



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201427925 A

(43)公開日：中華民國 103 (2014) 年 07 月 16 日

(21)申請案號：102142956

(22)申請日：中華民國 102 (2013) 年 11 月 26 日

(51)Int. Cl. :

C07C13/66 (2006.01)

C07C13/28 (2006.01)

C07D209/82 (2006.01)

C07D209/86 (2006.01)

C07D209/08 (2006.01)

C07D277/64 (2006.01)

C07D263/56 (2006.01)

C07C211/54 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

H05B33/14 (2006.01)

(30)優先權：2012/11/26 南韓

10-2012-0134761

(71)申請人：喜星素材股份有限公司 (南韓) HEESUNG MATERIAL LTD. (KR)

南韓

(72)發明人：李到炯 LEE, DO-HYUNG (KR)；金東駿 KIM, DONG-JUN (KR)；盧永錫 NO, YOUNG-SEOK (KR)；千玄東 CHUN, HYUNDONG (KR)；李柱東 LEE, JOO-DONG (KR)

(74)代理人：吳冠賜；蘇建太；林志鴻

申請實體審查：有 申請專利範圍項數：18 項 圖式數：3 共 84 頁

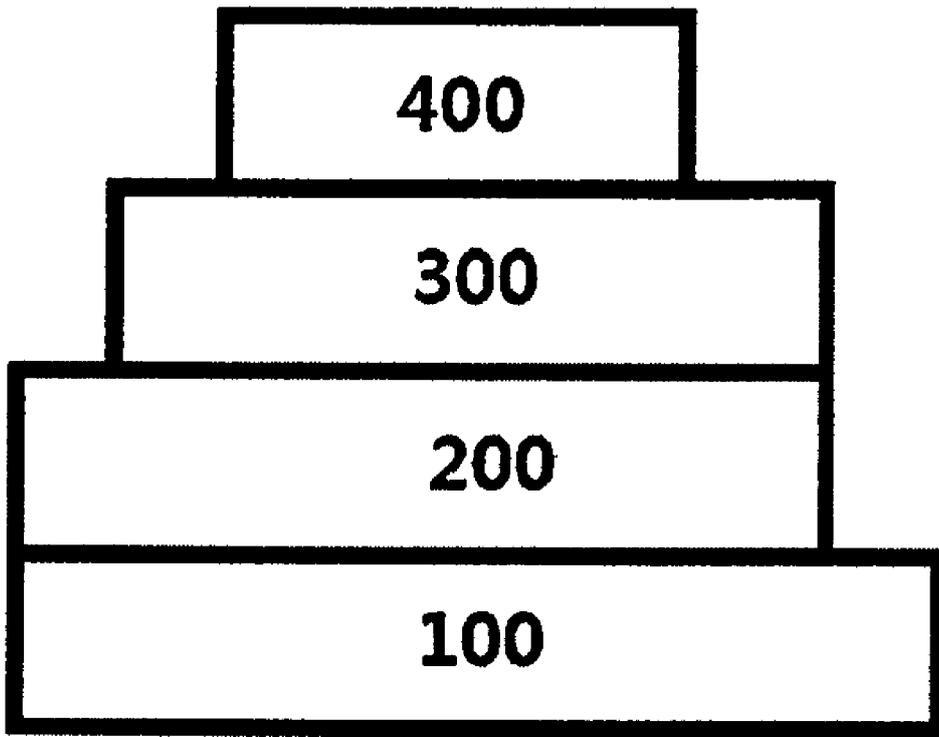
(54)名稱

多環芳香族化合物及使用其之有機發光裝置

MULTICYCLIC AROMATIC COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE USING THE SAME

(57)摘要

本發明係有關於一種具有新穎結構之多環芳香環化合物、以及使用其之有機發光裝置。



- 100 : 基板
- 200 : 陽極
- 300 : 有機材料層
- 400 : 陰極

圖 1



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公開本

(11) 公開編號：TW 201427925 A

(43) 公開日：中華民國 103 (2014) 年 07 月 16 日

(21) 申請案號：102142956

(22) 申請日：中華民國 102 (2013) 年 11 月 26 日

(51) Int. Cl. :

C07C13/66 (2006.01)

C07C13/28 (2006.01)

C07D209/82 (2006.01)

C07D209/86 (2006.01)

C07D209/08 (2006.01)

C07D277/64 (2006.01)

C07D263/56 (2006.01)

C07C211/54 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

H05B33/14 (2006.01)

(30) 優先權：2012/11/26 南韓

10-2012-0134761

(71) 申請人：喜星素材股份有限公司 (南韓) HEESUNG MATERIAL LTD. (KR)

南韓

(72) 發明人：李到炯 LEE, DO-HYUNG (KR)；金東駿 KIM, DONG-JUN (KR)；盧永錫 NO, YOUNG-SEOK (KR)；千玄東 CHUN, HYUNDONG (KR)；李柱東 LEE, JOO-DONG (KR)

(74) 代理人：吳冠賜；蘇建太；林志鴻

申請實體審查：有 申請專利範圍項數：18 項 圖式數：3 共 84 頁

(54) 名稱

多環芳香族化合物及使用其之有機發光裝置

MULTICYCLIC AROMATIC COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE USING THE SAME

(57) 摘要

本發明係有關於一種具有新穎結構之多環芳香環化合物、以及使用其之有機發光裝置。

201427925

C07C 13/66 (2006.01)

13/68 (2006.01)

發明摘要

C07D 209/82 (2006.01)

209/86 (2006.01)

※ 申請案號：102142956

※ 申請日：102. 11. 26

※IPC 分類：

209/08 (2006.01)

277/64 (2006.01)

【發明名稱】(中文/英文)

多環芳香族化合物及使用其之有機發光裝置/

263/66 (2006.01)

MULTICYCLIC AROMATIC COMPOUND AND ORGANIC LIGHT

C07C 211/54 (2006.01)

EMITTING DEVICE USING THE SAME

C09K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

【中文】

H05B 33/14 (2006.01)

本發明係有關於一種具有新穎結構之多環芳香環化合物、以及使用其之有機發光裝置。

【英文】

The present specification describes a multicyclic aromatic ring compound having a novel structure and an organic light emitting device using the same.

【代表圖】

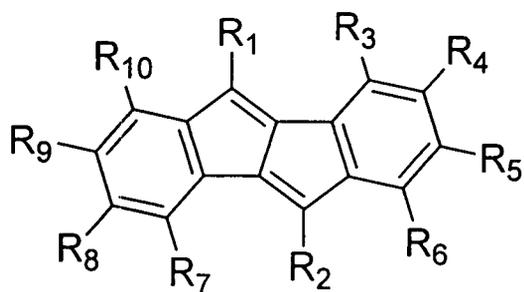
【本案指定代表圖】：圖（ 1 ）。

【本代表圖之符號簡單說明】：

- 100 基板
- 200 陽極
- 300 有機材料層
- 400 陰極

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：

[化學式 1]



其中，R₁至 R₁₀係如說明書中定義。

發明專利說明書

【發明名稱】(中文/英文)

多環芳香族化合物及使用其之有機發光裝置/
MULTICYCLIC AROMATIC COMPOUND AND ORGANIC
LIGHT EMITTING DEVICE USING THE SAME

【技術領域】

【0001】 本發明係關於一種新穎的多環芳香族化合物、
及使用其之有機發光裝置。

【先前技術】

【0002】 電致發光裝置是一種自發光類型的顯示裝置，
其具有廣視角、優異對比度、及快速反應時間之優點。

【0003】 在有機發光裝置的結構中，一有機薄膜係設置
於兩電極之間。當對具有此結構之有機發光裝置施加電壓
時，由兩電極注入之電子和電洞發光，其係在電子和電洞
於有機薄膜中結合配對後發散。該有機薄膜可視需要而形
成單層或多層。

【0004】 若需要，有機薄膜之材料可具有發光功能。例
如，作為有機薄膜之材料，可單獨使用能夠形成發光層之
化合物，或者亦可使用能夠作為主體-摻體系發光層之主體
或摻體之化合物。除此之外，亦可使用能夠執行電洞注入、
電洞轉移、電子阻障、電洞阻障、電子轉移、電子注入、
或類似者之化合物作為有機薄膜之材料。

【0005】 為了提升有機發光裝置之性能、使用壽命或效

率，一直具有對於有機薄膜材料之發展需求。

【0006】 例如，目前已知 CBP 為最廣泛作為磷光發光體之主體材料，並且已知在有機發光裝置中設有電洞阻障層(如 BCP 和 BAlq)、以及在有機發光裝置中使用 BAlq 衍生物作為主體。

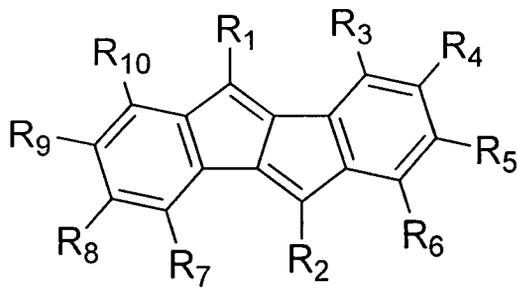
【0007】 然而，現有的材料具有發光性質方面的優點，但因為此種材料的低玻璃轉換溫度及極低熱穩定性，具有在真空下進行高溫沉積製程時材料會產生變化之缺點。在有機發光裝置中， $\text{功率} = (\pi / \text{電壓}) \times \text{電流效率}$ ，因此，功率與電壓成反比，為了使有機發光裝置具有低耗能，需要高功率，。實際上，和利用螢光發光材料的有機發光裝置相比，利用磷光發光材料的有機發光裝置具有相當高的電流效率(cd/A)，然而，當使用現有材料(例如 CBP 或 BAlq)作為磷光發光材料的主體時，由於相較於利用螢光材料之有機發光裝置係具有高驅動電壓，故對功率(lm/w)沒有非常有利。此外，有機發光裝置之使用壽命並非全然令人滿意，因此，具有發展更穩定及展現更優異性質之主體材料之需求。

【發明內容】

【0008】 本發明提供一種新穎的多環芳香族化合物、及一種使用其之有機發光裝置。

【0009】 本發明提供一種如下化學式 1 之化合物：

[化學式 1]



其中，在化學式 1 中，

R₁ 和 R₂ 係各自獨立為：氫；鹵素；經取代或未經取代之 C₁-C₃₀ 烷基；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳基；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳基，其中係與經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 環烷基、經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基、及經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基；經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基，其中係與經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 環烷基、經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳香環、及經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基；經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜環烷基、經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳香環、及經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 環烷基；經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜環烷基、經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳香環、及經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基中之一或多者稠合；氰基；-NR₁₁R₁₂；-SiR₁₃R₁₄R₁₅；-OR₁₆；-SR₁₇；經取代或未經取代之 (C₆-C₃₀) 芳基 (C₁-C₃₀) 烷基；經取代或未經取代之 C₁-C₃₀ 烷胺基；C₃-C₃₀ 雜芳基，其中係經 -SiR₁₈R₁₉R₂₀

取代；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳胺基；經取代或未經取代之 C₂-C₃₀ 烯基；經取代或未經取代之 C₂-C₃₀ 炔基；羧基；硝基；或羥基；或者，透過 C₃-C₃₀ 亞烷基或 C₃-C₃₀ 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；

R₁₁ 至 R₂₀ 係各自獨立為：氫；經取代或未經取代之 C₁-C₃₀ 烷基；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳基；或經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基；或者，透過 C₃-C₃₀ 亞烷基或 C₃-C₃₀ 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；

該雜環烷基和該雜芳基包含一個以上選自由氮(N)、氧(O)、硫(S)及矽(Si)的雜原子；

R₃ 至 R₁₀ 係各自獨立為：氫或單價有機取代基；以及

R₃ 及 R₄、R₄ 及 R₅、R₅ 及 R₆、R₇ 及 R₈、R₈ 及 R₉、或 R₉ 及 R₁₀，透過 C₃-C₃₀ 亞烷基或 C₃-C₃₀ 亞烯基而鍵結，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

【0010】 本發明另提供一種有機發光裝置，其包括：一第一電極；一第二電極；以及一個以上有機材料層，其係設置於該第一電極和該第二電極之間；其中，該一個以上有機材料層包含該化學式 1 之化合物。

【0011】 根據本發明一實施例，包含該化學式 1 之化合物之該有機材料層係為一發光層。

【0012】 根據本發明另一實施例，包含該化學式 1 之化

合物之該有機材料層更包括：一發光摻質。

【0013】 根據本發明再一實施例，包含該化學式 1 之化合物之該有機材料層更包括：一磷光摻質。

【0014】 可使用根據本發明之化合物作為有機發光裝置中有機材料層之材料。可使用該化合物作為有機發光裝置中之電洞注入材料、電洞轉移材料、發光材料、電子轉移材料、電子注入材料、或類似者。尤其，可使用該化合物作為有機發光裝置中之發光材料。此外，可使用該化合物作為主體材料，尤其是有機發光裝置中發光層之磷光主體材料。

【0015】 當使用根據本發明之化合物作為發光材料時，具有以下優點：和現有材料相比具有優異發光效率、因該材料之優異使用壽命性質特性而可預期裝置之長使用壽命、以及可透過引起功率提升而製造出具有改善能量消耗之有機發光裝置。此外，該化合物可完成適當的色座標(color coordinates)。因此，藉由使用根據本發明之化合物，可提供具有高效能及長使用壽命之有機發光裝置。

【圖式簡單說明】

【0016】

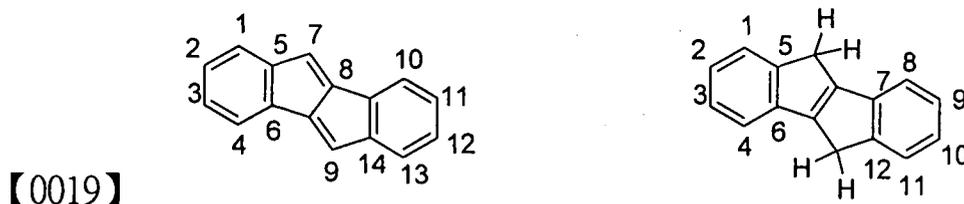
圖 1 至圖 3 係根據本發明實施例之有機發光裝置中電極及有機材料層之壓合順序示意圖。

【實施方式】

【0017】 之後，將詳述本發明。

【0018】 根據本發明之化合物可由化學式 1 表示。依照

核心結構之結構性質和物理性質，可使用根據本發明之化合物作為有機發光裝置中有機材料層之材料。詳細說明，化學式 1 具有苯並戊搭烯(dibenzopentalene)作為核心結構。苯並戊搭烯為一種具有戊搭烯骨架之反芳香性分子。根據休克爾規則(Hückel rule)，在骨架中的所有碳分子共享 π 電子，且具有 $4n$ 數 π 電子之分子具有「反芳香性」，且在此結構中，由於具有共價鍵結之結構中， π 電子之移動性提升進而增加反應性。此外，由於簡單修飾成二價陰離子形式，該分子可具有優異穩定性及芳香性。再者，具有戊搭烯骨架之該分子不論其反芳香性而具有高穩定性，因此，該分子利於製造具有夾心式(sandwich form)之過渡金屬錯合物，且利於作為有機半導體材料、或具有高氧化/還原潛力作為具有梯形式(trapezoid form)之 π 電子共軛分子之染劑。就此點而言，如下所示，化學式 1 之核心結構在 π 電子位置係不同於二氫戊搭烯(dihydropentalene)結構。



【0020】 在「經取代或未經取代」之 R_1 至 R_{10} 中，經取代表示各自獨立地更經由一種以上選自由下列所組群組者所取代：氬；鹵素； C_1 - C_{30} 烷基，其中係經鹵素取代或未經取代； C_6 - C_{30} 芳基； C_3 - C_{30} 雜芳基，其中係經 C_6 - C_{30} 芳基取代或未經取代；5 員至 7 員雜環烷基；5 員至 7 員雜環烷基，其中係與一個以上芳香環稠合； C_3 - C_{30} 環烷基； C_3 - C_{30} 環烷

基，其中係與一個以上芳香環稠合；三(C₁-C₃₀)烷基甲矽烷基；二(C₁-C₃₀)烷基(C₆-C₃₀)芳基甲矽烷基；三(C₆-C₃₀)芳基甲矽烷基；C₂-C₃₀烯基；C₂-C₃₀炔基；氰基；咪唑基；-NR₃₁R₃₂；-SiR₃₃R₃₄R₃₅；-OR₃₆；-SR₃₇；(C₆-C₃₀)芳基(C₁-C₃₀)烷基；(C₁-C₃₀)烷基(C₆-C₃₀)芳基；C₁-C₃₀烷氧基；C₁-C₃₀烷硫基；C₆-C₃₀芳氧基；C₆-C₃₀芳硫基；羧基；硝基；或羥基；以及 R₃₁ 至 R₃₇ 係各自獨立為氫；C₁-C₃₀烷基；C₆-C₃₀芳基；或 C₃-C₃₀雜芳基；或者透過 C₃-C₃₀亞烷基或 C₃-C₃₀亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

【0021】 在本發明說明書中所述之包含「烷基」、「烷氧基」、及額外「烷基」部分的取代基，包括所有線性或支鏈性型式。

【0022】 在本發明說明書中，環烷基包含具有 3 至 30 碳原子之單環或多環，且尤其包含所有經取代或未經取代之金剛烷基(adamantyl)、或經取代或未經取代之 C₇-C₃₀ 雙環烷基。在此，多環表示其中環烷基直接鍵結至其他環基、或與其他環基縮合之基團。在此，其他環基可為環烷基，但亦可為其他種類的環基，例如：雜環烷基、芳香環、雜芳基或其類似者。環烷基的碳原子數可為 3 至 30，較佳為 3 至 20，更佳為 5 至 12。

【0023】 在本發明說明書中，雜環基包含硫、氧或氮作為雜原子，包含具有 2 至 30 碳原子之單環或多環，且可更經由其他取代基所取代。在此，多環表示其中雜環烷基直

接鍵結至其他環基、或與其他環基縮合之基團。在此，其他環基可為雜環烷基，但亦可為其他種類的環基，例如：環烷基、芳香環、雜芳基或其類似者。雜環烷基的碳原子數可為 2 至 30，較佳為 2 至 20，更佳為 3 至 12。

【0024】 在本發明說明書中，芳基為經由移除芳香烴的一個氫而衍生的有機基團，並包含一包含 4 員至 7 員環之單環或稠合環，且較佳為 5 員至 6 員環；且亦可包含其中一種以上芳基係經由化學鍵結而結合之結構。芳基之具體範例包含苯基、萘基、聯苯基、蔥基、茛基、芴基、菲基、三亞苯基、芘基、芘基、屈基、稠四苯基(naphthacenyl)、茈蔥基、或類似者，但本發明不限於此。

【0025】 在本發明說明書中，雜芳基表示其中包含 1 至 4 個雜原子(選自由氮、氧及硫)作為芳香環骨架原子、其餘芳香環骨架原子為碳之芳基，且包含與一個以上苯環縮合之 5 至 6 員單環雜芳基或多環雜芳基，且可為部分飽和。此外，在本發明中，雜芳基亦包含：其中一個以上雜芳基透過化學鍵結合之結構。雜芳基包含二價芳基，其中環中的雜原子為氧化態或成為 4 員環，例如形成氮氧化物或四級鹽類。雜芳基的具體範例包含：單環雜芳基，例如：呋喃基、噁吩基、吡咯基(pyrolyl)、咪唑基(imidazolyl)、吡唑(pyrazolyl)、噻唑基(thiazolyl)、噻二唑基(thiadiazolyl)、異噻唑基、異噁唑基、噁唑基(oxazolyl)、惡二唑基(oxadiazolyl)、三嗪基、四嗪基(tetrazinyl)、三唑基(triazolyl)、四唑基(tetrazolyl)、呋咱基(furazanyl)、吡啶基、吡嗪基(pyrazinyl)、

嘧啶基、或噻嗪基；多環雜芳基，例如：苯並呋喃基、苯並噻吩基(benzothieryl)、異苯並呋喃、苯並咪唑(benzoimidazolyl)、苯並噻唑(benzothiazolyl)、苯並異噻唑、苯並異噁唑基、苯並噁唑基(benzooxazolyl)、異吲哚基、吲哚基(indolyl)、吲唑基(indazolyl)、苯並噻二唑(benzothiadiazolyl)、喹啉基、異喹啉基、噌啉基(cinnolinyl)、喹唑啉基(quinazolinylyl)、喹啉基(quinolizinylyl)、喹喔啉基(quinoxalinylyl)、呋唑基、菲啶基(phenanthridinylyl)、或苯並二氧雜環戊(benzodioxolyl)；對應其之氮氧化物，例如吡啶氮氧化物或喹啉氮氧化物；對應其之四級鹽類；或類似者；但並未受限於此。

【0026】 此外，在本發明說明書中，所述「C₁-C₃₀ 烷基」包含：C₁-C₂₀ 烷基或 C₁-C₁₀ 烷基；所述「C₆-C₃₀ 芳基」包含：C₆-C₂₀ 芳基或 C₆-C₁₂ 芳基。「C₃-C₃₀ 雜芳基」包含 C₃-C₂₀ 雜芳基或 C₃-C₁₂ 雜芳基；「C₃-C₃₀ 環烷基」包含：C₃-C₂₀ 環烷基或 C₃-C₇ 環烷基。「C₂-C₃₀ 烯基或炔基」包含 C₂-C₂₀ 烯基或炔基、或 C₂-C₁₀ 烯基或炔基。

【0027】 在本發明說明書中，鹵素包含：氟、氯、溴和碘。

【0028】 根據本發明一實施例，R₁至 R₁₀係各自獨立為：氫；鹵素；經取代或未經取代之 C₁-C₃₀ 烷基；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳基；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳基，其中係與一個以上的經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 環烷基稠合；經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基；經取代或未經取代之 5

員至 7 員雜環烷基；5 員至 7 員雜環烷基，其中係與一個以上的經取代或未經取代之芳香環稠合；經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 環烷基；C₃-C₃₀ 環烷基，其中係與一個以上的經取代或未經取代之芳香環稠合；氰基；-NR₁₁R₁₂；-SiR₁₃R₁₄R₁₅；-OR₁₆；-SR₁₇；經取代或未經取代之(C₆-C₃₀)芳基(C₁-C₃₀)烷基；經取代或未經取代之 C₁-C₃₀ 烷胺基；C₃-C₃₀ 雜芳基，其中係經-SiR₁₈R₁₉R₂₀ 取代；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳胺基；經取代或未經取代之 C₂-C₃₀ 烯基；經取代或未經取代之 C₂-C₃₀ 炔基；羧基；硝基；或羥基；或者，透過 C₃-C₃₀ 亞烷基或 C₃-C₃₀ 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；

R₁₁ 至 R₂₀ 係各自獨立為：經取代或未經取代之 C₁-C₃₀ 烷基；經取代或未經取代之 C₆-C₃₀ 芳基；或經取代或未經取代之 C₃-C₃₀ 雜芳基；或者，透過 C₃-C₃₀ 亞烷基或 C₃-C₃₀ 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；該雜環烷基和該雜芳基包含一個以上選自由氮(N)、氧(O)、硫(S)及矽(Si)的雜原子。

【0029】 根據本發明一實施例，R₁ 至 R₁₀ 係各自獨立為：氫；鹵素；烷基，例如甲基、乙基、丙基、丁基、戊基、己基、乙基己基、庚基、或辛基；芳基，例如苯基、萘基、芴基、聯苯基、菲基(phenanthryl)、三聯苯基、芘基(pyrenyl)、芘基(perylene)、螺二芴基(spirobifluorenyl)、熒蒽基(fluoranthenyl)、屈基(chrysenyl)、或三亞苯基；芳基，其中

係與一個以上環烷基稠合，例如 1,2-二氫萘基 (1,2-dihydroacenaphthyl)；雜芳基，例如二苯並噻吩基 (dibenzothiophenyl)、二苯並呋喃基(dibenzofuryl)、咔唑基 (carbazolyl)、吡啶基(pyridyl)、呋喃基(furyl)、噻吩基(thienyl)、喹啉基(quinolyl)、三嗪基(triazinyl)、嘧啶基(pyrimidinyl)、噻嗪基(pyridazinyl)、喹惡啉基(quinoxaliny)l、或菲咯啉基 (phenanthrolinyl)；雜環烷基，其中係與一個以上芳香環稠合，例如苯並吡咯烷基(benzopyrolidino)、苯並哌啶基 (benzopiperidino)、二苯嗎啉基(dibenzomorpholino)、或二苯並氮雜卓基(dibenzoazepino)；或胺基，其中經芳基(例如苯基、萘基、苄基、聯苯基、菲基、三聯苯基、芘基、芘基、螺二苄基、茱萸基、屈基、或三亞苯基)、或雜芳基(例如二苯並噻吩基、二苯並呋喃基、咔唑基、吡啶基、呋喃基、噻吩基、喹啉基、三嗪基、嘧啶基、噻嗪基、喹惡啉基、或菲咯啉基)所取代之；芳氧基，例如聯苯氧基(biphenyloxy)；芳硫基，例如聯苯硫基(biphenylthio)；芳烷基，例如聯苯甲基(biphenylmethyl)或三聯苯甲基(triphenylmethyl)；羧基；硝基；或羥基；但 R_1 至 R_{10} 並未受限於此，且在化學式 1 中可進一步被取代。

【0030】 根據本發明一實施例， R_1 和 R_2 係各自獨立為：鹵素；經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基、及經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基

中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基，其中係與經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基；經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 環烷基；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；氰基； $-NR_{11}R_{12}$ ； $-OR_{16}$ ； $-SR_{17}$ ；經取代或未經取代之 (C_6-C_{30}) 芳基 (C_1-C_{30}) 烷基；經取代或未經取代之 C_1-C_{30} 烷胺基； C_3-C_{30} 雜芳基，其中係經 $-SiR_{18}R_{19}R_{20}$ 取代；經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳胺基；經取代或未經取代之 C_2-C_{30} 烯基；經取代或未經取代之 C_2-C_{30} 炔基；羧基；硝基；或羥基；或者，透過 C_3-C_{30} 亞烷基或 C_3-C_{30} 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

【0031】 根據本發明一實施例， R_1 和 R_2 中至少一者在環員中具有七個以上的碳原子。

【0032】 根據本發明一實施例， R_1 和 R_2 中至少一者包含兩個以上的環。

【0033】 根據本發明一實施例， R_1 和 R_2 係互不相同。

【0034】 根據本發明一實施例， R_1 和 R_2 中至少一者為 C_1 - C_{30} 烷基。

【0035】 根據本發明一實施例， R_1 和 R_2 可選自由：氫、烷基、苯基、萘基、蔥基、菲基、芘基、經苯基或烷基取代的苄基、經苯基取代或未經取代的咪唑基、經萘基取代之苯基、聯苯基、茛基、蒽基、熒蔥基、經苯基取代的萘基、吲哚基、苯並噁唑基、苯並噻唑基、及經芳胺基取代之苯基。

【0036】 根據本發明一實施例， R_1 和 R_2 可選自由：烷基、萘基、蔥基、菲基、芘基、經苯基或烷基取代的苄基、經苯基取代或未經取代的咪唑基、經萘基取代之苯基、聯苯基、茛基、蒽基、熒蔥基、經苯基取代的萘基、吲哚基、苯並噁唑基、苯並噻唑基、及經芳胺基取代之苯基。

【0037】 在化學式 1 中， R_3 至 R_{10} 係各自獨立為氫或單價有機取代基。具體舉例說明， R_3 至 R_{10} 係各自獨立為氫；鹵素；經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基、及經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基；經取代或

未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；氰基； $-NR_{11}R_{12}$ ； $-SiR_{13}R_{14}R_{15}$ ； $-OR_{16}$ ； $-SR_{17}$ ；經取代或未經取代之 (C_6 - C_{30}) 芳基 (C_1 - C_{30}) 烷基；經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷胺基； C_3 - C_{30} 雜芳基，其中係經 $-SiR_{18}R_{19}R_{20}$ 取代；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳胺基；經取代或未經取代之 C_2 - C_{30} 烯基；經取代或未經取代之 C_2 - C_{30} 炔基；羧基；硝基；或羥基；或者，透過 C_3 - C_{30} 亞烷基或 C_3 - C_{30} 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

【0038】 根據本發明一實施例， R_3 至 R_{10} 係各自獨立為氫；經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基；或者，透過 C_3 - C_{30} 亞烷基或 C_3 - C_{30} 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

【0039】 根據本發明一實施例， R_3 至 R_{10} 係各自獨立為氫；甲基或苯基；或可與一相鄰取代基形成一苯基。

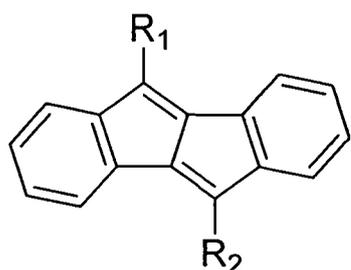
【0040】 根據本發明一實施例， R_5 和 R_9 係各自獨立為氫；甲基或苯基；或可與一相鄰取代基形成苯基。並且 R_3 、

R₄、R₆、R₇、R₈ 及 R₁₀ 為氫。

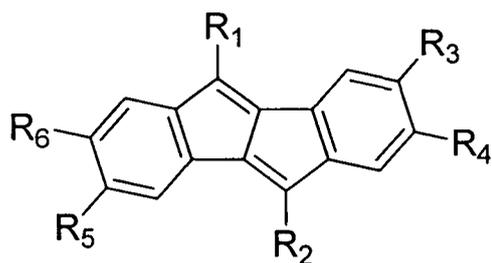
【0041】 根據本發明一實施例，R₄、R₅、R₈ 及 R₉ 可各自獨立為氫；甲基或苯基；或可與一相鄰取代基形成一苯基。並且 R₃、R₆、R₇ 及 R₁₀ 為氫。

【0042】 根據本發明一實施例，化學式 1 可由化學式 2 至 9 中任一者所示：

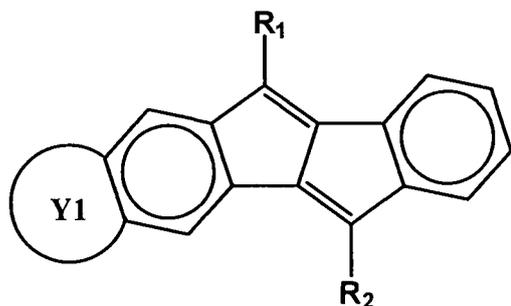
[化學式 2]



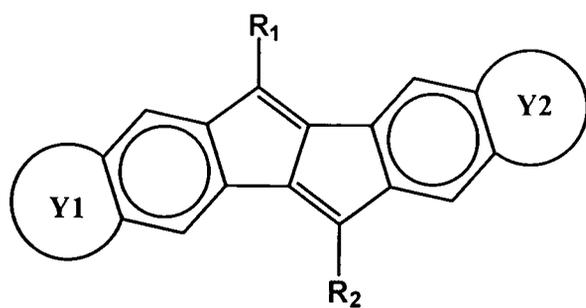
[化學式 3]



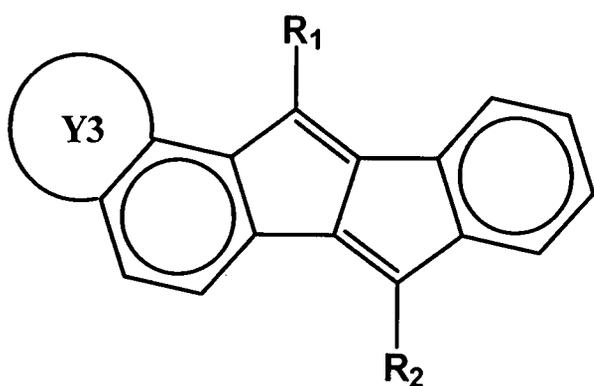
[化學式 4]



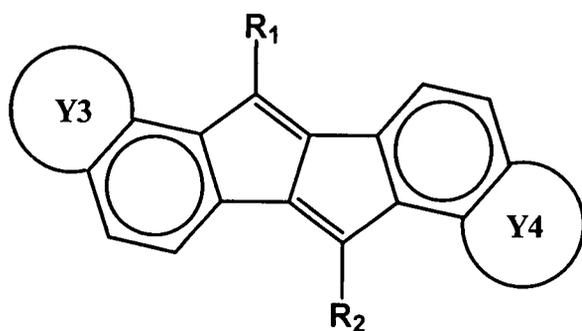
[化學式 5]



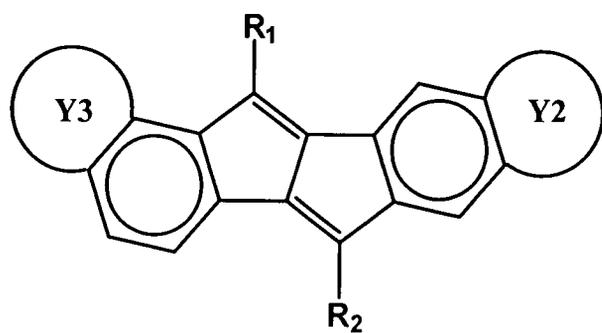
[化學式 6]



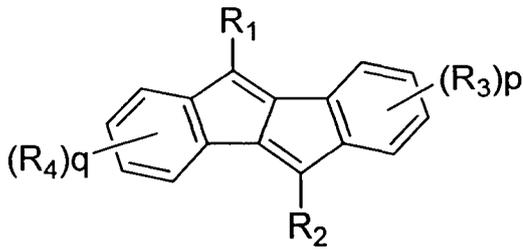
[化學式 7]



[化學式 8]



[化學式 9]

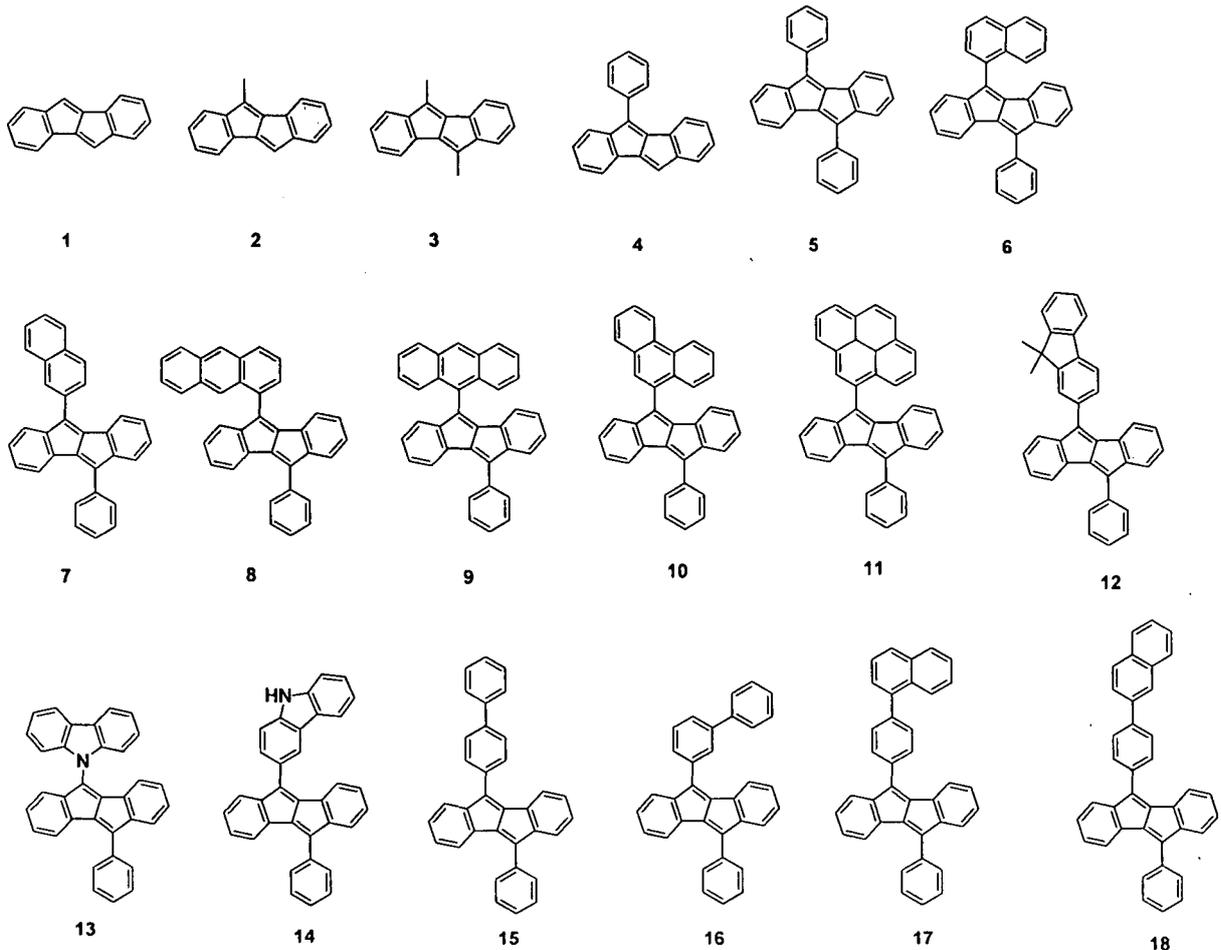


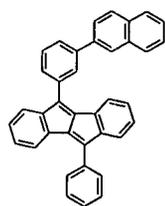
在化學式 2 至 9 中， R_1 、 R_2 、 R_3 及 R_4 係如同申請專利範圍第 1 項所定義；

p 和 q 係各自獨立為 1 至 4 之整數；

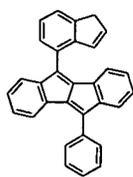
Y_1 至 Y_4 代表：經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之雜芳基、經取代或未經取代之 5 員至 7 員雜環烷基、及經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基中之一者，或者其中該些環中兩個以上的環稠合之一環。

【0043】 根據一實施例，化學式 1 可由下列結構式所表示，然而本發明之範圍並未受限於此。

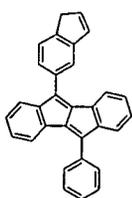




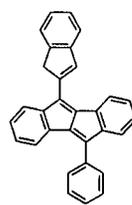
19



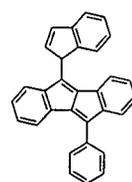
20



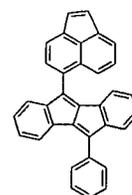
21



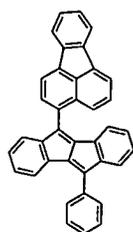
22



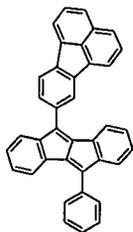
23



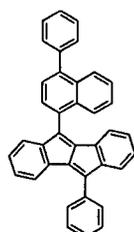
24



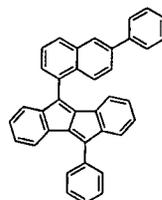
25



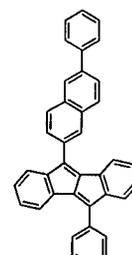
26



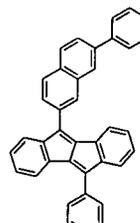
27



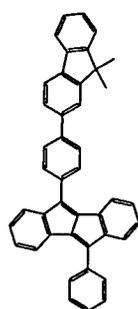
28



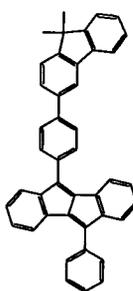
29



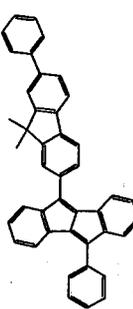
30



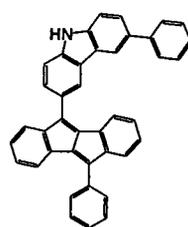
31



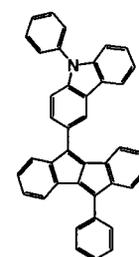
32



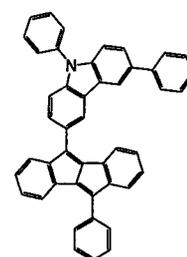
33



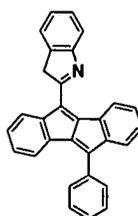
34



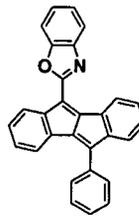
35



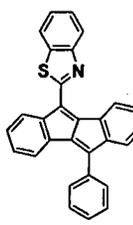
36



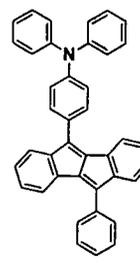
37



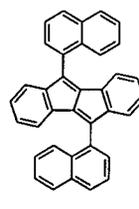
38



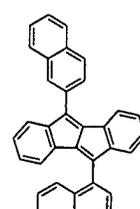
39



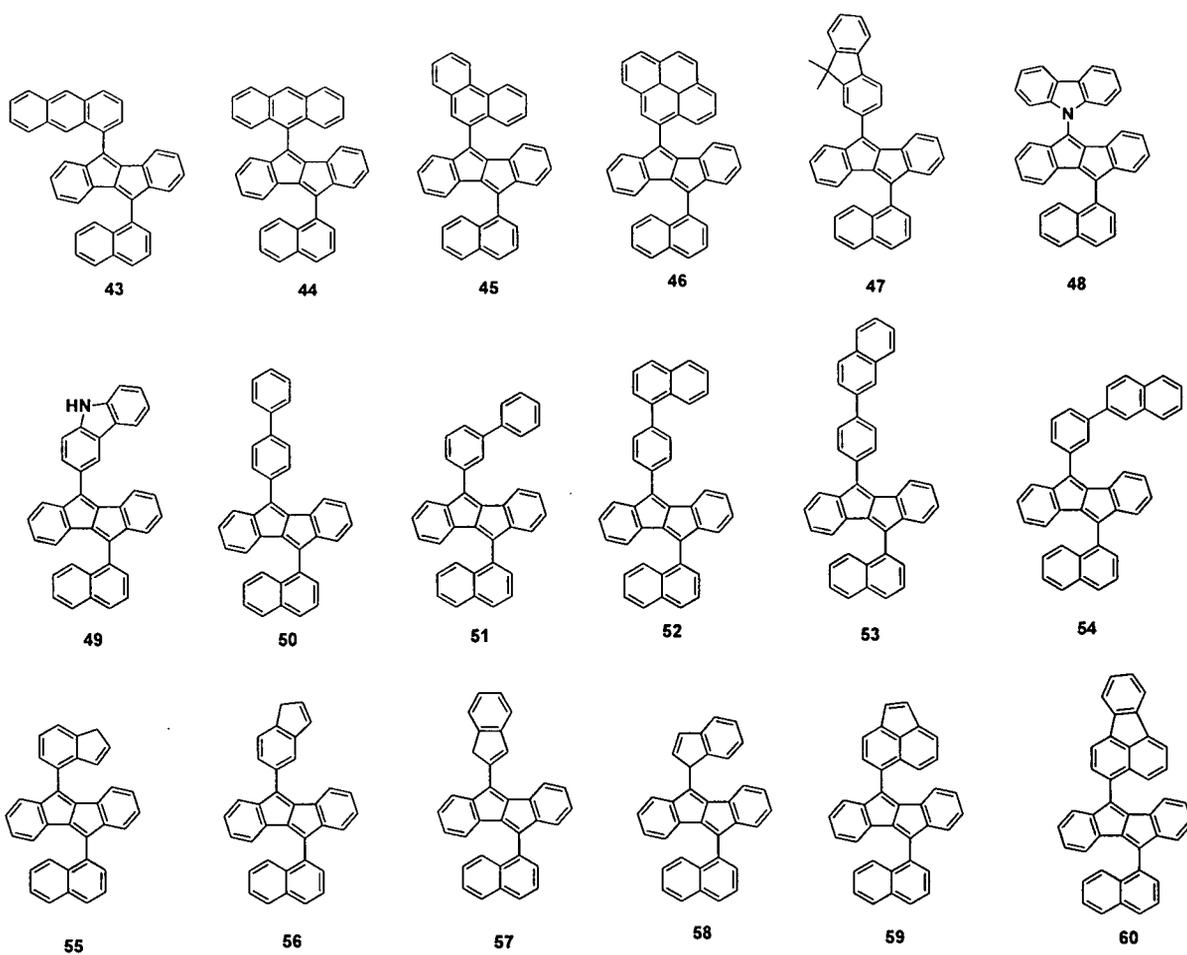
40

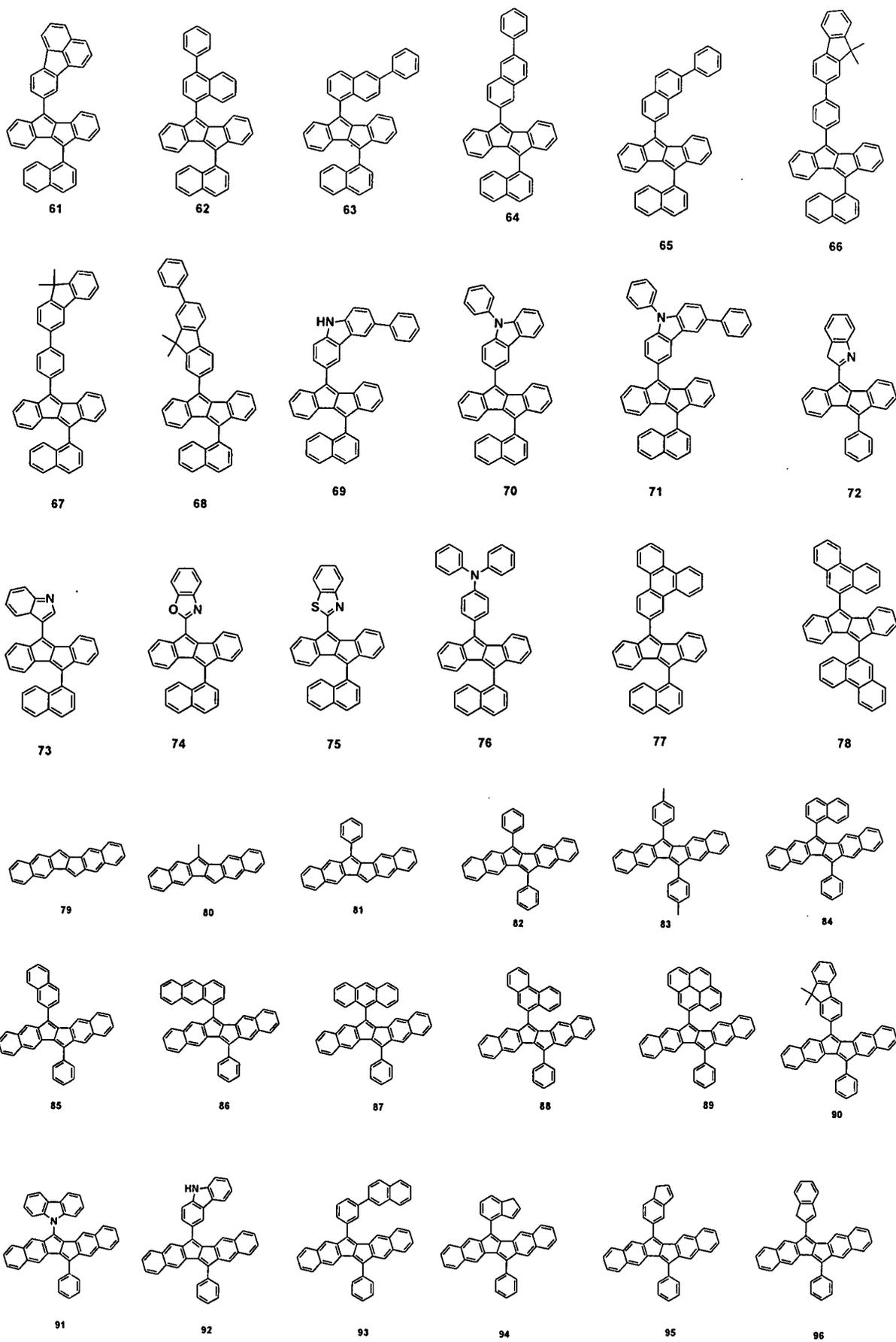


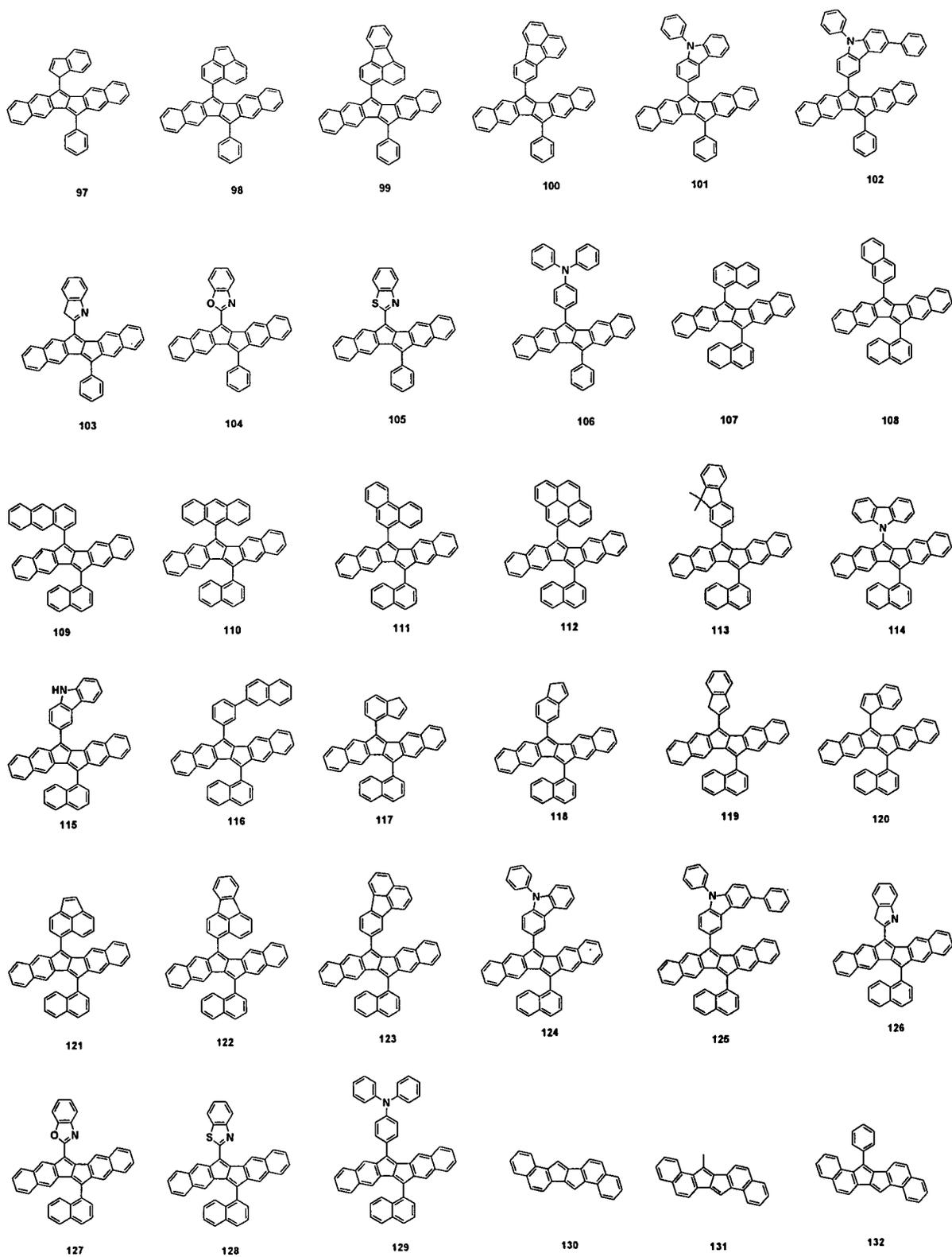
41

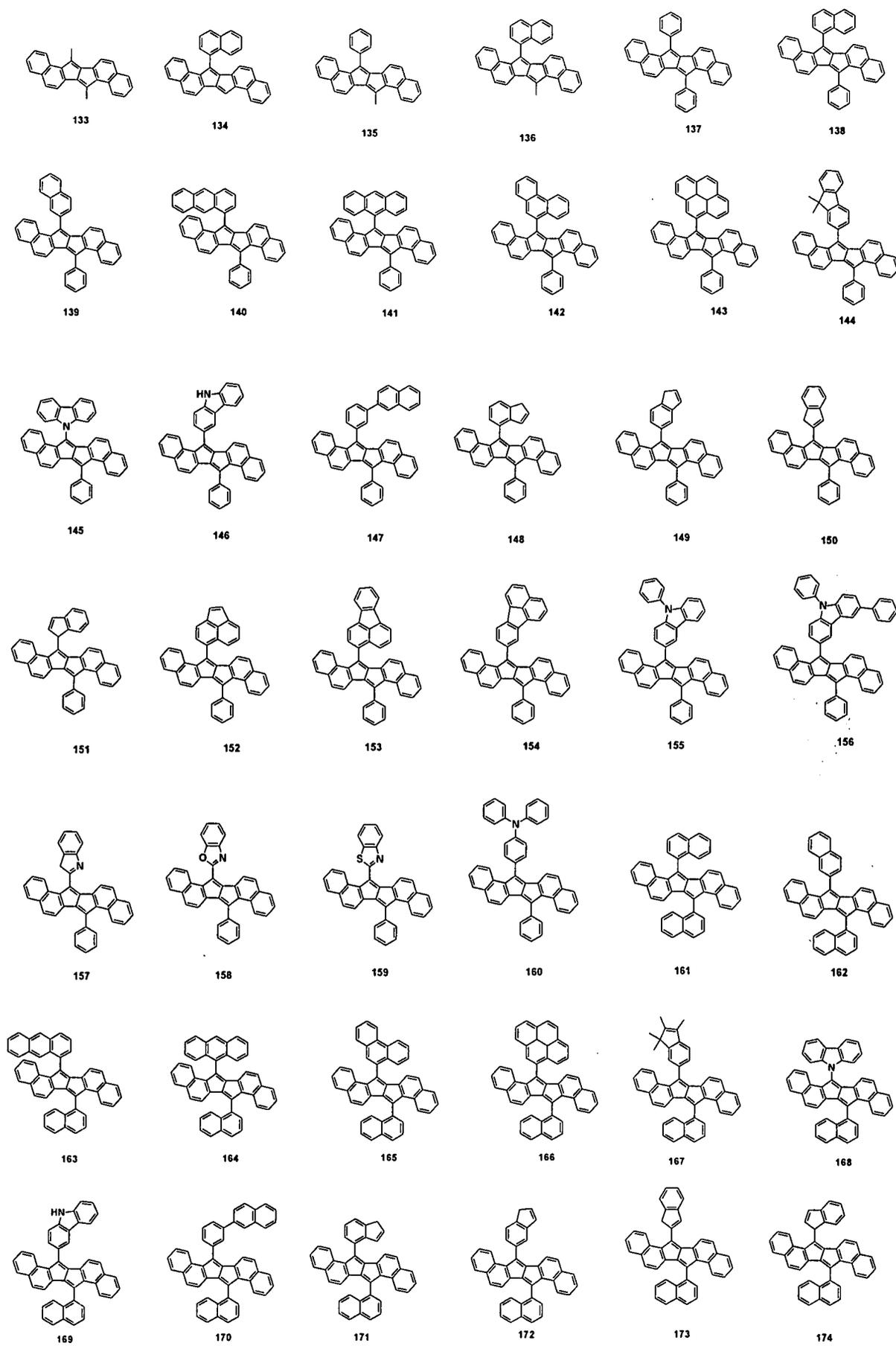


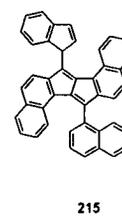
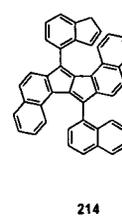
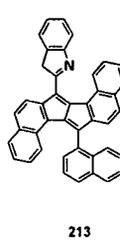
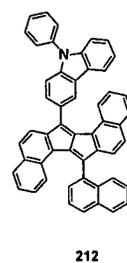
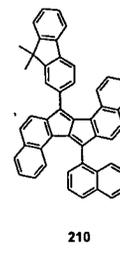
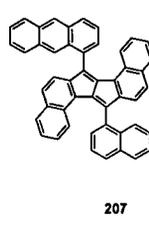
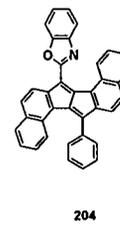
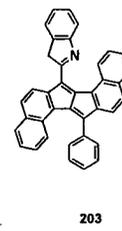
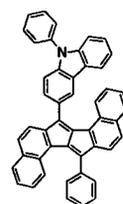
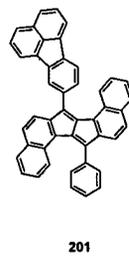
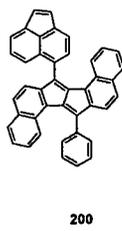
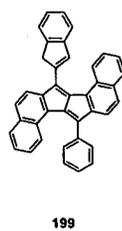
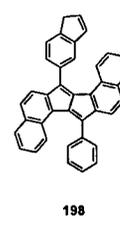
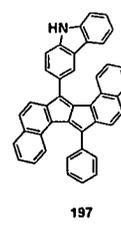
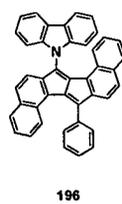
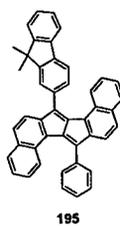
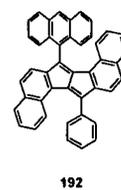
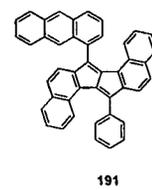
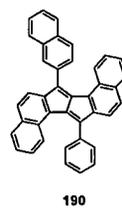
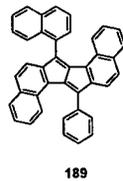
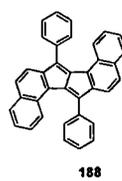
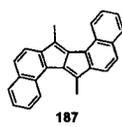
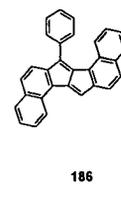
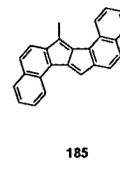
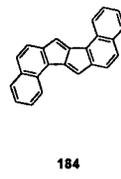
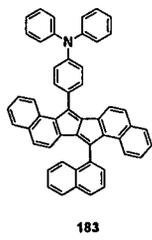
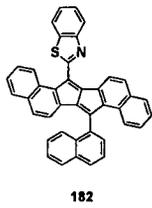
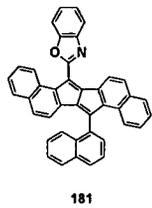
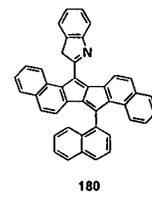
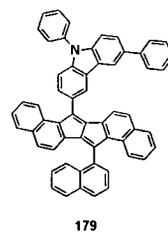
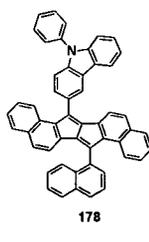
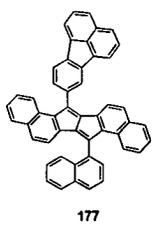
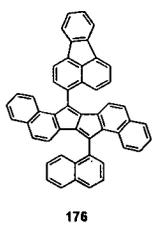
42

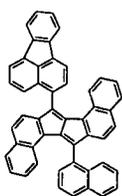




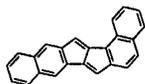




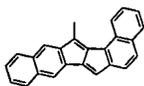




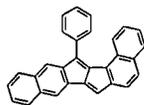
217



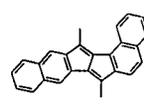
218



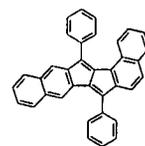
219



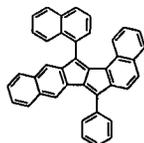
220



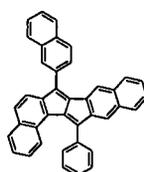
221



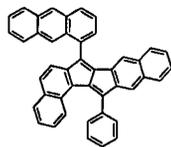
222



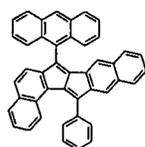
223



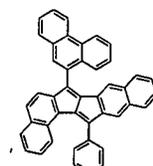
224



225



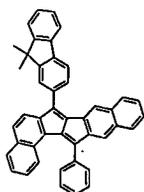
226



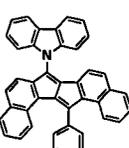
227



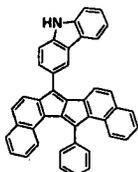
228



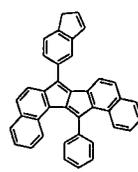
229



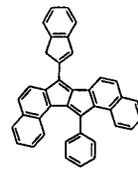
230



231



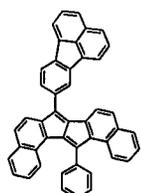
232



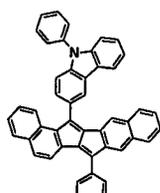
233



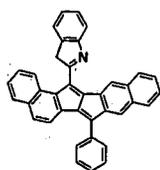
234



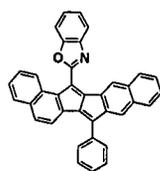
235



236



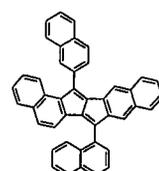
237



238



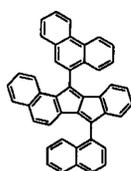
239



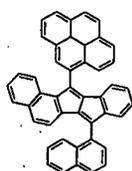
240



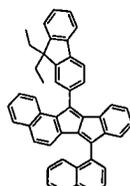
241



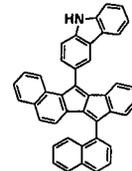
242



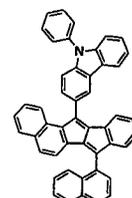
243



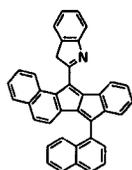
244



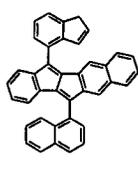
245



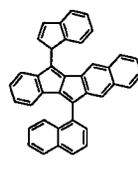
246



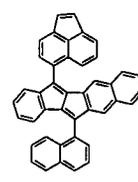
247



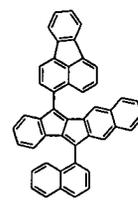
248



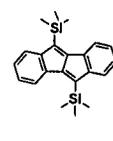
249



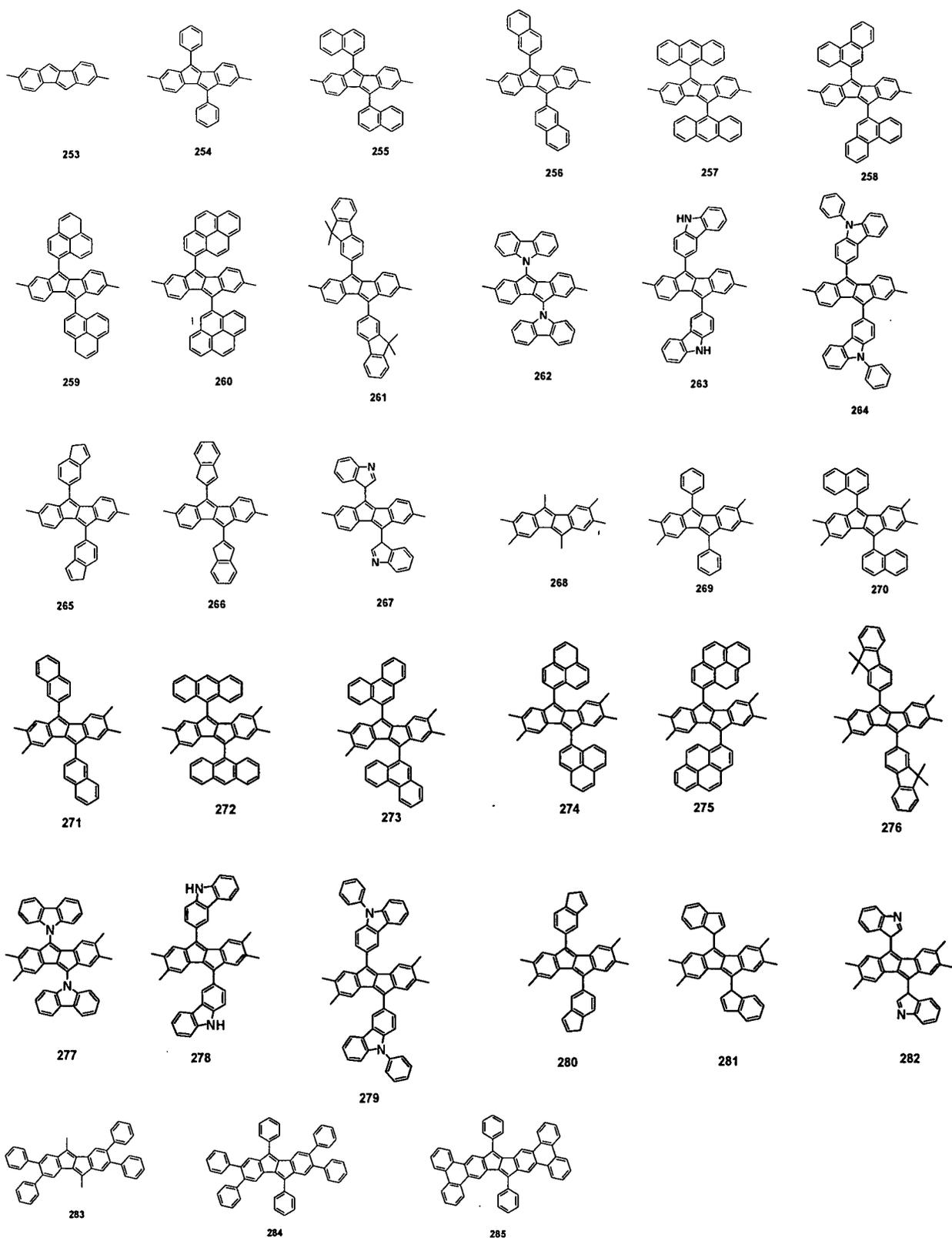
250



251



252



【0044】 參考後述製備例，可製備在本發明說明書中所述的化合物。

【0045】 本發明亦提供一種有機發光裝置，包括：一第一電極；一第二電極；以及一個以上有機材料層，其係設

置於該第一電極和該第二電極之間；其中，該一個以上有機材料層包含化學式 1 之化合物。

【0046】 如圖 1 至圖 3 所示為根據本發明實施例之有機發光裝置中電極及有機材料層之壓合順序。然而，這些圖式並非用於限制本發明之範圍，在本技術領域中已知的有機發光裝置結構亦可應用於本發明。

【0047】 根據圖 1，圖中所示之有機發光裝置中，在基板(100)上依序堆疊陽極(200)、有機材料層(300)及陰極(400)。然而，有機發光裝置之結構並非僅受限於此結構，又如圖 2 所示，有機發光裝置中可包含在基板上依序堆疊之陰極、有機材料層、及陽極。

【0048】 圖 3 顯示有機材料層為多層之情況。根據圖 3 之有機發光裝置，包含電洞注入層(301)、電洞轉移層(302)、發光層(303)、電子轉移層(304)、及電子注入層(305)。然而，本發明之範圍並未受限於此壓合結構，且若有需要，可不包含除了發光層以外的其他層，並可添加具有其他功能之其他必要層。

【0049】 除了在有機材料層之一或多層包含化學式 1 之化合物外，可利用本技術領域中已知的方法製備根據本發明之有機發光裝置。

【0050】 在有機發光裝置中，可單獨使用化學式 1 之化合物形成一層以上有機材料層。然而，若有需要，化學式 1 之化合物可與其他材料混合以形成有機材料層。

【0051】 可使用化學式 1 之化合物作為有機發光裝置中

的電洞注入材料、電洞轉移材料、發光材料、電子轉移材料、電子注入材料等。尤其是，可使用化學式 1 之化合物作為有機發光裝置中的發光材料，特別是作為發光層之主體(host)材料，且特別是作為磷光主體材料；在此情況下，可提供具有高效能和長使用壽命的有機發光裝置。根據一具體實施例，可使用化學式 1 之化合物作為藍色螢光主體材料。

【0052】 根據一實施例，化學式 1 之化合物尤其可作用為有機發光化合物，因此，包含化學式 1 之化合物之有機材料層係為發光層。

【0053】 根據另一實施例，化學式 1 之化合物可作用為發光主體材料，因此，包含化學式 1 之化合物之有機材料層更包含一發光摻質。

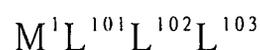
【0054】 根據另一實施例，包含化學式 1 之化合物之有機材料層更包含一螢光摻質。

【0055】 根據另一實施例，包含化學式 1 之化合物之有機材料層更包含一藍色螢光摻質。

【0056】 根據另一實施例，包含化學式 1 之化合物之有機材料層更包含一磷光摻質。

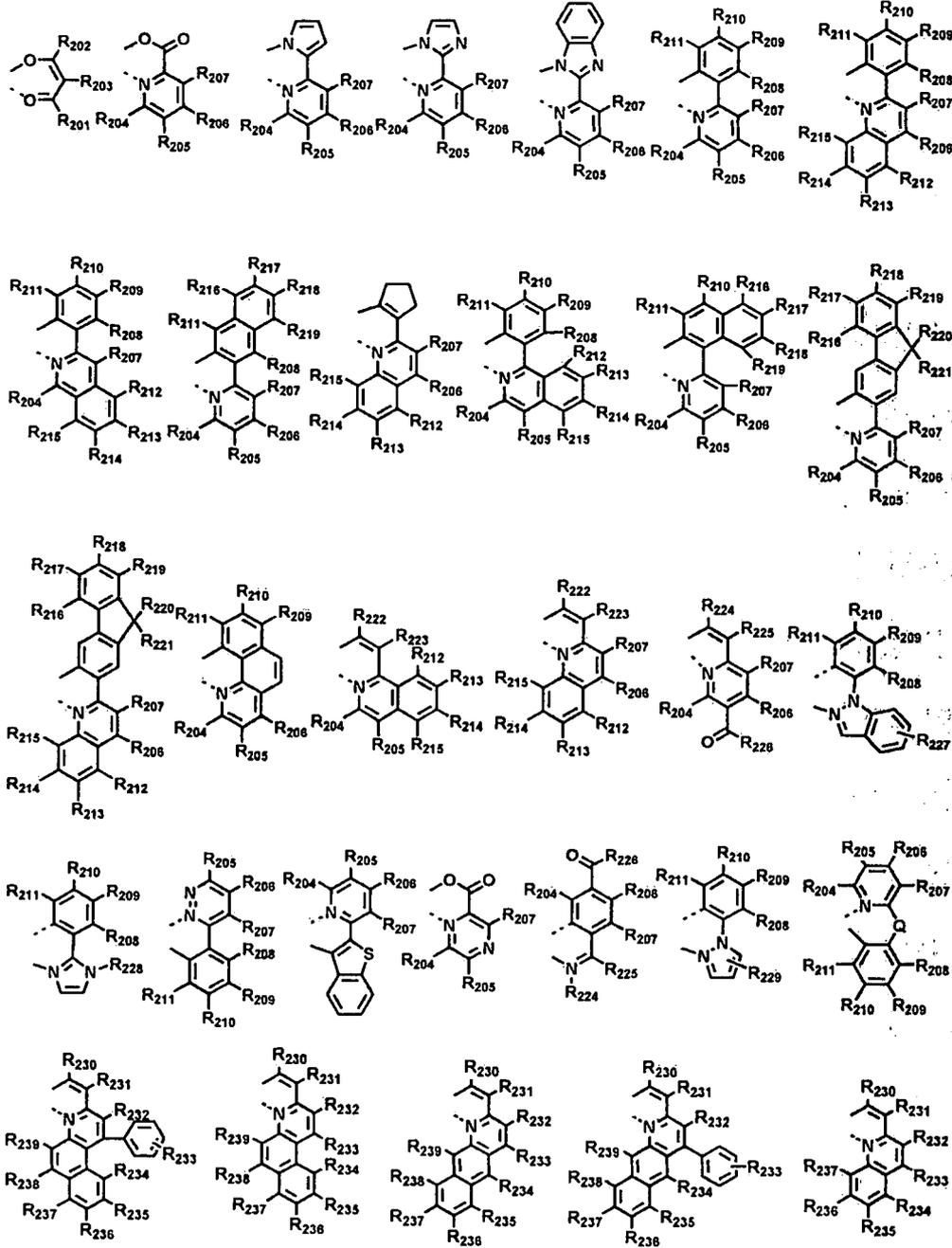
【0057】 應用於本發明之有機發光裝置之發光摻質並無特別限制，然而，可為以下化學式 10 所示之化合物。

【0058】 [化學式 10]



【0059】 其中， M^1 係選自由第 7 族、第 8 族、第 9 族、

第 10 族、第 11 族、第 13 族、第 14 族、第 15 族、及第 16 族金屬所組成之群組；且配體 L^{101} 、 L^{102} 及 L^{103} 係各自獨立選自以下結構。



【0060】 在化學式 10 中，

【0061】 R_{201} 至 R_{203} 係各自獨立為氫；氘； C_1 - C_{30} 烷基，其中係經鹵素取代或未經取代； C_6 - C_{30} 芳基，其中係經 C_1 - C_{30} 烷基取代或未經取代；或鹵素；

【0062】 R_{204} 至 R_{219} 係各自獨立為氫；氖；經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基；經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷氧基；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基；經取代或未經取代之 C_2 - C_{30} 烯基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基；經取代或未經取代之單或雙(C_1 - C_{30})烷胺基；經取代或未經取代之單或雙(C_6 - C_{30})芳胺基； SF_5 ；經取代或未經取代之三(C_1 - C_{30})烷基甲矽烷基；經取代或未經取代之雙(C_1 - C_{30})烷基(C_6 - C_{30})芳基甲矽烷基；經取代或未經取代之三(C_6 - C_{30})芳基甲矽烷基；氰基；或鹵素；

【0063】 R_{220} 至 R_{223} 係各自獨立為氫；氖； C_1 - C_{30} 烷基，其中係經鹵素取代或未經取代； C_6 - C_{30} 芳基，其中係經 C_1 - C_{30} 烷基取代或未經取代；

【0064】 R_{224} 及 R_{225} 係各自獨立為氫、氖、經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基、或鹵素；或者， R_{224} 及 R_{225} 可透過 C_3 - C_{12} 亞烷基或 C_3 - C_{12} 亞烯基而鍵結，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；

【0065】 R_{226} 為經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基、經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基、或鹵素；

【0066】 R_{227} 至 R_{229} 係各自獨立為氫、氖、經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基、或鹵素；

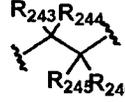
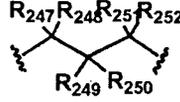
【0067】 R_{230} 至 R_{231} 係各自獨立為氫； C_1 - C_{20} 烷基，其中

係經鹵素取代或未經取代； C_6-C_{20} 芳基；鹵素；氰基；三(C_1-C_{20}) 烷基甲矽烷基；雙(C_1-C_{20}) 烷基(C_6-C_{20}) 芳基甲矽烷基；三(C_6-C_{20}) 芳基甲矽烷基； C_1-C_{20} 烷氧基； C_1-C_{20} 烷基羰基； C_6-C_{20} 芳基羰基；雙(C_1-C_{20}) 烷胺基或雙(C_6-C_{20}) 芳胺基；或者， R_{230} 及 R_{231} 可透過 C_3-C_{12} 亞烷基或 C_3-C_{12} 亞烯基而鍵結，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；

【0068】 在 R_{230} 及 R_{231} 中包含的烷基、芳基、或透過 C_3-C_{12} 亞烷基或 C_3-C_{12} 亞烯基鍵結而形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環，可更經由一個以上取代基取代，該取代基係選自由： C_1-C_{20} 烷基，其中係經鹵素取代或未經取代；鹵素；氰基；三(C_1-C_{20}) 烷基甲矽烷基；雙(C_1-C_{20}) 烷基(C_6-C_{20}) 芳基甲矽烷基；三(C_6-C_{20}) 芳基甲矽烷基； C_1-C_{20} 烷氧基； C_1-C_{20} 烷基羰基； C_6-C_{20} 芳基羰基；雙(C_1-C_{20}) 烷胺基；雙(C_6-C_{20}) 芳胺基；苯基；萘基；蔥基；苈基；或螺二苈基；或可更經由苯基或苈基取代，其中係經一個以上選自由下列群組之取代基取代： C_1-C_{20} 烷基，其中係經鹵素取代或未經取代；鹵素；氰基；三(C_1-C_{20}) 烷基甲矽烷基；雙(C_1-C_{20}) 烷基(C_6-C_{20}) 芳基甲矽烷基；三(C_6-C_{20}) 芳基甲矽烷基； C_1-C_{20} 烷氧基； C_1-C_{20} 烷基羰基； C_6-C_{20} 芳基羰基；雙(C_1-C_{20}) 烷胺基；雙(C_6-C_{20}) 芳胺基；苯基；萘基；蔥基；苈基；及螺二苈基；

【0069】 R_{232} 至 R_{239} 係各自獨立為氫； C_1-C_{20} 烷基，其中係經鹵素取代或未經取代； C_1-C_{20} 烷氧基； C_3-C_{12} 環烷基；

鹵素；氰基；C₆-C₂₀芳基；C₄-C₂₀雜芳基；三(C₁-C₂₀)烷基甲矽烷基；雙(C₁-C₂₀)烷基(C₆-C₂₀)芳基甲矽烷基或三(C₆-C₂₀)芳基甲矽烷基；以及

【0070】 Q 為 、 或 ，且 R₂₄₁ 至 R₂₅₂

係各自獨立為氫；C₁-C₆₀烷基，其中係經鹵素取代或未經取代；C₁-C₃₀烷氧基；鹵素；C₆-C₆₀芳基；氰基；C₅-C₆₀環烷基；或者，R₂₄₁ 至 R₂₅₂ 可透過亞烷基或亞烯基而鍵結至相鄰取代基，形成一 C₅-C₇ 螺環或一 C₅-C₉ 稠合環；或 R₂₄₁ 至 R₂₅₂ 可透過亞烷基或亞烯基而鍵結至 R₂₀₇ 或 R₂₀₈，形成一 C₅-C₇ 稠合環。

【0071】 M₁ 係選自由 Ir、Pt、Pd、Rh、Re、Os、Tl、Pb、Bi、In、Sn、Sb、Te、Au 及 Ag，且化學式 10 之化合物包含如韓國專利申請號 10-2009-0037519 所揭露者，但不限於此。

【0072】 在本發明之有機發光裝置中，包含化學式 1 化合物之有機材料層可更包含一個以上化合物係選自由芳胺系化合物或苯乙炔芳胺系化合物所組成之群組。芳胺系化合物或苯乙炔芳胺系化合物亦包含如韓國專利申請號 10-2008-0123276 或韓國專利申請號 10-2008-0107606 所揭露者，但不限於此。

【0073】 此外，本發明之有機發光裝置中，包含化學式 1 化合物之有機材料層可更包含一個以上金屬或錯合物係

選自由：第 1 族；第 2 族；第 4 週期及第 5 週期過渡金屬；
鑼系金屬；及 d-過渡原子之有機金屬所組成之群組。

【0074】 本發明之有機發光裝置可藉由更添加除了化學式 1 化合物以外之發藍光、紅光、或綠光之一種以上有機材料，而被製造為發白光的有機發光裝置。例如，可藉由在一有機材料層中包含兩種以上發光材料、或包含兩層以上發不同顏色光之發光層，以製造發白光的有機發光裝置。

【0075】 有機發光裝置可同時包含一發光層和一電荷產生層。

【0076】 根據本發明之有機發光裝置中，除了化學式 1 之化合物以外的材料係如下說明，然而，這些僅用於說明目的，而非用於限制本發明之範圍，且這些材料可更經由本技術領域中的已知材料所取代。

【0077】 作為陽極材料，可使用具有相對高功率的材料，且可使用透明導電氧化物、金屬、導電聚合物或類似者。

【0078】 作為陰極材料，可使用具有相對低功率的材料，且可使用金屬、金屬氧化物、導電聚合物或類似者。

【0079】 作為電洞轉移材料，可使用吡啶啉衍生物、芳胺系衍生物、芪衍生物、三苯二胺衍生物衍生物或類似者，且亦可使用低分子或高分子材料。

【0080】 作為發光材料，可使用發紅光、綠光或藍光的

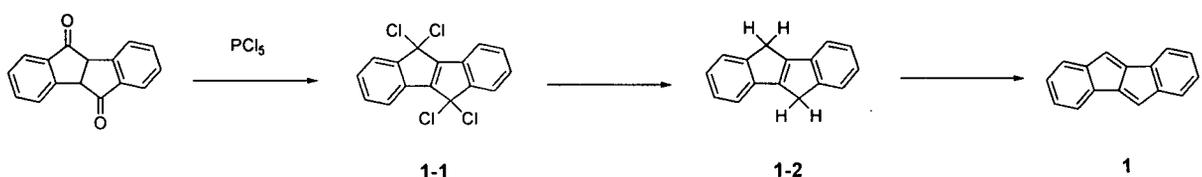
發光材料，且視需要，可混合兩種以上發光材料來使用。此外，作為發光材料，可使用螢光材料，但亦可使用磷光材料。作為發光材料，可使用藉由結合分別從陽極和陰極注入的電洞和電子而單獨發光的材料，然而，亦可使用主體材料和摻質材料共同參與發光的材料。

【0081】 作為電子轉移材料，可使用惡二唑衍生物、蔥醌二甲烷(anthraquinodimethane)及其衍生物、苯醌(benzoquinone)及其衍生物、萘醌(naphthoquinone)及其衍生物、蔥醌(anthraquinone)及其衍生物、四氰基蔥醌二甲烷(tetracyanoanthraquinodimethane)及其衍生物、芴衍生物、二苯基二氰基乙烯及其衍生物、聯苯醌(diphenoquinone)衍生物、8-羥基喹啉(8-hydroxyquinoline)及其衍生物之金屬錯合物等，且亦可使用高分子材料和低分子材料。

【0082】 作為電子注入材料，例如，在相關產業常用的LiF，然而，本發明並未受限於此。

【0083】 之後，為了詳細了解本發明，將參照本發明之代表性化合物來描述：根據本發明之有機發光化合物、其製備方法、及裝置的發光性質，然而，這僅用於說明實施例，本發明的範圍並非限制於這些化合物。

【0084】 [製備例 1]製備化合物 1



【0085】 製備化合物 1-1

【0086】 在燒瓶中置入 10 g (42.7 mmol)二苯並戊搭烯二酮(dibenzopentalenedione)及 22.5 g (108 mmol)五氯化磷(phosphorus pentachloride)之後，將燒瓶封口並加熱至有液體形成，然後加入過量的醋酸溶液，將其攪拌 48 小時，待反應完成後，用水過濾化合物，接著用水和二乙基醚提取該液體。將該溶液進行真空蒸餾，然後利用管柱分離並純化，產出 5.8 g (16.9 mmol)化合物 1-1。

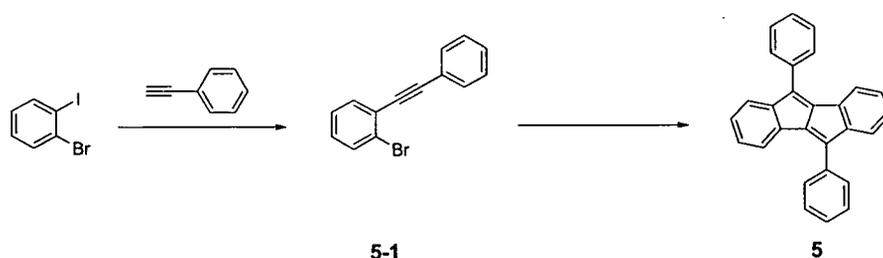
【0087】 製備化合物 1-2

【0088】 將 5g (14.6 mmol)化合物 1-1 溶於醋酸，然後在回流下加熱該混合物 4 小時，待反應完成後，用水和二乙基醚提取該產物，再用乙酸乙酯再結晶，產出 3g (14.6 mmol)化合物 1-2。

【0089】 製備化合物 1

【0090】 將 6g (29.4 mmol)化合物 1-2 和 0.12 ml(4.7 mmol)溴溶於 300 ml 二硫化碳，將該溶液在 0 度 C 下攪拌 12 小時。攪拌後，藉由真空蒸餾移除二硫化碳，再加入 19.6 g (117.5 mmol)硝酸銀，將該混合物溶於 250 ml 苯中，使其在回流下加熱 2 小時。待反應完成後，將該溶液進行真空蒸餾，然後利用管柱分離並純化，產出 2.8g (14.1 mmol)化合物 1。

【0091】 [製備例 2]製備化合物 5



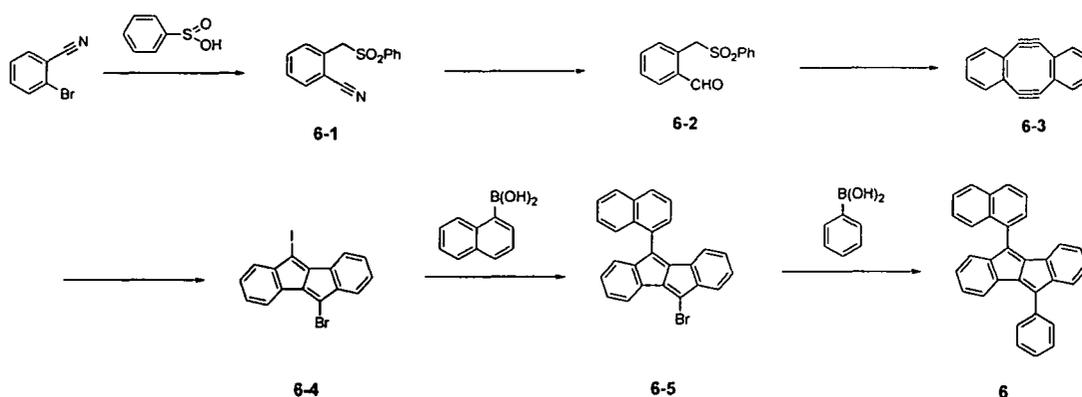
【0092】 製備化合物 5-1

【0093】 將 337 mg (1.77 mmol) CuI 及 744 mg (1.06 mmol) Pd(PPh₃)₂Cl₂ 溶於 150 ml 三乙基胺，形成一溶液，再依序加入 3.2 g (31.8 mmol) 苯乙炔和 10 g (35.3 mmol) 1-溴-2-碘代苯，將該混合物於室溫下攪拌 24 小時，待反應完成後，用氯化銨溶液清洗產物，再用乙酸乙酯提取。將該溶液進行真空蒸餾，然後利用管柱分離並純化，產出 9 g (35.0 mmol) 化合物 5-1。

【0094】 製備化合物 5

【0095】 將 4.3 g (39 mmol) 對苯二酚、12.67 g (38.9 mmol) Cs₂CO₃、5.9 g (38.9 mmol) CsF、0.12 g (0.59 mmol) P(t-Bu)₃ 及 0.27 g (0.29 mmol) Pd₂(dba)₃ 置入反應燒瓶之後，加入 5 g (19.45 mmol) 化合物 5-1 溶於 150 ml 1,4-二惡烷之溶液，在 120 度 C 下攪拌 24 小時。待反應完成後，將該反應溶液溶於甲苯而後提取，再利用硫酸鎂移除剩餘的水。將該溶液進行真空蒸餾，然後利用管柱分離並純化，產出 5.5 g (15.5 mmol) 化合物 5。

【0096】 [製備例 3] 製備化合物 6



【0097】 製備化合物 6-1

【0098】 將 15 g (82.4 mmol) 2-溴苯腈和 16.2 g (98.9 mmol) PhSOOH 溶於 100 ml DMF，在回流下以 80 度 C 加熱 2 小時。待反應完成後，用水和乙酸乙酯提取該產物，再將得到的溶液進行真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 18.0 g (70.0 mmol) 化合物 6-1。

【0099】 製備化合物 6-2

【0100】 將 15 g (58.3 mmol) 化合物 6-1、60 ml 之 1M DIBAL 溶液、及 45 ml 二氯甲烷依序置入反應燒瓶，再將該混合物於 -78 度 C 下攪拌 2 小時。然後加入過量的 1M 氯化銨溶液，再多攪拌 1 小時。待反應完成後，用二氯甲烷和鹽酸溶液提取該產物，再將得到的溶液進行真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 12.1 g (46.6 mmol) 化合物 6-2。

【0101】 製備化合物 6-3

【0102】 將 10 g (38.4 mmol) 化合物 6-2 及 7 ml (46 mmol) ClP(O)OEt₂ 溶於 125 ml THF 之後，將該混合物於 -78 度 C 下攪拌 15 分鐘。之後，將 75 ml 之 1M LiHMDS 溶液置於反應燒瓶中，將該產物於室溫下攪拌 2 小時。當反應燒

瓶的溫度再降至 -78 度 C 之後，加入 200 ml 之 1M DIBAL 溶液，再於室溫下攪拌 2 小時。待反應完成後，加入氯化銨溶液並立刻攪拌之，接著用二氯甲烷提取該產物，再將得到的液體進行真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 4.6 g (23 mmol) 化合物 6-3。

【0103】 製備化合物 6-4

【0104】 將 5 g (25 mmol) 化合物 6-3 和 4.7 g (27.4 mmol) IBr 溶於 150 ml 二氯甲烷，將該混合物於 -78 度 C 下攪拌 1 小時，待反應完成後，加入亞硫酸鈉溶液並立刻攪拌之。接著，利用有機溶劑提取該溶液，將得到的液體真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 6.3 g (15.4 mmol) 化合物 6-4。

【0105】 製備化合物 6-5

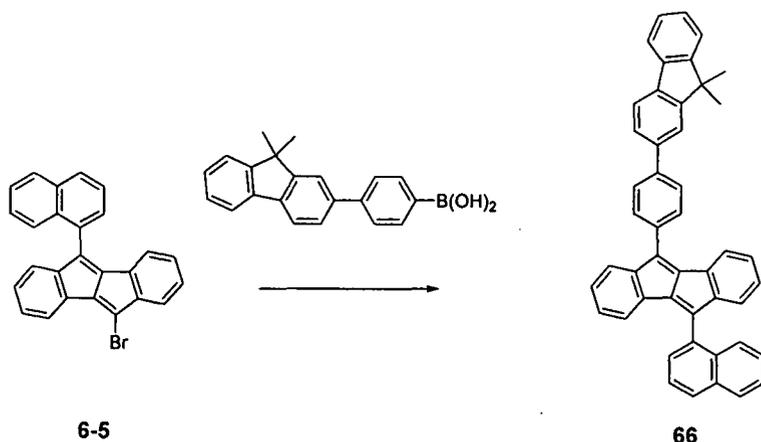
【0106】 將 5 g (12.2 mmol) 化合物 6-4、3.1 g (18.4 mmol) 之 1-萘基硼酸、1.4 g (1.2 mmol) Pd(PPh₃)₄、及 7.8 g (36.9 mmol) K₃PO₄ 溶於 37 ml 之 1,4-二惡烷及 13 ml 的水中之後，在回流下於 90 度 C 加熱該混合物 2 小時。待反應完成後，加入氯化銨溶液，利用有機溶劑提取該溶液，將得到的液體真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 4.3 g (10.4 mmol) 化合物 6-5。

【0107】 製備化合物 6

【0108】 將 6 g (14.7 mmol) 化合物 6-5、2.7 g (22.1 mmol) 苯基硼酸、1.7 g (1.5 mmol) Pd(PPh₃)₄ 及 9.4 g (44.2 mmol) K₃PO₄ 溶於 45 ml 之 1,4-二惡烷及 15 ml 的水中，於回流下於

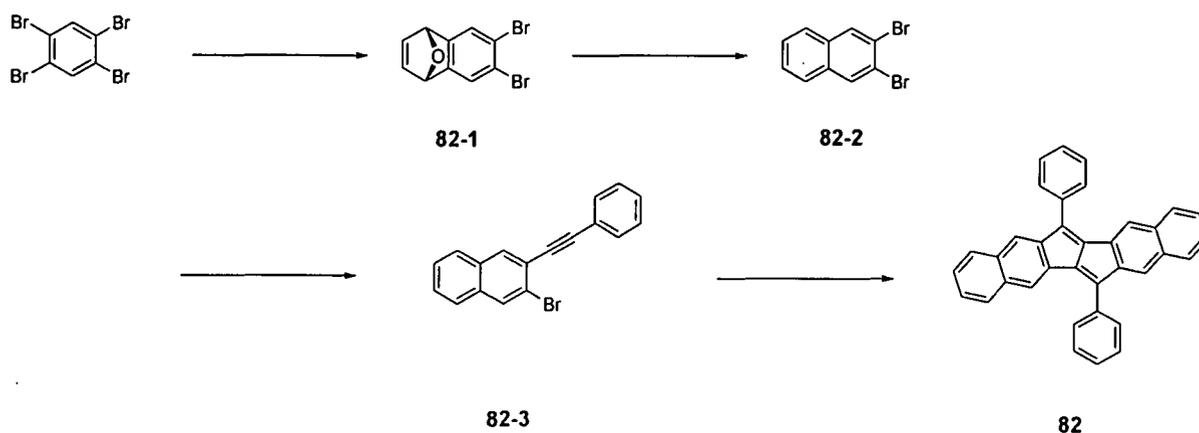
90 度 C 加熱該混合物 2 小時。待反應完成後，加入氯化銨溶液，利用有機溶劑提取該溶液，將得到的液體真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 5.4 g (13.3 mmol) 化合物 6。

【0109】 [製備例 4] 製備化合物 66



【0110】 將 5 g (12.2 mmol) 化合物 6-5、5.8 g (18.4 mmol) 苯基硼酸、1.4 g (1.2 mmol) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 及 7.8 g (36.9 mmol) K_3PO_4 溶於 37 ml 之 1,4-二惡烷及 13 ml 的水中，於回流下於 90 度 C 加熱該混合物 2 小時。待反應完成後，加入氯化銨溶液，利用有機溶劑提取該溶液，將得到的液體真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 5.5 g (9.2 mmol) 化合物 66。

【0111】 [製備例 5] 製備化合物 82



【0112】 製備化合物 82-1

【0113】 將 4 g (10 mmol)之 2,3,5,6-四溴苯和 5 ml (70 mmol)呋喃溶於 50 ml 之 THF 之後，於 -78 度 C 下添加 25 ml 之 0.5M n-BuLi 溶液，然後將其攪拌 18 小時。待反應完成後，加入少量甲醇，利用有機溶劑提取該產物，將得到的溶液真空蒸餾。將得到的固體利用己烷和甲醇再結晶，得到 2.0 g (6.5 mmol)化合物 82-1。

【0114】 製備化合物 82-2

【0115】 將 8.7 g (132 mmol)鋅粉和 8.7 ml (79 mmol)四氯化鈦溶於 200 ml 之 THF，將該混合物於回流下加熱 18 小時。將該混合物冷卻至室溫後，添加 4 g (13.2 mmol)化合物 82-1 溶於 THF 之溶液，然後將該產物於回流下加熱 18 小時。待反應完成後，加入鹽酸溶液，利用有機溶劑提取該產物，將得到的溶液真空蒸餾。利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 3.1 g (11.0 mmol)化合物 82-2。

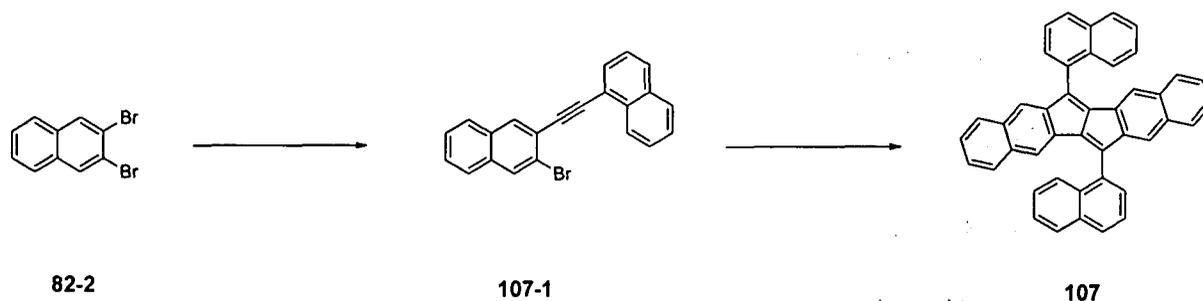
【0116】 製備化合物 82-3

【0117】 將 2 g (7.0 mmol)化合物 82-2、0.7 g (7.0 mmol) 苯乙炔、0.3 g (0.3 mmol)之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 及 4.5 g (21.0 mmol) CuI 依序置入反應燒瓶中，溶於 30 ml 三乙胺，且在回流下於 100 度加熱該混合物 18 小時。待反應完成後，加入鹽酸溶液，利用有機溶劑提取該產物，然後利用硫酸鈉移除剩餘的水。將該溶液真空蒸餾之後，利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 1.0 g (3.3 mmol)化合物 82-3。

【0118】 製備化合物 82

【0119】 將 5.5 g (18.0 mmol) 化合物 82-3、5.9 g (9.0 mmol) $\text{Ni}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 及 1.8 g (26.9 mmol) 鋅粉依序置入反應燒瓶中，溶於 80 ml 四氫呋喃和 20 ml 二乙基醚，且在回流下於 80 度 C 加熱該混合物 24 小時。待反應完成後，利用有機溶劑提取該產物，將得到的溶液真空蒸餾，利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 1.5 g (3.2 mmol) 化合物 82。

【0120】 [製備例 6] 製備化合物 107



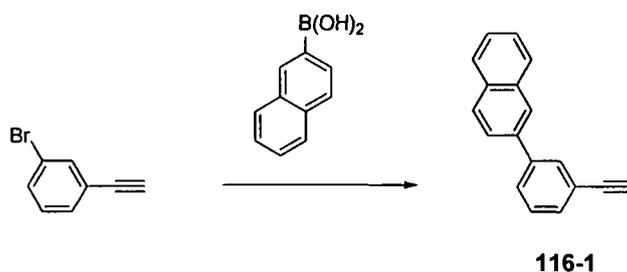
【0121】 製備化合物 107-1

【0122】 將 4 g (14.0 mmol) 化合物 82-2、2.1 g (14.0 mmol) 苯乙炔、0.5 g (0.7 mmol) 之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 及 8.9 g (42.0 mmol) 之 CuI 依序置入反應燒瓶，溶於 60 ml 三乙基胺，在回流下於 100 度 C 加熱該混合物 18 小時。待反應完成後，加入鹽酸溶液，利用有機溶劑提取該產物，然後利用硫酸鈉移除剩餘的水。將該溶液真空蒸餾之後，利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 2.1 g (5.9 mmol) 化合物 107-1。

【0123】 製備化合物 107

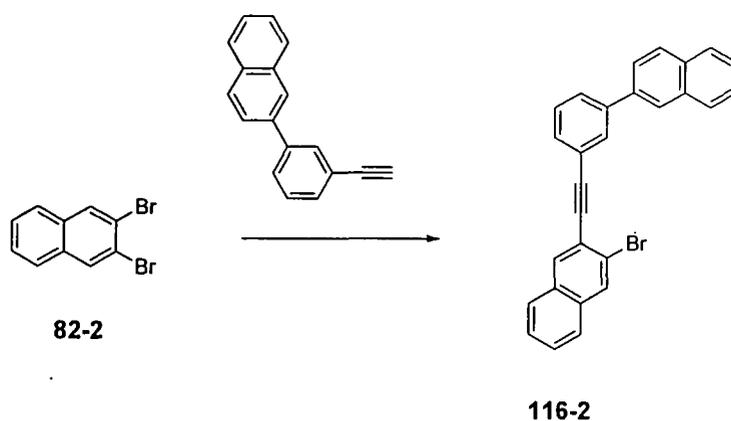
【0124】 將 4 g (11.2 mmol) 化合物 107-1、3.7 g (5.6 mmol)之 $\text{Ni}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 及 1.1 g (16.8 mmol) 鋅粉依序置入反應燒瓶中，溶於 48 ml 四氫呋喃及 12 ml 二乙基醚，且在回流下於 80 度 C 加熱該混合物 24 小時。待反應完成後，利用有機溶劑提取該產物，將得到的溶液真空蒸餾，利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 683 mg (1.2 mmol) 化合物 107。

【0125】 [製備例 7] 製備化合物 116



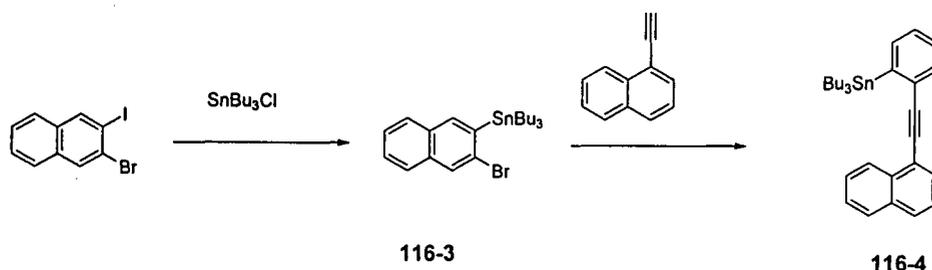
【0126】 製備化合物 116-1

【0127】 將 10 g (55.2 mmol) 3-溴代苯乙炔、14.3 g (82.9 mmol)之 2-萘基硼酸、6.4 g (5.5 mmol)之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 及 35.2 g (165 mmol)之 K_3PO_4 溶於 150 ml 之 1,4-二惡烷和 50 ml 的水中，在回流下於 90 度 C 加熱該混合物 2 小時。待反應完成後，加入氯化銨溶液，利用有機溶劑提取該溶液，將得到的液體真空蒸餾，利用管柱將得到的固體進行分離並純化，產出 10.2 g (44.7 mmol) 化合物 116-1。



【0128】 製備化合物 116-2

【0129】 將 417 mg (2.2 mmol)之 CuI 及 922 mg (1.3 mmol) 之 Pd(PPh₃)₂Cl₂ 溶於 400 ml 三乙基胺，再依序加入 10 g (43.8 mmol)化合物 116-1 和 12.5 g (43.8 mmol)化合物 82-2，將該混合物於室溫下攪拌 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 9 g (43.4 mmol)化合物 116-2。



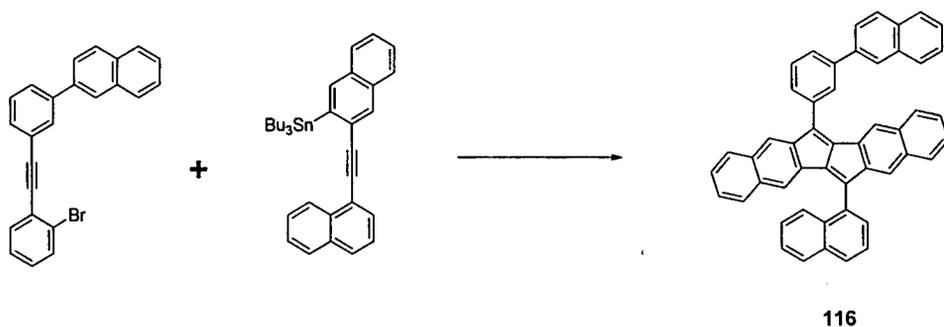
【0130】 製備化合物 116-3

【0131】 將 8 g (24.0 mmol) 2-溴-3-碘化萘溶於 12 ml 四氫呋喃中，當溶液溫度降至 -78 度 C 之後，加入 2.5M n-BuLi 溶液，然後攪拌該混合物 40 分鐘。當該反應燒瓶回溫至室溫之後，加入 8.6 g (26.4 mmol) SnBu₃Cl，並攪拌該產物 18 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗產物，然後利用有機溶劑提取該產物，利用硫酸鎂移除剩餘的水，將該溶

液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 11.9 g (24.0 mmol) 化合物 116-3。

【0132】 製備化合物 116-4

【0133】 將 38 mg (0.1 mmol) 之 CuI 及 85 mg (0.1 mmol) 之 Pd(PPh₃)₂Cl₂ 溶於 20 ml 三乙基胺，依序加入 2 g (4.0 mmol) 化合物 116-3 和 0.6 g (4.0 mmol) 1-乙炔基萘，於室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 2.2 g (3.9 mmol) 化合物 116-4。

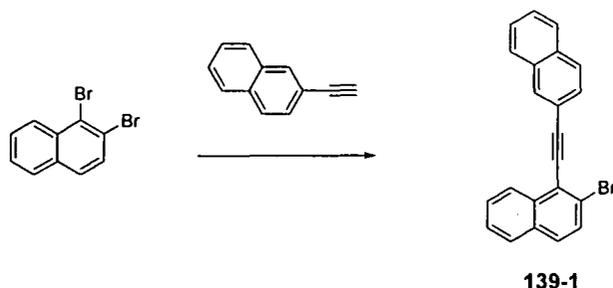


【0134】 製備化合物 116

【0135】 將 1.1 g (9.7 mmol) 對苯二酚、3.2 g (9.7 mmol) 之 Cs₂CO₃、1.5 g (9.7 mmol) 之 CsF、0.03 g (0.15 mmol) 之 P(t-Bu)₃ 及 0.07 g (0.07 mmol) 之 Pd₂(dba)₃ 置入反應燒瓶，加入 2.1 g (4.8 mmol) 化合物 116-2 和 3 g (5.3 mmol) 化合物 116-4 溶於 75 ml 之 1,4-二惡烷之溶液，在 150 度 C 下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，將反應溶液溶於甲苯後提取，再利用硫酸鎂移除剩餘的水。將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.2 g (1.8 mmol) 化合物 116。

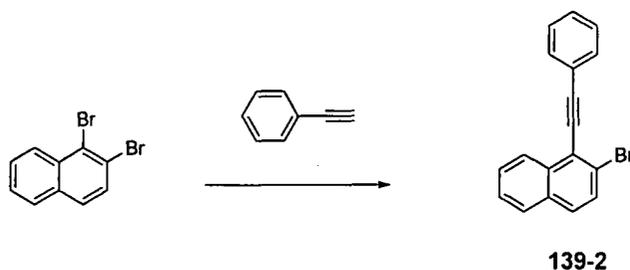
【0136】 [製備例 8] 製備化合物 139

【0137】 製備化合物 139-1



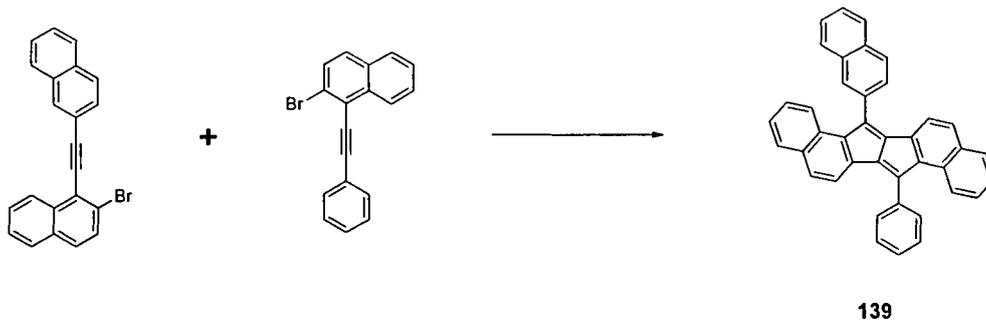
【0138】 將 0.17 g (0.9 mmol)之 CuI 及 0.37 g (0.5 mmol) 之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 溶於 400 ml 三乙基胺，再依序加入 5 g (17.5 mmol)之 1,2-二溴萘(1,2-dibromonaphthalene)及 2.7 g (17.5 mmol)之 2-乙炔基萘，將該混合物於室溫下攪拌 24 小時。待反應完成後，利用氯化銨溶液清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 3 g (8.4 mmol)化合物 139-1。

【0139】 製備化合物 139-2



【0140】 將 0.17 g (0.9 mmol)之 CuI 和 0.37 g (0.5 mmol) 之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 溶於 400 ml 三乙基胺，再依序加入 5 g (17.5 mmol)之 1,2-二溴萘及 1.8 g (17.5 mmol)苯乙炔，然後在室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 2.3 g (7.3 mmol)化合物 139-2。

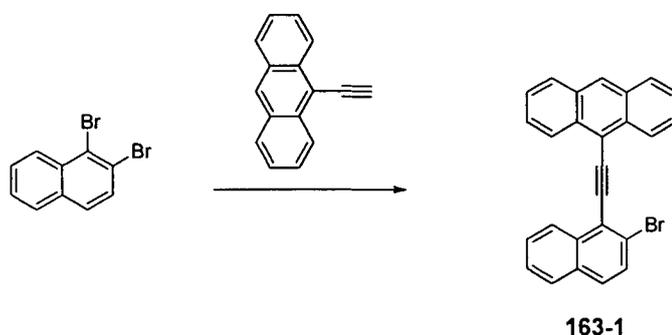
【0141】 製備化合物 139



【0142】 將 1.3 g (11.8 mmol)對苯二酚、3.8 g (11.8 mmol) Cs₂CO₃、1.8 g (11.8 mmol)之 CsF、0.03 g (0.17 mmol)之 P(t-Bu)₃ 及 0.08 g (0.09 mmol)之 Pd₂(dba)₃ 置入反應燒瓶，然後加入 2 g (4.8 mmol)化合物 139-1 及 2 g (5.3 mmol)化合物 139-2 溶於 60 ml 之 1,4-二惡烷之溶液，將該混合物於 150 度 C 下攪拌 24 小時。待反應完成後，將反應溶液溶於甲苯後提取，在利用硫酸鎂移除剩餘的水。將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.5 g (3.0 mmol)化合物 139。

【0143】 [製備例 9]製備化合物 163

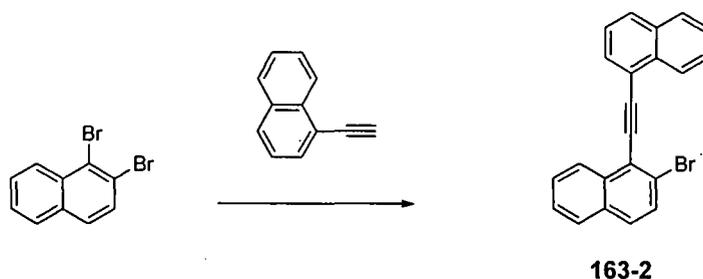
【0144】 製備化合物 163-1



【0145】 將 0.17 g (0.9 mmol)之 CuI 及 0.37 g (0.5 mmol) 之 Pd(PPh₃)₂Cl₂ 溶於 400 ml 三乙基胺，再依序加入 5 g (17.5 mmol)之 1,2-二溴萘和 3.5 g (17.5 mmol)之 9-乙炔基蒽，於室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液

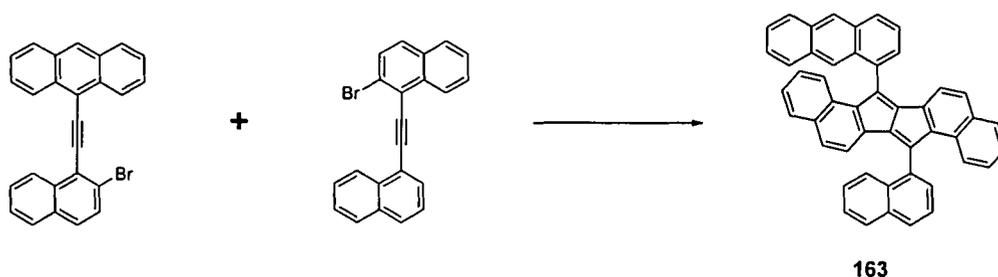
清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 2.8 g (6.8 mmol) 化合物 163-1。

【0146】 製備化合物 163-2



【0147】 將 0.17 g (0.9 mmol) 之 CuI 和 0.37 g (0.5 mmol) 之 Pd(PPh₃)₂Cl₂ 溶於 400 ml 三乙基胺，再依序加入 5 g (17.5 mmol) 之 1,2-二溴萘和 2.7 g (17.5 mmol) 之 1-乙炔萘，於室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 2.9 g (8.2 mmol) 化合物 163-2。

【0148】 製備化合物 163

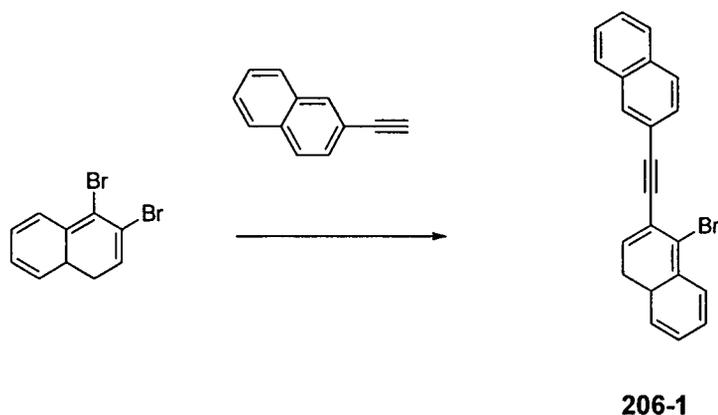


【0149】 將 1.7 g (15.2 mmol) 對苯二酚、5.0 g (15.2 mmol) 之 Cs₂CO₃、2.3 g (15.2 mmol) 之 CsF、0.05 g (0.23 mmol) 之 P(t-Bu)₃ 及 0.10 g (0.11 mmol) 之 Pd₂(dba)₃ 置入反應燒瓶，再加入 3.1 g (7.6 mmol) 化合物 163-1 和 3 g (8.4 mmol) 化合物

163-2 溶於 100 ml 之 1,4-二惡烷之溶液，將該混合物於 150 度 C 下攪拌 24 小時。待反應完成後，將反應溶液溶於甲苯後提取，再利用硫酸鎂移除剩餘的水。將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.8 g (3.0 mmol) 化合物 163。

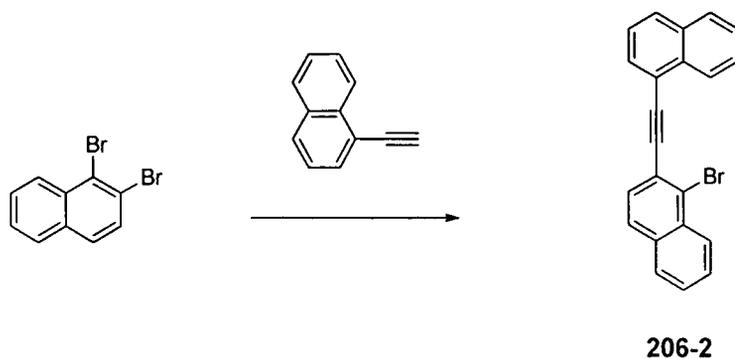
【0150】 [製備例 10] 製備化合物 206

【0151】 製備化合物 206-1



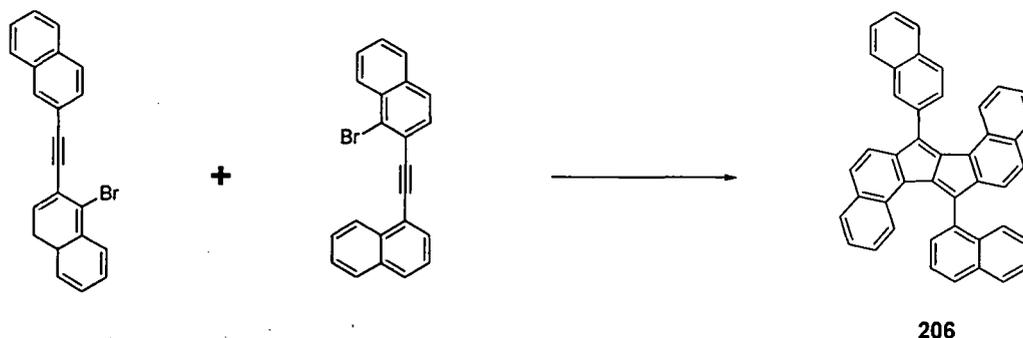
【0152】 將 0.1 g (0.5 mmol) 之 CuI 及 0.22 g (0.3 mmol) 之 Pd(PPh₃)₂Cl₂ 溶於 200 ml 三乙基胺，再依序加入 3 g (10.5 mmol) 之 1,2-二溴萘和 1.6 g (10.5 mmol) 之 2-乙炔萘，且在室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.6 g (4.5 mmol) 化合物 206-1。

【0153】 製備化合物 206-2



【0154】 將 0.1 g (0.5 mmol)之 CuI 和 0.22 g (0.3 mmol) 之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 溶於 200 ml 三乙基胺，再依序加入 3 g (10.5 mmol)之 1,2-二溴萘和 1.6 g (10.5 mmol)之 1-乙炔萘，然後於室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.2 g (3.3 mmol)化合物 206-2。

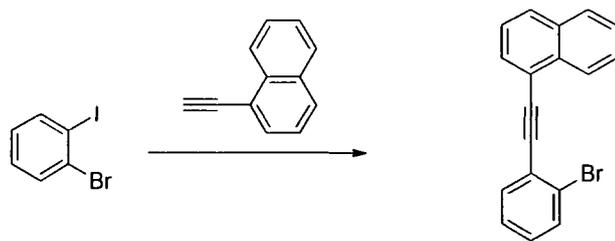
【0155】 製備化合物 206



【0156】 將 1.1 g (10.1 mmol)對苯二酚、3.3 g (10.1 mmol) 之 Cs_2CO_3 、1.5 g (10.1 mmol)之 CsF 、0.04 g (0.2 mmol)之 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 和 0.07 g (0.08 mmol)之 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 置入反應燒瓶中，而加入 1.8 g (5.0 mmol)化合物 206-1 和 2 g (5.5 mmol)化合物 206-2 溶於 100 ml 之 1,4-二惡烷之溶液之後，將該混合物於 150 度 C 下攪拌 24 小時。待反應完成後，將反應溶液溶於甲苯後提取，再利用硫酸鎂移除剩餘的水。將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.1 g (2.0 mmol)化合物 206。

【0157】 [製備例 11]製備化合物 244

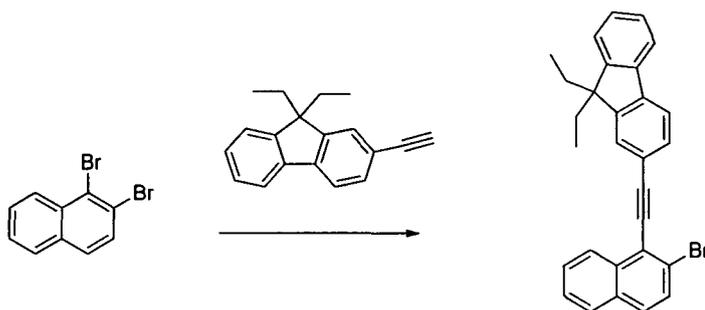
【0158】 製備化合物 244-1



244-1

【0159】 將 0.07 g (0.4 mmol)之 CuI 和 0.15 g (0.2 mmol) 之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 溶於 60 ml 三乙基胺，再依序加入 2 g (7.0 mmol)之 1-溴-2-碘化苯和 1.1 g (7.0 mmol)之 1-乙炔萘，然後在室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.7 g (5.6 mmol) 化合物 244-1。

【0160】 製備化合物 244-2

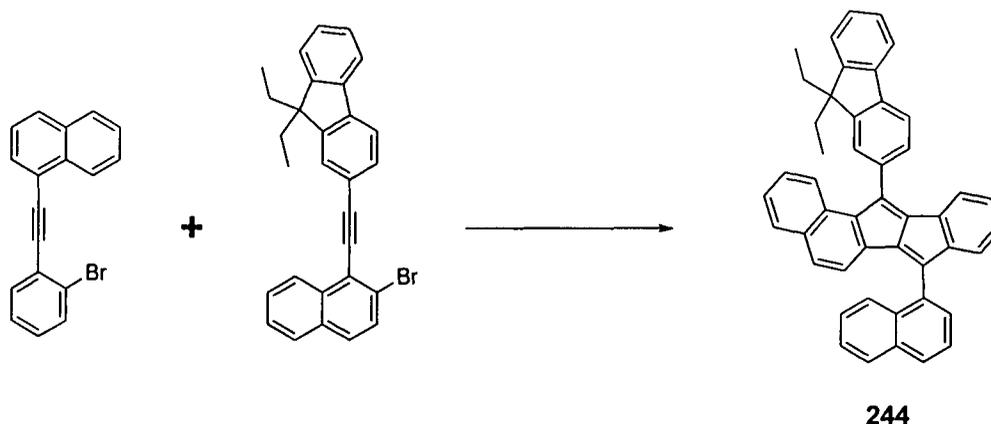


244-2

【0161】 將 0.07 g (0.4 mmol)之 CuI 和 0.15 g (0.2 mmol) 之 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ 溶於 80 ml 三乙基胺，再依序加入 2 g (7.0 mmol)之 1,2-二溴萘和 1.7 g (7.0 mmol)之 9,9-二乙基-2-乙炔基-9H-芴，在室溫下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，以氯化銨溶液清洗該產物，然後利用乙酸乙酯提取該產物，將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.1 g (2.5

mmol)化合物 244-2。

【0162】 製備化合物 244



【0163】 將 1.3 g (11.2 mmol)對苯二酚、3.8 g (11.2 mmol)之 Cs_2CO_3 、1.8 g (11.2 mmol)之 CsF 、0.04 g (0.18 mmol)之 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 和 0.08 g (0.09 mmol)之 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 置入反應燒瓶中，然後加入 1.8 g (5.9 mmol)化合物 244-1 和 2.9 g (6.4 mmol)化合物 244-2 溶於 60 ml 之 1,4-二惡烷之溶液，在 150 度 C 下攪拌該混合物 24 小時。待反應完成後，將反應溶液溶於甲苯後提取，再利用硫酸鎂移除剩餘的水。將該溶液真空蒸餾，利用管柱分離並純化，產出 1.5 g (2.6 mmol)化合物 244。

【0164】 此外，化學式 1 至 6 所示之各種化合物可藉由以選自下列群組之任一種、兩種、或多種混合物而利用已知方法引入各種取代基來合成：2,4-二氯吡啶[2,3-d]嘧啶(由 OChem Incorporation 製造)、2-氯-吡啶[3,2-d]嘧啶(由 Anichem LLC 製造)、吡啶[4,3-d]嘧啶-4(3H)-酮(由 Aces Pharma, Inc. 製造)、2-氯-6,7-二甲基-喋啶(由 International Laboratory Limited 製造)、2-氯喋啶(由 Princeton BioMolecular Research,

Inc.製造)、3-氯喹啉(由 Texas Biochemicals Inc.製造)、2,4-二氯喹啉(由 Shanghai PI Chemicals Ltd 製造)、2,3-二氯喹啉(由 Aces Pharma, Inc.製造)、1-氯異喹啉(由 Alfa Aesar, China Ltd.製造)、1,3-二氯異喹啉(由 Aalen Chemical Co. Ltd.製造)及 1,4-二氯異喹啉(由 Bepfarm Ltd 製造)。

【0165】 利用製備例 1 至 11 之方法，製備出化合物 1 至化合物 285，且該些所製備的化合物之 ^1H NMR 和 MS/FAB 係如表 1 所示。

【0166】 [表 1]

化合物	^1H NMR(CDCl_3 , 200MHz)	MS/FAB	
		發現值	計算值
1	$\delta=8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d})$	202.25	202.08
3	$\delta=8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 2.34(6\text{H}, \text{s})$	230.30	230.11
5	$\delta=7.68(4\text{H}, \text{d}), 7.54(4\text{H}, \text{t}), 7.47(2\text{H}, \text{t}), 7.21(2\text{H}, \text{d}), 7.03(2\text{H}, \text{d}), 6.92(2\text{H}, \text{t}), 6.85(2\text{H}, \text{t})$	354.14	354.14
6	$\delta=8.55(1\text{H}, \text{d}), 8.42(5\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 8.08(1\text{H}, \text{d}), 8.04(1\text{H}, \text{d}), 7.61(1\text{H}, \text{t}), 7.55(2\text{H}, \text{d}), 7.52(2\text{H}, \text{d}), 7.51(2\text{H}, \text{t}), 7.41(1\text{H}, \text{t})$	404.50	404.16
10	$\delta=8.93(2\text{H}, \text{d}), 8.55(1\text{H}, \text{d}), 8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.12(2\text{H}, \text{t}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 7.93(1\text{H}, \text{d}), 7.88\sim 7.82(4\text{H}, \text{m}), 7.52(2\text{H}, \text{d}), 7.51(2\text{H}, \text{t}), 7.41(1\text{H}, \text{t})$	454.56	454.17
13	$\delta=8.55(1\text{H}, \text{d}), 8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.12(1\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 7.94(1\text{H}, \text{d}), 7.63\sim 7.25(10\text{H}, \text{m})$	443.54	443.17
16	$\delta=8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 7.70(1\text{H}, \text{s}), 7.57(1\text{H}, \text{t}), 7.52(4\text{H}, \text{d}), 7.51(4\text{H}, \text{t}), 7.48(2\text{H}, \text{d}), 7.41(2\text{H}, \text{t})$	430.54	430.17
19	$\delta=8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 8.00(2\text{H}, \text{d}), 7.92(1\text{H}, \text{d}), 7.73\sim 7.48(12\text{H}, \text{m}), 7.41(1\text{H}, \text{t})$	480.60	480.19
21	$\delta=8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 7.83(1\text{H}, \text{s}), 7.52(4\text{H}, \text{d}), 7.51(4\text{H}, \text{t}), 7.41(2\text{H}, \text{t}), 7.21(2\text{H}, \text{d}), 6.58(1\text{H}, \text{d}), 6.39(1\text{H}, \text{ds}), 3.22(1\text{H}, \text{d}),$	392.49	392.16
24	$\delta=8.42(5\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 7.96(1\text{H}, \text{t}), 7.90(1\text{H}, \text{d}), 7.80(1\text{H}, \text{d}), 7.58(1\text{H}, \text{t}), 7.52(2\text{H}, \text{d}), 7.51(2\text{H}, \text{t}), 7.41(1\text{H}, \text{t}), 7.15(2\text{H}, \text{s})$	428.52	428.16
27	$\delta=8.55(2\text{H}, \text{d}), 8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 8.01(2\text{H}, \text{s}), 7.55(2\text{H}, \text{d}), 7.52(2\text{H}, \text{d}), 7.51(4\text{H}, \text{t}), 7.49(2\text{H}, \text{d}), 7.41(2\text{H}, \text{t})$	480.60	480.19
	$\delta=8.42(4\text{H}, \text{d}), 8.10(4\text{H}, \text{d}), 7.92(2\text{H}, \text{d}), 7.73(2\text{H}, \text{d}), 7.58(2\text{H},$	480.60	480.19

30	s), 7.52(4H, d), 7.51(4H, t), 7.41(2H, t)		
32	δ =8.42(4H, d), 8.10(4H, d), 8.06(1H, s), 7.87~7.53(4H, m), 7.52(4H, d), 7.51(4H, t), 7.41(2H, t), 7.38~7.28(4H, s), 1.72(6H, s)	546.70	546.23
35	δ =8.55(1H, d), 8.42(4H, d), 8.10(4H, d), 7.98~7.69(4H, m), 7.58(2H, t), 7.52(6H, m), 7.45(1H, t), 7.41(1H, t), 7.33~7.25(2H, d)	519.63	519.20
41	δ =8.55(2H, d), 8.42(6H, d), 8.10(4H, d), 8.06(4H, d), 7.61(2H, t), 7.55(4H, d)	454.56	454.17
45	δ =8.93(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(5H, d), 8.12(2H, d), 8.10(4H, d), 8.06(2H, d), 7.93(1H, d), 7.85(4H, t), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d)	504.62	504.19
47	δ =8.55(2H, d), 8.42(5H, d), 8.10(4H, d), 8.06(2H, d), 7.90(2H, dd), 7.77~7.55(6H, m), 7.38~7.28(2H, m), 1.72(6H, s)	520.66	520.22
50	δ =8.55(2H, d), 8.42(5H, d), 8.10(4H, d), 8.06(2H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.52(4H, dt), 7.41(1H, t), 7.25(4H, s)	480.60	480.19
52	δ =8.55(2H, d), 8.42(6H, d), 8.10(4H, d), 8.06(4H, d), 7.61(2H, t), 7.55(4H, d), 7.25(4H, s)	530.66	530.20
57	δ =8.55(1H, d), 8.42(5H, d), 8.10(4H, d), 8.06(2H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.33(1H, d), 7.26(1H, d), 7.21(2H, t), 6.94(1H, s), 3.22(1H, s)	442.55	442.17
59	δ =8.55(1H, d), 8.42(5H, d), 8.10(4H, d), 8.06(2H, d), 7.96~7.79(4H, d), 7.61(1H, t), 7.58(1H, t), 7.55(2H, d), 7.15(2H, s)	478.58	478.17
66	δ =8.55(1H, d), 8.42(5H, d), 8.10(4H, d), 8.06(2H, d), 7.61(1H, t), 7.58(1H, t), 7.55(2H, d), 7.25(4H, s)	596.76	596.25
69	δ =8.55(1H, d), 8.42(5H, d), 8.10(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.87(2H, d), 7.77(2H, s), 7.69(2H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t) 7.41(1H, t)	569.69	569.21
71	δ =8.55(1H, d), 8.42(5H, d), 8.18(1H, d), 8.10(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 8.00(1H, d), 7.87(1H, d), 7.77(2H, s), 7.69(1H, d), 7.58(2H, t), 7.55(2H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.50(2H, d), 7.45(2H, d), 7.41(1H, d)	645.79	645.25
76	δ =8.55(1H, d), 8.42(5H, d), 8.10(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.61(1H, d), 7.55(2H, d), 7.54(2H, d), 7.20(4H, t), 6.81(2H, d), 6.69(2H, d), 6.63(4H, d)	571.71	571.23
79	δ =8.16(4H, d), 7.67(8H, d)	302.37	302.11
82	δ =8.16(4H, d), 7.67(8H, d), 2.34(2H, s)	330.42	330.14
86	δ =8.31(2H, s), 8.16(4H, d), 7.91(2H, d), 7.87(1H, d), 7.67(8H, d), 7.61(1H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.45(1H, t), 7.41(1H, t), 7.39(2H, d)	554.68	554.20

87	$\delta=8.27(1H, s), 8.16(4H, d), 7.91(4H, d), 7.67(8H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t), 7.39(4H, d)$	554.68	554.20
90	$\delta=8.16(4H, d), 7.93(1H, d), 7.87(1H, d), 7.77(1H, s), 7.67(8H, d), 7.63(1H, d), 7.55(1H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t), 7.38(1H, t), 7.28(1H, t), 1.72(2H, s)$	570.72	570.23
93	$\delta=8.16(4H, d), 8.00(2H, d), 7.92(1H, d), 7.73(1H, d), 7.70(1H, s), 7.67(8H, d), 7.59(2H, d), 7.58(1H, s), 7.57(1H, t), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.48(2H, d), 7.41(1H, t)$	580.71	580.22
96	$\delta=8.16(4H, d), 7.67(8H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t), 7.33(1H, d), 7.26(1H, d), 7.21(2H, d), 6.94(1H, s), 3.22(1H, s)$	492.61	492.19
100	$\delta=8.16(4H, d), 7.90(2H, d), 7.79(2H, d), 7.67(8H, d), 7.63(1H, d), 7.58(2H, t), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.48(1H, s), 7.41(1H, t), 7.19(1H, d)$	578.70	578.20
105	$\delta=8.18(1H, d), 8.16(4H, d), 8.01(1H, d), 7.67(8H, d), 7.53(2H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t)$	511.63	511.24
107	$\delta=8.55(2H, d), 8.42(2H, d), 8.16(4H, d), 8.08(2H, d), 8.04(2H, d), 7.67(8H, d), 7.61(2H, d), 7.55(4H, d)$	554.68	554.20
110	$\delta=8.55(1H, s), 8.42(1H, d), 8.27(1H, s), 8.16(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.91(4H, d), 7.67(8H, d), 7.61(1H, d), 7.55(2H, d), 7.39(4H, d)$	604.74	604.22
115	$\delta=8.55(1H, s), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.12(1H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.87(1H, d), 7.77(1H, s), 7.69(1H, d), 7.67(8H, d), 7.63(1H, d), 7.61(1H, d), 7.55(2H, d), 7.50(1H, t), 7.29(1H, t)$	593.71	593.21
116	$\delta=8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 8.00(2H, d), 7.92(1H, d), 7.73(1H, d), 7.70(1H, s), 7.67(8H, d), 7.61(1H, d), 7.59(2H, d), 7.58(1H, s), 7.57(1H, t), 7.55(2H, d), 7.48(2H, d)$	630.77	630.23
119	$\delta=8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.67(8H, d), 7.61(1H, d), 7.55(2H, d), 7.33(1H, d), 7.26(1H, d), 7.21(2H, d), 6.94(1H, s), 3.22(1H, s)$	542.67	542.20
124	$\delta=8.55(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.94(1H, d), 7.87(1H, d), 7.77(1H, s), 7.69(1H, d), 7.67(8H, d), 7.61(1H, d), 7.58(2H, d), 7.55(2H, t), 7.50(2H, d), 7.45(1H, t), 7.33(1H, t), 7.25(1H, t)$	669.81	669.25
126	$\delta=8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.67(8H, d), 7.61(1H, d), 7.55(2H, d), 7.33(1H, t), 7.26(1H, t), 7.23(1H, d), 7.01(1H, d), 3.05(1H, d)$	543.65	543.20
132	$\delta=8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t)$	378.46	378.14
136	$\delta=8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, d),$	442.55	442.17

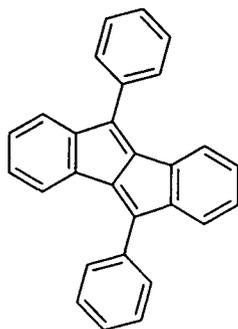
	7.55(2H, d), 2.34(1H, s)		
139	δ =8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 8.00(2H, d), 7.92(1H, d), 7.81(2H, d), 7.73(1H, d), 7.67(4H, d), 7.59(2H, d), 7.58(1H, s), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t)	504.62	504.19
142	δ =8.93(2H, d), 8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 8.12(1H, d), 7.93(1H, s), 7.88(2H, t), 7.82(2H, dt), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t)	554.68	554.20
147	δ =8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 8.00(2H, d), 7.92(1H, d), 7.81(2H, d), 7.73(1H, d), 7.70(1H, s), 7.67(4H, d), 7.59(3H, s), 7.57(1H, t), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.48(2H, d), 7.41(1H, t)	580.71	580.22
150	δ =8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t), 7.33(1H, d), 7.26(1H, d), 7.21(2H, d), 6.94(1H, s), 3.22(1H, s)	492.61	492.19
152	δ =8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 7.96(1H, d), 7.90(1H, d), 7.81(2H, d), 7.80(2H, d), 7.67(4H, d), 7.58(1H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t), 7.15(2H, s)	528.64	582.19
158	δ =8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 7.81(2H, d), 7.74(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t), 7.39(2H, d)	495.57	495.16
162	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 8.00(2H, d), 7.92(1H, d), 7.81(2H, d), 7.73(1H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.59(2H, d), 7.58(1H, d), 7.55(2H, d)	554.68	554.20
164	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.27(1H, s), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 7.91(4H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.39(4H, d)	604.74	604.22
167	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 7.93(1H, d), 7.87(1H, d), 7.81(2H, d), 7.77(1H, s), 7.67(4H, d), 7.63(1H, d), 7.61(1H, t), 7.55(3H, d), 7.38(1H, t), 7.28(1H, t), 1.72(6, s)	593.71	593.21
171	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.10(1H, d), 8.06(2H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.28(2H, d), 6.58(1H, d), 6.39(1H, t), 3.22(1H, d)	542.67	542.20
176	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(3H, d), 8.16(4H, d), 8.10(2H, d), 8.06(2H, d), 7.96(1H, d), 7.90(1H, d), 7.81(3H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.58(1H, d), 7.55(2H, d)	628.76	628.22
181	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 7.81(2H, d), 7.74(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.39(2H, d)	545.63	545.18
183	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.54(2H, d), 7.20(4H, t), 6.81(2H, t), 6.69(2H, d), 6.63(4H, d)	671.83	671.26
189	δ =8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, dt), 7.52(2H, d), 7.51(2H, d), 7.41(1H, t)	454.56	454.17

194	$\delta=8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 7.98(9H, s), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, d), 7.41(1H, t), 4.82(2H, s)$	580.71	580.22
196	$\delta=8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 8.12(1H, d), 7.94(1H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.63(1H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, d), 7.50(1H, t), 7.41(1H, t), 7.33(1H, t), 7.29(1H, d), 7.25(1H, d)$	543.65	543.20
199	$\delta=8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, d), 7.41(1H, t), 7.33(1H, d), 7.26(1H, d), 7.21(2H, d), 6.94(1H, s), 3.22(1H, s)$	492.61	492.19
204	$\delta=8.54(2H, d), 8.16(4H, d), 7.81(2H, d), 7.74(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, d), 7.41(1H, t), 7.39(2H, d)$	445.51	445.15
206	$\delta=8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 8.00(2H, d), 7.92(1H, d), 7.81(2H, d), 7.73(1H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.59(2H, d), 7.58(1H, s), 7.55(2H, d)$	554.68	554.20
213	$\delta=8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.06(2H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.33(1H, t), 7.26(1H, t), 7.23(1H, d), 7.01(1H, d), 3.05(1H, s)$	543.65	543.20
217	$\delta=8.55(1H, d), 8.54(2H, d), 8.42(3H, dd), 8.16(4H, d), 8.10(2H, d), 8.06(2H, d), 7.96(1H, d), 7.90(1H, d), 7.81(2H, d), 7.80(1H, d), 7.79(1H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.58(1H, t), 7.55(2H, d)$	628.76	628.22
220	$\delta=8.54(1H, d), 8.16(4H, d), 7.81(1H, d), 7.67(6H, ds), 7.52(2H, d), 7.51(2H, d), 7.41(1H, t)$	378.46	378.14
222	$\delta=8.54(1H, d), 8.16(4H, d), 7.81(1H, d), 7.67(6H, ds), 7.52(4H, d), 7.51(4H, d), 7.41(2H, t)$	454.56	454.17
225	$\delta=8.54(1H, d), 8.31(2H, s), 8.16(4H, d), 7.91(2H, d), 7.87(1H, d), 7.81(1H, d), 7.67(6H, ds), 7.61(1H, d), 7.52(2H, d), 7.51(1H, d), 7.45(1H, t), 7.41(1H, t), 7.39(2H, d)$	554.68	554.20
230	$\delta=8.55(1H, d), 8.54(2H, s), 8.16(4H, d), 8.12(1H, d), 7.94(1H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.63(1H, d), 7.52(2H, d), 7.51(3H, m), 7.41(1H, t), 7.33(1H, t), 7.27(2H, t)$	543.65	543.20
233	$\delta=8.54(2H, s), 8.16(4H, d), 7.81(2H, d), 7.67(4H, d), 7.52(2H, d), 7.51(2H, t), 7.41(1H, t), 7.33(1H, d), 7.26(1H, d), 7.21(2H, dd), 6.94(1H, s), 3.22(1H, s)$	492.61	492.19
238	$\delta=8.54(1H, d), 8.16(4H, d), 7.81(1H, d), 7.74(2H, d), 7.67(6H, ds), 7.52(2H, d), 7.51(2H, d), 7.41(1H, t), 7.39(3H, dd)$	495.57	495.16
240	$\delta=8.54(2H, d), 8.42(1H, d), 8.16(4H, d), 8.08(1H, d), 8.04(1H, d), 8.00(2H, d), 7.92(1H, d), 7.81(1H, t), 7.73(1H, d), 7.67(6H, ds), 7.61(1H, t), 7.59(2H, d), 7.58(1H, s), 7.55(2H, d)$	554.68	554.20
244	$\delta=8.55(1H, d), 8.54(1H, d), 8.42(3H, dd), 8.16(2H, d), 8.10(2H, d), 8.06(2H, dd), 7.93(1H, d), 7.87(1H, d), 7.81(1H, t), 7.77(1H, s), 7.67(2H, d), 7.63(1H, d), 7.61(1H, t), 7.55(3H, dd), 7.38(1H, d), 7.28(1H, t), 1.91(4H, d), 0.90(6H, s)$	598.77	598.27

246	$\delta=8.55(2H, dd), 8.54(1H, d), 8.42(3H, dd), 8.16(2H, d), 8.10(2H, d), 8.06(2H, dd), 7.94(1H, d), 7.87(1H, d), 7.81(1H, t), 7.77(1H, s), 7.69(1H, d), 7.67(2H, d), 7.61(1H, t), 7.58(2H, t), 7.55(2H, d), 7.50(2H, d), 7.45(1H, t), 7.33(1H, t), 7.25(1H, t)$	619.75	619.23
249	$\delta=8.55(1H, d), 8.42(3H, d), 8.16(2H, d), 8.10(2H, d), 8.06(2H, d), 7.67(4H, d), 7.61(1H, t), 7.55(2H, d), 7.26(1H, d), 7.21(2H, t), 7.18(1H, d), 6.58(1H, d), 6.39(1H, d), 4.74(1H, d)$	492.61	492.19
253	$\delta=7.57(2H, s), 7.45(2H, d), 7.23(2H, d), 2.34(6H, s)$	203.30	203.11
258	$\delta=8.93(4H, d), 8.12(4H, d), 7.93(2H, s), 7.88(4H, t), 7.82(4H, t), 7.57(2H, s), 7.45(2H, d), 7.23(2H, d), 2.34(6H, s)$	582.73	582.23
260	$\delta=8.18(2H, d), 8.12(2H, d), 8.04(2H, d), 7.88(2H, d), 7.82(2H, t), 7.71(8H, s), 7.57(2H, s), 7.45(2H, d), 7.23(2H, d), 2.34(6H, s)$	630.77	630.23
265	$\delta=7.83(2H, s), 7.57(2H, s), 7.45(2H, d), 7.24(2H, d), 7.23(2H, d), 7.21(2H, d), 6.58(2H, d), 6.39(2H, t), 3.22(2H, s), 2.34(6H, s)$	458.59	458.20
269	$\delta=7.52(4H, d), 7.51(4H, t), 7.45(4H, d), 7.41(2H, t), 2.34(12H, s)$	410.55	410.20
273	$\delta=8.93(4H, d), 8.12(4H, d), 7.93(2H, s), 7.88(4H, t), 7.82(4H, t), 7.45(4H, d), 2.34(12H, s)$	610.78	610.27
277	$\delta=8.55(2H, d), 8.12(2H, d), 7.94(2H, d), 7.63(2H, d), 7.50(2H, d), 7.45(4H, d), 7.33(2H, t), 7.29(2H, t), 7.25(2H, t), 2.34(12H, s)$	588.74	588.26
281	$\delta=7.45(4H, d), 7.26(2H, d), 7.21(4H, dd), 7.18(2H, d), 6.58(2H, t), 6.39(2H, t), 4.74(2H, d), 2.34(12H, s)$	486.64	486.23
285	$\delta=8.93(6H, ds), 8.12(6H, ds), 7.88(4H, t), 7.82(4H, t), 7.52(4H, d), 7.51(4H, t), 7.41(2H, t)$	654.79	654.23

【0167】 用於驗證下方化學式之化合物 5，數據證實如

下：



UV: 261, 285 nm

PL: 365 nm

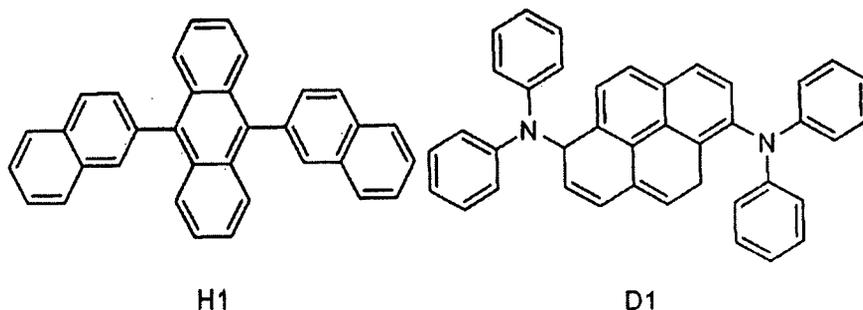
HOMO: -5.7 eV

LUMO: -3.3 eV

Bg: 2.4 eV

【0168】 試驗例：製造 OLED 裝置

【0169】 從 OLED 玻璃(由 Samsung Corning Co. Ltd.製造)得到一透明的 ITO 薄膜，將其利用三氯乙烯、丙酮、乙醇和蒸餾水依序進行超音波清洗。將 ITO 基板放入真空沉積設備之基板夾層中，進行洩壓直到腔室達到 10^{-6} torr 真空程度，接著藉由施加電流至真空沉積設備之單元，將厚度 200 Å 之電洞注入層沉積在 ITO 基板上，進而蒸鍍 2-TNATA。藉由施加電流至另一單元，將厚度 600 Å 之電洞轉移層沉積在電洞注入層上，進而蒸鍍 N,N'-雙(α -萘基)-N,N'-二苯基-4,4'-二胺(NPB)。在真空沉積設備之一單元中，如表 2 所述在合成例中製備的化合物、或 H1 係設置為主體材料；而在另一單元中，藉由施加電流至單元以設置並蒸鍍下方摻質材料 D1。



【0170】 接著，藉由加熱而在電洞轉移層上沉積厚度 400 Å 的發光層，並同時在摻質沉積速率比為 5 重量百分比(主體：摻質=95:5)下進行兩單元的沉積。然後，沉積厚度

200 Å 之三(8-羥基喹啉)鋁(III)(Alq)作為電子轉移層。之後，沉積厚度 10 Å 之氟化鋰(LiF)化合物作為電子注入層。接著，沉積厚度 1000 Å 之 Al 陰極，以製造出 OLED。並且，透過真空昇華純化(vacuum sublimation purification)在 10^{-6} 至 10^{-8} torr 下，分別純化所有必需用於製造 OLED 裝置之有機化合物材料，以製造出 OLED。

【0171】 [測試例]:評估 OLED 裝置特性

【0172】 試驗例 1 至 50 和比較例 1 中製造出的 OLED 裝置，在 1000 cd/m^2 和 50%效能下測量其電流密度和壽命結果，列於下表 2。

【0173】 [表 2]

項目	化合物編號	Cd/A @1000 cd/m ²	壽命(T50)
	H1	4.5	250
1	1	4.7	450
2	3	4.6	440
3	5	4.5	410
4	6	4.8	460
5	10	5.1	500
6	13	5.1	400
7	16	4.6	410
8	19	4.8	450
9	21	4.8	460
10	24	4.6	430
11	27	4.6	430
12	30	4.5	410
13	32	4.8	450
14	35	4.9	400
15	41	4.9	470
16	45	4.7	450
17	47	4.9	430
18	50	4.6	440
19	52	4.8	450
20	57	4.9	460
21	59	4.8	440

22	66	5.0	400
23	69	4.9	410
24	71	5.1	410
25	76	5.0	400
26	79	4.8	460
27	82	4.8	450
28	86	4.9	470
29	87	4.9	490
30	90	5.1	430
31	93	5.0	450
32	96	4.7	440
33	100	4.7	430
34	105	4.7	400
35	107	4.8	460
36	110	4.7	440
37	115	4.7	400
38	116	4.9	450
39	119	4.8	440
40	124	5.0	390
41	126	4.9	400
42	132	4.7	450
43	136	4.8	430
44	139	4.9	460
45	142	4.8	460
46	147	4.6	430
47	150	4.9	460
48	152	4.8	450
49	158	4.9	400
50	162	4.7	460

【0174】 上述實施例僅係為了方便說明而舉例而已，本發明所主張之權利範圍自應以申請專利範圍所述為準，而非僅限於上述實施例。

【符號說明】

【0175】

100 基板

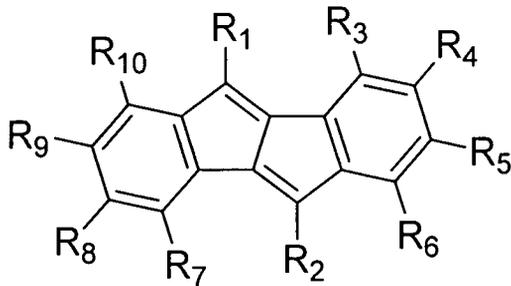
200 陽極

300	有機材料層
301	電洞注入層
302	電洞轉移層
303	發光層
304	電子轉移層
305	電子注入層
400	陰極

申請專利範圍

1. 一種化合物，如下化學式1所示：

[化學式1]



其中，在化學式1中，

R_1 和 R_2 係各自獨立為：氫；鹵素；經取代或未經取代之 C_1 - C_{30} 烷基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基；經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基、及經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基；經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基；經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；氨基； $-NR_{11}R_{12}$ ；

-SiR₁₃R₁₄R₁₅； -OR₁₆； -SR₁₇； 經取代或未經取代之(C₆-C₃₀)芳基(C₁-C₃₀)烷基； 經取代或未經取代之C₁-C₃₀烷胺基； C₃-C₃₀雜芳基，其中係經-SiR₁₈R₁₉R₂₀取代； 經取代或未經取代之C₆-C₃₀芳胺基； 經取代或未經取代之C₂-C₃₀烯基； 經取代或未經取代之C₂-C₃₀炔基； 羧基； 硝基； 或羥基； 或者，透過C₃-C₃₀亞烷基或C₃-C₃₀亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；

R₁₁至R₂₀係各自獨立為：氫； 經取代或未經取代之C₁-C₃₀烷基； 經取代或未經取代之C₆-C₃₀芳基； 或經取代或未經取代之C₃-C₃₀雜芳基； 或者，透過C₃-C₃₀亞烷基或C₃-C₃₀亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環；

該雜環烷基和該雜芳基包含一個以上選自由氮(N)、氧(O)、硫(S)及矽(Si)的雜原子；

R₃至R₁₀係各自獨立為：氫或單價有機取代基； 以及

R₃及R₄、R₄及R₅、R₅及R₆、R₇及R₈、R₈及R₉、或R₉及R₁₀，透過C₃-C₃₀亞烷基或C₃-C₃₀亞烯基而鍵結，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

2. 如申請專利範圍第1項所述之化合物，其中，R₃至R₁₀係各自獨立為：氫； 鹵素； 經取代或未經取代之C₁-C₃₀烷基； 經取代或未經取代之C₆-C₃₀芳基； 經取代或未經取代之C₆-C₃₀芳基，其中係與經取代或未經取代之C₃-C₃₀環烷基、經取代

或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基、及經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基，其中係與經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基；經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 環烷基；經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 環烷基，其中係與經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜環烷基、經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳香環、及經取代或未經取代之 C_3-C_{30} 雜芳基中之一或多者稠合；氰基； $-NR_{11}R_{12}$ ； $-SiR_{13}R_{14}R_{15}$ ； $-OR_{16}$ ； $-SR_{17}$ ；經取代或未經取代之 (C_6-C_{30}) 芳基 (C_1-C_{30}) 烷基；經取代或未經取代之 C_1-C_{30} 烷胺基； C_3-C_{30} 雜芳基，其中係經 $-SiR_{18}R_{19}R_{20}$ 取代；經取代或未經取代之 C_6-C_{30} 芳胺基；經取代或未經取代之 C_2-C_{30} 烯基；經取代或未經取代之 C_2-C_{30} 炔基；羧基；硝基；或羥基；或者，透過 C_3-C_{30} 亞烷基或 C_3-C_{30} 亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

3. 如申請專利範圍第2項所述之化合物，其中，「在經取代或未經取代」之 R_1 至 R_{10} 中，經取代表示各自獨立地更經由一個以上選自由下列所組群組者所取代：氬；鹵素； C_1-C_{30} 烷基，其中係經鹵素取代或未經取代； C_6-C_{30} 芳基；

C₃-C₃₀雜芳基，其中係經C₆-C₃₀芳基取代或未經取代；5員至7員雜環烷基；5員至7員雜環烷基，其中係與一個以上芳香環稠合；C₃-C₃₀環烷基；C₃-C₃₀環烷基，其中係與一個以上芳香環稠合；三(C₁-C₃₀)烷基甲矽烷基；二(C₁-C₃₀)烷基(C₆-C₃₀)芳基甲矽烷基；三(C₆-C₃₀)芳基甲矽烷基；C₂-C₃₀烯基；C₂-C₃₀炔基；氰基；咪唑基；-NR₃₁R₃₂；-SiR₃₃R₃₄R₃₅；-OR₃₆；-SR₃₇；(C₆-C₃₀)芳基(C₁-C₃₀)烷基；(C₁-C₃₀)烷基(C₆-C₃₀)芳基；C₁-C₃₀烷氧基；C₁-C₃₀烷硫基；C₆-C₃₀芳氧基；C₆-C₃₀芳硫基；羧基；硝基；或羥基；以及R₃₁至R₃₇係各自獨立為氫；C₁-C₃₀烷基；C₆-C₃₀芳基；或C₃-C₃₀雜芳基；或者透過C₃-C₃₀亞烷基或C₃-C₃₀亞烯基，鍵結至一相鄰取代基，形成包含或不包含一稠合環之一單環或多環脂肪環、或一單環或多環芳香環。

4. 如申請專利範圍第1項所述之化合物，其中，R₁至R₁₀係各自獨立地選自由：氫；鹵素；甲基；乙基；丙基；丁基；戊基；己基；乙基己基；庚基；辛基；苯基；萘基；芴基；聯苯基；菲基(phenanthryl)；三聯苯基；芘基(pyrenyl)；芘基(perylene)；螺二芴基(spirobifluorenyl)；芘蒽基(fluoranthenyl)；屈基(chrysenyl)；三亞苯基；1,2-二氫芴基(1,2-dihydroacenaphthyl)；二苯並噻吩基(dibenzothiophenyl)；二苯並呋喃基(dibenzofuryl)；咪唑基(carbazolyl)；吡啶基(pyridyl)；呋喃基(furyl)；噻吩基(thienyl)；喹啉基(quinolyl)；三嗪基(triazinyl)；嘧啶基(pyrimidinyl)；噁嗪基(pyridazinyl)；喹惡啉基(quinoxaliny)；菲咯啉基(phenanthrolinyl)；苯並吡咯烷基(benzopyrolidino)；苯並哌啶基(benzopiperidino)；二

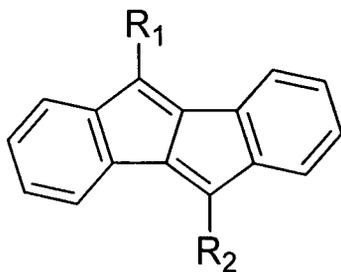
苯嗎啉基 (dibenzomorpholino)；二苯並氮雜卓基 (dibenzoazepino)；經苯基、萘基、芴基、聯苯基、菲基、三聯苯基、芘基、芘基、螺二芴基、茱萸基、屈基、三亞苯基、二苯並噻吩基、二苯並呋喃基、呋唑基、吡啶基、呋喃基、噻吩基、喹啉基、三嗪基、嘧啶基、噁嗪基、喹惡啉基、或菲咯啉基取代之胺基；聯苯氧基(biphenyloxy)；聯苯硫基(biphenylthio)；聯苯甲基(biphenylmethyl)；三聯苯甲基(triphenylmethyl)；羧基；硝基；或羥基。

5. 如申請專利範圍第1項所述之化合物，其中， R_1 和 R_2 中至少一者係為：一在環員中具有七個以上碳原子的取代基、一包含兩個以上環的取代基、或 C_1 - C_{30} 烷基。

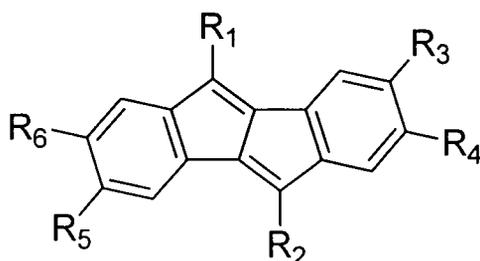
6. 如申請專利範圍第1項所述之化合物，其中， R_1 和 R_2 係互不相同。

7. 如申請專利範圍第1項所述之化合物，其中，化學式1係由化學式2至9中任一者所示：

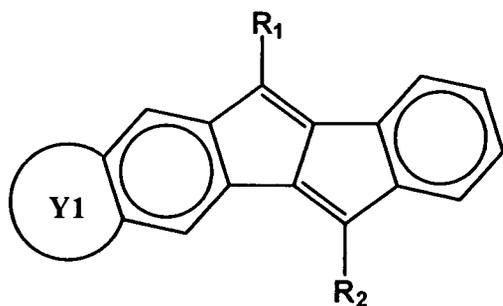
[化學式2]



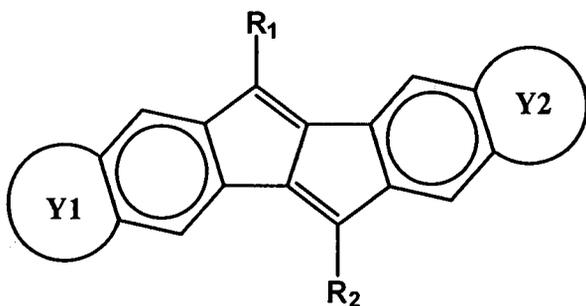
[化學式3]



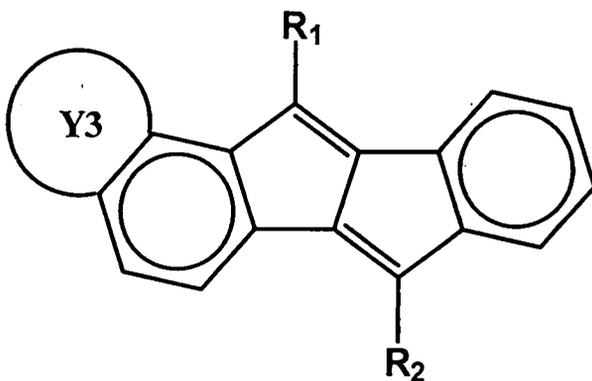
[化學式 4]



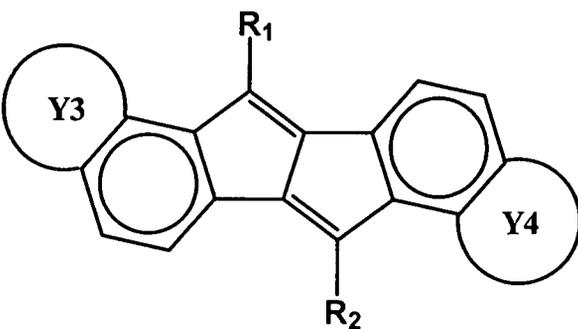
[化學式 5]



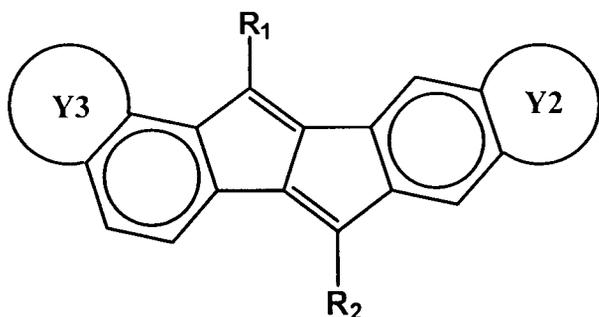
[化學式 6]



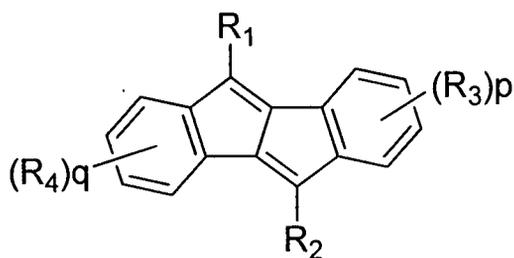
[化學式 7]



[化學式 8]



[化學式9]

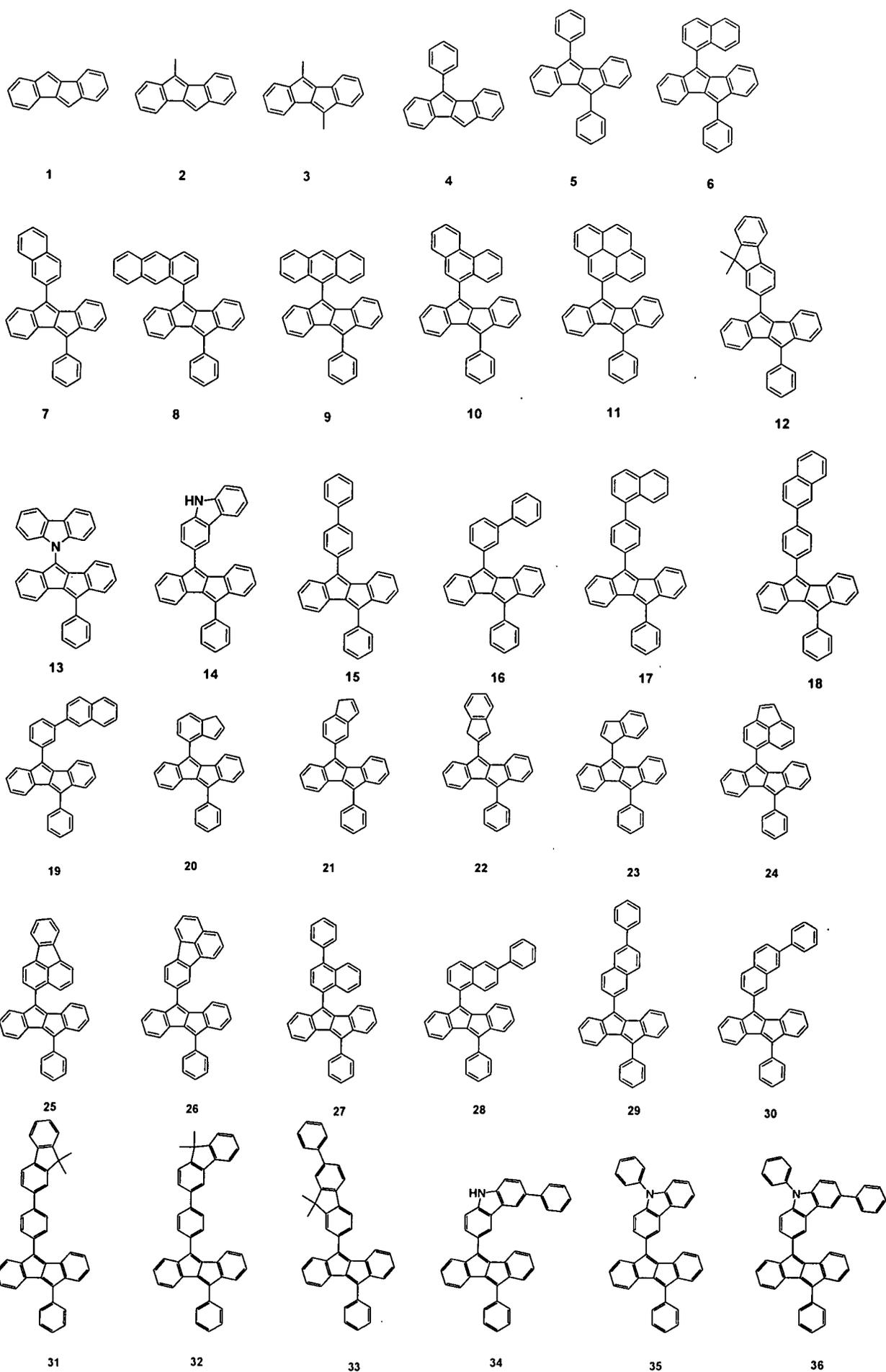


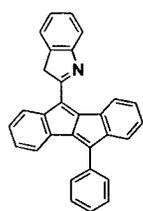
其中，在化學式2至9中， R_1 、 R_2 、 R_3 及 R_4 係如同申請專利範圍第1項所定義；

p 和 q 係各自獨立為1至4之整數；

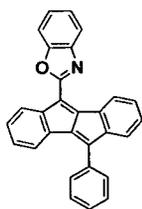
Y_1 至 Y_4 代表：經取代或未經取代之 C_3 - C_{30} 環烷基、經取代或未經取代之雜芳基、經取代或未經取代之5員至7員雜環烷基、及經取代或未經取代之 C_6 - C_{30} 芳基中之一者，或者其中該些環中兩個以上的環稠合之一環。

8. 如申請專利範圍第1項所述之化合物，係選自由下列結構式：

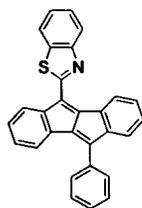




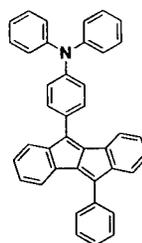
37



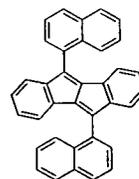
38



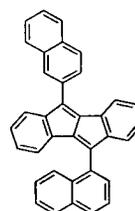
39



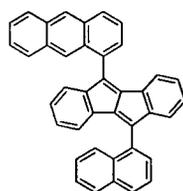
40



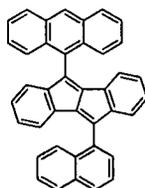
41



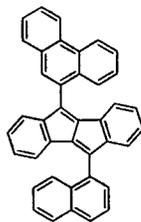
42



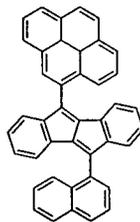
43



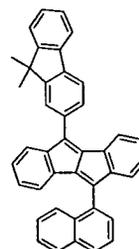
44



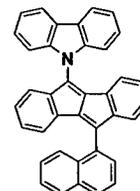
45



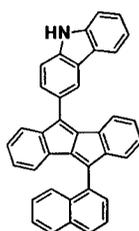
46



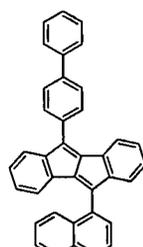
47



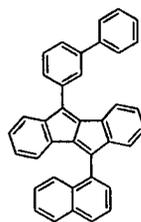
48



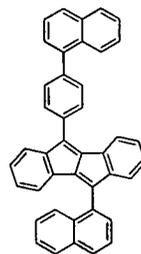
49



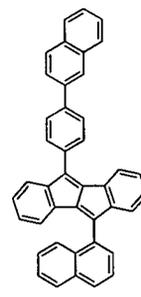
50



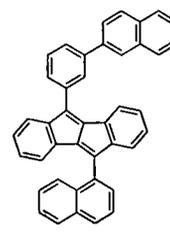
51



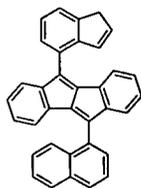
52



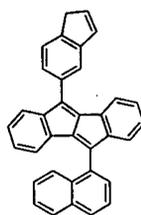
53



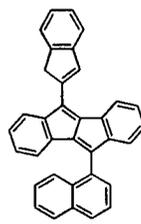
54



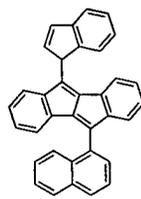
55



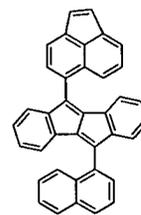
56



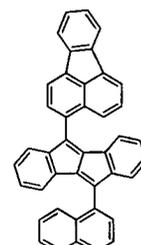
57



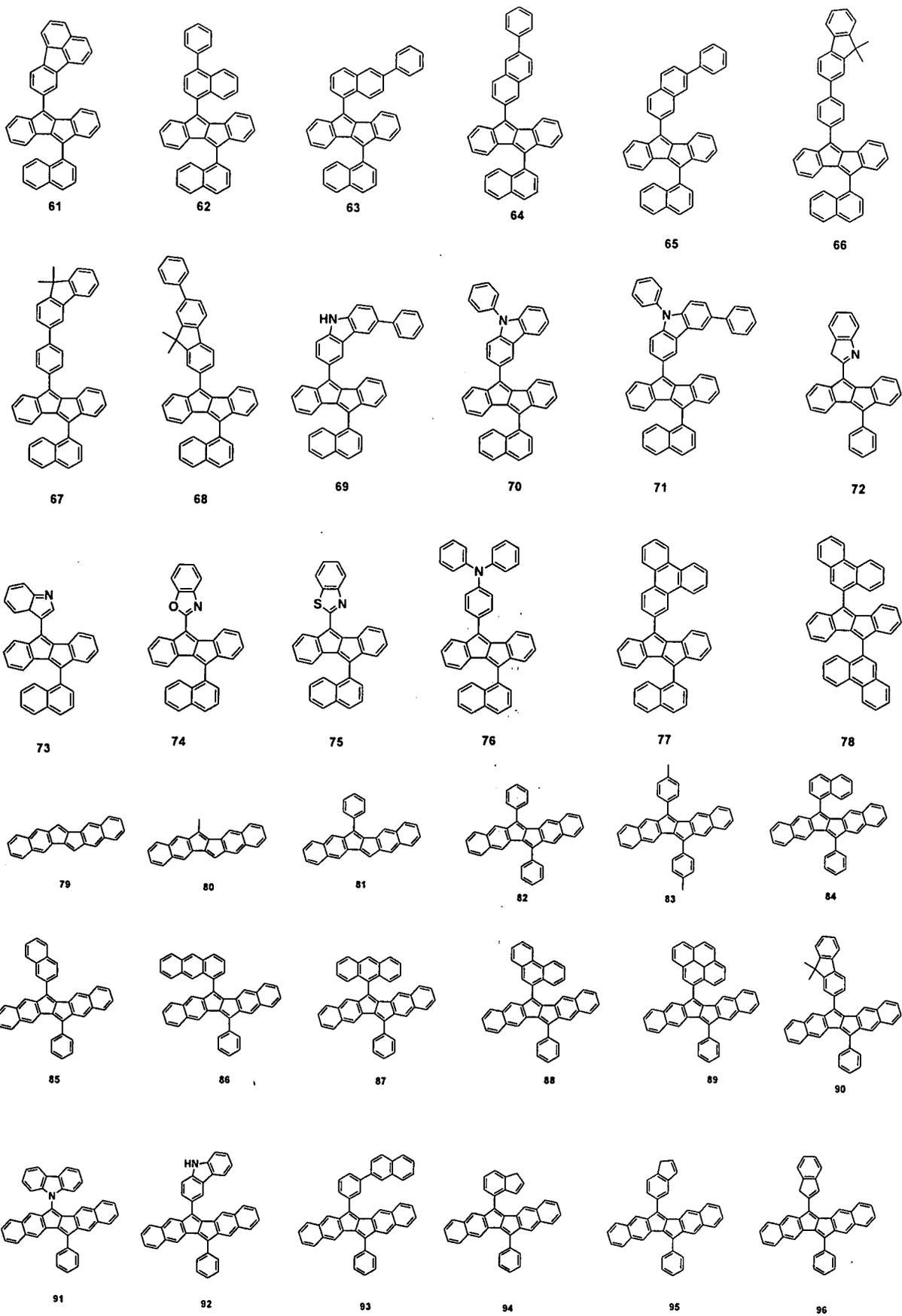
58

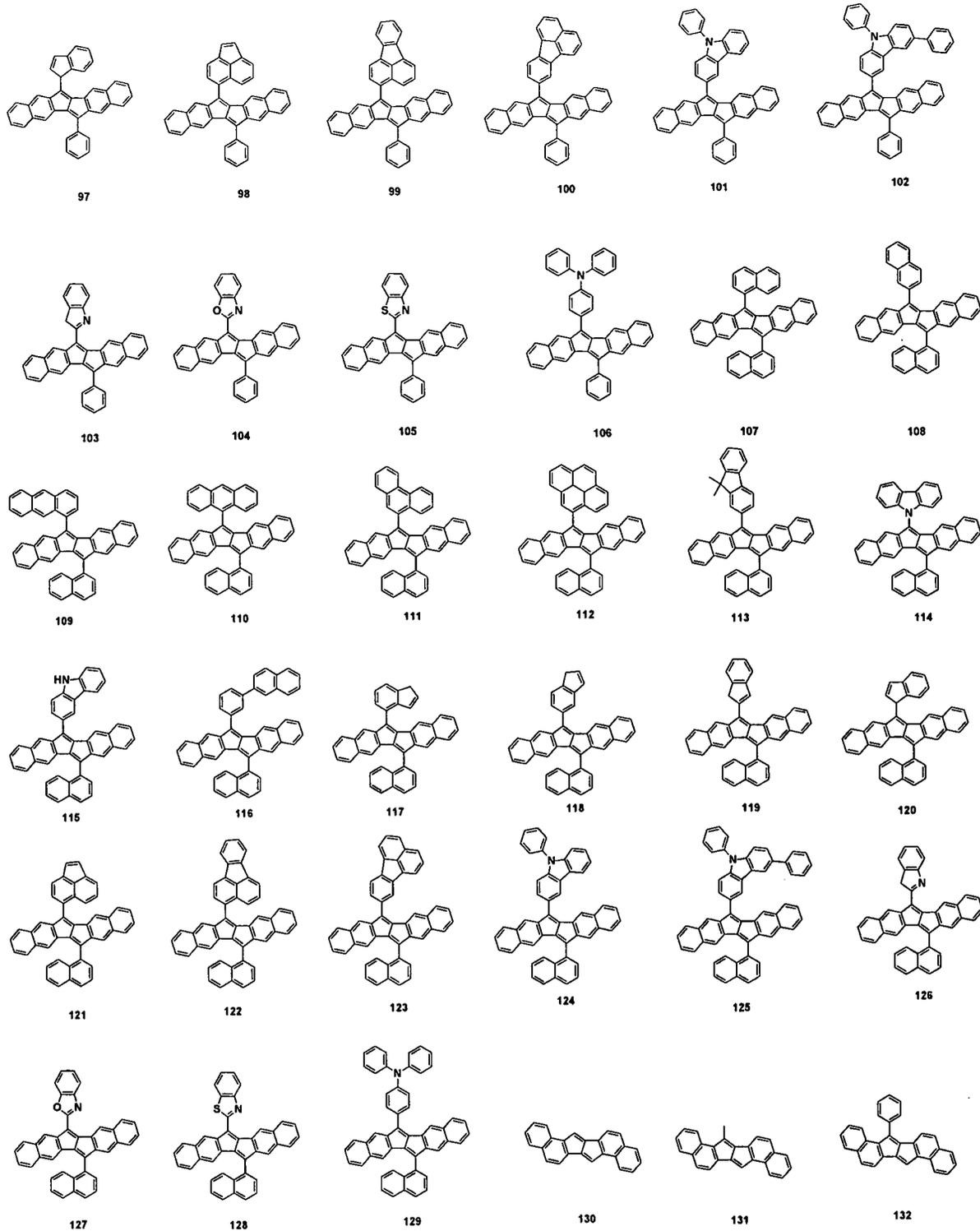


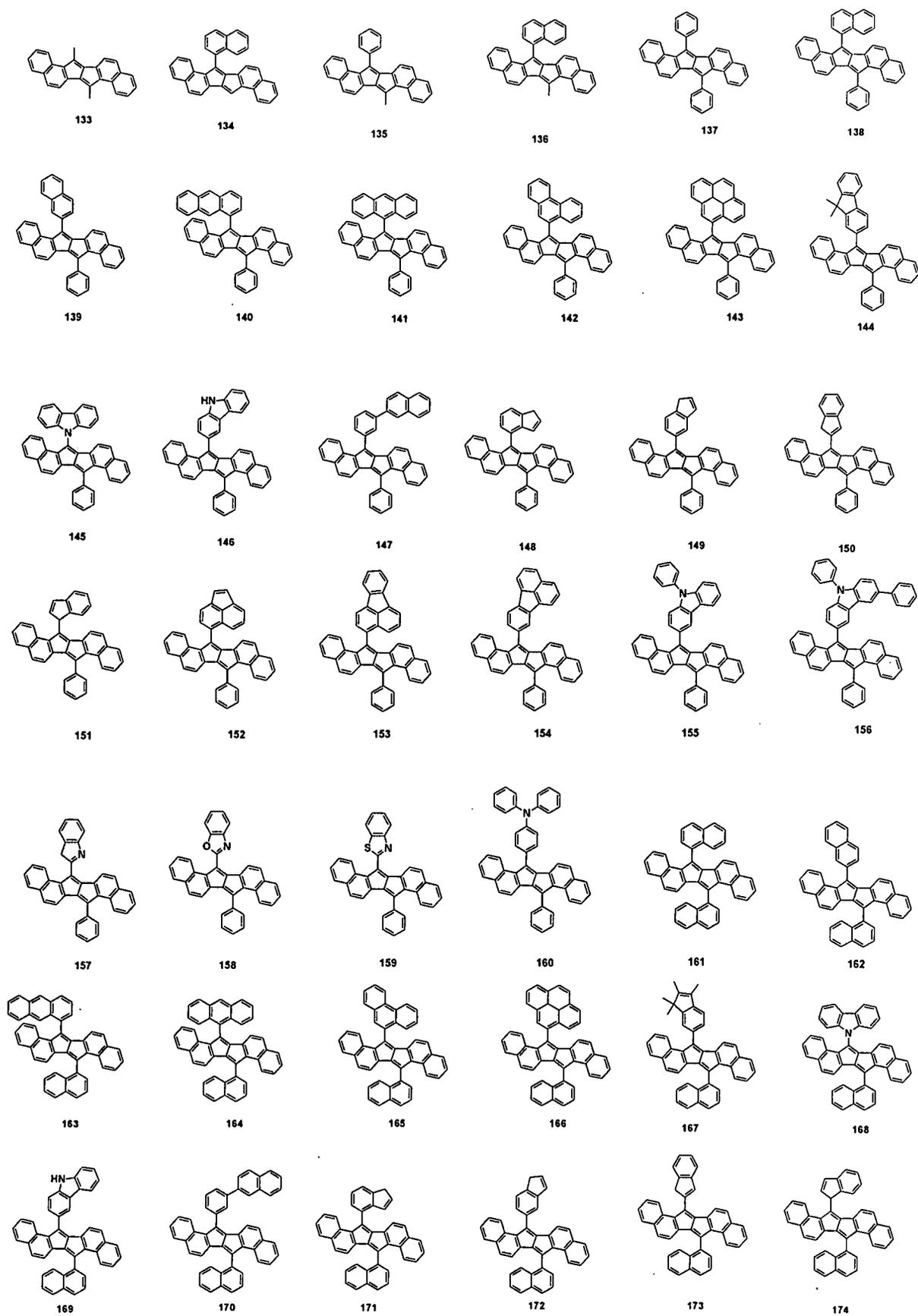
59

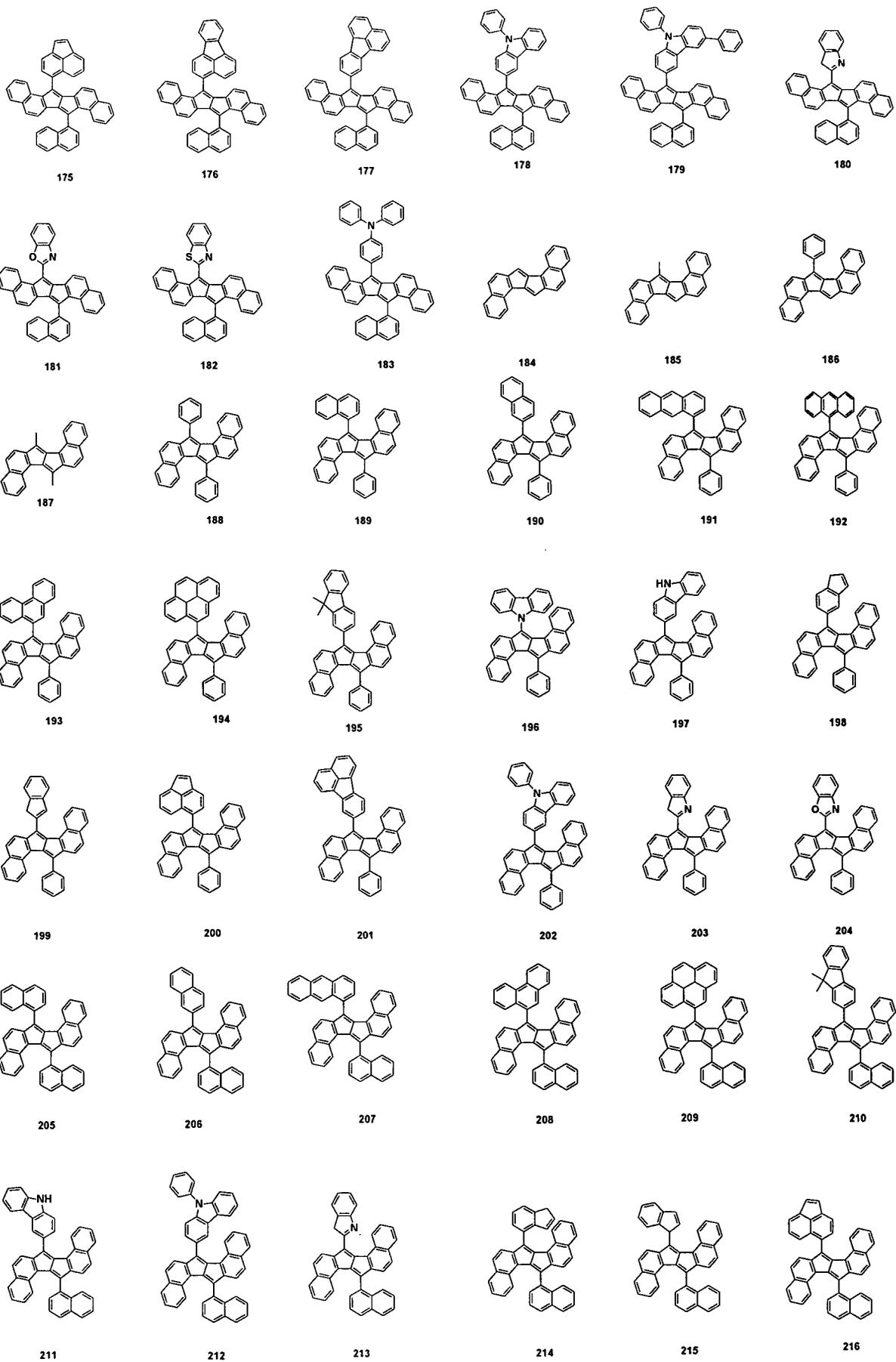


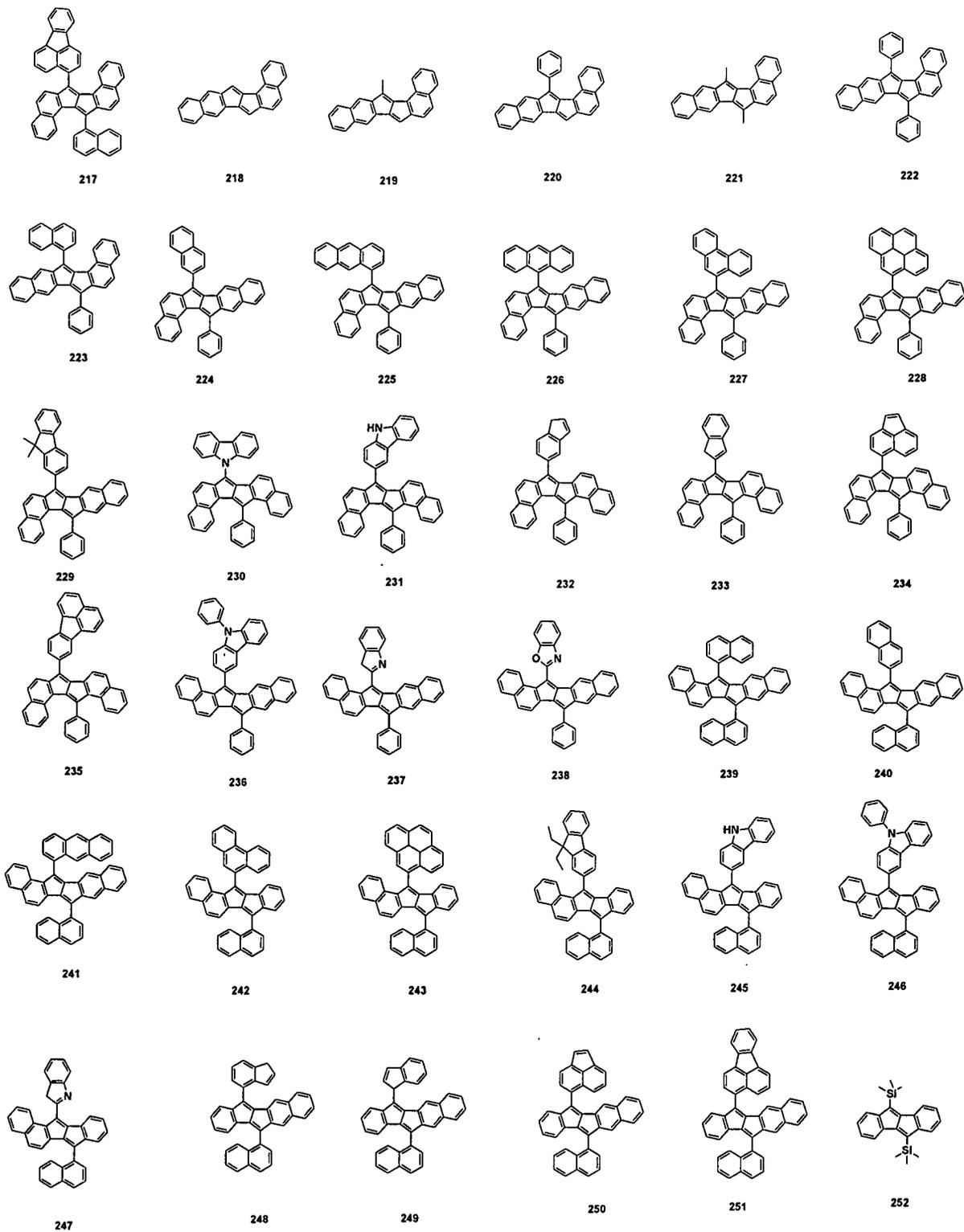
60

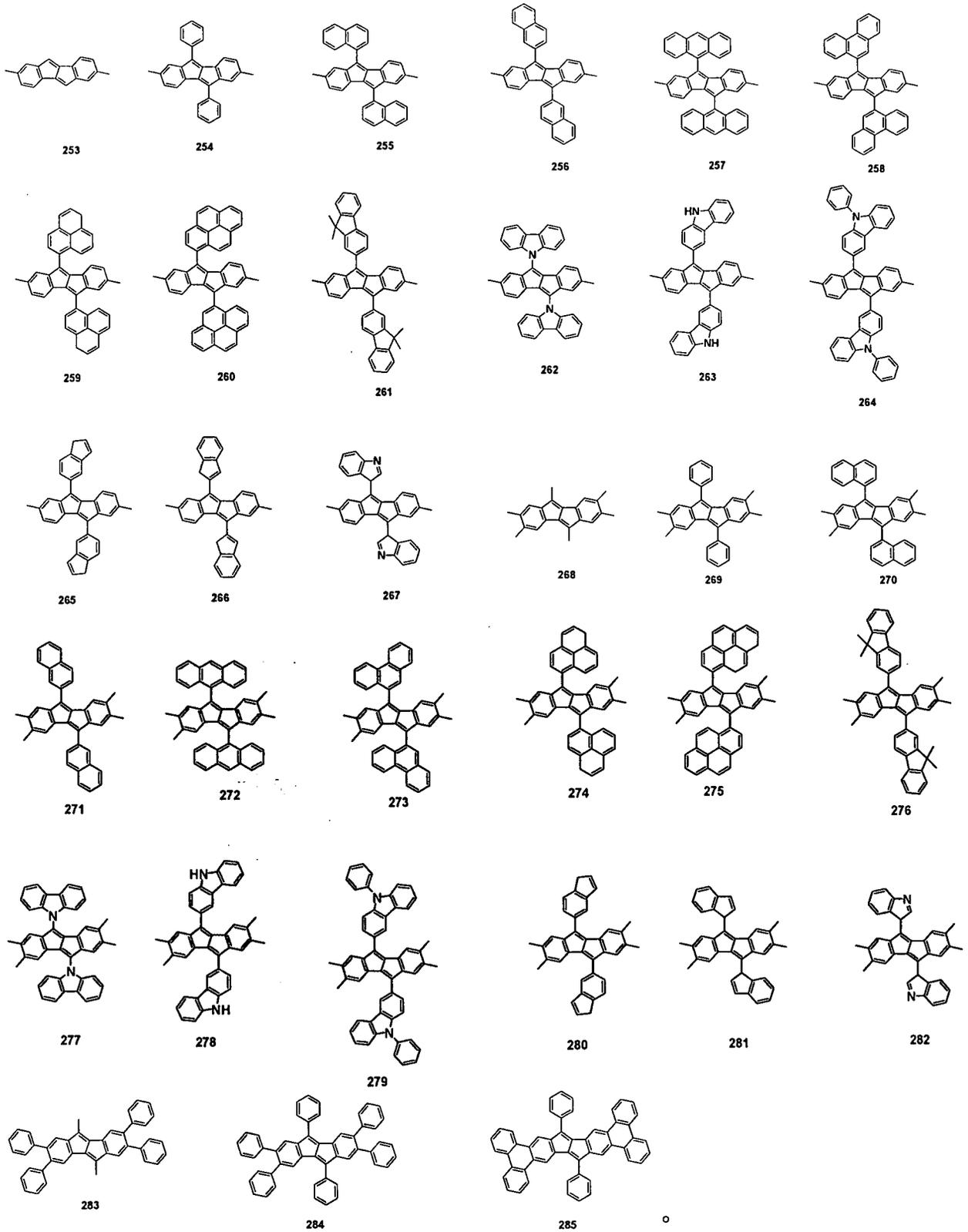












9. 一種有機發光裝置，包括：

— 第一電極；

— 第二電極；以及

一個以上有機材料層，其係設置於該第一電極和該第二電極之間；

其中，該一個以上有機材料層包含：該如申請專利範圍第1至8項中任一項所述之化學式1之化合物。

10. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，其中，包含該化學式1之化合物之該有機材料層係為一發光層。

11. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，其中，包含該化學式1之化合物之該有機材料層更包括：一螢光摻質。

12. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，其中，包含該化學式1之化合物之該有機材料層更包括：一藍色螢光摻質。

13. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，其中，包含該化學式1之化合物之該有機材料層更包括：一磷光摻質。

14. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，其中，包含該化學式1之化合物之該有機材料層更包括：一個以上化合物係選自由：芳胺系化合物或苯乙烯芳胺系化合物所組成之群組。

15. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，其中，包含該化學式1之化合物之該有機材料層更包括：一個以上金屬或錯合物係選自由：第1族；第2族；第4週期及第5週期過渡金屬；鑰系金屬；及d-過渡原子之有機金屬所組成之群組。

16. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，除了該化學式1之化合物，更包括：發出藍、紅、或綠光之有機材料中之一或多者。

17. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，除了包含該化學式1之化合物之該有機材料層，更包括：發出藍、紅、或綠光之有機材料層中之一或多者。

18. 如申請專利範圍第9項所述之有機發光裝置，其係發出白光。

圖式

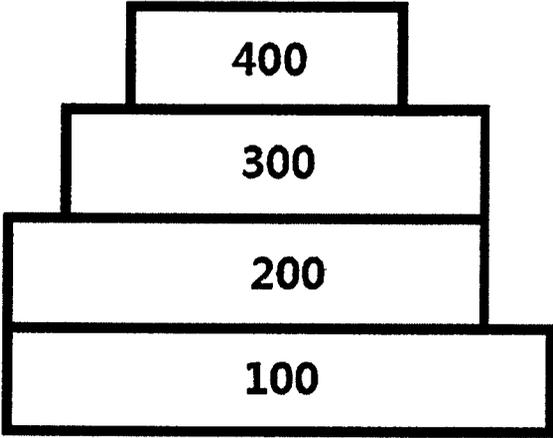


圖 1

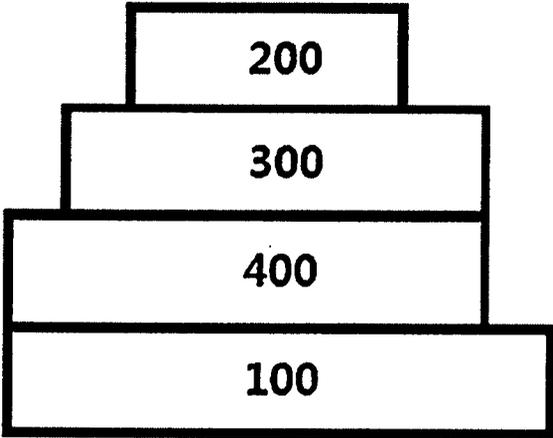


圖 2

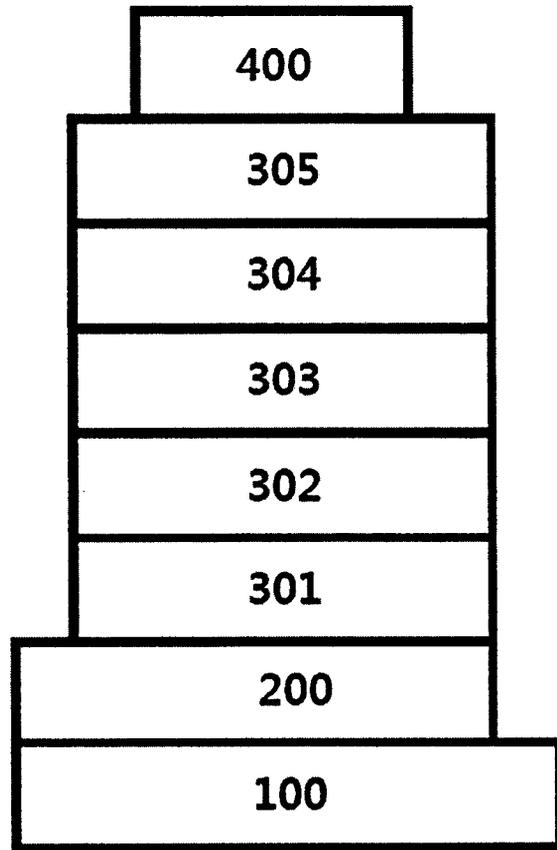


圖 3