



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I756292 B

(45) 公告日：中華民國 111 (2022) 年 03 月 01 日

(21) 申請案號：106138736

(22) 申請日：中華民國 106 (2017) 年 11 月 09 日

(51) Int. Cl. :	<i>C07D403/10 (2006.01)</i>	<i>C07D403/14 (2006.01)</i>
	<i>C07D251/24 (2006.01)</i>	<i>C07D239/26 (2006.01)</i>
	<i>C07D487/04 (2006.01)</i>	<i>C07D491/048(2006.01)</i>
	<i>C07D405/14 (2006.01)</i>	<i>C07D471/04 (2006.01)</i>
	<i>C07D209/86 (2006.01)</i>	<i>C07D413/10 (2006.01)</i>
	<i>C07D405/12 (2006.01)</i>	<i>C07D409/14 (2006.01)</i>
	<i>H05B33/14 (2006.01)</i>	<i>C09K11/06 (2006.01)</i>
	<i>H01L51/50 (2006.01)</i>	

(30) 優先權：2016/11/14 歐洲專利局 16198684.9

(71) 申請人：德商麥克專利有限公司 (德國) MERCK PATENT GMBH (DE)
德國(72) 發明人：史托希爾 菲利普 STOESSEL, PHILIPP (DE)；艾倫瑞區 克里斯汀 EHRENREICH,
CHRISTIAN (DE)；哈巴赫 菲利普 HARBACH, PHILIPP (DE)

(74) 代理人：林志剛

(56) 參考文獻：

WO 2016/159479A1

審查人員：王慧婷

申請專利範圍項數：12 項 圖式數：0 共 179 頁

(54) 名稱

具有受體基團與供體基團之化合物

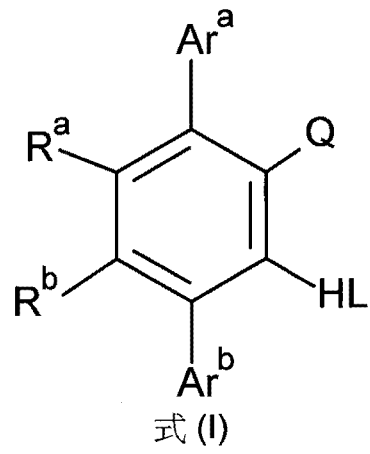
(57) 摘要

本發明描述具有受體基團與供體基團之化合物，特別是用於電子裝置中者。本發明進一步關於製備本發明化合物之方法及包含這些化合物之電子裝置。

The present invention describes compounds having an acceptor group and a donor group, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

特徵化學式：

式 I





I756292

【發明摘要】

【中文發明名稱】

具有受體基團與供體基團之化合物

【英文發明名稱】

Compounds having an acceptor group and a donor group

【中文】

本發明描述具有受體基團與供體基團之化合物，特別是用於電子裝置中者。本發明進一步關於製備本發明化合物之方法及包含這些化合物之電子裝置。

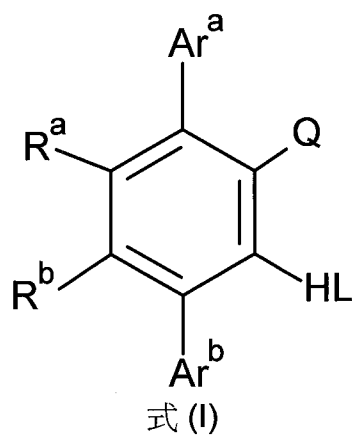
【英文】

The present invention describes compounds having an acceptor group and a donor group, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

【指定代表圖】無

【代表圖之符號簡單說明】無

【特徵化學式】式 I



【發明說明書】

【中文發明名稱】

具有受體基團與供體基團之化合物

【英文發明名稱】

Compounds having an acceptor group and a donor group

【技術領域】

本發明描述具有受體基團與供體基團之化合物，特別是用於電子裝置中者。本發明進一步關於製備本發明化合物之方法及包含這些化合物之電子裝置。

【先前技術】

發光電子組件漸增地用作為每日之光源。與慣用的照明器具相比，彼等之優點為低耗能、緊密型設計及長得多之壽命。雖然無機發光二極體首先用於作為照明器具，但有機發光二極體(OLED)亦已發現漸增地用於每日使用之物件中例如手機顯示器中。OLED優於其無機等效物的優點在於更輕易的可處理性。OLED中所用的材料可溶於適當溶劑中。組件之個別層可例如藉由印刷法施加至基板上。因此比較簡單以製造曲面顯示器。因為這些層並非晶形，故與以無機化合物為基底的LED相比，OLED較具撓性且因此可施加至撓性基板上以供製造撓性螢幕。OLED本身發光且因此並不需要任何如同例如液晶顯示器(LCD)

情況所需的背光。故可以製造以 OLED 為基底之極薄螢幕。以 OLED 為基底之顯示器所顯現的其他優點為極高對比，因為未被激發的 OLED 並不發出任何光，亦即為全黑。有關光輸出(light yield)方面，已達到大幅進步，且因此如今可以將用以誘導 OLED 電子狀態的能量實質完全地轉換成光。

OLED 係由多層所形成。首先，將陽極施加至基板上，該基板較佳地為透明如玻璃板或透明聚合物薄膜。此處通常使用氧化銦錫(ITO)透明陽極。然後將電洞傳輸層(HTL)施加至陽極。為加速將電洞由陽極轉移至電洞傳輸層，亦即減低電洞的注入障壁，通常先將由 PEDOT/PSS(摻雜聚苯乙烯磺酸鹽之聚(3,4-伸乙二氧基噻吩))所構成之中間層施加至陽極上，然後再施加電洞傳輸層。電洞傳輸層之後為含有或以染料為基底(比例例如為 5 重量%至 10 重量%)之發射層(EL)。接著將電子傳輸層(ETL)施加至後者。最後於高真空下，藉蒸氣沈積法施加由具有低電子功函數之金屬或合金例如鈣、鋁、鋇、鈦、鎂/銀合金所組成之陰極。作為保護層且欲降低電子的注入障壁，亦可以將極薄層之氟化鋰、氟化銫或銀施加至陰極與 ETL 之間。故 OLED 的結構相對複雜且需要多重之操作步驟。而且，所用的材料對濕氣及氧氣敏感，因此其結構必需要予封裝以求確保 OLED 可以長期運作。

電子係從陰極注入層結構而電洞係從陽極注入層結構作為電荷載子。電子及電洞漂移朝向彼此且漂移於發射層

中以求形成束縛態，其稱之為激子。於電荷載子之再結合中，單重態及三重態激子以1:3的比例形成。激子的衰變提供供染料分子激發的能量。接著激發態可返回至基態且如此一來地發射光子。在從單重態發射的情況下(其稱之為發螢光)僅有最多25%之所產生的激子導致發射，而從三重態所持續進行的無輻射躍遷則以熱形式喪失。從三重態 T_1 躍遷至單重態 S_0 為高度自旋禁止且因此不能提供光的發射。

在三重態發射的情況下(其稱之為發磷光)，理論上可以藉由三重態的捕獲(harvesting)來利用所有激子且將彼等以光的形式發射。於此情況下，於高於三重態之能量下被額外誘導之單重態藉由系統間跨越完全地鬆弛成三重態。

所用之三重態發射體通常為過渡金屬錯合物，其中該金屬選自第三週期過渡元素例如銱、鉑或金。由於中心貴金屬離子之高自旋軌道偶合之結果，在光學躍遷方面被嚴格禁止的三重態-單重態躍遷是被允許的，且達到適用於OLED之數 μs 的發射壽命。然而隨著電流密度之增長及所得發射體分子之大多數或所有三重態 T_1 的佈居(population)，產生飽和效應且結果電荷載子流不再被完全地利用於激發態的佈居(population)，意指歐姆損耗出現且發射體效率下降("衰減(roll-off)"特徵)。

單重態發射體具有奈秒範圍內之短得多的發射壽命，且因此如果有的話，衰減(roll-off)效應發生的程度小得多。發射體之效率或量子產率可藉同樣地使用三重態於發

光而增加。然而，欲供此目的，最高佔據三重態 T_1 與最低激發單重態 S_1 之間的能量差必需要小，而使得可以在室溫下從三重態 T_1 進行單重態 S_1 之熱再佈居。再者，必需能夠有強的自旋軌道偶合，而使得系統間跨越賦予自旋禁止之 $T_1 \rightarrow S_1$ 躍遷的能力。此躍遷的發射壽命應小約 $1 \mu\text{s}$ ，例如約 100 至 600 ns 。

於單重態的捕獲中，如同在三重態捕獲的情況下，故其為經佈居之最低激發單重態。然而，發射並非來自最低三重態 T_1 而是經由來自最低激發單重態 S_1 的熱再佈居，而使得會另行喪失的激發能量幾乎可完全利用在用於發光的三重態。

此方法稱之為熱活化延遲螢光 (TADF) 且述於例如 B. H. Uoyama et al., *Nature* 2012, Vol. 492, 234 中。為求能夠進行此方法，乃需要例如小於約 2000 cm^{-1} 之較小單重態-三重態分隔 $\Delta E(S_1-T_1)$ 於發射體中。為了開啓原則上為自旋禁止之 $T_1 \rightarrow S_1$ 躍遷以及發射體，可以提供其他化合物於具有強自旋軌道偶合之基質中，而使系統間跨越能經由空間接近性及因此分子之間可能之交互作用而成為可能，或者自旋軌道偶合係藉由發射體中存在的金屬原子產生。

適當之發射體尤其為顯現高電荷轉移特質的分子，例如銅化合物。故顯現熱活化延遲螢光化合物之高度發光化合物必需予以配置而使其具有極小分隔 $\Delta E(S_1-T_1)$ 加上相對短之 $>10^6 \text{ s}^{-1}$ 的衰變率，而使在競爭無發光之衰變路徑中衰退。

已發展出之其他發光電子組件為有機發光電化學電池 (OLEC，亦稱為 LEC 或 LEEC)。OLEC 首次述於 Ouibing Pei et al., *Science*, 1995, 296, 1086-1088 中，其中亦闡述基本原理。

與 OLED 相比，OLEC 具有較簡單的結構且亦較簡單於製造。例如，與 OLED 相比，OLEC 具有較小數目的層。此外，OLEC 中的活性層可較厚，故可以使用較簡單的方法來製造活性發光層。OLEC 中的活性發光層可具有數微米至高至數十微米的厚度。因此活性層的施加可使用諸如噴墨印刷法、篩網印刷法或噴霧塗佈等方法完成，彼等亦適於便宜的大量製造。藉由與 OLED 相比，OLEC 對基板表面的不規則性及對活性層中的缺陷顯現較低敏感性。因此 OLEC 具有較佳適當性以製造大面積的發光裝置。

OLEC 包含兩個電極及安排在陰極與陽極之間的活性層。活性層包含發光有機半導體及提供活動離子 (mobile ion) 之電解質。為求能夠使光有出口，至少有一個電極應為透明。

所用之發光有機半導體可共軛至如同亦用於 OLED 中之共聚物或離子性金屬錯合物。例示之過渡金屬錯合物為參(2-苯基吡啶)銱 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 或參(8-羥基喹啉)鋁 (Alq_3)。小分子提供的優點為彼等較易於處理，因為彼等可較輕易地溶於適當溶劑中。然而，於這些溶液之處理中，會出現不良薄膜形成性質的困難。

有機半導體發光的能力係藉最高佔據分子軌域

(HOMO)及最低未佔據分子軌域(LUMO)的能量以及彼等之相對位置測定。然而，於有機半導體的情況下，HOMO及LUMO可就其能量藉於分子中引入側鏈或由不同有機半導體中製備共聚物而調整，使得不同有機半導體存在於共聚物鏈中。以此方式，亦可以影響有機半導體之溶解度及其薄膜形成性質。然而，軌道之間的交互作用(能量狀態位置係藉此測定)亦受聚合物之幾何學及有關於其他分子之相對位置所影響。因此，在由溶液所形成之薄膜的情況下，溶液的改變可影響HOMO及LUMO的位置，使得有機發光組件的發射由於薄膜的無定形特質而具有相對寬的光譜。

大多數金屬具有相對高的功函數，且基此原因故於電極有相當大的能量消耗是為了將電子由電極材料注入有機半導體中。在使用鹼金屬或鹼土金屬的情況下，這些金屬確實具有低功函數，使得陰極與有機半導體之LUMO之間的能量差降低。然而，這些金屬對氧及水極具反應性，故電子組件的製造複雜。

在有機發光電化學電池的情況下，係使用活動離子以使電荷能夠從電極轉移至活性層。如果將電壓施加於陰極與陽極之間，正離子累積於陰極且負離子累積於陽極，因而形成電雙層。此電雙層極薄，其意指高電場梯度逐步建立在與活性層之層厚度無關之電極界面。如果電極之間有足夠大的電位差，則該電雙層能有效地將電荷載子注入有機半導體之HOMO或LUMO中。電荷載子的注入係藉由帶

電荷離子的對向移動來補償。因此電子於陰極的注入引致正離子的累積且因此導致 n-摻雜。電子於陽極的萃取或電洞於陽極的注入被帶負電荷的離子相應地補償且導致 p-摻雜。電化學摻雜可促進電子或電洞於有機半導體內的傳輸。在又是較厚活性層引致較大電極分隔的情況下，因此可以引致具有小電位差的有效電荷傳輸。

電化學摻雜區域於彼此的方向成長直至彼等最終相見為止，且 pn 之再結合係於極薄的未摻雜層中引起。然而，OLEC 及 OLED 中的電荷傳輸機轉有決定性的差異。雖然 OLEC 中的電荷係經由活動離子的協助傳輸，但 OLED 中的電荷係藉電子/電洞從或多或少為靜止的分子中跳躍而傳輸。此外，OLED 經常含有其他具不同材料的層(例如電子及電洞傳輸層)。相比之下，製造 OLEC 僅需要提供單一均相之活性層，因為於電極之間施加電位差後，供電子及電洞傳輸的層自動地於活性層中形成。因此與 OLED 相比，OLEC 的功能並非依賴電極的功函數。故兩種電極均可由相同的材料製造。亦因此可以製得完全不含金屬之 OLEC。

OLED 為具有正向及逆向電荷傳輸的二極體，意指電流-電壓曲線為不對稱的。OLEC 實質上為電解電池。施加電位差後，電解質於陽極氧化及於陰極還原。

OLEC 典型地使用包含發光及電荷傳輸共軛聚合物例如聚伸苯基-乙烯聚合物、聚噻吩聚合物或聚萘聚合物之單一溶液、及包含活動離子性摻雜劑例如三氟甲磺酸鋰及

形成該電解質之化合物例如聚氧化乙烯的電解質系統製造。

發光電化學電池係已知，例如由 WO 2013/173845 已知。

如果使用單重態發射體作為染料，則類似於上述用於 OLED 之方法，於三重態躍遷中釋出的能量以熱的形式喪失。因為只有約 25% 之電荷載子的再結合導致單重態激子，此意指被注入活性層中的所有電荷載子中有 75% 失去了光的產生。故與光輸出有關的效率於此種類的 LEC 中不令人滿意。先前技藝中已知，OLED 在壽命及效率方面明顯地優於 OLEC。

【發明內容】

因此藉由本發明所解決的一個問題為提供有機電激發光裝置 (OLED, PLED) 或有機發光電化學電池 (OLEC)，其以所用之電能量可達到高的光輸出且克服先前技藝中已知的缺點。

藉本發明所解決的另一問題為提供適用於有機電子裝置特別於有機電激發光裝置或有機電化學電池中且當用於此裝置中時可導致良好裝置性質之化合物，及提供相應之電子裝置。

更特別地，藉本發明所解決的問題為提供導致長壽命、良好效率及低操作電壓之化合物。特別是基質材料的性質又對有機電激發光裝置的壽命及效率具有實質影響。

藉本發明所解決的另一問題可被認為是提供適用於磷光或螢光 OLED 之化合物，尤其是作為基質材料。本發明之特別目的為提供適於紅色 -、黃色 - 及綠色磷光 OLED 且亦可能適於藍色磷光 OLED 的基質材料。

而且，該化合物應可以極簡單的方式處理，且尤其顯現良好的溶解度及薄膜形成。例如，該化合物應顯現升高之氧化安定性及改善之玻璃轉移溫度。

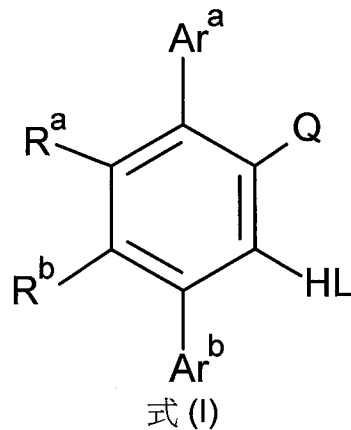
另一目的可被認為是提供具有優良效能、極便宜且品質穩定之電子裝置。

再者，應該可以使用或適應電子裝置於許多目的。更特別地，電子裝置的效能應可於寬廣的溫度範圍保持。

意外地已發現，下文中詳細描述之特別化合物可解決這些問題且排除先前技藝之缺點。化合物的使用導致有機電子裝置尤其是有機電激發光裝置極良好的性質，尤其是有關壽命、效率及操作電壓方面。因此本發明提供電子裝置，尤其是有機電激發光裝置或有機發光電化學電池，其包含此種類之化合物，且亦包含相應之較佳實施態樣。

【實施方式】

因此本發明提供包含至少一種下式 (I) 結構之化合物：



其中所用之符號如下：

Q 為包含芳族或雜芳族環系統之受體基團，該芳族或雜芳族環系統具有 5 至 60 個芳族環原子且可被一或多個 R^1 基團取代；

HL 為供體基團；

Ar^a 、 Ar^b 為相同或不同且為具有 5 至 60 個芳族(較佳地 5 至 40 個芳族)環原子且可被一或多個 R^1 基團取代之芳族或雜芳族環系統；

R^a 、 R^b 為相同或不同且為 H；D；F；Cl；Br；I； $B(OR^1)_2$ ；CHO； $C(=O)R^1$ ； $CR^1=C(R^1)_2$ ；CN； $C(=O)OR^1$ ； $C(=O)N(R^1)_2$ ； $Si(R^1)_3$ ； $N(R^1)_2$ ； NO_2 ； $P(=O)(R^1)_2$ ； OSO_2R^1 ； OR^1 ； $S(=O)R^1$ ； $S(=O)_2R^1$ ；具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，各者分別可被一或多個 R^1 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可被 $-R^1C=CR^1-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $Ge(R^1)_2$ 、

$\text{Sn}(\text{R}^1)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^1$ 、 NR^1 、
 $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^1)$ 、 $-\text{C}(\text{=O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(\text{=O})\text{NR}^1-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、
 SO 或 SO_2 替代且其中一或多個氫原子可被 D 、 F 、
 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替代；或具有5至60個芳族
 (較佳地5至40個芳族)環原子且於每一情況下可被
 一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統；或具
 有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且可
 被一或多個 R^1 基取代之芳氧基或雜芳氧基；或具
 有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且可
 被一或多個 R^1 基取代之芳烷基或雜芳烷基；或具
 有10至40個芳族環原子且可被一或多個 R^1 基取代
 之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基；或這
 些系統之組合；同時， R^a 與 R^b 一起或者連同 Ar^a
 或 Ar^b 基一起可形成單環或多環之脂族、雜脂
 族、芳族或雜芳族環系統；

R^1 於每一情況為相同或不同且為 H ； D ； F ； Cl ；
 Br ； I ； $\text{B}(\text{OR}^2)_2$ ； CHO ； $\text{C}(\text{=O})\text{R}^2$ ； $\text{CR}^2=\text{C}(\text{R}^2)_2$ ；
 CN ； $\text{C}(\text{=O})\text{OR}^2$ ； $\text{C}(\text{=O})\text{N}(\text{R}^2)_2$ ； $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ ；
 $\text{N}(\text{R}^2)_2$ ； NO_2 ； $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^2)_2$ ； OSO_2R^2 ； OR^2 ；
 $\text{S}(\text{=O})\text{R}^2$ ； $\text{S}(\text{=O})_2\text{R}^2$ ；具有1至40個碳原子之直鏈
 烷基、烷氧基或烷硫基或具有3至40個碳原子之
 支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，各者分別可
 被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2
 基可被 $-\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$ 、

$\text{Sn}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 NR^2 、
 $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^2)$ 、 $-\text{C}(\text{=O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(\text{=O})\text{NR}^2-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、
 SO 或 SO_2 替代且其中一或多個氫原子可被 D 、 F 、
 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替代；或具有5至60個芳族
 (較佳地5至40個芳族)環原子且於每一情況下可被
 一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；或具
 有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且可
 被一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基；或具
 有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且可
 被一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；或具
 有10至40個芳族環原子且可被一或多個 R^2 基取代
 之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基；或這
 些系統之組合；同時，二或多個較佳地相鄰之 R^1
 基團可一起形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳
 族或雜芳族環系統；

R^2 於每一情況為相同或不同且為 H ； D ； F ； Cl ；
 Br ； I ； $\text{B}(\text{OR}^3)_2$ ； CHO ； $\text{C}(\text{=O})\text{R}^3$ ； $\text{CR}^3=\text{C}(\text{R}^3)_2$ ；
 CN ； $\text{C}(\text{=O})\text{OR}^3$ ； $\text{C}(\text{=O})\text{N}(\text{R}^3)_2$ ； $\text{Si}(\text{R}^3)_3$ ；
 $\text{N}(\text{R}^3)_2$ ； NO_2 ； $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^3)_2$ ； OSO_2R^3 ； OR^3 ；
 $\text{S}(\text{=O})\text{R}^3$ ； $\text{S}(\text{=O})_2\text{R}^3$ ；具有1至40個碳原子之直鏈
 烷基、烷氧基或烷硫基或具有3至40個碳原子之
 支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，各者分別可
 被一或多個 R^3 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2
 基可被 $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、

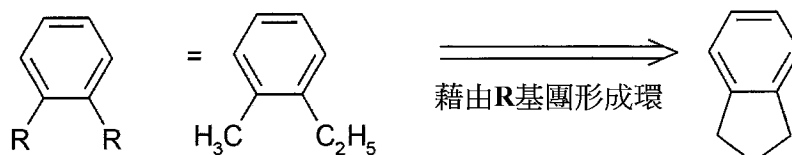
$\text{Ge}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^3$ 、 NR^3 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^3-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO 或 SO_2 替代且其中一或多個氫原子可被 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替代；或具有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且於每一情況下可被一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統；或具有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且可被一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基；或具有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且可被一或多個 R^3 基取代之芳烷基或雜芳烷基；或具有10至40個芳族環原子且可被一或多個 R^3 基取代之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基；或這些系統之組合；同時，二或多個較佳地相鄰之 R^2 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統；

R^3 於每一情況為相同或不同且為 H ； D ； F 或具有1至20個碳原子之脂族、芳族及/或雜芳族烴基，其中氫原子亦可被 F 替代；同時，二或多個較佳地相鄰之 R^3 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統。

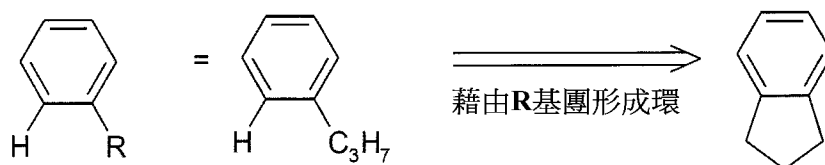
本發明上下文中之相鄰碳原子為彼此直接鍵結之碳原子。此外，基團定義中之"相鄰基團(adjacent radical)"意指這些基團係鍵結至同一碳原子或鍵結至相鄰碳原子。這些定義尤其相應地適用於術語"相鄰基團(adjacent groups)"

及"相鄰取代基"。

本說明書上下文中之用語"二或多個基團可一起形成環"應理解為尤其意指該二個基團係藉由化學鍵同時正式脫去兩個氫原子而彼此連結。此乃藉由下列反應圖闡明：



然而，除此之外，上述用語應亦理解為意指如果該二個基團中之一者為氫，則第二個基團係結合至該氫原子所鍵結的位置以形成環。此應藉由下列反應圖闡明：



本發明上下文中之稠合芳基、稠合芳族環系統或稠合雜芳族環系統為其中二或多個芳族基彼此沿著共同的邊稠合(亦即合環(annelated))而使得(例如)兩個碳原子隸屬於至少兩個芳族或雜芳環的基團，例如於萘中者。對照之下，例如，萘在本發明上下文中不是稠合芳基，因為萘中的兩個芳族基並不具有共同的邊。相應之定義適用於雜芳基及適用於可能但亦不必要含有雜原子的稠合環系統。

本發明上下文中之芳基含有6至60個碳原子，較佳地6至40個碳原子；本發明上下文中之雜芳基含有2至60個碳原子，較佳地2至40個碳原子，及至少一個雜原子，前提是碳原子及雜原子的總和為至少5。雜原子較佳地選自N、

O及/或S。芳基或雜芳基在此處要理解為意指簡單芳族環，亦即苯，或簡單雜芳族環例如吡啶、嘧啶、噁吩等等，或稠合芳基或雜芳基例如萘、蔥、菲、喹啉、異喹啉等等。

本發明上下文中之芳族環系統於環系統中含有6至60個(較佳地6至40個)碳原子。本發明上下文中之雜芳族環系統於環系統中含有1至60個(較佳地1至40個)碳原子及至少一個雜原子，前提是碳原子及雜原子的總和為至少5。雜原子較佳地選自N、O及/或S。本發明上下文中之芳族或雜芳族環系統應理解為意指系統未必僅含有芳基或雜芳基，其中亦可有二或多個芳基或雜芳基被非芳族單元(較佳地小於10%之非氫的原子)例如碳、氮或氧原子或羰基插入。故例如，諸如9,9'-螺雙芴、9,9-二芳基芴、三芳基胺、二芳基醚、芪等等系統在本發明上下文中亦應視為芳族環系統，且同樣地其中二或多個芳基例如被直鏈或環狀烷基或被矽基插入的系統亦如是。此外，其中二或多個芳基或雜芳基彼此直接鍵結之系統例如聯苯、聯三苯、聯四苯或聯吡啶同樣地應視為芳族或雜芳族環系統。

本發明上下文中之環狀烷基、烷氧基或烷硫基要理解為意指單環、雙環或多環基。

本發明上下文中，其中個別氫原子或CH₂基亦可被上述基團替代之。C₁-至C₂₀-烷基要理解為意指例如甲基、乙基、正丙基、異丙基、環丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、三級丁基、環丁基、2-甲基丁基、正戊基、二級戊

基、三級戊基、2-戊基、新戊基、環戊基、正己基、二級己基、三級己基、2-己基、3-己基、新己基、環己基、1-甲基環戊基、2-甲基戊基、正庚基、2-庚基、3-庚基、4-庚基、環庚基、1-甲基環己基、正辛基、2-乙基己基、環辛基、1-雙環[2.2.2]辛基、2-雙環[2.2.2]辛基、2-(2,6-二甲基)辛基、3-(3,7-二甲基)辛基、金剛烷基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、1,1-二甲基-正己-1-基、1,1-二甲基-正庚-1-基、1,1-二甲基-正辛-1-基、1,1-二甲基-正癸-1-基、1,1-二甲基-正十二烷-1-基、1,1-二甲基-正十四烷-1-基、1,1-二甲基-正十六烷-1-基、1,1-二甲基-正十八烷-1-基、1,1-二乙基-正己-1-基、1,1-二乙基-正庚-1-基、1,1-二乙基-正辛-1-基、1,1-二乙基-正癸-1-基、1,1-二乙基-正十二烷-1-基、1,1-二乙基-正十四烷-1-基、1,1-二乙基-正十六烷-1-基、1,1-二乙基-正十八烷-1-基、1-(正丙基)環己-1-基、1-(正丁基)環己-1-基、1-(正己基)環己-1-基、1-(正辛基)環己-1-基及1-(正癸基)環己-1-基。烯基要理解為意指例如，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、環辛烯基或環辛二烯基。炔基要理解為意指例如，乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基、庚炔基或辛炔基。C₁-至C₄₀-烷氧基要理解為意指例如，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、二級丁氧基、三級丁氧基或2-甲基丁氧基。

芳族或雜芳族環系統，其具有5至60個(較佳地5-40個)

芳族環原子且亦可於每一情況下被上述基團取代且其可經由任何期望位置連結至芳族或雜芳族系統者，要理解為意指例如衍生自下列之群組：苯、萘、蒽、苯并蒽、菲、苯并菲、芘、蒾、苊、苈、苉、苯并苈、稠四苯、稠五苯、苯并芘、聯苯、伸聯苯、聯三苯、伸聯三苯、萸、螺雙萸、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛并萸、順-或反-單苯并茛并萸、順-或反-二苯并茛并萸、參茛并苯、異參茛并苯、螺參茛并苯、螺異參茛并苯、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、吡嗪、吡啶并吡嗪、茛并吡嗪、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、啡噻吡、啡噻吡、吡啶、吡嗪、咪唑、苯并咪唑、萘并咪唑、菲并咪唑、吡啶并咪唑、吡嗪并咪唑、喹啉并咪唑、噻吩、苯并噻吩、萘并噻吩、蒽并噻吩、菲并噻吩、異噻吩、1,2-噻吩、1,3-噻吩、苯并噻吩、噻吡、苯并噻吡、噻啶、苯并噻啶、噻吩、1,5-二氫雜蒽、2,7-二氫雜芘、2,3-二氫雜芘、1,6-二氫雜芘、1,8-二氫雜芘、4,5-二氫雜芘、4,5,9,10-四氫雜芘、吡嗪、啡吡、啡噻吡、啡噻吡、螢紅環、噻啶、氮雜吡嗪、苯并吡嗪、啡啶、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、1,3,5-三吡、1,2,4-三吡、1,2,3-三吡、四唑、1,2,4,5-四吡、1,2,3,4-四吡、1,2,3,5-四吡、噻吩、噻啶、

吲哚啉及苯并噻二唑。

較佳組態中，本發明化合物可以式(I)結構表示。較佳地，包含式(I)結構之化合物具有不大於5000 g/mol、較佳地不大於4000 g/mol、特別佳地不大於3000 g/mol、尤佳地不大於2000 g/mol 且最佳地不大於1200 g/mol之分子量。

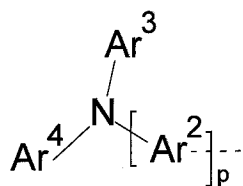
此外，較佳之本發明化合物的特徵為彼等是可昇華的。這些化合物通常具有小於約1200 g/mol之莫耳質量。

HL基表示供體基團，此概念於專家領域中尤其是有關於TADF材料之專家領域中係已知。

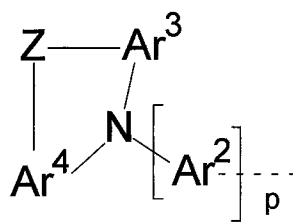
本情況下之供體基團D(亦稱為供體取代基)要理解為意指基團，其為電子供體基團。何謂供體基團為熟諳此藝者已詳知。較佳地為當供體基團具有正誘導效應(positive inductive effect)(+I)及/或正共振效應(positive mesomeric effect)(+M)之時。經由漢米特方程式(Hammett equation)進行之參數測定為熟諳此藝者已詳知。適當之供體取代基尤其為二芳基-或-雜芳基胺基及呋啞基或呋啞衍生物諸如茛并呋啞或吲哚并呋啞。這些基團亦可具有另外之取代。

另一實施態樣中，供體基團選自芳基胺基較佳地二-或三芳基胺基、雜芳基胺基較佳地二-或三雜芳基胺基、呋啞基，提供之較佳者為呋啞基。

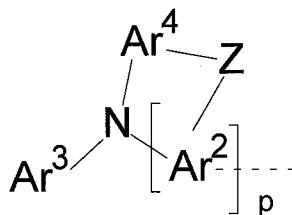
可能較佳的情況為，供體基團HL包含基團且較佳地為選自式(H-1)至(H-3)之基團



式 (H-1)



式 (H-2)



式 (H-3)

其中虛線鍵標示連接位置且

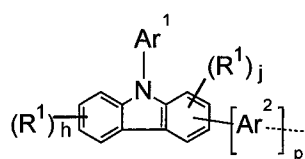
Ar^2 、 Ar^3 、 Ar^4 各自獨立地為具有 6 至 40 個碳原子之芳基或具有 3 至 40 個碳原子之雜芳基，各者分別可被一或多個 R^1 基取代；

p 為 0、1、2、3、4、5 或 6，較佳地為 0、1、2 或 3 且更佳地為 0、1 或 2 且

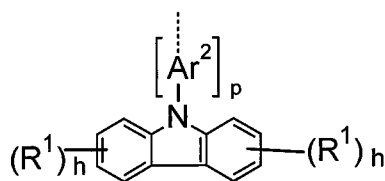
Z 為 CR^{1_2} 、 SiR^{1_2} 、 $C=O$ 、 $N-Ar^1$ 、 BR^1 、 PR^1 、 POR^1 、 SO 、 SO_2 、 Se 、 O 或 S ，較佳地為 CR^{1_2} 、 $N-Ar^1$ 、 O 或 S ，其中該 R^1 基具有申請專利範圍第 1 項中提供之定義且 Ar^1 表示具有 5 至 60 個芳族 (較佳地 5 至 40 個芳族) 環原子且於每一情況下可被一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有 5 至 60 個芳族 (較佳地 5 至 40 個芳族) 環原子且於每一情況下可被一或多個 R^1 基取代之芳氧基、或具有 5 至 60 個芳族 (較佳地 5 至 40 個芳族) 環原子且於每一情況下可被一或多個 R^1 基取代之芳烷基，其中二或多個較佳地相鄰之 R^1 取代基隨

意地可以形成可被一或多個 R^2 基取代之單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統。

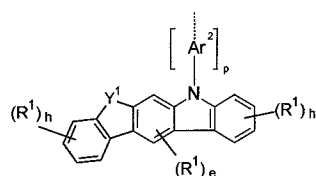
此外可能的情況為，供體基團 HL 包含基團且較佳地為選自式 (H-4) 至 (H-26) 之基團



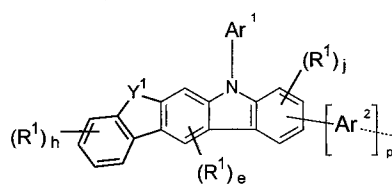
式 (H-4)



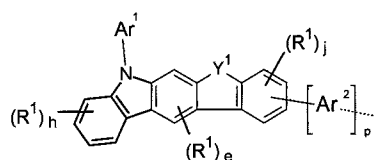
式 (H-5)



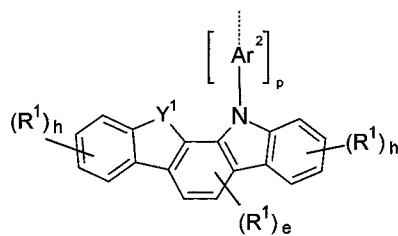
式 (H-6)



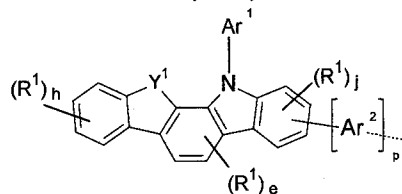
式 (H-7)



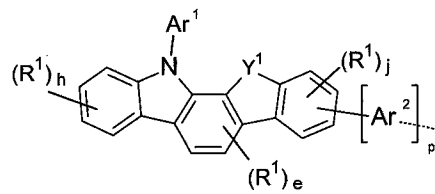
式 (H-8)



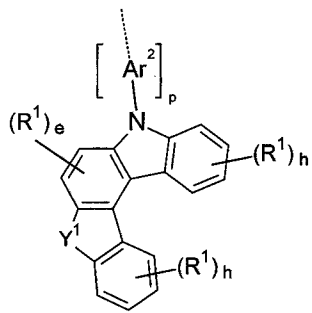
式 (H-9)



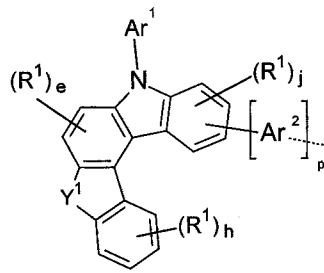
式 (H-10)



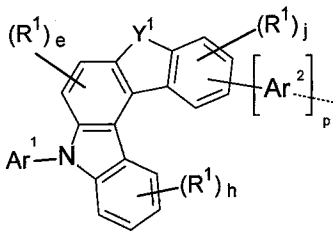
式 (H-11)



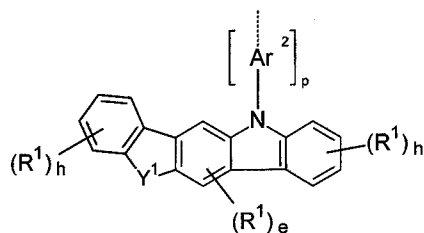
式 (H-12)



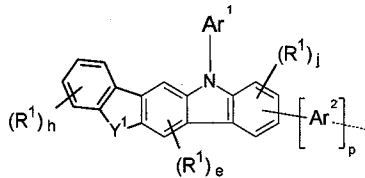
式 (H-13)



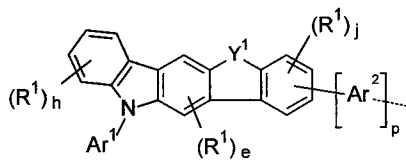
式 (H-14)



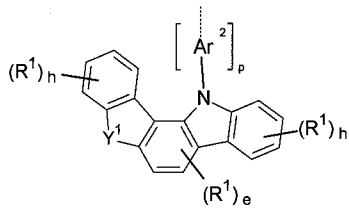
式 (H-15)



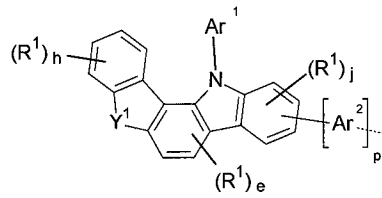
式 (H-16)



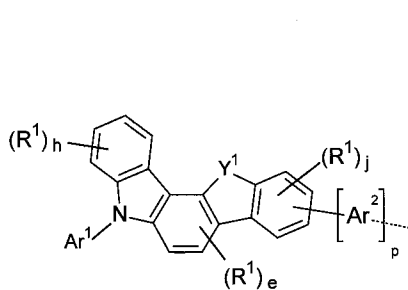
式 (H-17)



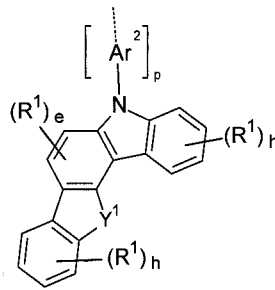
式 (H-18)



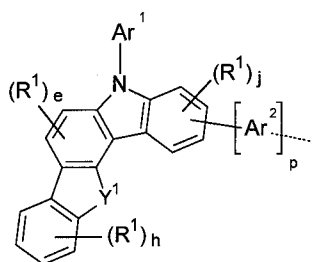
式 (H-19)



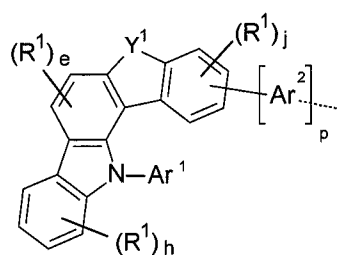
式 (H-20)



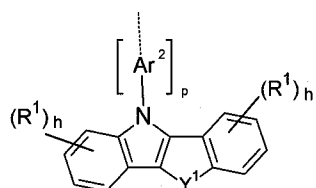
式 (H-21)



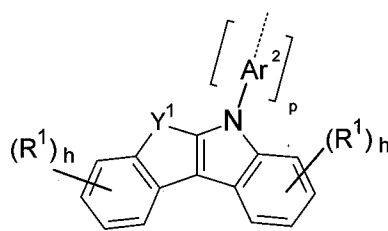
式 (H-22)



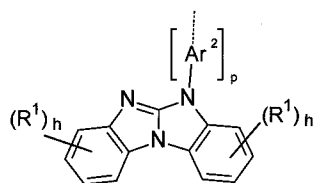
式 (H-23)



式 (H-24)



式 (H-25)

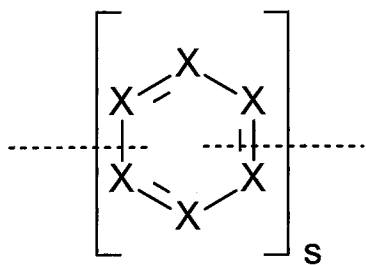


式 (H-26)

其中 Y^1 表示 O、S、 $C(R^1)_2$ 或 NAr^1 ，虛線鍵標示連接位置， e 為 0、1 或 2， j 為 0、1、2 或 3， h 為 0、1、2、3 或 4， p 為 0、1、2、3、4、5 或 6，較佳地為 0、1、2 或 3 且更佳地為 0、1 或 2， Ar^1 及 Ar^2 具有上文提供之定義，尤其是式 (H-1) 或 (H-2) 提供之定義，且 R^1 具有上文提供之定義，尤其是式 (I) 提供之定義。

基團 (H-1) 至 (H-26) 中，提供之較佳者為吡啶基，尤其是基團 (H-4) 至 (H-26)。

較佳地，式 (H-1) 至 (H-26) 中之 Ar^2 基可為式 (LAr-1) 之連接結構



式(LAr-1)

其中X於每一情況為相同或不同且為N或CR¹，較佳地為CR¹，或者如果有基團結合至X，則X為C；虛線鍵標示連接位置，且s為0、1、2、3、4、5或6，較佳地為0、1、2或3，更佳地為0、1或2且尤佳地為0或1，其中R¹基具有上文提供之定義，尤其是式(I)提供之定義。較佳地，式(LAr-1)中所示基團的兩個連接位置為對位。進一步較佳地，式(H-1)至(H-26)中之指標p為1且式(LAr-1)中之指標s為0、1、2、3、4、5或6，較佳地為0、1、2或3，更佳地0、1或2且尤佳地為0或1。

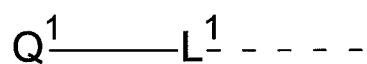
較佳地，式(LAr-1)中每環不多於二個X基為N。更佳地，式(LAr-1)之連接結構包含不多於二個之氮原子、更佳地不多於一個氮原子且尤佳地無氮原子。再者，優先考慮之化合物其特徵為在式(LAr-1)中，每環至少四個X且較佳地所有X均為CR¹，其中X所表示之CR¹基較佳地至多4個、更佳地至多3個且尤佳地至多2個不為CH基。更佳地，式(LAr-1)之連接結構包含不多於兩個不是H的R¹基、更佳地不多於一個且尤其是沒有。

式(I)中之Q基表示受體基團，該受體基團包含具有5

至 60 個芳族環原子且可被一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統。具有此性質之受體基團於專家領域尤其有關於 TADF 材料之專家領域中廣泛已知。較佳地為當受體基團具有負誘導效應 (-I) 及 / 或負共振效應 (-M) 之時。經由漢米特方程式 (Hammett equation) 進行之參數測定為熟諳此藝者已詳知。適當之受體取代基尤其為缺電子雜芳基及被拉電子取代基取代之芳基，其中這些基團亦可具有另外之取代。較佳缺電子雜芳基之實例選自由三吡啶、嘧啶、氧化膦及酮所組成之群組。

再者，驚人的優點係藉由下列化合物顯現，這些化合物包含至少一種式 (I) 結構或其較佳實施態樣，其中該受體基團 Q 包含至少一種選自以下群組之結構：吡啶、嘧啶、吡啶、嗒吡啶、三吡啶、喹啉、喹啉、喹啉、異喹啉、咪啶及 / 或苯并咪啶，提供之特別佳者為嘧啶、三吡啶及喹啉。

本發明之較佳組態中，可能的情況為，受體基團為可以式 (QL) 表示之基團

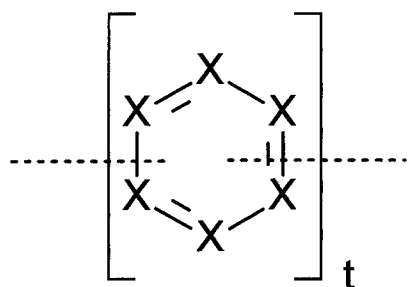


式 (QL)

其中 L^1 表示一鍵或為具有 5 至 60 個芳族 (較佳地 5 至 40 個芳族) 環原子且可被一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統，且 Q^1 為拉電子基，其中 R^1 基具有上文提供之定

義，尤其是式(I)提供之定義。

較佳地， L^1 基為式(LAr-2)之連接結構



式(LAr-2)

其中X於每一情況為相同或不同且為N或 CR^1 ，較佳地為 CR^1 ，或者如果有基團結合至X，則X為C；

虛線鍵標示連接位置，且t為0、1、2、3、4、5或6，較佳地為0、1、2或3，更佳地為0、1或2且尤佳地為0或1，其中 R^1 基具有上文所示之定義，尤其是式(I)所示之定義。較佳地，式(LAr-2)中所示連接結構的兩個連接位置為對位。

較佳地，式(LAr-2)中每環不多於二個X基為N。更佳地，式(LAr-2)之連接結構包含不多於二個之氮原子、更佳地不多於一個氮原子且尤佳地無氮原子。再者，優先考慮之化合物其特徵為在式(LAr-2)中，每環至少四個X且較佳地所有X均為 CR^1 ，其中X所表示之 CR^1 基較佳地至多4個、更佳地至多3個且尤佳地至多2個不為CH基。更佳地，式(LAr-2)之連接結構包含不多於兩個不是H的 R^1 基、更佳地不多於一個且尤其是沒有。

另外可能的情況為，式(H-1)至(H-26)中之指標p為0、

1或2且式(LAr-2)中之指標t為0、1或2。較佳地，式(LAr-1)中之指標s可為0、1或2且式(LAr-2)中之指標t可為0、1或2。另外可能的情況為式(LAr-1)中之指標s與式(LAr-2)中之指標t的差距不大於2、較佳地不大於1且尤佳地為0。

較佳之式(I)化合物包含至少一個式(H-1)至(H-26)之供體基團，其中Ar²基為式(LAr-1)之連接結構，及至少一個式(QL)之受體基團，其中L¹可以式(LAr-2)之連接結構表示，其中式(LAr-1)中之指標s與式(LAr-2)中之指標t具有下列數值：

化合物	式(LAr-1)中之指標 s	式(LAr-2)中之指標 t
式(I-1)	0	0
式(I-2)	1	1
式(I-3)	2	2
式(I-4)	0	1
式(I-5)	1	0
式(I-6)	1	2
式(I-7)	2	1
式(I-8)	3	3
式(I-9)	3	2
式(I-10)	2	3
式(I-11)	0	2
式(I-12)	2	0
式(I-13)	3	1
式(I-14)	1	3

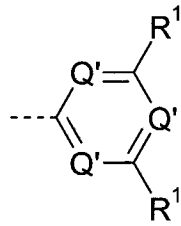
另一組態中，可能的情況為式(I)中尤其詳述之Q基或者拉電子Q¹基表示雜芳族環系統，其中該環原子包含1至4個氮原子且該環系統可被一或多個R¹基取代，但較佳地未經取代，其中R¹具有上文詳述之定義，尤其是式(I)詳述之

定義。

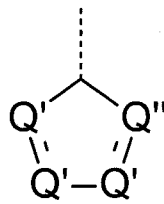
再者，優先考慮之化合物其特徵在於式(I)中之受體基團Q或者拉電子 Q^1 基為具有至少兩個稠環之雜芳族環系統，其可被一或多個 R^1 基取代，但較佳地未經取代，其中該至少兩個稠環之該環原子包含至少一個氮原子且較佳地至少兩個氮原子，其中 R^1 具有上文所示之定義，尤其是式(I)所示之定義。

另外可能的情況為化學式中尤其詳述之Q基或者拉電子 Q^1 基表示具有9至14個且較佳地10個環原子之雜芳族環系統，其可被一或多個 R^1 基取代(其中 R^1 具有上文詳述之定義，特別是式(I)詳述之定義)，但較佳地未經取代。

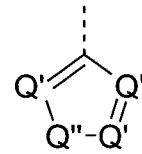
較佳地，式(I)中尤其詳述之Q基或式(QL)中詳述之 Q^1 基可選自選自式(Q-1)、(Q-2)、(Q-3)、(Q-4)、(Q-5)、(Q-6)、(Q-7)、(Q-8)、(Q-9)及/或(Q-10)之結構



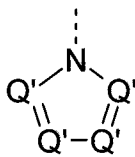
式 (Q-1)



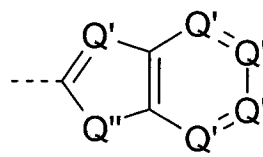
式 (Q-2)



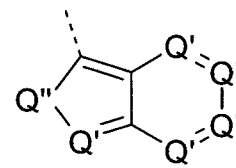
式 (Q-3)



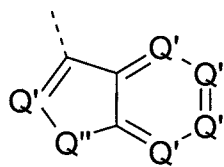
式 (Q-4)



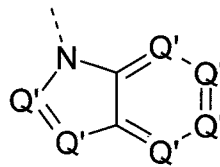
式 (Q-5)



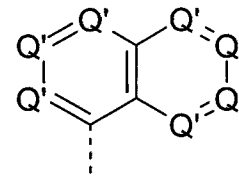
式 (Q-6)



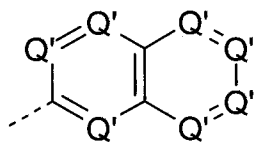
式 (Q-7)



式 (Q-8)



式 (Q-9)



式 (Q-10)

其中虛線鍵標示連接位置，

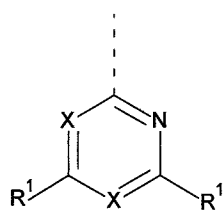
Q' 於每一情況為相同或不同且表示 CR¹或 N，且

Q'' 表示 NR¹、O或 S；

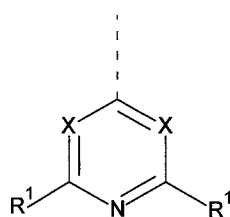
其中至少一個 Q' 為 N 且 / 或至少一個 Q'' 為 NR¹ 且

R¹ 為如申請專利範圍第 1 項所定義者。

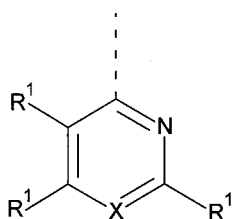
較佳地，式 (I) 中之 Q 或式 (QL) 中詳述之 Q¹ 基選自式 (Q-11)、(Q-12)、(Q-13)、(Q-14) 及 / 或 (Q-15) 之結構



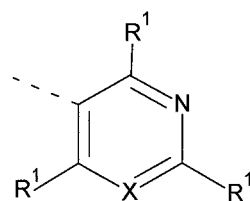
式 (Q-11)



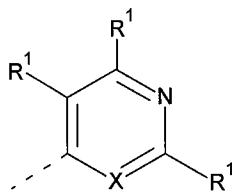
式 (Q-12)



式 (Q-13)



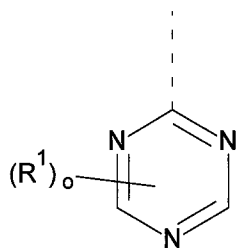
式 (Q-14)



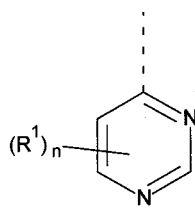
式 (Q-15)

其中符號 R^1 尤其具有式 (I) 提供之定義， X 為 N 或 CR^1 且虛線鍵標示連接位置，其中 X 較佳地表示氮原子。

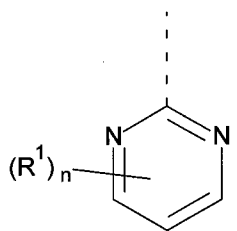
另一實施態樣中，式 (I) 中尤其詳述之 Q 基或式 (QL) 中尤其詳述之 Q^1 基可選自式 (Q-16)、(Q-17)、(Q-18)、(Q-19)、(Q-20)、(Q-21) 及 / 或 (Q-22) 之結構



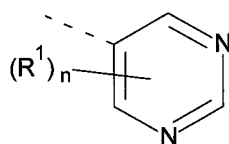
式 (Q-16)



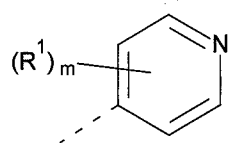
式 (Q-17)



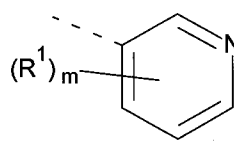
式 (Q-18)



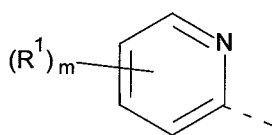
式 (Q-19)



式 (Q-20)



式 (Q-21)

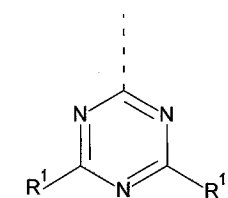


式 (Q-22)

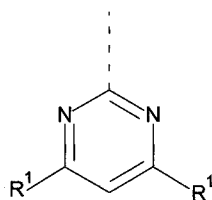
其中符號 R^1 尤其具有上文式 (I) 詳述之定義，虛線鍵標示連接位置且 m 為 0、1、2、3 或 4，較佳地為 0、1 或 2， n 為 0、1、2 或 3，較佳地為 0、1 或 2，且 o 為 0、1 或 2，較佳地為 1 或 2。此處較佳者為式 (Q-16)、(Q-17)、(Q-18) 及 (Q-19) 之結構。

另一實施態樣中，式 (I) 中尤其詳述之 Q 基或式 (QL) 中尤其詳述之 Q^1 基可選自式 (Q-23)、(Q-24) 及 / 或 (Q-25) 之結

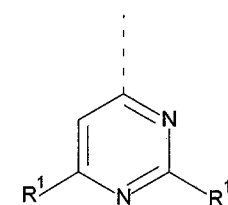
構



式 (Q-23)



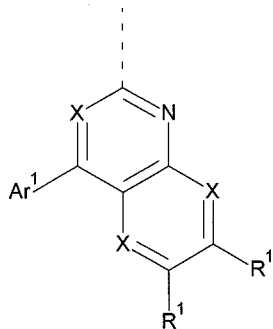
式 (Q-24)



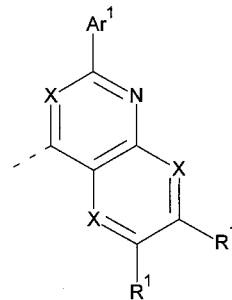
式 (Q-25)

其中符號 R¹ 尤其具有上文式 (I) 所示之定義，且虛線鍵標示連接位置。

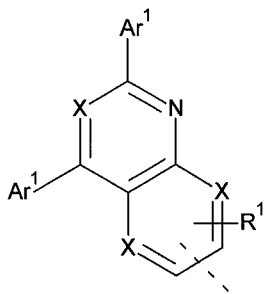
另一實施態樣中，式 (I) 中尤其詳述之 Q 基或式 (QL) 中尤其詳述之 Q¹ 基可選自式 (Q-26)、(Q-27)、(Q-28)、(Q-29) 及 / 或 (Q-30) 之結構



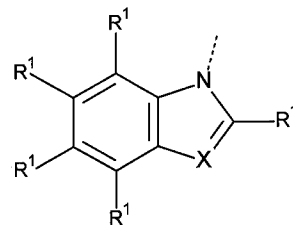
式 (Q-26)



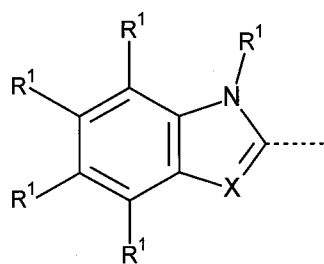
式 (Q-27)



式 (Q-28)



式 (Q-29)

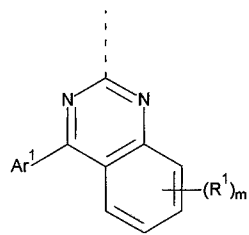


式 (Q-30)

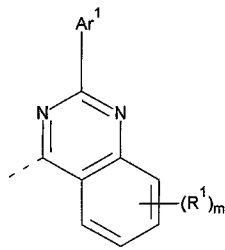
其中X為N或CR¹，符號R¹尤其具有上文式(I)提供之定義，虛線鍵標示連接位置，其中X較佳地表示氮原子且Ar¹表示具有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且於每一情況下可被一或多個R¹基取代之芳族或雜芳族環系統、具有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且可被一或多個R¹基取代之芳氧基、或具有5至60個芳族(較佳地5至40個芳族)環原子且於每一情況下可被一或多個R¹基取代之芳烷基，其中二或多個較佳地相鄰之R¹取代基隨意地可

以形成可被一或多個 R^2 基取代之單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統，較佳為單環或多環之脂族環系統。

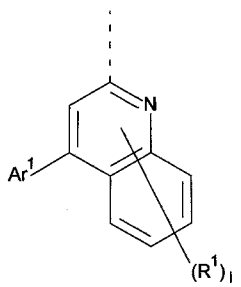
較佳地，式 (I) 中尤其詳述之 Q 基或式 (QL) 中尤其詳述之 Q^1 基可選自式 (Q-31)、(Q-32)、(Q-33)、(Q-34)、(Q-35)、(Q-36)、(Q-37)、(Q-38)、(Q-39)、(Q-40)、(Q-41)、(Q-42)、(Q-43) 及 / 或 (Q-44) 之結構



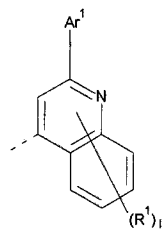
式 (Q-31)



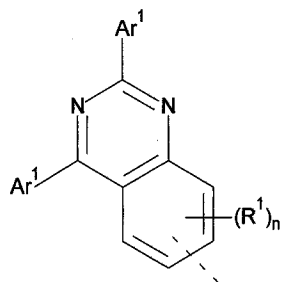
式 (Q-32)



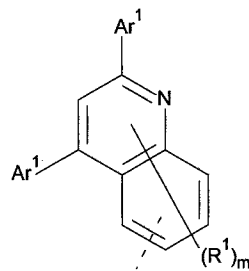
式 (Q-33)



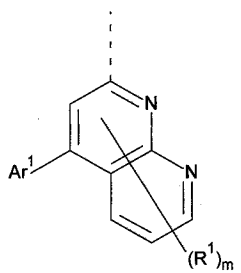
式 (Q-34)



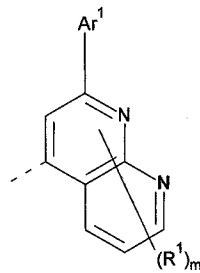
式 (Q-35)



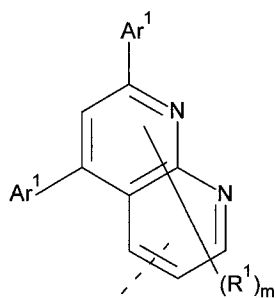
式 (Q-36)



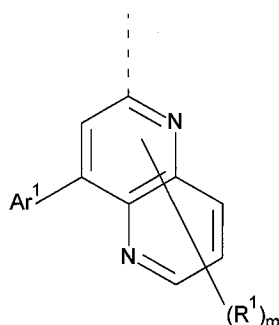
式 (Q-37)



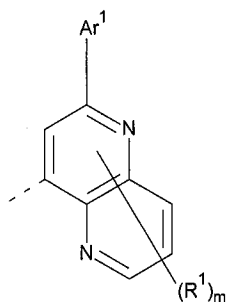
式 (Q-38)



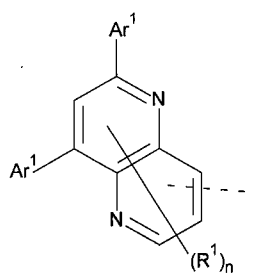
式 (Q-39)



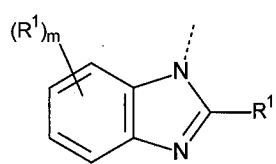
式 (Q-40)



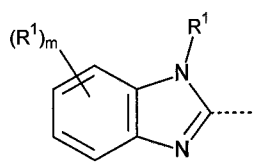
式 (Q-41)



式 (Q-42)



式 (Q-43)



式 (Q-44)

其中符號 Ar^1 尤其具有上文式 (Q-26)、(Q-27)、(Q-28)、(Q-29) 或 (Q-30) 所示之定義且 R^1 尤其具有上文式 (I) 所示之定義，虛線鍵表示連接位置且 m 為 0、1、2、3 或 4，較佳地為 0、1 或 2， n 為 0、1、2 或 3，較佳地為 0 或 1，且 l 為 0、1、2、3、4 或 5，較佳地為 0、1 或 2。

較佳地，符號 Ar^1 表示芳基或雜芳基，而使芳族或雜芳族環系統中之芳族或雜芳族基團直接鍵結，亦即經由芳族或雜芳族基團之原子直接鍵結至另一基團的個別原子，例如上示 (Q-26) 至 (Q-42) 基團之碳或氮原子。

本發明之另一較佳實施態樣中， Ar^1 於每一情況為相

同或不同且為具有6至24個芳族環原子、較佳地6至18個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，且更佳地為具有6至12個芳族環原子之芳族環系統或具有6至13個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之雜芳族環系統，其中 R^1 可具有上文提供之定義，尤其是於式(I)中提供之定義。

有利地，式(Q-26)至(Q-42)中之 Ar^1 表示具有6至12個芳族環原子且可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之芳族環系統，其中 R^1 可具有上文詳述之定義，尤其是式(I)詳述之定義。

較佳地，式(Q-1)至(Q-44)中之 R^1 基並不與該 R^1 基所鍵結之雜芳基的環原子形成稠環系統。此包括與可鍵結至 R^1 基上之可能 R^2 、 R^3 取代基形成稠環系統。

較佳地， R^2 基並不與式(Q-26)至(Q-42)中之該 R^2 基所鍵結之芳基或雜芳基 Ar^1 的環原子形成稠環系統。此包括與可鍵結至 R^2 基上之可能 R^3 取代基形成稠環系統。

較佳實施態樣中，可能的情況為，該拉電子 Q^1 基為具有5至60個、較佳地具有5至40個且更佳地具有6至24個芳族環原子、尤佳地具有6至18個芳族環原子，及具有一或多個拉電子取代基之芳族或雜芳族環系統。較佳地，該拉電子取代基具有不小於零之漢米特常數(Hammett constant, σ)。極佳地，該拉電子取代基之漢米特常數(Hammett constant)不小於0.2、更佳地不小於0.4且最佳地不小於0.55。有關於漢米特常數(Hammett constant)之定義

及測定的進一步細節為熟諳此藝者由有機化學基礎中詳知且揭示於標準教科書中。供本發明目的之漢米特常數 (Hammett constant) 及其測定為如 Jerry March, *Advanced Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, Fourth Edition, 1992第9章中所定義者。

具有一或多個拉電子取代基之適當芳族或雜芳族環系統的實例選自由以下所組成之群組：苯基、鄰-、間-或對-聯苯基、聯三苯基、尤其是支鏈聯三苯基、聯四苯基、尤其是支鏈聯四苯基、1-、2-、3-或4-萸基、1-、2-、3-或4-螺雙萸基、吡啶基、嘧啶基、1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基、1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基、茈基、三吡基、咪唑基、苯并咪唑基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、1-或2-萘基、蔥基，各者分別可被一或多個 R^2 基取代，提供之特別佳者為螺雙萸、萸、二苯并呋喃、二苯并噻吩、蔥、菲、伸聯三苯基。所述基團當中，以具有一或多個拉電子取代基之苯基尤佳。

較佳之拉電子取代基包括 F、氟化烷基、 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 、 $C(=O)OR^1$ 、 $C(=O)N(R^1)_2$ 、 $B(OR^1)_2$ 、 NO_2 、 CHO 、 $C(=O)R^1$ 、 $P(=O)(R^1)_2$ 、 $S(=O)R^1$ 、 $S(=O)_2R^1$ 及 / 或 CN ，提供之較佳者為 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 、 $C(=O)OR^1$ 、 $C(=O)N(R^1)_2$ 、 NO_2 、 CHO 、 $C(=O)R^1$ 、 $S(=O)R^1$ 、 $S(=O)_2R^1$ 及 / 或 CN ，且特別考慮的為 CN 、F、氟化烷基、 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 。拉電子 Q^1 基較佳地可具有二或多個拉電子取代基，其中這些取代基可相同或不同。

較佳地，符號 Ar^a 及 / 或 Ar^b 表示芳基或雜芳基，而使芳族或雜芳族環系統中之芳族或雜芳族基團直接鍵結至其他基團的個別原子，亦即經由芳族或雜芳族基團之原子直接鍵結。

本發明之另一較佳實施態樣中，符號 Ar^a 及 / 或 Ar^b 為相同或不同且為具有 6 至 24 個芳族環原子、較佳地 6 至 18 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，且更佳地為具有 6 至 12 個芳族環原子之芳族環系統或具有 6 至 13 個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之雜芳族環系統，其中 R^1 可具有上文提供之定義，尤其是於式 (I) 中提供之定義。

有利地，式 (I) 中之符號 Ar^a 及 / 或 Ar^b 各自獨立地表示具有 6 至 12 個芳族環原子且可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之芳族環系統，其中 R^1 可具有上文詳述之定義，尤其是式 (I) 詳述之定義。尤佳地，式 (I) 中之 Ar^a 及 / 或 Ar^b 各自獨立地表示可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之苯基環。

尤佳地，式 (I) 中之 Ar^a 及 / 或 Ar^b 基不同於符號 HL 之供體基團。此外可能的情況為，式 (I) 中之 Ar^a 基不同於符號 HL 之供體基團。另外可能的情況為，式 (I) 中之 Ar^b 基不同於符號 HL 之供體基團。特別佳地，式 (I) 中之 Ar^a 及 Ar^b 基均不同於符號 HL 之供體基團。

尤佳地，式 (I) 中之 Ar^a 及 / 或 Ar^b 基不同於符號 Q 之受體基團。此外可能的情況為，式 (I) 中之 Ar^a 基不同於符號 Q 之

受體基團。另外可能的情況為，式(I)中之 Ar^b 基不同於符號Q之受體基團。特別佳地，式(I)中之 Ar^a 及 Ar^b 基均不同於符號Q之受體基團。

較佳地，式(I)中之 R^a 、 R^b 取代基選自由以下所組成之群組： F ； CN ； $\text{N}(\text{Ar}^1)_2$ ； $\text{C}(=\text{O})\text{Ar}^1$ ； $\text{P}(=\text{O})(\text{Ar}^1)_2$ ；具有1至10個碳原子之直鏈烷基或烷氧基或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有2至10個碳原子之烯基，各者分別可被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可被 O 替代且其中一或多個氫原子可被 D 或 F 替代；具有5至40個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個 R^2 基取代但較佳地未經取代之芳族或雜芳族環系統；具有5至25個芳族環原子且可被一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，鍵結至同一碳原子或至相鄰碳原子的兩個 R^1 取代基隨意地可以形成可被一或多個 R^1 基取代之單環或多環之脂族、芳族或雜芳族環系統；其中 Ar^1 可具有式(H-1)至(H-26)或/及式(Q-26)、(Q-27)、(Q-28)、(Q-29)或(Q-30)所示之定義，其中該處所示之較佳者亦可適用於此定義中。較佳地， Ar^1 於每一情況為相同或不同且表示具有5至24個且較佳地5至12個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個 R^2 取代但較佳地未經取代之芳基或雜芳基。

較佳地，符號 R^a 及/或 R^b 表示芳基或雜芳基，而使芳族或雜芳族環系統中之芳族或雜芳族基團直接鍵結至其他基團的個別原子，亦即經由芳族或雜芳族基團之原子直接鍵結。

本發明之另一較佳實施態樣中，符號 R^a 及 / 或 R^b 於每一情況下獨立地為具有 5 至 24 個芳族環原子、較佳地 6 至 18 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，且更佳地為具有 6 至 12 個芳族環原子之芳族環系統或具有 5 至 13 個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之雜芳族環系統，其中 R^1 可具有上文提供之定義，尤其是於式 (I) 中提供之定義。

有利地，式 (I) 中之符號 R^a 及 / 或 R^b 各自獨立地表示具有 6 至 12 個芳族環原子且可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之芳族環系統，其中 R^1 可具有上文詳述之定義，尤其是式 (I) 詳述之定義。尤佳地，式 (I) 中之 Ar^a 及 / 或 Ar^b 各自獨立地表示可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之苯基環。

尤佳地，式 (I) 中之符號 R^a 及 / 或 R^b 不同於符號 HL 之供體基團。此外可能的情況為，式 (I) 中之 R^a 基不同於符號 HL 之供體基團。另外可能的情況為，式 (I) 中之 R^b 基不同於符號 HL 之供體基團。特別佳地，式 (I) 中之 R^a 及 R^b 基均不同於符號 HL 之供體基團。

尤佳地，式 (I) 中之 R^a 及 / 或 R^b 基不同於符號 Q 之受體基團。此外可能的情況為，式 (I) 中之 R^a 基不同於符號 Q 之受體基團。另外可能的情況為，式 (I) 中之 R^b 基不同於符號 Q 之受體基團。特別佳地，式 (I) 中之 R^a 及 R^b 基均不同於符號 Q 之受體基團。

更佳地，式 (I) 中之符號 Ar^a 、 Ar^b 、 R^a 及 R^b 各自獨立地

為具有較佳地 5 至 24 個芳族環原子、更佳地 6 至 18 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，各者分別可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代。更佳地，式 (I) 中之符號 Ar^a 、 Ar^b 、 R^a 及 R^b 各自獨立地為具有 6 至 12 個芳族環原子之芳族環系統或具有 5 至 13 個芳族環原子之雜芳族環系統，各者分別可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代，其中 R^1 可具有上文詳述之定義，尤其是式 (I) 中詳述之定義。尤佳地，式 (I) 中之符號 Ar^a 、 Ar^b 、 R^a 及 R^b 各自表示可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代之苯基環。

此處式 (I) 中之符號 Ar^a 、 Ar^b 、 R^a 及 / 或 R^b 的二或多者可以藉由閉環而連結，其中該連結更佳地可藉由式 (I) 中之個別 Ar^a 、 Ar^b 、 R^a 及 / 或 R^b 基之間的鍵達成。

當 X 為 CR^1 時或當芳族及 / 或雜芳族基團被 R^1 取代基取代時，這些 R^1 取代基較佳地選自由以下所組成之群組： H ； D ； F ； CN ； $N(Ar^1)_2$ ； $C(=O)Ar^1$ ； $P(=O)(Ar^1)_2$ ；具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 10 個碳原子之烯基，各者分別可被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可被 O 替代且其中一或多個氫原子可被 D 或 F 替代；具有 5 至 24 個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個 R^2 基取代但較佳地未經取代之芳族或雜芳族環系統；具有 5 至 25 個芳族環原子且可被一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，鍵結至同一碳原子或至相鄰碳原子的兩個 R^1 取代基隨意地可以形成可被一或多個 R^1 基取代之單

環或多環之脂族、芳族或雜芳族環系統；其中 Ar^1 可具有式 (H-1) 至 (H-26) 或 / 及式 (Q-26)、(Q-27)、(Q-28)、(Q-29) 或 (Q-30) 所示之定義，其中該處所示之較佳者亦可適用於此定義中。

更佳地，這些 R^1 取代基選自由以下所組成之群組： H ； D ； F ； CN ； $\text{N}(\text{Ar}^1)_2$ ；具有 1 至 8 個碳原子較佳地具有 1、2、3 或 4 個碳原子之直鏈烷基、或具有 3 至 8 個碳原子較佳地具有 3 或 4 個碳原子之支鏈或環狀烷基、或具有 2 至 8 個碳原子較佳地具有 2、3 或 4 個碳原子之烯基，各者分別可被一或多個 R^2 基取代但較佳地未經取代；或具有 6 至 24 個芳族環原子、較佳地 6 至 18 個芳族環原子、更佳地 6 至 13 個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個非芳族 R^1 基取代但較佳地未經取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至同一碳原子或至相鄰碳原子的兩個 R^1 取代基隨意地可以形成可被一或多個 R^2 基取代但較佳地未經取代之單環或多環脂族環系統，其中 Ar^1 可具有上文所示之定義。

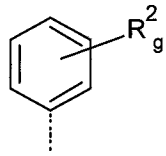
最佳地， R^1 取代基選自由以下所組成之群組： H 及具有 6 至 18 個芳族環原子較佳地 6 至 13 個芳族環原子且可於每一情況下被一或多個非芳族 R^2 基取代但較佳地未經取代之芳族或雜芳族環系統。

較佳地， R^1 基並不與該 R^1 基所鍵結之芳基或雜芳基的環原子形成稠環系統。此包括與可鍵結至 R^1 基上之可能 R^2 、 R^3 取代基形成稠環系統。

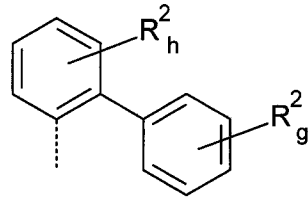
可能較佳的情況為式 (I)、(H-1) 至 (H-26)、(LAr-1)、

(LAr-2) 及 / 或 (Q-1) 至 (Q-44) 結構中之 Ar^a 、 Ar^b 、 Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 、 Ar^4 、 R^a 、 R^b 及 / 或 R^1 基選自由以下所組成之群組：苯基、鄰-、間-或對-聯苯基、聯三苯基、尤其是支鏈聯三苯基、聯四苯基、尤其是支鏈聯四苯基、1-、2-、3-或4-萸基、1-、2-、3-或4-螺雙萸基、吡啶基、嘧啶基、1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基、1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基、茚基、三吡基、咪唑基、苯并咪唑基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、1-、2-、3-或4-吡啶基、1-或2-萘基、蔥基，較佳地為9-蔥基、菲基及 / 或伸聯三苯基，各者分別可被一或多個 R^2 基取代但較佳地未經取代，提供之特別佳者為苯基、螺雙萸、萸、二苯并呋喃、二苯并噻吩、蔥、菲、伸聯三苯基。

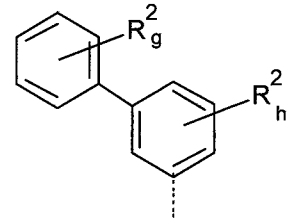
另外可能的情況為在式 (I)、(H-1) 至 (H-26)、(LAr-1)、(LAr-2) 及 / 或 (Q-1) 至 (Q-44) 之結構中，至少一個 Ar^a 、 Ar^b 、 Ar^1 、 Ar^3 、 Ar^4 、 R^a 、 R^b 及 / 或 R^1 基包含基團且較佳地為選自式 (R¹-1) 至 (R¹-86) 之基團：



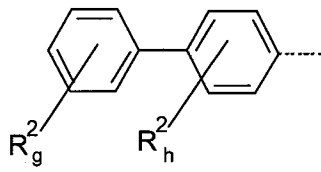
式 (R¹-1)



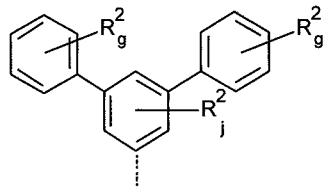
式 (R¹-2)



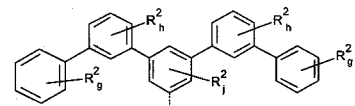
式 (R¹-3)



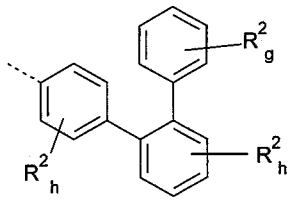
式 (R¹-4)



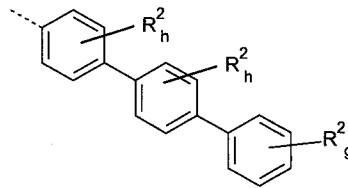
式 (R¹-5)



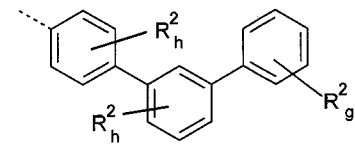
式 (R¹-6)



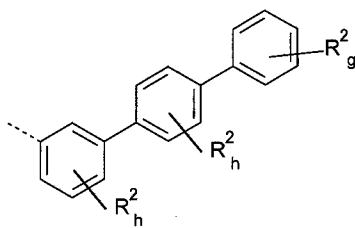
式 (R¹-7)



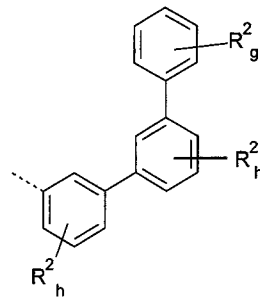
式 (R¹-8)



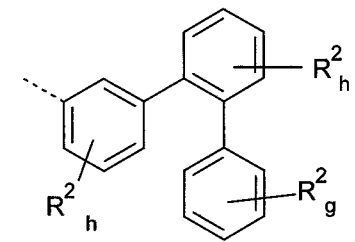
式 (R¹-9)



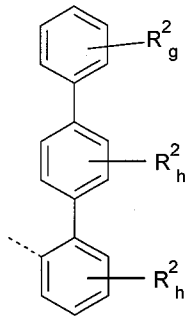
式 (R¹-10)



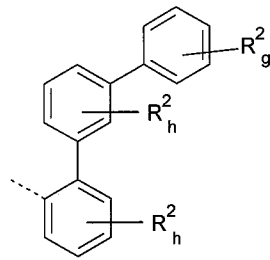
式 (R¹-11)



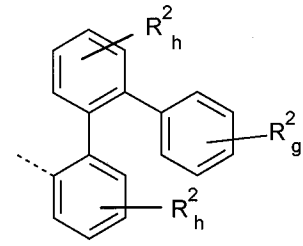
式 (R¹-12)



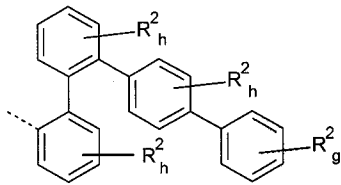
式 (R¹-13)



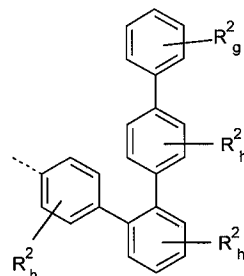
式 (R¹-14)



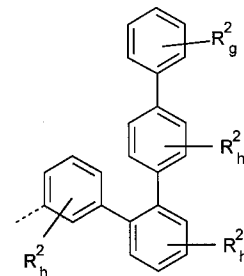
式 (R¹-15)



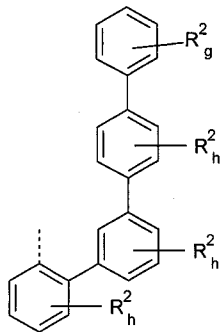
式 (R¹-16)



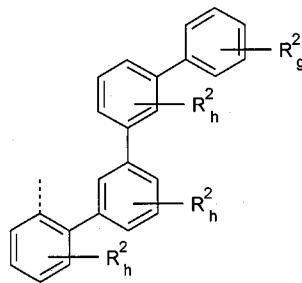
式 (R¹-17)



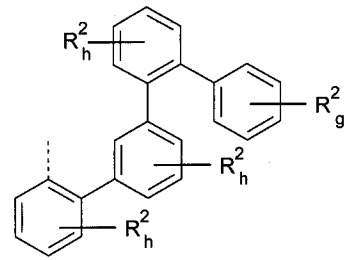
式 (R¹-18)



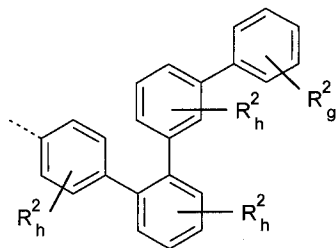
式 (R¹-19)



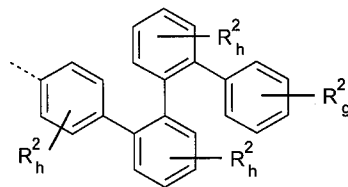
式 (R¹-20)



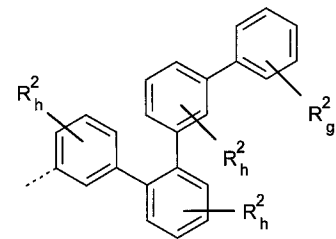
式 (R¹-21)



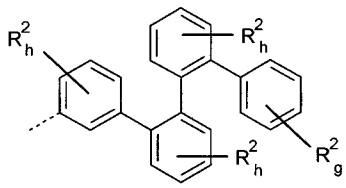
式 (R¹-22)



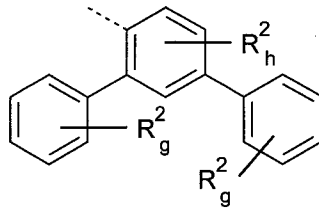
式 (R¹-23)



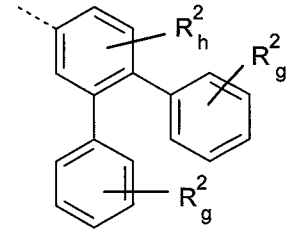
式 (R¹-24)



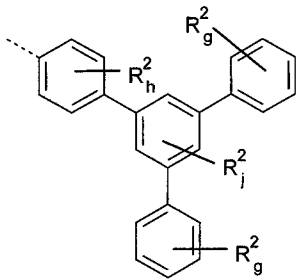
式 (R¹-25)



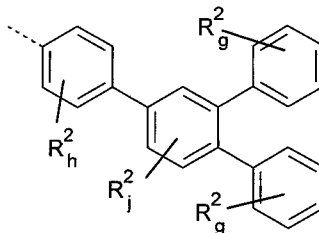
式 (R¹-26)



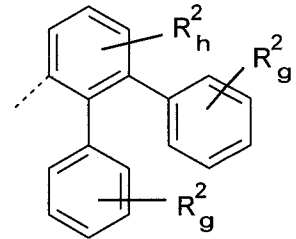
式 (R¹-27)



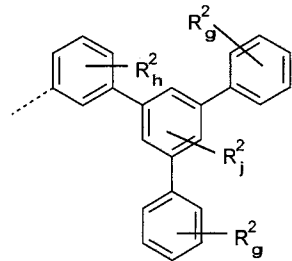
式 (R¹-28)



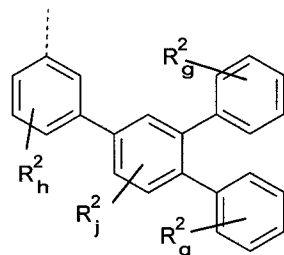
式 (R¹-29)



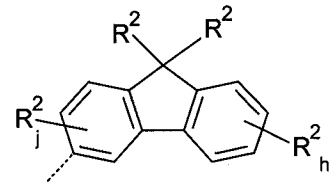
式 (R¹-30)



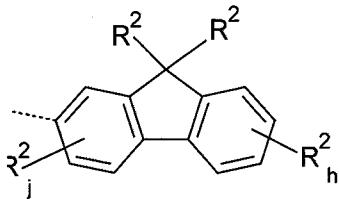
式 (R¹-31)



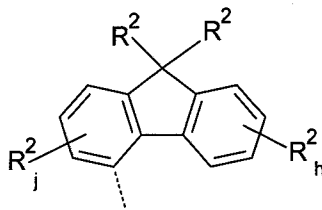
式 (R¹-32)



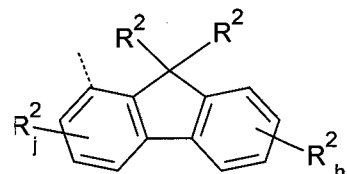
式 (R¹-33)



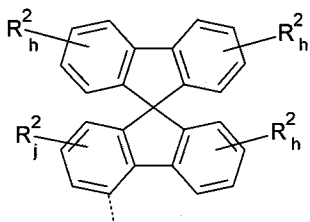
式 (R¹-34)



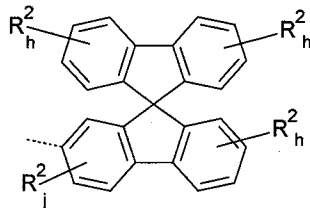
式 (R¹-35)



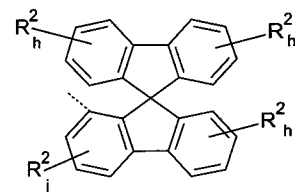
式 (R¹-36)



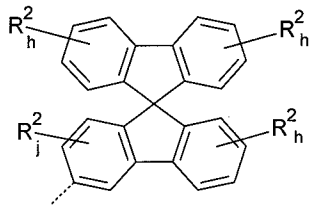
式 (R¹-37)



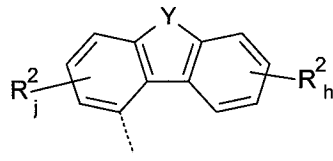
式 (R¹-38)



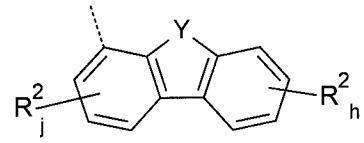
式 (R¹-39)



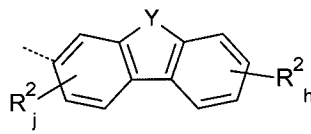
式 (R¹-40)



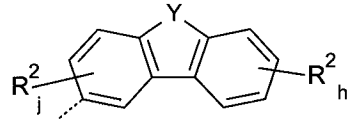
式 (R¹-41)



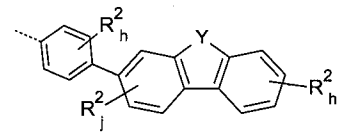
式 (R¹-42)



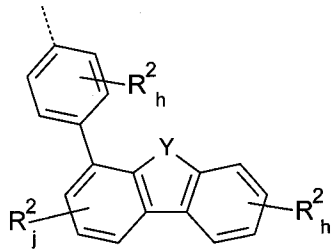
式 (R¹-43)



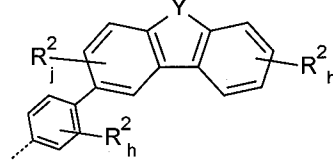
式 (R¹-44)



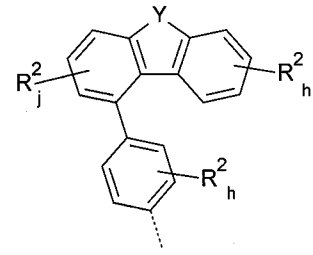
式 (R¹-45)



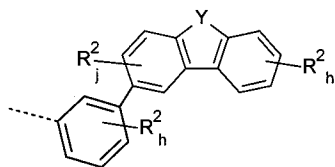
式 (R¹-46)



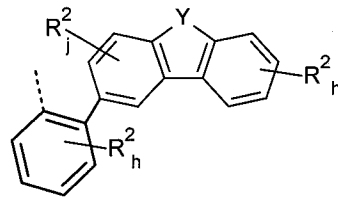
式 (R¹-47)



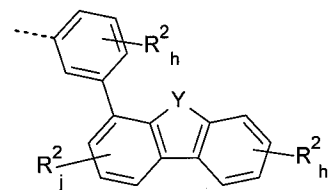
式 (R¹-48)



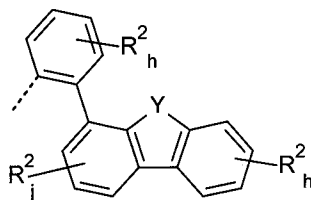
式 (R¹-49)



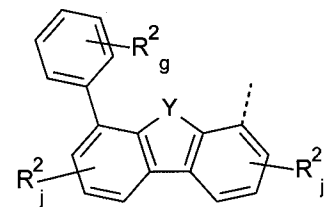
式 (R¹-50)



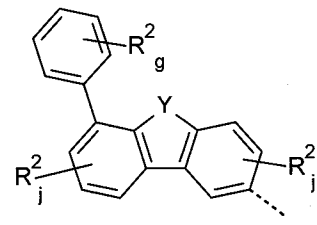
式 (R¹-51)



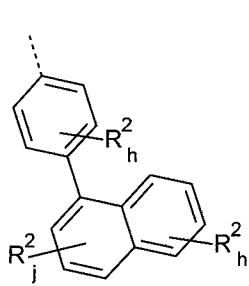
式 (R¹-52)



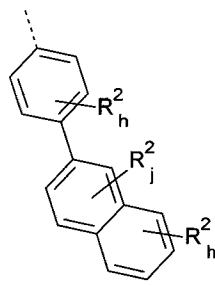
式 (R¹-53)



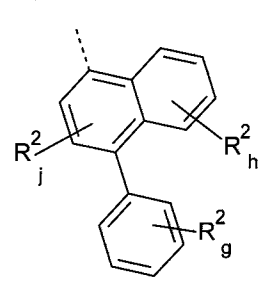
式 (R¹-54)



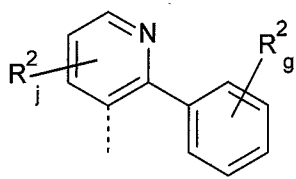
式 (R¹-55)



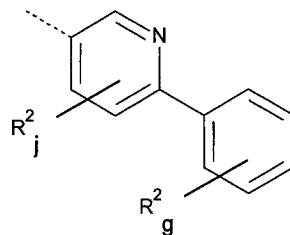
式 (R¹-56)



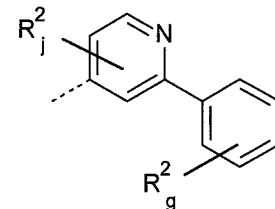
式 (R¹-57)



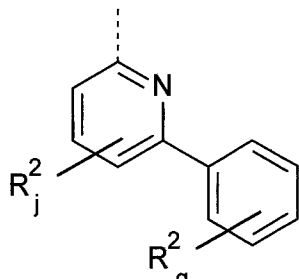
式 (R¹-58)



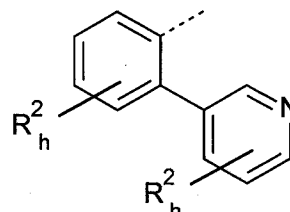
式 (R¹-59)



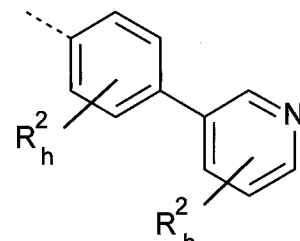
式 (R¹-60)



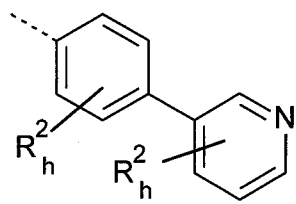
式 (R¹-61)



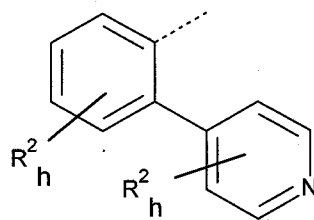
式 (R¹-62)



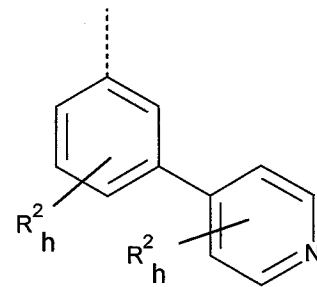
式 (R¹-63)



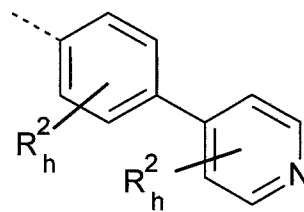
式 (R¹-64)



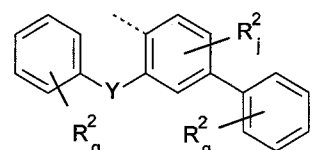
式 (R¹-65)



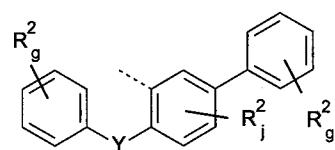
式 (R¹-66)



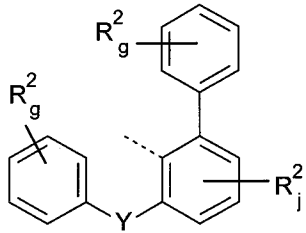
式 (R¹-67)



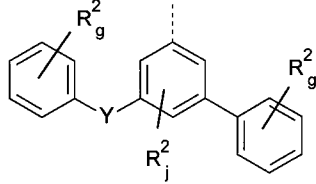
式 (R¹-68)



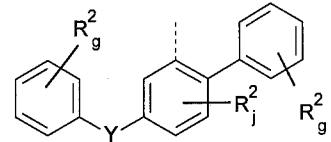
式 (R¹-69)



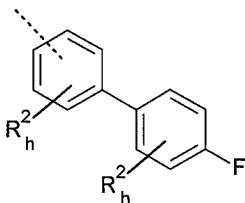
式 (R¹-70)



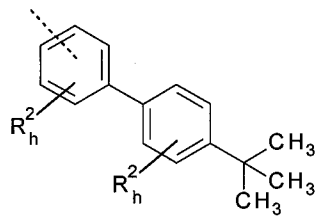
式 (R¹-71)



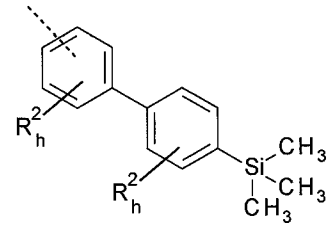
式 (R¹-72)



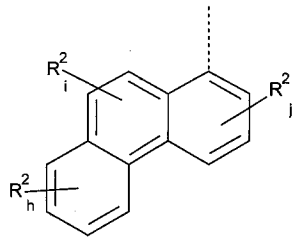
式 (R¹-73)



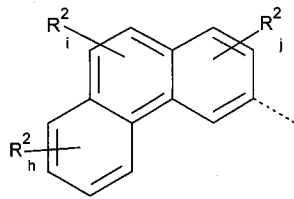
式 (R¹-74)



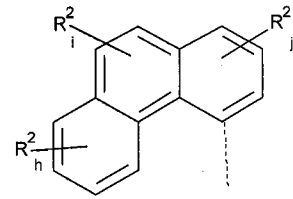
式 (R¹-75)



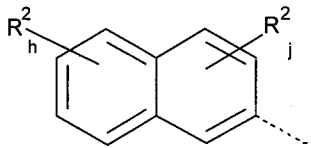
式 (R¹-76)



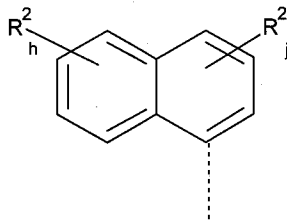
式 (R¹-77)



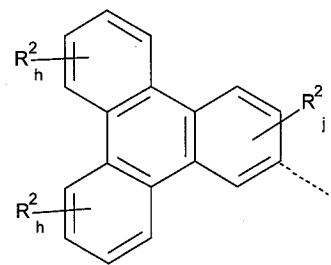
式 (R¹-78)



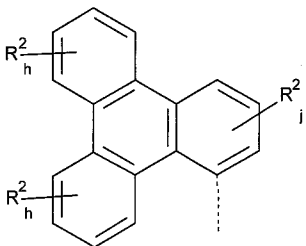
式 (R¹-79)



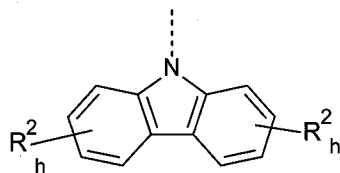
式 (R¹-80)



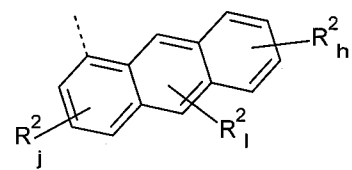
式 (R¹-81)



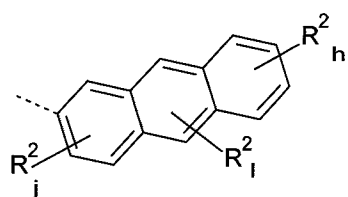
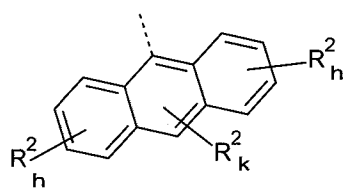
式 (R¹-82)



式 (R¹-83)



式 (R¹-84)

式(R¹-85)式(R¹-86)

其中所用之符號如下：

Y 為 O、S 或 NR²，較佳地為 O 或 S；

i 於每一情況獨立地為 0、1 或 2；

j 於每一情況獨立地為 0、1、2 或 3；

h 於每一情況獨立地為 0、1、2、3 或 4；

g 於每一情況獨立地為 0、1、2、3、4 或 5；

R² 可具有上文提供之定義，尤其是式 (I) 提供之定義，且虛線鍵標示連接位置。此處提供之較佳者為式 R1-1 至 R1-54 基團且提供之特別佳者為式 R1-1、R1-3、R1-5、R1-6、R1-15、R1-29、R1-34、R1-35、R1-45、R1-46、R1-47 及 / 或 R1-48 基團。

可能較佳的情況為，式 (R¹-1) 至 (R¹-86) 結構中之指標 i、j、h 及 g 的總數於每一情況下不大於 3，較佳地不大於 2 且更佳地不大於 1。

較佳地，式 (R¹-1) 至 (R¹-86) 中之 R² 基並不與該 R² 基所鍵結之芳基或雜芳基的環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，且較佳地並不形成任何稠環系統。此包括與可鍵結至 R² 基上之可能 R³ 取代基形成稠環系統。

較佳地，L¹ 基可與 Q¹ 基及與式 (I) 或 (QL) 之該 L¹ 基所鍵結之芳族基團一起形成貫穿共軛 (through-conjugation)。

一旦在相鄰芳族或雜芳族環之間形成直接鍵，則芳族或雜芳族系統之貫穿共軛形成。上述共軛基團之間例如經由硫、氮或氧原子或羰基的其他鍵對共軛作用是無害的。在萸系統的情況下，兩個芳族環直接鍵結，其中位置9中之 sp^3 -混成軌域碳原子可避免這些環的耦合，但共軛現象是可能的，因為位置9中之此 sp^3 -混成軌域碳原子未必位在 Q^1 基與式(I)或(QL)之 L^1 基所鍵結之芳族基團之間。對照之下，在第二個螺雙萸結構的情況下，如果 Q^1 基與式(I)之芳族基團之間的鍵係經由螺雙萸結構中之同一苯基或者經由螺雙萸結構中彼此直接鍵結且於一平面的苯基，則形成貫穿共軛。如果 Q^1 基與式(I)之芳族基團之間的鍵係經由第二螺雙萸結構(經由位置9之 sp^3 -混成軌域碳原子鍵結)中之不同苯基，則共軛被中斷。較佳地， Ar^2 基(例如於式(H-1)至(H-26)中)亦與該 Ar^2 基所鍵結之基團形成貫穿共軛。此外，式(LAr-1)及/或(LAr-2)之連接結構與該式(LAr-1)及/或(LAr-2)之連接結構所鍵結之基團形成貫穿共軛。

本發明之另一較佳實施態樣中， L^1 或 Ar^2 基為具有5至14個芳族或雜芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，較佳地為具有6至12個碳原子之芳族環系統，且其可被一或多個 R^1 基取代但較佳地未經取代，其中 R^1 可具有上文提供之定義，尤其是式(I)提供之定義。更佳地， L^1 或 Ar^2 基為具有6至10個芳族環原子之芳族環系統或具有6至13個雜芳族環原子之雜芳族環系統，各者分別可被一或多個 R^2 基取代但較佳地未經取代，其中 R^2 可具有上文提供之定義，尤其是

式(I)提供之定義。

進一步較佳地，於式(QL)結構中尤其詳述之符號 L^1 或於式(H-1)至(H-26)中詳述之 Ar^2 基於每一情況為相同或不同且為一鍵或具有5至24個環原子、較佳地6至13個環原子、更佳地6至10個環原子之芳基或雜芳基，而使芳族或雜芳族環系統中之芳族或雜芳族基團直接鍵結至其他基團的個別原子，亦即經由芳族或雜芳族基團之原子直接鍵結。

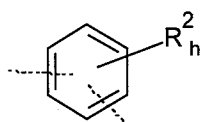
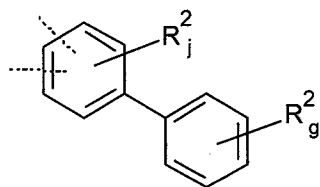
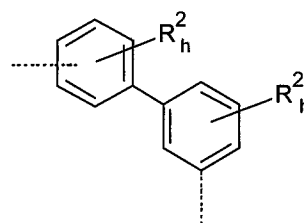
此外可能的情況為，於式(QL)結構中尤其詳述之符號 L^1 或於式(H-1)至(H-26)中詳述之 Ar^2 基包含具有不多於兩個稠合芳族及/或雜芳族環之芳族環系統，較佳地不具有任何稠合芳族或雜芳族環系統。因此，萘基結構優於蔥結構。此外，萸基、螺雙萸基、二苯并呋喃基及/或二苯并噻吩基結構優於萘基結構。

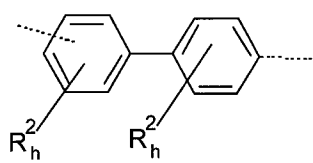
提供之特別佳者為無稠合之結構，例如苯基、聯苯基、聯三苯基及/或聯四苯基結構。

適當芳族或雜芳族環系統 L^1 或 Ar^2 之實例選自由以下所組成之群組：苯基、鄰-、間-或對-聯苯基、聯三苯基、尤其是支鏈聯三苯基、聯四苯基、尤其是支鏈聯四苯基、1-、2-、3-或4-萸基、1-、2-、3-或4-螺雙萸基、吡啶基、嘧啶基、1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基、1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基、芘基、三吡基、咪唑基、苯并咪唑基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、1-、2-、3-或4-呋唑基、1-或2-萘基、蔥基，較佳地為9-蔥基、菲基及/或伸聯三苯基，各

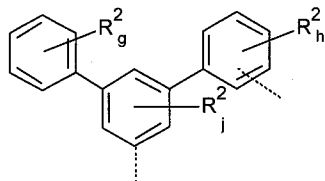
者分別可被一或多個 R^2 基取代但較佳地未經取代，提供之特別佳者為苯基、螺雙萸、萸、二苯并呋喃、二苯并噻吩、蔥、菲、伸聯三苯基。

另外可能的情況為，式 (H-1) 至 (H-26) 結構中之 Ar^2 基及 / 或式 (QL) 中之 L^1 基為一鍵或為選自式 (L¹-1) 至 (L¹-108) 之基團，或者式 (LAr-1) 或 (LAr-2) 之結構表示一鍵或形成選自式 (L¹-1) 至 (L¹-108) 之基團

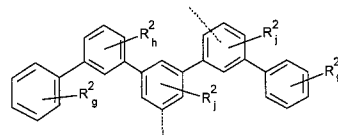
式 (L¹-1)式 (L¹-2)式 (L¹-3)



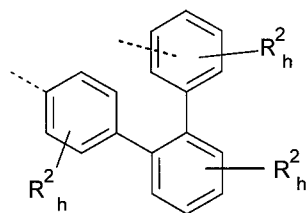
式 (L¹-4)



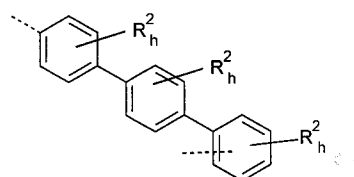
式 (L¹-5)



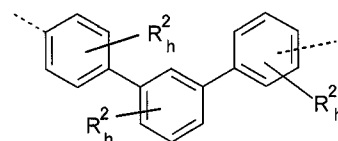
式 (L¹-6)



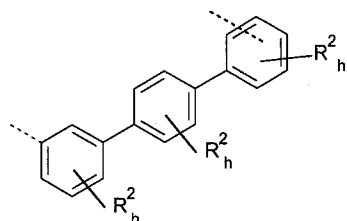
式 (L¹-7)



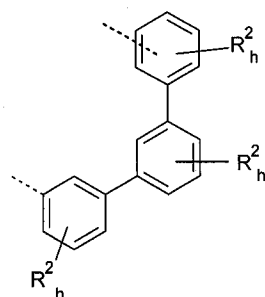
式 (L¹-8)



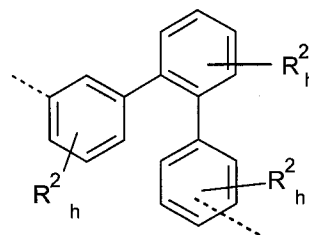
式 (L¹-9)



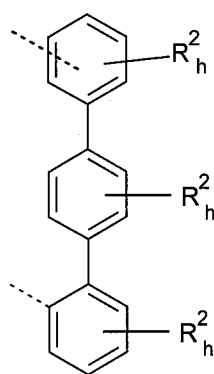
式 (L¹-10)



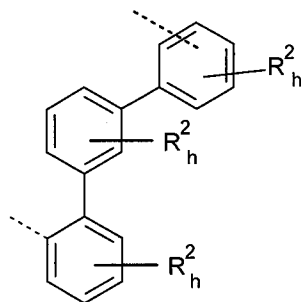
式 (L¹-11)



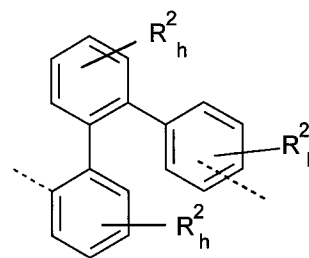
式 (L¹-12)



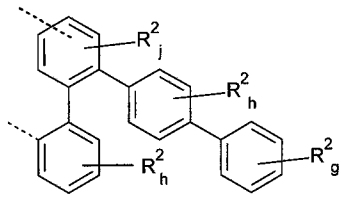
式 (L¹-13)



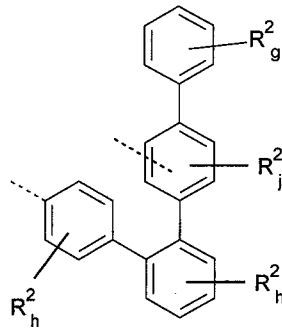
式 (L¹-14)



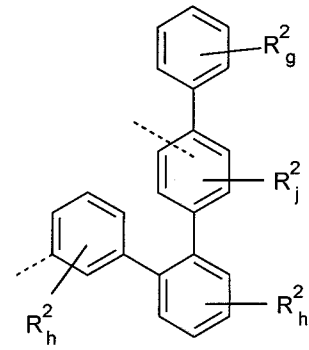
式 (L¹-15)



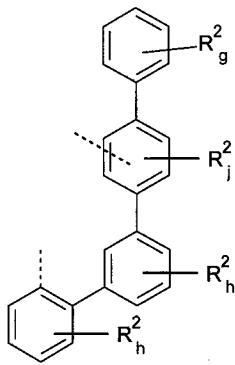
式 (L¹-16)



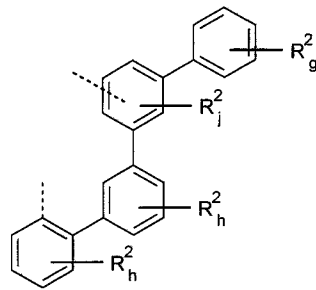
式 (L¹-17)



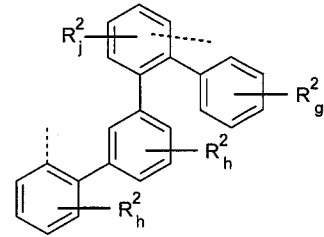
式 (L¹-18)



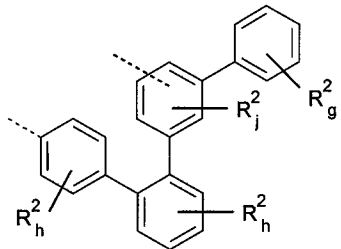
式 (L¹-19)



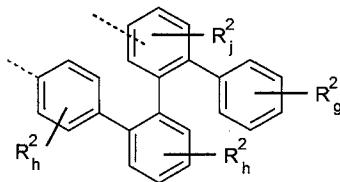
式 (L¹-20)



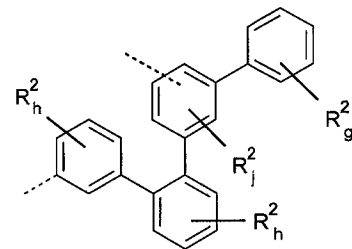
式 (L¹-21)



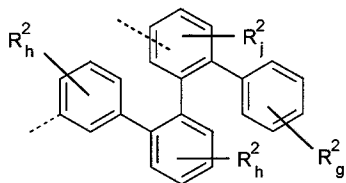
式 (L¹-22)



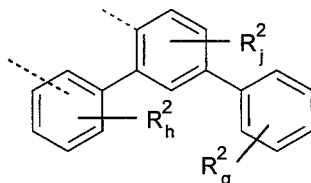
式 (L¹-23)



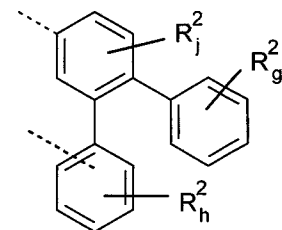
式 (L¹-24)



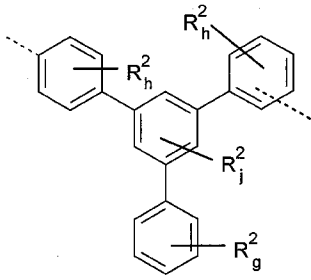
式 (L¹-25)



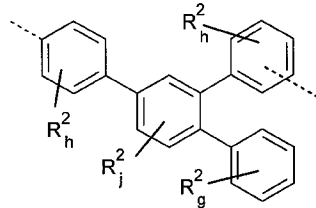
式 (L¹-26)



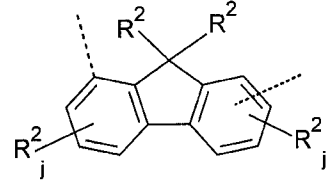
式 (L¹-27)



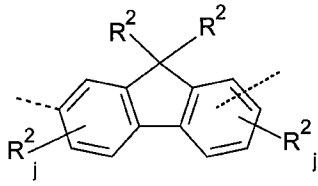
式 (L¹-28)



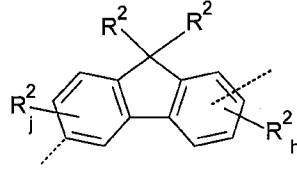
式 (L¹-29)



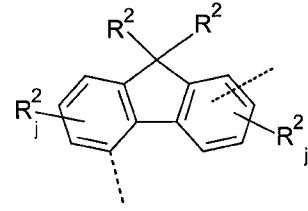
式 (L¹-30)



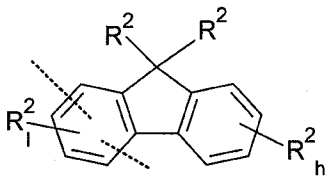
式 (L¹-31)



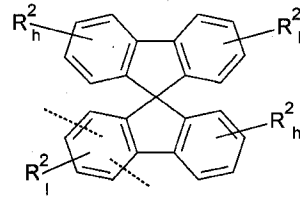
式 (L¹-32)



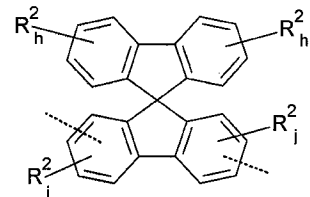
式 (L¹-33)



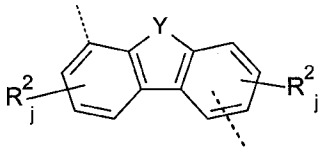
式 (L¹-34)



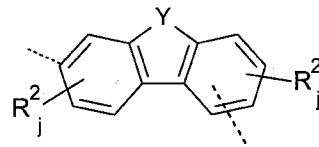
式 (L¹-35)



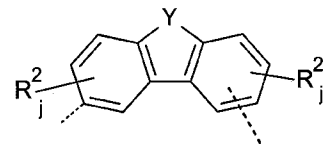
式 (L¹-36)



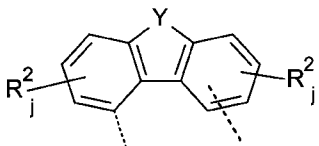
式 (L¹-37)



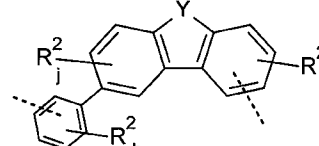
式 (L¹-38)



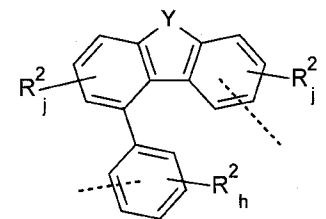
式 (L¹-39)



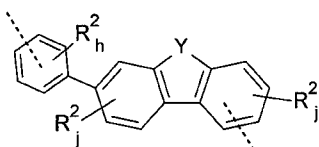
式 (L¹-40)



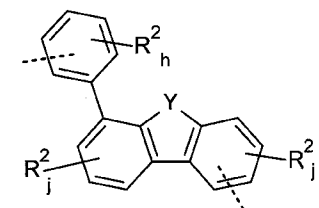
式 (L¹-41)



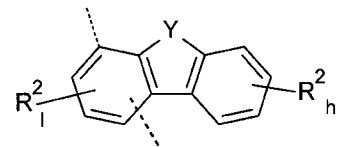
式 (L¹-42)



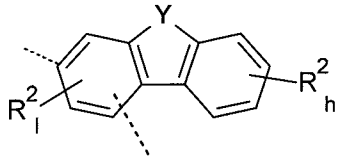
式 (L¹-43)



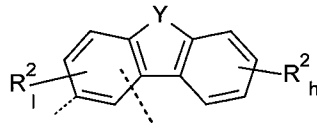
式 (L¹-44)



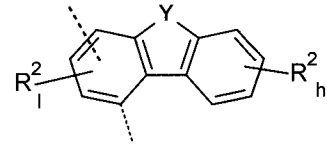
式 (L¹-45)



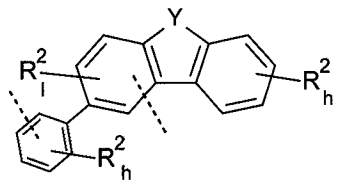
式 (L¹-46)



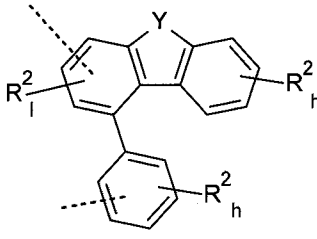
式 (L¹-47)



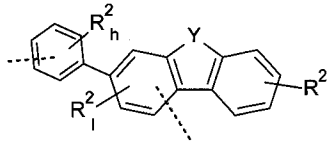
式 (L¹-48)



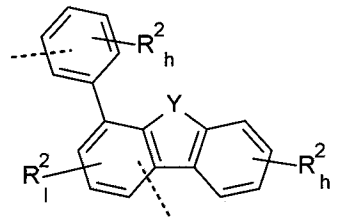
式 (L¹-49)



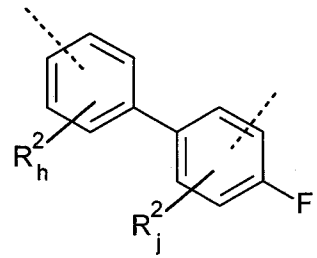
式 (L¹-50)



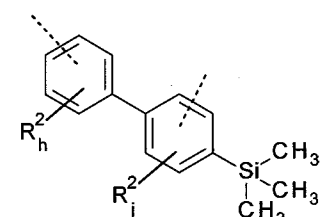
式 (L¹-51)



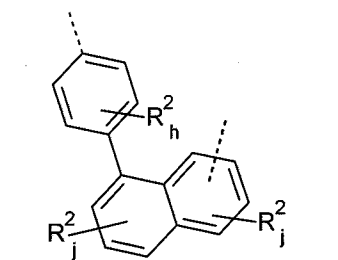
式 (L¹-52)



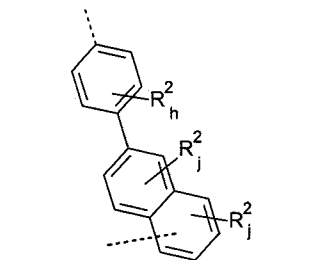
式 (L¹-53)



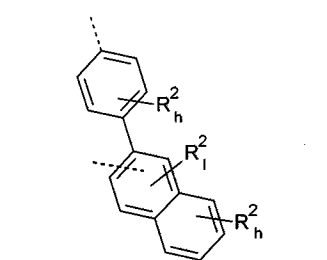
式 (L¹-54)



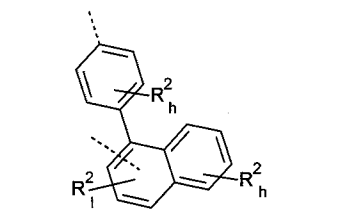
式 (L¹-55)



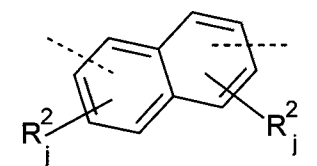
式 (L¹-56)



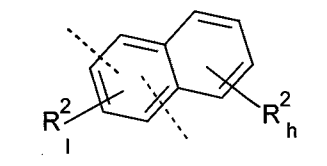
式 (L¹-57)



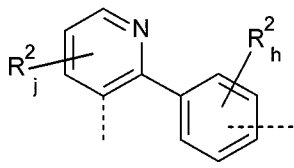
式 (L¹-58)



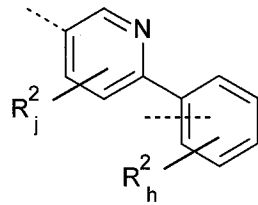
式 (L¹-59)



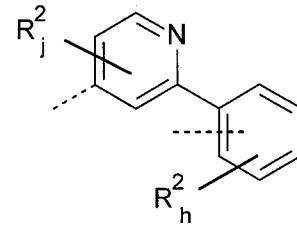
式 (L¹-60)



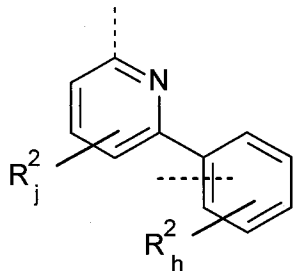
式 (L¹-61)



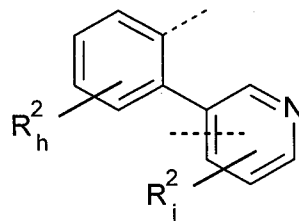
式 (L¹-62)



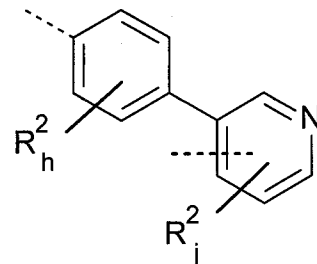
式 (L¹-63)



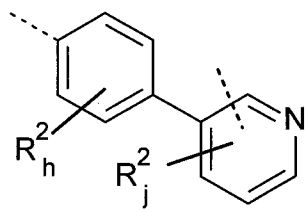
式 (L¹-64)



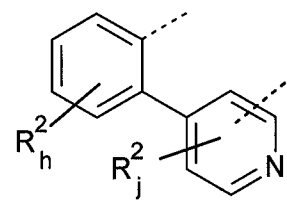
式 (L¹-65)



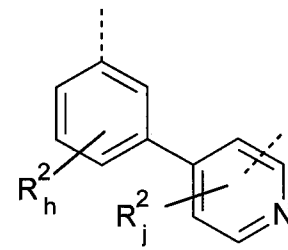
式 (L¹-66)



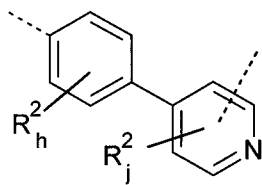
式 (L¹-67)



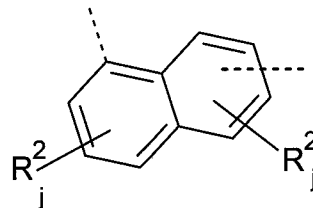
式 (L¹-68)



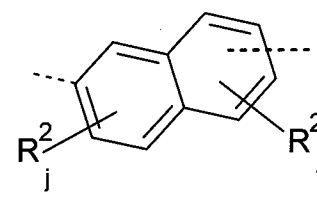
式 (L¹-69)



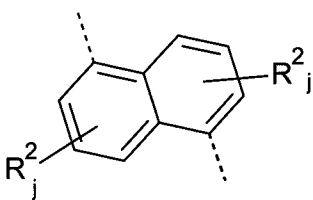
式 (L¹-70)



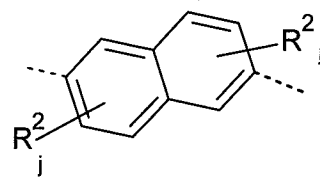
式 (L¹-71)



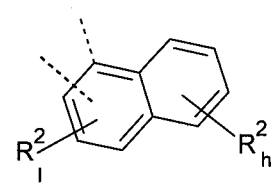
式 (L¹-72)



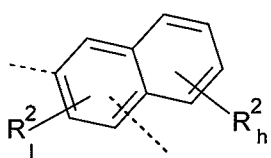
式 (L¹-73)



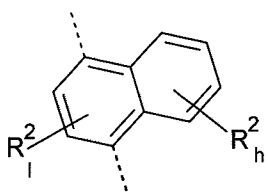
式 (L¹-74)



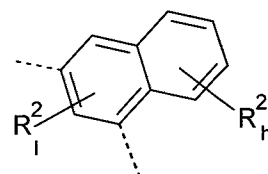
式 (L¹-75)



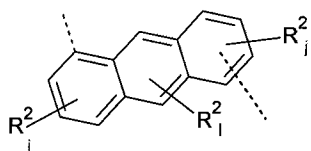
式 (L¹-76)



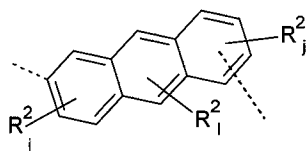
式 (L¹-77)



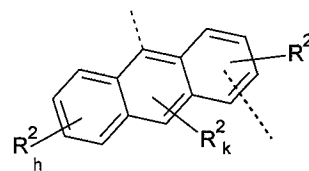
式 (L¹-78)



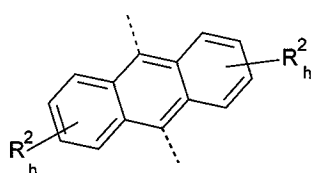
式 (L¹-79)



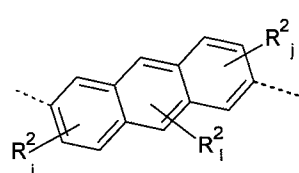
式 (L¹-80)



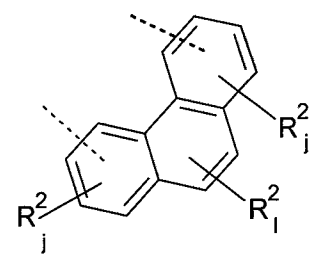
式 (L¹-81)



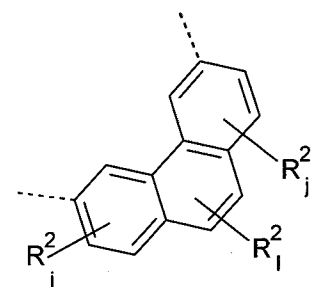
式 (L¹-82)



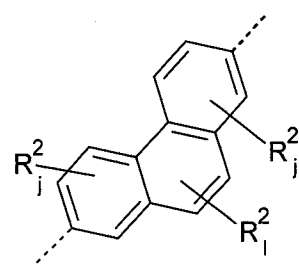
式 (L¹-83)



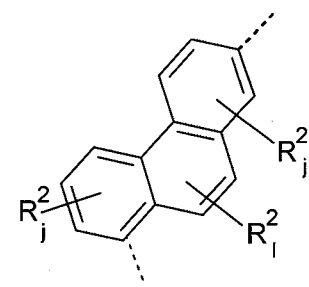
式 (L¹-84)



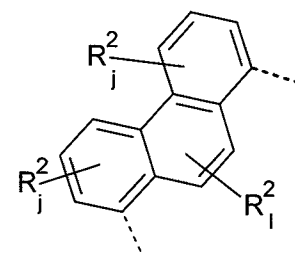
式 (L¹-85)



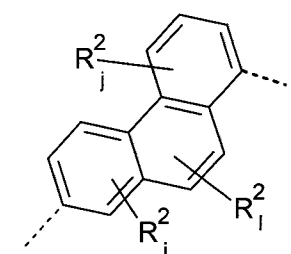
式 (L¹-86)



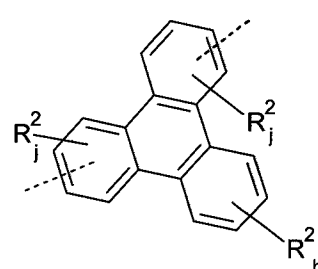
式 (L¹-87)



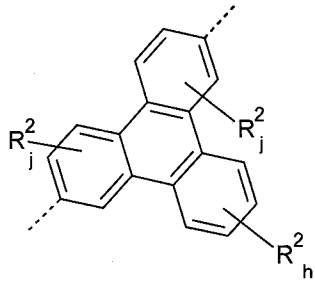
式 (L¹-88)



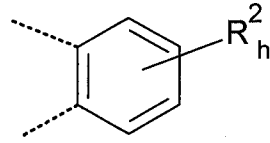
式 (L¹-89)



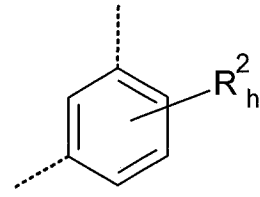
式 (L¹-90)



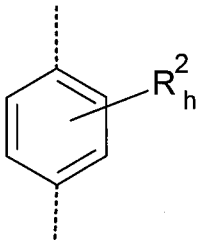
式 (L¹-91)



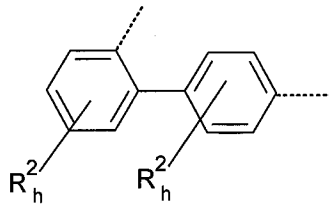
式 (L¹-92)



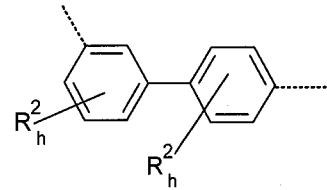
式 (L¹-93)



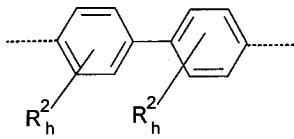
式 (L¹-94)



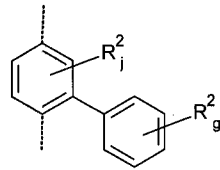
式 (L¹-95)



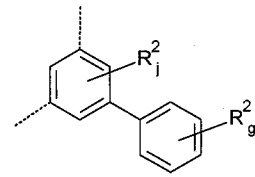
式 (L¹-96)



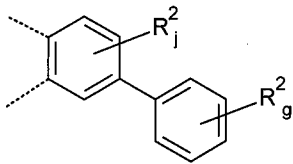
式 (L¹-97)



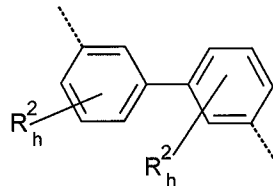
式 (L¹-98)



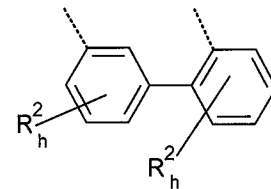
式 (L¹-99)



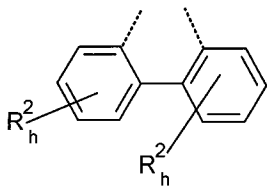
式 (L¹-100)



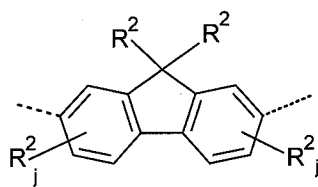
式 (L¹-101)



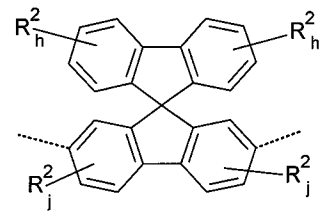
式 (L¹-102)



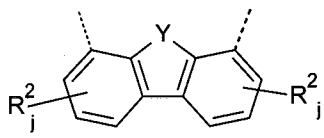
式 (L¹-103)



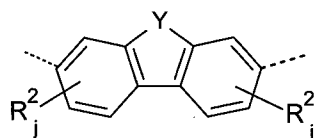
式 (L¹-104)



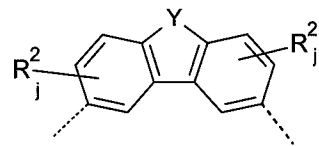
式 (L¹-105)



式 (L¹-106)



式 (L¹-107)



式 (L¹-108)

其中每一情況下之虛線鍵標示連接位置，指標 k 於每一情況獨立地為 0 或 1，指標 l 於每一情況獨立地為 0、1 或 2，指標 j 於每一情況獨立地為 0、1、2 或 3；指標 h 於每一情況獨立地為 0、1、2、3 或 4，指標 g 於每一情況獨立地為 0、1、2、3、4 或 5；符號 Y 為 O 、 S 或 NR^2 ，較佳地 O 或 S ；且符號 R^2 具有上文提供之定義，尤其是式 (I) 提供之定義。

可能較佳的情況為，式 (L¹-1) 至 (L¹-108) 結構中之指標 k 、 l 、 g 、 h 及 j 的總數於每一情況下至多為 3，較佳地至多為 2 且更佳地至多為 1。

根據本發明之較佳化合物包含 L^1 或 Ar^2 基，該 L^1 或 Ar^2 基表示一鍵或選自式 (L¹-1) 至 (L¹-78) 及 / 或 (L¹-92) 至 (L¹-108)、較佳地式 (L¹-1) 至 (L¹-54) 及 / 或 (L¹-92) 至 (L¹-108)、尤佳地式 (L¹-1) 至 (L¹-29) 及 / 或 (L¹-92) 至 (L¹-103) 之一者。有利地，式 (L¹-1) 至 (L¹-78) 及 / 或 (L¹-92) 至 (L¹-108)、較佳地式 (L¹-1) 至 (L¹-54) 及 / 或 (L¹-92) 至 (L¹-108)、尤佳地式 (L¹-1) 至 (L¹-29) 及 / 或 (L¹-92) 至 (L¹-103) 結構中之指標 k 、 l 、 g 、 h 及 j 的總數於每一情況下可不大於 3、較佳地不大於 2 且更佳地不大於 1。

較佳地，式 (L¹-1) 至 (L¹-108) 中之 R^2 基並不與該 R^2 基所鍵結之芳基或雜芳基的環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，且較佳地並不形成任何稠環系統。此包括與可鍵結至 R^2 基上之可能 R^3 取代基形成稠環系統。

本發明之另一較佳實施態樣中， R^2 ，例如於式 (I) 結構及此結構之較佳實施態樣或其中有提及這些化學式之結構

中的 R^2 於每一情況為相同或不同且選自由以下所組成之群組：H、D、具有 1 至 10 個碳原子較佳地具有 1、2、3 或 4 個碳原子之脂族烴基、或具有 5 至 30 個芳族環原子、較佳地 5 至 24 個芳族環原子、更佳地 5 至 13 個芳族環原子且可被一或多個各具有 1 至 4 個碳原子之烷基取代但較佳地未經取代之芳族或雜芳族環系統。

本發明之另一較佳實施態樣中， R^3 ，例如於式 (I) 結構及此結構之較佳實施態樣或其中有提及這些化學式之結構中的 R^3 於每一情況為相同或不同且選自由以下所組成之群組：H、D、F、CN、具有 1 至 10 個碳原子較佳地具有 1、2、3 或 4 個碳原子之脂族烴基、或具有 5 至 30 個芳族環原子、較佳地 5 至 24 個芳族環原子、更佳地 5 至 13 個芳族環原子且可被一或多個各具有 1 至 4 個碳原子之烷基取代但較佳地未經取代之芳族或雜芳族環系統。

當本發明化合物被芳族或雜芳族 R^1 或 R^2 基取代時，最好在當這些取代基並不具有任何具有大於兩個彼此直接稠合之芳族六員環的芳基或雜芳基時。更佳地，這些取代基完全不具有任何具有彼此直接稠合之六員環的芳基或雜芳基。此偏好的理由為此些結構之低三重態能量。然而根據本發明亦適當的具有大於兩個彼此直接稠合之芳族六員環的稠合芳基為菲及伸聯三苯，因為這些亦具有高三重態能階。

提供之特別佳者為具有下列性質之本發明化合物：

Ar ^a 及 Ar ^b	R ^a 及 R ^b	受體基團(QL)		供體基團
		Q ¹	L ¹	
R ¹ -1 至 R ¹ -86	R ¹ -1 至 R ¹ -86	Q-1 至 Q-44	鍵	H-1 至 H-44
R ¹ -1 至 R ¹ -82	R ¹ -1 至 R ¹ -82	Q-1 至 Q-44	鍵	H-1 至 H-44
R ¹ -1 至 R ¹ -54	R ¹ -1 至 R ¹ -54	Q-1 至 Q-44	鍵	H-1 至 H-44
R ¹ -1	R ¹ -1	Q-1 至 Q-44	鍵	H-1 至 H-44
R ¹ -1 至 R ¹ -86	R ¹ -1 至 R ¹ -86	Q-1 至 Q-44	L-1	H-1 至 H-44
R ¹ -1 至 R ¹ -82	R ¹ -1 至 R ¹ -82	Q-1 至 Q-44	L-1	H-1 至 H-44
R ¹ -1 至 R ¹ -54	R ¹ -1 至 R ¹ -54	Q-1 至 Q-44	L-1	H-1 至 H-44
R ¹ -1	R ¹ -1	Q-1 至 Q-44	L-1	H-1 至 H-44

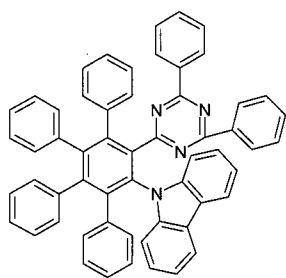
提供之特別佳者為本發明化合物，其包含至少一個式 (H-1) 至 (H-26) 之供體基團，其中 Ar² 基為式 (LAr-1) 之連接結構，及至少一個式 (QL) 之受體基團，其中 L¹ 可以式 (LAr-2) 之連接結構表示，其中下列之額外性質得到滿足：

Ar^a 及 Ar^b	R^a 及 R^b	式(LAr-1)中之指標 s	式(LAr-2)中之指標 t
R^{1-1} 至 R^{1-86}	R^{1-1} 至 R^{1-86}	0, 1 或 2	0
R^{1-1} 至 R^{1-86}	R^{1-1} 至 R^{1-86}	0, 1 或 2	1
R^{1-1} 至 R^{1-86}	R^{1-1} 至 R^{1-86}	0, 1 或 2	2
R^{1-1} 至 R^{1-86}	R^{1-1} 至 R^{1-86}	0	0, 1 或 2
R^{1-1} 至 R^{1-86}	R^{1-1} 至 R^{1-86}	1	0, 1 或 2
R^{1-1} 至 R^{1-86}	R^{1-1} 至 R^{1-86}	2	0, 1 或 2
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	0	0
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	1	1
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	2	2
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	0	1
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	1	2
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	2	3
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	1	0
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	2	1
R^{1-1} 至 R^{1-82}	R^{1-1} 至 R^{1-82}	3	2
R^{1-1}	R^{1-1}	0, 1 或 2	0
R^{1-1}	R^{1-1}	0, 1 或 2	1
R^{1-1}	R^{1-1}	0, 1 或 2	2
R^{1-1}	R^{1-1}	0	0, 1 或 2
R^{1-1}	R^{1-1}	1	0, 1 或 2
R^{1-1}	R^{1-1}	2	0, 1 或 2
R^{1-1}	R^{1-1}	0	0
R^{1-1}	R^{1-1}	1	1
R^{1-1}	R^{1-1}	2	2
R^{1-1}	R^{1-1}	0	1
R^{1-1}	R^{1-1}	1	2
R^{1-1}	R^{1-1}	2	3
R^{1-1}	R^{1-1}	1	0
R^{1-1}	R^{1-1}	2	1
R^{1-1}	R^{1-1}	3	2

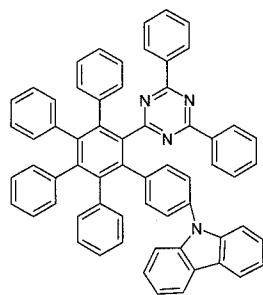
上示表中， Ar^a 及 Ar^b 指派為 R^{1-1} 至 R^{1-86} 意指 Ar^a 基及 Ar^b 基均選自上文詳述之式 R^{1-1} 至 R^{1-86} 基團，較佳地為 R^{1-1} 。 R^a 及 R^b 的指派意指 R^a 基及 R^b 基均選自上文詳述之式 R^{1-1} 。

1至R¹-86基團，較佳地為R¹-1。其他的指派乃相應地適用。

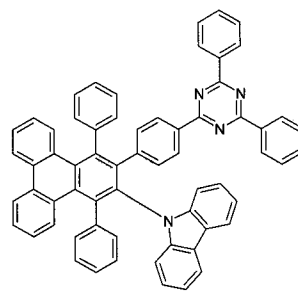
適當之本發明化合物的實例為下式1至51的結構：



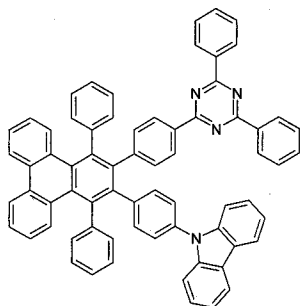
式 1



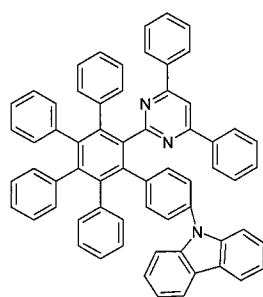
式 2



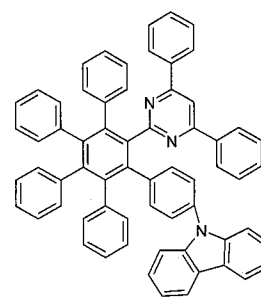
式 3



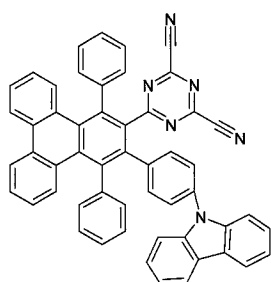
式 4



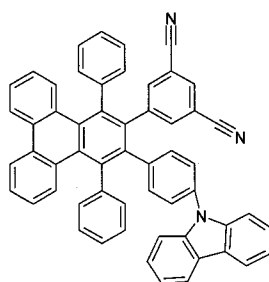
式 5



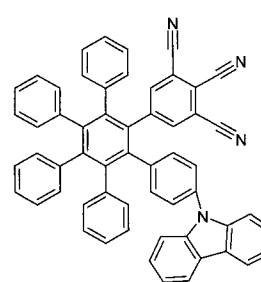
式 6



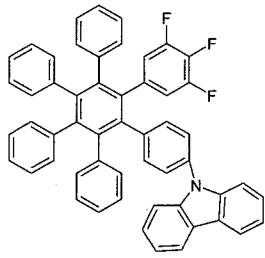
式 7



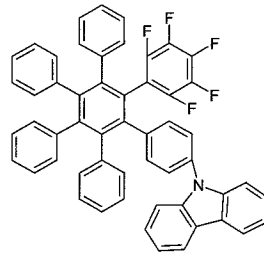
式 8



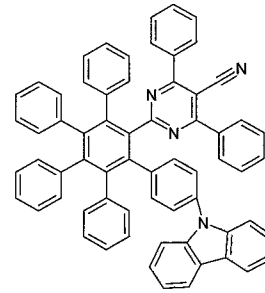
式 9



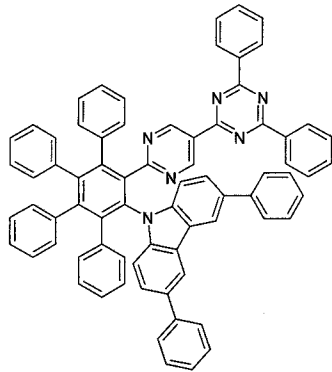
式 10



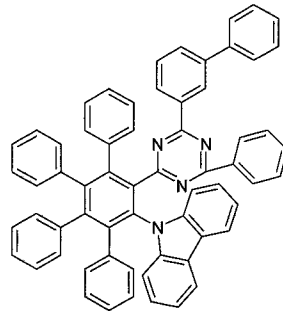
式 11



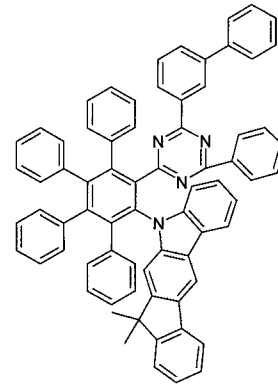
式 12



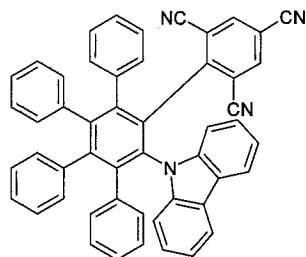
式 13



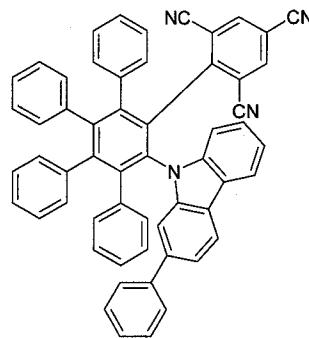
式 14



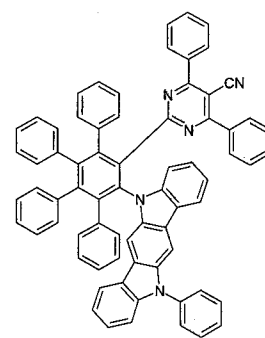
式 15



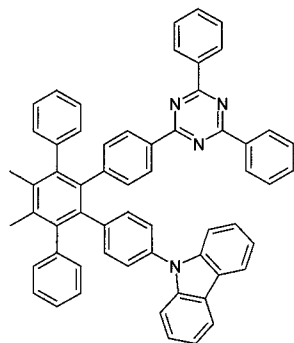
式 16



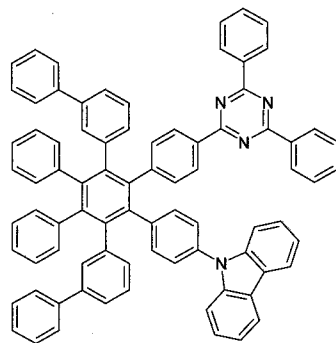
式 17



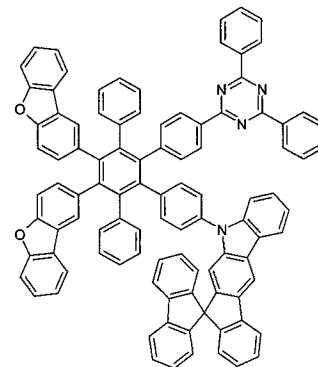
式 18



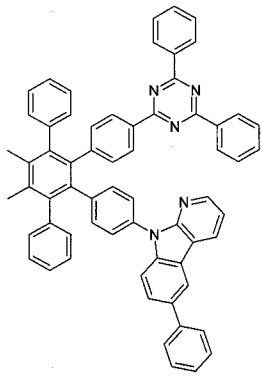
式 19



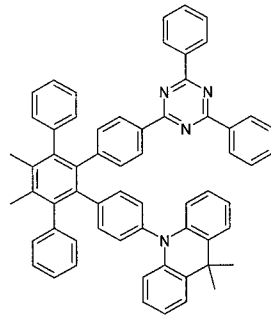
式 20



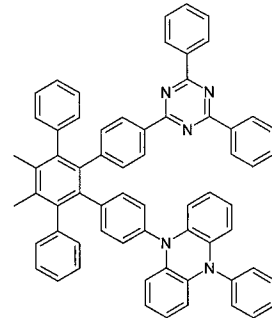
式 21



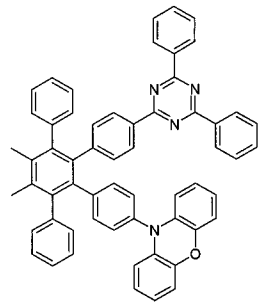
式 22



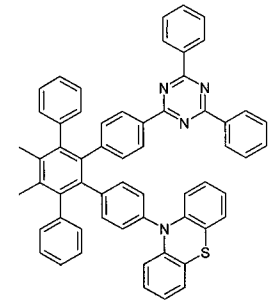
式 23



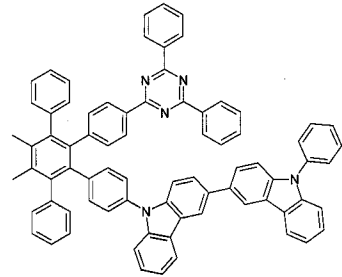
式 24



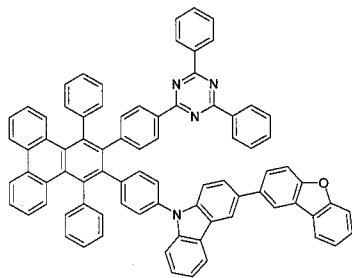
式 25



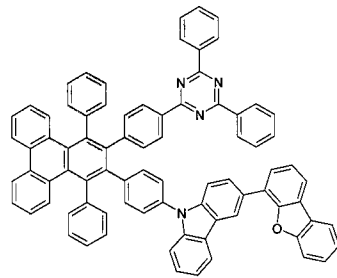
式 26



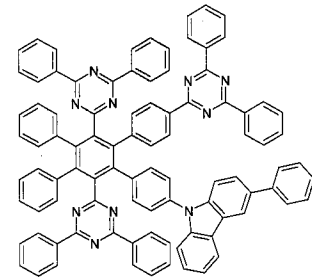
式 27



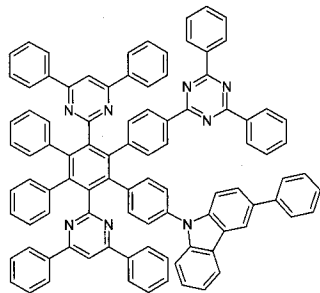
式 28



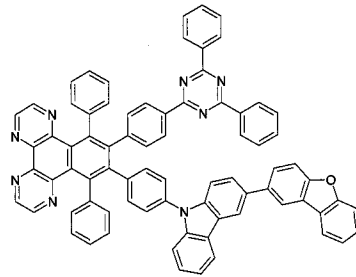
式 29



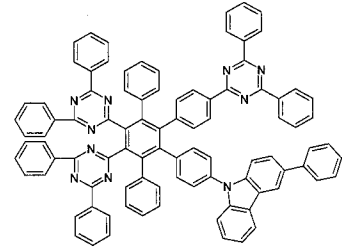
式 30



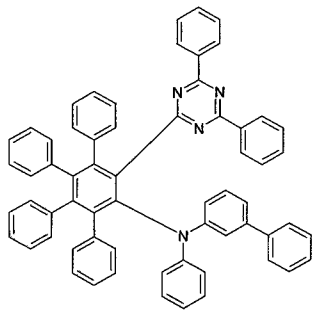
式 31



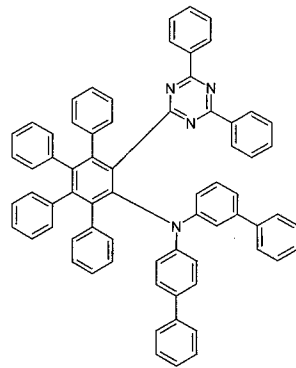
式 32



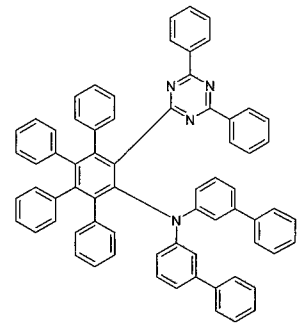
式 33



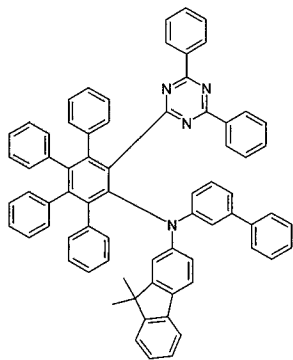
式 34



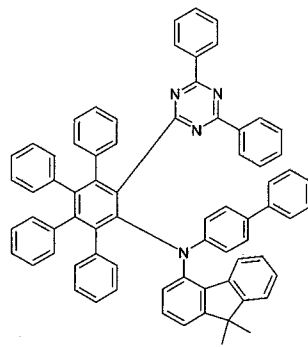
式 35



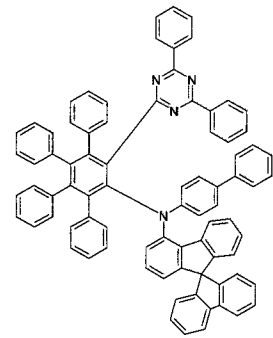
式 36



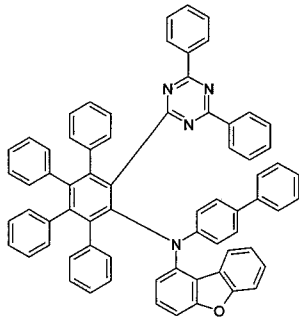
式 37



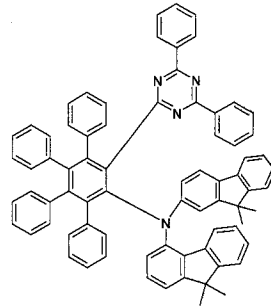
式 38



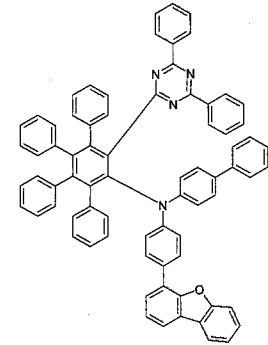
式 39



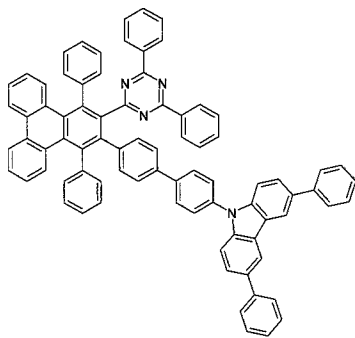
式 40



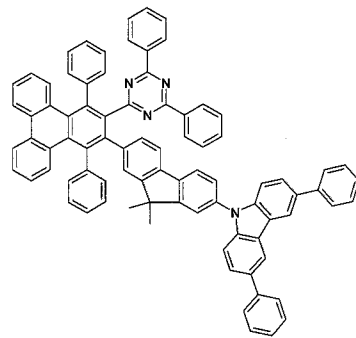
式 41



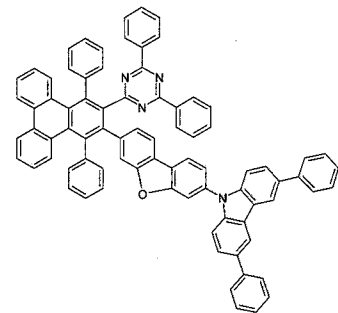
式 42



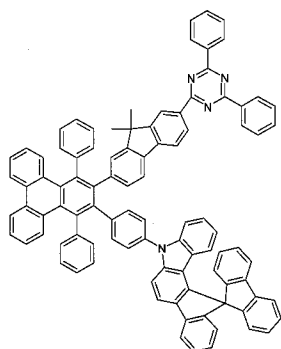
式 43



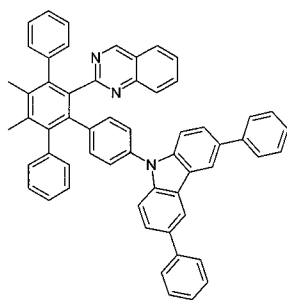
式 44



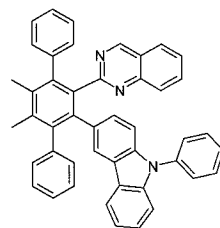
式 45



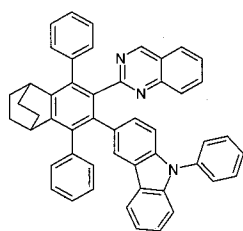
式 46



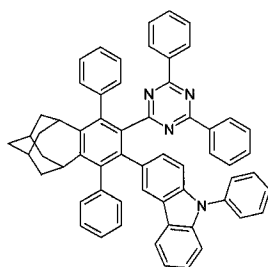
式 47



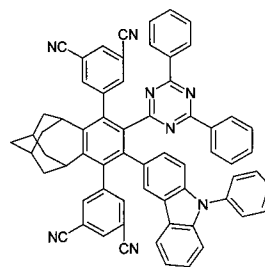
式 48



式 49



式 50



式 51

本發明化合物之較佳實施態樣尤其引述於實例中，這些化合物可單獨使用或與其他化合物組合使用以供本發明之所有目的。

前提是要遵守申請專利範圍第1項中特定的條件，上述之較佳實施態樣可依所需彼此組合。本發明特別佳之實施態樣中，上述之較佳實施態樣同時適用。

本發明化合物原則上可藉各種方法製備。然而，下文所述的方法已被發現特別適當。

因此，本發明進一步提供製備包含至少一種式(I)結構之化合物的方法，其中將包含至少一個供體基團之化合物於偶合反應中連結至受體基團。

具有供體基團之適當化合物於許多情況下為市售，而實例中詳述之起始化合物可藉已知方法得到，所以在其中

提及。

較佳地，環戊二烯酮衍生物可與炔烴衍生物反應，其可於狄爾斯-阿德爾反應(Diels-Alder reaction)中達成。然後狄爾斯-阿德爾產物脫去CO地反應，得本發明化合物。如果Ar^a、Ar^b、R^a及R^b基表示芳基或雜芳基時，此反應尤其有利。

此處可以藉由將含有相應反應基之化合物與芳族或雜芳族炔烴化合物反應而得到較佳地包含供體基團及/或受體基團之化合物的相應炔烴衍生物。適於此目的之偶合反應例如鈴木偶合反應(Suzuki coupling)為一般常識，而稱之為菌頭反應(Sonogashira reaction)之反應已被發現特別有用於此目的。鈴木偶合或菌頭反應的反應條件於技術領域中廣泛已知，且實例提供有關於此方面之重要指點。

用於作為鈴木偶合或菌頭反應的反應物之反應性化合物可例如從已知之芳基或雜芳基化合物中藉已知之鹵化反應較佳地溴化反應得到。

這些化合物可與其他芳基化合物藉已知之偶合反應進行反應，供此目的之必要條件為熟諳此藝者已知，而實例中詳述的規格提供熟諳此藝者於進行這些反應中的支撐。

特別適當及特別佳的偶合反應(所有均導致C-C鍵形成及/或C-N鍵形成)為根據布赫瓦爾德(BUCHWALD)、鈴木(SUZUKI)、山本(YAMAMOTO)、施蒂勒(STILLE)、赫克(HECK)、根岸(NEGISHI)、菌頭(SONOGASHIRA)及檜山(HIYAMA)者。這些反應係泛已知，且實例將提供熟諳此

者進一步之指點。

如果接著必需純化，則可以藉由這些方法例如再結晶法或昇華法進行，以得到包含高純度較佳地大於99%(用 ^1H NMR及/或HPLC測定)純度之式(I)結構的本發明化合物。

本發明化合物亦可具有適當取代基，例如相對長之烷基(約4至20個碳原子)、特別是支鏈烷基、或隨意經取代之芳基例如二甲苯基、萊基或支鏈聯三苯基或聯四苯基，其引致於標準有機溶劑例如甲苯或二甲苯中、於室溫、於充分濃度中之溶解度，以求可從溶液中處置化合物。這些可溶性化合物特別適當於從溶液中進行處置例如藉印刷法。此外，應該強調的是，包含至少一種式(I)結構之本發明化合物於這些溶劑中已具有增強之溶解度。

本發明化合物亦可與聚合物混合。同樣地可以將這些化合物共價地併至聚合物中。尤其可以與被反應性脫離基諸如溴、碘、氯、醯酸或醯酸酯取代或被反應性可聚合基團諸如烯烴或氧雜環丁烷取代之化合物進行。這些經發現可用於作為用於製造相應寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物之單體。寡聚反應或聚合反應較佳地經由鹵素官能度或醯酸官能度或經由可聚合基團達成。另外可以將聚合物經由此類之基團交聯。本發明之化合物及聚合物可以交聯或未交聯層之形式使用。

因此本發明進一步提供包含一或多種上文詳述式(I)結構或本發明化合物之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其

中本發明化合物或式(I)結構存在一或多個鍵結至聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物的鍵。根據式(I)結構或化合物之鍵聯，因此彼等形成寡聚物或聚合物的側鏈或者於主鏈內鍵結。聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物可為共軛、部分共軛或未共軛。寡聚物或聚合物可為直鏈、支鏈或樹枝狀。有關寡聚物、樹枝狀聚合物及聚合物中之本發明化合物的重覆單元方面，適用與上述者相同之偏好。

在寡聚物或聚合物的製備方面，本發明之單體係與其他單體均聚化或共聚化。提供之較佳者為共聚物，其中上下文中所述式(I)單元或較佳實施態樣係以 0.01 至 99.9 mol%、較佳地 5 至 90 mol%、更佳地 20 至 80 mol% 的程度存在。形成聚合物基礎骨架之適當且較佳共聚單體選自萸(例如根據 EP 842208 或 WO 2000/022026)、螺雙萸(例如根據 EP 707020、EP 894107 或 WO 2006/061181)、對伸苯(例如根據 WO 92/18552)、呋啞(例如根據 WO 2004/070772 或 WO 2004/113468)、噻吩(例如根據 EP 1028136)、二氫萸(例如根據 WO 2005/014689)、順-及反-茛苳并萸(例如根據 WO 2004/041901 或 WO 2004/113412)、酮(例如根據 WO 2005/040302)、萸(例如根據 WO 2005/104264 或 WO 2007/017066)或複數種這些單元。聚合物、寡聚物及樹枝狀聚合物亦可含有其他單元，例如電洞傳輸單元，尤其是以三芳基胺為基底者、及/或電子傳輸單元。

另外特別關注的是本發明化合物以高玻璃轉移溫度為特徵。有關此方面，尤其提供之較佳者為包含通式(I)結構

或上下文所述較佳實施態樣之本發明化合物，其具有根據 DIN 51005(2005-08版)測得之至少 70°C、更佳地至少 110°C、甚至更佳地至少 125°C 且尤佳地至少 150°C 之玻璃轉移溫度。

由液相中例如藉旋轉塗佈法或藉印刷法處理本發明化合物方面，需要本發明化合物的調合物。這些調合物可例如為溶液、分散液或乳膠。欲供此目的，較佳地可使用二或多種溶劑之混合物。適當且較佳之溶劑為例如甲苯、苯甲醚、鄰-、間-或對-二甲苯、苯甲酸甲酯、苯、四氫萘、藜蘆醚、THF、甲基-THF、THP、氯苯、二噁烷、苯氧基甲苯、尤其是 3-苯氧基甲苯、(-)-葑酮、1,2,3,5-四甲基苯、1,2,4,5-四甲基苯、1-甲基萘、2-甲基苯并噻唑、2-苯氧基乙醇、2-吡咯啉酮、3-甲基苯甲醚、4-甲基苯甲醚、3,4-二甲基苯甲醚、3,5-二甲基苯甲醚、苯乙酮、 α -萘品醇、苯并噻唑、苯甲酸丁酯、異丙苯、環己醇、環己酮、環己基苯、十氫萘、十二烷基苯、苯甲酸乙酯、二氫化茛、苯甲酸甲酯、NMP、對-異丙基甲苯、苯乙醚、1,4-二異丙基苯、二苄基醚、二乙二醇丁基甲基醚、三乙二醇丁基甲基醚、二乙二醇二丁基醚、三乙二醇二甲基醚、二乙二醇單丁基醚、三丙二醇二甲基醚、四乙二醇二甲基醚、2-異丙基萘、戊基苯、己基苯、庚基苯、辛基苯、1,1-雙(3,4-二甲基苯基)乙烷、六甲基二氫化茛或這些溶劑之混合物。

因此本發明進一步提供調合物，其包含本發明化合物

及至少一種其他化合物。此其他化合物可例如為溶劑，尤其是上述溶劑之一者或這些溶劑之混合物。該其他化合物亦可另為同樣地用於電子裝置中的其他有機或無機化合物，例如發光化合物尤其是磷光摻雜劑、及/或其他基質材料。該其他化合物亦可為聚合性。

因此本發明又進一步提供組成物，其包含本發明化合物及至少一種其他有機功能材料。功能材料通常為引至陽極與陰極之間的有機或無機材料。較佳地，該有機功能材料選自由以下所組成之群組：螢光發射體、磷光發射體、主體材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞導體材料、電洞注入材料、電子阻擋材料、電洞阻擋材料、寬能帶間隙材料及n-摻雜劑。

因此本發明亦關於組成物，其包含至少一種含有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物及至少一種基質材料。該基質材料亦稱為主體材料。本上下文中，本發明化合物可具有基質材料或發射體的性質。如果包含式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物係作為基質材料，則除了本發明化合物以外之主體材料在本文中尤其亦作為其他基質材料。根據本發明之特別方面，該其他基質材料具有電洞傳輸性質。

基質材料尤其可根據電子裝置的特性尤其是本發明化合物用途的特性選擇。如果使用本發明化合物(例如)作為例如於有機電激發光裝置或有機發光電化學電池中之發射體，則主體材料較佳地比根據本發明使用之作為螢光

TADF材料之包含式(I)結構的化合物具有更大的能量間隙。

較佳地，主體材料係作為電子或電洞導體或作為組合之電子/電洞導體。

一實施態樣中，作為螢光TADF材料之本發明化合物的吸收光譜與至少一種主體材料之光激發光光譜重疊，而使本發明化合物與該至少一種主體材料之間可以能量轉移。原則上，可以使用已知或慣常用於OLEC或OLED中的主體材料。

一實施態樣中，該主體材料為電洞-或電子-傳輸材料。

一實施態樣中，該主體材料之最低三重態 T_1^H 所具有之能量高於未帶電荷之有機發光化合物之最低三重態 T_1 的能量。

適當之主體材料選自例如蔥、苯并蔥、苯并萸、萸、螺聯萸、菲、脫氫菲、脫氫萸、噻吩、三吡、咔唑、茛并咔唑、吡啶并咔唑、嘧啶、內醯胺、二苯基酮、三芳基胺、喹啉及咪唑。

極佳之主體材料選自苯并萸、萸、螺聯萸、菲、脫氫菲、脫氫萸、噻吩、三吡、咔唑、茛并咔唑、吡啶并咔唑、嘧啶、內醯胺、二苯基酮、三芳基胺、喹啉及咪唑。

一實施態樣中，組成物包含四種或更少之主體材料，進一步實施態樣中包含三或更少之主體材料，且進一步實

施態樣中包含一或二種主體材料。

特別佳之主體材料選自伸寡芳基，例如2,2',7,7'-四苯基螺雙萸(其述於EP 676461中)、或二萘基蔥。提供之較佳者為包含稠合芳族基團之伸寡芳基，例如菲、稠四苯、蔥、萸、萸、螺萸、芘、酞芘、萘芘、十環烯(decacyclene)、紅螢烯(rubrene)、伸寡芳基伸乙炔基例如4,4'-雙(2,2-二苯基乙炔基)-1,1'-聯苯(DPVBi)或4,4'-雙-2,2-二苯基乙炔基-1,1-螺聯苯(螺-DPVBi)，如同於EP 676461中所述。

其他適當之主體材料為如同例如述於WO 2004/081017中之多足金屬錯合物例如具8-羥基喹啉之金屬錯合物諸如鋁(III)參(8-羥基喹啉)(Alq₃)、或雙-(2-甲基-8-喹啉)-4-(苯基非諾林基)鋁(bis-(2-methyl-8-quinolinolato)-4-(phenylphenolinolato)aluminium)、如同述於US 2007/0092753 A1中之咪唑螯合化合物、及亦喹啉-金屬錯合物、胺基喹啉-金屬錯合物、苯并喹啉-金屬錯合物、例如述於WO 2004/058911中之電洞-傳輸材料、電子-傳輸材料尤其是酮、氧化磷、如同例如述於WO 2005/084081及WO 2005/08408中之亞砷、如同述於WO 2006/048268之阻轉異構物、如同例如述於WO 2006/117052中之醌酸衍生物、或如同述於DE 102007024850中之苯并蔥。

其他適當之主體材料為伸寡芳基諸如萘、蔥、苯并蔥及芘、及亦這些化合物之阻轉異構物、酮、氧化磷及亞砷。較佳地，主體材料選自伸寡芳基之類別尤其是萘、

蔥、苯并蔥及芘。本發明上下文中之寡芳基化合物要理解為意指包含至少三個彼此直接連結之芳基或伸芳基的化合物。

其他適當之主體材料選自式(HM-1)化合物：



其中：

Ar^5 、 Ar^6 、 Ar^7 於每一情況為相同或不同且為具有5至30個芳族環原子之芳基或雜芳基，其亦可經單或多取代，

$p=1$ 、2或3；

其中 Ar^5 、 Ar^6 、 Ar^7 中之 π 電子的總數當 $p=1$ 時為至少30且如果 $p=2$ 時為至少36且如果 $p=3$ 為至少42。

另一實施態樣中，式(HM-1)之主體材料內， Ar^6 較佳地為可被一或多個 R^1 基取代之蔥，其中 Ar^5 及 Ar^7 基於位置9及10鍵結。更佳地， Ar^5 及 Ar^7 基之至少一者為稠合芳基，其較佳地選自1-或2-萘基、2-、3-或9-菲基或2-、3-、4-、5-、6-或7-苯并蔥基之群組，各者分別可被 R^1 所單或多取代。此處 R^1 為如上文所定義者。

適當之蔥化合物例如述於US 2007/0092753 A1及US 2007/0252517 A1中，例如為2-(4-甲苯基)-9,10-二(2-萘基)蔥、9-(2-萘基)-10-(1,1'-聯苯基)蔥及9,10-雙[4-(2,2-二苯基乙烯基)苯基]蔥、9,10-二苯基蔥、9,10-雙(苯基乙炔基)蔥及1,4-雙(9'-乙炔基蔥基)苯。亦提供之較佳者為具有兩個蔥基的主體材料(US 2008/0193796 A1)，例如10,10'-雙

[1,1',4', 1'']聯三苯-2-基-9,9'-雙蔥基。

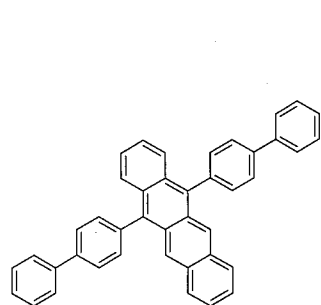
其他適當主體材料為芳基胺衍生物、苯乙烯基胺、螢光素、皮林酮(perinone)、酞皮林酮(phthaloperinone)、萘皮林酮(naphthaloperinone)、二苯基丁二烯、四苯基丁二烯、環戊二烯、四苯基環戊二烯、五苯基環戊二烯、香豆素、嗎二唑、雙苯并嗎唑啉、嗎酮、吡啶、吡啶、亞胺、苯并噁唑、苯并嗎唑、苯并咪唑(US 2007/0092753 A1)例如 2,2',2''-(1,3,5-伸苯基)參[1-苯基-1H-苯并咪唑]、醛吡啶(aldazine)、芪、苯乙烯基伸芳基衍生物例如 9,10-雙[4-(2,2-二苯基乙烯基)苯基]蔥、及二苯基乙烯基伸芳基衍生物(US 5121029)、二苯基乙烯、乙烯基蔥、二胺基咪唑、哌喃、噁喃、二酮基吡咯并吡咯、聚甲炔、部花青素、吡啶酮、喹吡酮、肉桂酸酯及螢光染料。

較佳實施態樣中，係使用芳基胺及苯乙烯基胺衍生物作為主體材料，例如 4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-(2-萘基)胺基]聯苯(TNB)。

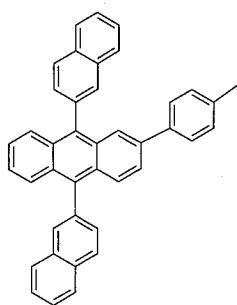
適於作為主體材料之伸寡芳基乃例如述於 US 2003/0027016 A1、US 7326371 B2、US 2006/043858 A、US 7326371 B2、US 2003/0027016 A1、WO 2007/114358、WO 2008/145239、JP 3148176 B2、EP 1009044、US 2004/018383、WO 2005/061656 A1、EP 0681019B1、WO 2004/013073A1、US 5077142、WO 2007/065678、及 US 2007/0205412 A1 中。

特別佳之作為主體材料的化合物乃示於下列式(HM-2)

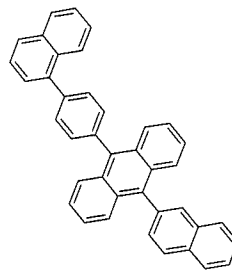
至 (HM-8) 中：



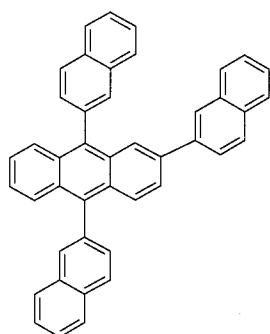
式 (HM-2)



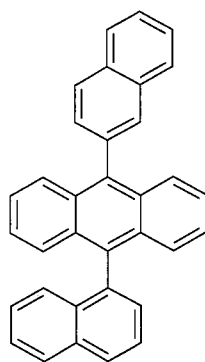
式 (HM-3)



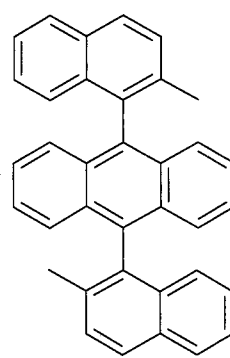
式 (HM-4)



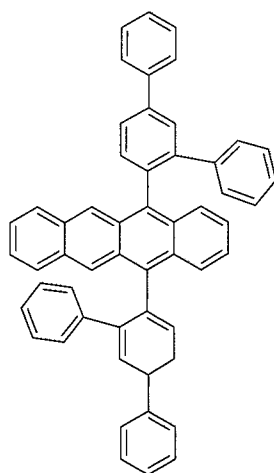
式 (HM-5)



式 (HM-6)



式 (HM-7)



式 (HM-8)

其他適當之主體材料為螺雙萘及其衍生物，例如螺-DPVBi，其述於 EP 0676461 中；或苯并萘，其述於 US 6562485 中。

作為發射體或作為 TADF 材料之本發明化合物與上述

主體材料之組合(為了形成OLEC中的發射層)可相應地補充電解質，該電解質可提供活動離子(mobile ion)，如同從先前技藝中特別述於此申請案之前言部分中已知。

本發明進一步提供組成物，其包含至少一種含有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物及至少一種寬能帶間隙材料，寬能帶間隙材料要理解為意指於US 7,294,849之揭示內容所定義的材料。這些系統於電激發光裝置中顯現異常有利的效能。

較佳地，其他化合物可具有2.5 eV或更多、較佳地3.0 eV或更多、極佳地3.5 eV或更多的能帶間隙。計算能帶間隙的一種方法為經由最高佔據分子軌域(HOMO)及最低未佔據分子軌域(LUMO)的能階。

材料之分子軌域，尤其亦為最高佔據分子軌域(HOMO)及最低未佔據分子軌域(LUMO)，其能階及最低三重態 T_1 的能量及最低激發單重態 S_1 的能量係經由量子化學計算法測定。在無金屬的有機物質之計算方面，幾何最佳化首先係藉由 "Ground State/Semi-empirical/Default Spin/AM1/Charge 0/Spin Singlet"法進行。接著，能量的計算係以最佳化之幾何為基準達成。此係使用 "TD-SCF/DFT/Default Spin/B3PW91"法連同 "6-31G(d)"基底函數組(charge 0, spin singlet)完成。在含金屬之化合物方面，幾何係經由 "Ground State/Hartree-Fock/Default Spin/LanL2MB/Charge 0/Spin Singlet"法最佳化。能量的計算係類似於上述用於有機物質的方法達成，惟使用

"LanL2DZ"基底函數組於金屬原子及使用"6-31G(d)"基底函數組於配位基。HOMO能階HEh或LUMO能階LEh係得自哈特單位(Hartree unit)的能量計算。此係用於如下地藉循環伏安測量法而測定HOMO及LUMO能階(單位為電子伏特)：

$$\text{HOMO(eV)} = ((\text{HEh} * 27.212) - 0.9899) / 1.1206$$

$$\text{LUMO(eV)} = ((\text{LEh} * 27.212) - 2.0041) / 1.385$$

這些數值於本申請案上下文中被視為是材料的HOMO及LUMO能階。

最低三重態T₁經定義為具有最低能量的三重態能量，其由所述之量子化學計算法中明顯可見。

最低激發單重態S₁經定義為具有最低能量的激發單重態能量，其由所述之量子化學計算法中明顯可見。

本文中所述之方法與所用之軟體包無關且總能提供相同的結果。經常使用之用於此目的的程式之實例為"Gaussian09W"(Gaussian Inc.)及Q-Chem 4.1(Q-Chem, Inc.)。

此外，本發明化合物亦可作為與發射體組合使用之基質材料。

因此，本發明亦關於組成物，其包含至少一種具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物及至少一種螢光發射體，術語"螢光發射體"亦應理解為意指螢光摻雜劑。可能較佳的情況為，螢光發射體與根據本發明之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物的重量比在0.1重量%

至 50 重量 %、1 重量 % 至 20 重量 % 及 3 重量 % 至 15 重量 % 之範圍內。

本發明亦關於組成物，其包含至少一種包含式 (I) 結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物及至少一種磷光發射體，術語 "磷光發射體" 亦應理解為意指磷光摻雜劑。

包含基質材料及摻雜劑之系統中的摻雜劑要理解為意指於混合物中具有較小比例的組份。相應地，包含基質材料及摻雜劑之系統中的基質材料要理解為意指於混合物中具有較大比例的組份。

用於基質系統較佳地混合型基質系統中的較佳磷光摻雜劑為下文所特定之較佳磷光摻雜劑。

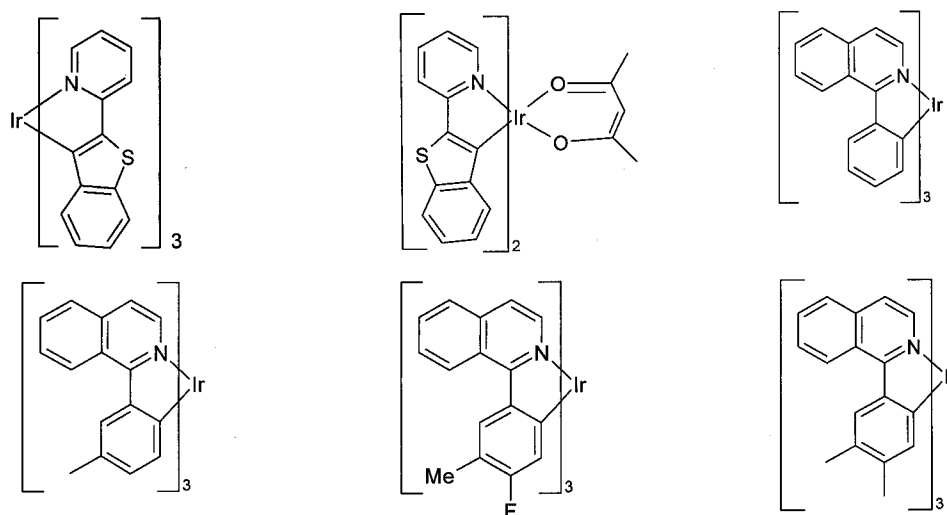
術語 "磷光摻雜劑" 典型地涵蓋化合物，其中光的發射係經由自旋禁止躍遷，例如從激發三重態或具有更高自旋量子數的狀態例如五重態中躍遷達成。

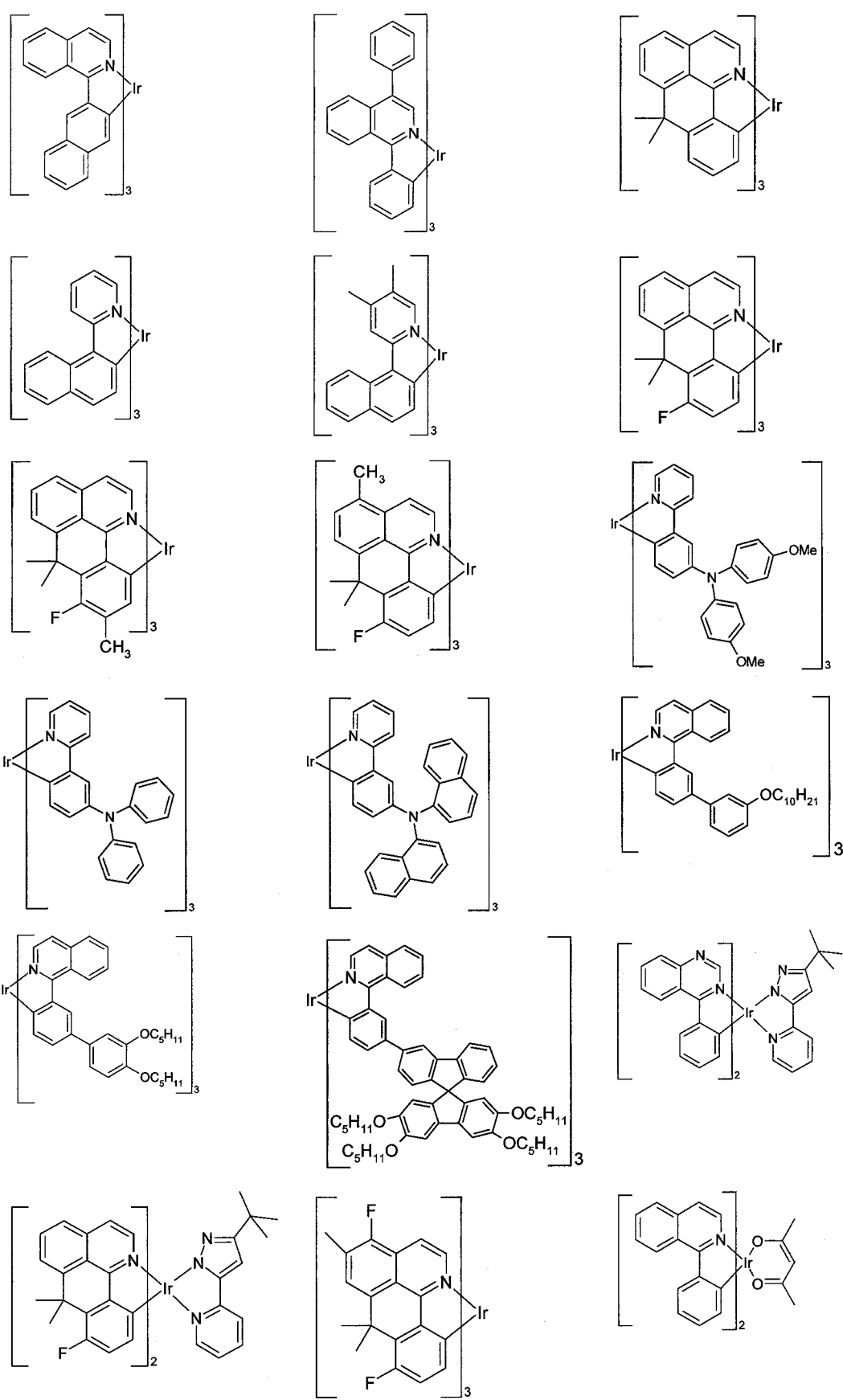
適當之磷光化合物 (= 三重態發射體) 尤其為當適當激發時發光 (較佳地於可見光區中) 之化合物，且亦含有至少一個原子數大於 20、較佳地大於 38 且小於 84、尤其較佳地大於 56 且小於 80 的原子，尤其是具有此原子數的金屬。所用之較佳磷光發射體為含有銅、鉬、鎢、銻、鈮、鐵、銻、銻、鈮、鉑、銀、金或鎘之化合物，尤其是含有銻或鉑之化合物。本發明上下文中，含有上述金屬之所有發光化合物均被視為是磷光化合物。

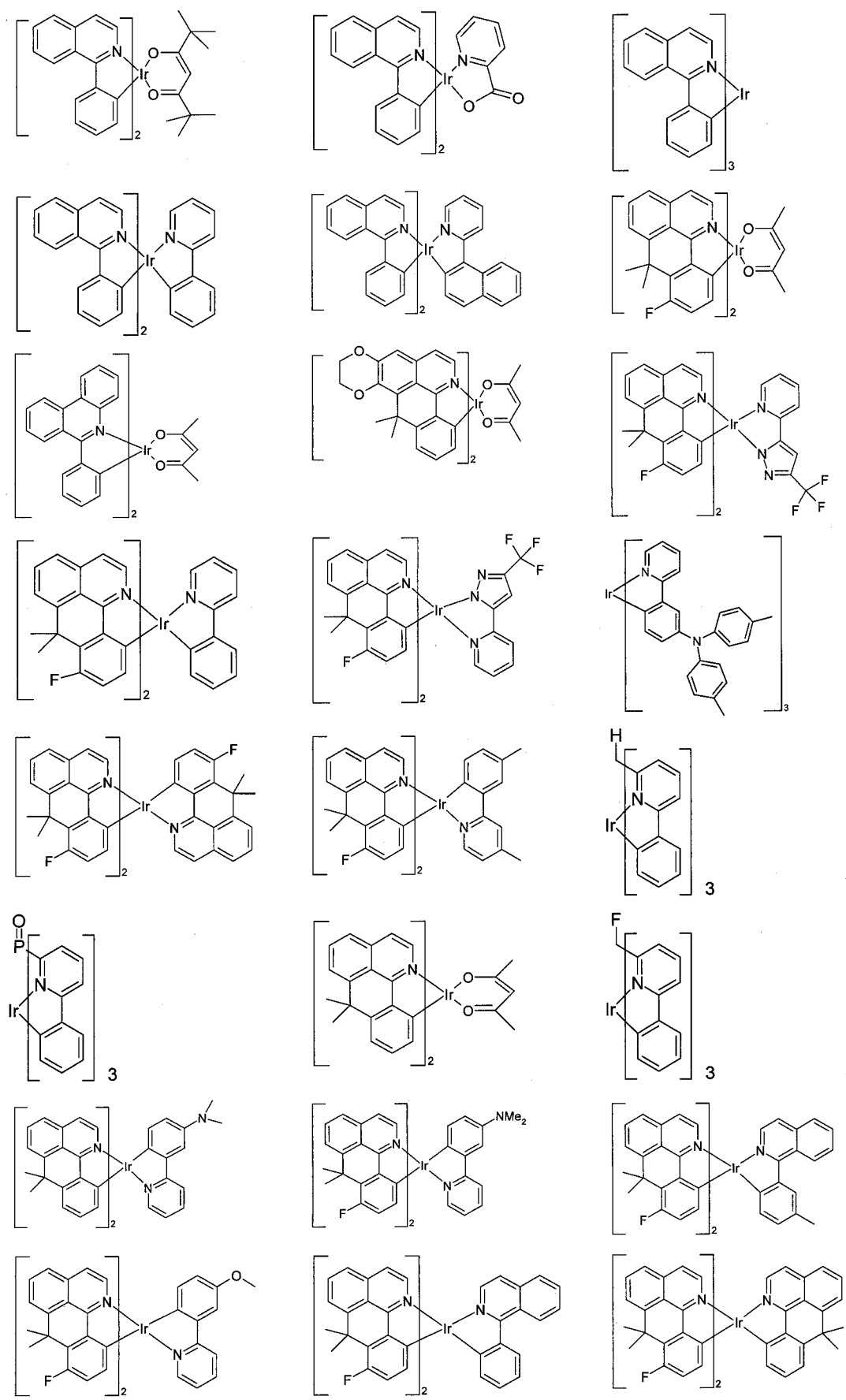
上述發射體之實例可見於申請案 WO 00/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP

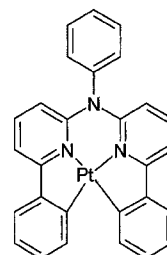
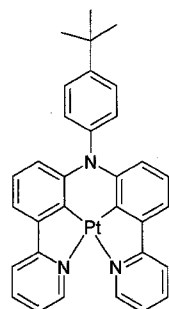
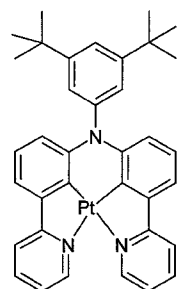
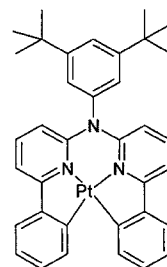
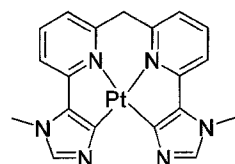
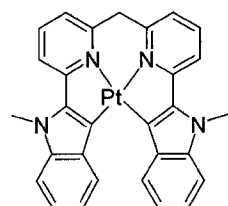
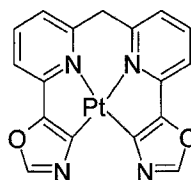
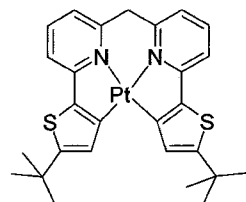
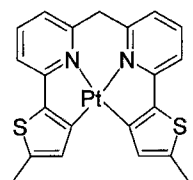
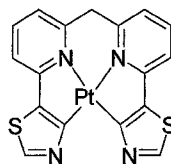
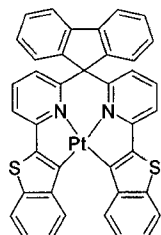
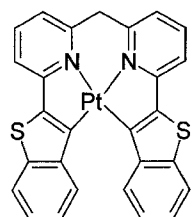
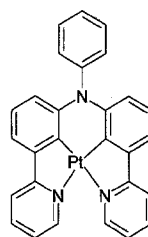
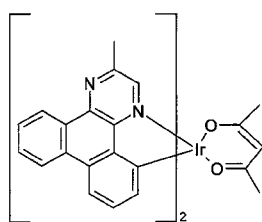
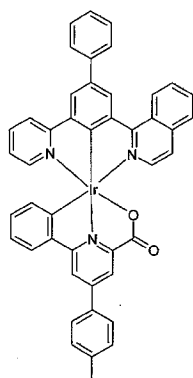
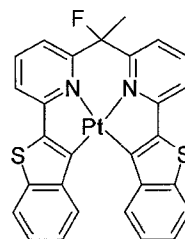
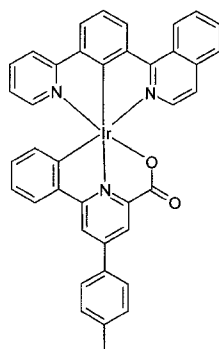
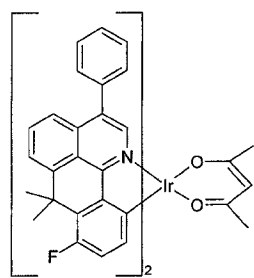
1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373、US 2005/0258742、WO 2009/146770、WO 2010/015307、WO 2010/031485、WO 2010/054731、WO 2010/054728、WO 2010/086089、WO 2010/099852、WO 2010/102709、WO 2011/032626、WO 2011/066898、WO 2011/157339、WO 2012/007086、WO 2014/008982、WO 2014/023377、WO 2014/094961、WO 2014/094960、WO 2016/124304、WO 2016/015815、WO 2016/000803、WO 2015/117718、WO 2015/104045及WO 2015/036074中。通常，根據先前技藝及熟知有機電激發光領域者已知之用於磷光OLED的所有磷光錯合物均適當，熟諳此藝者可不必運用本發明技能地使用其他磷光錯合物。

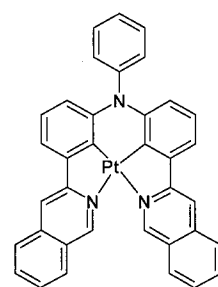
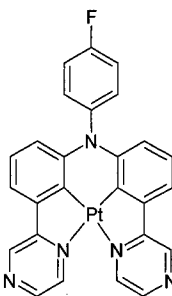
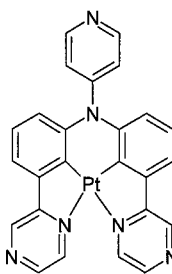
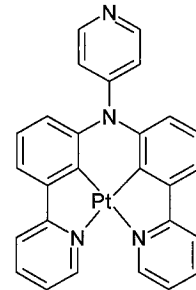
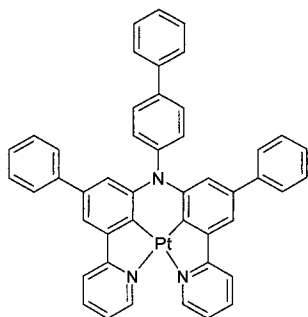
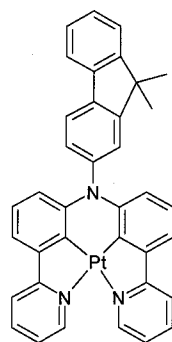
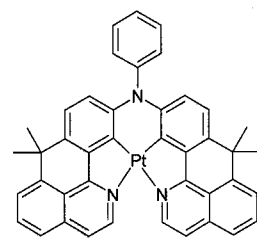
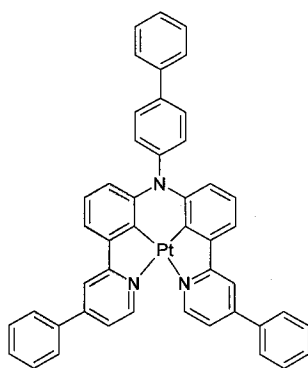
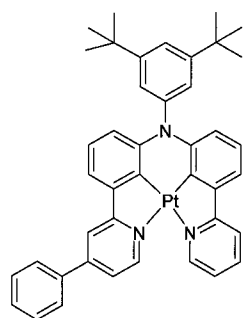
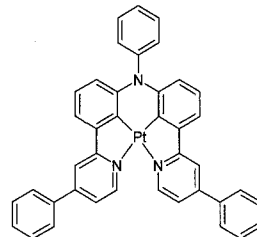
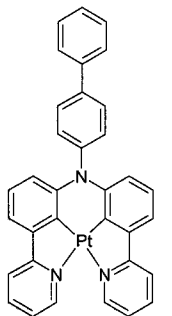
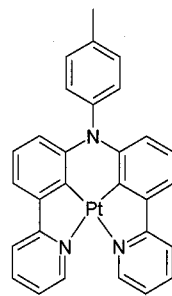
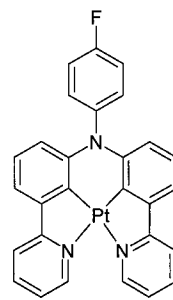
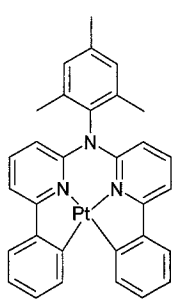
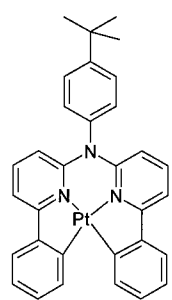
磷光摻雜劑之明確實例乃示於下表中：

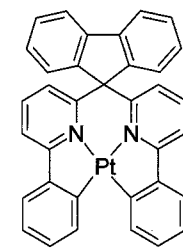
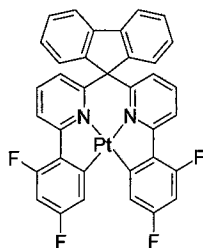
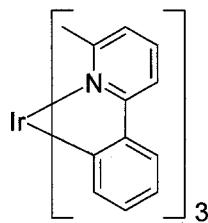
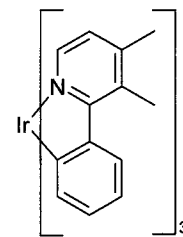
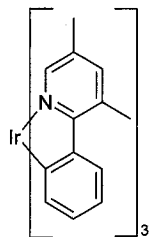
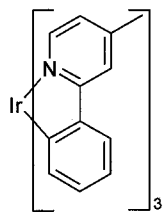
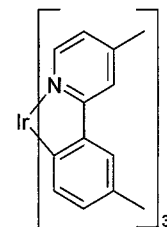
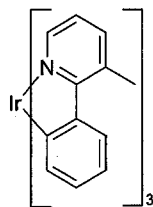
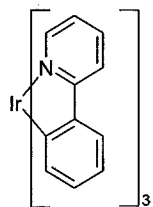
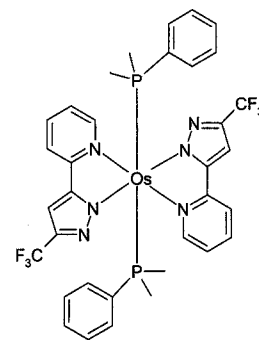
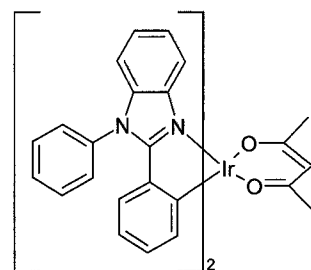
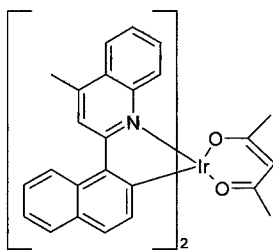
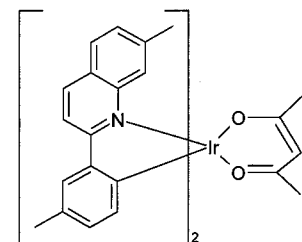
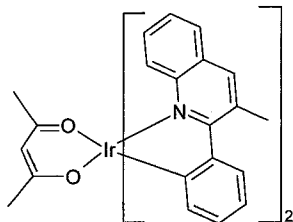
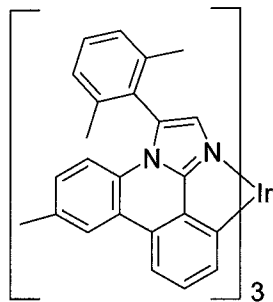
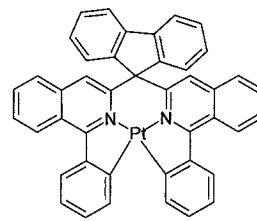
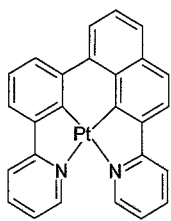
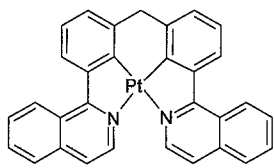


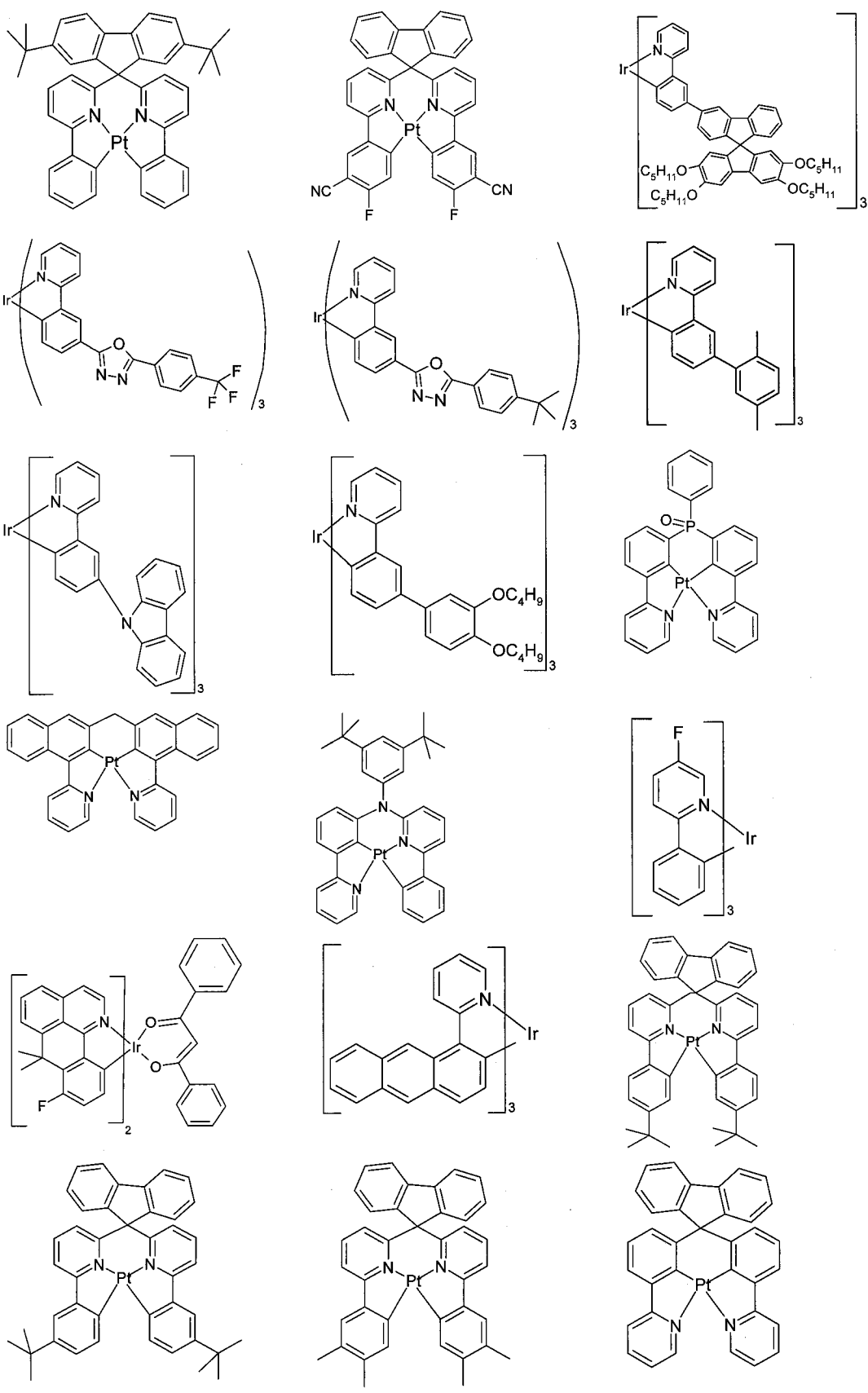


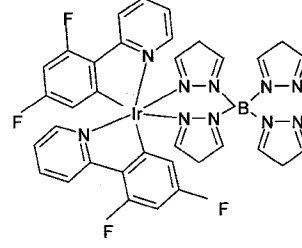
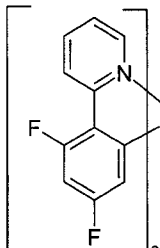
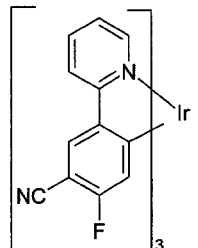
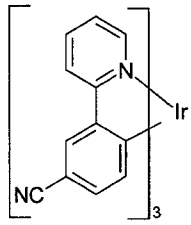
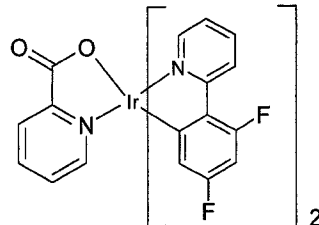
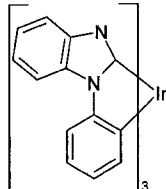
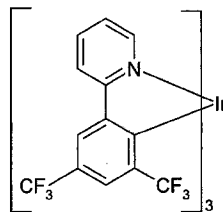
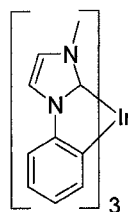
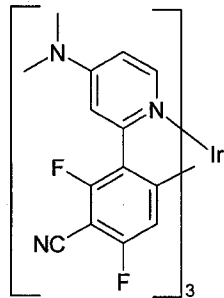
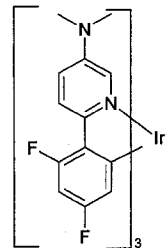
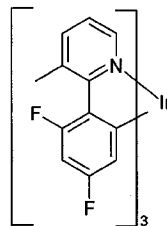
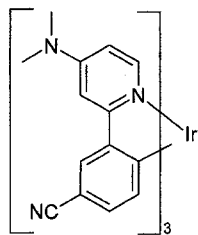
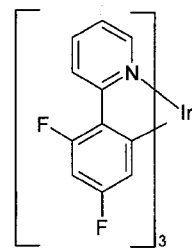
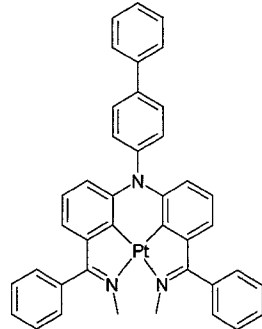
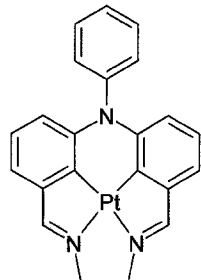
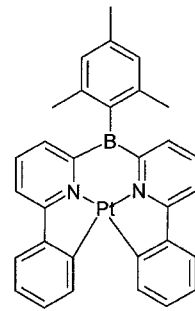
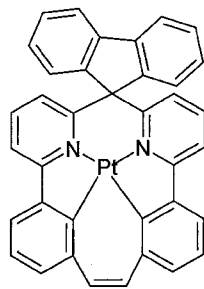
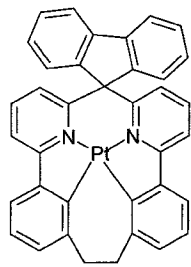


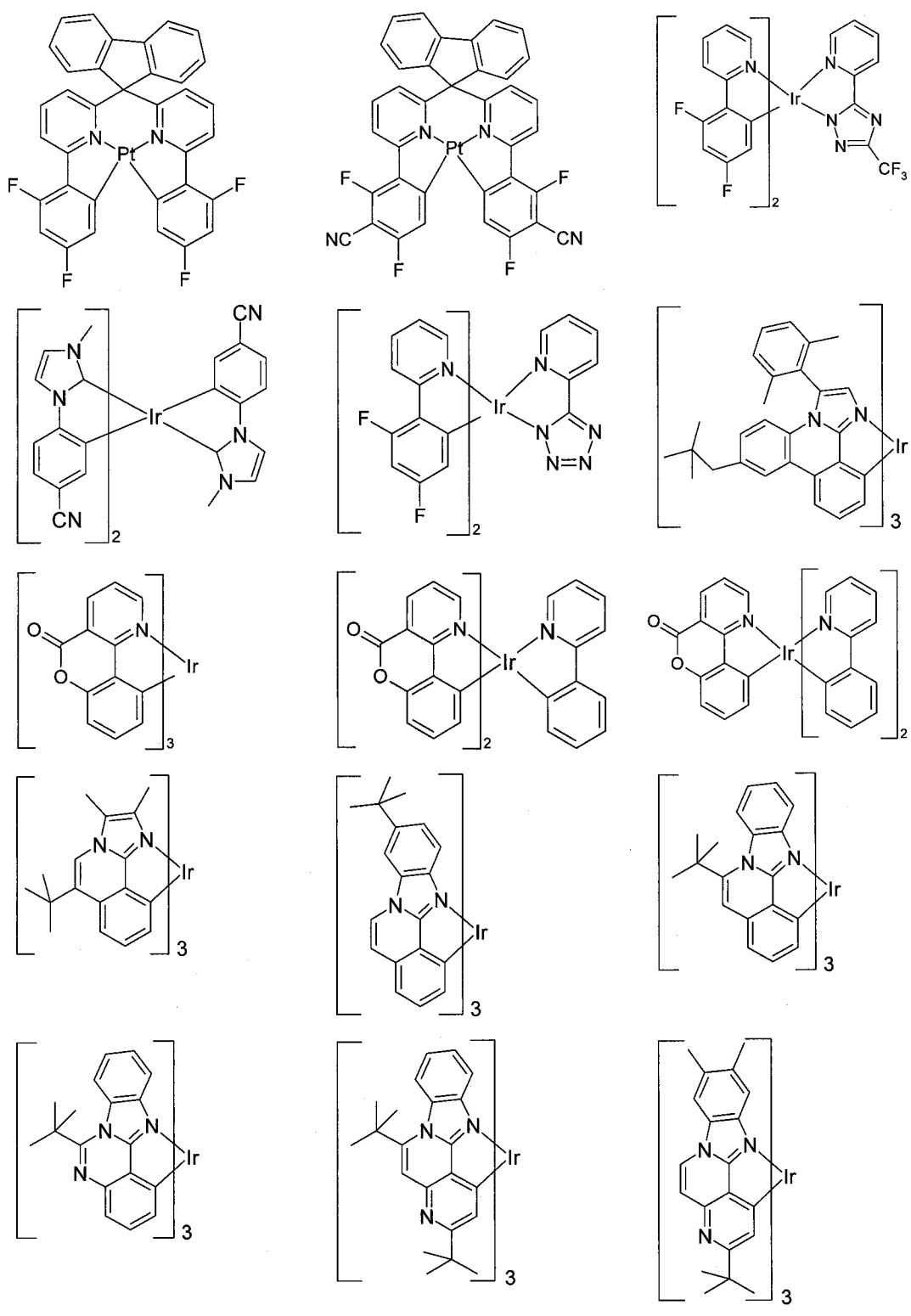


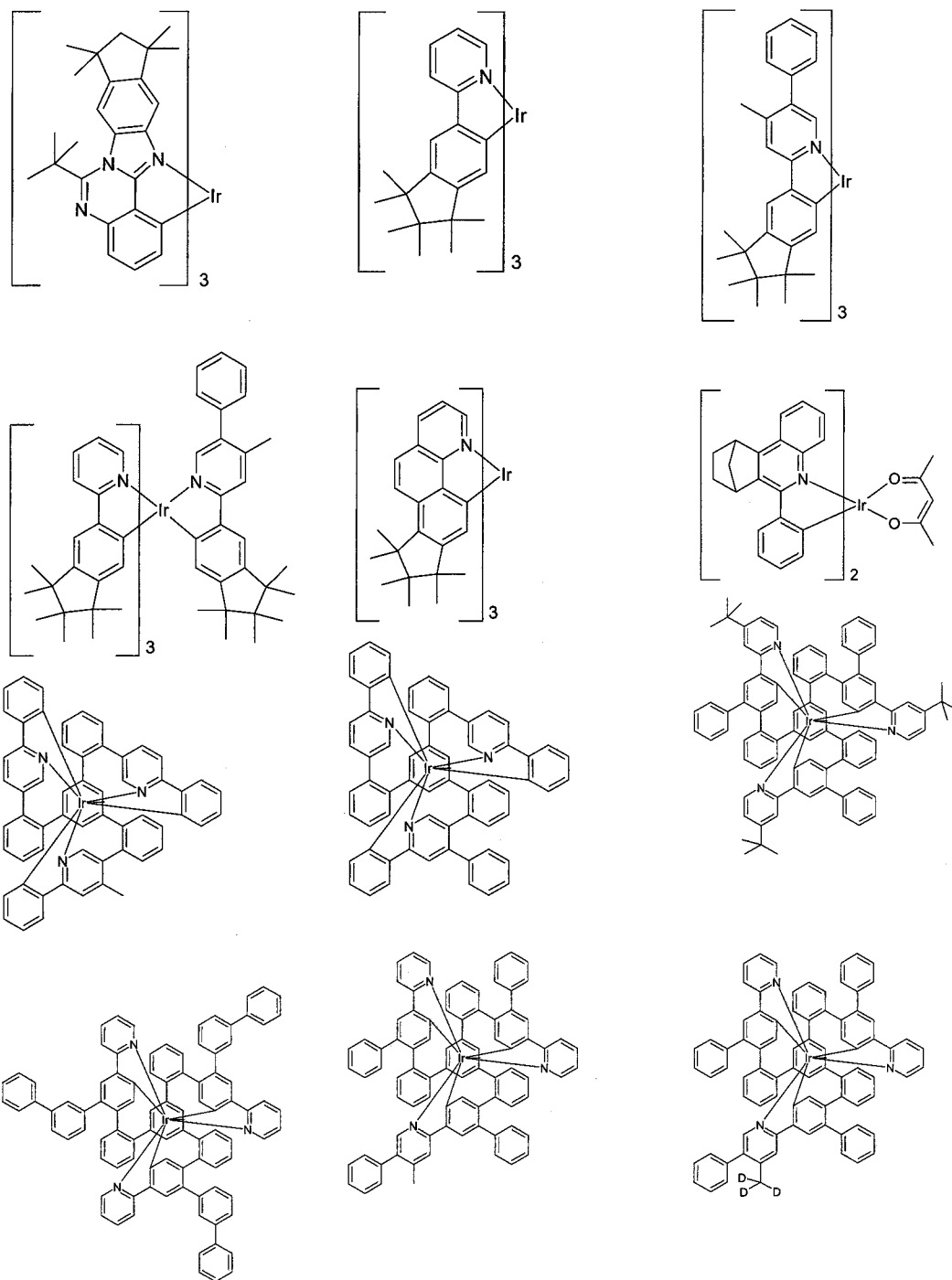












包含式(I)結構或上文詳述較佳實施態樣之上述化合物較佳地作為電子裝置中之活性組件。電子裝置要理解為包含陽極、陰極及介於陽極與陰極之間的至少一層之任何裝置，該介於陽極與陰極之間的至少一層包含至少一種有機

或有機金屬化合物。故本發明之電子裝置包含陽極、陰極及至少一個插入層，該至少一個插入層含有至少一種包含式(I)結構之化合物。此處較佳電子裝置選自由以下所組成之群組：有機電激發光裝置(OLED, PLED)、有機積體電路(O-IC)、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)、有機太陽能電池(O-SC)、有機光學偵測器、有機光感受器、有機場猝滅裝置(O-FQD)、有機電感測器、發光電化學電池(LEC)，較佳地為有機發光電化學電池(OLEC)、有機雷射二極體(O-laser)及有機電漿子發射裝置(D. M. Koller *et al.*, *Nature Photonics* **2008**, 1-4)，較佳地有機電激發光裝置(OLED, PLED)或有機發光電化學電池(OLEC)、尤其是磷光OLED或有機發光電化學電池OLEC，彼等於至少一層中含有至少一種包含式(I)結構之化合物。提供之特別佳者為有機電激發光裝置。活性組件通常為引至陽極與陰極之間的有機或無機材料，例如電荷注入、電荷傳輸或電荷阻擋材料，但尤其為發射材料及基質材料。

本發明之較佳實施態樣為有機電激發光裝置。有機電激發光裝置包含陰極、陽極及至少一個發射層。除了這些層之外，其亦可包含其他層，例如於每一情況下包含一或多個電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、電子傳輸層、電子注入層、激子阻擋層、電子阻擋層、電荷產生層及/或有機或無機p/n界面。同時，可以是一或多個電洞傳輸層例如以金屬氧化物諸如MoO₃或WO₃或以(全)氟化之缺

電子芳族系統進行 p-摻雜，且/或一或多個電子傳輸層為 n-摻雜。同樣可以有被引至兩個發射層之間的中間層，彼等具有例如激子阻擋功能及/或控制電激發光裝置中之電荷平衡。然而應指出，未必這些層中之每一層都必需存在。

此情況下，有機電激發光裝置可以含有發射層，或者其可含有複數個發射層。如果存在複數個發射層，則彼等較佳地在整體 380 nm 至 750 nm 之間具有數個最大發射峰，使得整體結果為發射白光；換言之，係使用可發螢光或磷光之各種發光化合物於發射層中。尤佳者為三層系統，其中該三層顯現藍、綠及橙或紅光之發射(有關基本構造例如參見 WO 2005/011013)；或為具有大於三個發射層之系統。系統亦可為混合系統(hybrid system)，其中一或多層發螢光且一或多個其他層發磷光。

本發明之較佳實施態樣中，有機電激發光裝置含有包含式(I)結構或上文詳述較佳實施態樣之本發明化合物作為一或多個發射層中的基質材料較佳地作為電子傳導性基質材料，較佳地與其他基質材料較佳地電洞傳導性基質材料組合。本發明之另一較佳實施態樣中，該其他基質材料為電子傳輸化合物。又另一較佳實施態樣中，該其他基質材料為具有大能帶間隙而未顯著程度地涉及(如果有的話)層中之電洞及電子傳輸的化合物。發射層包含至少一種發光化合物。

可與式(I)化合物或根據較佳實施態樣組合使用之適當基質材料為芳族酮、芳族磷氧化物或芳族亞砷或砷、例如

根據 WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或WO 2010/006680，三芳基胺，尤其是單胺、例如根據 WO 2014/015935、咪唑衍生物、例如CBP(N,N-雙咪唑基聯苯)，或揭示於 WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527、或 WO 2008/086851中之咪唑衍生物，吡啶并咪唑衍生物、例如根據 WO 2007/063754或WO 2008/056746，茚并咪唑衍生物、例如根據 WO 2010/136109或WO 2011/000455、氮雜咪唑衍生物、例如根據 EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160，雙極基質材料、例如根據 WO 2007/137725，矽烷、例如根據 WO 2005/111172，氮雜硼雜環戊烯或酮酸酯、例如根據 WO 2006/117052，三吡啶衍生物、例如根據 WO 2010/015306、WO 2007/063754或WO 2008/056746，鋅錯合物、例如根據 EP 652273或WO 2009/062578，二氮雜矽雜噻咯(diazasilole)或四氮雜矽雜噻咯(tetraazasilole)衍生物、例如根據 WO 2010/054729、二氮雜磷雜環戊二烯(diazaphosphole)衍生物、例如根據 WO 2010/054730，橋連咪唑衍生物、例如根據 US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877或WO 2012/143080，伸聯三苯衍生物、例如根據 WO 2012/048781，內醯胺、例如根據 WO 2011/116865、WO 2011/137951或WO 2013/064206，或4-螺咪唑衍生物、例如根據 WO 2014/094963或尚未公開之申請案 EP 14002104.9。同樣地可以有發射比實際發射體更

短波長的其他磷光發射體存在作為混合物中的共主體 (co-host)。

較佳之共主體 (co-host) 材料為三芳基胺衍生物、尤其是單胺、茛苳并吡啶衍生物、4-螺吡啶衍生物、內醯胺及吡啶衍生物。

亦較佳地係使用複數種不同基質材料作為混合物，尤其是至少一種電子傳導性基質材料及至少一種電洞傳導性基質材料。同樣地提供之較佳者為使用電荷傳輸基質材料與未顯著涉及(如果有的話)電荷傳輸之電惰性基質材料(如同例如於 WO 2010/108579 中所述)的混合物。

進一步較佳地係使用二或多種三重態發射體連同基質之混合物。此情況下，具有較短波發射光譜之三重態發射體係充作具有較長波發射光譜之三重態發射體的共基質 (co-matrix)。

更佳地，可以使用包含式 (I) 結構之本發明化合物，於較佳實施態樣中，作為有機電子裝置、尤其是有機電激發光裝置、例如 OLED 或 OLEC 中之發射層的基質材料。此情況下，含有包含式 (I) 結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物的基質材料係與一或多種摻雜劑較佳地磷光摻雜劑組合地存在於電子裝置中。

此情況下發射層中之基質材料的比例在螢光發射層方面介於 50.0 體積 % 至 99.9 體積 % 之間、較佳地介於 80.0 體積 % 至 99.5 體積 % 之間、且更佳地介於 92.0 體積 % 至 99.5 體積 % 之間，而在磷光發射體方面係介於 85.0 體積 % 至 97.0 體積 % 之間。

%之間。

相應地，摻雜劑的比例在螢光發射層方面介於0.1體積%至50.0體積%之間、較佳地介於0.5體積%至20.0體積%之間、且更佳地介於0.5體積%至8.0體積%之間，而在磷光發射體方面係介於3.0體積%至15.0體積%之間。

有機電激發光裝置之發射層亦可包含含有複數種基質材料(混合基質系統)及/或複數種摻雜劑的系統。亦於此情況下，摻雜劑通常為於系統中具有較小比例的材料，而基質材料為於系統中具有較大比例的材料。然而，個別情況下，系統中之單一基質材料的比例可小於單一摻雜劑的比例。

本發明之另一較佳實施態樣中，該包含式(I)結構或上文所述較佳實施態樣之化合物係作為混合基質系統的組份。混合基質系統較佳地包含二或三種不同的基質材料、更佳地二種不同的基質材料。較佳地，於此情況下，二種材料之一者為具有電洞傳輸性質的材料且另一材料為具有電子傳輸性質的材料。然而，混合基質組份的期望電子傳輸及電洞傳輸性質亦可主要地或完全地組合於單一混合基質組份中，於此情況下，其他混合基質組份可滿足其他功能。兩種不同的基質材料可以1:50至1:1、較佳地1:20至1:1、更佳地1:10至1:1且最佳地1:4至1:1的比例存在。提供之較佳者為使用混合基質系統於磷光有機電激發光裝置中。有關混合基質系統之更詳細訊息的一來源為申請案WO 2010/108579。

本發明進一步提供電子裝置、較佳地有機電激發光裝置或有機電化學電池，其包含一或多種本發明化合物及/或至少一種本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於一或多個發射層中作為基質材料。

本發明另外提供電子裝置、較佳地有機電激發光裝置或有機電化學電池，其包含一或多種本發明化合物及/或至少一種本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於一或多個發射層中作為發射體材料。

較佳之陰極為具有低功函數的金屬、金屬合金或由各種金屬例如鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑰系元素(例如Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等等)構成之多層結構。另外適當者為由鹼金屬或鹼土金屬及銀所構成之合金，例如由鎂及銀構成之合金。在多層結構之情況下，除了所述之金屬之外，亦可使用具有相對高功函數的其他金屬例如Ag，在此情況下，通常使用金屬之組合諸如Mg/Ag、Ca/Ag或Ba/Ag。較佳地亦可在金屬陰極與有機半導體之間引入具有高介電常數之材料的薄中間層。供此目的之有用材料實例為鹼金屬或鹼土金屬氟化物，但亦可為相應之氧化物或碳酸鹽(例如LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃等等)。同樣地可用於此目的者為有機鹼金屬錯合物，例如Liq(喹啉醇鋰)(lithium quinolate)。此層之層厚度較佳地在0.5至5 nm之間。

較佳之陽極為具有高功函數的材料。陽極較佳地具有相對於真空大於4.5 eV的功函數。首先，具有高氧化還原

電位的金屬例如 Ag、Pt 或 Au 適於供此目的。其次，金屬/金屬氧化物電極(例如 Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x)亦佳。一些應用方面，所述電極中至少一者必需為透明或部分透明而使能夠達成有機材料的照射(O-SC)或光的發射(OLED/PLED，O-laser)。此處較佳之陽極材料為導電混合型金屬氧化物。提供之特別佳者為氧化銦錫(ITO)或氧化銦鋅(IZO)。進一步提供之較佳者為導電性摻雜型有機材料，尤其是導電性摻雜型聚合物，例如 PEDOT、PANI 或這些聚合物之衍生物。進一步較佳地是 p 摻雜型電洞傳輸材料作為電洞注入層地被施至陽極，此情況下適當的 p 摻雜劑為金屬氧化物例如 MoO₃ 或 WO₃、或(全)氟化缺電子芳族系統。其他適當之 p 摻雜劑為 HAT-CN(六氰基六氮雜聯伸三苯)或得自 Novald 之 NPD9。此型式之層簡化了電洞注入至具有低 HOMO 亦即在大小方面為大 HOMO 的材料中。

其他層中，通常可以使用根據先前技藝用於所述層的任何材料，且熟諳此藝者可以在不運用本發明技能的情況下將電子裝置中的任何這些材料與本發明材料組合。

所述裝置被相應地(根據其應用)結構化、觸點接通且最後被密封，因為此些裝置的壽命於水及/或空氣的存在下嚴重地縮短之故。

另外較佳者為電子裝置、尤其為有機電激發光裝置，其特徵在於一或多個層藉由昇華法塗佈。此情況下，材料係藉蒸氣沈積法於真空昇華系統中、於典型地小於 10⁻⁵ 毫巴、較佳地小於 10⁻⁶ 毫巴之起始壓力下施加。起始壓力亦

可以甚至更低或甚至更高，例如小於 10^{-7} 毫巴。

同樣地提供之較佳者為電子裝置、尤其是有機電激發光裝置，其特徵在於一或多個層藉 OVPD(有機汽相沈積)法或經由載流氣體昇華的協助來塗佈。此情況下，材料係於 10^{-5} 毫巴至1巴之間的壓力施加。此方法之特別案例為 OVJP(有機蒸氣噴印)法，其中所述材料係藉由噴嘴直接施加且因此結構化(例如，M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, 92, 053301)。

另外提供之較佳者為電子裝置、尤其是有機電激發光裝置，其特徵在於一或多個層係由溶液中例如藉旋塗法或藉任何印刷法例如網版印刷法、柔版印刷法、平版印刷法或噴嘴印刷法，但更佳地 LITI(光誘導熱成像法、熱轉印法)或噴墨印刷法製得。欲供此目的，需要可溶性化合物，其係例如經由適當之取代而得。

電子裝置、尤其是有機電激發光裝置亦可藉由溶液中施加一或多個層及藉蒸氣沈積法施加一或多個其他層而製成混合系統。例如，可以由溶液中施加包含含有式(I)結構之本發明化合物及基質材料的發射層，再藉於減壓下進行蒸氣沈積法將電洞阻擋層及/或電子傳輸層施加至其上。

這些方法通常為熟諳此藝者已知且可毫無困難地應用至包含含有式(1)結構或上文詳述較佳實施態樣之本發明化合物的電子裝置、尤其是有機電激發光裝置上。

本發明之電子裝置尤其是有機電激發光裝置具有顯著之下列一或多個出人意外之優於先前技藝的優點：

1. 電子裝置、尤其是有機電激發光裝置且極特別地有機發光二極體或有機發光電化學電池(其包含具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，尤其作為電子傳導性材料)具有極良好之壽命。
2. 電子裝置、尤其是有機電激發光裝置且極特別地有機發光二極體或有機發光電化學電池(其包含具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，作為電子傳導性材料、電子注入材料及/或主體材料)具有優良之效率。更特別地，其效率遠高於未含有式(I)結構單元的類似化合物。本上下文中，具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物當用於電子裝置中時，導致低操作電壓。本上下文中，這些化合物於高亮度下尤其導致低的衰減，亦即裝置的功率效率之小幅下降。
3. 具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物顯現極高的安定性(例如氧化還原安定性、熱安定性及光化學安定性)且導致具有極長壽命的化合物。
4. 使用具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物可以避免電子裝置尤其是有機電激發光裝置且極特別地

有機發光二極體或有機發光電化學電池中之光損失通道之形成。結果，這些裝置以高PL效率且因此發射體之高EL效率、及基質至摻雜劑的優良能量傳遞為特徵。

5. 使用具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於電子裝置尤其是有機電激發光裝置且極特別地有機發光二極體或有機發光電化學電池中可導致電子導體結構的高移動率。
6. 具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物以優良之熱安定性為特徵，且具有小於約1200 g/mol莫耳質量之化合物具有良好之昇華性。
7. 具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物具有優良之玻璃薄膜形成。
8. 具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物可由溶液中形成極良好之薄膜。
9. 具有式(I)結構或上下文所述較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物具有驚人地高之三重態能階 T_1 ，此在用作為電子傳導性材料之化合物上特別真實。

上述優點並未伴隨其他電子性質的劣化。

本發明之化合物及混合物適用於電子裝置中。電子裝置要理解為意指含有至少一個含有至少一種有機化合物之層的裝置。組件亦可包含無機材料或另為完全地由無機材料形成之層。

因此本發明進一步提供本發明之化合物及混合物於電子裝置中、特別於有機電激發光裝置中之用途。

本發明又進一步提供本發明化合物及/或本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於電子裝置中作為TADF材料、主體材料、電洞導體材料、電子注入材料及/或電子傳輸材料，較佳地作為TADF材料、主體材料、電洞導體材料及/或電子傳輸材料之用途。

本發明又進一步提供電子裝置，其包含至少一種上文詳述之本發明化合物或混合物。此情況下，上文詳述之有關化合物的偏好亦適用於電子裝置。提供之特別佳者為選自由以下所組成之群組的電子裝置：有機電激發光裝置(OLED, PLED)、有機積體電路(O-IC)、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)、有機太陽能電池(O-SC)、有機光學偵測器、有機光感受器、有機場猝滅裝置(O-FQD)、有機電感測器、發光電化學電池(LEC)、較佳地有機發光電化學電池(OLEC)、有機雷射二極體(O-laser)及有機電漿子發射裝置(D. M. Koller *et al.*, *Nature Photonics* **2008**, 1-4)、較佳地有機電激發光裝置(OLED, PLED)或有機發光電化學電池(OLEC)、尤其是磷光或螢光OLED 或螢光OLEC。

本發明之進一步實施態樣中，本發明之有機電激發光裝置並未含有任何個別的電洞注入層及/或電洞傳輸層及/或電洞阻擋層及/或電子傳輸層，意指發射層係直接鄰接電洞注入層或陽極，及/或發射層係直接鄰接電子傳輸層或電子注入層或陰極，例如如同於 WO 2005/053051 所述地。另外可以使用相同或類似於發射層中之金屬錯合物的金屬錯合物作為直接鄰接至發射層的電洞傳輸或電洞注入材料，例如如同於 WO 2009/030981 所述。

此外，亦可使用本發明化合物於電子傳輸層中。

本發明之有機電激發光裝置的其他層中，可以使用根據先前技藝典型地使用之任何材料。因此熟諳此藝者可無需運用本發明技能地使用已知可與本發明式 (I) 或根據較佳實施態樣之化合物組合使用的用於有機電激發光裝置之任何材料。

本發明化合物對於在有機電激發光裝置的用途上通常具有極良好的性質。尤其是本發明化合物用於有機電激發光裝置中的情況下，與根據先前技藝之類似化合物相比，其壽命顯著較佳。同時，有機電激發光裝置的其他性質尤其是效率及電壓同樣地較佳或至少可相比。

應該指出的是，本發明中所述之實施態樣的變化乃涵蓋在本發明之範圍內。除非明確排除，否則本發明中所揭示之任何特徵均可以適合相同目的或等效或類似目的的替代性特徵來交換。因此，除非另有指定，否則本發明中所揭示之任何特徵均應被視為是通用系列的實例或被視為是

等效或類似特徵。

本發明之所有特徵均可以任何方式彼此組合，除了有特別之特徵及/或步驟互相排斥除外。此在本發明之較佳特徵上尤其真實。同樣地，非必要組合之特徵可分開使用（且不是以組合方式）。

亦應指出的是，許多特徵且尤其是本發明之較佳實施態樣者，本身應被視為是本發明而非僅是本發明之一些實施態樣。有關這些特徵方面，可尋求除此之外的獨立保護或作為任何當前申請專利發明的替代者。

連同本發明一起揭示之技術教示可予摘要化且與其他實例組合。

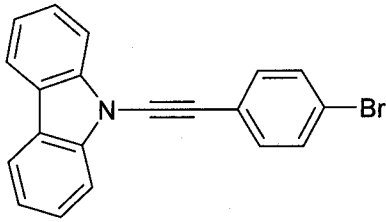
本發明藉由下列實例詳細闡述，但不意在藉此限制之。

熟諳此藝者可無需運用本發明技能地使用所提供之細節以製造本發明之其他電子裝置且因此在所申請專利之整個範圍執行本發明。

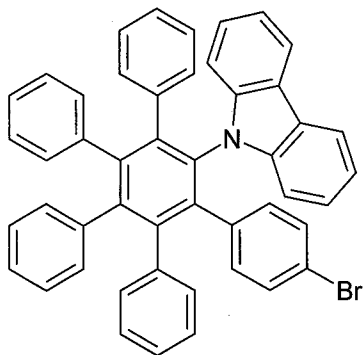
實例：

除非另有指定，否則下列合成係於保護性氣體氣氛下、於無水溶劑中進行。金屬錯合物額外地於排除光或於黃光下處理。溶劑及試劑可購自例如 Sigma-ALDRICH 或 ABCR。方括號內的個別數字或個別化合物指示的數字意指文獻中已知之化合物的 CAS 編號。

合成子之合成

實例 S1:

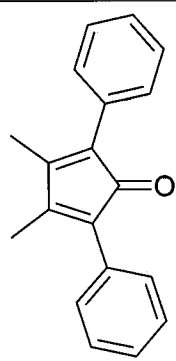
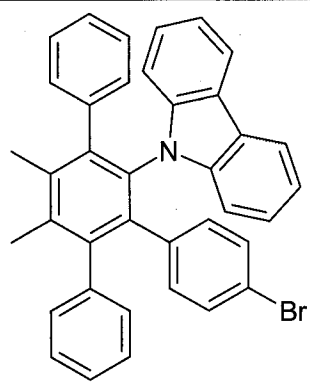
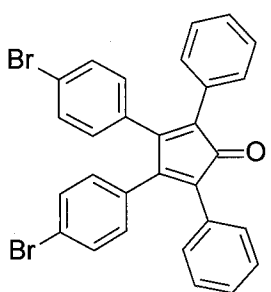
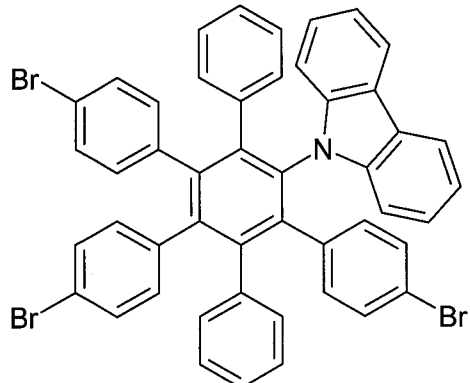
類似於 A. Sagadevan, et al., *Green Chemistry*, 17(2), 1113-1119; 2015之步驟。將 33.8 g(130 mmol)1-溴-4-(2-溴乙炔基)苯 [934-94-1]加至已充分攪拌之 16.7 g(100 mmol) 吡啶 [86-74-8]、34.6 g(250 mmol)碳酸鉀、2.5 g(10 mmol) 硫酸銅(II)五水合物 [7758-99-8]、3.6 g(20 mmol)喹啉、300 ml 甲苯及 50 g 玻璃珠之混合物中，然後將混合物於 80 °C 攪拌 16 小時。冷卻後，將混合物通過矽藻土 (Celite) 床過濾，將後者清洗通過，再將濾液濃縮至乾。將殘留物藉快速層析法(得自 Axel Semrau 之 CombiFlash Torrent) 予以純化。產量：23.2 g(67 mmol)，67%；純度：藉 ^1H NMR 測得為 95%。

實例 S100:

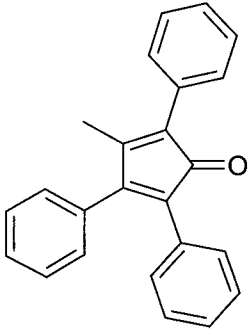
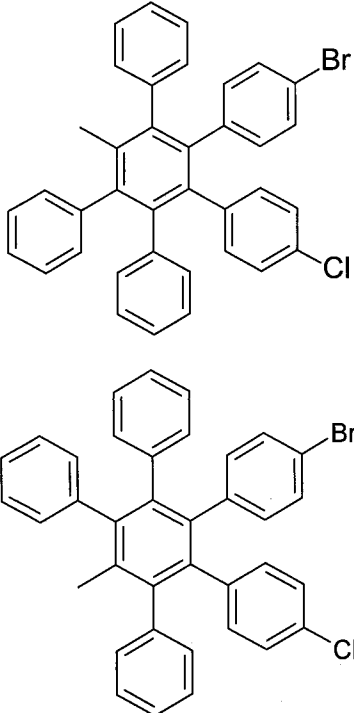
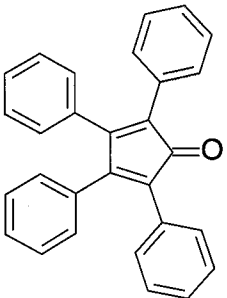
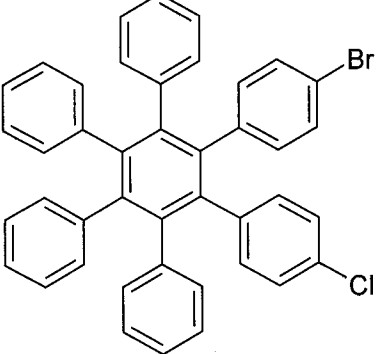
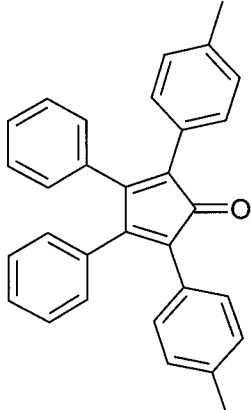
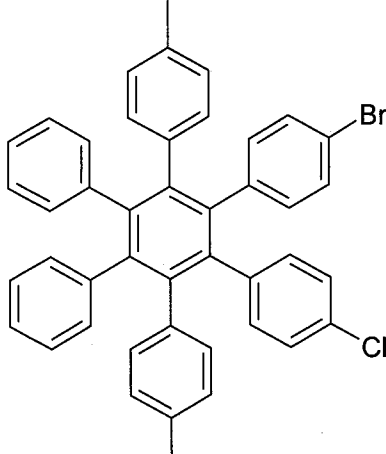
將 34.6 g(100 mmol) S1、38.5 g(100 mmol) 2,3,4,5-四苯基-2,4-環戊二烯-1-酮 [479-33-4]及 130 ml 二苯基醚之混

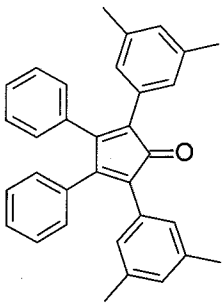
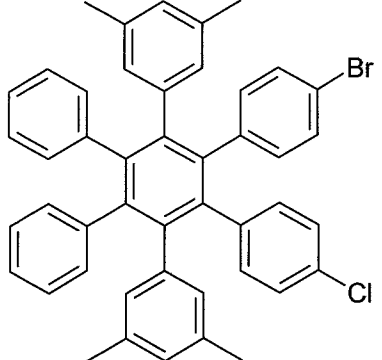
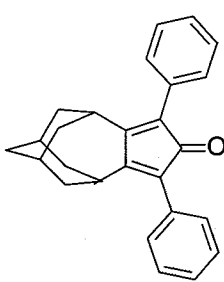
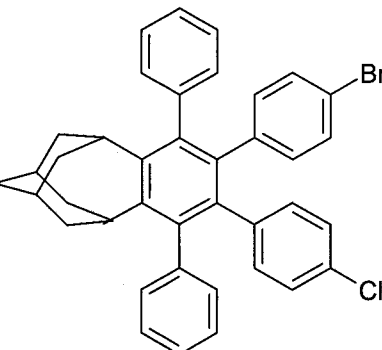
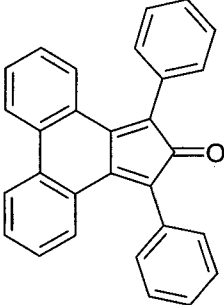
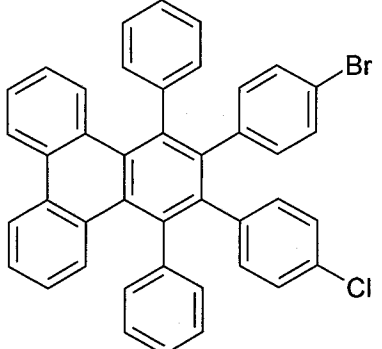
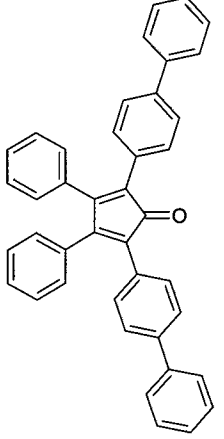
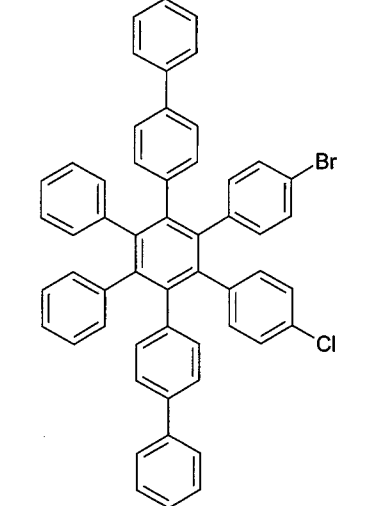
合物加熱至 265°C 24 小時。冷卻及將二苯基醚於減壓下移除後，將殘留物藉以 300 ml 乙醇沸煮進行萃取，再將固狀物空吸濾出，以每次 100 ml EtOH 清洗三次，再於減壓下乾燥。將殘留物藉快速層析法 (得自 Axel Semrau 之 CombiFlash Torrent) 純化。產量：51.4 g (73 mmol)，73%；純度：藉 ¹H NMR 測得為 98%。

以類似之方式，可以使用 S1 亦即 1-溴-4-[2-(4-氯苯基)乙炔基]苯 [832744-28-2] 作為親二烯物來製備下列化合物：

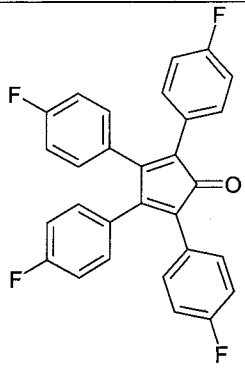
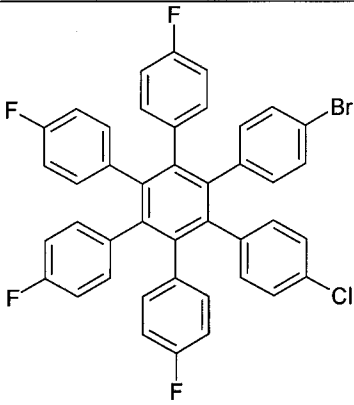
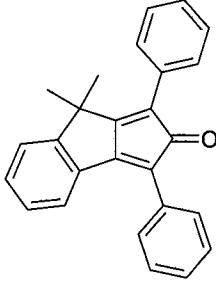
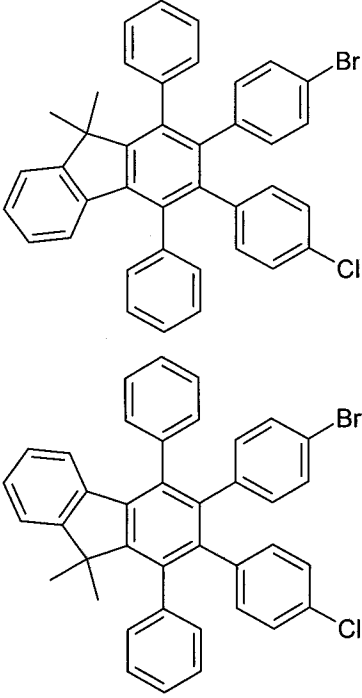
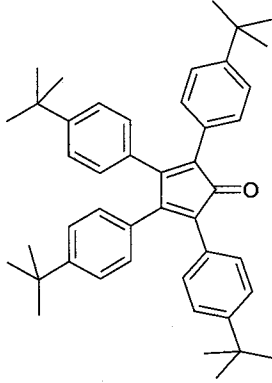
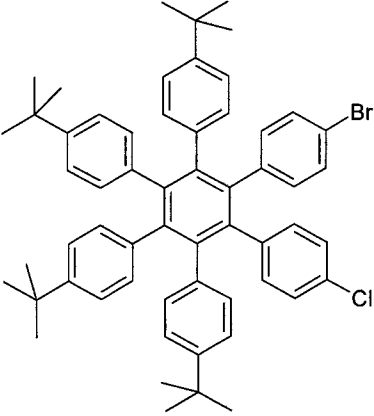
實例	二烯	產物	產率
S101	 <p>S1</p>		54%
S102	 <p>38268-11-0 S1</p>		56%

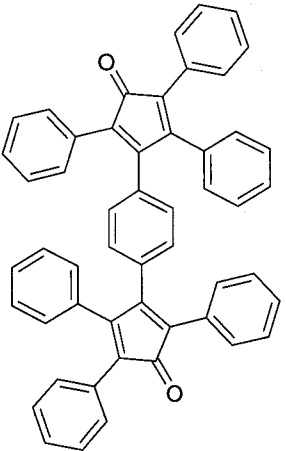
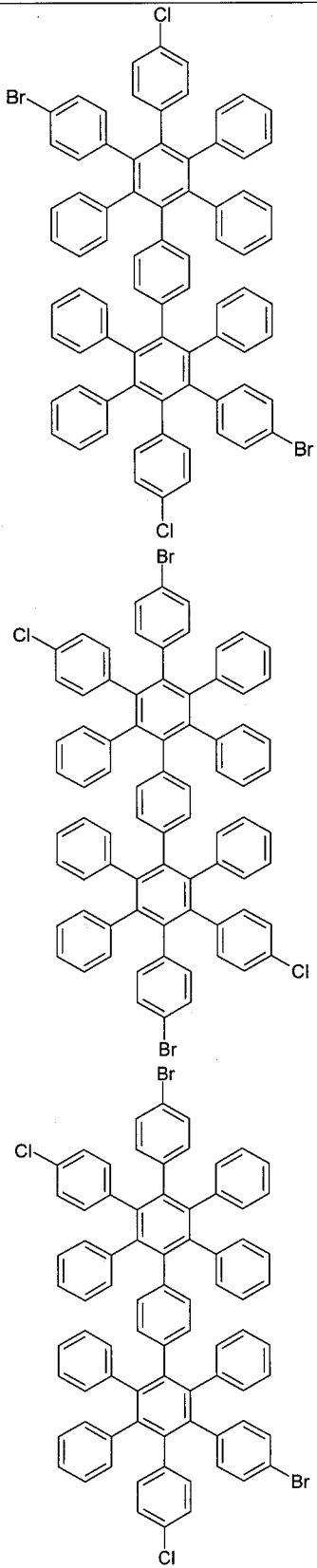
S103	<p>5660-91-3 S1</p>	<p>52%</p>
S104	<p>23414-46-2</p>	<p>63%</p>
S105	<p>412268-65-6</p>	<p>43%</p>
S106	<p>1607433-47-5</p>	<p>55%</p>

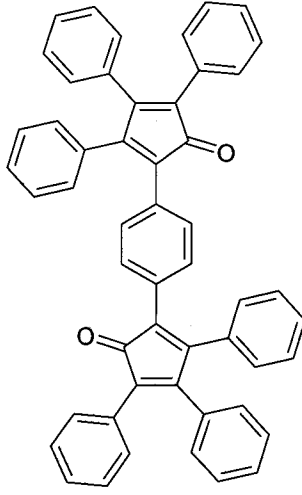
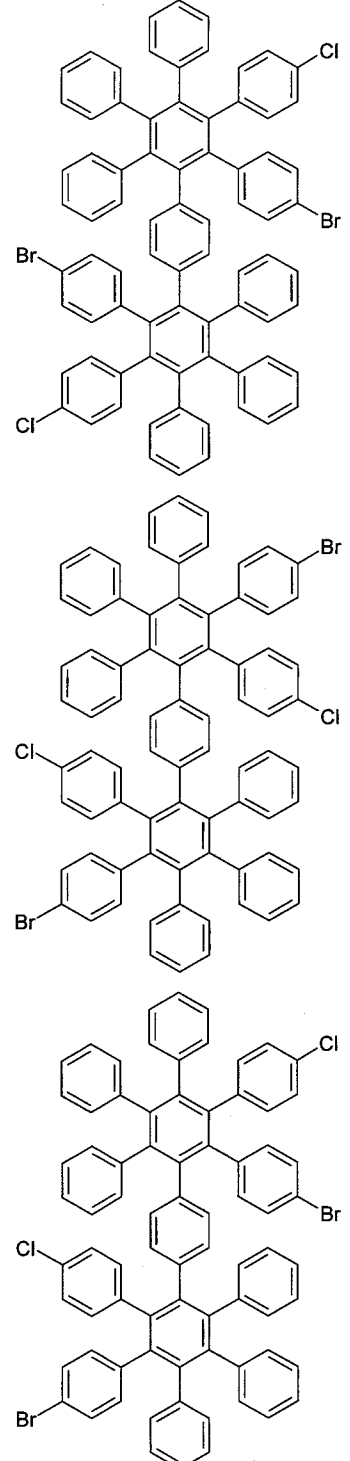
<p>S107</p>	 <p>107319-64-2</p>	 <p>異構物混合物</p>	<p>53%</p>
<p>S108</p>	 <p>479-33-4</p>		<p>67%</p>
<p>S109</p>	 <p>38268-18-7</p>		<p>60%</p>

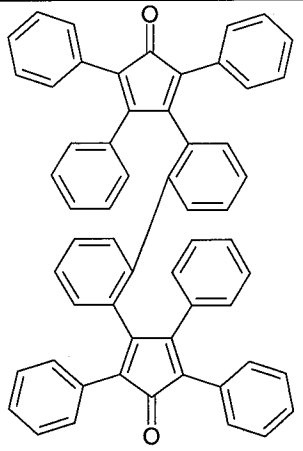
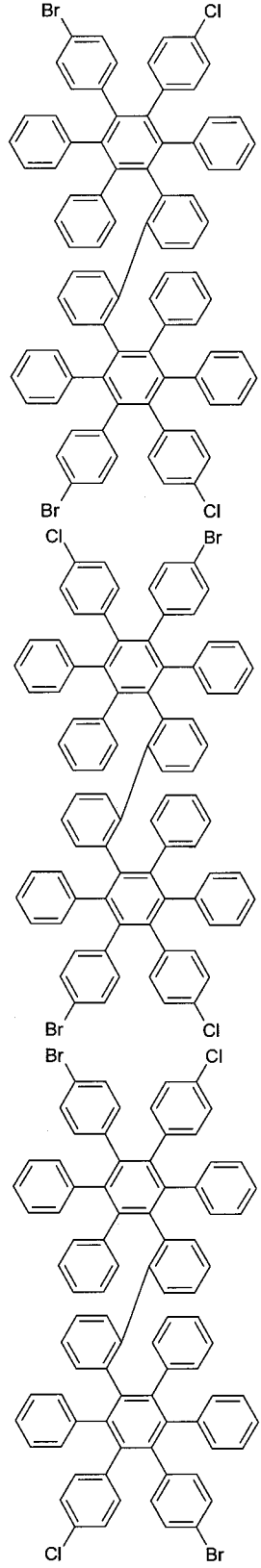
S110	 <p>356074-64-1</p>		63%
S111	 <p>106821-16-3</p>		68%
S112	 <p>5660-91-3 S1</p>		73%
S113	 <p>19059-92-8</p>		69%

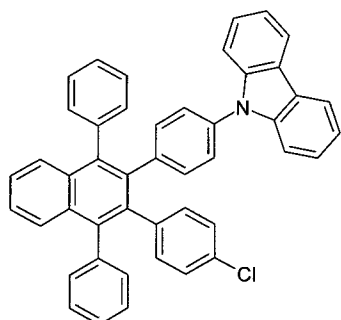
S114	<p>38268-11-0</p>	<p>57%</p>
S115	<p>54523-24-9</p>	<p>53%</p>
S116	<p>297154-31-2</p>	<p>62%</p>
S117	<p>1465020-42-1</p>	<p>43%</p>

S118	 <p>163132-55-6</p>		66%
S119	 <p>132665-86-2</p>	 <p>異構物混合物</p>	60%
S120	 <p>196505-83-6</p>		67%

<p>S121</p>	 <p>3432-73-3</p>	 <p>異構物混合物</p>	<p>61%</p>
-------------	--	---	------------

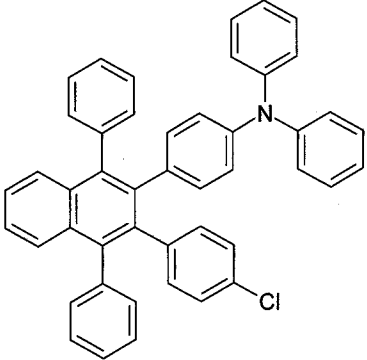
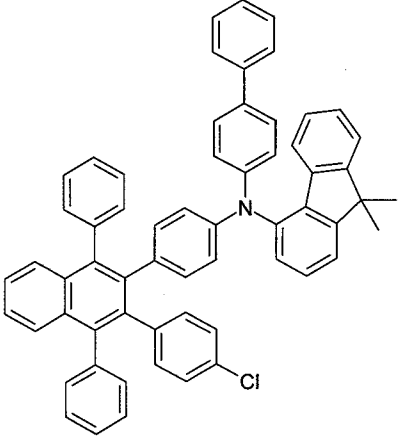
<p>S122</p>	 <p>1018691-33-2</p>	 <p>異構物混合物</p>	<p>63%</p>
-------------	---	---	------------

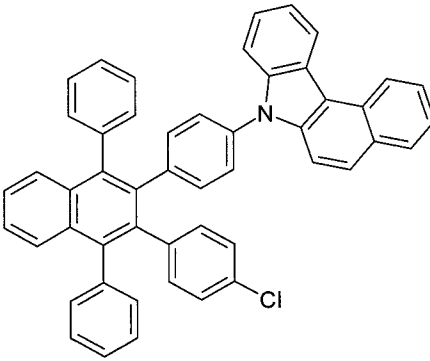
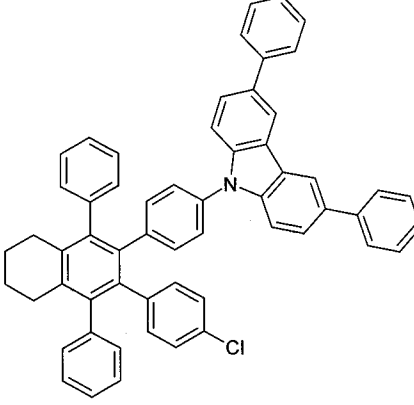
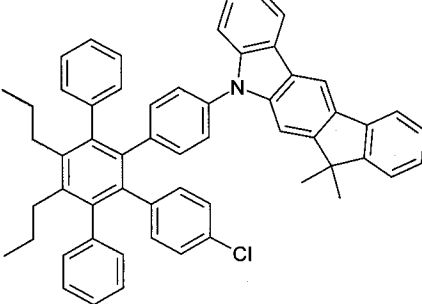
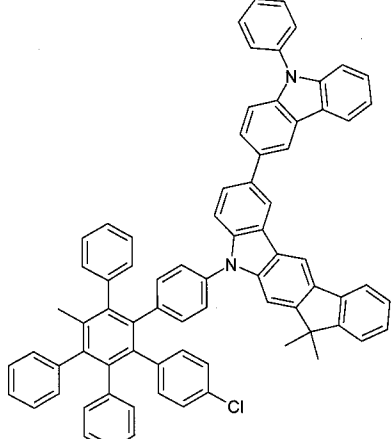
<p>S123</p>	 <p>30550-32-04</p>	 <p>異構物混合物</p>	<p>48%</p>
-------------	--	---	------------

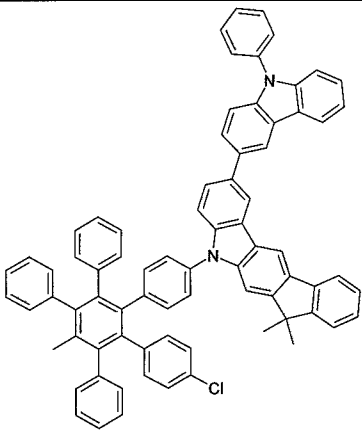
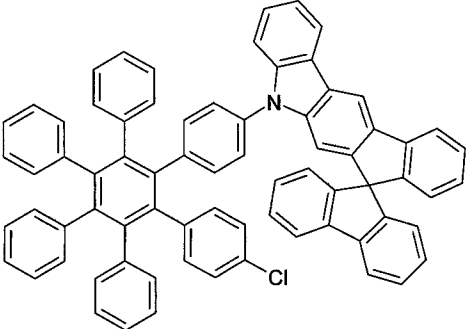
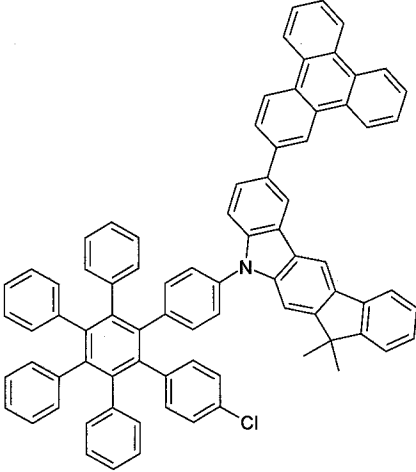
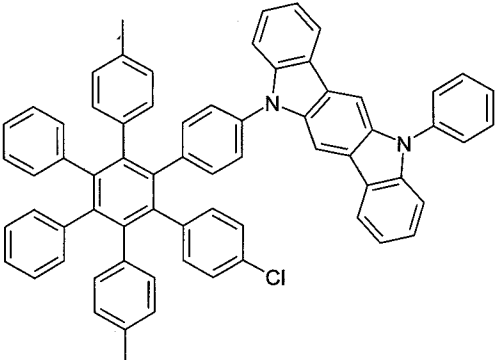
實例 S200: 布赫瓦爾德(BUCHWALD)偶合反應

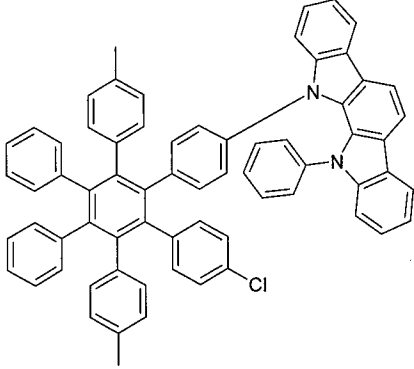
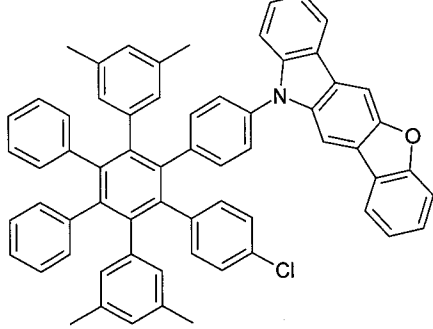
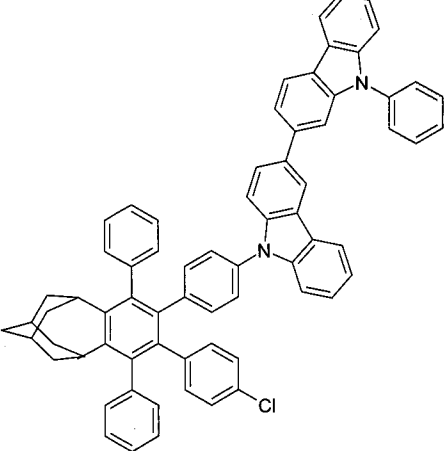
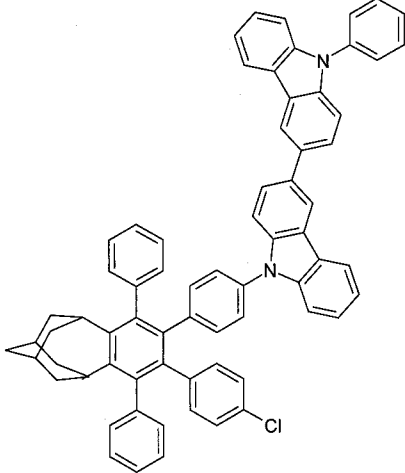
將 54.6 g (100 mmol) S104、16.7 g (100 mmol) 吡啶 [86-74-8]、41.5 g (300 mmol) 碳酸鉀、50 g 玻璃珠、700 ml 甲苯、405 mg (2 mmol) 三-三級丁基膦及 225 mg (1 mmol) 乙酸鈣之混合物邊良好攪拌邊於迴流下加熱 24 小時。冷卻後，將鹽以甲苯漿液形式通過矽藻土 (Celite) 床空吸濾出，將床以每次 100 ml 溫甲苯清洗通過三次，再將濾液以 500 ml 水清洗一次及以 300 ml 氯化鈉溶液清洗一次，再於硫酸鎂上乾燥。將已將乾燥劑濾出及已將溶劑移除後所得之固狀物進行層析 (矽膠，二氯甲烷)，然後由二甲基乙醯胺 (DMAC) 中予以再結晶。產量：46.1 g (73 mmol)，73%；純度：藉 ^1H NMR 測得為 97%。

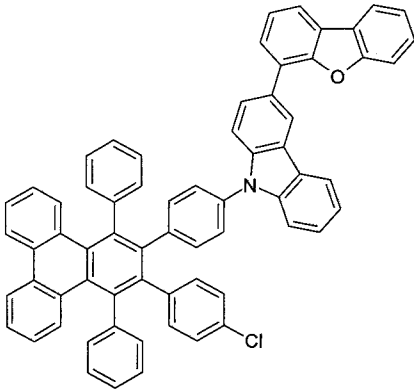
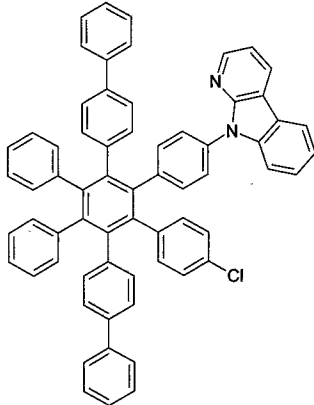
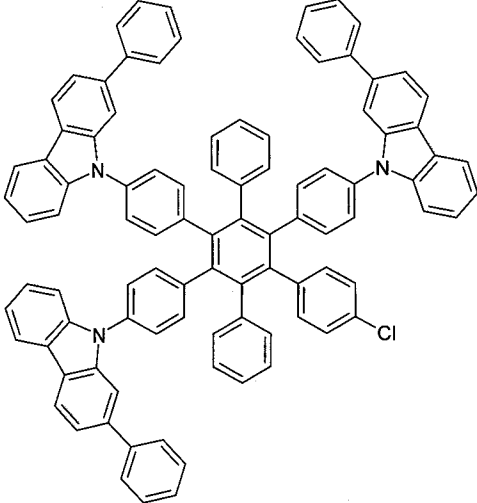
以類似之方式，可以使用 120 mmol 三級丁醇鈉而非碳酸鉀地供與二級胺進行偶合來製備下列化合物。

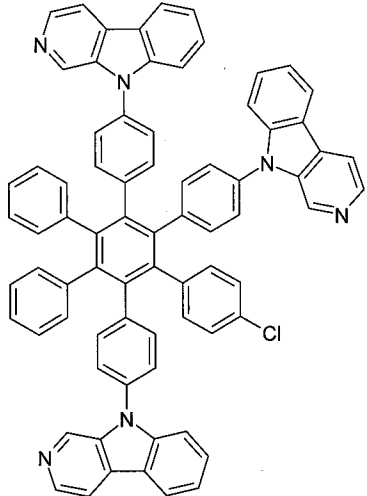
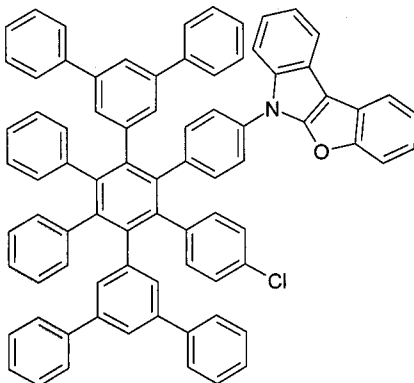
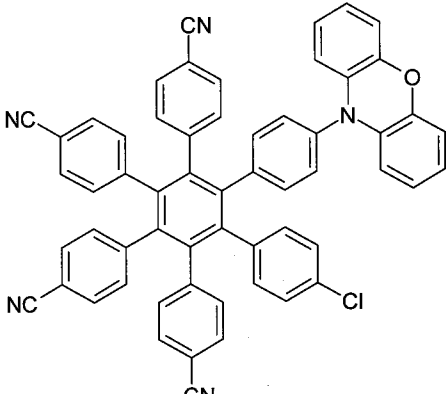
實例	反應物	產物	產率
S201	S104 122-39-4		58%
S202	S104 1421789-16-3		70%

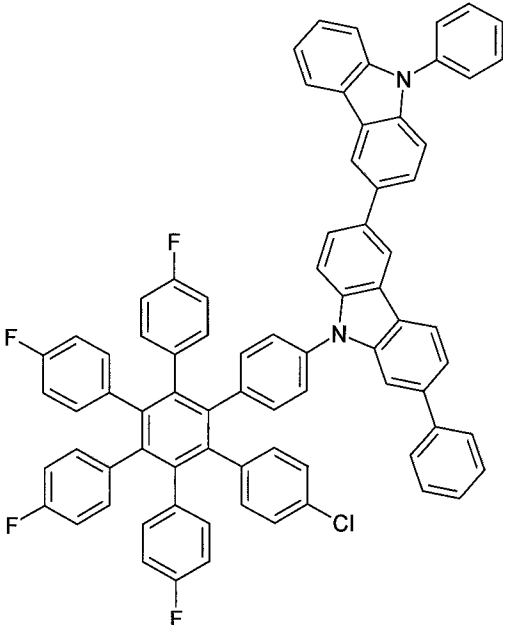
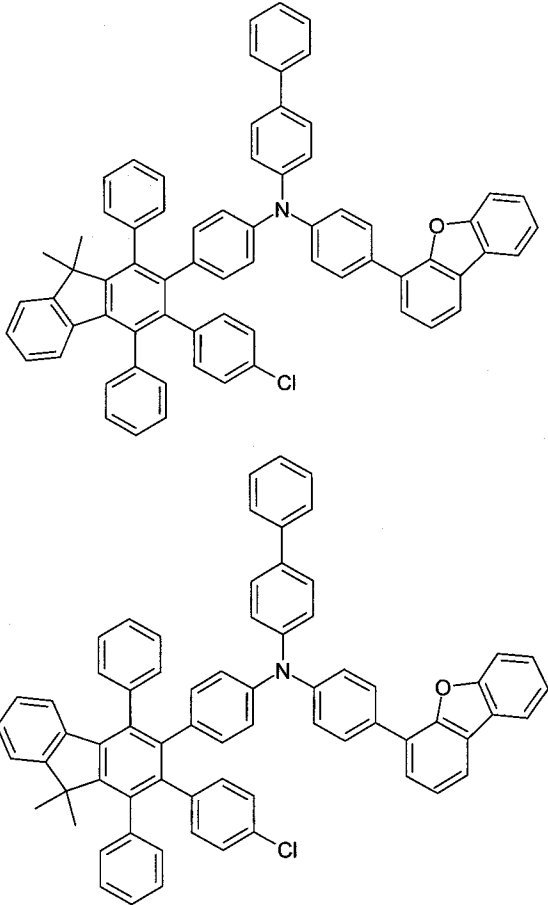
S203	S104 205-25-4		68%
S204	S105 56525-79-2		67%
S205	S106 1257220-47-5		72%
S206	S107 1466521-76-5		49%

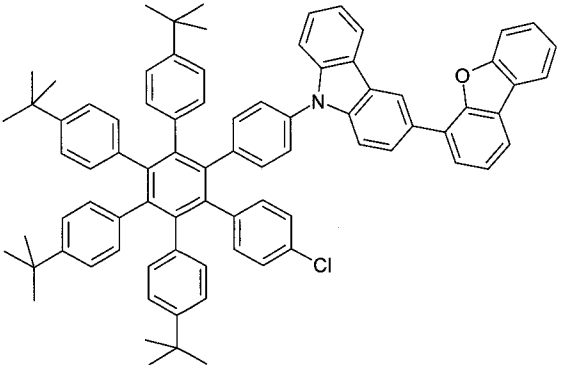
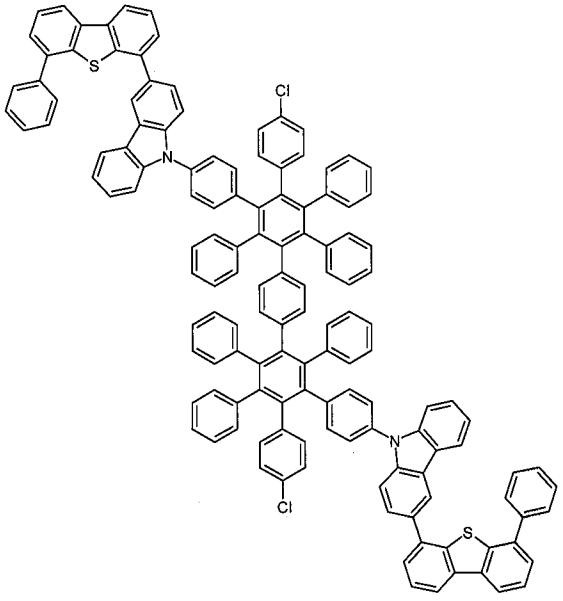
		 <p>異構物混合物</p>	
S207	S108 1257247-94-1		59%
S208	S108 1431284-23-9		55%
S209	S108 1316311-27-9		60%

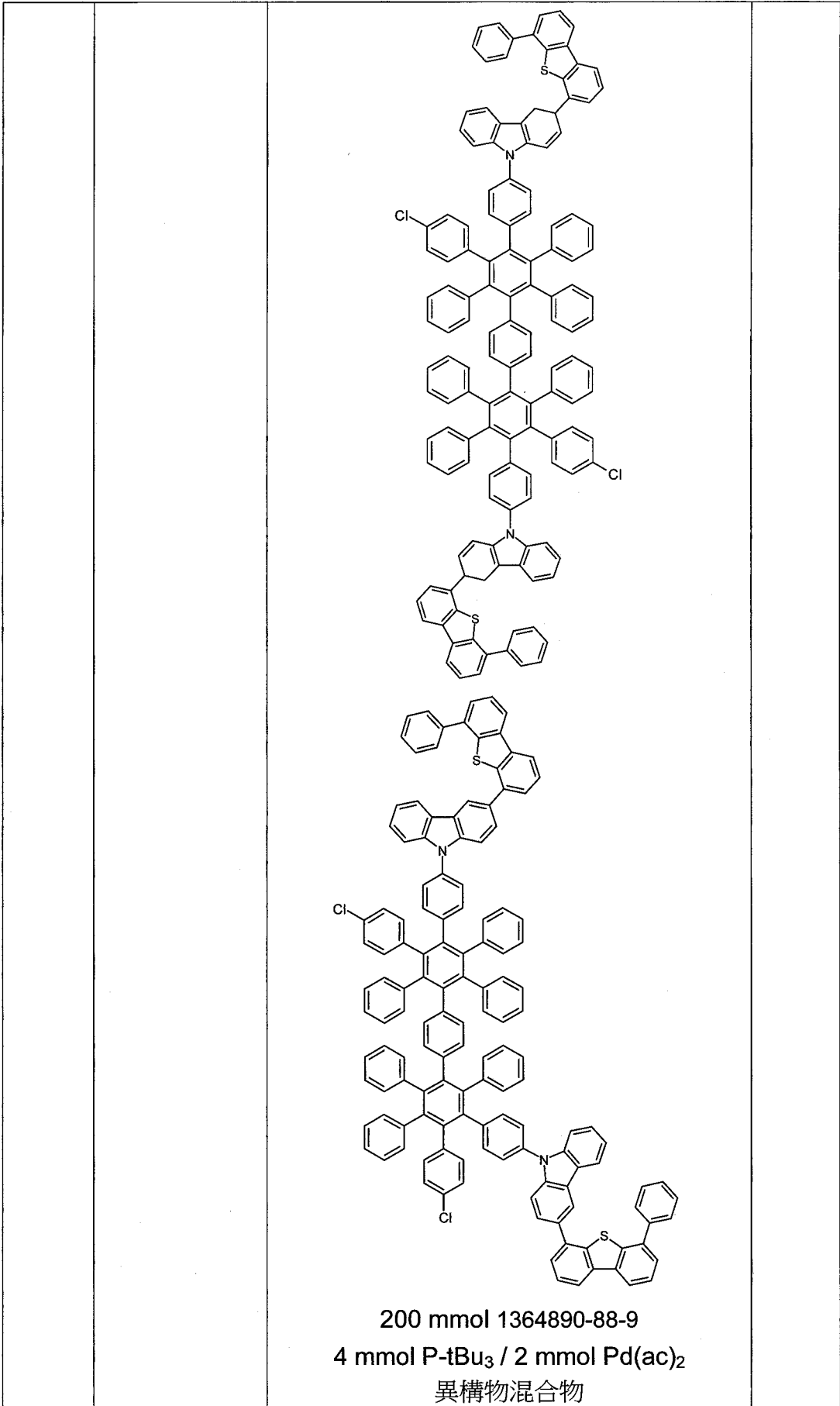
S210	S109 1024598-06-8		38%
S211	S110 1199350-22-5		70%
S212	S111 1382955-10-3		64%
S213	S111 1060735-14-9		60%

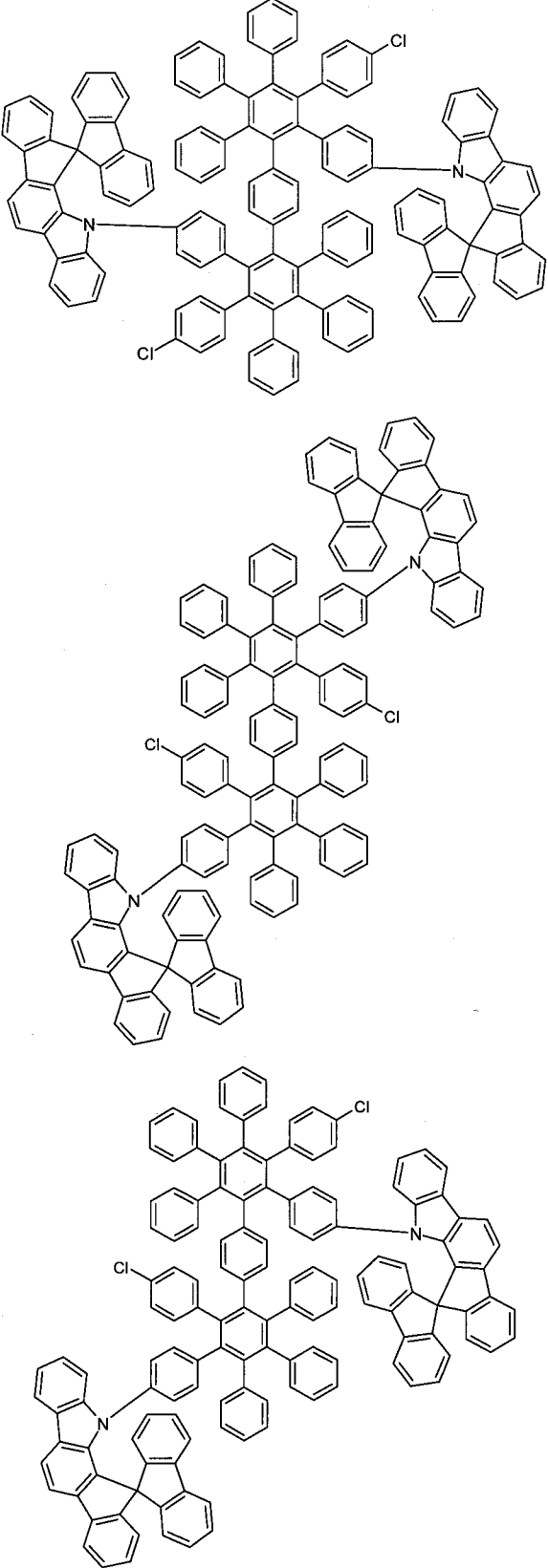
S214	S112 1609088-05-2		59%
S215	S113 244-76-8		68%
S216	S114 88590-00-5	 <p>300 mmol 88590-00-5 6 mmol P-tBu₃ / 3 mmol Pd(ac)₂</p>	45%

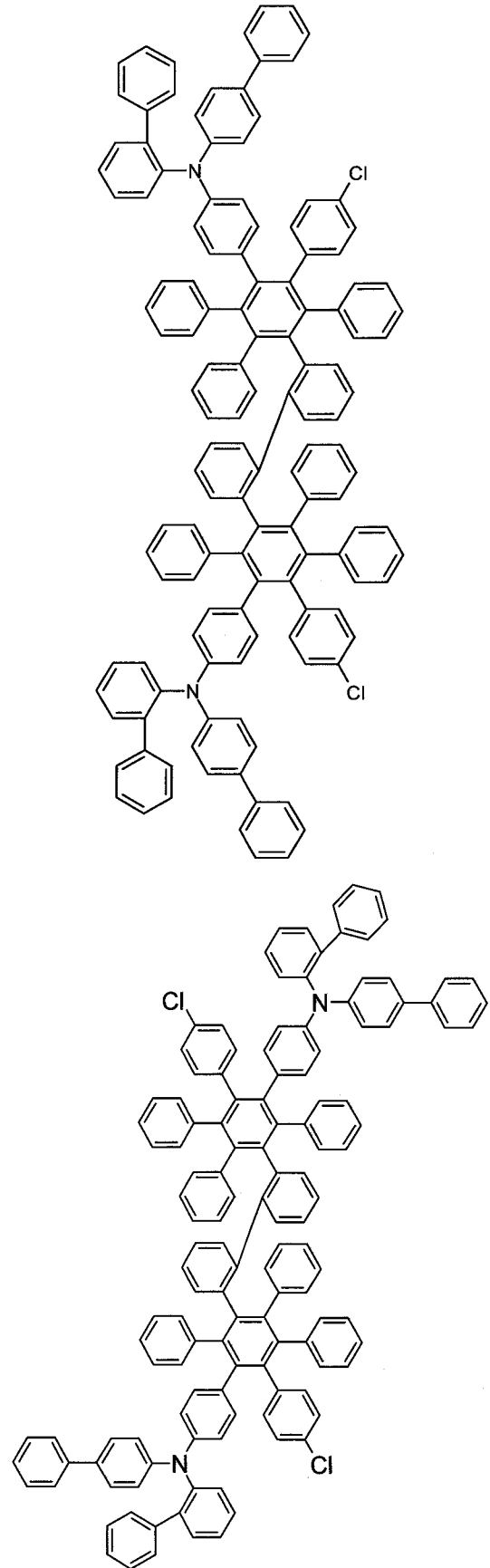
S217	S115 244-63-3	 <p>300 mmol 244-63-3 6 mmol P-tBu₃ / 3 mmol Pd(ac)₂</p>	48%
S218	S116 1365647-82-0		58%
S219	S117 135-67-1		62%

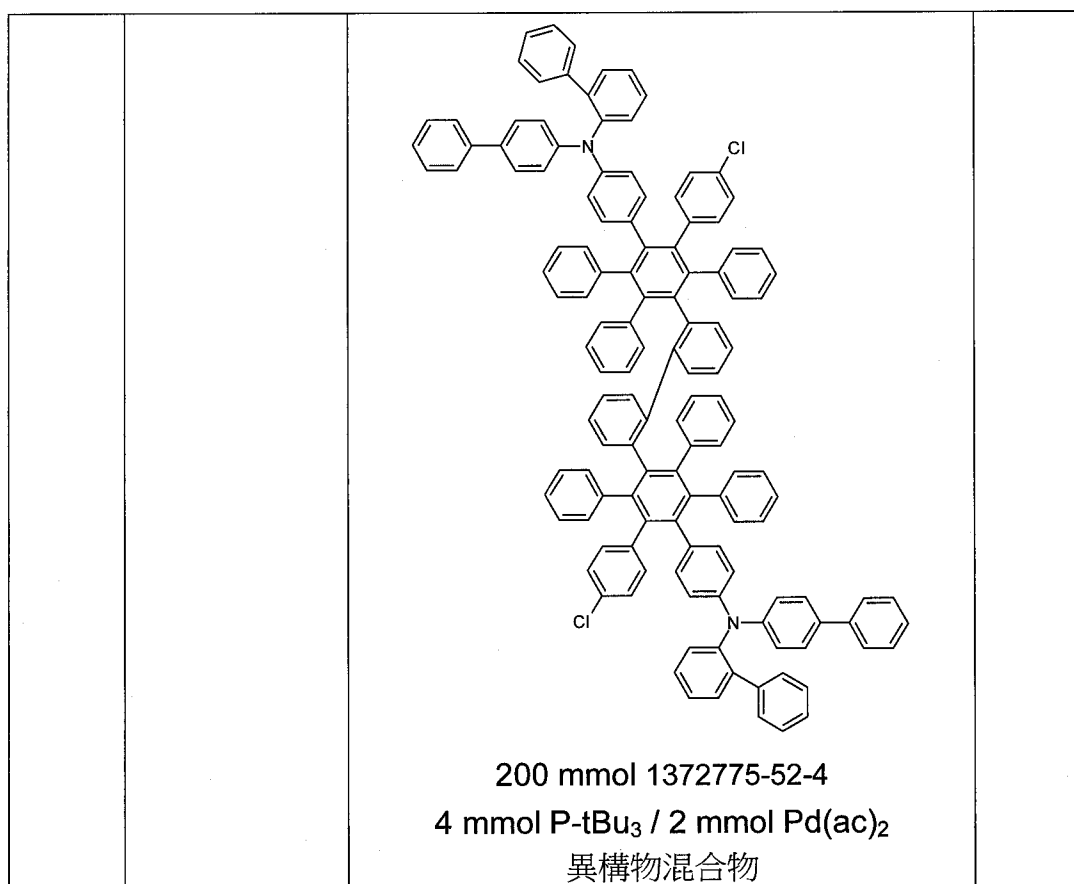
S220	S118 1799501-71-5	 <p>The structure of S220 is a complex polycyclic molecule. It features a central benzene ring substituted with four phenyl groups: two at the 1 and 4 positions are 4-fluorophenyl groups, and two at the 2 and 3 positions are 4-chlorophenyl groups. This central benzene ring is further substituted at its 1 and 4 positions with two indole rings. Each indole ring has a phenyl group attached to its nitrogen atom and a 4-phenylphenyl group attached to its 3-position.</p>	60%
S221	S119 955959-89-4	 <p>The structure of S221 is a complex polycyclic molecule, shown as a mixture of isomers. It features a central benzene ring substituted with four phenyl groups: one at the 1-position is a 4-phenylphenyl group, one at the 2-position is a 4-chlorophenyl group, and two at the 3 and 4 positions are 4-phenylphenyl groups. This central benzene ring is further substituted at its 1 and 4 positions with two indole rings. Each indole ring has a phenyl group attached to its nitrogen atom and a 4-phenylphenyl group attached to its 3-position.</p> <p>異構物混合物</p>	49%

S222	S120 1346669-46-2	 <p>The chemical structure of S120 features a central benzene ring substituted with four tert-butyl groups and a chlorine atom. This central ring is further substituted with two 4-tert-butylphenyl groups, one 4-chlorophenyl group, and one 2-(2-phenylindol-1-yl)phenyl group.</p>	55%
S223	S121 1364890-88-9	 <p>The chemical structure of S121 features a central benzene ring substituted with two chlorine atoms and four phenyl groups. This central ring is further substituted with two 2-(2-phenylthiophen-5-yl)phenyl groups and two 2-(2-phenylindol-1-yl)phenyl groups.</p>	47%

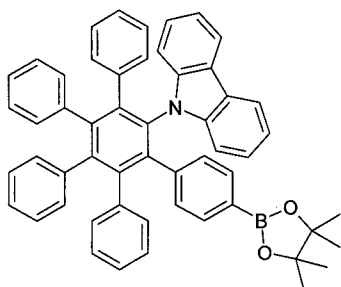


S224	S122 1807860-07-6	 <p>200 mmol 1807860-07-6 4 mmol P-tBu₃ / 2 mmol Pd(ac)₂ 異構物混合物</p>	51%
------	----------------------	--	-----

<p>S225</p>	<p>S123 1372775-52-4</p>	 <p>The chemical structure is a complex polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) consisting of a central benzene ring fused to two naphthalene units, which are further fused to two anthracene units. The structure is highly symmetric and features several phenyl rings attached to the outer positions of the fused system. Two chlorine atoms (Cl) are attached to the structure, one on a phenyl ring at the top and one on a phenyl ring at the bottom. Two nitrogen atoms (N) are also present, each bonded to two phenyl rings, one at the top and one at the bottom.</p>	<p>45%</p>
-------------	------------------------------	--	------------



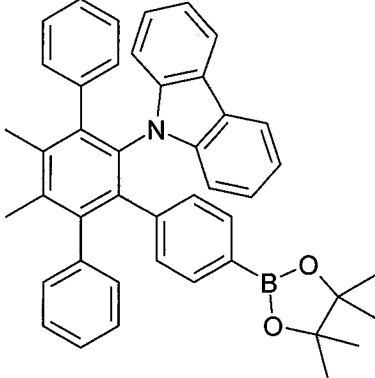
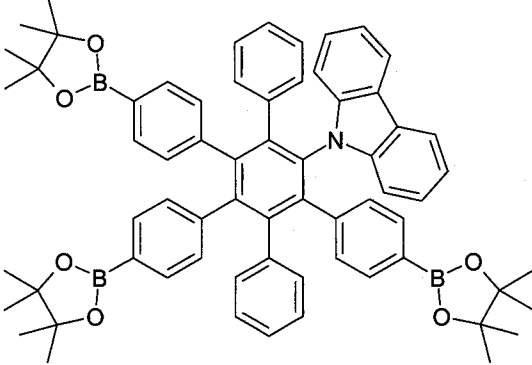
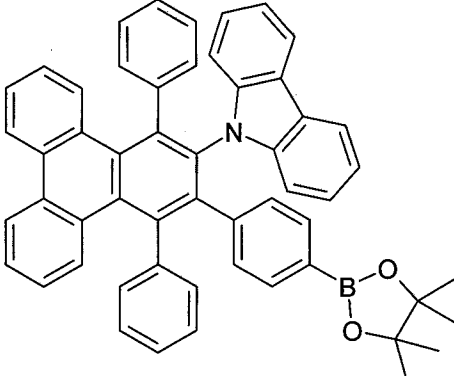
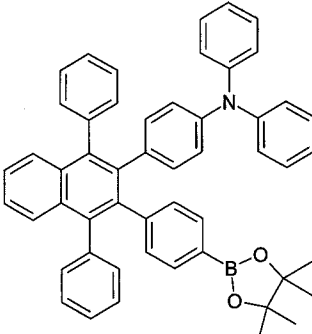
實例 S300 : 硼基化反應

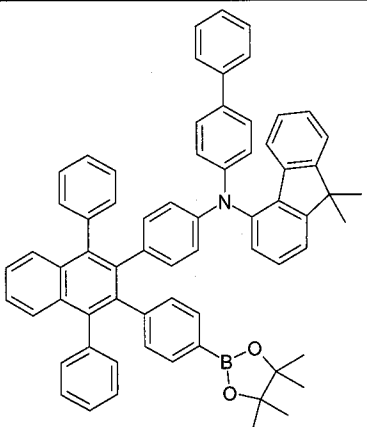
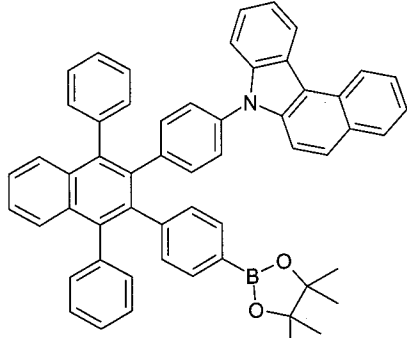
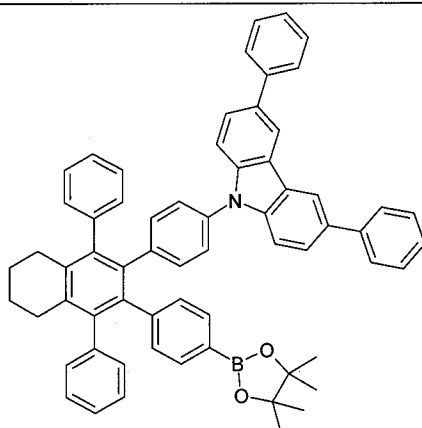
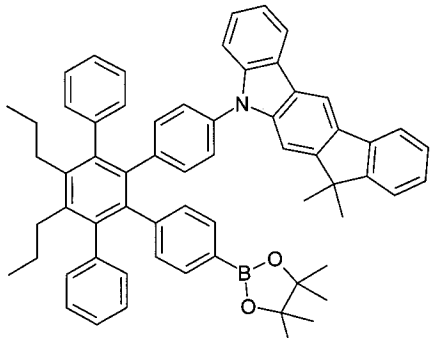


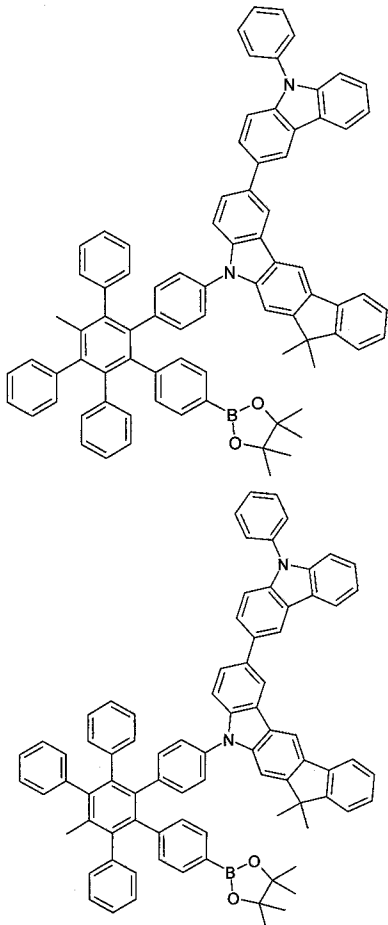
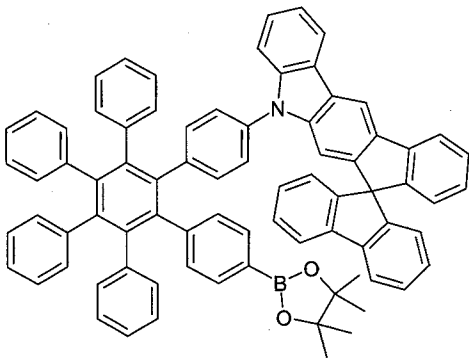
將 543 mg (1.3 mmol) S-Phos [657408-07-6] 及 225 mg (1 mmol) 乙酸鈣 (II) 加至 70.3 g (100 mmol) S100、26.7 g (105 mmol) 4,4,4',4',5,5,5',5'-八甲基-2,2'-雙(1,3,2-二氧硼雜環戊烷) [73183-34-3]、29.5 g (300 mmol) 無水乙酸鉀、50 g 玻璃珠 (直徑 3 mm) 及 700 ml 二噁烷之混合物中，再將混合物邊良好攪拌邊加熱至 90°C 16 小時。冷卻後，將混合物以二

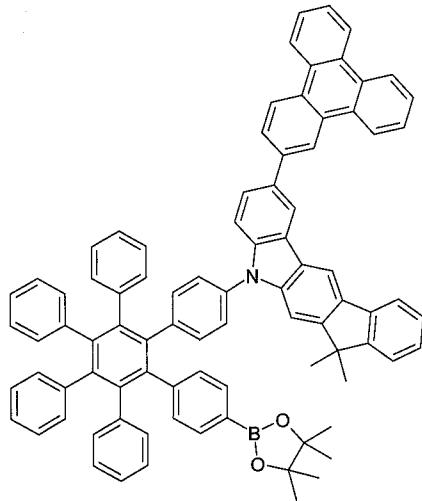
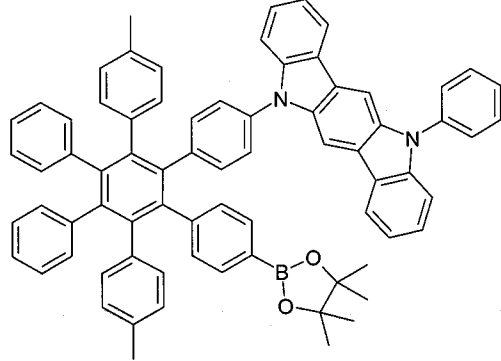
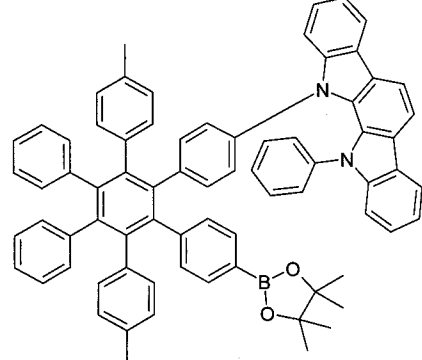
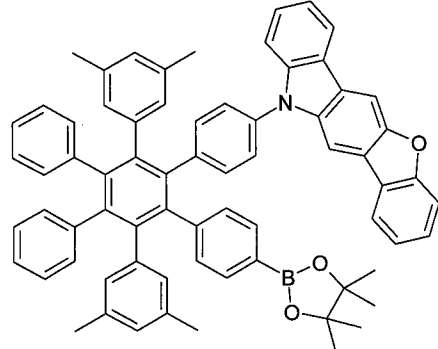
噶烷漿液形式通過矽藻土(Celite)床過濾，將床以300 ml二噶烷清洗通過，將濾液濃縮至乾，將殘留物置於500 ml甲苯中，再將溶液以每次100 ml水清洗三次及以200 ml飽和氯化鈉溶液清洗一次，然後於硫酸鎂上乾燥。將已將乾燥劑濾出及已將溶劑移除後所得之泡沫狀物由乙酸乙酯/甲醇中予以再結晶。產量：65.2 g(87 mmol)，87%；純度：藉¹H NMR測得為95%。

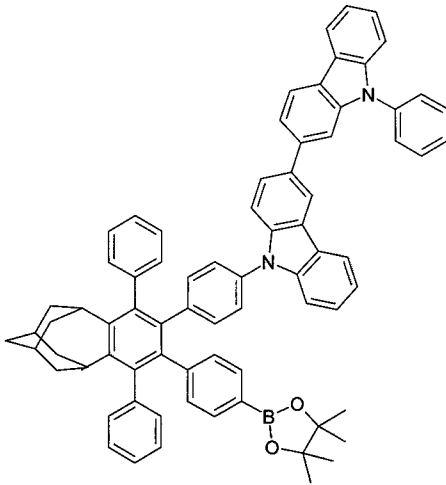
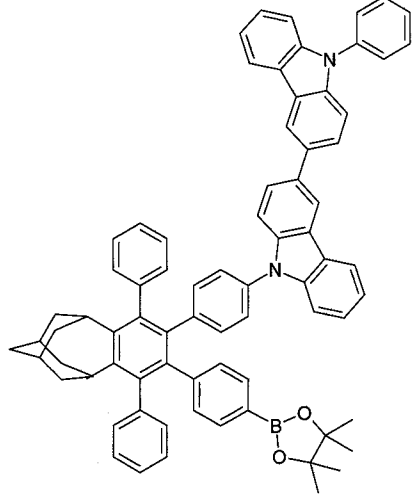
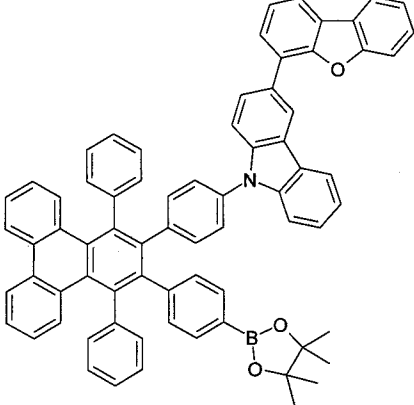
以類似之方式可以製得下列化合物：

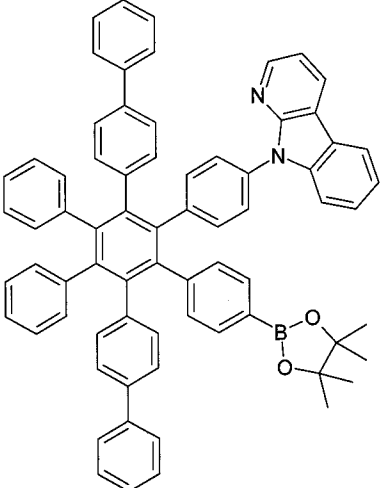
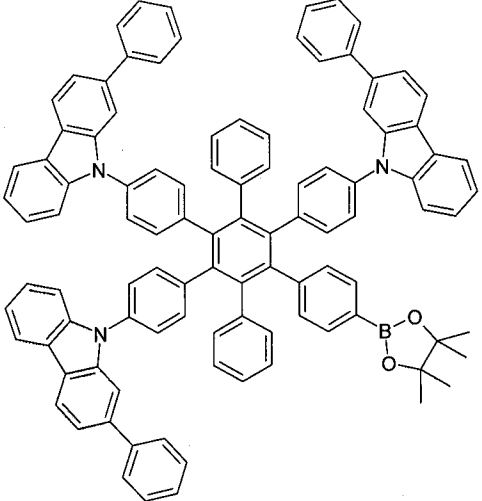
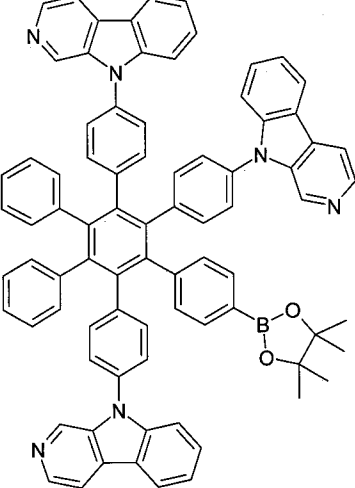
實例	反應物	產物	產率
S301	S101		89%
S302	S102	 <p data-bbox="722 1077 1038 1108">315 mmol 73183-34-3</p>	90%
S303	S103		85%
S304	S201		86%

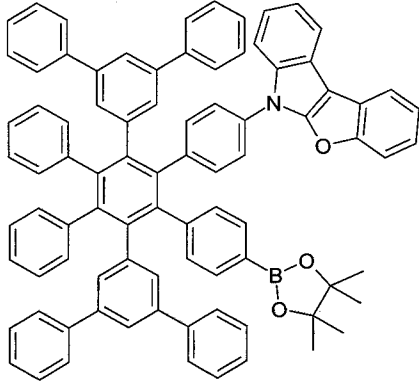
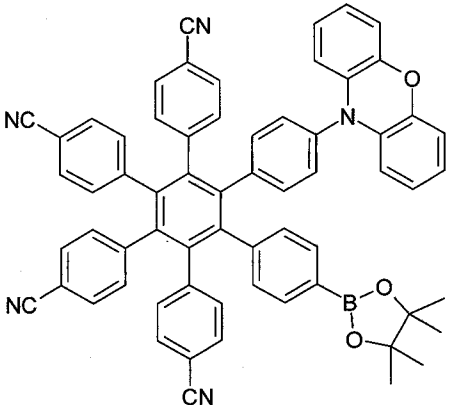
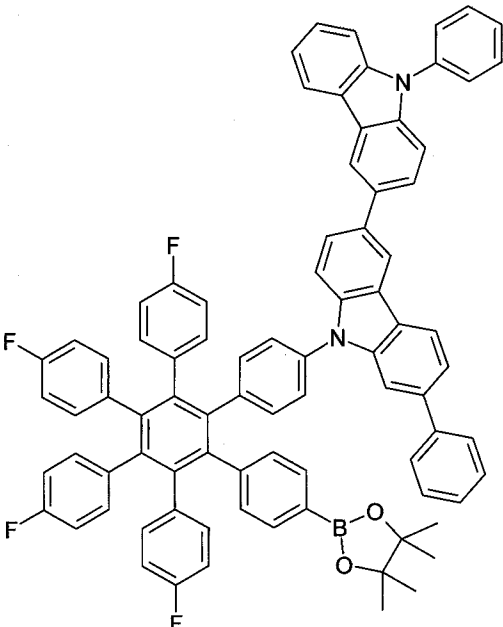
S305	S202		83%
S306	S203		90%
S307	S204		86%
S308	S205		87%

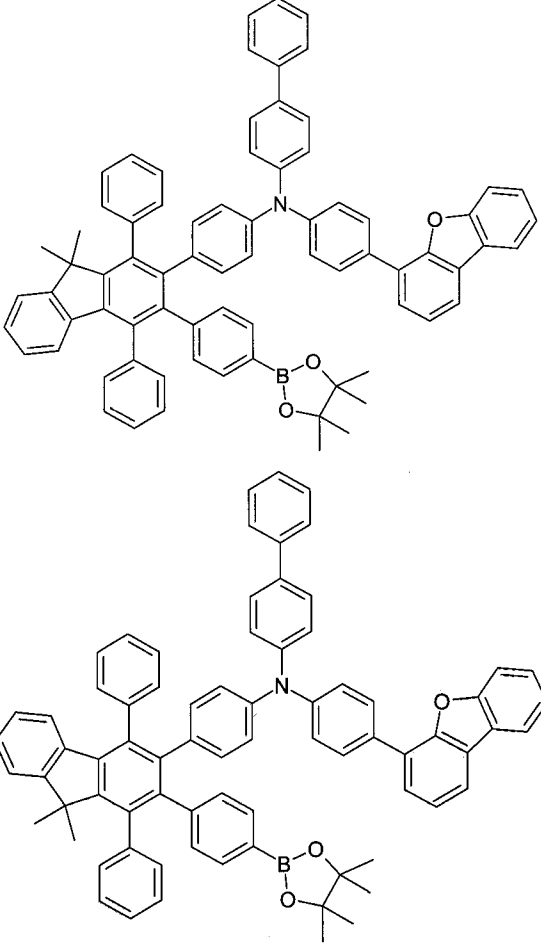
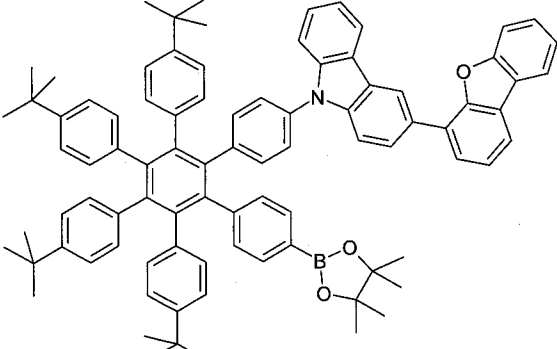
S309	S206	 <p>異構物混合物</p>	73%
S310	S207		79%

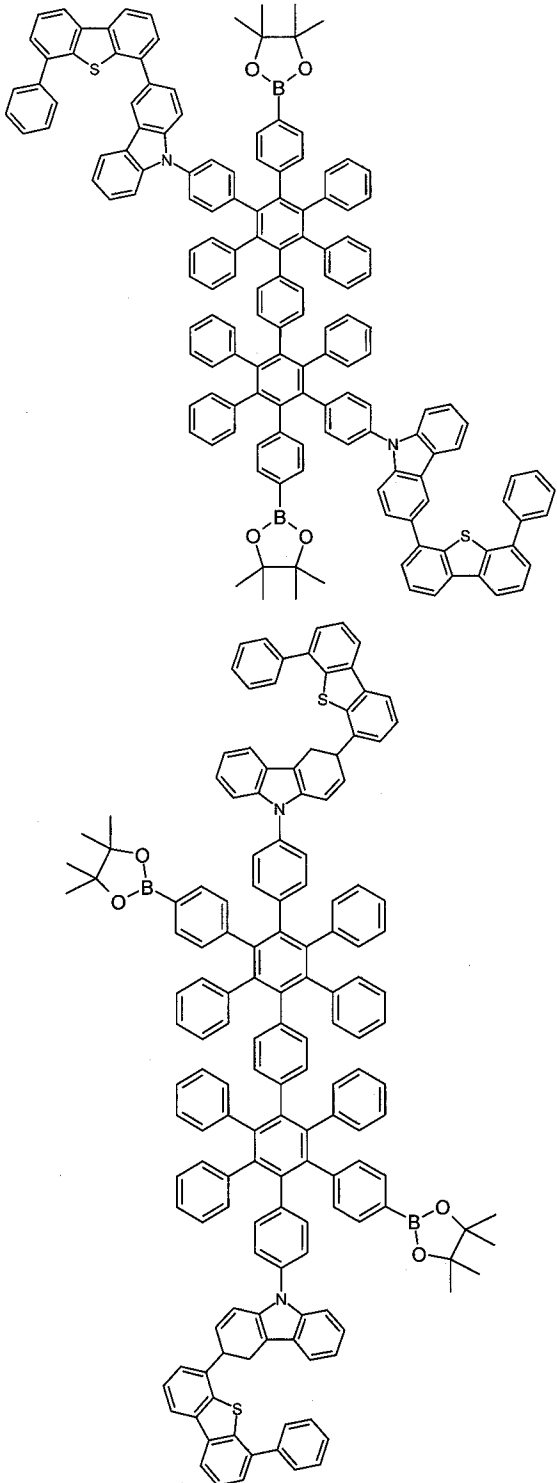
S311	S208		80%
S312	S209		85%
S313	S210		85%
S314	S211		87%

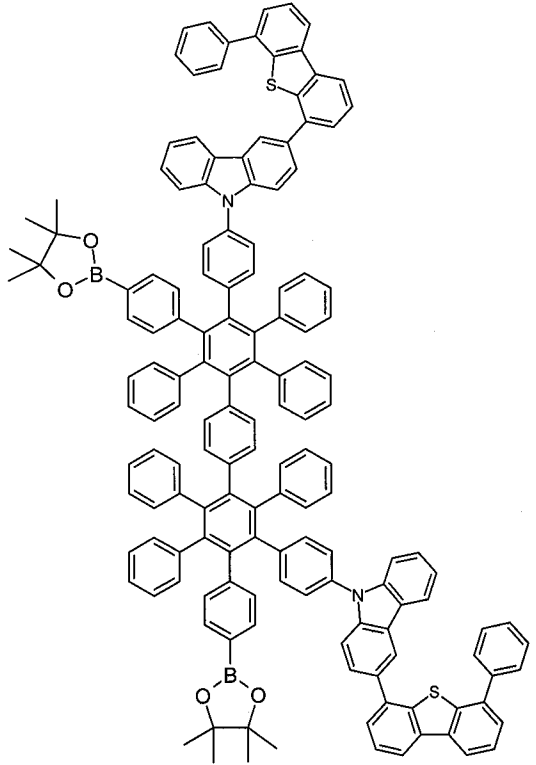
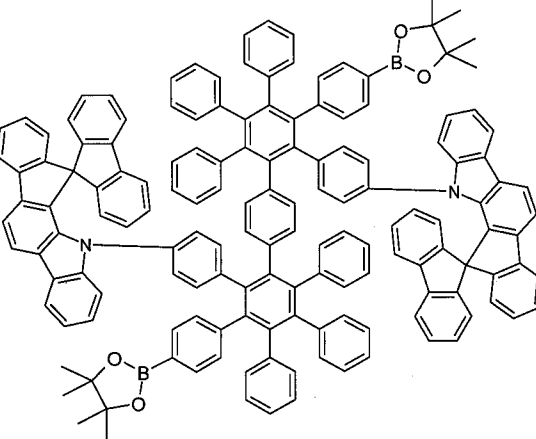
S315	S212	 <p>The structure of S315 features a central benzene ring substituted with a norbornene group, a phenyl ring, and a pinacol boronate ester. It is also substituted with a 2-phenyl-1H-indole-5-yl group and a 2-(2-phenyl-1H-indol-5-yl)phenyl group.</p>	86%
S316	S213	 <p>The structure of S316 is identical to S315, but the 2-phenyl-1H-indole-5-yl group is substituted at the 2-position with a phenyl ring.</p>	88%
S317	S214	 <p>The structure of S317 is identical to S315, but the 2-phenyl-1H-indole-5-yl group is substituted at the 2-position with a benzofuran ring system.</p>	79%

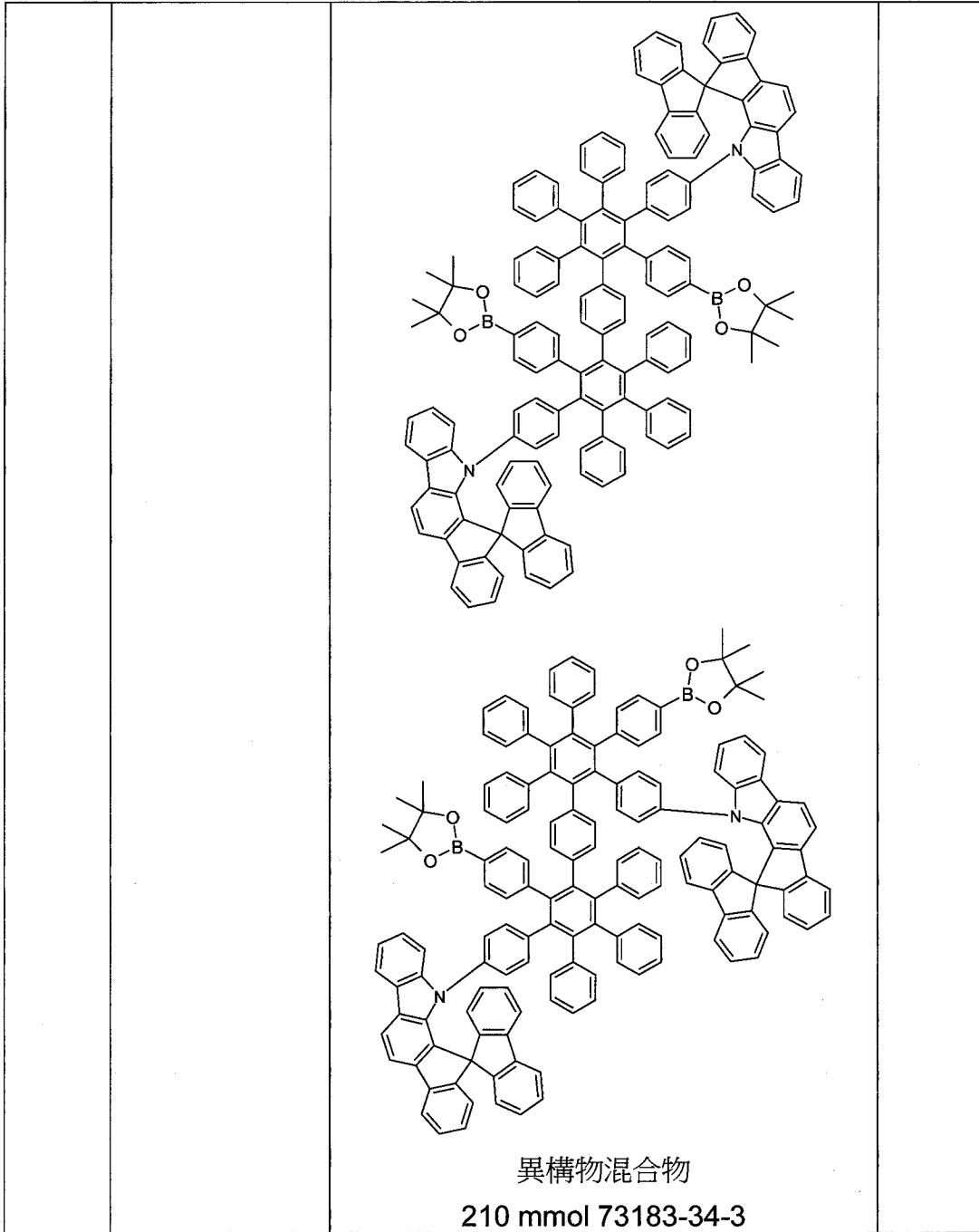
S318	S215		81%
S319	S216		90%
S320	S217		80%

S321	S218		88%
S322	S219		74%
S323	S220		82%

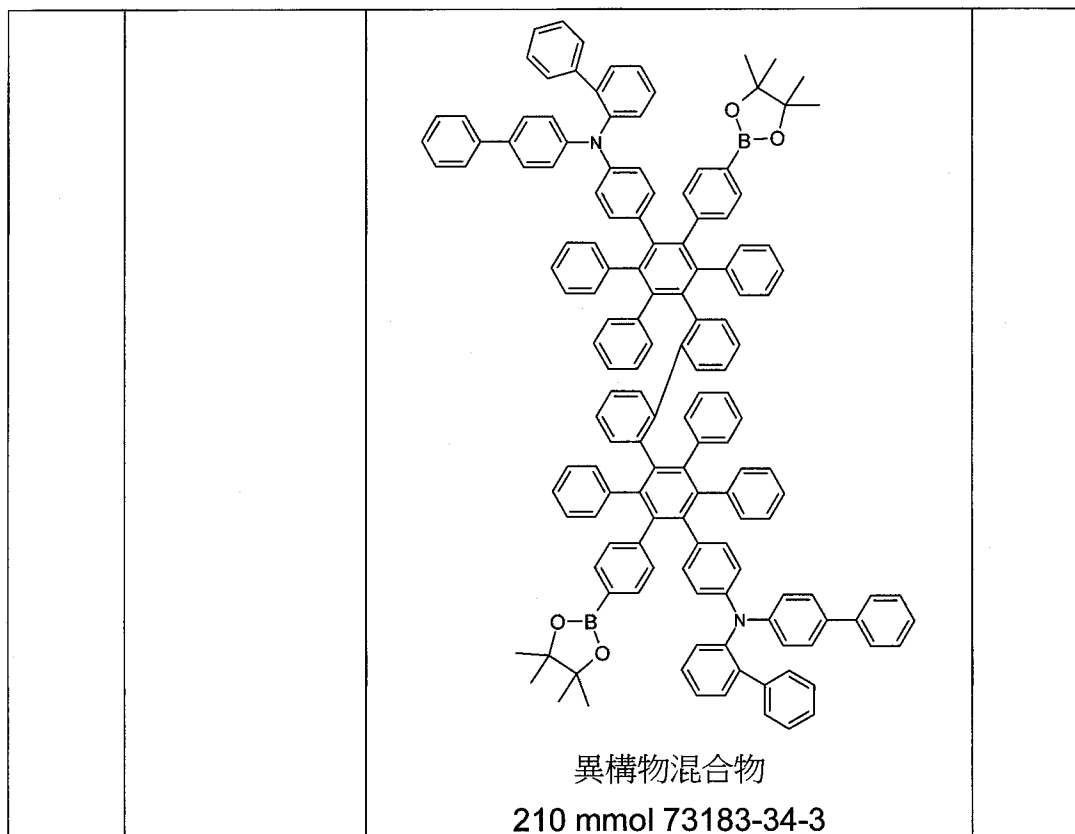
S324	S221	 <p>異構物混合物</p>	76%
S325	S222		69%

<p>S326</p>	<p>S223</p>	 <p>The image displays two chemical structures, S326 and S223, which are boronate ester derivatives of a central boronic acid. The central boronic acid core consists of a central boron atom bonded to two hydroxyl groups and two phenyl rings. This core is further substituted with a 2-phenyl-1H-benzimidazole group and a 2-phenyl-1H-benzothiazole group. The boronic acid groups are converted to pinacol boronate esters, which are represented by a central boron atom bonded to two oxygen atoms, each of which is further bonded to a pinacol moiety (a 2,2,6,6-tetramethyl-1,3-dioxane ring system).</p>	
-------------	-------------	--	--

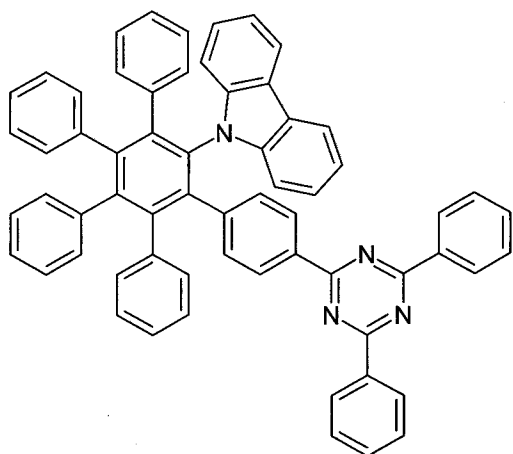
		 <p>異構物混合物 210 mmol 73183-34-3</p>	
S327	S224		67%



<p>S328</p>	<p>S225</p>		<p>71%</p>
-------------	-------------	--	------------



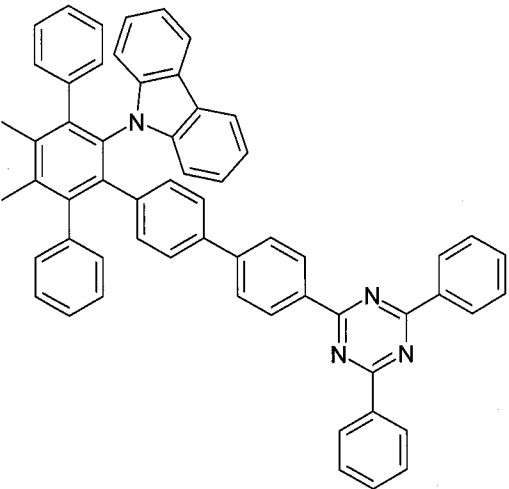
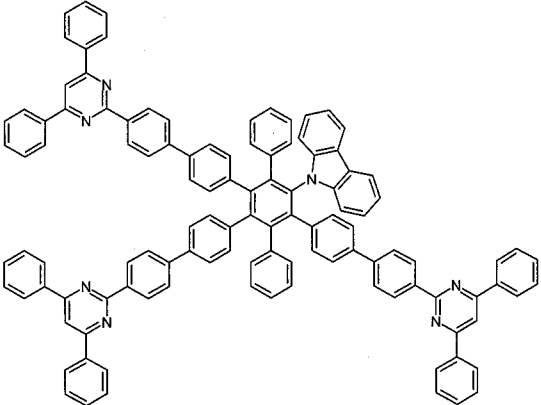
實例 P1：鈴木(Suzuki)偶合反應

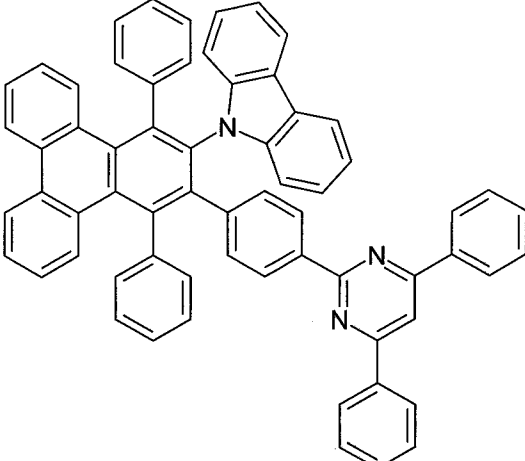
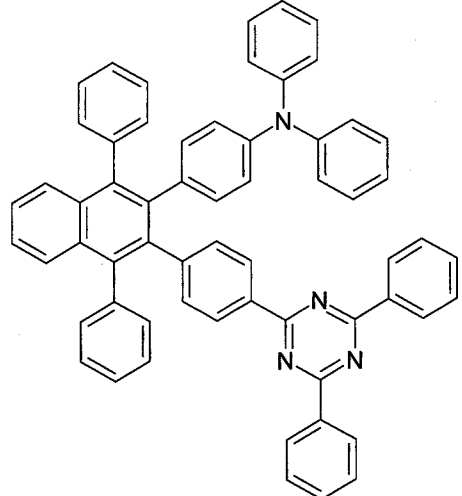
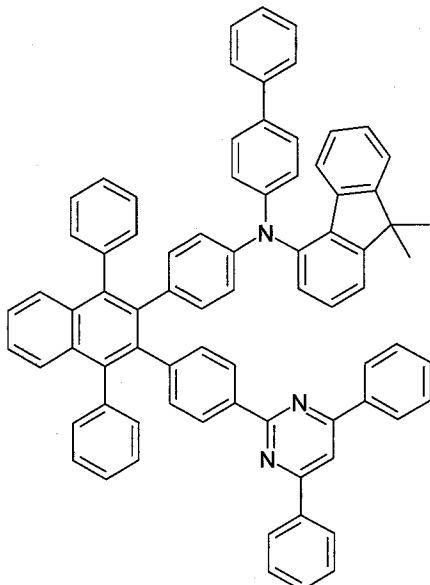


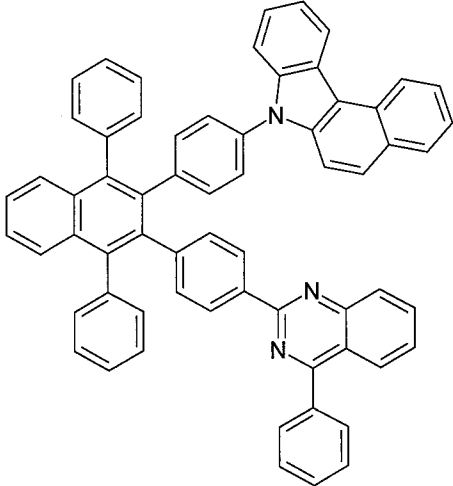
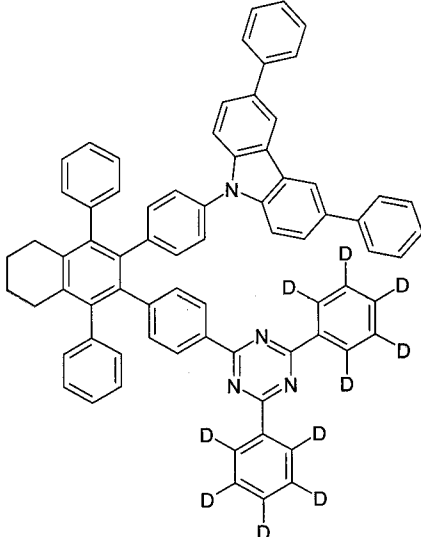
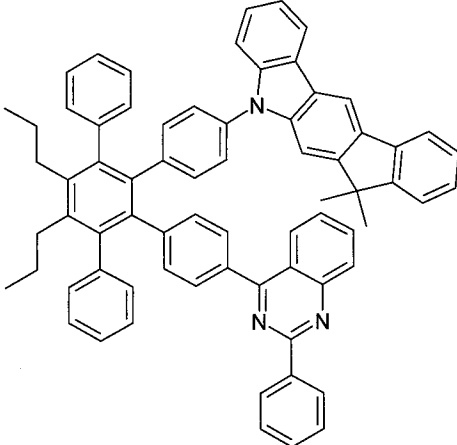
將 1.2 g (3 mmol) S-Phos [657408-07-6] 及 498 mg (2 mmol) 乙酸鈣 (II) 加至已充分攪拌之 75.0 g (100 mmol) S300、28.1 g (105 mmol) 1-氯-3,5-二苯基三吡啶 [3842-55-5]、63.7 g (300 mmol) 磷酸三鉀、500 ml 甲苯、300 ml 二噁烷、500 ml 水之混合物中，然後將混合物於迴流下加

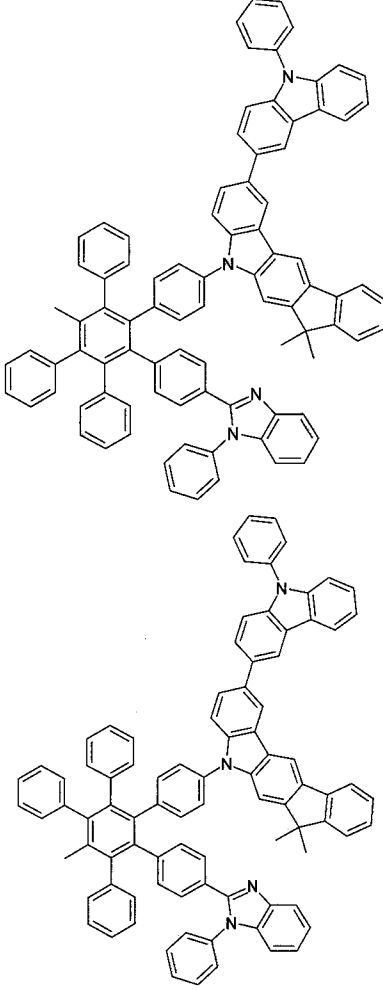
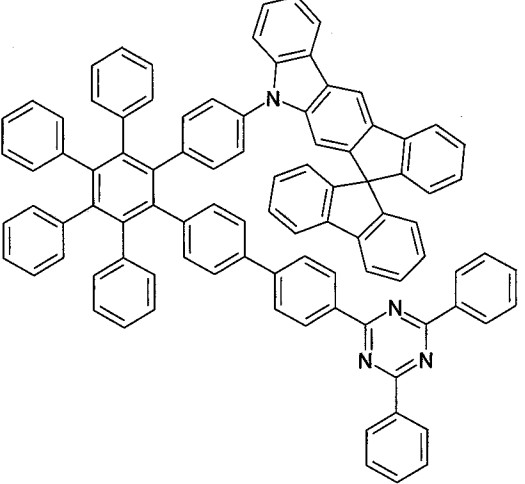
熱 16 小時。冷卻後，將有機相移除，再以每次 300 ml 水清洗兩次及以 300 ml 飽和氯化鈉溶液清洗一次，然後於硫酸鎂上乾燥。將乾燥劑以甲苯漿液形式通過矽藻土 (Celite) 床空吸濾出，將床以 300 ml 甲苯清洗通過，將濾液濃縮至乾，再將殘留物由二甲基乙醯胺中結晶兩次。藉以乙酸正丁酯重覆熱萃取，其後進行分步昇華 (p 約 10^{-5} 毫巴，T 約 330°C) 以達成進一步純化。產量：47.9 g (56 mmol)，56%；純度：藉 ^1H NMR 測得為 99.9%。

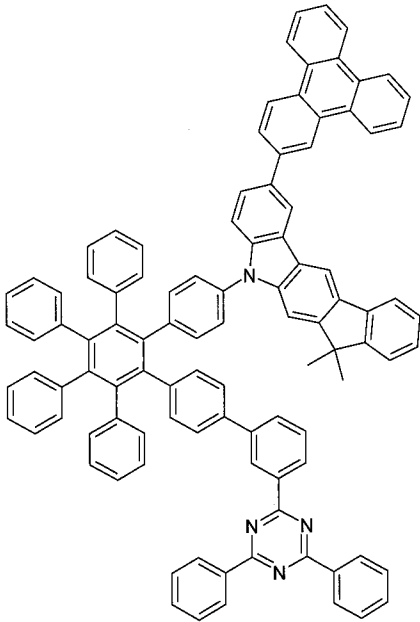
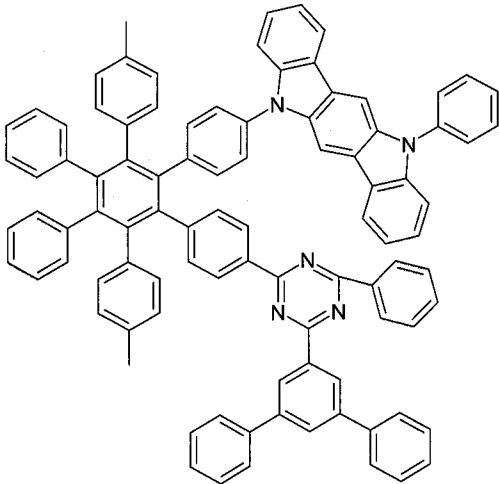
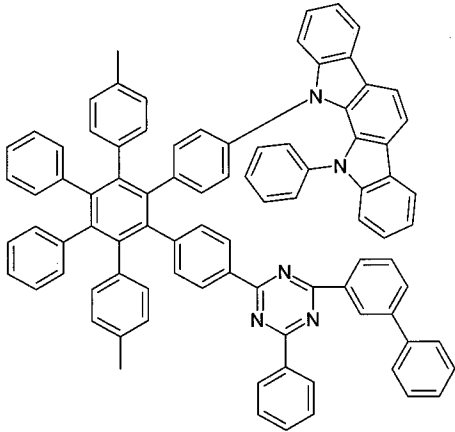
以類似之方式，可以製得下列化合物，大於 1200 g/mol 莫耳質量之產物藉於高真空下加熱典型地不含殘留溶劑：

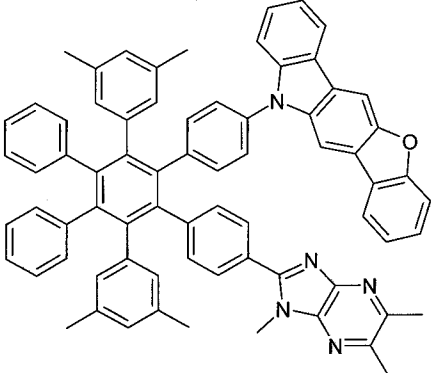
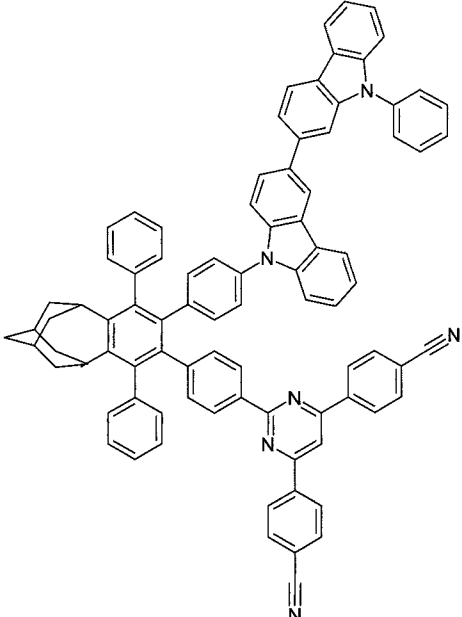
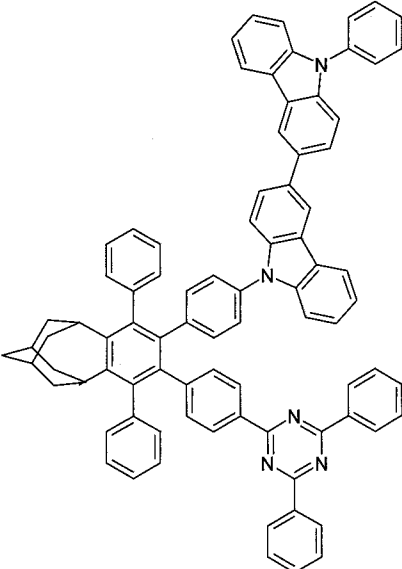
實例	反應物	產物	產率
P2	S101 1215596-23-6		54%
P3	S102 1613163-88-4	 <p data-bbox="646 1209 1125 1276">315 mmol 1613163-88-4 6 mmol S-Phos / 4 mmol Pd(ac)₂</p>	49%

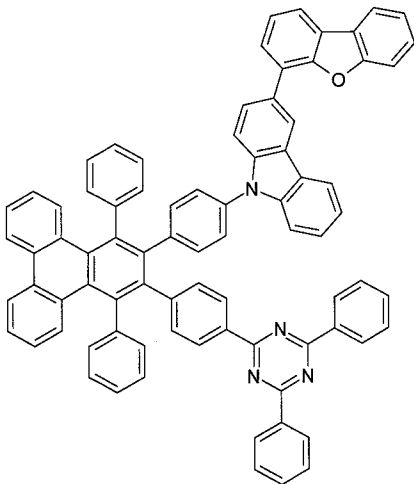
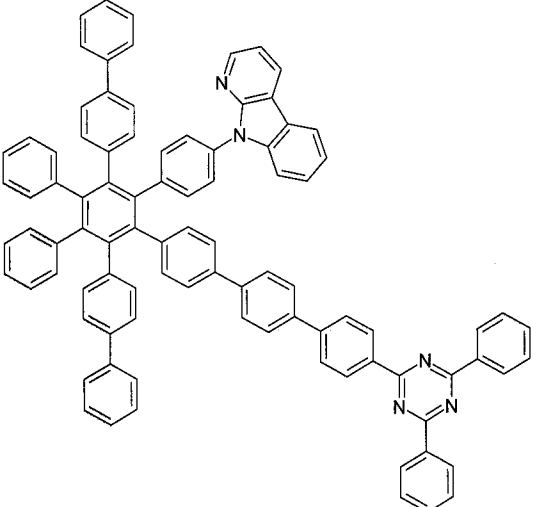
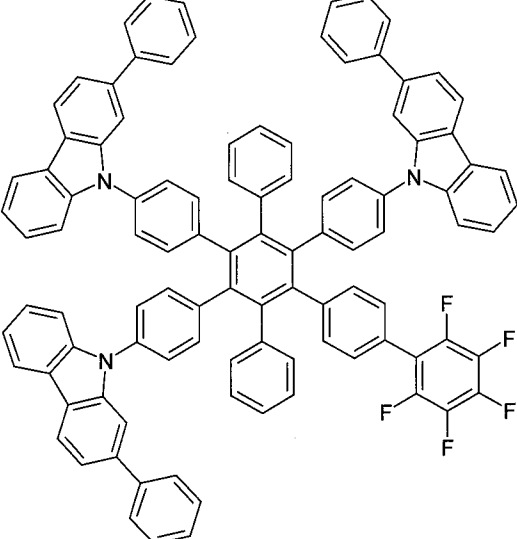
P4	S303 2915-16-4		59%
P5	S304 3842-55-5		57%
P6	S305 2915-16-4		53%

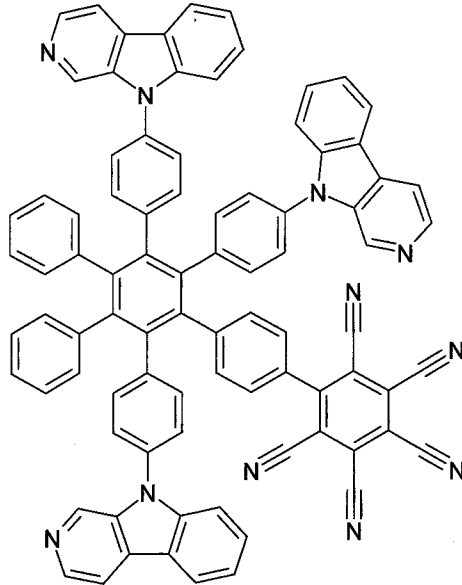
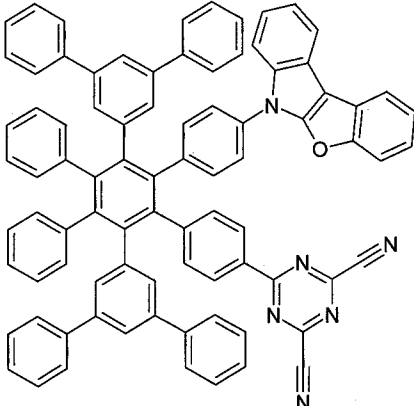
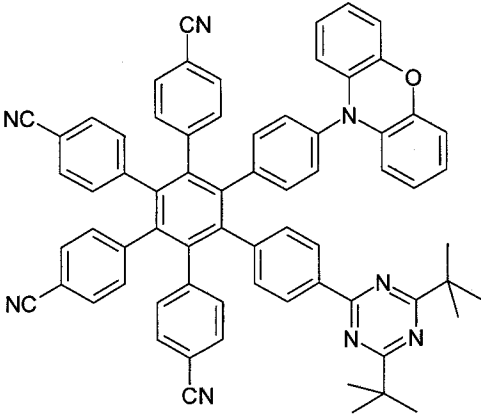
P7	S306 29874-83-7	 <p>The structure of S306 features a central benzene ring substituted with a phenyl group at the top, a phenyl group at the bottom, and two 4-phenylphenyl groups at the 2 and 6 positions. The 4-phenylphenyl group at the 2-position is further substituted with a 1-phenyl-2,3-benzofuran-5-yl group. The 4-phenylphenyl group at the 6-position is substituted with a 2-phenylquinoline-5-yl group.</p>	55%
P8	S307 1300115-09-6	 <p>The structure of S307 is similar to S306 but includes deuterium (D) labels. It features a central benzene ring with a phenyl group at the top, a cyclohexane ring at the bottom, and two 4-phenylphenyl groups at the 2 and 6 positions. The 4-phenylphenyl group at the 2-position is substituted with a 1-phenyl-2,3-benzofuran-5-yl group. The 4-phenylphenyl group at the 6-position is substituted with a 2-(1,2,3,4,5,6-deuterated phenyl)quinoline-5-yl group.</p>	51%
P9	S308 6484-25-9	 <p>The structure of S308 features a central benzene ring substituted with a phenyl group at the top, a propyl group at the bottom, and two 4-phenylphenyl groups at the 2 and 6 positions. The 4-phenylphenyl group at the 2-position is substituted with a 1-phenyl-2,3-benzofuran-5-yl group. The 4-phenylphenyl group at the 6-position is substituted with a 2-phenylquinoline-5-yl group.</p>	49%

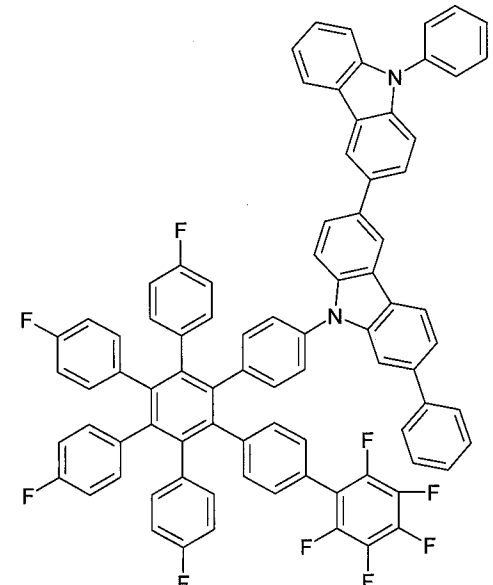
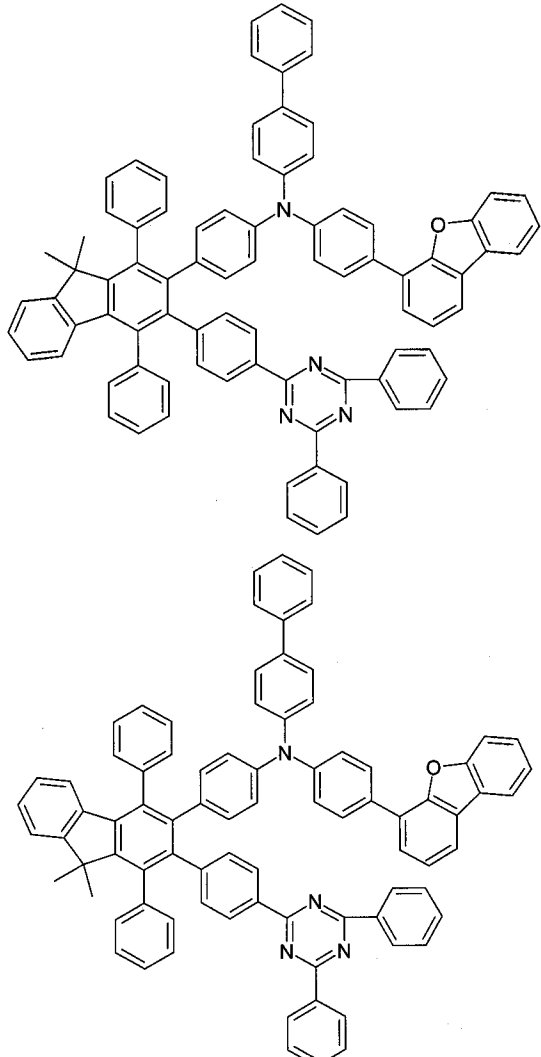
P10	S309 24547-45-3	 <p>異構物混合物</p>	38%
P11	S310 23449-08-3		55%

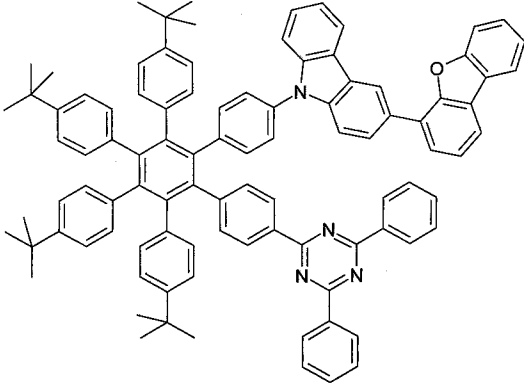
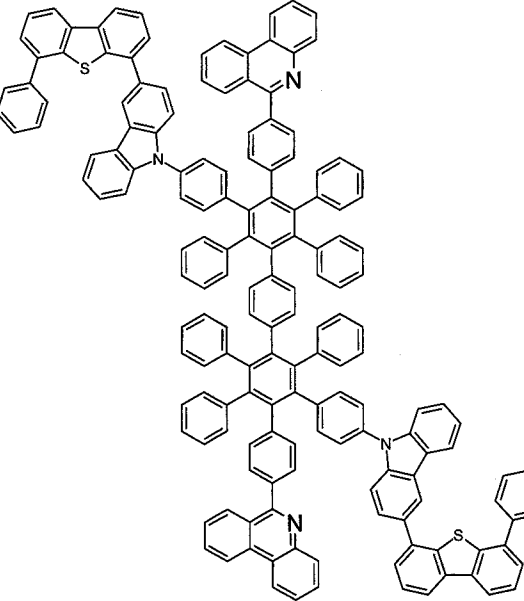
P12	S311 864377-31-1	 <p>The chemical structure of S311 features a central benzene ring substituted with four phenyl groups. This central ring is connected to a 1,2,3,4-tetrahydroquinoline system. The nitrogen atom of this system is substituted with a phenyl group and a 2-phenylphenyl group. The 2-position of the tetrahydroquinoline ring is substituted with a 1,2,4-triazole ring, which is further substituted with two phenyl groups.</p>	58%
P13	S312 1616231-57-2	 <p>The chemical structure of S312 features a central benzene ring substituted with four phenyl groups. This central ring is connected to a 1,2,3,4-tetrahydroquinoline system. The nitrogen atom of this system is substituted with a phenyl group and a 2-phenylphenyl group. The 2-position of the tetrahydroquinoline ring is substituted with a 1,2,4-triazole ring, which is further substituted with two phenyl groups.</p>	54%
P14	S313 1689576-03-1	 <p>The chemical structure of S313 features a central benzene ring substituted with four phenyl groups. This central ring is connected to a 1,2,3,4-tetrahydroquinoline system. The nitrogen atom of this system is substituted with a phenyl group and a 2-phenylphenyl group. The 2-position of the tetrahydroquinoline ring is substituted with a 1,2,4-triazole ring, which is further substituted with two phenyl groups.</p>	50%

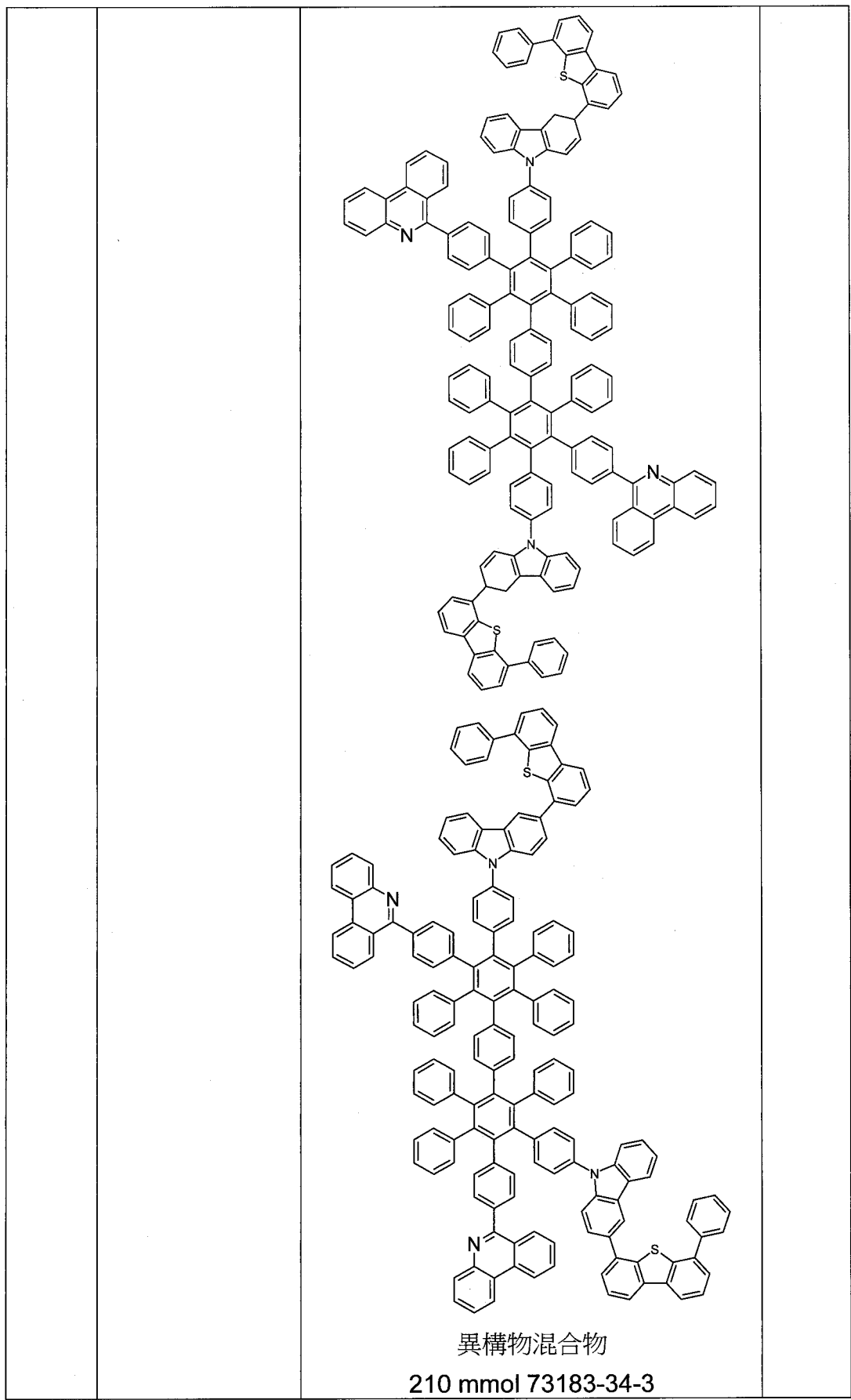
P15	S314 55635-65-9	 <p>The structure of S314 features a central benzene ring substituted with a 1,3,5-trimethylphenyl group, a phenyl group, and a 1,3,5-trimethylphenyl group. This central ring is further substituted with a 4-phenylphenyl group, a 4-(2-phenyl-1H-indol-5-yl)phenyl group, and a 4-(2,4,6-trimethyl-1H-imidazole-5-yl)phenyl group.</p>	57%
P16	S315 1931136-94-5	 <p>The structure of S315 features a central benzene ring substituted with a 1,3,5-trimethylphenyl group, a phenyl group, and a 1,3,5-trimethylphenyl group. This central ring is further substituted with a 4-phenylphenyl group, a 4-(2-phenyl-1H-indol-5-yl)phenyl group, and a 4-(4-cyano-2-phenyl-1H-imidazole-5-yl)phenyl group.</p>	51%
P17	S316 3842-55-5	 <p>The structure of S316 features a central benzene ring substituted with a 1,3,5-trimethylphenyl group, a phenyl group, and a 1,3,5-trimethylphenyl group. This central ring is further substituted with a 4-phenylphenyl group, a 4-(2-phenyl-1H-indol-5-yl)phenyl group, and a 4-(2-phenyl-1H-imidazole-5-yl)phenyl group.</p>	53%

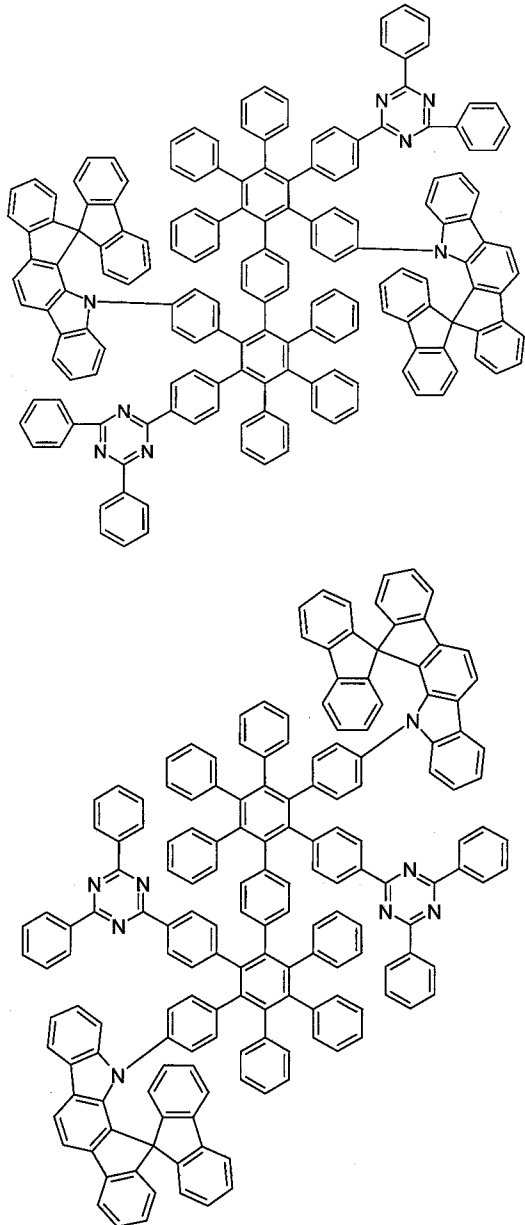
P18	S317 3842-55-5		59%
P19	S318 1439929-51-7		55%
P20	S319 334-04-7		52%

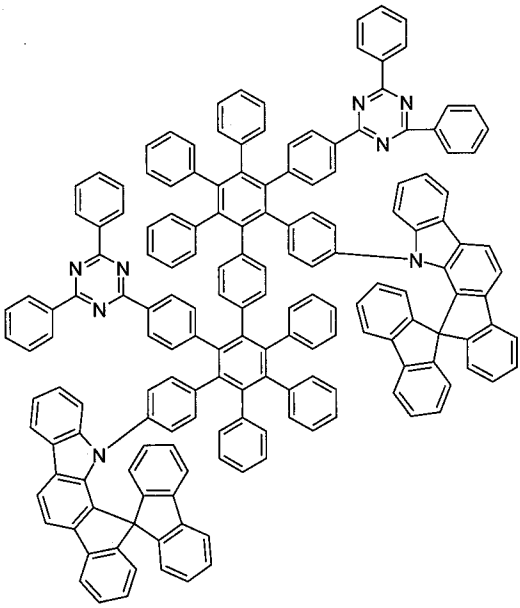
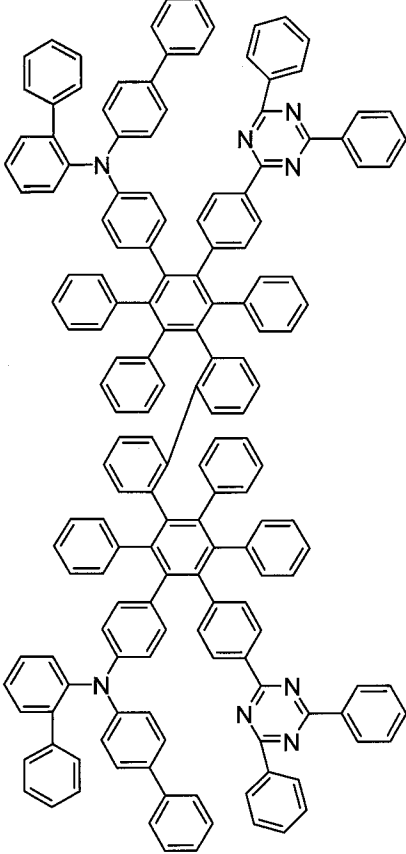
P21	S320 371-88-6		56%
P22	S321 80587-76-4		49%
P23	S322 37084-03-4		44%

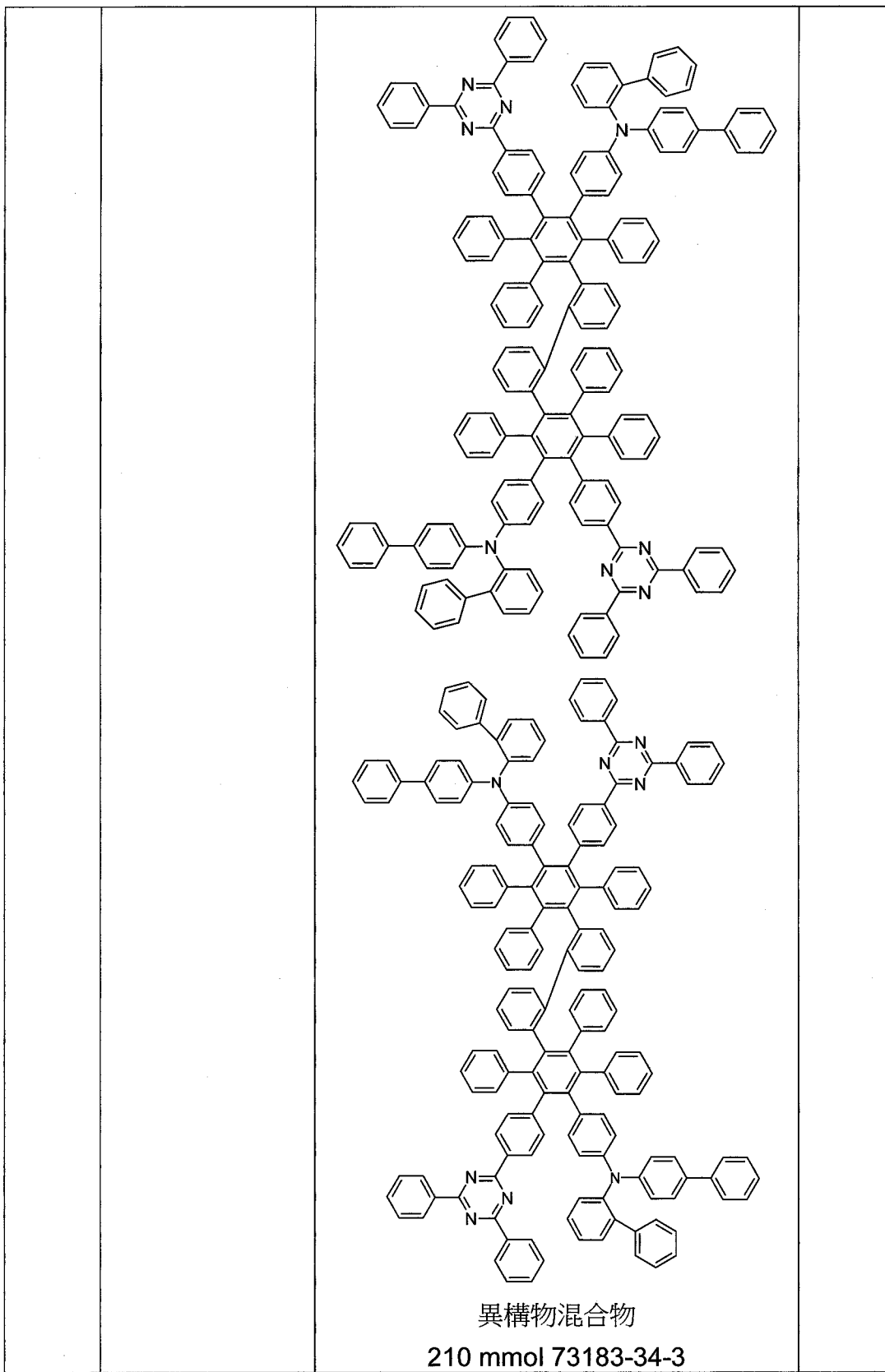
<p>P24</p>	<p>S323 334-04-7</p>	 <p>A complex organic molecule featuring a central benzene ring substituted with four fluorophenyl groups and a 1-phenyl-2-(2-phenyl-5-(2-phenyl-1H-indol-5-yl)phenyl)indole group.</p>	<p>47%</p>
<p>P25</p>	<p>S324 3842-55-5</p>	 <p>Two identical chemical structures of a complex organic molecule. Each structure features a central benzene ring substituted with a 1,1-dimethyl-2-phenylindole group, a phenyl group, a 1-phenyl-2-(2-phenyl-5-(2-phenyl-1H-indol-5-yl)phenyl)indole group, and a 1,2,4-triazole ring substituted with two phenyl groups.</p> <p>異構物混合物</p>	<p>30%</p>

P26	S325 3842-55-5		
P27	S326 15679-03-5		32%



<p>P28</p>	<p>S327 3842-55-5</p>	 <p>The chemical structure is a complex polycyclic aromatic hydrocarbon. It features a central benzene ring substituted with four phenyl groups. This central core is further substituted with two indole-like structures (indole-3-ylidene derivatives) and two 1,3,5-triphenyl-1H-1,2,4-triazole groups. The overall structure is highly symmetric and contains multiple fused and linked ring systems.</p>	<p>27%</p>
------------	---------------------------	--	------------

		 <p>異構物混合物 210 mmol 73183-34-3</p>	
<p>P29</p>	<p>S328 3842-55-5</p>		<p>29%</p>



實例：OLED之製造

1) 真空處理裝置：

本發明之 OLED 及根據先前技藝之 OLED 係藉由根據 WO 2004/058911 之一般方法製得，此一般方法被改編成此處所述的情況(層厚度之變化、所用之材料)。

下列實例中，呈現各種 OLED 的結果。帶有結構化 ITO(50 nm，氧化銻錫)之玻璃板(glass plaque)形成其中 OLED 施加至其上的基板。OLED 原則上具有以下之層結構：基板/電洞傳輸層 1(HTL1)(由摻雜 5%NDP-9(市售得自 Novaled)之 HTM 所組成)、20 nm/電洞傳輸層 2(HTL2)/隨意之電子阻擋層(EBL)/發射層(EML)/隨意之電洞阻擋層(HBL)/電子傳輸層(ETL)/隨意之電子注入層(EIL)及最終之陰極。此陰極係由厚度 100 nm 之鋁層所形成。

首先說明真空處理 OLED。欲供此目的，所有材料均藉熱蒸氣沈積法於真空室中施加。此情況下，發射層經常是由至少一種基質材料(主體材料(host material))及以特定體積比例藉共蒸發法加至基質材料中的發射摻雜劑(發射體)所組成。以諸如 M3:M2:Ir(L2)(55%:35%:10%)提供的細節在此處意指材料 M3 以 55% 的體積比存在於層中，M2 以 35% 的比例存在於層中且 Ir(L2) 以 10% 的比例存在於層中。類似地，電子傳輸層亦可由兩種材料之混合物所組成。OLED 之精確結構示於表 1 中。用於製造 OLED 的材料示於表 4 中。

OLED 以標準方法特徵化。欲達此目的，乃由電流/電

壓/亮度特徵線(IUL特徵線)中測得電激發光光譜、功率效率(以 cd/A 為單位測量)及電壓(於 1000 cd/m^2 以 V 為單位測量)。在選定之實驗方面，測定其壽命。壽命經定義為使光度由特定的起始光度降落到某一比例後的時間。數值LD50意指該特定之壽命為使光度掉到起始光度之50%，亦即例如由 1000 cd/m^2 掉落到 500 cd/m^2 的時間。根據發光色，選擇不同的起始亮度。經由熟諳此藝者已知之轉化公式的協助，壽命值可轉換成其他起始光度之數值。本上下文中，以起始光度為 1000 cd/m^2 的壽命為標準數值。

本發明化合物作為磷光OLED中之發射體材料的用途

本發明化合物之一用途為作為OLED中之發射層中的發射體材料(TADF)。

彼等亦可用於作為磷光發射體之基質/主體材料。根據表4之化合物係作為根據先前技藝之比較。OLED之結果整理於表2中。

表 1：OLED 之結構

實例	HTL2 厚度	EBL 厚度	EML 厚度	HBL 厚度	ETL 厚度
Ref.-D1	HTM 40 nm	---	M1:IrRef1 (88%:12%) 35 nm	HBM1 10 nm	ETM1:ETM2 (50%:50%) 30 nm
D1	HTM 40 nm	---	P1:IrRef1 (88%:12%) 35 nm	HBM1 10 nm	ETM1:ETM2 (50%:50%) 30 nm
D2	HTM 40 nm	---	P4:IrRef1 (88%:12%) 35 nm	HBM1 10 nm	ETM1:ETM2 (50%:50%) 30 nm
D3	HTM 40 nm	---	P4:IrRef1 (80%:20%) 35 nm	HBM1 10 nm	ETM1:ETM2 (50%:50%) 30 nm
D4	HTM 40 nm	---	P4:M3:IrRef1 (60%:30%:10%) 35 nm	HBM1 10 nm	ETM1:ETM2 (50%:50%) 30 nm
D5	HTM 40 nm	---	P18:M3 (60%:40%) 40 nm	HBM1 10 nm	ETM1:ETM2 (50%:50%) 30 nm
D6	HTM 40 nm	---	P18:M3:SER1 (60%:35%:5%) 40 nm	HBM1 10 nm	ETM1:ETM2 (50%:50%) 30 nm

表 2：真空處理 OLED 之結果

實例	EQE (%) 1000 cd/m ²	電壓 (V) 1000 cd/m ²	CIE x/y 1000 cd/m ²	LD50 (h) 1000 cd/m ²
Ref.-D1	18.8	3.2	0.34/0.62	190000
D1	18.9	3.0	0.33/0.62	240000
D2	19.2	2.9	0.34/0.62	230000
D3	19.4	2.9	0.33/0.63	340000
D4	19.0	3.1	0.34/0.62	360000
實例	EQE (%) 500 cd/m ²	電壓 (V) 500 cd/m ²	CIE x/y 500 cd/m ²	LD50 (h) 500 cd/m ²
D5	12.3	3.4	0.26/0.54	20000
D6	15.7	3.5	0.51/0.47	90000

溶液處理裝置：

來自低分子量之可溶性功能性材料

本發明之銥錯合物亦可由溶液中處理，其中導致

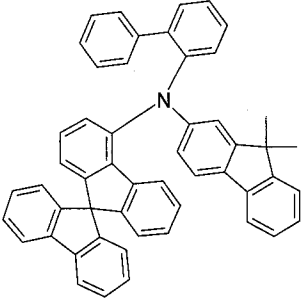
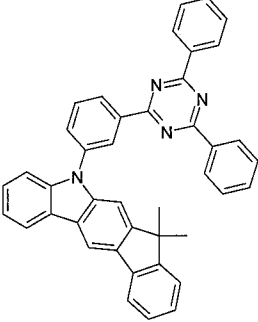
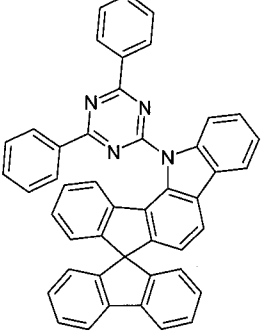
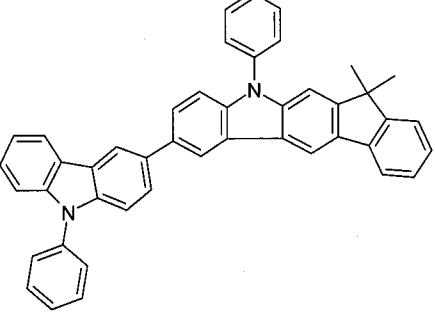
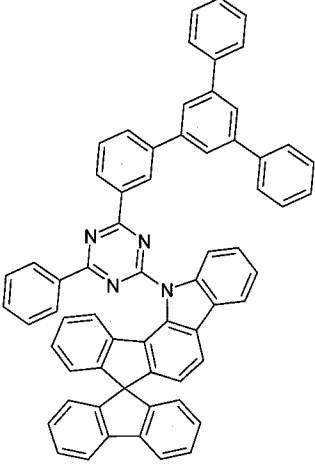
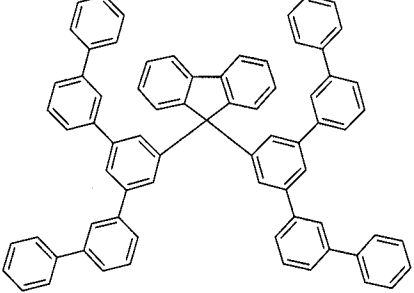
OLED在製程技術的觀點方面比真空處理之OLED簡單得多，不過仍具有良好的性質。此組件的製造係以聚合性發光二極體(PLED)的製造為基準，其已在文獻中描述多次(例如於WO 2004/037887中)。此結構係由基板/ITO/電洞注入層(60 nm)/中間層(20 nm)/發射層(60 nm)/電洞阻擋層(10 nm)/電子傳輸層(40 nm)/陰極所構成。欲達此目的，使用得自Technoprint的基板(鈉鈣玻璃)，其中ITO結構(氧化銻錫，透明導電性陽極)乃施加至其上。將基板於清潔室中以去離子水及清潔劑(Deconex 15 PF)清潔，然後藉UV/臭氧電漿處理法予以活化。其後，同樣地於清潔室中，將20 nm電洞注入層藉旋轉塗佈法施加。所需之轉速依稀釋程度及特定之旋轉塗佈器幾何學而定。欲由層中移除殘留之水，乃將基板於熱盤上、於200°C烘烤30分鐘。所用之中間層用於電洞傳輸，此情況下使用來自Merck之HL-X。中間層亦可另外地被一或多個層替代，該一或多個層僅必需滿足不會再度地被EML由溶液中沈積的接續處理步驟分開的條件。在發射層之製造方面，將本發明之三重態發射體連同基質材料一起溶於甲苯或氯苯中。此處當裝置典型之60 nm層厚度係待藉由旋轉塗佈法達成時，則此溶液之典型固體含量在16至25 g/l之間。綠色第1型溶液處理裝置含有由P:M:IrRef2(X%:Y%:Z%)構成之發射層，紅色第2型裝置含有由P:M:IrRef2:IrRef3(X%:Y%:Z%:5%)構成之發射層；另言之，彼等含有兩種不同的Ir錯合物。發射層係於惰性氣體氣氛中(本情況係於氬中)旋轉塗佈，再於160°C

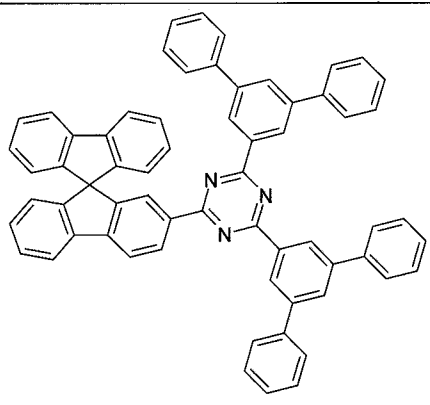
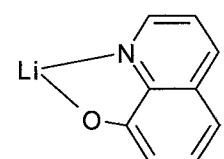
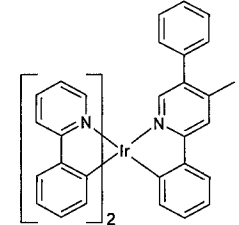
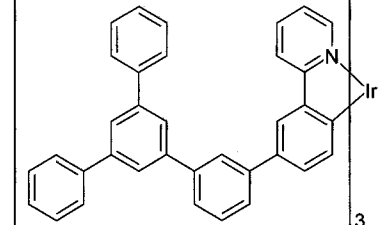
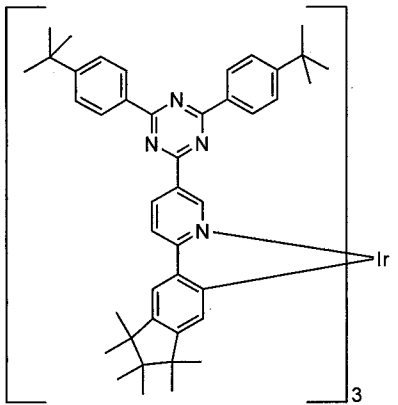
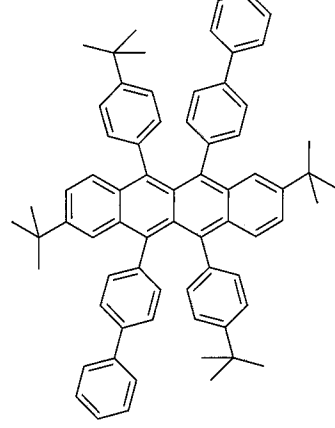
烘烤10分鐘。蒸氣沈積於後者之上的為電洞阻擋層(10 nm ETM1)及電子傳輸層(40 nm ETM1(50%)/ETM2(50%))(蒸氣沈積系統得自Lesker等等，典型蒸氣沈積壓力為 5×10^{-6} 毫巴)。最後，將鋁陰極(100 nm)(得自Aldrich之高純度金屬)藉蒸氣沈積法施加。欲保護裝置免於空氣及大氣濕度，最後乃將裝置封裝，然後特徵化。所引述之OLED實例有待最適化，表3總結所得數據。

表 3：由溶液中處理之材料的結果

實例	P:M:IrRef	EQE (%) 1000 cd/m ²	電壓 (V) 1000 cd/m ²	CIE x/y	LD50 (h) 1000 cd/m ²
紅色第 2 型裝置					
Sol-Ref-Red1	M4:M5: IrRef2 30%:40%:25%	17.4	6.2	0.66/0.34	240000
Sol-RedD1	P11:M5:IrRef2 70%:0%:25%	18.3	5.8	0.66/0.34	290000
Sol-RedD2	P11:M5:IrRef2 50%:20%:25%	18.6	5.9	0.66/0.34	320000
Sol-RedD3	P28:M5:IrRef2 70%:0%:25%	18.8	6.1	0.66/0.34	370000
綠色第 1 型裝置					
Sol-Ref-Green1	M4:M5: IrRef2 20%:60%:20%	20.1	5.3	0.33/0.62	200000
Sol-GreenD1	P10:M5:IrRef2 80%:0%:20%	20.6	5.4	0.33/0.62	230000
Sol-GreenD2	P10:M5:IrRef2 50%:30%:20%	20.9	5.3	0.33/0.62	220000
Sol-GreenD3	P11:M5:IrRef2 60%:20%:20%	20.8	5.1	0.33/0.62	240000
Sol-GreenD4	P13:M5:IrRef2 50%:30%:20%	20.5	5.2	0.33/0.62	240000
Sol-GreenD5	P14:M4:IrRef2 45%:30%:25%	20.2	5.0	0.34/0.61	250000
Sol-GreenD6	P18:M3:IrRef2 50%:35%:15%	20.0	5.2	0.32/0.63	310000
Sol-GreenD7	P25:M5:IrRef2 80%:0%:20%	19.9	5.1	0.33/0.62	260000
Sol-GreenD8	P28:M5:IrRef2 75%:0%:25%	20.3	5.0	0.32/0.62	240000

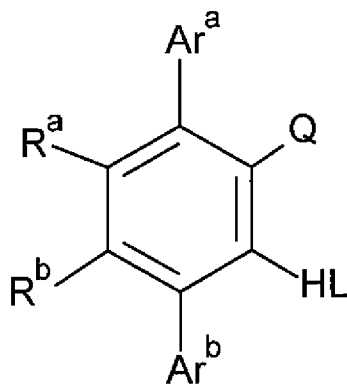
表 4：所用材料之結構式

 <p>HTM = M9 1450933-44-4</p>	 <p>M1 1257248-13-7</p>
 <p>M2 1615703-29-1</p>	 <p>M3 1357150-54-9</p>
 <p>M4 1616231-60-7</p>	 <p>M5 1246496-85-4</p>

 <p>ETM1 = HBM1 = M10 1233200-52-6</p>	 <p>ETM2 25387-93-3</p>
 <p>IrRef1 1215692-34-4</p>	 <p>IrRef2 1269508-30-6</p>
 <p>IrRef3 1870013-87-8</p>	 <p>SER1 850797-15-8</p>

【發明申請專利範圍】

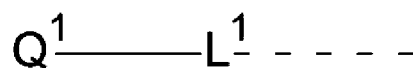
【請求項 1】一種化合物，其包含至少一種式 (I) 結構：



式 (I)

其中所用之符號如下：

Q 為如下式 (QL) 所示之受體基團，



式 (QL)

其中

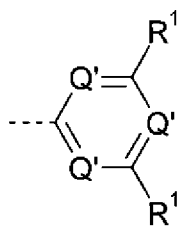
L¹ 表示具有 5 至 60 個芳族環原子且可被一或多個

R¹ 基取代之芳族或雜芳族環系統，及

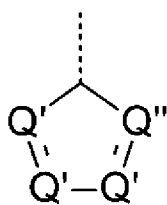
Q¹ 基為選自式 (Q-1)、(Q-2)、(Q-3)、(Q-4)、(Q-

5)、(Q-6)、(Q-7)、(Q-8)、(Q-9) 及 (Q-10) 之

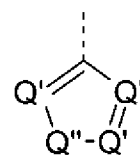
結構的拉電子基，



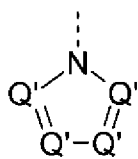
式 (Q-1)



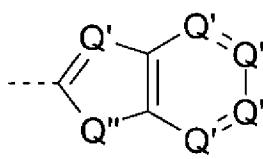
式 (Q-2)



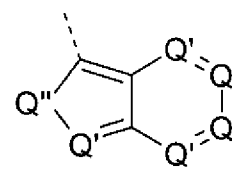
式 (Q-3)



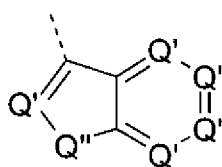
式 (Q-4)



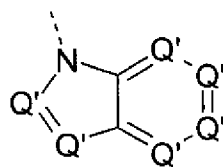
式 (Q-5)



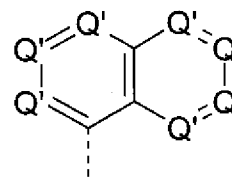
式 (Q-6)



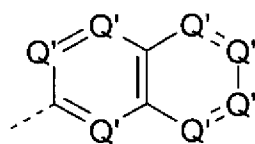
式 (Q-7)



式 (Q-8)



式 (Q-9)



式 (Q-10)

其中虛線鍵標示連接位置，

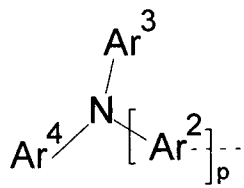
Q' 於每一情況為相同或不同且表示 CR^1 或 N ，

及

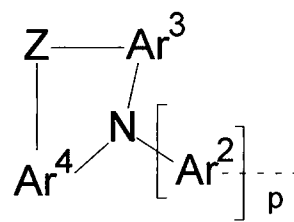
Q'' 表示 NR^1 、 O 或 S ；

其中至少一個 Q' 為 N ，或至少一個 Q'' 為 NR^1 ，及

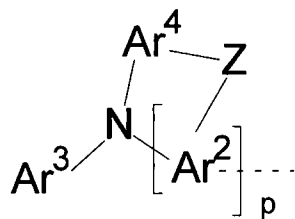
HL 為包含選自式 (H-1) 至 (H-26) 之基團的供體基團，



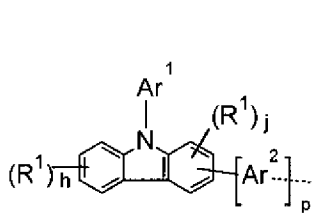
式 (H-1)



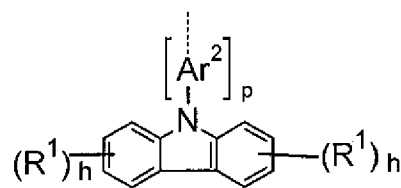
式 (H-2)



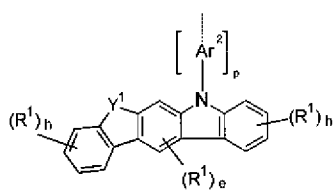
式 (H-3)



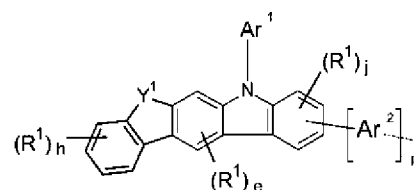
式 (H-4)



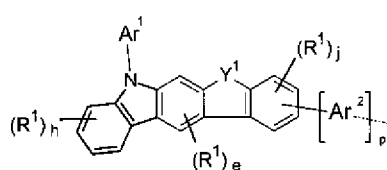
式 (H-5)



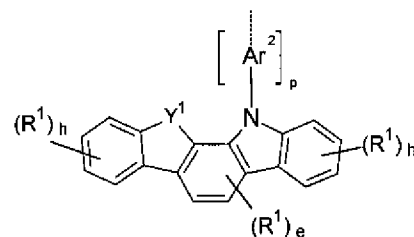
式 (H-6)



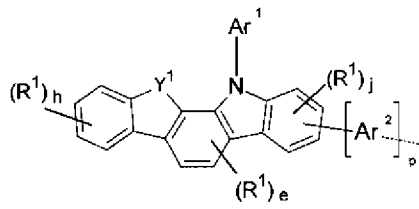
式 (H-7)



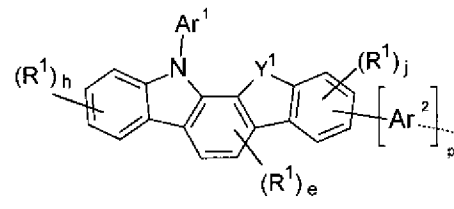
式 (H-8)



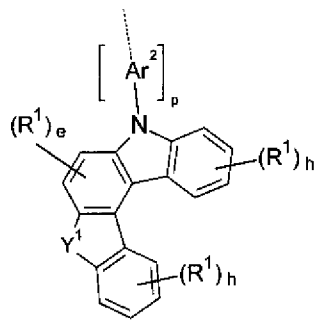
式 (H-9)



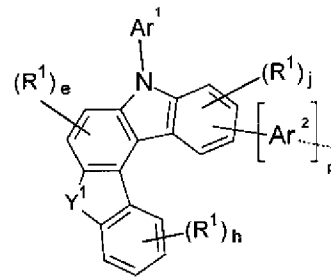
式 (H-10)



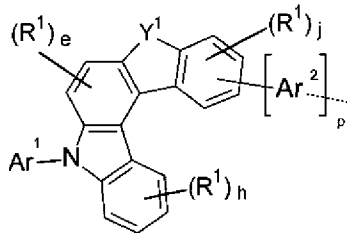
式 (H-11)



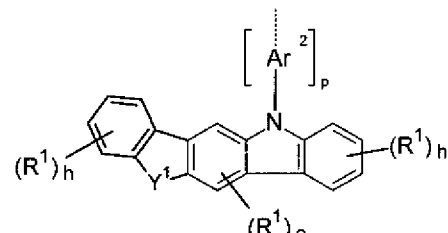
式 (H-12)



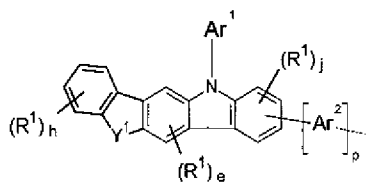
式 (H-13)



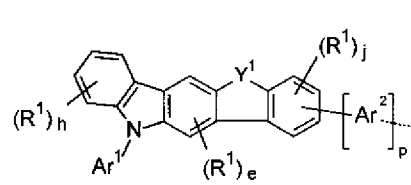
式 (H-14)



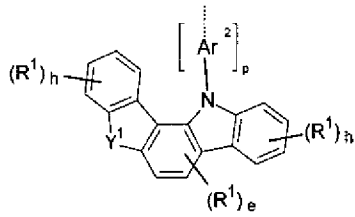
式 (H-15)



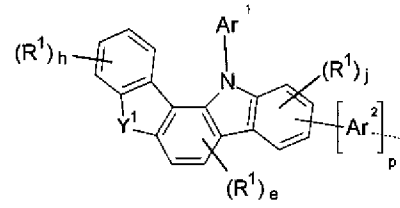
式 (H-16)



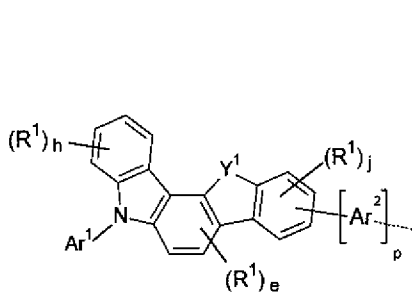
式 (H-17)



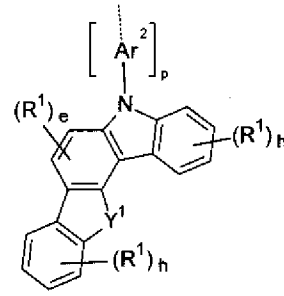
式 (H-18)



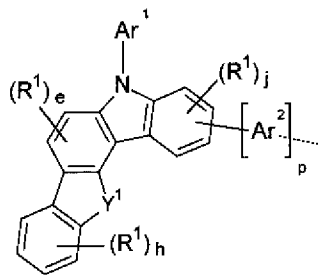
式 (H-19)



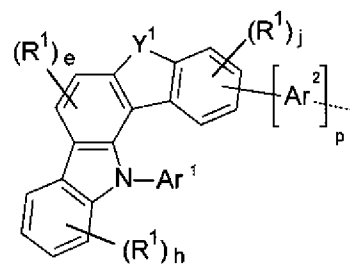
式 (H-20)



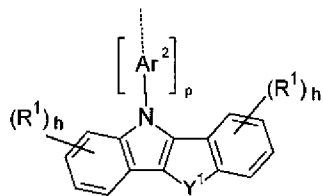
式 (H-21)



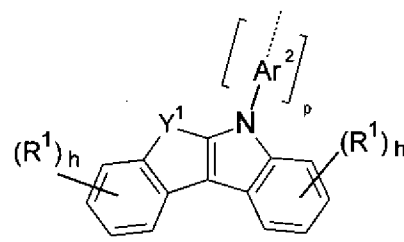
式 (H-22)



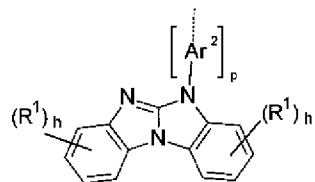
式 (H-23)



式 (H-24)



式 (H-25)



式 (H-26)

其中虛線鍵標示連接位置，及

Ar^2 、 Ar^3 、 Ar^4 各自獨立地為具有 6 至 40 個碳原子之芳基或具有 3 至 40 個碳原子之雜芳基，各者分別可被一或多個 R^1 基取代；

p 為 0、1 或 2；

Z 為 CR^1_2 、 $N-Ar^1$ 、 O 或 S ；

Y^1 表示 O 、 S 、 $C(R^1)_2$ 或 NAr^1 ， e 為 0、1 或 2， j 為 0、1、2 或 3， h 為 0、1、2、3 或 4；

Ar^a 、 Ar^b 為相同或不同且為具有 6 至 24 個芳族環原子且可被一或多個 R^1 基團取代之芳族或雜芳族環系統；

R^a 、 R^b 為相同或不同且係選自由 F ； CN ；具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基，各者分別可被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可被 O 替代且其中一或多個氫原子可被 D 或 F 替代；或具有 5 至 40 個芳族環原子且於每一情況下可被一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；

Ar^1 表示具有 6 至 24 個芳族環原子且於每一情況下可被一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統；

R^1 於每一情況為相同或不同且為 H ； D ； F ； Cl ； Br ； I ； $B(OR^2)_2$ ； CHO ； $C(=O)R^2$ ； $CR^2=C(R^2)_2$ ； CN ； $C(=O)OR^2$ ； $C(=O)N(R^2)_2$ ； $Si(R^2)_3$ ； $N(R^2)_2$ ； NO_2 ； $P(=O)(R^2)_2$ ； OSO_2R^2 ； OR^2 ；

$S(=O)R^2$; $S(=O)_2R^2$; 具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，各者分別可被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可被 $-R^2C=CR^2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 NR^2 、 $P(=O)(R^2)$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 或 SO_2 替代且其中一或多個氫原子可被 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替代；或具有 5 至 60 個芳族環原子且於每一情況下可被一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；或具有 5 至 60 個芳族環原子且可被一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基；或具有 5 至 60 個芳族環原子且可被一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；或具有 10 至 40 個芳族環原子且可被一或多個 R^2 基取代之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基；或這些系統之組合；同時，二或多個 R^1 基團可一起形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統；

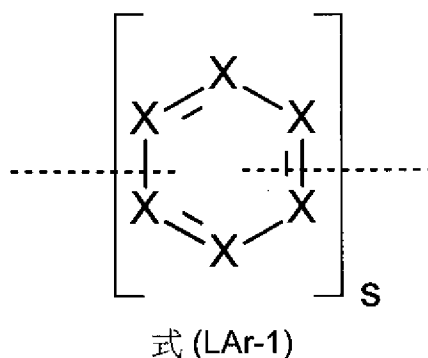
R^2 於每一情況為相同或不同且為 H ； D ； F ； Cl ； Br ； I ； $B(OR^3)_2$ ； CHO ； $C(=O)R^3$ ； $CR^3=C(R^3)_2$ ； CN ； $C(=O)OR^3$ ； $C(=O)N(R^3)_2$ ； $Si(R^3)_3$ ； $N(R^3)_2$ ； NO_2 ； $P(=O)(R^3)_2$ ； OSO_2R^3 ； OR^3 ； $S(=O)R^3$ ； $S(=O)_2R^3$ ；具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之

支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，各者分別可被一或多個 R^3 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可被 $-R^3C=CR^3-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 NR^3 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^3-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 或 SO_2 替代且其中一或多個氫原子可被 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 替代；或具有 5 至 60 個芳族環原子且於每一情況下可被一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統；或具有 5 至 60 個芳族環原子且可被一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基；或具有 5 至 60 個芳族環原子且可被一或多個 R^3 基取代之芳烷基或雜芳烷基；或具有 10 至 40 個芳族環原子且可被一或多個 R^3 基取代之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基；或這些系統之組合；同時，二或多個 R^2 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統；

R^3 於每一情況為相同或不同且為 H ； D ； F ；或具有 1 至 20 個碳原子之脂族、芳族及/或雜芳族烴基，其中氫原子亦可被 F 替代；同時，二或多個 R^3 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統。

【請求項 2】根據請求項 1 之化合物，其中式 (I) 中之該 Ar^a 及/或 Ar^b 基不同於符號 HL 之供體基團。

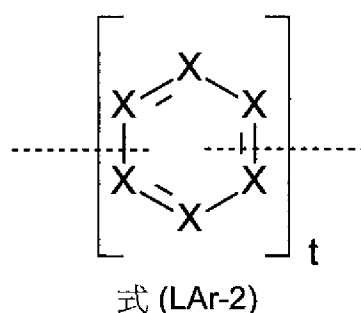
【請求項 3】根據請求項 1 之化合物，其中該 Ar^2 基為式 (LAr-1) 之連接結構



其中 X 於每一情況為相同或不同且為 N 或 CR^1 ，或者如果有基團結合至 X，則 X 為 C；

虛線鍵標示連接位置，且 s 為 0、1 或 2，其中該 R^1 基具有請求項 1 中提供之定義。

【請求項 4】根據請求項 1 之化合物，其中該 L^1 基為式 (LAr-2) 之連接結構

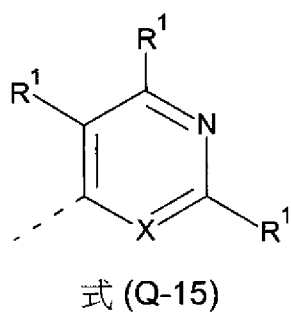
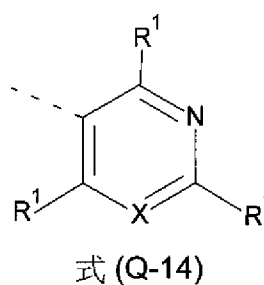
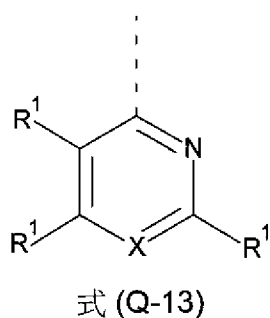
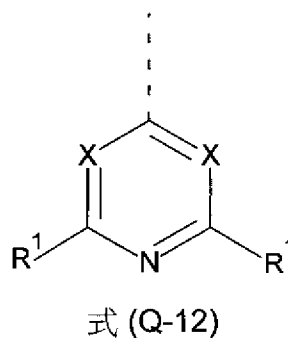
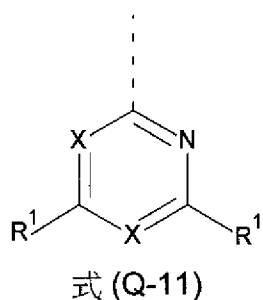


其中 X 於每一情況為相同或不同且為 N 或 CR^1 ，或者如果有基團結合至 X，則 X 為 C；

虛線鍵標示連接位置，且 t 為 0、1 或 2，其中該 R^1 基具有請求項 1 中提供之定義。

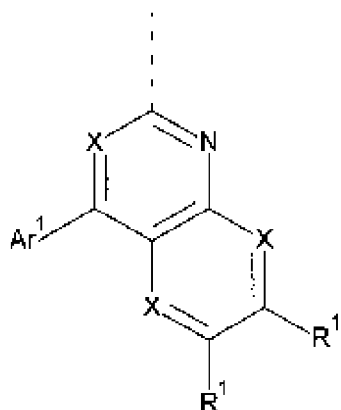
【請求項 5】根據請求項 1 之化合物，其中該 Q^1 基為選

自式 (Q-11)、(Q-12)、(Q-13)、(Q-14) 及 / 或 (Q-15) 之結構

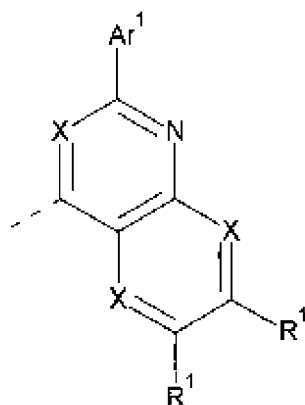


其中該符號 R^1 具有請求項 1 中提供之定義，X 為 N 或 CR^1 ，且虛線鍵標示連接位置。

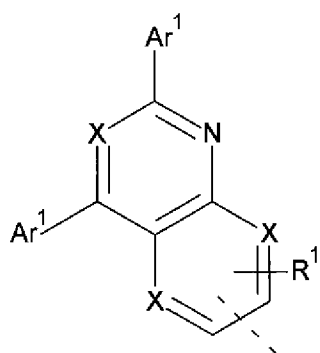
【請求項 6】根據請求項 1 之化合物，其中該 Q^1 基選自式 (Q-26)、(Q-27)、(Q-28)、(Q-29) 及 / 或 (Q-30) 之結構



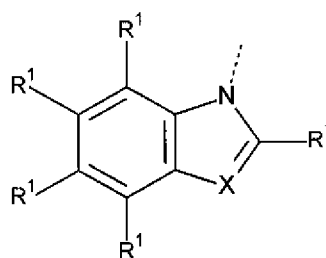
式 (Q-26)



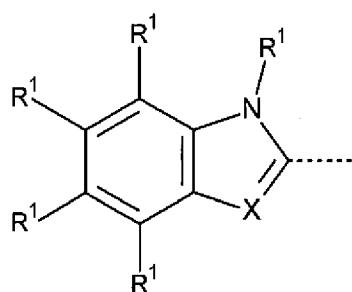
式 (Q-27)



式 (Q-28)



式 (Q-29)



式 (Q-30)

其中 X 為 N 或 CR¹，符號 R¹ 具有請求項 1 中提供之定義，且虛線鍵標示連接位置，且 Ar¹ 具有請求項 1 中提供之定義。

【請求項 7】一種寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其含有一或多種根據請求項 1 至 6 中任一項之化合物，其中，該(等)化合物有一或多個鍵代替氫原子或取代基接至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物。

【請求項 8】一種組成物，其包含至少一種根據請求項 1 至 6 中任一項之化合物或根據請求項 7 之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物及至少一種選自由以下所組成之群組的其他化合物：螢光發射體、磷光發射體、主體材料、基質材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞導體材料、電洞注入材料、電子阻擋材料及電洞阻擋材料。

【請求項 9】一種調合物，其包含至少一種根據請求項 1 至 6 中任一項之化合物或根據請求項 7 之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或根據請求項 8 之組成物及至少一種溶劑。

【請求項 10】一種根據請求項 1 至 6 中任一項之化合物或根據請求項 7 之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或根據請求項 8 之組成物之用途，其係用於電子裝置中作為 TADF 材料、主體材料、電子傳輸材料或電洞導體材料。

【請求項 11】一種製備根據請求項 1 至 6 中任一項之化合物或根據請求項 7 之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物之方法，其特徵在於將包含至少一個供體基團之化合物於偶合反應中連結至受體基團。

【請求項 12】一種電子裝置，其包含至少一種根據請求項 1 至 6 中任一項之化合物、根據請求項 7 之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或根據請求項 8 之組成物，其中該電子裝置係選自有機積體電路、有機場效電晶體、有機薄膜電晶體、有機太陽能電池、有機光學偵測器、有機光感受器、有機場猝滅裝置、及有機電激發光裝置。