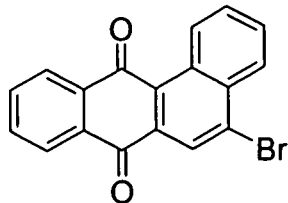
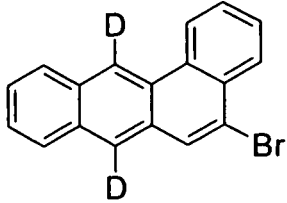
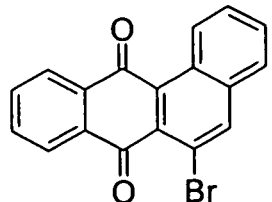
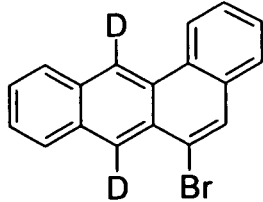
將 380 微升 (2 毫莫耳) 的 氯二 - 三級 - 丁基膦 和 然後 224 毫克 (1 毫莫耳) 的 乙酸鈮 (II) 加至 19.3 克 (50 毫莫耳) 的 4,7-二溴苯并[a]蔥 (製備如實例 35 中所述) , 20.4 克 (120 毫莫耳) 的 二苯胺 和 15.4 克 (160 毫莫耳) 的 三級 - 丁醇鈉 在 500 毫升的 甲苯 中之懸浮液 , 和隨後在回流下加熱混合物 5 小時。混合物已冷卻至 60℃ 之後 , 加 500 毫升的水 , 分離有機相 , 經過矽凝膠過濾 , 在真空中於 80℃ 下事實上蒸發到乾 , 和然後加 300 毫升的乙醇。冷卻之後 , 用吸濾過濾固體。從二噁烷 (約 8 毫升 / 克) 再結晶五次 ; 昇華 ($p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴 , $T = 300^{\circ}\text{C}$) 。產率 : 16.9 克 (30 毫莫耳) , 60.2% , 純度 99.9% (HPLC) , $T_g = 134.9^{\circ}\text{C}$ 。

實例	胺	產物	產率
61			37.8%
62			42.0%
63			33.9%
64			72.8%
65			61.3%

實例 66：2-、3-、4-、5-和 6-溴-7,12-二氘-苯并[a]蔥的合成

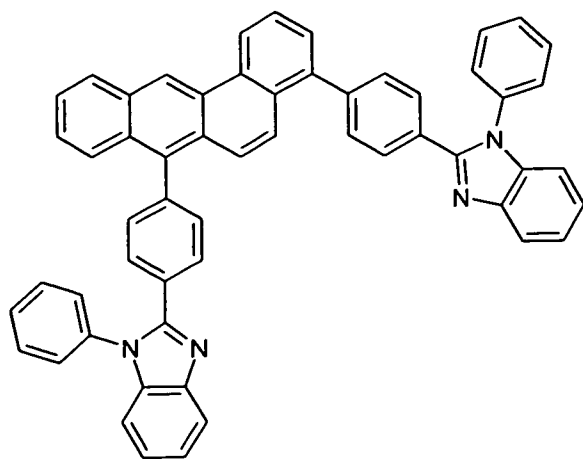


在回流下將 1.7 克（5 毫莫耳）的對應 2-、3-、4-、5-或 6-溴苯并[a]蔥醌（2-溴、3-溴：參見 J. Org. Chem. 1983, 48(17), 2926；4-溴：參見 J. Org. Chem. 1987, 52(26), 5668；5-溴：參見 Bull. Chem. Soc. Jpn. 1976, 49(12), 3713）在 4 毫升的在 D_2O 中之 50% D_3PO_2 、8 毫升的在 D_2O 中之 57% DI 和 18 毫升的 CD_3COOD 之混合物中的懸浮液加熱 15 小時。冷卻之後，用吸濾過濾掉固體，用水良好洗滌，用 50 毫升的沸 EtOH 洗滌一次和最後乾燥。氘化度，根據起始原料 D_3PO_2 、DI 和 CD_3COOD 之氘化度，為 > 99%。

實例	苯醌	產物	產率
67			94.5%
68			88.6%
69			89.1%
70			14.3%
71			67.5%

所得 2-、3-、4-、5-和 6-溴 -7,12-二氘苯并[a]蒽類可類似於實例 1 至 60 轉化成根據本發明之 7-及/或 12-氘化合物 1 至 60。

實例 72：4,7-雙（4-苯基-1H-苯并咪唑基）-苯并[a]蒽的合成

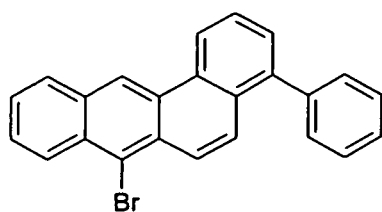


913 毫克 (3 毫莫耳) 的三 - 鄰 - 甲苯基膦和然後將 112 毫克 (0.5 毫莫耳) 的乙酸鈮 (II) 加至 11 克 (31.5 毫莫耳) 的 1- 苯基 -2- (4- 溴苯基) 苯并咪唑、 4.4 克 (14 毫莫耳) 的苯并 [a] 蒽 -4,7- 二硼酸和 13 克 (65 毫莫耳) 的磷酸三鉀在 300 毫升的甲苯、 100 毫升的二噁烷和 400 毫升的水中之混合物的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇 / 水 (1 : 1，體積 : 體積) 洗滌三次和用 100 毫升的乙醇洗滌三次，從 DMF (約 10 毫升 / 克) 再結晶三次和隨後昇華二次 ($p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 308^{\circ}\text{C}$)。產率： 17.5 克 (23 毫莫耳)，41%，純度 99.9% (HPLC)， $T_g = 111.4^{\circ}\text{C}$ 。

實例 73：4- 苯基 -7- (4- 苯基 -1H- 苯并咪唑基) - 苯并 [a] 蒽的合成

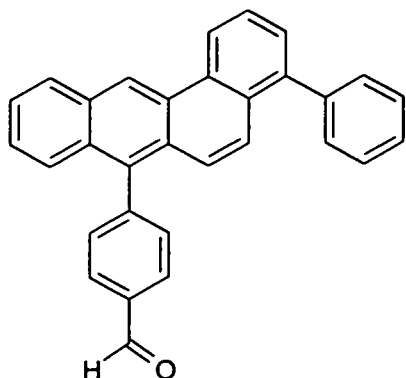
a) 4- 苯基 苯并 [a] 蒽

b) 7-溴-4-苯基苯并[a]蒽



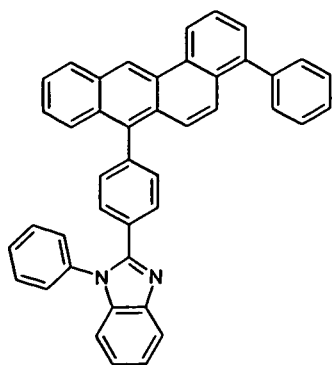
- 108 -

c) 4-(4-苯基苯并[a]蒽-7-基)苯甲醛



913 毫克 (3 毫莫耳) 的三-鄰-甲苯基磷和然後將 112 毫克 (0.5 毫莫耳) 的乙酸鈮 (II) 加至 15.3 克 (40 毫莫耳) 的 7-溴-4-苯基苯并[a]蒽、7.5 克 (50 毫莫耳) 的 4-甲醯基苯基硼酸和 25.5 克 (120 毫莫耳) 的磷酸三鉀在 300 毫升的甲苯、100 毫升的二噁烷和 400 毫升的水之混合物中的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水 (1:1, 體積：體積) 洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。從 DMF 再結晶。產率：14.3 克 (35 毫莫耳)，88%。

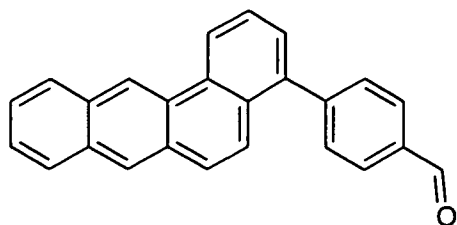
d) 7-(4-苯基-1H-苯并咪唑基)-4-苯基苯并[a]蒽



在已藉由加熱徹底地乾燥之燒瓶中，將 18 克（45 毫莫耳）的 4-（4-苯基苯并[a]蔥-7-基）苯甲醛和 15.3 克（81 毫莫耳）的 N-苯基-鄰-苯二胺溶解在 900 毫升的 DMF 中，逐滴加入 104 克（169 毫莫耳）的單過硫酸氫鉀，和隨後攪拌混合物另 1 小時且然後於 60℃ 下加熱 1 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的乙醇：水（1：1，體積：體積）洗滌三次和用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。從 DMF（約 4 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 320^\circ\text{C}$ ）。產率：6 克（11 毫莫耳），26%，純度 99.9%（HPLC）， $T_g = 130.4^\circ\text{C}$ 。

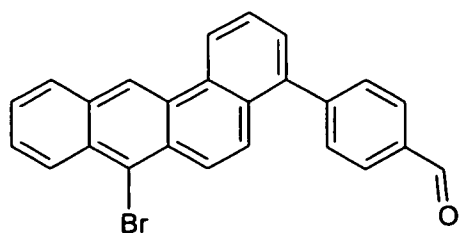
實例 74：7-蔡-1-基-4-（4-苯基-1H-苯并咪唑）苯并[a]蔥的合成

a) 4-苯并[a]蔥-4-基苯甲醛



將 2.4 克 (7.9 毫莫耳) 的三 - 鄰 - 甲苯基磷和然後 300 毫克 (1.3 毫莫耳) 的乙酸鈮 (II) 加至 50 克 (333 毫莫耳) 的 4-甲醯基苯基硼酸、81 克 (266 毫莫耳) 的 4-溴 - 苯并 [a] 蒽和 118 克 (558 毫莫耳) 的磷酸三鉀在 500 毫升的甲苯、500 毫升的二噁烷和 400 毫升的水中之混合物中的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水 (1：1，體積：體積) 洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。產率：49.7 克 (149 毫莫耳)，56%。

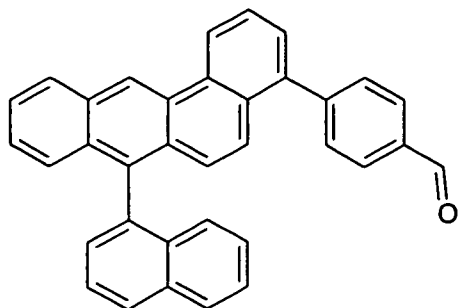
b) 4- (7-溴苯并 [a] 蒽 -4-基) 苯甲醛



在 100℃ 下將 29.4 克 (165 毫莫耳) 的 N-溴琥珀醯亞胺加至 49 克 (150 毫莫耳) 的 4-苯并 [a] 蒽 -4-基苯甲醛在 800 毫升的 DMF 中之懸浮液。在 3 小時之後，在室溫下加

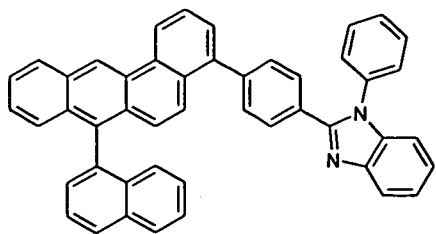
入 500 毫升的乙醇，和用吸濾過濾固體，用乙醇洗滌和乾燥。產率：49.3 克（119 毫莫耳），79%。

c) 4-(7-萘-1-基苯并[a]蒽-4-基)苯甲醛



將 850 毫克（2.8 毫莫耳）的三-鄰-甲基磷和然後 108 毫克（0.48 毫莫耳）的乙酸鈹（II）加至 49 克（115 毫莫耳）的萘基-1-硼酸、21 克（126 毫莫耳）的 4-(7-溴-苯并[a]蒽-4-基)苯甲醛、36.6 克（172 毫莫耳）的磷酸三鉀在 500 毫升的甲苯、500 毫升的二噁烷和 400 毫升的水之混合物中的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水（1：1，體積：體積）洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。產率：76 克（161 毫莫耳），54%。

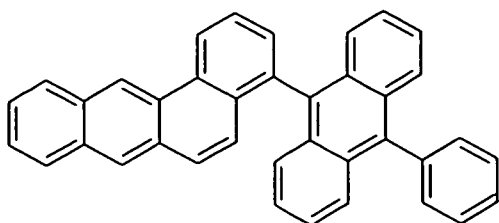
d) 7-萘-1-基-4-(4-苯基-1H-苯并咪唑)苯并[a]蒽



在已藉由加熱徹底地乾燥之燒瓶中，將 76 克（116 毫莫耳）的 4-（7-蔡-1-基苯并[a]蒽-4-基）苯甲醛和 112 克（598 毫莫耳）的 N-苯基-鄰-苯二胺溶解在 900 毫升的 DMF 中，逐滴加入 240 克（359 毫莫耳）的單過硫酸氫鉀，和隨後攪拌混合物另 1 小時且然後於 60℃ 下加熱 1 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的乙醇：水（1：1，體積：體積）洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。從 DMF（約 4 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 320^\circ\text{C}$ ）。產率：60 克（96 毫莫耳），83%，純度 99.9%（HPLC）， $T_g = 161.3^\circ\text{C}$ 。

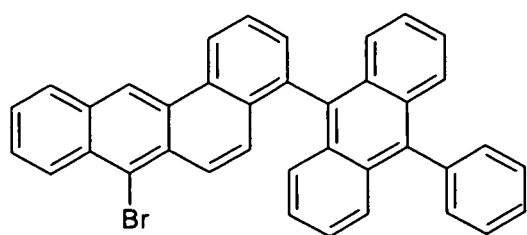
實例 75：7-（4-苯基-1H-苯并咪唑）-4-（9-苯基-蒽-10-基）苯并[a]蒽的合成

a) 4-（9-苯基蒽-10-基）苯并[a]蒽



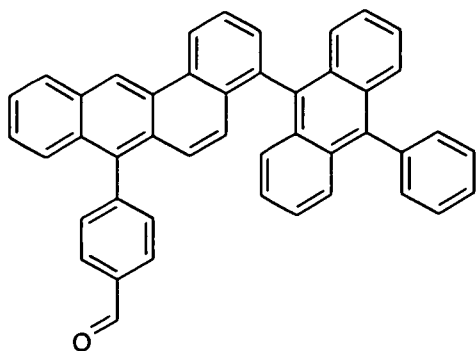
將 3 克 (9.8 毫莫耳) 的三 - 鄰 - 甲苯基膦和然後 391 毫克 (1.7 毫莫耳) 的乙酸鉍 (II) 加至 20 克 (60 毫莫耳) 的 9-溴 -10-苯基蒽、19.8 克 (73 毫莫耳) 的 4-溴 - 苯并 [a]-蒽和 19 克 (89 毫莫耳) 的磷酸三鉀在 250 毫升的甲苯、50 毫升的二噁烷和 250 毫升的水之混合物中的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水 (1：1，體積：體積) 洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。產率：34 克 (71 毫莫耳)，97%。

b) 7-溴 -4-(9-苯基蒽 -10-基) 苯并 [a]蒽



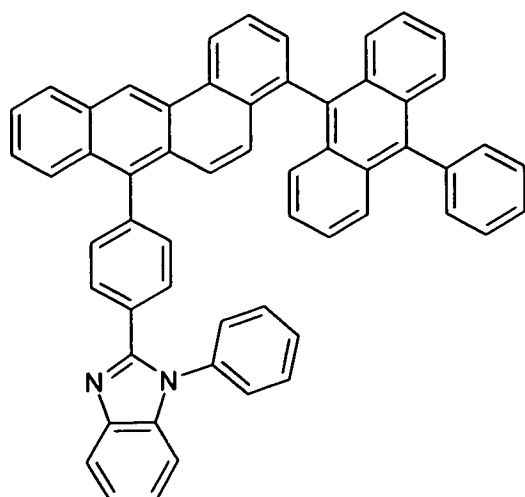
在 100℃ 下將 20 克 (116 毫莫耳) 的 N-溴琥珀醯亞胺加至 55 克 (116 毫莫耳) 的 4-(9-苯基蒽 -10-基) 苯并 [a]蒽在 500 毫升的 DMF 中之懸浮液。在 3 小時之後，在室溫下加入 500 毫升的乙醇，和用吸濾過濾固體，用乙醇洗滌和乾燥。產率：63 克 (113 毫莫耳)，65%。

c) 7-(對 - 苯甲醯) -4-(9-苯基蒽 -10-基) 苯并 [a]蒽



將 1.05 克 (3.6 毫莫耳) 的三 - 鄰 - 甲苯基膦和然後 130 毫克 (0.58 毫莫耳) 的乙酸鈮 (II) 加至 21 克 (145 毫莫耳) 的 4-甲醯基苯基硼酸、66 克 (119 毫莫耳) 的 7-溴 -4- (9-苯基蔥 -10-基) 苯并 [a]蔥和 49 克 (234 毫莫耳) 的磷酸三鉀在 500 毫升的甲苯、500 毫升的二噁烷和 400 毫升的水之混合物中的良好攪拌懸浮液，和隨後在回流下加熱混合物 16 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的甲苯洗滌三次，用 50 毫升的乙醇：水 (1：1，體積：體積) 洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。產率：44 克 (76 毫莫耳)，62%。

d) 7- (4-苯基 -1H-苯并咪唑) -4- (9-苯基蔥 -10-基) 苯并 [a]蔥



在已藉由加熱徹底地乾燥之燒瓶中，將 20 克（34.2 毫莫耳）的 7-（對-苯甲醛）-4-（9-苯基蔥-10-基）苯并[a]蔥和 23 克（123 毫莫耳）的 N-苯基-鄰-苯二胺溶解在 900 毫升的 DMF 中，逐滴加入 157.7 克（256 毫莫耳）的單過硫酸氫鉀，和隨後攪拌混合物另 1 小時和然後於 60℃ 下加熱 1 小時。冷卻之後，用吸濾過濾沈澱之固體，用 50 毫升的乙醇：水（1：1 體積：體積）洗滌三次，用 100 毫升的乙醇洗滌三次和最後乾燥。從 DMF（約 4 毫升/克）再結晶五次；昇華（ $p = 5 \times 10^{-5}$ 毫巴， $T = 320^\circ\text{C}$ ）。產率：10 克（13 毫莫耳），38%，純度 99.9%（HPLC）。

實例 76：OLED 之製備

OLED 係藉由 WO 04/058911 中所述之一般方法製備，其在各別情中適應特別環境（例如層-厚度變化以便達成最適效率或顏色）。

下述實例 21 至 34 顯示各種 OLED 之結果。塗佈結構 ITO（氧化銦錫）之玻璃板形成 OLED 之基材。為了改良

加工，將 20 奈米之 PEDOT（從水旋轉塗佈；購自 H.C. Starck，Goslar，德國；聚（3,4-伸乙基-二氧基-2,5-噻吩））施用至基材。OLED 由下列層順序所組成：基材/PEDOT/電洞傳輸層（HTM）40 奈米/發光層（EML）30 奈米/電子傳輸層（ETM）20 奈米和最後陰極。在真空室中熱蒸汽沉積除了 PEDOT 之外的材料。發光層在此總由基質材料（主體）和摻雜劑所組成，因此主體藉由共蒸發摻合。用具有 1 奈米厚度之 LiF 層和沈積在其上之 100 奈米 Al 層形成陰極。表 1 顯示用以構成 OLED 之材料的化學結構。

這些 OLED 以標準方法示性；為此目的，電發光光譜、效率（以 cd/A 測量），功率效率（以 lm/W 測量）為發光強度之函數，從電流/電壓/發光強度特性線（IUL 特性線）計算，和測定壽命。壽命定義為初發光強度已從 6000 cd/m^2 降至一半之後的時間。

表 2 顯示一些 OLED（實例 71 至 82）之結果。使用實例 7、8 和 11 之化合物作為根據本發明之主體材料。使用根據先前技藝之主體 H1 作為比較。

表 3 顯示包含得自實例 18 之化合物作為根據本發明之電子傳輸材料的 OLED（實例 83 和 84）之結果。作為比較，使用 AlQ_3 作為根據先前技藝之電子傳輸材料。

表 1

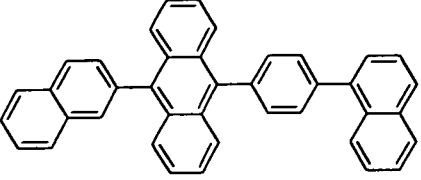
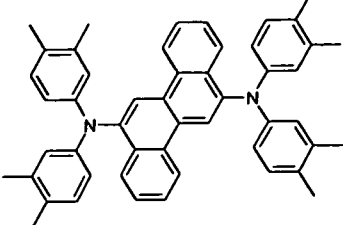
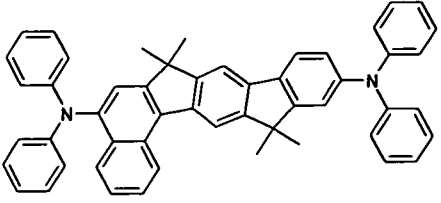
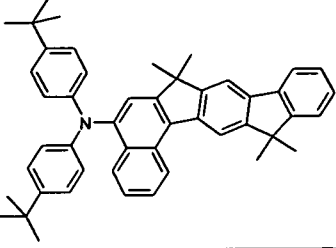
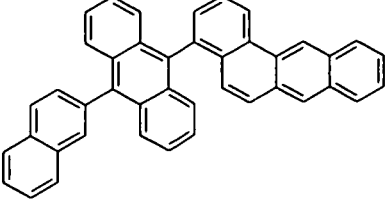
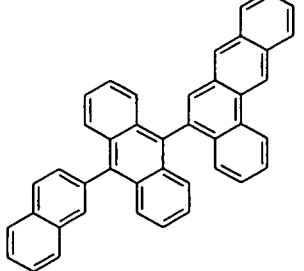
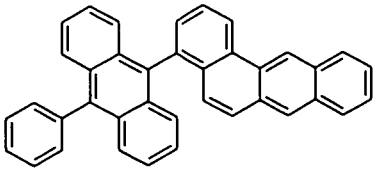
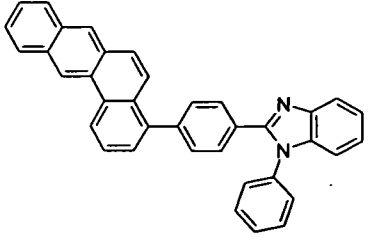
	
H1	D1
	
D2	D3
	
實例 7	實例 11
	
實例 8	實例 18

表 2

實例	EML	最大效率 (cd/A)	於 1000cd/m ² 之電壓(V)	CIE	於 6000cd/m ² 之壽命(h)
77(比較)	H1+5%之 D1	6.8	5.8	x=0.14/y=0.19	210
78(比較)	H1+5%之 D2	7.0	5.9	x=0.14/y=0.18	240
79(比較)	H1+5%之 D3	6.9	5.7	x=0.14/y=0.21	280
80	實例 7+5%之 D1	7.1	5.9	x=0.14/y=0.20	270
81	實例 7+5%之 D2	7.4	5.6	x=0.14/y=0.17	280
82	實例 7+5%之 D3	7.3	6.1	x=0.14/y=0.22	340
83	實例 11+5%之 D1	7.2	5.9	x=0.14/y=0.19	270
84	實例 11+5%之 D2	7.5	5.5	x=0.14/y=0.17	310
85	實例 11+5%之 D3	7.6	5.9	x=0.14/y=0.21	400
86	實例 8+5%之 D1	7.0	5.8	x=0.14/y=0.19	260
87	實例 8+5%之 D2	7.3	5.4	x=0.14/y=0.17	300
88	實例 8+5%之 D3	7.1	5.4	x=0.14/y=0.20	430

表 3

實例	EML	ETM	最大效率 (cd/A)	於 1000cd/m ² 之電壓(V)	CIE
89(比較)	實例 7+5%之 D2	AlQ ₃	7.4	5.6	x=0.14/y=0.17
90	實例 7+5%之 D2	實例 18	7.6	5.2	x=0.14/y=0.17

從上述所給予之實例顯而易知，包含根據本發明之化合物作為主體材料的根據本發明之有機電發光裝置具有比根據先前技藝之裝置高的效率和長的壽命。除此之外，如果根據本發明之材料用以代替 AlQ₃ 作為電子傳輸材料，如上述實例 84 中，裝置之效率可進一步改良和減少電壓。

實例 91：在改良層結構中之 OLED 的製備

各種 OLED 之結果呈現在下述實例 86 至 105 中。OLED 在此由下列層順序組成：基材/電洞注入層（HIL1）5 奈米/電洞傳輸層（HTM x）60 奈米/電洞傳輸層（HTM3）20 奈米/發光層（EML）40 奈米/電子傳輸層（ETM）20 奈米和最後陰極。如實例 70 中所指示處理材料。用具有 1 奈米厚度之 LiF 層和沈積在其上之 150 奈米 Al 層形成陰極。表 4 顯示用以構成 OLED 之材料的化學結構。

這些 OLED 以標準方法示性；為此目的，電發光光譜、效率（以 cd/A 測量），功率效率（以 lm/W 測量）為發光強度之函數，從電流/電壓/發光強度特性線（IUL 特性線）計算，和測定壽命。壽命定義為初發光強度已從 6000 cd/m^2 （在藍色之情形）或 $25,000 \text{ cd/m}^2$ （在綠色之情形）降至一半之後的時間。

表 5 至 7 顯示一些 OLED（實例 86 至 105）之結果。表 4 中所顯示之化合物係用作根據本發明之摻雜劑或主體材料或電子傳輸材料。根據先前技藝之摻雜劑 D1 和主體材料 H1 係使用於比較例中。

表 4

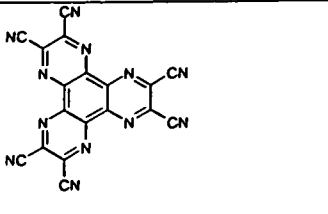
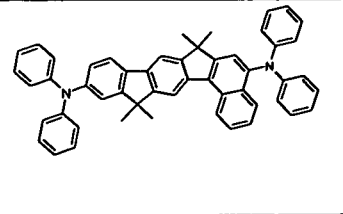
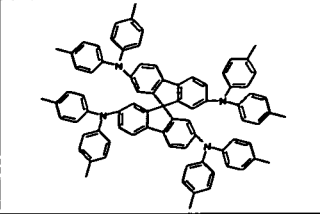
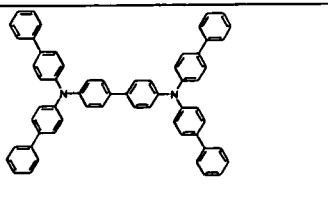
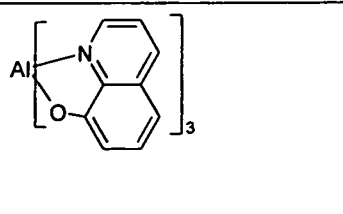
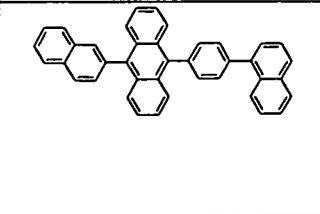
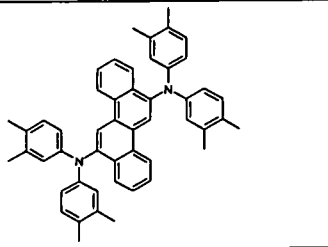
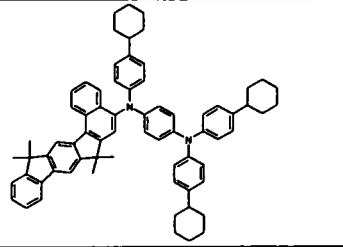
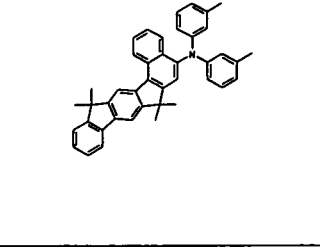
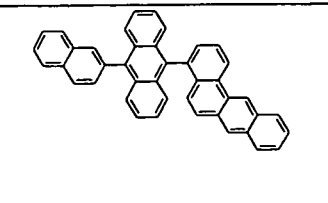
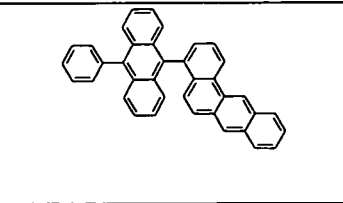
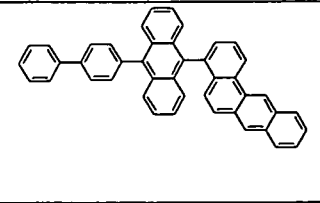
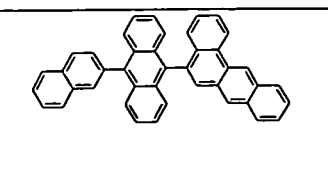
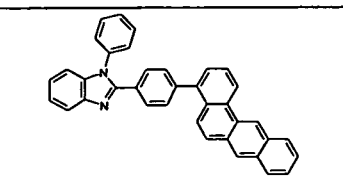
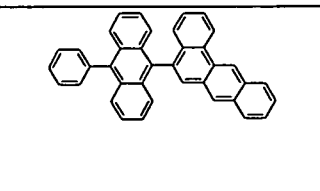
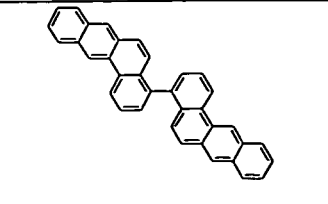
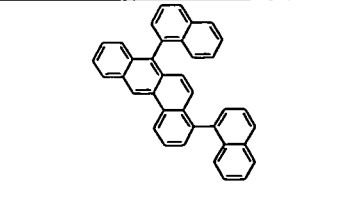
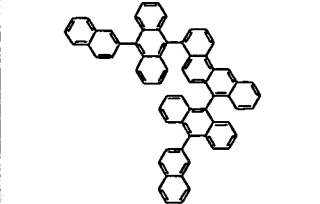
		
HIL1	HTM 1	HTM 2
		
HTM 3	ETM1	H1
		
D1	D2	D3
		
實例 7	實例 8	實例 9
		
實例 11	實例 18	實例 20
		
實例 27	實例 35	實例 41

表 5

實例	HTM	EML	ETM	顏色	最大效率 (cd/A)	於 1000cd/m ² 之電壓(V)	CIE	於 6000cd/m ² 之壽命(h)
92 (比較)	HTM2	H1+5%之 D1	ETM1	藍色	6.5	5.5	x=0.14/ y=0.18	450
93	HTM2	實例 7+5%之 D1	ETM1	藍色	6.9	5.6	x=0.14/ y=0.19	530
94	HTM2	實例 8+5%之 D1	ETM1	藍色	7.0	5.5	x=0.14/ y=0.20	580
95	HTM2	實例 20+5%之 D1	ETM1	藍色	7.2	5.6	x=0.14/ y=0.19	460
96	HTM2	實例 27+5%之 D1	ETM1	藍色	6.5	5.3	x=0.14/ y=0.18	430
97	HTM2	實例 8+5%之 D1	實例 18	藍色	8.5	5.1	x=0.14/ y=0.18	560
98	HTM2	實例 20+5%之 D1	實例 18	藍色	8.7	5.2	x=0.14/ y=0.17	580

表 6

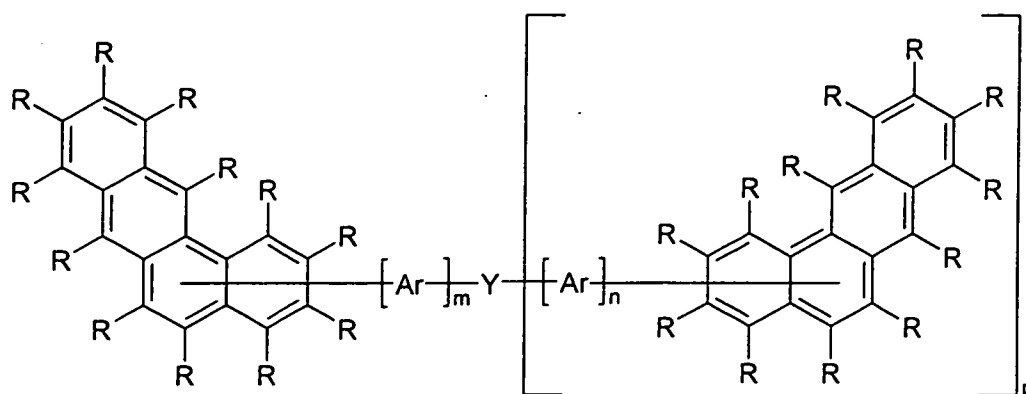
實例	HTM	EML	ETM	顏色	最大效率 (cd/A)	於 1000cd/m ² 之電壓(V)	CIE	於 25000cd/m ² 之壽命(h)
99 (比較)	HTM1	H2+5%之 D2	ETM1	綠色	18.5	5.1	x=0.29/ y=0.60	380
100	HTM1	H2+5%之 D2	實例 18	綠色	24.5	4.8	x=0.29/ y=0.62	430
101	HTM1	實例 8+5%之 D2	ETM1	綠色	21.5	5.0	X=0.29/ y=0.60	550
102	HTM1	實例 8+5%之 D2	實例 18	綠色	26.0	4.7	x=0.29/ y=0.63	540
103	HTM1	實例 8+5%之 D2	ETM1	綠色	21.5	5.0	x=0.29/ y=0.60	550
104	HTM1	實例 9+5%之 D2	ETM1	綠色	22.5	4.9	x=0.29/ y=0.60	530
105	HTM1	實例 11+5%之 D2	ETM1	綠色	23.0	4.8	x=0.29/ y=0.63	500

表 7

實例	HTM	EML	ETM	顏色	最大效率 (cd/A)	於 1000cd/m ² 之電壓(V)	CIE	於 6000cd/m ² 之壽命(h)
106 (比較)	HTM2	H1+5%之 D3	ETM1	藍色	4.5	5.8	x=0.14/ y=0.12	150
107	HTM2	實例 27+5%之 D3	ETM1	藍色	4.8	5.9	X=0.14/ y=0.11	110
108	HTM2	實例 35+5%之 D3	ETM1	藍色	4.9	5.8	x=0.14/ y=0.10	130
109	HTM2	實例 8+5%之 D3	實例 18	藍色	4.8	5.6	x=0.14/ y=0.12	230
110	HTM2	實例 8+5%之 D3	ETM1	藍色	4.5	5.8	x=0.14/ y=0.12	250
111	HTM2	實例 35+5%之 D3	ETM1	藍色	3.9	5.6	x=0.14/ y=0.09	90

十、申請專利範圍

1. 一種式 (1) 之不帶電化合物，



式 (1)

其中基團 Ar 或 Y 經由苯并[a]蔥的 2、3、4、5 或 6 位置之一鍵結且對應地沒有基團 R 在此位置鍵結，其中下列適用於該等符號和指標：

Ar 在每次發生時相同或不同地表示具有 5 至 40 個芳族環原子之二價芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個基團 R 取代；

Y 視指標 p 而定，為具有 5 至 40 個芳族環原子之單 -、二 -、三 -、四 -、五 - 或六價芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個基團 R 取代；或如果 $p = 0$ ，則 Y 為 $N(Ar^1)_2$ 、或 $P(=O)(Ar^1)_2$ 基團；或如果 $p = 1$ ，則 Y 為單鍵或 $C=O$ 、 O 、 S 、 SO 、 SO_2 、 NR^1 、 NAr^1 、 PAr^1 、 $P(=O)Ar^1$ 、 $P(=S)Ar^1$ 、 $O-B(Ar^1)-O$ 、 $O-BR^1-O$ 、 $-CR^1=CR^1-$ 、 $-C \equiv C-$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之伸烷基或亞烷基基團，其每個也可經一或更多個基團 R^1 取代，其中一或多個非相鄰 CH_2

基團可經 $R^1C=CR^1$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $Ge(R^1)_2$ 、 $Sn(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^1$ 、 $P(=O)(R^1)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^1 、 O 、 S 或 $CONR^1$ 替換和其中一或多個 H 原子可經 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替換；或，如果 $p=2$ ，則 Y 等於 B 、 B_3O_3 、 CR^1 、 CAr^1 、 N 、 P 、 $P=O$ 或 $P=S$ ；

R 在每次出現時相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CHO 、 $N(Ar^1)_2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(Ar^1)_2$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、 $S(=O)Ar^1$ 、 $S(=O)_2Ar^1$ 、 $CR^1=CR^1Ar^1$ 、 CN 、 NO_2 、 $Si(R^1)_3$ 、 $B(OAr^1)_2$ 、 $B(OR^1)_2$ 、 OSO_2R^1 、 OH 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基或硫烷氧基基團或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烷氧基基團或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷氧基基團，其每個可經一或更多個基團 R^1 取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $R^1C=CR^1$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $Ge(R^1)_2$ 、 $Sn(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^1$ 、 $P(=O)(R^1)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^1 、 O 、 S 或 $CONR^1$ 替換和其中一或多個 H 原子可經 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替換，或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個非-芳族基團 R 取代、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基或雜芳氧基基團，其可經一或多個非-芳族基團 R 取代、或這些系統之組合；二或多個相鄰取代基 R 在此也可彼此形成單-或多環脂族環系統；惟在式 (1) 苯并[a]蔥結構 12-位置之取代基 R 為氫；

Ar^1 在每次發生時相同或不同地為具有 5 至 30 個芳族

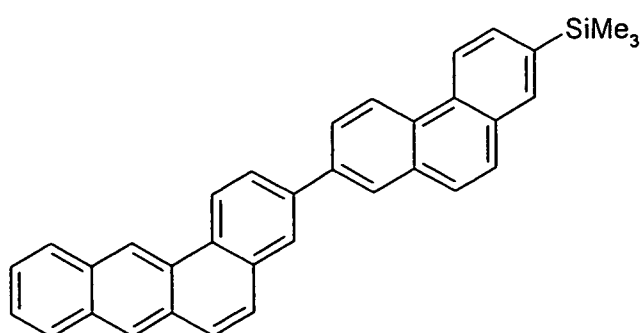
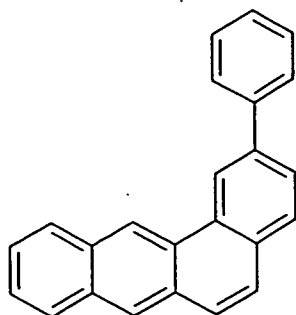
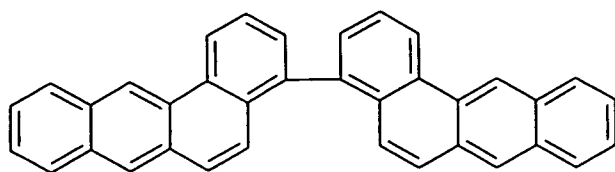
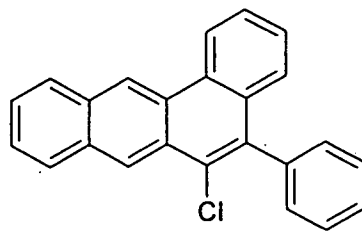
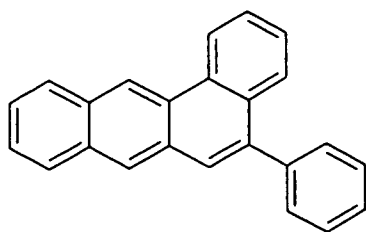
環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個非-芳族基團 R 取代；二個鍵結至相同氮或磷原子上之 Ar^1 基團也可以單鍵或選自 $B(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、 O 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^1)$ 、 $P(R^1)$ 和 $P(=O)R^1$ 之橋聯彼此連接；

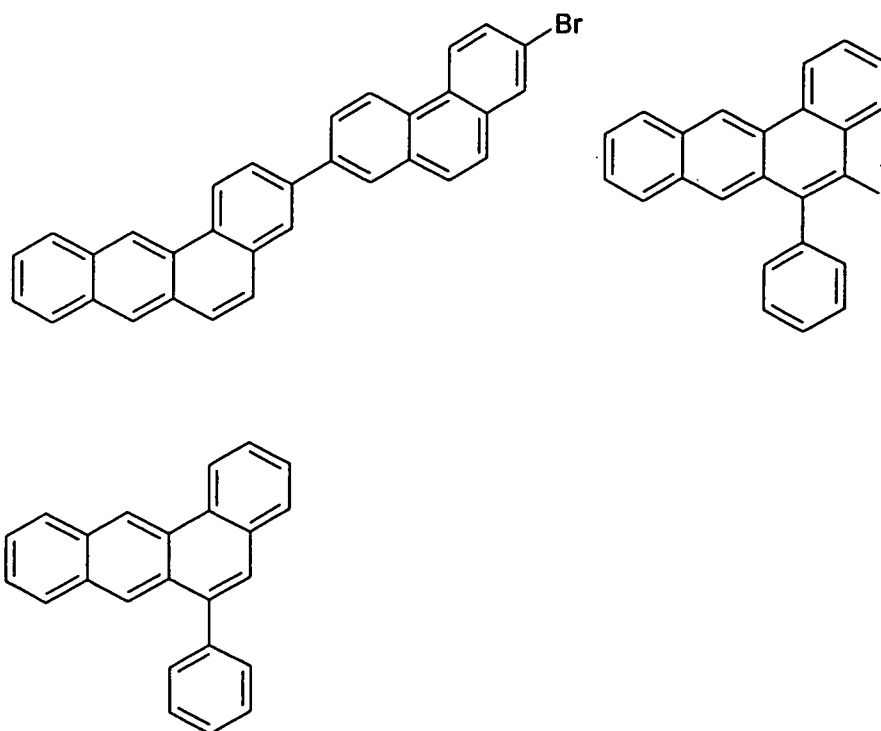
R^1 在每次發生時相同或不同地為 H 或具有 1 至 20 個碳原子之脂族、芳族及 / 或雜芳族烴基團，其中，除此之外，一或多個 H 原子可經 F 替換；二或多個相鄰取代基 R^1 在此也可彼此形成單-或多環脂族或芳族環系統；

m、n 在每次發生時相同或不同地為 0、1、2 或 3；

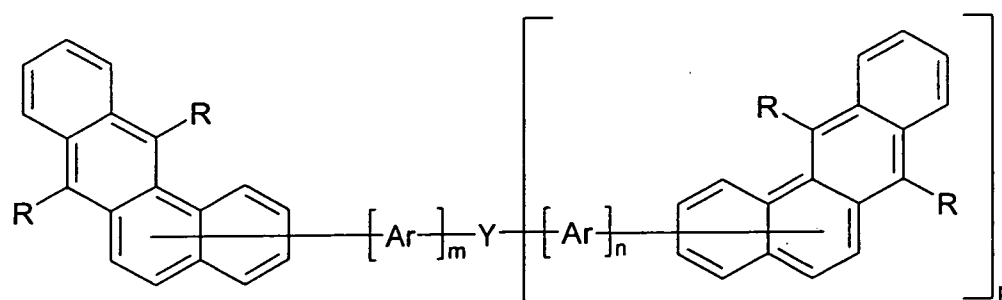
p 為 0、1、2、3、4 或 5；

下列化合物從本發明排除：





2. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其係為式
(2)

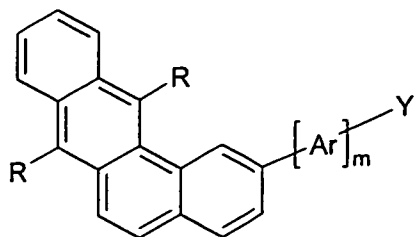


式 (2)

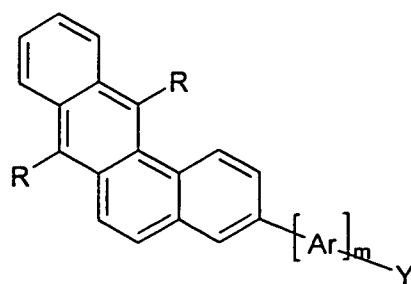
其中基團 Ar 或 Y 經由苯并[a]蔥的 2、3、4、5 或 6 位置之一鍵結且其中的符號和指標具有如申請專利範圍第 1 項中所述之相同意義；以及如申請專利範圍第 1 項中所述在式 (1) 苯并[a]蔥結構 12-位置之取代基 R 為氫。

3. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其係選自式

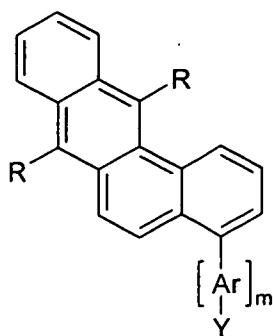
(3) 至 (24) :



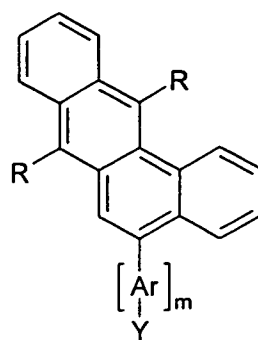
式 (3)



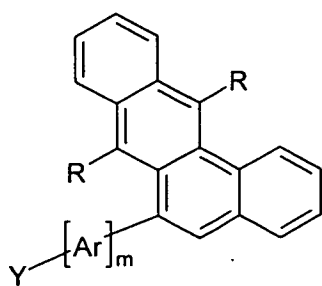
式 (4)



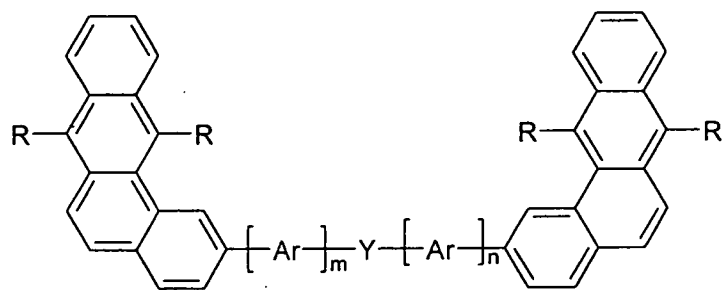
式 (5)



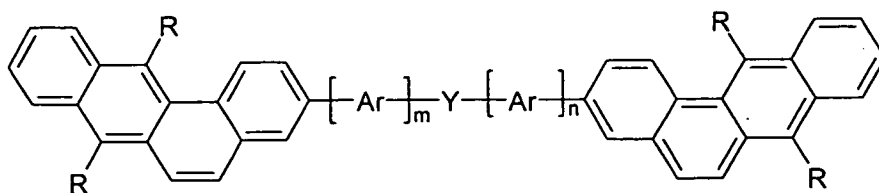
式 (6)



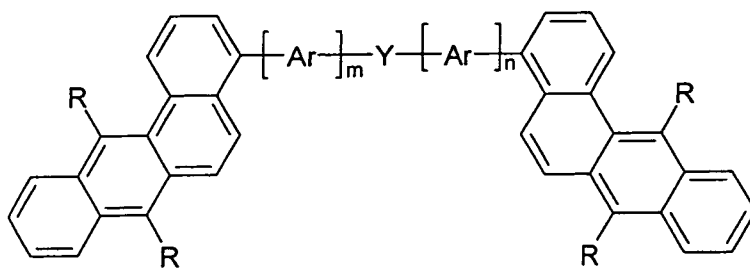
式 (7)



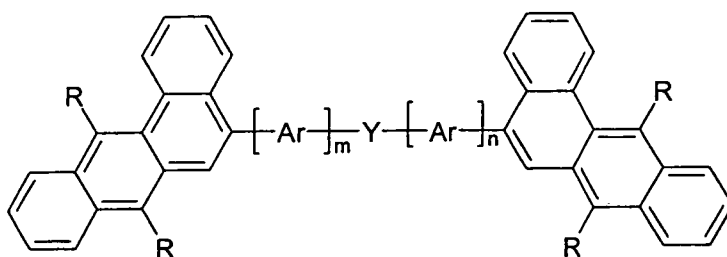
式 (8)



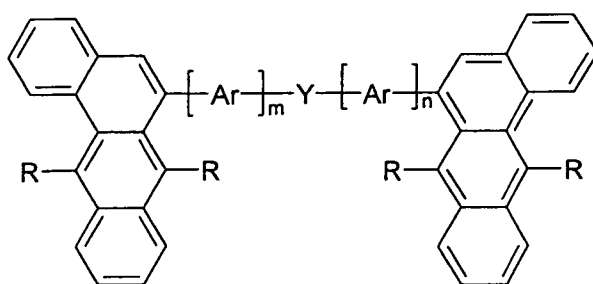
式 (9)



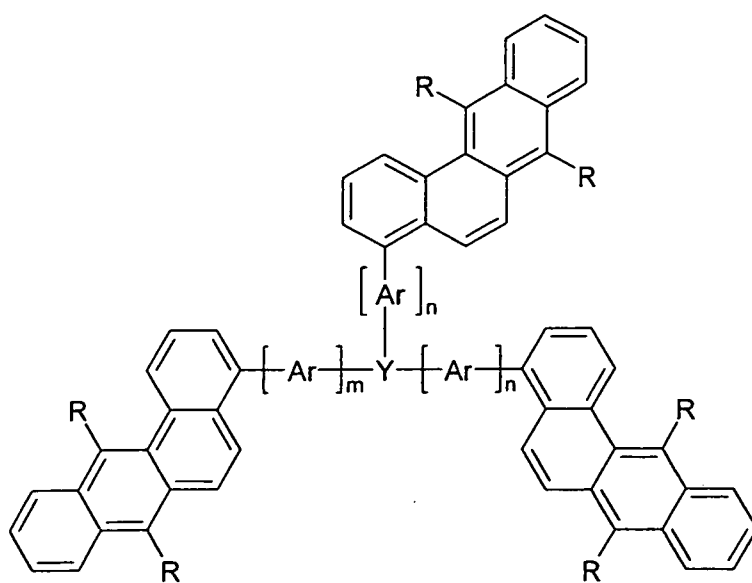
式 (10)



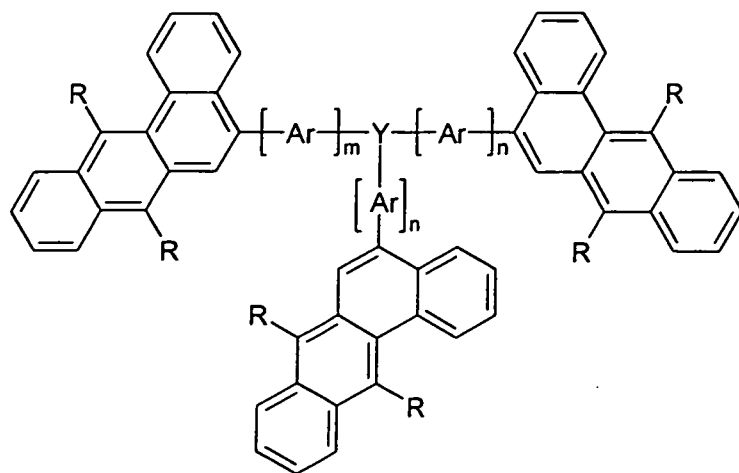
式 (11)



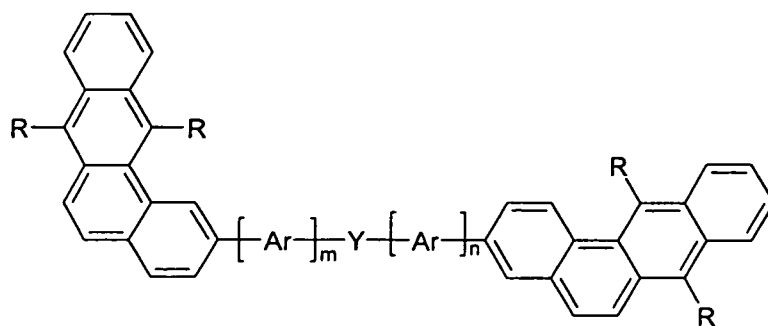
式 (12)



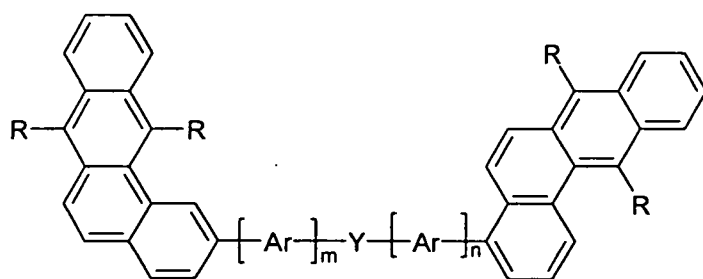
式 (13)



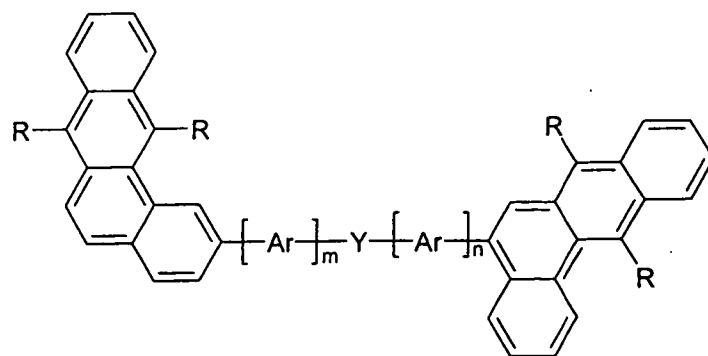
式 (14)



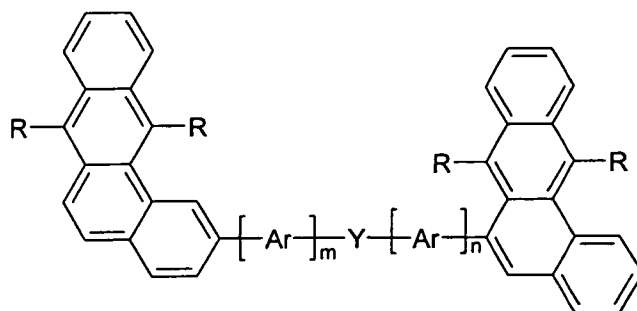
式 (15)



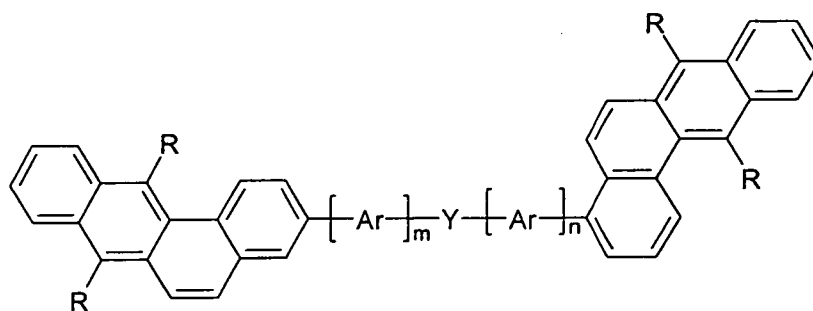
式 (16)



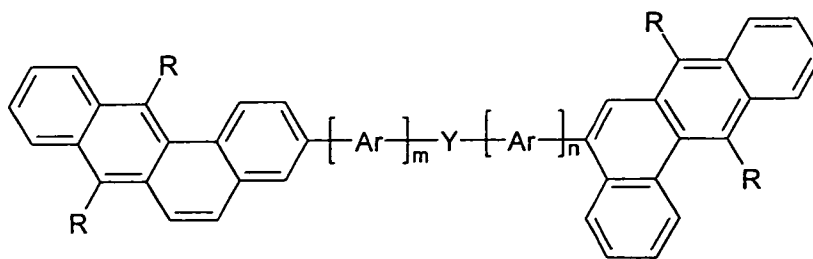
式 (17)



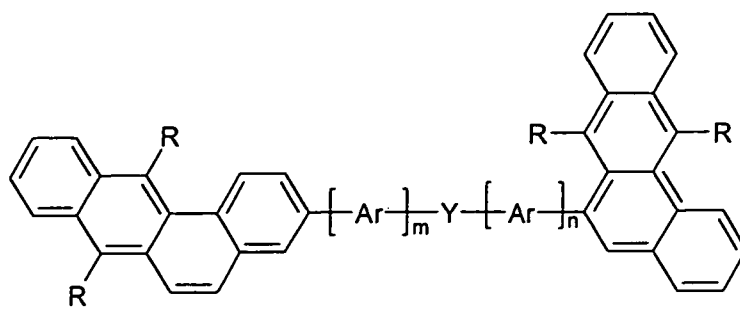
式 (18)



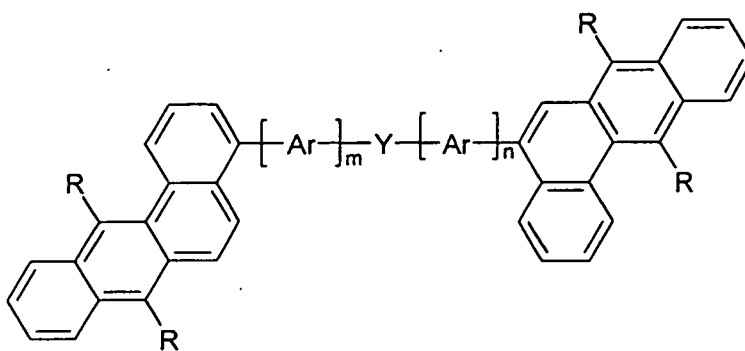
式 (19)



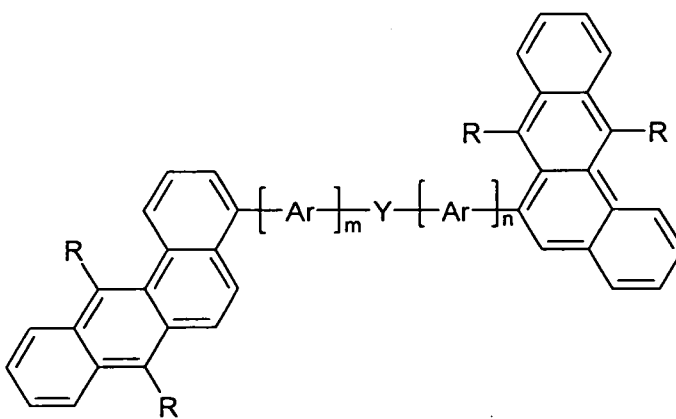
式 (20)



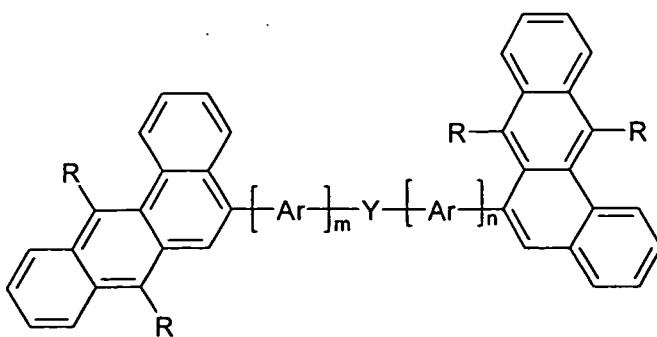
式 (21)



式 (22)



式 (23)

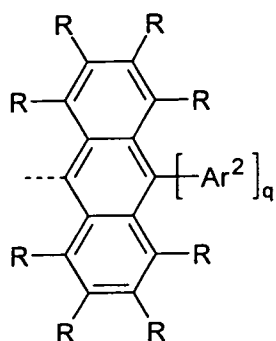


式 (24)

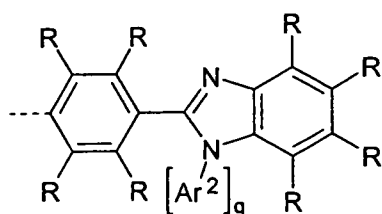
其中符號和指標具有如申請專利範圍第 1 項下所述之相同意義，其中苯并[a]蒽骨架也可具有替代氫之氘和其中基團 Y 在式 (3) 至 (7) 中表示單價芳族或雜芳族環系統或 $N(Ar^1)_2$ 基團；以及如申請專利範圍第 1 項中所述在式 (1) 苯并[a]蒽結構 12-位置之取代基 R 為氫。

4. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其中基團 Y 係由基團苯、萘、蒽、吡啶、菲、苯并蒽、蒾、芘、啡啉、啡啉并咪唑、1,3,5-三嗪和苯并咪唑組合或，如果 $p = 0$ ，則 Y 表示 $N(Ar^1)_2$ 基團。

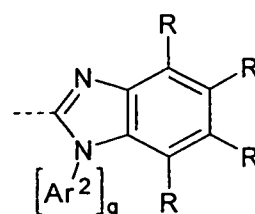
5. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其中對於 $p = 0$ 或在式 (3) 至 (7) 之化合物中，基團 Y 係選自下列式 (25) 至 (33) 之基團：



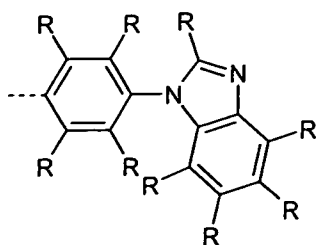
式 (25)



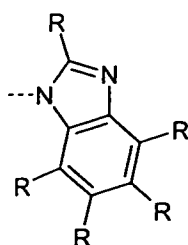
式 (26)



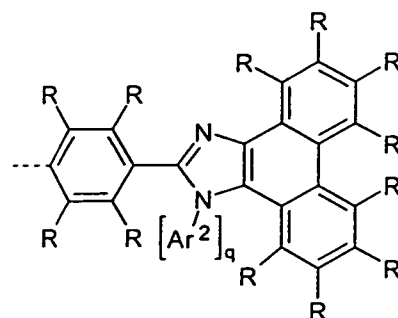
式 (27)



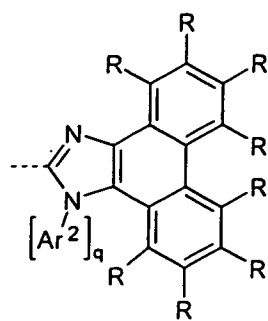
式 (28)



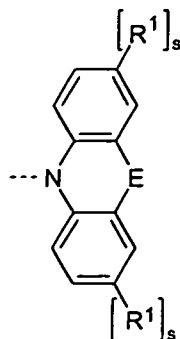
式 (29)



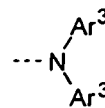
式 (30)



式 (31)



式 (32)



式 (33)

其中 R 和 R^1 具有申請專利範圍第 1 項中所指示之意義，以及：

Ar^2 為具有 5 至 16 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團，其每個可經一或更多個基團 R^1 取代，或在式 (25) 中，為式 (32) 或 (33) 之基團；

Ar^3 在每次發生時相同或不同地為具有 5 至 20 個芳族環原子之芳基或雜芳基基團或具有 15 至 30 個芳族環原子之三芳胺基團，其每個可經一或更多個基團 R^1 取代；

E 表示單鍵、 O 、 S 、 $N(R^1)$ 或 $C(R^1)_2$ ，其中二個基團 R^1 透過環形成可形成螺系統；

q 為 1、2 或 3；

s 在每次發生時相同或不同地為 0 或 1。

6. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其中符號 Ar 在每次發生時相同或不同地表示選自 1,2-伸苯基、1,3-伸苯基、1,4-伸苯基、1,4-伸萘基、9,10-伸蒽基、2,7-伸菲基、3,6-伸菲基、1,6-伸芘基、2,7-伸芘基、2,6-伸吡啶基、2,5-伸吡啶基、2,2'-聯苯基、3,3'-聯苯基、4,4'-聯苯基、2,7-萸基和 2,7-螺聯萸基之伸芳基或伸

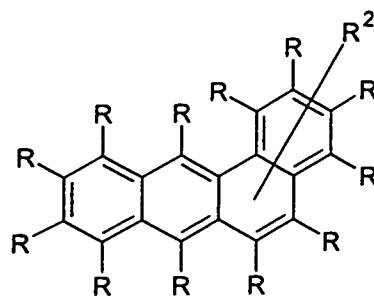
雜芳基基團。

7. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其中在式 (1) 和式 (2) 之化合物中 $p = 1$ 時或式 (8) 至 (12) 之化合物和式 (15) 至 (24) 之化合物中，符號 Y 表示單鍵或表示選自 $C=O$ 、 O 、 NAr^2 、 $POAr^2$ 、 $O-B(Ar^2)-O$ 、具有 1 至 6 個 C 原子之二價伸烷基或亞烷基基團或具有 5 至 14 個芳族環原子之二價芳族或雜芳族環系統之二價基團；和在式 (1) 和式 (2) 之化合物中 $p = 2$ 時或式 (13) 和 (14) 之化合物中，符號 Y 表示 N 或具有 5 至 14 個芳族環原子之三價芳族或雜芳族環系統；和在式 (1) 和 (2) 之化合物 (其中 $p > 2$) 中 Y 表示具有 5 至 14 個芳族環原子之對應多價芳族或雜芳族環系統。

8. 一種製備根據申請專利範圍第 1 至 7 項之一或多項之化合物之方法，其中基團 Ar 或 Y 係在苯并[a]蒽之 6-位置鍵結，其係藉由隨意地經取代之 2-(2'-芳基乙炔) 苯基萘與親電子劑之反應。

9. 一種製備根據申請專利範圍第 1 至 7 項之一或多項之化合物之方法，其特徵在於經反應性離去基取代之苯并[a]蒽偶合至官能化芳族化合物或偶合至單-或二取代之胺。

10. 一種式 (34) 之化合物，



式 (34)

其中 R 、 R^1 和 Ar^1 具有如申請專利範圍第 1 項中所述之相同意義；以及如申請專利範圍第 1 項中所述在苯并[a]蒽結構 12-位置之取代基 R 為氫，和 R^2 鍵結於苯并[a]蒽之 2、3、4、5 或 6 位置且對應地沒有基團 R 於此位置鍵結，以及：

R^2 表示 $B(OR^1)_2$ 或 $B(OAr^1)_2$ 。

11. 一種寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其包含一個或更多根據申請專利範圍第 1 至 7 項之一或多項之化合物，其中一個或更多基團 R 或 Ar 或 Y 表示從根據申請專利範圍第 1 至 7 項之一或多項之化合物至聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物的鍵。

12. 一種根據申請專利範圍第 1 至 7 項之一或多項或根據申請專利範圍第 10 項之化合物或根據申請專利範圍第 11 項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物在電子裝置中之用途。

13. 一種有機電子裝置，其包含至少一種根據申請專利範圍第 1 至 7 項之一或多項或根據申請專利範圍第 10 項之化合物或至少一種根據申請專利範圍第 11 項之寡聚

物、樹枝狀聚合物或聚合物。

14. 根據申請專利範圍第 13 項之有機電子裝置，其選自有機電發光裝置、有機場效電晶體（O-FET）、有機薄膜電晶體（O-TFT）、有機發光電晶體（O-LET）、有機積體電路（O-IC）、有機太陽能電池（O-SC）、有機場抑止裝置（field-quench 裝置）（O-FQD）、發光電化學電池（LEC）、有機雷射二極體（O-雷射）或有機光感受器。

15. 根據申請專利範圍第 14 項之有機電子裝置，其為有機電發光裝置，其中使用根據申請專利範圍第 1 至 10 項之一或多項之化合物作為用於螢光摻雜劑之主體材料。

16. 根據申請專利範圍第 14 項之有機電子裝置，其為有機電發光裝置，其中使用根據申請專利範圍第 1 至 7 項之一或多項之化合物作為發光材料（摻雜劑）、作為電洞傳輸材料、作為電洞注入材料或作為電子傳輸材料。