



(21) 申請案號：107145202

(22) 申請日：中華民國 107 (2018) 年 12 月 14 日

(51) Int. Cl. :

C07D487/04 (2006.01)

H05B33/14 (2006.01)

H05B33/22 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

H01L51/00 (2006.01)

(30) 優先權：2017/12/19

歐洲專利局

17208699.3

(71) 申請人：德商麥克專利有限公司 (德國) MERCK PATENT GMBH (DE)

德國

(72) 發明人：安吉哈特 簡斯 ENGELHART, JENS (DE)；梅爾 賽巴斯汀 MEYER, SEBASTIAN

(DE)；喬斯汀 多明尼克 JOOSTEN, DOMINIK (DE)；艾克霍夫 克莉斯汀

EICKHOFF, CHRISTIAN (DE)

(74) 代理人：林志剛

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：17 項 圖式數：0 共 217 頁

(54) 名稱

雜環化合物

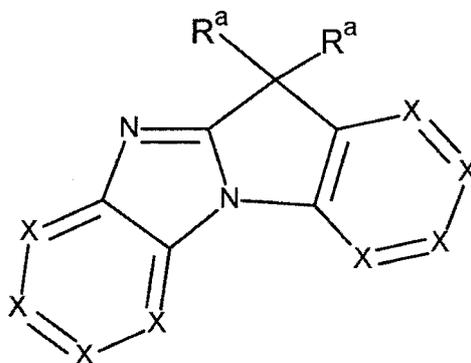
(57) 摘要

本發明係關於雜環化合物，尤其是用於電子裝置者。本發明進一步關於製備本發明化合物之方法以及關於包含該等化合物之電子裝置。

The present invention relates to heterocyclic compounds, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

特徵化學式：

式 I



式 (I)

【發明說明書】

【中文發明名稱】

雜環化合物

【英文發明名稱】

HETEROCYCLIC COMPOUNDS

【技術領域】

【0001】本發明係關於雜環化合物，尤其是用於電子裝置者。本發明進一步關於製備本發明化合物之方法以及關於包含該等化合物之電子裝置。

【先前技術】

【0002】使用有機半導體作為功能性材料之有機電致發光裝置(OLED)的構造係本領域之常識。所使用之發光材料經常為展現磷光之有機金屬錯合物。基於量子力學因素，使用有機金屬化合物作為磷光發射體可能有多達四倍之能量效率及功率效率。大體而言，仍需要OLED尤其是展現磷光之OLED的改良，例如關於效率、操作電壓及使用壽命方面。

【0003】有機電致發光裝置之性質不只是由所使用之發射體決定。此處亦特別重要的尤其是所使用之其他材料，諸如主體及基質材料、電洞阻擋材料、電子傳輸材料、電洞傳輸材料及電子或激子阻擋材料。該等材料之改

良會造成電致發光裝置的明顯改良。

【0004】根據先前技術經常用作磷光化合物之基質材料及用作電子傳輸材料的是芳族或雜芳族化合物，例如三芳胺衍生物或吡啶衍生物。此外，亦使用三吡啶衍生物或噁啶衍生物作為基質材料。

【0005】大體而言，在該等材料例如用作基質材料的情況下，仍需要改良，特別是關於使用壽命方面，還有關於裝置之效率及操作電壓方面。

【發明內容】

【0006】本發明所針對的難題因此為提供適用於有機電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，且當用於該裝置時能獲致良好裝置性質之化合物；以及為提供對應之電子裝置。

【0007】更特別的是，本發明所針對的難題係提供能獲致高使用壽命、良好效率及低操作電壓之化合物。特別是，基質材料之性質亦對於有機電致發光裝置之使用壽命及效率具有基本影響。

【0008】本發明所針對的另一難題可認為是提供適用於磷光或螢光 OLED，尤其是作為基質材料之化合物。本發明所針對的特別難題係提供適用於發出紅色磷光、發出黃色磷光、及發出綠色磷光之 OLED 且亦可能適用於發出藍色磷光之 OLED 的基質材料。

【0009】此外，該等化合物，尤其係於有機電致發光

裝置中用作基質材料、用作電洞傳導材料或用作電子傳輸材料時，應獲致具有優異色純度(colour purity)之裝置。

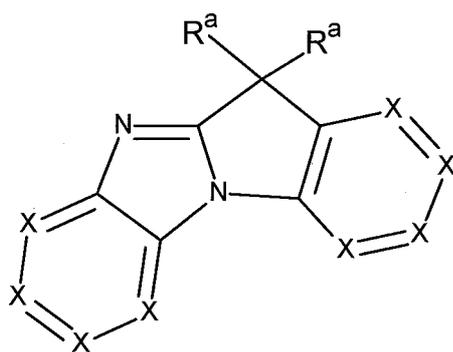
【0010】此外，化合物應可以極簡單方式加工，以及尤其是展現良好溶解度及膜形成。例如，化合物應展現提高之氧化安定性及經改良之玻璃轉移溫度(glass transition temperature)。

【0011】另一目的可認為是以極低廉地及以穩定品質提供具有優異性能之電子裝置。

【0012】此外，應可將該等電子裝置使用或適用於許多目的。更明確地說，該等電子裝置之性能應在廣泛溫度範圍內維持。

【0013】已意外發現，該等難題係由下文詳細說明之特別化合物而獲得解決。使用該等化合物可使有機電子裝置尤其是有機電致發光裝置獲致非常良好性質，尤其是關於使用壽命、色純度、效率及操作電壓方面。本發明因此提供含有此等化合物以及對應之較佳實施態樣的電子裝置，尤其是有機電致發光裝置。

【0014】本發明因此提供包含至少一式(I)之結構的化合物：



式 (I)

其中，所使用之符號如下：

X 於各情況下係相同或不同，且為 **N** 或 **CR**，較佳為 **CR**；

R^a 於各情況下係相同或不同，且為 **H**、**D**、**OH**、**F**、**Cl**、**Br**、**I**、**CN**、**NO₂**、**N(Ar^a)₂**、**N(R)₂**、**C(=O)Ar^a**、**C(=O)R²**、**P(=O)(Ar^a)₂**、**P(Ar^a)₂**、**B(Ar^a)₂**、**B(OR)₂**、**Si(Ar^a)₃**、**Si(R)₃**、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基 (thioalkoxy) 或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基，其各可經一或多個 **R** 基取代，其中一或多個非相鄰 **CH₂** 基團可經 **-RC=CR-**、**-C≡C-**、**Si(R)₂**、**Ge(R)₂**、**Sn(R)₂**、**C=O**、**C=S**、**-O-**、**-Se-**、**-S-**、**C=Se**、**-C(=O)O-**、**-C(=O)NR-**、**C=NR**、**NR**、**P(=O)(R)**、**SO** 或 **SO₂** 置換，以及其中一或多個氫原子可經 **D**、**F**、**Cl**、**Br**、**I**、**CN** 或 **NO₂** 置換，或為各可經一或多個 **R** 基取代之具有 5 至 60 個芳族環原子的芳族或雜芳族環系統、或具有 5 至 60 個芳族環原子及可經一或多個 **R** 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 60 個芳族環原子及可經一或多個 **R** 基取代之芳烷基或雜芳

烷基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^a 基可與彼此或與 R 基形成環系統；

Ar^a 於各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個非芳族 R 基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至相同矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個 Ar^a 基亦可能經由單鍵之橋接 (bridge) 或選自下列之橋接而接合在一起： $B(R)$ 、 $C(R)_2$ 、 $Si(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR$ 、 $C=C(R)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R)$ 、 $P(R)$ 及 $P(=O)R$ ；

R 於各情況下係相同或不同，且為 H 、 D 、 OH 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 $N(Ar)_2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $C(=O)R^1$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $P(Ar)_2$ 、 $B(Ar)_2$ 、 $B(OR^1)_2$ 、 $Si(Ar)_3$ 、 $Si(R^1)_3$ 、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基，其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $-R^1C=CR^1-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $Ge(R^1)_2$ 、 $Sn(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^1-$ 、 $C=NR^1$ 、 NR^1 、 $P(=O)(R^1)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 SO 或 SO_2 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換，或為各可經一或多個 R^1 基取代之具有 5 至 60 個芳族環原子的芳族或雜芳族環系統、或具有 5 至 60 個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 60 個

芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳烷基或雜芳烷基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^1 基可與彼此形成環系統；

Ar 於各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個非芳族 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至相同矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個 **Ar** 基亦可能經由單鍵之橋接或選自下列之橋接而接合在一起： $B(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^1)$ 、 $P(R^1)$ 及 $P(=O)R^1$ ；

R^1 於各情況下係相同或不同，且為 H 、 D 、 OH 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 $N(Ar^1)_2$ 、 $N(R^2)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、 $P(Ar^1)_2$ 、 $B(Ar^1)_2$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $Si(Ar^1)_3$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基，其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $-R^2C=CR^2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^2-$ 、 NR^2 、 $P(=O)(R^2)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 SO 或 SO_2 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換，或為具有 5 至 40 個芳族環原子及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、或具有 5 至 40 個芳族環原子

及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 40 個芳族環原子及可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^1 基可與彼此形成環系統；

Ar^1 於各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個非芳族 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至相同矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個 Ar^1 基亦可能經由單鍵之橋接或選自下列之橋接而接合在一起： $B(R^2)$ 、 $C(R^2)_2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^2$ 、 $C=C(R^2)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^2)$ 、 $P(R^2)$ 及 $P(=O)R^2$ ；

R^2 於各情況下係相同或不同，且為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 $B(OR^3)_2$ 、 NO_2 、 $C(=O)R^3$ 、 $CR^3=C(R^3)_2$ 、 $C(=O)OR^3$ 、 $C(=O)N(R^3)_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $P(R^3)_2$ 、 $B(R^3)_2$ 、 $N(R^3)_2$ 、 NO_2 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 OSO_2R^3 、 OR^3 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其各可經一或多個 R^3 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $-R^3C=CR^3-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^3$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^3-$ 、 NR^3 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 SO 或 SO_2 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換，或為具有 5 至 40 個芳族環原子及於各情況下可經一或多個

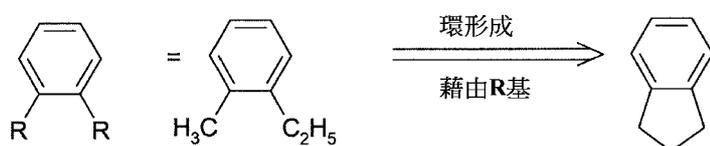
R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統、或具有5至40個芳族環原子及可經一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^2 取代基亦可與彼此形成環系統；

R^3 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組：H，D，F，CN，具有1至20個碳原子之脂族烴基，以及其中一或多個氫原子可經D、F、Cl、Br、I或CN置換及其可經一或多個各具有1至4個碳原子之烷基取代的具有5至30個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^3 取代基可與彼此形成環系統。

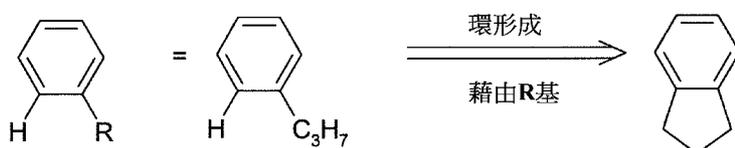
【0015】可較佳的是不超過一個 R^a 基為OH，以及若一個 R^a 基為OH，第二個 R^a 基不為F、Cl、Br、I或CN。

【0016】本發明內容中之相鄰碳原子為彼此直接鍵結的碳原子。此外，在基之定義中的「相鄰基」意指該等基係鍵結至相同碳原子或鍵結至相鄰的碳原子。該等定義相應地適用於尤其是用語「相鄰基團」及「相鄰取代基」。

【0017】本說明內容中，二或更多基可一起形成環之措辭應理解為尤其意指兩個基藉由化學鍵彼此接合（正式消除 (formal elimination) 兩個氫原子）。此係由下圖說明：



此外，然上述措辭亦應理解為意指，若這兩個基中之一者為氫，則第二個基結合至氫原子所鍵結的位置，而形成環。此應以下圖說明：



【0018】本發明內容中之稠合芳基(fused aryl group)、稠合芳族環系統或稠合雜芳族環系統為其中之二或更多芳族基團係沿共用邊緣彼此稠合(即，環合(annelated))的基團，使得例如兩個碳原子屬於該至少兩個芳族或雜芳族環，如例如，萘。反之，例如，萸，並非本發明內容中之稠合芳基，原因係萸中的兩個芳族基團不具有共用邊緣。相應定義適用於雜芳基以及可但不必亦含有雜原子的稠合環系統。

【0019】本發明內容中之芳基含有6至60個碳原子，較佳為6至40個碳原子；本發明內容中之雜芳基含有2至60個碳原子，較佳為2至40個碳原子，及至少一個雜原子，其先決條件係碳原子和雜原子之總和總數為至少5。雜原子較佳係選自N、O及/或S。芳基或雜芳基於此處應理解為意指簡單芳族環(aromatic cycle)，即，苯；或簡單雜芳族環，例如吡啶、嘧啶、噁吩等；或稠合芳基或雜芳基，例如萘、蔥、菲、喹啉、異喹啉等。

【0020】本發明內容中之芳族環系統在環系統中含有6至60個碳原子，較佳為6至40個碳原子。本發明內容中之

雜芳族環系統在環系統中含有1至60個碳原子，較佳為1至40個碳原子，及至少一個雜原子，其先決條件係碳原子和雜原子之總和總數為至少5。雜原子較佳係選自N、O及/或S。本發明內容中之芳族或雜芳族環系統應理解為意指如下之系統：其不一定只含芳基或雜芳基，而是其中亦可能多個芳基或雜芳基被非芳族單元（較佳係少於10%之原子不為H）例如碳、氮或氧原子或者羰基所中斷。例如，諸如9,9'-螺雙芴(9,9'-spirobifluorene)、9,9-二芳芴(9,9-diarylfluorene)、三芳胺(triarylamine)、二芳基醚、芪(stilbene)等之系統因此亦應視為本發明內容中之芳族環系統，還有，其中二或更多芳基係被例如直鏈或環狀烷基或被矽基所中斷的系統。此外，其中二或更多芳基或雜芳基彼此直接鍵結之系統，例如聯苯、聯三苯、聯四苯(quaterphenyl)或聯吡啶(bipyridine)，同樣應視為芳族或雜芳族環系統。

【0021】本發明內容中之環狀的烷基、烷氧基或烷硫基(thioalkoxy group)應理解為意指單環、雙環或多環基團。

【0022】本發明內容中，其中個別氫原子或CH₂基團亦可經上述基團置換的C₁至C₂₀烷基係理解為意指，例如，甲基、乙基、正丙基、異丙基、環丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、三級丁基、環丁基、2-甲基丁基、正戊基、二級戊基、三級戊基、2-戊基、新戊基、環戊基、正己基、二級己基、三級己基、2-己基、3-己基、新己基、

環己基、1-甲基環戊基、2-甲基戊基、正庚基、2-庚基、3-庚基、4-庚基、環庚基、1-甲基環己基、正辛基、2-乙基己基、環辛基、1-雙環[2.2.2]辛基、2-雙環[2.2.2]辛基、2-(2,6-二甲基)辛基、3-(3,7-二甲基)辛基、金剛烷基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、1,1-二甲基-正己-1-基、1,1-二甲基-正庚-1-基、1,1-二甲基-正辛-1-基、1,1-二甲基-正癸-1-基、1,1-二甲基-正十二-1-基、1,1-二甲基-正十四-1-基、1,1-二甲基-正十六-1-基、1,1-二甲基-正十八-1-基、1,1-二乙基-正己-1-基、1,1-二乙基-正庚-1-基、1,1-二乙基-正辛-1-基、1,1-二乙基-正癸-1-基、1,1-二乙基-正十二-1-基、1,1-二乙基-正十四-1-基、1,1-二乙基-正十六-1-基、1,1-二乙基-正十八-1-基、1-(正丙基)環己-1-基、1-(正丁基)環己-1-基、1-(正己基)環己-1-基、1-(正辛基)環己-1-基及1-(正癸基)環己-1-基。烯基係理解為意指，例如，乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、庚烯基、環庚烯基、辛烯基、環辛烯基、或環辛二烯基。炔基係理解為意指，例如，乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基、庚炔基或辛炔基。C₁至C₄₀烷氧基係理解為意指，例如，甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、異丁氧基、二級丁氧基、三級丁氧基或2-甲基丁氧基。

【0023】具有5至60個芳族環原子、較佳為5至40個芳族環原子，以及於各情況下亦可經上述基取代及可經由任

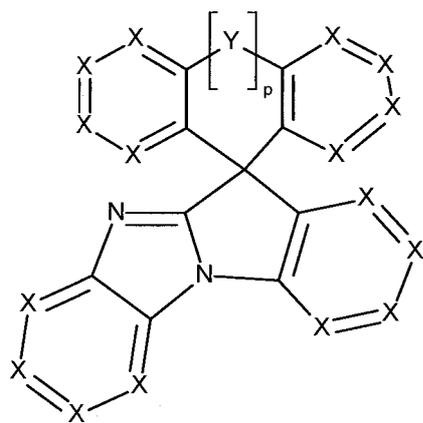
何所希望位置接合至芳族或雜芳族系統之芳族或雜芳族環系統係理解為意指，例如，衍生自下列之基團：苯、萘、蒽、苯并蒽、菲、苯并菲、芘、葑(chrysene)、芘、苜(fluoranthene)、苯并苜(benzofluoranthene)、稠四苯(naphthacene)、稠五苯(pentacene)、苯并芘(benzopyrene)、聯苯、聯伸二苯(biphenylene)、聯三苯(terphenyl)、聯伸三苯(terphenylene)、萸、螺雙萸、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛并萸、順-或反-單苯并茛并萸、順-或反-二苯并茛并萸、參茛并苯(truxene)、異參茛并苯(isotruxene)、螺參茛并苯(spirotruxene)、螺異參茛并苯(spiroisotruxene)、呔喃、苯并呔喃、異苯并呔喃、二苯并呔喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、咪唑、吡啶并咪唑、茛并咪唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻吡、啡噻吡、吡啶、吡啶、咪唑、苯并咪唑、萘并咪唑(naphthimidazole)、菲并咪唑(phenanthrimidazole)、吡啶并咪唑(pyridimidazole)、吡啶并咪唑(pyrazinimidazole)、喹噁啉并咪唑(quinoxalinimidazole)、噁唑、苯并噁唑、萘并噁唑(naphthoxazole)、蒽并噁唑(anthroxazole)、菲并噁唑(phenanthroxazole)、異噁唑、1,2-噁唑、1,3-噁唑、苯并噁唑、嗒吡、苯并嗒吡、噁啶、苯并噁啶、喹噁啉、1,5-二吡蒽(1,5-diazaanthracene)、2,7-二吡芘(2,7-diazapyrene)、2,3-二吡芘(2,3-diazapyrene)、1,6-二吡芘、1,8-二吡芘、

4,5-二吡芘、4,5,9,10-四吡芘(4,5,9,10-tetraazaperylene)、吡咩、啡咩、啡喞咩、啡噻咩、螢紅環(fluorubine)、喏啉(naphthyridine)、吡呖啞(azacarbazole)、苯并呖啉、啡啉(phenanthroline)、1,2,3-三啞、1,2,4-三啞、苯并三啞、1,2,3-喞二啞、1,2,4-喞二啞、1,2,5-喞二啞、1,3,4-喞二啞、1,2,3-噻二啞、1,2,4-噻二啞、1,2,5-噻二啞、1,3,4-噻二啞、1,3,5-三咩、1,2,4-三咩、1,2,3-三咩、四啞、1,2,4,5-四咩、1,2,3,4-四咩、1,2,3,5-四咩、嘍呤、喋啉(pteridine)、吲哚啉(indolizine)及苯并噻二啞。

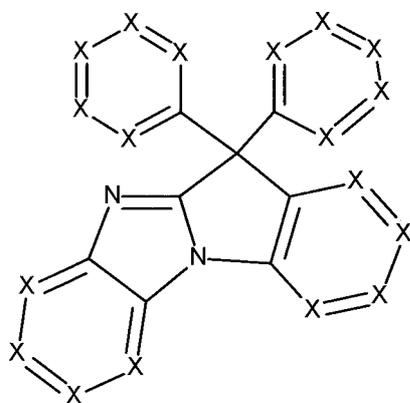
【0024】於一較佳實施態樣中，較佳可為 R^a 基中之至少一者為、較佳係皆為具有5至60個芳族環原子的芳族或雜芳族環系統之情況，及於各情況下可經一或多個 R 基取代。

【0025】於另一變化方案中，可為 R^a 基中之至少一者為、較佳係皆為具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或為具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或為具有2至40個碳原子之烯基或炔基的情況，其各可經一或多個 R 基取代。

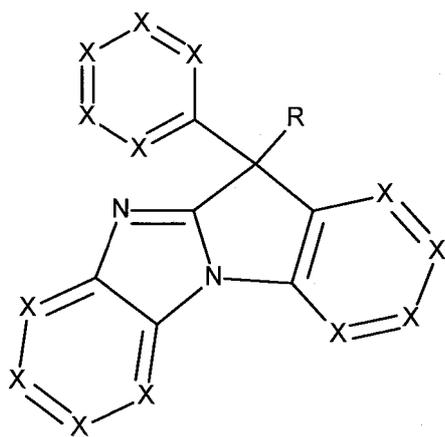
【0026】於較佳構造中，本發明化合物可含有至少一式(IIa)、(IIb)、(IIc)或(IIId)之結構



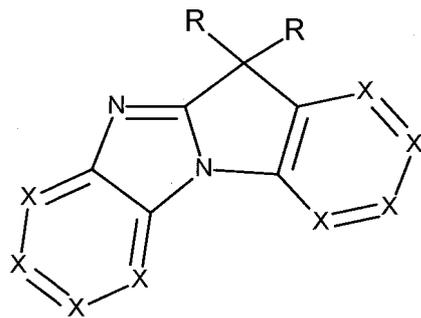
式 (IIa)



式 (IIb)



式 (IIc)



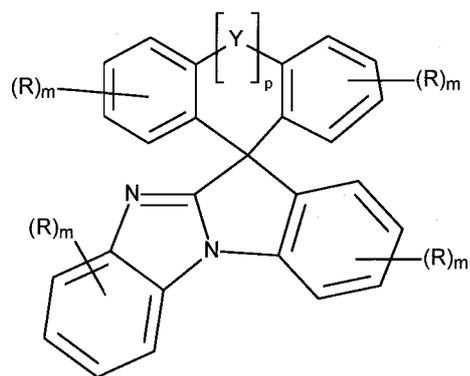
式 (IIId)

其中， p 為 0 或 1， Y 為 $B(R)$ 、 $C(R)_2$ 、 $Si(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR$ 、 $C=C(R)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R)$ 、 $P(R)$ 及 $P(=O)R$ ，較佳為 $B(R)$ 、 $C(R)_2$ 、 $Si(R)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R)$ 、 $P(R)$ 及 $P(=O)R$ ，以及所使用之符號 R 及 X 具有如前文所提供之定義，尤其是用於式 (I) 者。若 $p = 0$ ，所顯示之芳族或雜芳族環之間存在鍵。

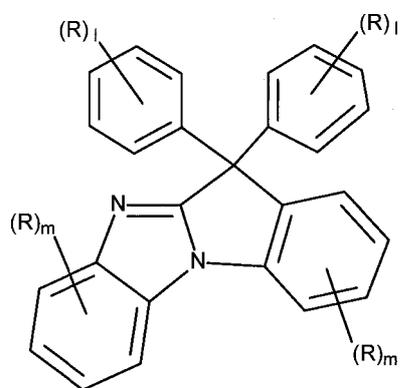
【0027】較佳之情況可為，於式 (I)、(IIa)、(IIb)、(IIc) 或 (IIId) 中，每個環不超過兩個 X 基團為 N ；較佳係每個環至少一個、更佳係至少兩個 X 基團係選自 $C-H$ 及 $C-D$ 。

【0028】較佳地，於式 (I)、(IIa)、(IIb)、(IIc) 或 (IIId) 中，不超過四個、較佳不超過兩個 X 基團為 N ；更佳的，全部 X 基團均為 CR^1 ，其中較佳係 X 表示的 CR^1 基團中之至多 4 者、更佳至多 3 者、尤佳至多 2 者不為 CH 基團。

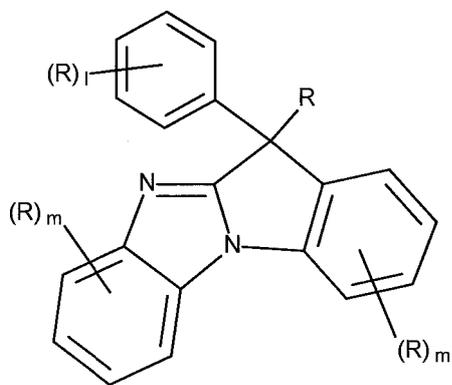
【0029】較佳地，本發明化合物可包含式 (IIIa)、(IIIb)、(IIIc) 及 / 或 (IIId) 之結構



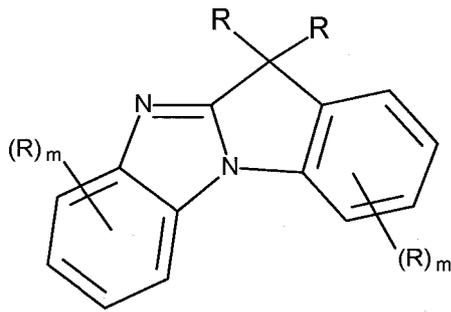
式 (IIIa)



式 (IIIb)



式 (IIIc)



式 (IIIId)

其中， l 為 1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2，以及 m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0、1 或 2，以及所使用之符號 R 、 Y 及 p 具有如前文所提供之定義，尤其是用於式 (I) 及 / 或 (II) 者，其中下標 l 及 m 之總和總數較佳為至多 6、尤佳為至多 4、特別佳為至多 2。若 $p = 0$ ，所顯示之芳族環之間存在鍵。

【0030】可進一步為以下情況：於式 (I)、(IIc)、(IIId)、(IIIc)、(IIIId) 之結構中， R^a 或 R 基中之至少一者，較佳為 R^a 或 R 基中結合至蒽橋 (fluorene bridge) 之一者，為具有 1 至 40 個碳原子、較佳具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基，具有 3 至 40 個碳原子、較佳具有 1 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其可經一或多個 R 或 R^1 基取代，以及較佳為未經取代。此處烷基係優於烷氧基或烷硫基。

【0031】此外，較佳者為具有式 (I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IIId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc) 及 / 或 (IIIId) 之結構的化合物，其特徵在於 R^a 及 / 或 R 基中之至少一者於各情況下獨立地為具有 1 至 40 個碳原子、較佳具有 1 至 10 個碳原子之直

鏈烷基、烷氧基或烷硫基，具有3至40個碳原子、較佳具有1至10個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，或是具有5至40個芳族環原子、較佳具有5至24個芳族環原子、尤佳具有5至18個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個R或R¹基取代；較佳為具有5至40個芳族環原子、較佳具有5至24個芳族環原子、尤佳具有5至18個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個R或R¹基取代；更佳為具有5至40個芳族環原子、較佳具有5至24個芳族環原子、尤佳具有5至18個芳族環原子之芳基或雜芳基，其可經一或多個R或R¹基取代；極特佳為具有6至40個芳族環原子、較佳具有5至24個芳族環原子、尤佳具有5至18個芳族環原子之芳基。

【0032】另外可為以下之情況：式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)及/或(IIId)之雜芳族環系統的取代基R不與該雜芳族環系統之環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係不形成任何稠合環系統。此包括與可鍵結至R基之可能的R¹、R²、R³取代基形成稠合環系統。較佳可為式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)及/或(IIId)中之取代基R不與雜芳族環系統中之環原子形成任何環系統的情況。此包括與可鍵結至R基之可能的R¹、R²、R³取代基形成環系統。

【0033】當可尤其選自R^a、R、R¹、R²、R及/或R³之兩個基彼此形成環系統時，該環系統可為單環或多環之脂族、雜脂族(heteroaliphatic)、芳族或雜芳族。在該情況

下，一起形成環系統之基可相鄰，意指該等基係鍵結至相同碳原子或鍵結至數個彼此直接鍵結之碳原子，或其可進一步自彼此移除。

【0034】於一較佳構造中，本發明化合物可以式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)及/或(IIId)之結構表示。因此，較佳為式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)及/或(IIId)之結構的化合物。較佳的，包含式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)及/或(IIId)之結構的化合物具有不超過5000 g/mol、較佳不超過4000 g/mol、特佳不超過3000 g/mol、尤佳不超過2000 g/mol、最佳不超過1200 g/mol之分子量。

【0035】此外，本發明較佳化合物之一特徵係其可昇華(sublimable)。該等化合物通常具有低於約1200 g/mol之莫耳質量。

【0036】在一更佳實施態樣中，可為上示結構中之R^a及/或R基係選自由下列所組成之群組的情況：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基(branched terphenyl))，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基(branched quaterphenyl))，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基(dibenzothienyl)，芘基(pyrenyl)，三吡基(triazinyl)，咪唑基，苯并咪唑基(benzimidazolyl)，苯并噁唑基(benzoxazolyl)，苯并噻

啞基(benzothiazolyl)，1-、2-、3-或4-呋啞基，1-或2-萘基，蔥基(較佳為9-蔥基(9-anthracenyl))，菲基(phenanthrenyl)及/或聯伸三苯基(triphenylenyl)，其各可經一或多個R或R¹基取代，萸基及呋啞基除外，但較佳為未經取代；特佳者為螺雙萸基、萸基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、蔥基、菲基、聯伸三苯基。

【0037】當X為CR或當芳族及/或雜芳族基團係經取代基R取代時，該等取代基R較佳係選自由下列所組成之群組：H、D、F、CN、N(Ar)₂、C(=O)Ar、P(=O)(Ar)₂、具有1至10個碳原子之直鏈烷基或烷氧基或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有2至10個碳原子之烯基，其各可經一或多個R¹基取代，其中一或多個非相鄰CH₂基團可經O置換，以及其中一或多個氫原子可經D或F置換，具有5至24個芳族環原子以及於各情況下可經一或多個R¹基取代但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統，或為具有5至25個芳族環原子及可經一或多個R¹基取代之芳烷基(aralkyl)或雜芳烷基(heteroaralkyl)；同時，鍵結至相同碳原子或至相鄰碳原子之兩個取代基R視情況可能形成可經一或多個R¹基取代之單環或多環之脂族、芳族或雜芳族環系統，其中Ar於各情況下係相同或不同，且為具有5至40個芳族環原子以及於各情況下可經一或多個R¹基取代之芳族或雜芳族環系統、具有5至40個芳族環原子以及可經一或多個R¹基取代之芳氧基(aryloxy group)、或具有5至40個芳族環原子及於各情況下可經一或多個R¹基取代之

芳烷基，其中二或更多個較佳係相鄰之 R^1 取代基可視情況形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統，較佳為單環或多環之脂族環系統，其可經一或多個 R^2 基取代，其中符號 R^2 可具有前文所提供之定義，尤其是用於式(I)者。較佳的，Ar於各情況下係相同或不同，且為具有5至24個、較佳為5至12個芳族環原子及其於各情況下可經一或多個 R^2 基取代、但較佳係未經取代之芳基或雜芳基。

【0038】適用之Ar基團的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基及1-、2-、3-或4-呋唑基，其各可經一或多個 R^1 基取代，但較佳係未經取代。

【0039】更佳的，該等取代基R係選自由下列所組成之群組：H、D、F、CN、 $N(Ar)_2$ ，具有1至8個碳原子、較佳具有1、2、3或4個碳原子之直鏈烷基，或具有3至8個碳原子、較佳具有3或4個碳原子之支鏈或環狀烷基，或具有2至8個碳原子、較佳具有2、3或4個碳原子之烯基，其各可經一或多個 R^1 基取代，但較佳係未經取代；或具有6至24個芳族環原子、較佳6至18個芳族環原子、更佳6至13個芳族環原子以及在各情況下可經一或多個非芳族 R^1 基取代、但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統；同時，視情況可能鍵結至相同碳原子或至相鄰碳原子之兩個取代基

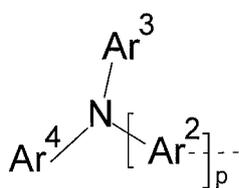
R係形成單環或多環之脂族環系統(其可經一或多個R¹基取代，但較佳係未經取代)，其中Ar可具有上述所提供之定義。

【0040】最佳的，R取代基係選自由下列所組成之群組：H以及具有6至18個芳族環原子、較佳具有6至13個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其各可經一或多個非芳族R¹基取代，但較佳係未經取代。

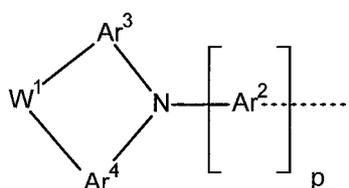
【0041】較佳可為化合物包含電洞傳輸基團的情況，其中較佳係R^a基中之一者或R基中之一者包含且較佳為電洞傳輸基團(hole transport group)。

【0042】在另一實施態樣中，R^a及/或R基中之一者為選自下列之基團：芳胺基(arylamino group)，較佳為二芳胺基或三芳胺基；雜芳胺基(heteroarylamino group)，較佳為二雜芳胺基或三雜芳胺基；吡啶基；較佳者為吡啶基。該等基團亦可視為電洞傳輸基團(hole-transporting group)。

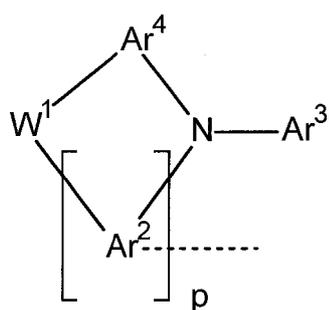
【0043】較佳可為電洞傳輸基團包含基團及較佳為選自式(H-1)至(H-3)之基團的情況



式 (H-1)



式 (H-2)



式 (H-3)

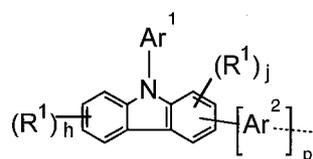
其中，虛線鍵標記附接位置，以及

Ar^2 、 Ar^3 、 Ar^4 各自獨立地為具有 6 至 40 個碳原子之芳族環系統或具有 3 至 40 個碳原子之雜芳族環系統，其各可經一或多個 R^1 基取代；

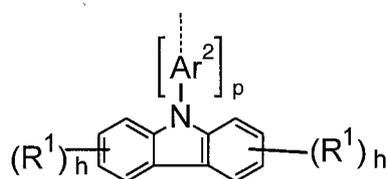
p 為 0 或 1，以及

W^1 為鍵、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $N-Ar^1$ 、 BR^1 、 PR^1 、 POR^1 、 SO 、 SO_2 、 Se 、 O 或 S ，較佳為 $C(R^1)_2$ 、 $N-Ar^1$ 、 O 或 S ，其中，符號 Ar^1 及 R^1 具有前文所提供較佳係用於式 (I) 及 / 或 (II) 之定義。較佳的，排除 $N-N$ 鍵之存在，因此，例如於 $W^1=NR$ 或 NAr 之情況，下標 $p=1$ 。

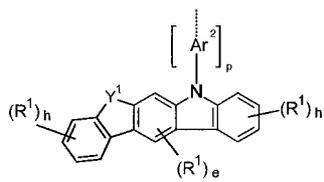
【0044】另外可為電洞傳輸基團包含基團及較佳為選自式 (H-4) 至 (H-26) 之基團的情況



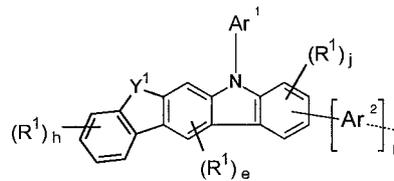
式 (H-4)



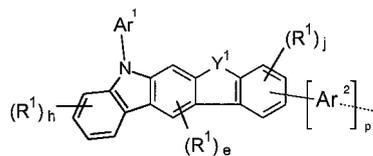
式 (H-5)



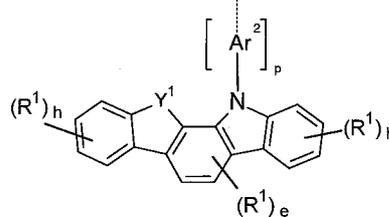
式 (H-6)



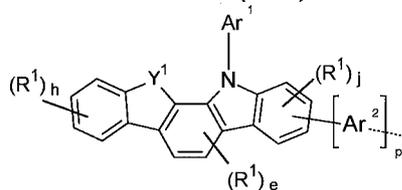
式 (H-7)



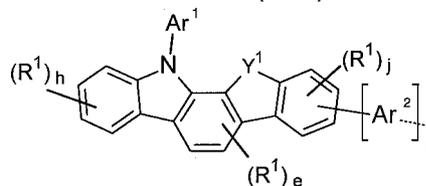
式 (H-8)



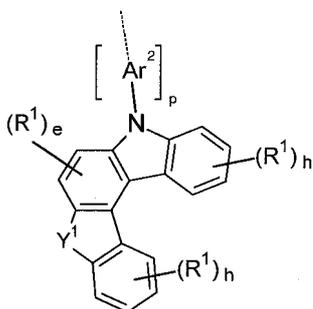
式 (H-9)



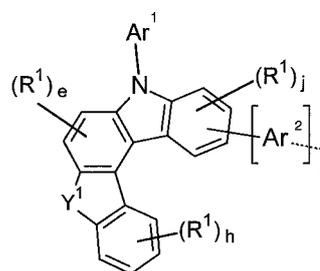
式 (H-10)



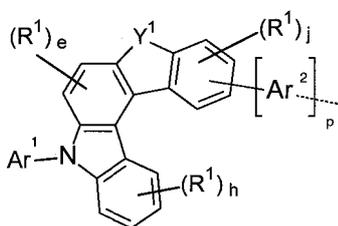
式 (H-11)



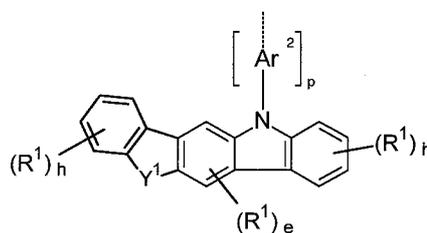
式 (H-12)



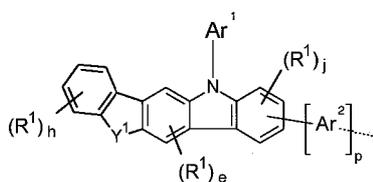
式 (H-13)



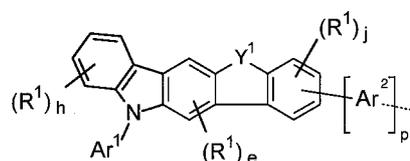
式 (H-14)



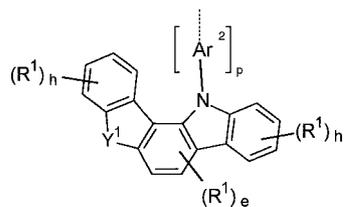
式 (H-15)



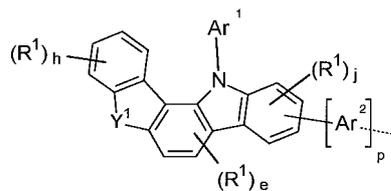
式 (H-16)



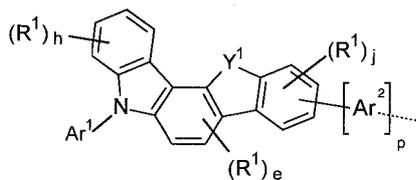
式 (H-17)



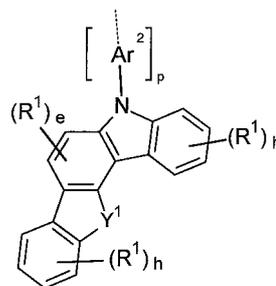
式 (H-18)



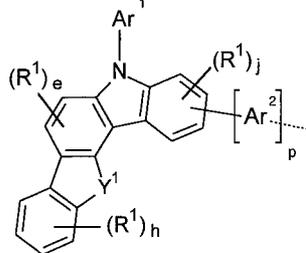
式 (H-19)



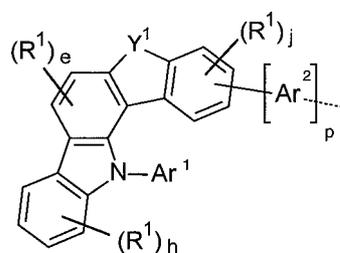
式 (H-20)



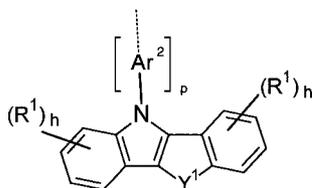
式 (H-21)



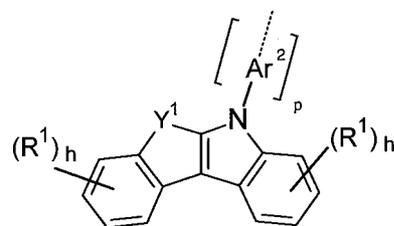
式 (H-22)



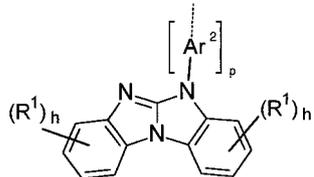
式 (H-23)



式 (H-24)



式 (H-25)



式 (H-26)

其中， Y^1 為O、S、 $C(R^1)_2$ 或 NAr^1 ，虛線鍵標記附接位置， e 為0、1或2， j 為0、1、2或3， h 為0、1、2、3或4， p 為0或1， Ar^2 具有前文所提供之定義，尤其用於式(H-1)或(H-

2)者，以及 Ar^1 及 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 及 / 或 (II) 者。

【0045】較佳的，排除 N-N 鍵之存在，因此，例如於式 (H-5)、(H-6)、(H-9)、(H-12)、(H-15)、(H-18)、(H-21)、(H-24)、(H-25) 及 (H-26) 中之 $\text{Y} = \text{NAr}$ 的情況，下標 p 較佳為 1。

【0046】於基團 (H-1) 至 (H-26) 中，較佳者為呋啞基，尤其是基團 (H-4) 至 (H-26)。

【0047】較佳的， Ar^2 基團可與芳族或雜芳族基或者式 (H-1) 至 (H-26) 之 Ar^2 基團可鍵結的氮原子形成貫穿共軛 (through-conjugation)。

【0048】在本發明一更佳實施態樣中， Ar^2 為具有 5 至 14 個芳族或雜芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，較佳為具有 6 至 12 個碳原子之芳族環系統，及其可經一或多個 R^1 基取代，但較佳係未經取代，其中 R^1 可具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 者。更佳的， Ar^2 為具有 6 至 10 個芳族環原子之芳族環系統或具有 6 至 13 個雜芳族環原子之雜芳族環系統，其各可經一或多個 R^1 基取代，但較佳係未經取代，其中 R^1 可具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 者。

【0049】進一步較佳的，式 (H-1) 至 (H-26) 中所示之符號 Ar^2 尤其為具有 5 至 24 個環原子、較佳為 6 至 13 個環原子、更佳為 6 至 10 個環原子之芳基或雜芳基，以使芳族或雜芳族環系統之芳族或雜芳族基團直接鍵結至其他基團之個別原子，即，經由該芳族或雜芳族基團之原子。

【0050】可進一步為以下情況：就用作電洞傳輸材料或主體材料之化合物而言，式(H-1)至(H-26)中所示之 Ar^2 基團包含具有不超過兩個稠合芳族及/或雜芳族環之芳族環系統，較佳不包含任何稠合芳族或雜芳族環系統。因此，萘基結構優於蔥結構。此外，萘基、螺雙萘基、二苯并呋喃基及/或二苯并噻吩基結構優於萘基結構。特佳者為無稠合之結構，例如苯基、聯苯基(biphenyl)、聯三苯基(terphenyl)及/或聯四苯基(quaterphenyl)結構。

【0051】適用之芳族或雜芳族環系統 Ar^2 的實例係選自由下列所組成之群組：鄰伸苯基、間伸苯基、或對伸苯基，鄰聯伸二苯基、間聯伸二苯基或對聯伸二苯基(para-biphenylene)，聯伸三苯基(尤其是支鏈聯伸三苯基(branched terphenylene))，聯伸四苯基(尤其是支鏈聯伸四苯基(branched quaterphenylene))，伸萘基(fluorenylene)，伸螺雙萘基(spirobifluorenylene)，伸二苯并呋喃基(dibenzofuranylene)，伸二苯并噻吩基(dibenzothienylene)及伸咔唑基(carbazolylene)，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

【0052】另外可為式(H-1)至(H-26)中所示之 Ar^2 基團尤其具有不超過1個氮原子、較佳不超過2個雜原子、特佳不超過一個雜原子、尤佳無雜原子的情況。

【0053】在本發明一更佳實施態樣中， Ar^3 及/或 Ar^4 於各情況下係相同或不同，且為具有6至24個芳族環原子、較佳為6至18個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，以及

更佳為具有6至12個芳族環原子之芳族環系統或具有6至13個芳族環原子之雜芳族環系統，其各可經一或多個 R^1 基取代，但較佳係未經取代，其中， R^1 可具有前文所提供之定義，尤其是式(I)及/或(II)中者。適用之 Ar^3 及/或 Ar^4 基團的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并咪喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基及1-、2-、3-或4-咪唑基，其各可經一或多個 R^1 基取代，但較佳係未經取代。

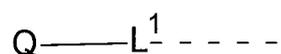
【0054】較佳的， R^1 基不與芳基或雜芳基 Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 及/或 Ar^4 中可與式(H-1)至(H-26)中的 R^1 基鍵結的環原子形成稠合環系統(fused ring system)。此包括與可鍵結至 R^1 或 R^2 基之可能的取代基 R^2 、 R^3 形成稠合環系統。

【0055】較佳可為化合物包含電子傳輸基團的情況，其中較佳係 R^a 基中之一者或 R 基中之一者包含且較佳為電子傳輸基團。電子傳輸基團在該技術領域中已廣為人知，且促進化合物傳輸及/或傳導電子的能力。

【0056】此外，以下化合物展現出驚人的優點：包含至少一式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)之結構的化合物或其較佳實施態樣，其中 R^a 及/或 R 基包含選自吡啶、嘧啶、吡嗪、噻嗪、三嗪、喹啉、喹啉、喹啉、異喹啉、咪唑及/或苯并咪唑之群組

的至少一結構，特佳為嘧啶、三吡及喹啉之。

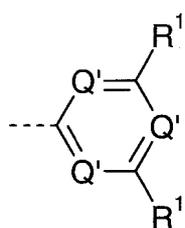
【0057】於本發明之一較佳構造中，可為 R^a 基中之一者或 R 基中之一者包含及較佳為可以式 (QL) 表示之電子傳輸基團的情況



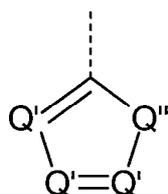
式 (QL)

其中， L^1 表示鏈或者具有 5 至 40 個、較佳為 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統，以及 Q 為電子傳輸基團，其中 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 者。

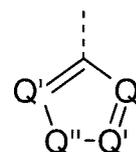
【0058】較佳地，尤其是式 (QL) 中所示之 Q 基團，或者電子傳輸基團，可為選自式 (Q-1)、(Q-2)、(Q-4)、(Q-3)、(Q-5)、(Q-6)、(Q-7)、(Q-8)、(Q-9) 及 / 或 (Q-10) 之結構



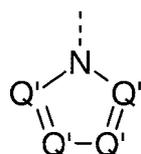
式 (Q-1)



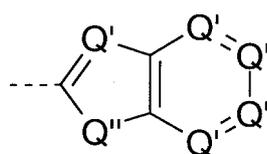
式 (Q-2)



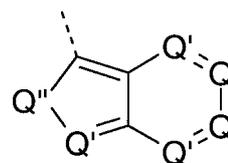
式 (Q-3)



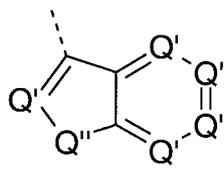
式 (Q-4)



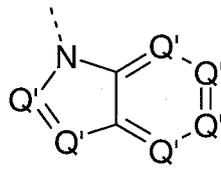
式 (Q-5)



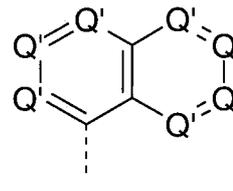
式 (Q-6)



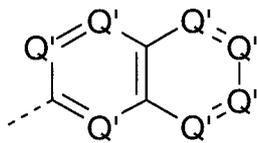
式 (Q-7)



式 (Q-8)



式 (Q-9)



式 (Q-10),

其中，虛線鍵標記附接位置，

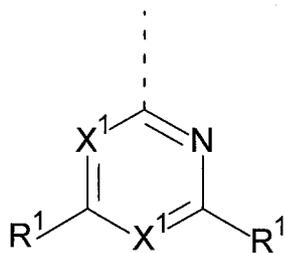
Q' 於各情況下係相同或不同，且為 CR^1 或 N ，以及

Q'' 為 NR^1 、 O 或 S ；

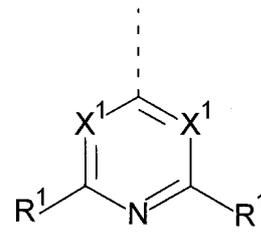
其中，至少一 Q' 為 N ，以及

R^1 係如前文所定義，尤其於式 (I) 中者。

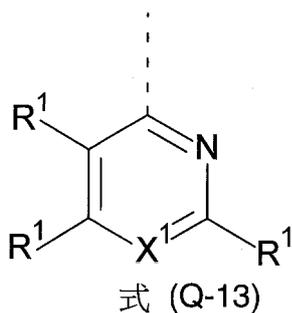
【0059】此外，尤其是式 (QL) 中所示之 Q 基團，或者電子傳輸基團，可較佳地選自式 (Q-11)、(Q-12)、(Q-13)、(Q-14) 及 / 或 (Q-15) 之結構



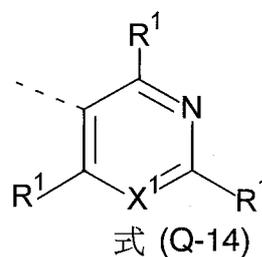
式 (Q-11)



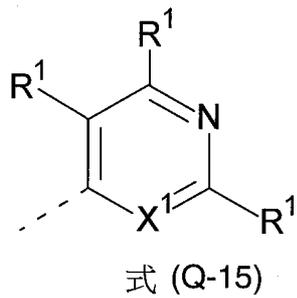
式 (Q-12)



式 (Q-13)

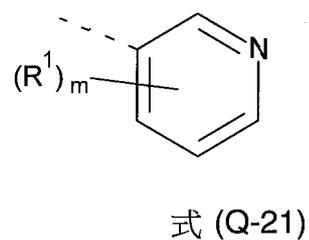
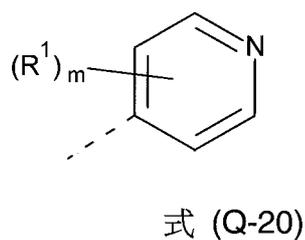
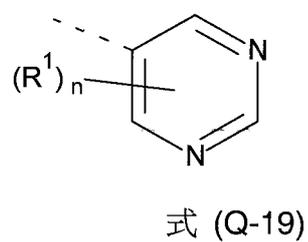
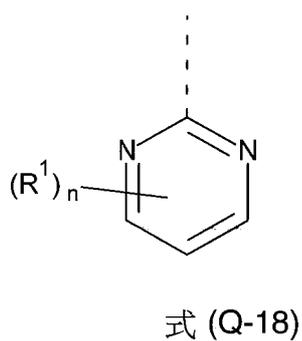
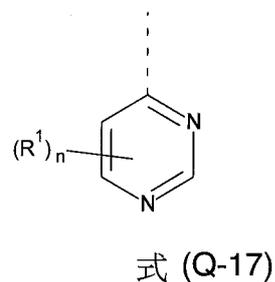
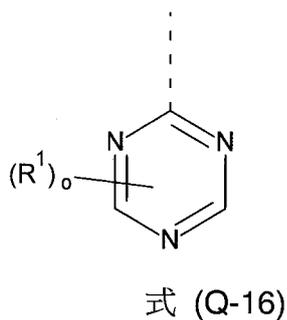


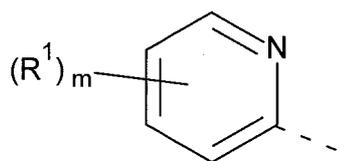
式 (Q-14)



其中，符號 R^1 具有前文所提供尤其用於式(I)之定義， X^1 為N或 CR^1 ，而虛線鍵標記附接位置，其中， X^1 較佳為氮原子。

【0060】在另一實施態樣中，尤其是式(QL)中所示之Q基團，或者電子傳輸基團，可為選自式(Q-16)、(Q-17)、(Q-18)、(Q-19)、(Q-20)、(Q-21)及/或(Q-22)之結構

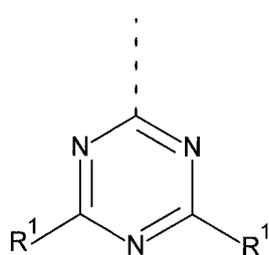




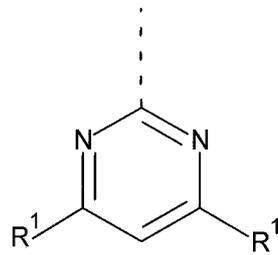
式 (Q-22)

其中，符號 R^1 具有前文詳述尤其用於式 (I) 之定義，虛線鍵標記附接位置，以及 m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1 或 2， n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，以及 o 為 0、1 或 2，較佳為 1 或 2。此處較佳者為式 (Q-16)、(Q-17)、(Q-18) 及 (Q-19) 之結構。

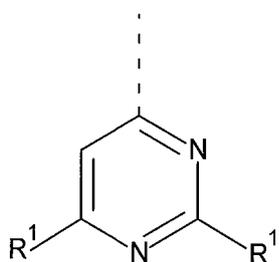
【0061】在另一實施態樣中，尤其是式 (QL) 中所示之 Q 基團，或者電子傳輸基團，可選自式 (Q-23)、(Q-24) 及 / 或 (Q-25) 之結構



式 (Q-23)



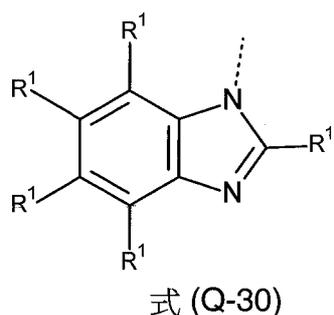
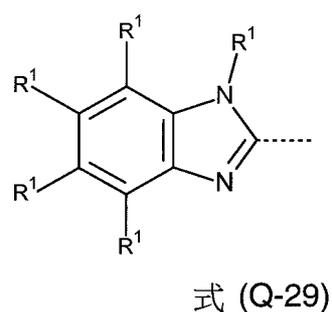
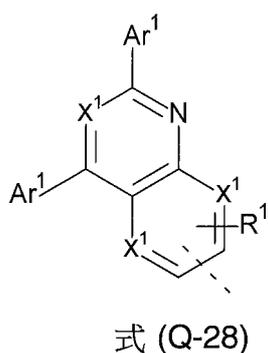
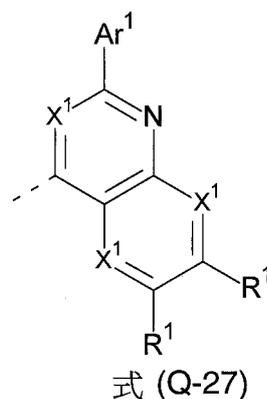
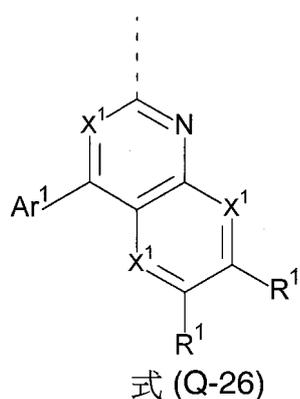
式 (Q-24)



式 (Q-25)

其中，符號 R^1 具有前文所列尤其用於式 (I) 之定義，以及虛線鍵標記附接位置。

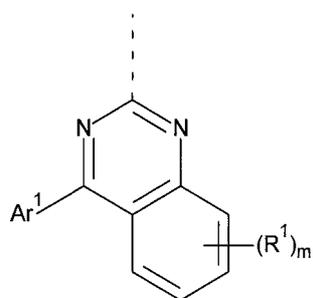
【0062】在另一實施態樣中，尤其是式(QL)中所示之Q基團，或者電子傳輸基團，可選自式(Q-26)、(Q-27)、(Q-28)、(Q-29)及/或(Q-30)之結構



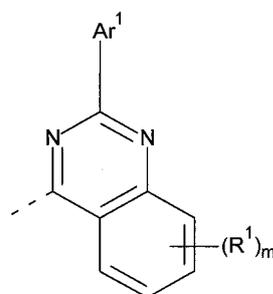
其中，符號 Ar^1 及 R^1 具有前文所提供尤其用於式(I)之定義， X^1 為 N 或 CR^1 ，以及虛線鍵標記附接位置。較佳的，於式(Q-26)、(Q-27)及(Q-28)之結構中，正好一個 X^1 為氮原子。

【0063】較佳的，尤其是式(QL)中所示之Q基團，或

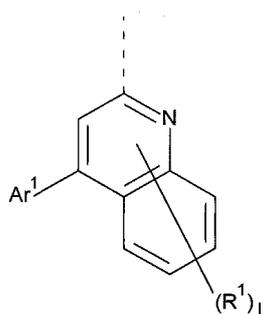
者電子傳輸基團，可選自式(Q-31)、(Q-32)、(Q-33)、(Q-34)、(Q-35)、(Q-36)、(Q-37)、(Q-38)、(Q-39)、(Q-40)、(Q-41)、(Q-42)、(Q-43)及/或(Q-44)之結構



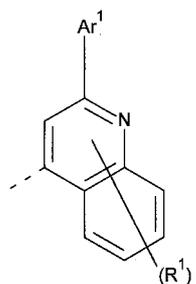
式(Q-31)



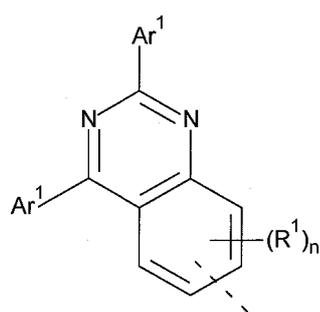
式(Q-32)



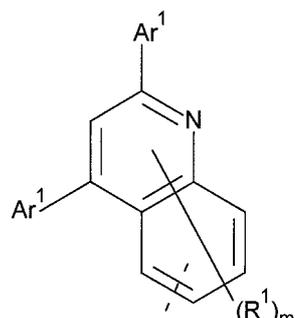
式(Q-33)



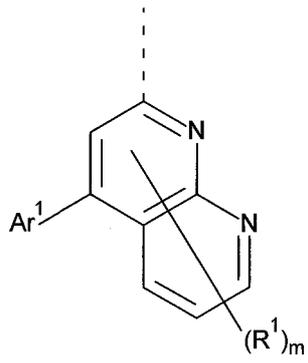
式(Q-34)



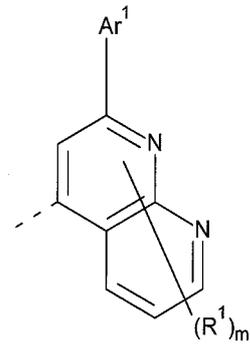
式(Q-35)



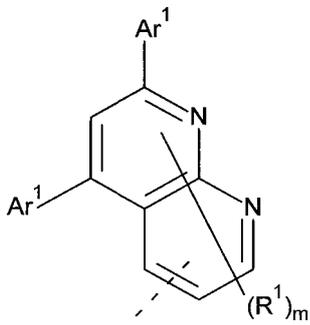
式(Q-36)



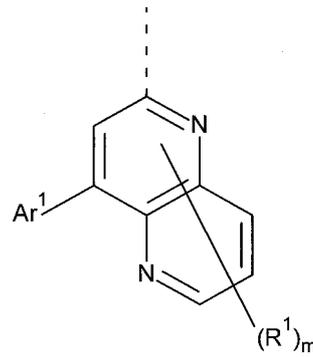
式 (Q-37)



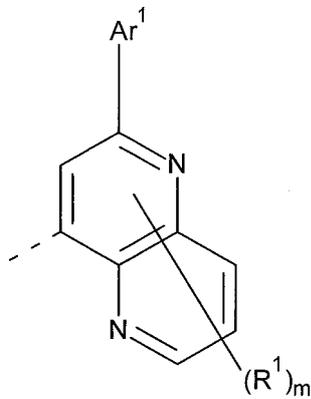
式 (Q-38)



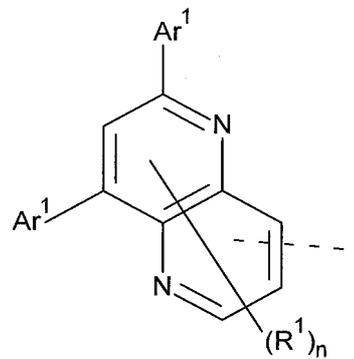
式 (Q-39)



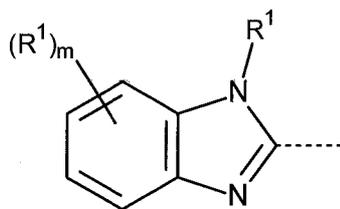
式 (Q-40)



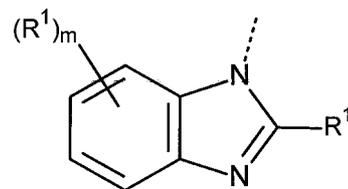
式 (Q-41)



式 (Q-42)



式 (Q-43)



式 (Q-44)

其中，符號 Ar^1 及 R^1 具有前文所列尤其用於式 (I) 之定義，

虛線鍵標記附接位置，以及 m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1 或 2， n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0 或 1， n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，以及 l 為 1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2。

【0064】較佳的，符號 Ar^1 為芳基或雜芳基，因而芳族或雜芳族環系統之芳族或雜芳族基團係直接(即，經由該芳族或雜芳族基團之原子)鍵結至其他基團之個別原子，例如上示(H-1)至(H-26)或(Q-16)至(Q-34)基團之碳或氮原子。

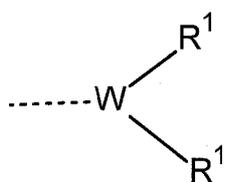
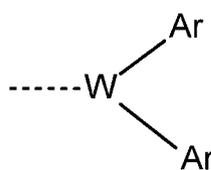
【0065】在本發明一更佳實施態樣中， Ar^1 於各情況下係相同或不同，且為具有 6 至 24 個芳族環原子、較佳具有 6 至 18 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，以及更佳為具有 6 至 12 個芳族環原子之芳族環系統或具有 6 至 13 個芳族環原子以及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代但較佳係未經取代之雜芳族環系統，其中， R^2 可具有前文提供之定義，尤其於式(I)中者。適用之 Ar^1 基團的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基及1-、2-、3-或4-呋唑基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

【0066】有利的，式(H-1)至(H-26)或(Q-16)至(Q-34)中之 Ar^1 為具有 6 至 12 個芳族環原子及可經一或多個 R^2 基取

代但較佳係未經取代之芳族環系統，其中， R^2 可具有前文詳述之定義，尤其用於式(I)者。

【0067】較佳的，式(H-1)至(H-26)或(Q-1)至(Q-34)中之 R^1 基不與雜芳基或 Ar^1 及/或 Ar^2 基團中 R^1 基所鍵結的環原子形成稠合環系統。此包括與可鍵結至 R^1 或 R^2 基之可能的取代基 R^2 、 R^3 形成稠合環系統。

【0068】於一較佳構造中，可為以下情況：式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)或(IIId)中至少一個 R^a 或 R 基為可以式 L^1-Z 表示之基團，其中， L^1 表示鍵或者具有5至40個、較佳為5至30個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統， Z 為 R^1 、 Ar 或式 Z^a 或 Z^b 之基團，其中符號 Ar 及 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)者，以及 Z^a 或 Z^b 為

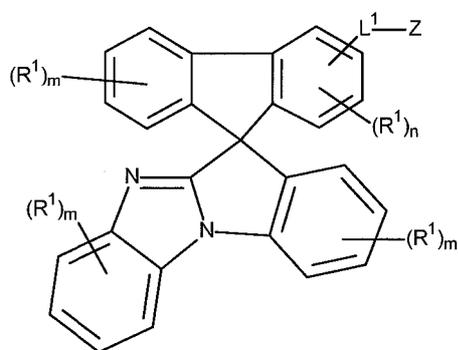
式 Z^a 式 Z^b

其中， W 於各情況下係相同或不同，且為具有5至30個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統、氮原子、硼原子、磷原子或氧化磷基團(phosphine oxide group)，虛線鍵標記附接位置，以及符號 Ar 及 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)者。

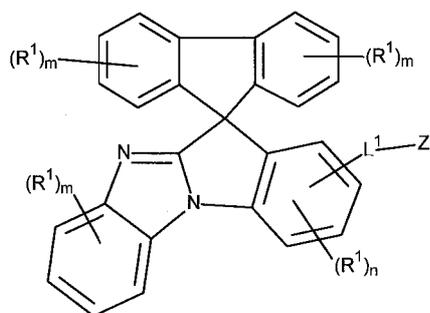
【0069】可進一步為以下情況：式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)或(IIId)中至少一 R^a 或 R

基，較佳係全部 R^a 或 R 基，為可以如前文及下文詳述之式 R^1 之基表示的基團。

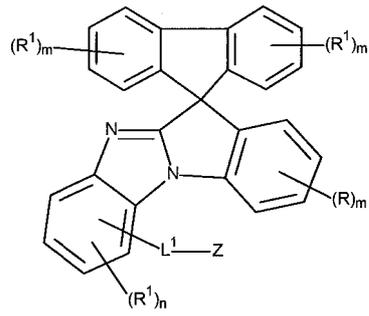
【0070】較佳的，本發明化合物可包含式 (IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe)、(IVf)、(IVg)、(IVh)、(IVi)、(IVj)、(IVk)、(IVl)、(IVm)、(IVn)、(IVo)、(IVp)、(IVq)、(IVr)、(IVs)、(IVt)、(IVu)、(IVv)、(IVw)、(IVx) 或 (IVy) 之結構



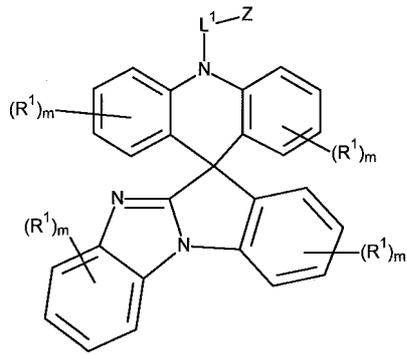
式 (IVa)



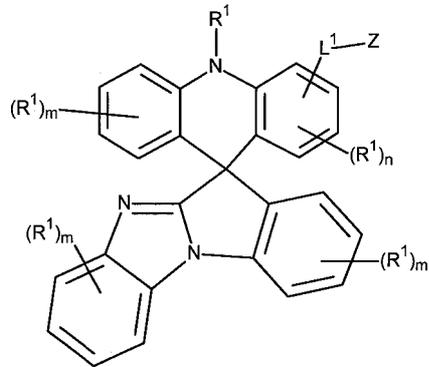
式 (IVb)



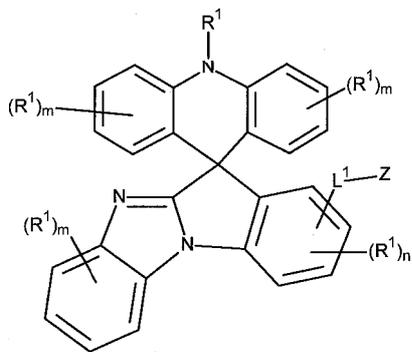
式 (IVc)



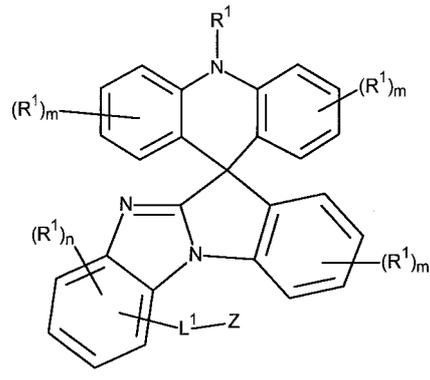
式 (IVd)



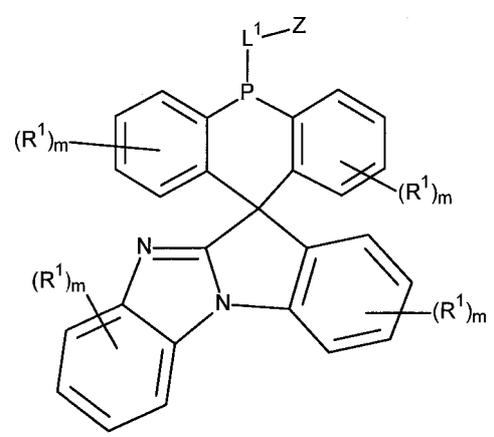
式 (IVe)



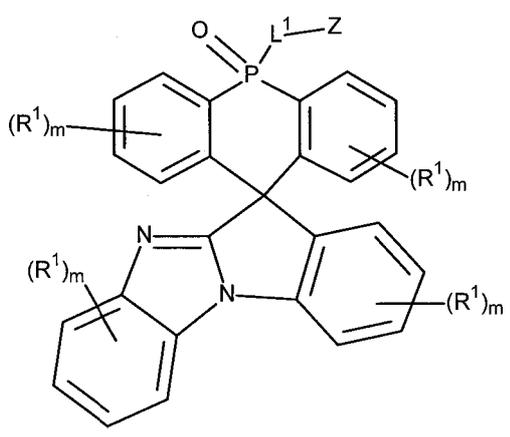
式 (IVf)



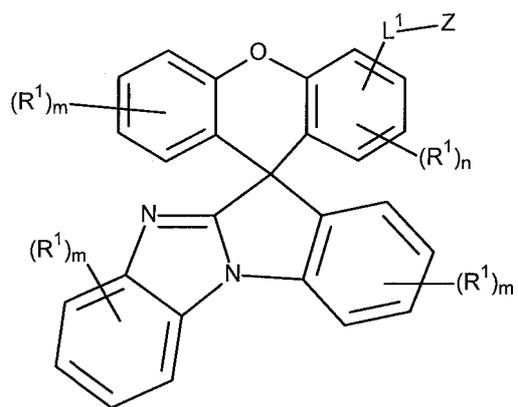
式 (IVg)



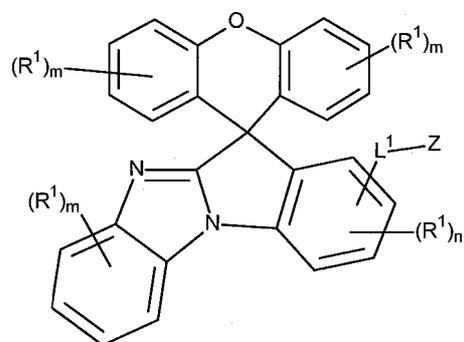
式 (IVh)



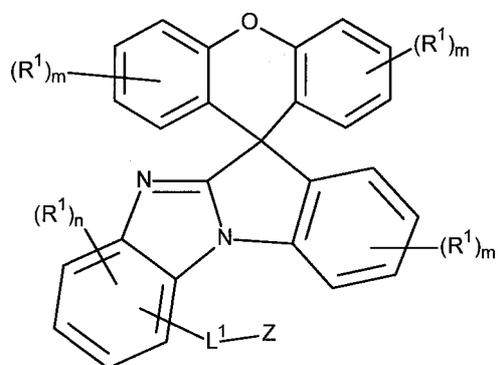
式 (IVi)



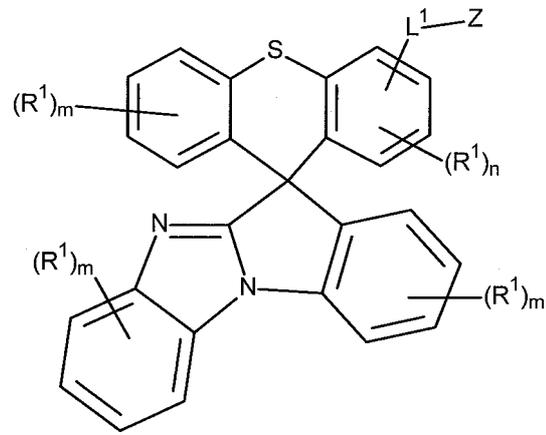
式 (IVj)



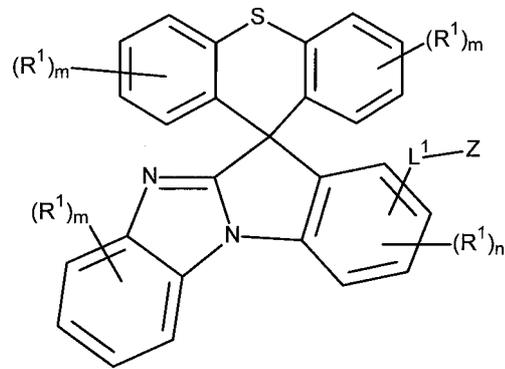
式 (IVk)



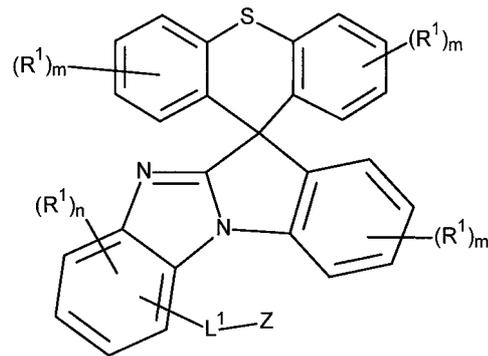
式 (IVl)



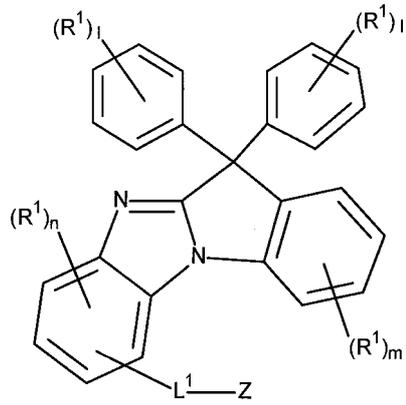
式 (IVm)



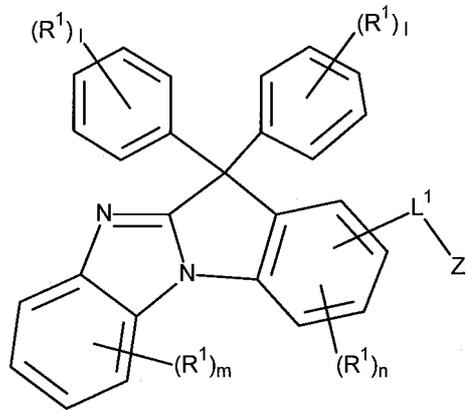
式 (IVn)



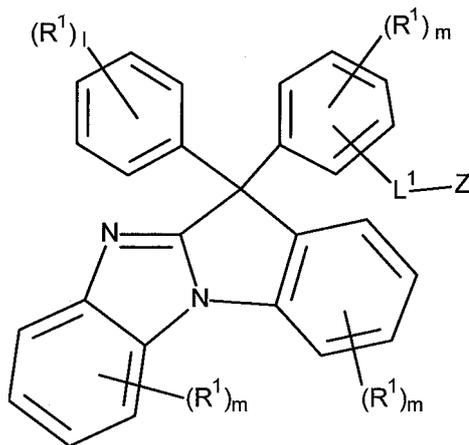
式 (IVo)



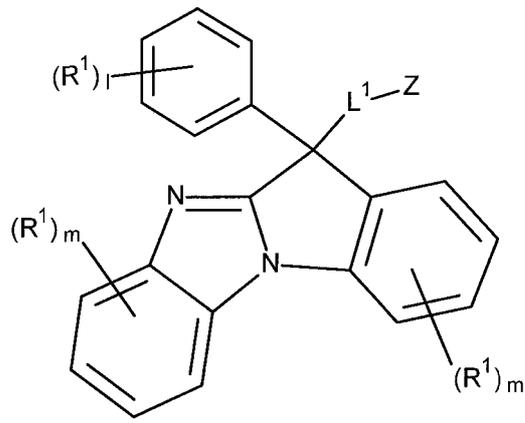
式 (IVp)



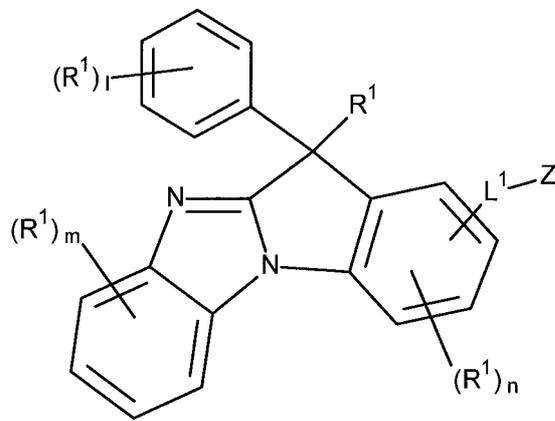
式 (IVq)



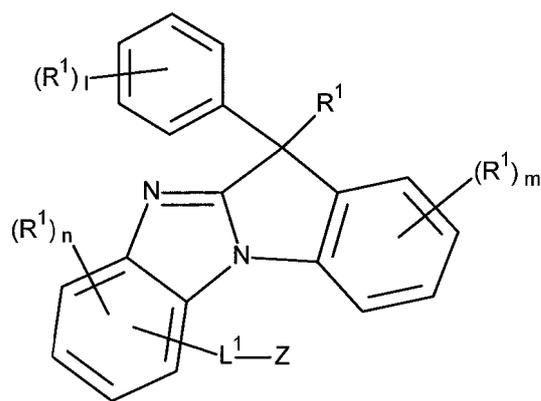
式 (IVr)



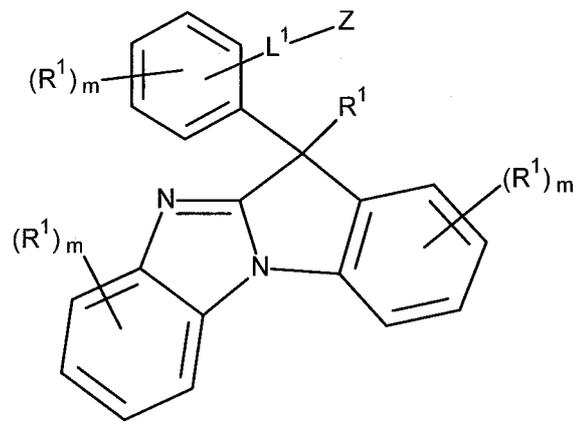
式 (IVs)



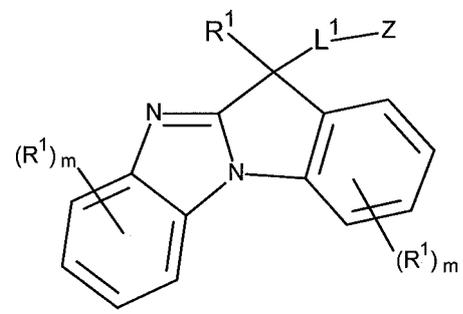
式 (IVt)



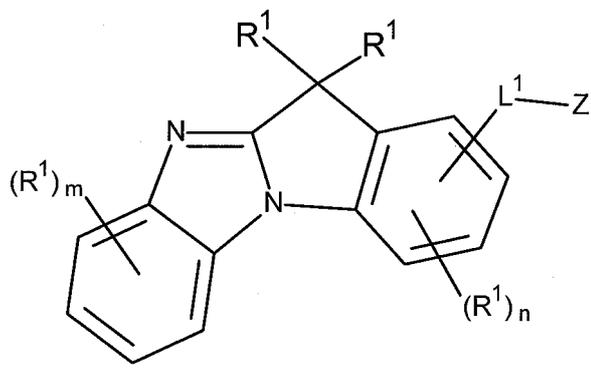
式 (IVu)



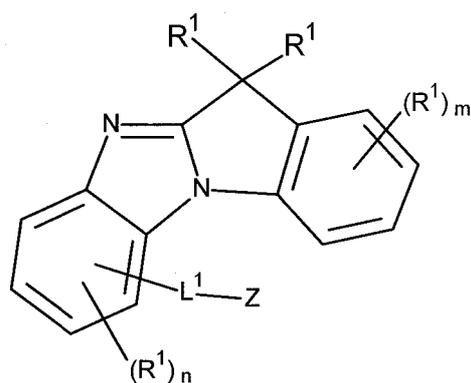
式 (IVv)



式 (IVw)



式 (IVx)

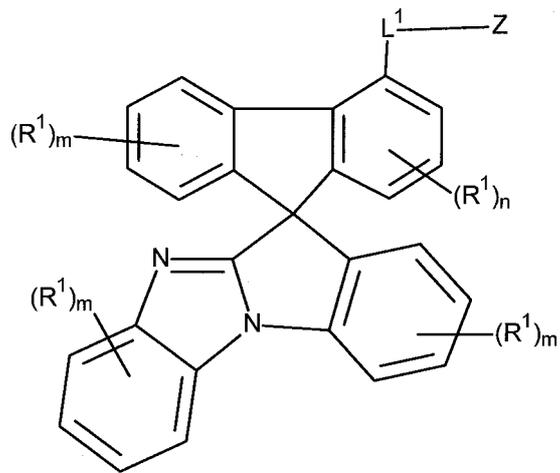


式 (IVy)

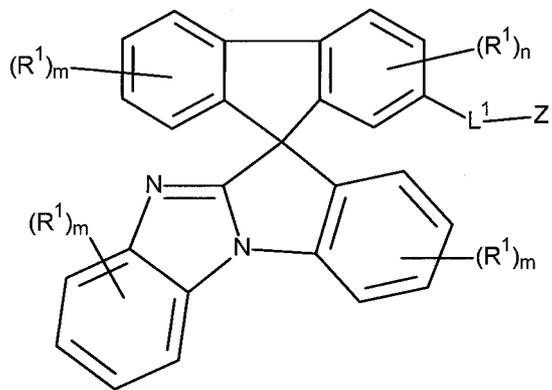
其中， l 為 1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2， m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0、1 或 2，以及 n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，更佳為 0 或 1，以及所使用之符號 R^1 、 L^1 及 Z 具有前文提供之定義，尤其用於式 (I) 及 / 或 (L^1 - Z) 者，其中下標 l 、 m 及 n 之總和總數較佳為至多 6，尤佳為至多 4 及特佳為至多 2。

【0071】可進一步為以下情況：於式 (IVt) 至 (IVy) 之結構中， R^1 基中之至少一者，較佳為 R^1 基中結合至蒽橋 (fluorene bridge) 之一者，為具有 1 至 40 個碳原子、較佳具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基，具有 3 至 40 個碳原子、較佳具有 1 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其可經一或多個 R^2 基取代，以及較佳為未經取代。此處烷基係優於烷氧基或烷硫基。

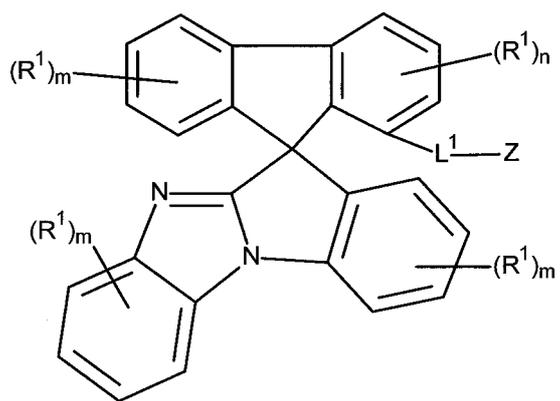
【0072】較佳的，本發明化合物可包含式 (Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)、(Vf)、(Vg) 或 (Vh) 之結構



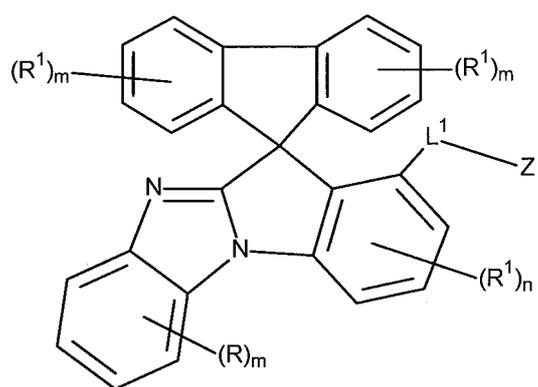
式 (Va)



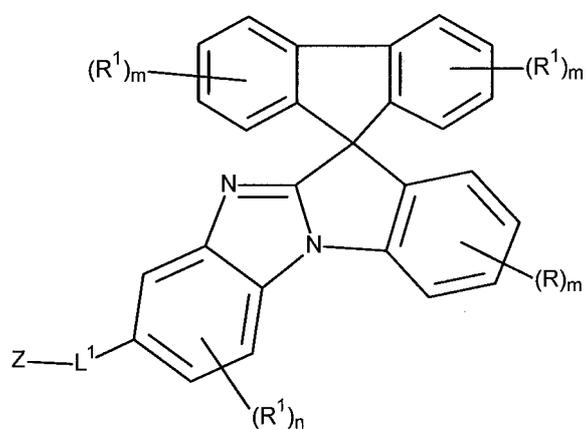
式 (Vb)



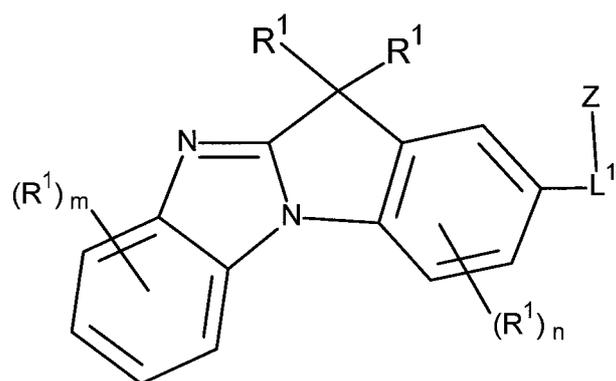
式 (Vc)



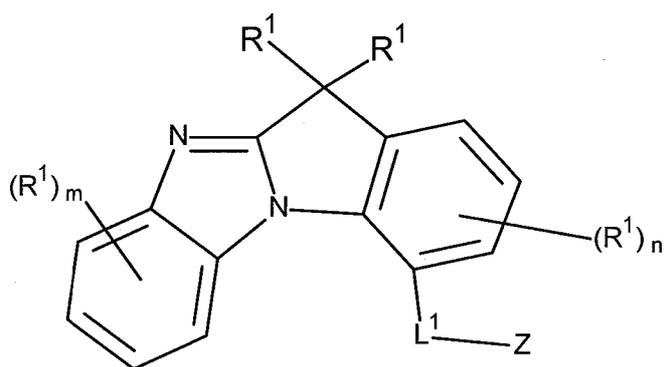
式 (Vd)



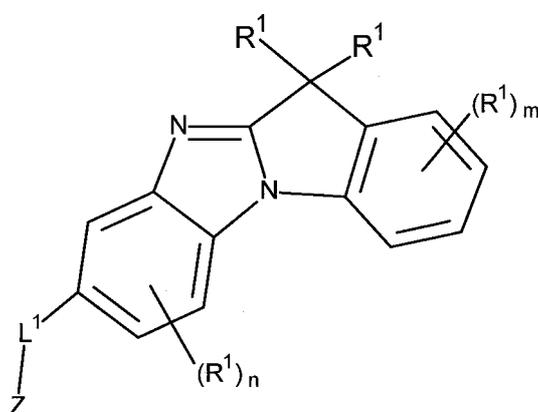
式 (Ve)



式 (Vf)



式 (Vg)



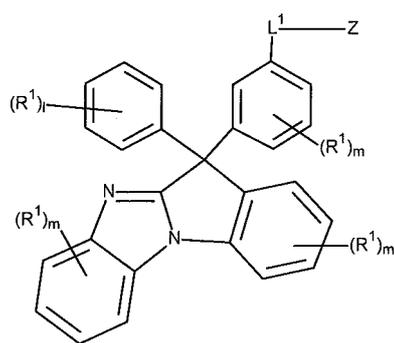
式 (Vh)

其中， m 為0、1、2、3或4，較佳為0、1、2或3，更佳為0、1或2，以及 n 為0、1、2或3，較佳為0、1或2，更佳為0或1，以及所使用之符號 R^1 、 L^1 及 Z 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)及/或(L^1-Z)者，其中下標 m 及 n 之總和總數較佳為至多5，尤佳為至多3，及特佳為至多1。

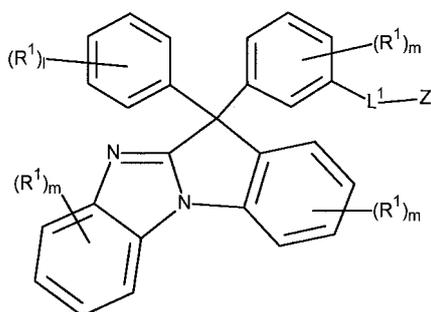
【0073】可進一步為以下情況：式(Vf)、(Vg)或(Vh)之結構中， R^1 基中之至少一者，較佳為 R^1 基中結合至萸橋之一者，為具有1至40個碳原子、較佳具有1至10個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基，具有3至40個碳原子、較佳具有1至10個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其可經一或多個 R^2 基取代，以及較佳為未經取代。此

處烷基係優於烷氧基或烷硫基。

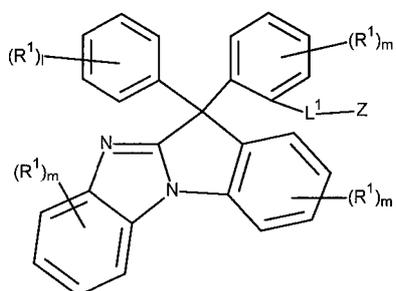
【0074】較佳的，本發明化合物可包含以下結構：式 (VIa)、(VIb)、(VIc)、(VIId)、(VIE)、(VIf)、(VIg)、(VIh)、(VIi)、(VIj)、(VIk)、(VIll)、(VIIm)、(VIIn)、(VIO)、(VIp)、(VIq)、(VIr)、(VIIs)及(VIt)



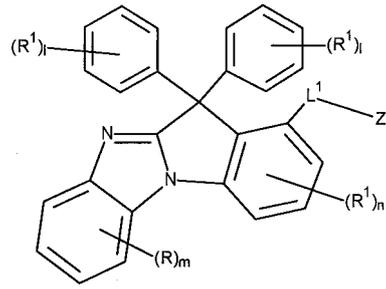
式 (VIa)



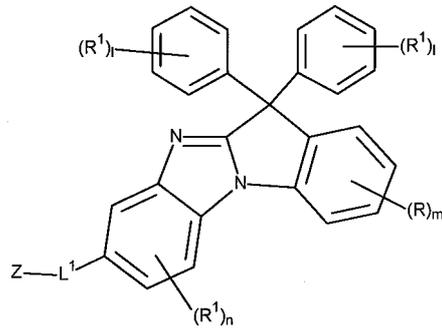
式 (VIb)



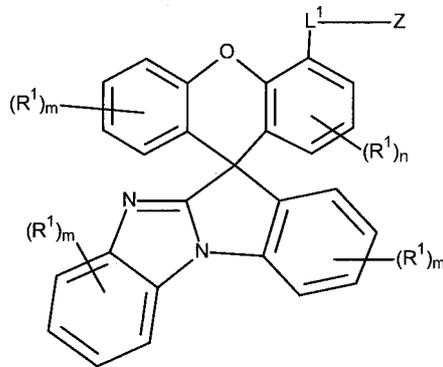
式 (VIc)



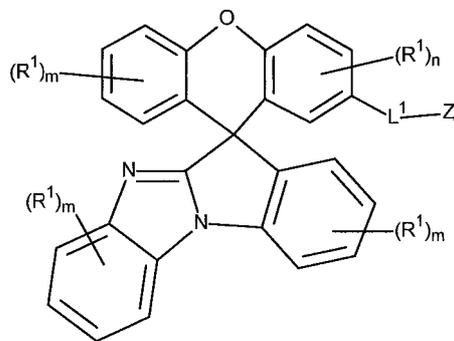
式 (VI d)



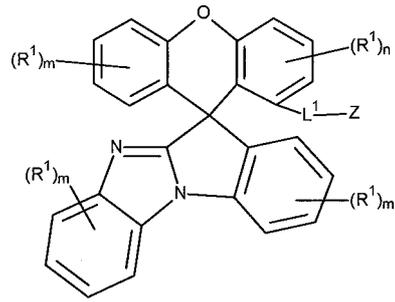
式 (VI e)



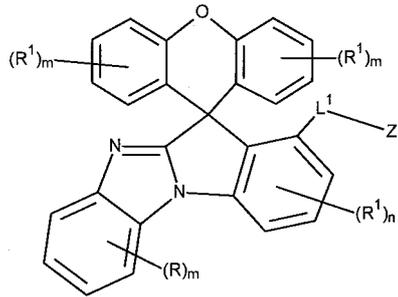
式 (VI f)



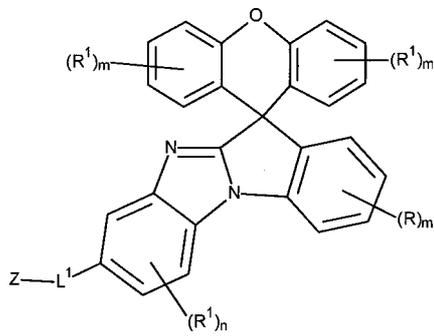
式 (VI g)



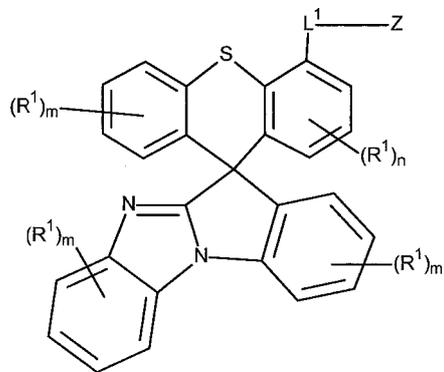
式 (VIh)



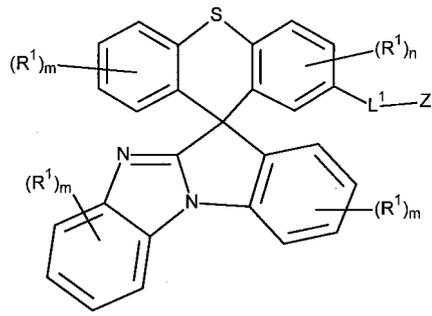
式 (VIi)



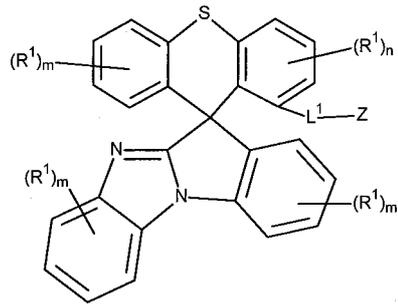
式 (VIj)



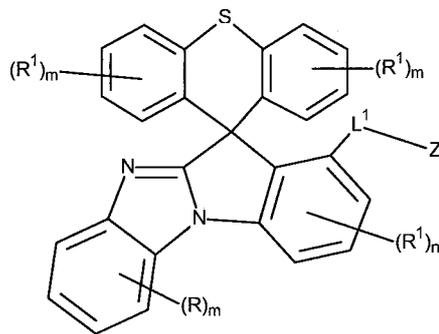
式 (VIk)



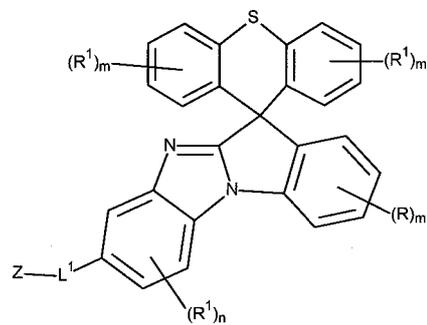
式 (VII)



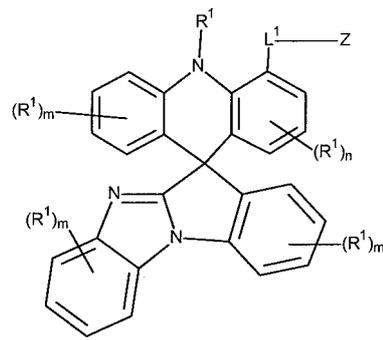
式 (VIIm)



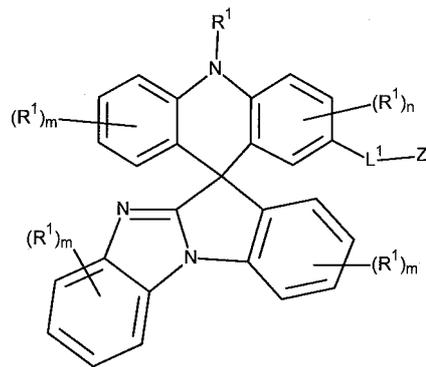
式 (VIIn)



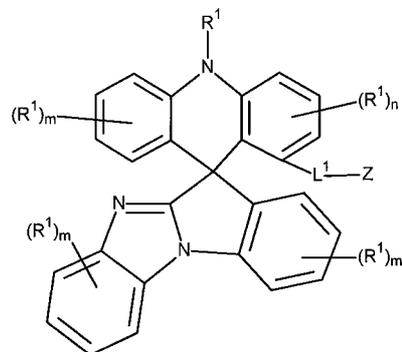
式 (VIo)



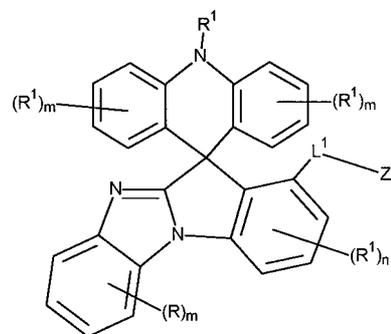
式 (VIp)



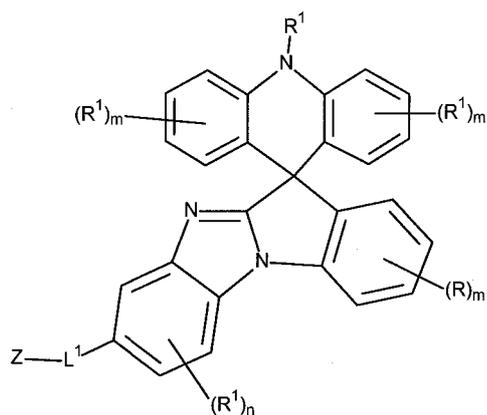
式 (VIq)



式 (VIr)



式 (VIs)

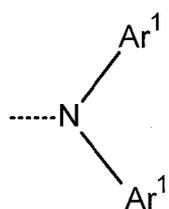


式 (VIIt)

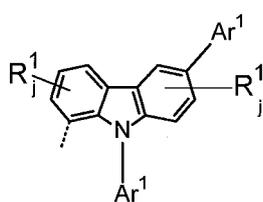
其中， l 為 1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2， m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0、1 或 2，以及 n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，更佳為 0 或 1，以及所使用之符號 R^1 、 L^1 及 Z 具有前文提供之定義，尤其用於式 (I) 及 / 或 (L^1 - Z) 者，其中下標 l 、 m 及 n 之總和總數較佳為至多 5，尤佳為至多 3，及特佳為至多 1。

【0075】進一步可為以下情況：式 (IVa) 至 (IVy)、(Va) 至 (Vh) 或 (VIa) 至 (VIIt) 中之 L^1 - Z 基團為式 (H-1) 至 (H-26) 之電洞傳輸基團及 / 或式 (QL) (較佳為式 (Q-1) 至 (Q-44)) 之電子傳輸基團。

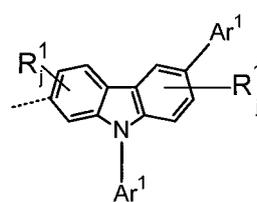
【0076】進一步可為以下情況：式 L^1 - Z 中或式 (IVa) 至 (IVy)、(Va) 至 (Vh) 及 / 或 (VIa) 至 (VIIt) 之結構中的符號 Z 為選自式 (Z-1) 至 (Z¹-90) 之基團



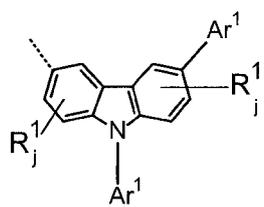
式 (Z-1)



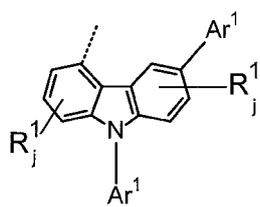
式 (Z-2)



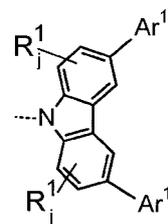
式 (Z-3)



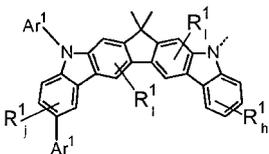
式 (Z-4)



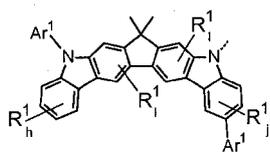
式 (Z-5)



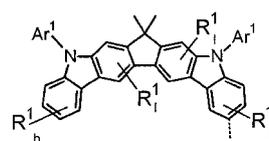
式 (Z-6)



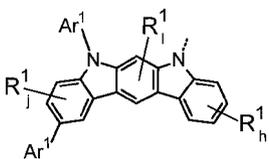
式 (Z-7)



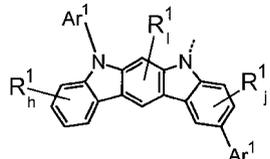
式 (Z-8)



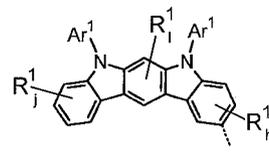
式 (Z-9)



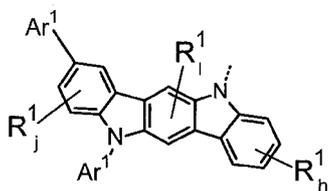
式 (Z-10)



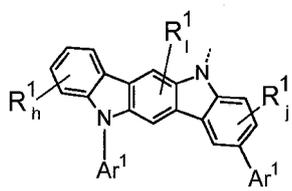
式 (Z-11)



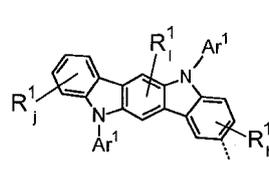
式 (Z-12)



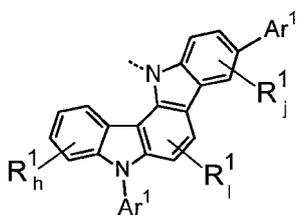
式 (Z-13)



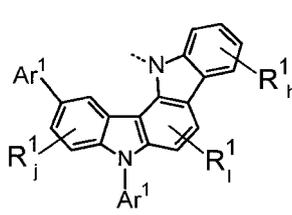
式 (Z-14)



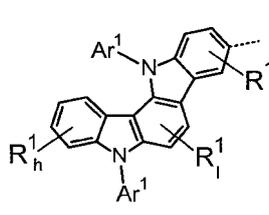
式 (Z-15)



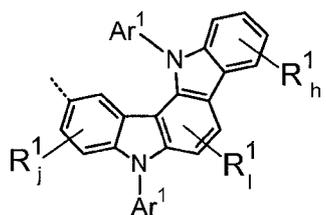
式 (Z-16)



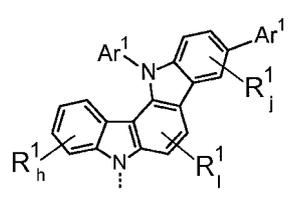
式 (Z-17)



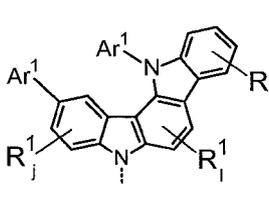
式 (Z-18)



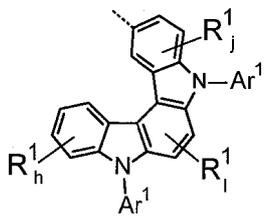
式 (Z-19)



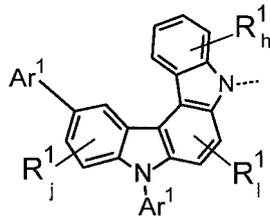
式 (Z-20)



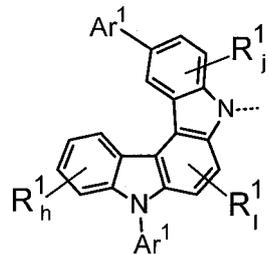
式 (Z-21)



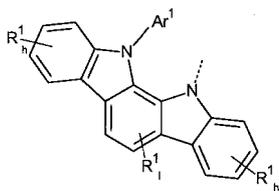
式 (Z-22)



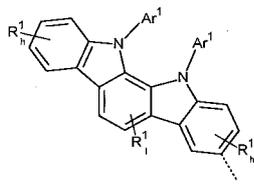
式 (Z-23)



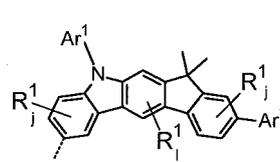
式 (Z-24)



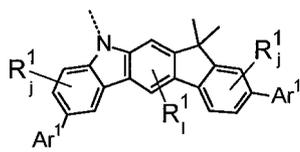
式 (Z-25)



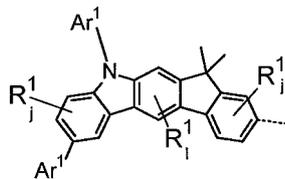
式 (Z-26)



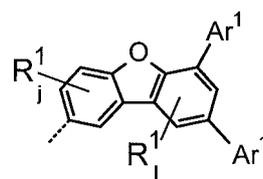
式 (Z-27)



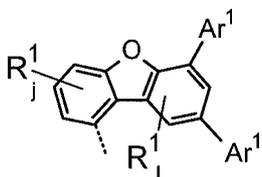
式 (Z-28)



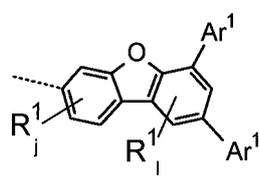
式 (Z-29)



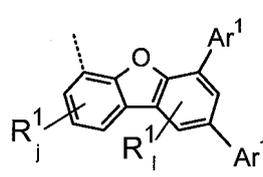
式 (Z-30)



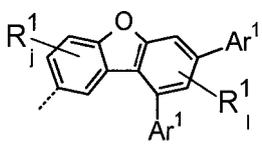
式 (Z-31)



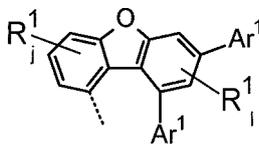
式 (Z-32)



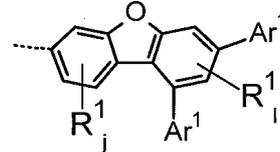
式 (Z-33)



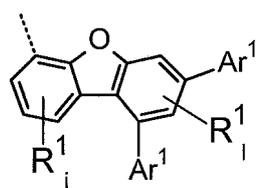
式 (Z-34)



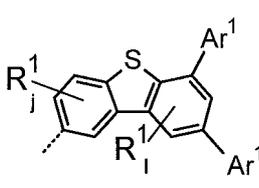
式 (Z-35)



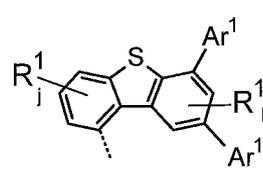
式 (Z-36)



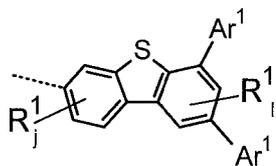
式 (Z-37)



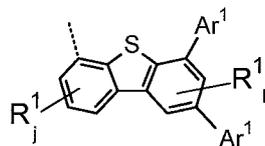
式 (Z-38)



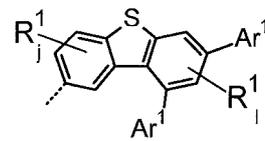
式 (Z-39)



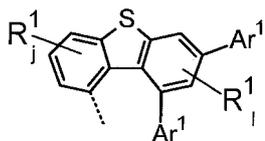
式 (Z-40)



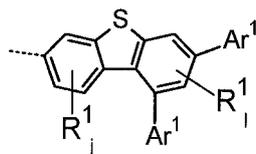
式 (Z-41)



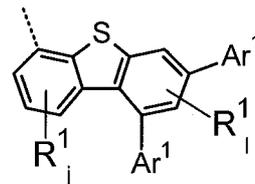
式 (Z-42)



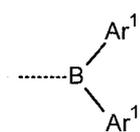
式 (Z-43)



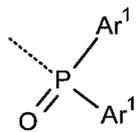
式 (Z-44)



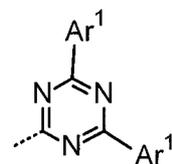
式 (Z-45)



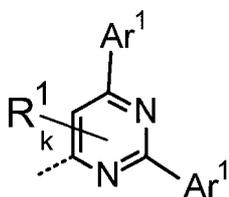
式 (Z-46)



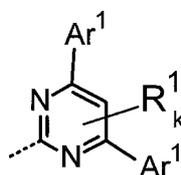
式 (Z-47)



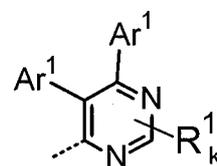
式 (Z-48)



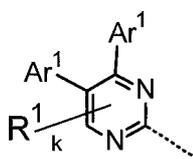
式 (Z-49)



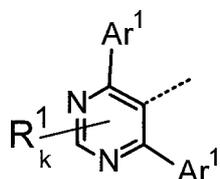
式 (Z-50)



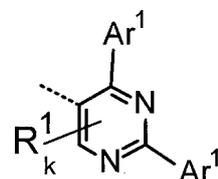
式 (Z-51)



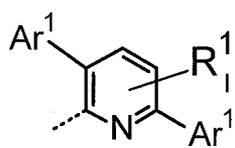
式 (Z-52)



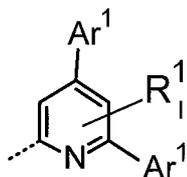
式 (Z-53)



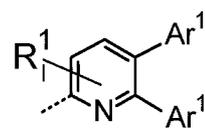
式 (Z-54)



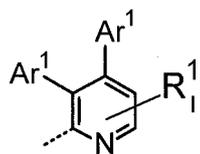
式 (Z-55)



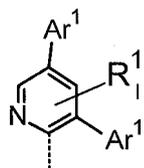
式 (Z-56)



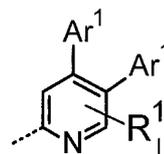
式 (Z-57)



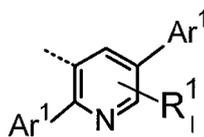
式 (Z-58)



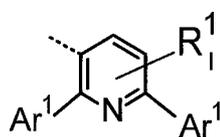
式 (Z-59)



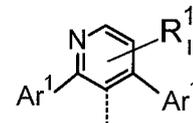
式 (Z-60)



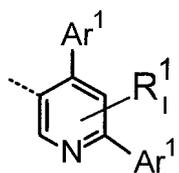
式 (Z-61)



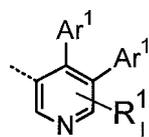
式 (Z-62)



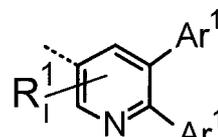
式 (Z-63)



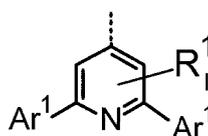
式 (Z-64)



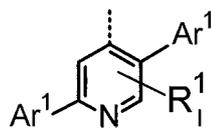
式 (Z-65)



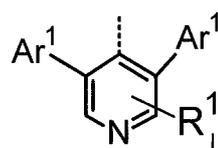
式 (Z-66)



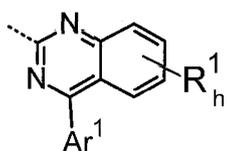
式 (Z-67)



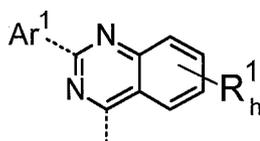
式 (Z-68)



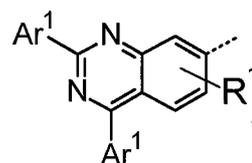
式 (Z-69)



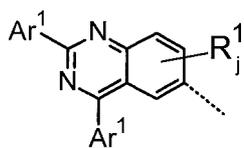
式 (Z-70)



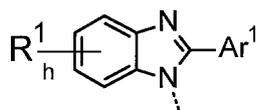
式 (Z-71)



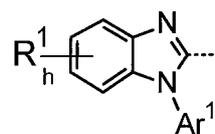
式 (Z-72)



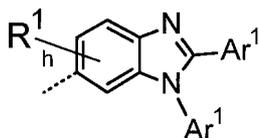
式 (Z-73)



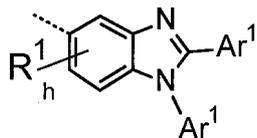
式 (Z-74)



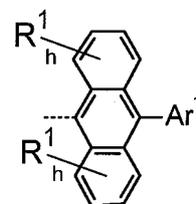
式 (Z-75)



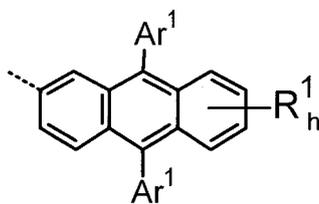
式 (Z-76)



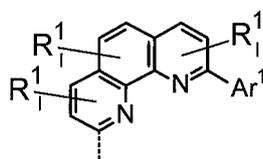
式 (Z-77)



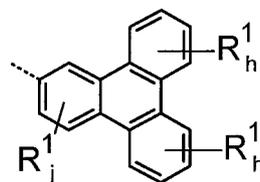
式 (Z-78)



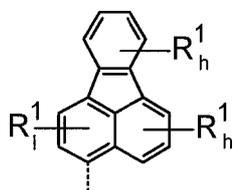
式 (Z-79)



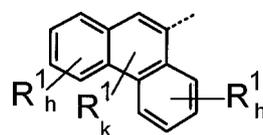
式 (Z-80)



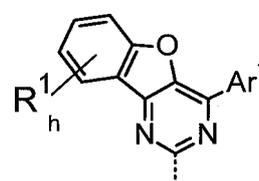
式 (Z-81)



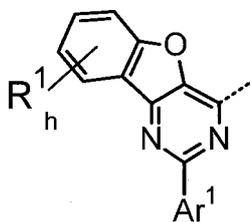
式 (Z-82)



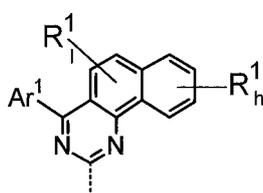
式 (Z-83)



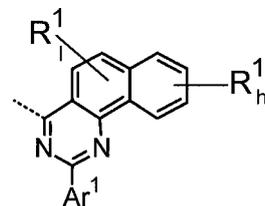
式 (Z-84)



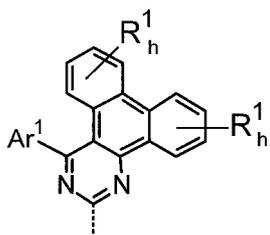
式 (Z-85)



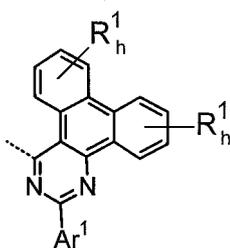
式 (Z-86)



式 (Z-87)



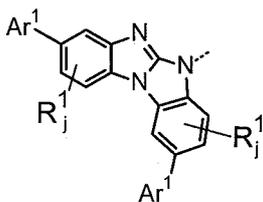
式 (Z-88)



式 (Z-89)



式 (Z-90)



式 (Z-91)

其中，所使用之符號如下：

- k 於各情況下獨立地為 0 或 1；
- i 於各情況下獨立地為 0、1 或 2；
- j 獨立地於各情況下為 0、1、2 或 3；
- h 獨立地於各情況下為 0、1、2、3 或 4；
- g 獨立地於各情況下為 0、1、2、3、4 或 5；

虛線鍵標記附接位置；以及

Ar¹、R¹ 具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 者。

【0077】較佳的，L¹基團可與 Q基團或 Z基團以及式 (QL) 中或式 (L¹-Z) 中之 L¹基團所鍵結的原子形成貫穿共軛 (through-conjugation)。芳族或雜芳族系統之貫穿共軛係於相鄰芳族或雜芳族環之間形成直接鍵時即形成。上述共軛基團之間的其他鍵結，例如經由硫、氮或氧原子或羰基，對於共軛無害。在萸系統之情況，兩個芳族環係直接鍵結，其中在位置 9 之 sp³混成 (sp³-hybridized) 碳原子確實

防止該等環之稠合，但共軛是可能的，原因係該在位置9之 sp^3 混成碳原子不一定位在電子傳輸Q基團與氮原子之間。反之，在第二螺雙萸結構之情況，若Q基團與式(QL)之 L^1 基團所鍵結的芳族或雜芳族基係經由螺雙萸結構中之相同苯基或者經由螺雙萸結構中彼此直接鍵結且在一平面的苯基而鍵結，則可形成貫穿共軛。若Q基團與式(QL)之 L^1 基團所鍵結的芳族或雜芳族基之間的鍵結係經由透過在位置9之 sp^3 混成碳原子而鍵結的第二螺雙萸結構中之不同苯基，則共軛被阻礙。

【0078】在本發明一更佳實施態樣中， L^1 為鍵或具有5至14個芳族或雜芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，較佳為具有6至12個碳原子之芳族環系統，及其可經一或多個 R^1 基取代，但較佳係未經取代，其中， R^1 可具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)者。更佳的， L^1 為具有6至10個芳族環原子之芳族環系統或具有6至13個雜芳族環原子之雜芳族環系統，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代，其中， R^2 可具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)者。

【0079】進一步較佳的，式(QL)中或式(L^1 -Z)中所示之符號 L^1 於各情況下尤其係相同或不同，且其為鍵或具有5至24個環原子、較佳為6至13個環原子、更佳為6至10個環原子之芳基或雜芳基，以使芳族或雜芳族環系統之芳族或雜芳族基團直接(即，經由該芳族或雜芳族基團之原子)鍵結至其他基團之個別原子。

【0080】另外可為以下之情況：式(QL)中或式(L¹-Z)中所示之L¹基團包含具有不超過兩個稠合芳族及/或雜芳族6員環之芳族環系統，較佳不包含任何稠合芳族或雜芳族環系統。因此，萘基結構優於蔥結構。此外，萸基、螺雙萸基、二苯并呋喃基及/或二苯并噻吩基結構優於萘基結構。

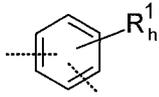
【0081】特佳者為無稠合之結構，例如苯基、聯苯基、聯三苯基及/或聯四苯基結構。

【0082】適用之芳族或雜芳族環系統L¹的實例係選自由下列所組成之群組：鄰伸苯基、間伸苯基、或對伸苯基，鄰聯伸苯基、間聯伸苯基或對聯伸苯基，聯伸三苯基(尤其是支鏈聯伸三苯基)，聯伸四苯基(尤其是支鏈聯伸四苯基)，伸萸基，伸螺雙萸基，伸二苯并呋喃基，伸二苯并噻吩基及伸呋唑基，其各可經一或多個R¹基取代，但較佳係未經取代。

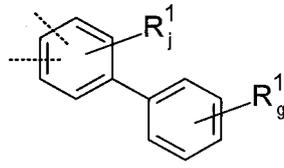
【0083】另外可為式(QL)或式(L¹-Z)中所示之L¹基團尤其具有不超過1個氮原子、較佳不超過2個雜原子、尤佳不超過一個雜原子、更佳無雜原子的情況。

【0084】較佳為包含至少一式(H-1)至(H-26)之結構(其中Ar²基團為鍵或選自式(L¹-1)至(L¹-162)之基團)的化合物，及/或包含式(IVa)至(IVy)、(Va)至(Vh)及/或(VIa)至(VIp)之結構(其中結構要素L¹-Z中之L¹基團為鍵或選自式(L¹-1)至(L¹-162)的基團)的化合物，及/或包含式(QL)之結構(其中L¹基團為鍵或選自式(L¹-1)至(L¹-162)之基團)的

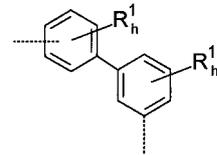
化合物



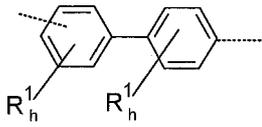
式 (L¹-1)



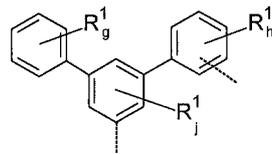
式 (L¹-2)



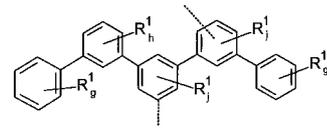
式 (L¹-3)



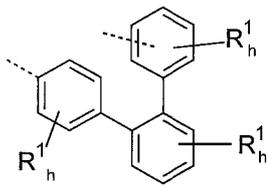
式 (L¹-4)



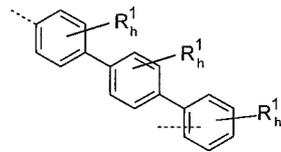
式 (L¹-5)



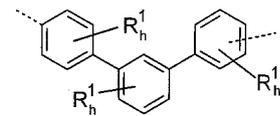
式 (L¹-6)



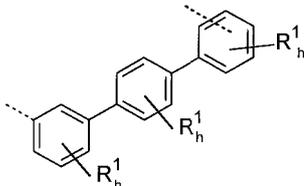
式 (L¹-7)



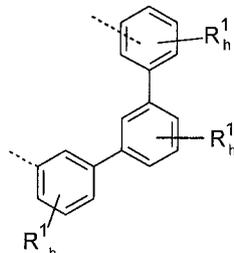
式 (L¹-8)



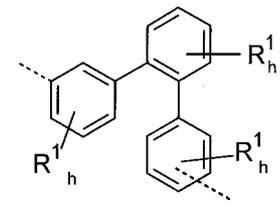
式 (L¹-9)



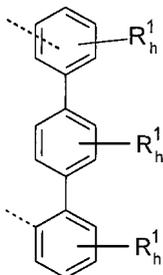
式 (L¹-10)



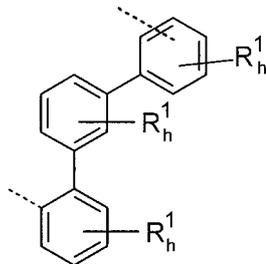
式 (L¹-11)



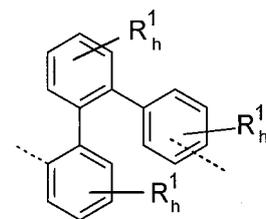
式 (L¹-12)



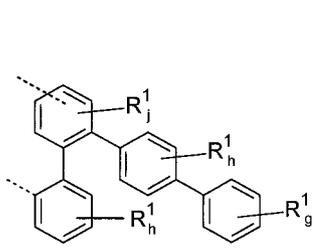
式 (L¹-13)



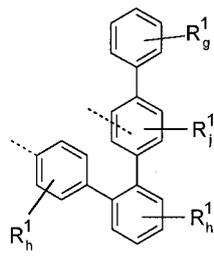
式 (L¹-14)



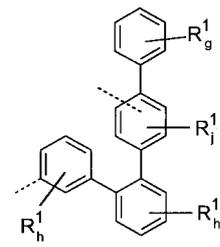
式 (L¹-15)



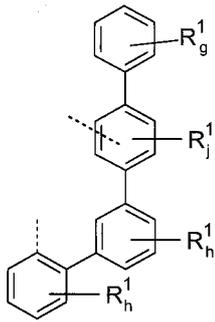
式 (L¹-16)



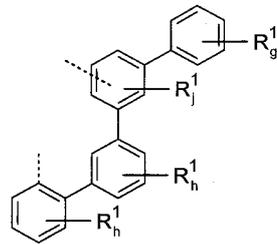
式 (L¹-17)



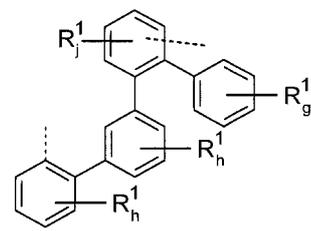
式 (L¹-18)



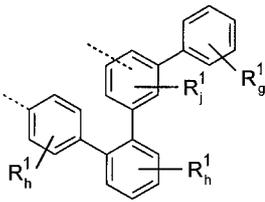
式 (L¹-19)



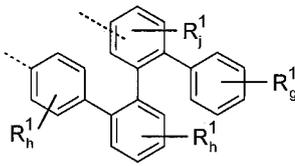
式 (L¹-20)



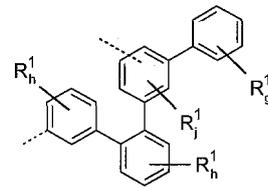
式 (L¹-21)



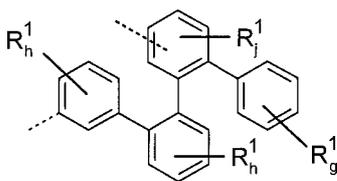
式 (L¹-22)



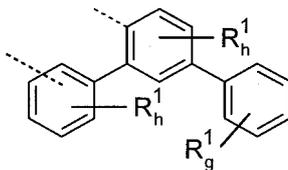
式 (L¹-23)



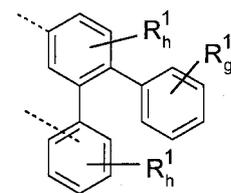
式 (L¹-24)



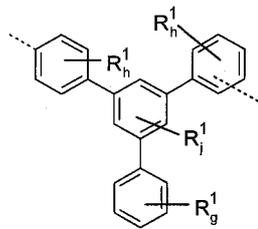
式 (L¹-25)



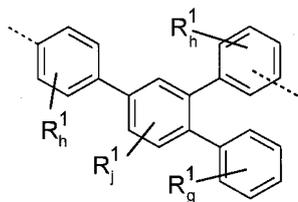
式 (L¹-26)



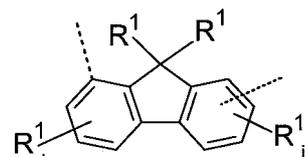
式 (L¹-27)



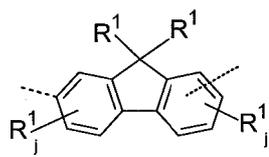
式 (L¹-28)



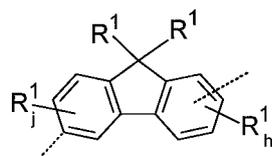
式 (L¹-29)



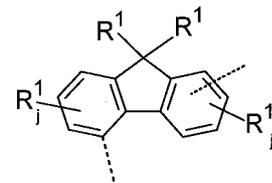
式 (L¹-30)



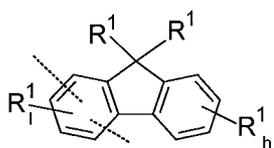
式 (L¹-31)



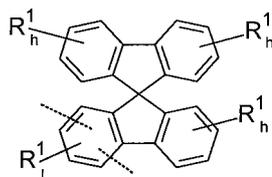
式 (L¹-32)



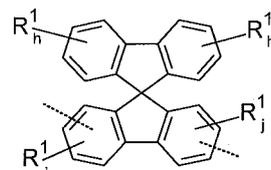
式 (L¹-33)



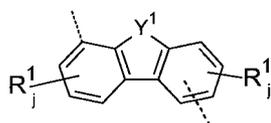
式 (L¹-34)



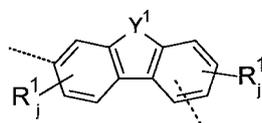
式 (L¹-35)



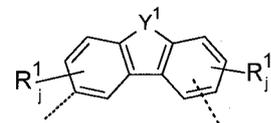
式 (L¹-36)



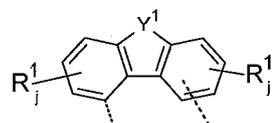
式 (L¹-37)



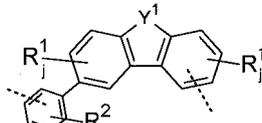
式 (L¹-38)



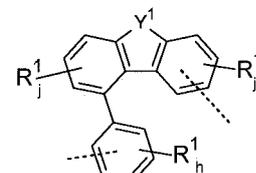
式 (L¹-39)



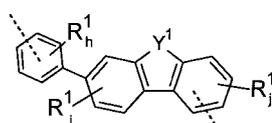
式 (L¹-40)



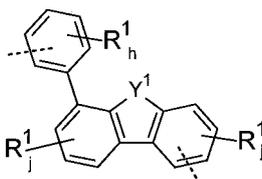
式 (L¹-41)



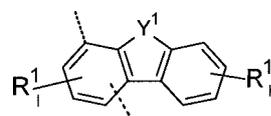
式 (L¹-42)



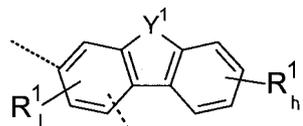
式 (L¹-43)



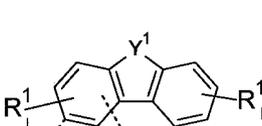
式 (L¹-44)



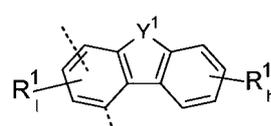
式 (L¹-45)



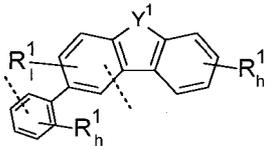
式 (L¹-46)



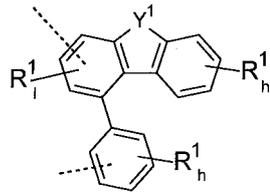
式 (L¹-47)



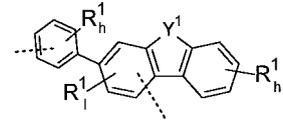
式 (L¹-48)



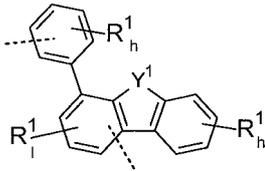
式 (L¹-49)



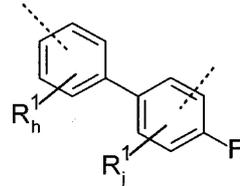
式 (L¹-50)



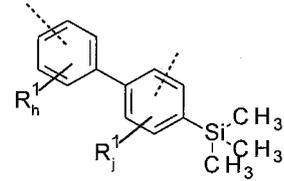
式 (L¹-51)



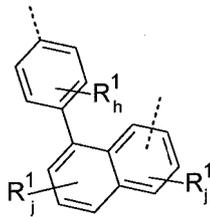
式 (L¹-52)



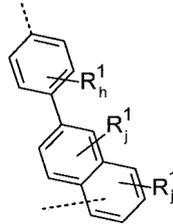
式 (L¹-53)



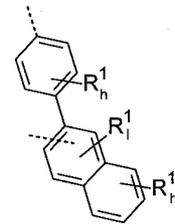
式 (L¹-54)



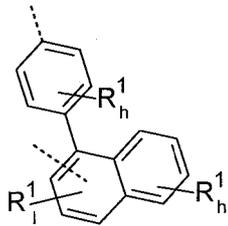
式 (L¹-55)



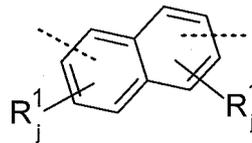
式 (L¹-56)



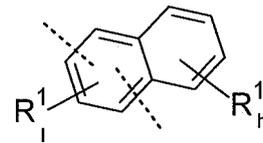
式 (L¹-57)



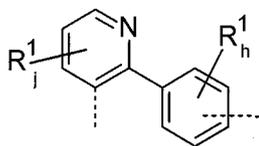
式 (L¹-58)



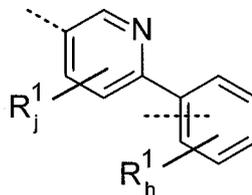
式 (L¹-59)



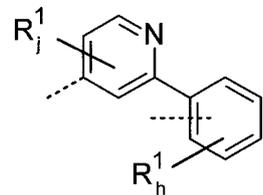
式 (L¹-60)



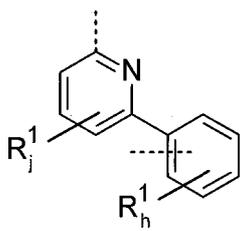
式 (L¹-61)



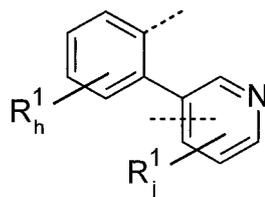
式 (L¹-62)



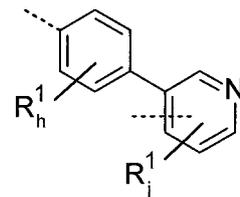
式 (L¹-63)



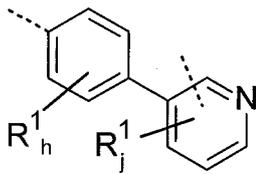
式 (L¹-64)



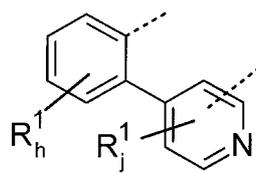
式 (L¹-65)



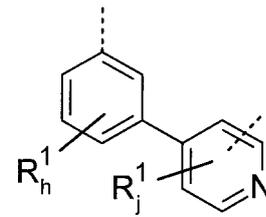
式 (L¹-66)



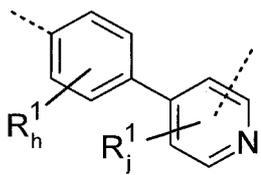
式 (L¹-67)



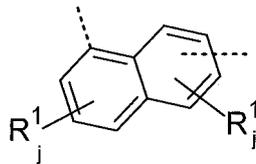
式 (L¹-68)



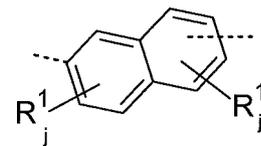
式 (L¹-69)



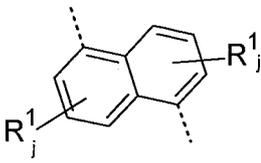
式 (L¹-70)



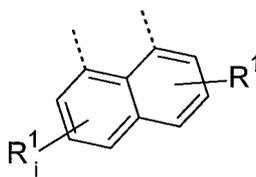
式 (L¹-71)



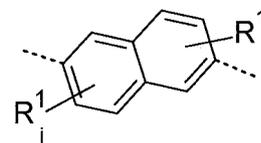
式 (L¹-72)



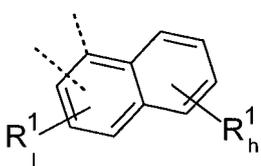
式 (L¹-73)



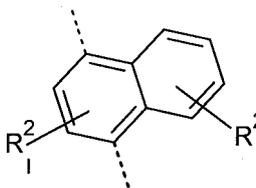
式 (L¹-74)



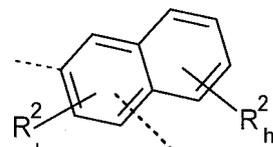
式 (L¹-75)



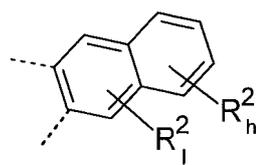
式 (L¹-76)



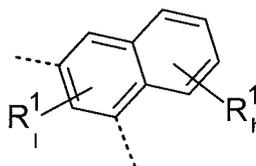
式 (L¹-77)



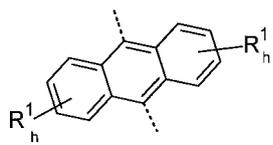
式 (L¹-78)



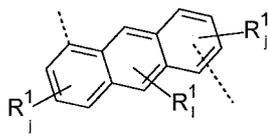
式 (L¹-79)



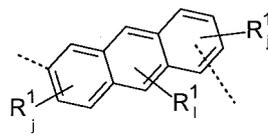
式 (L¹-80)



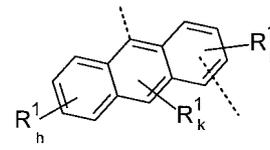
式 (L¹-81)



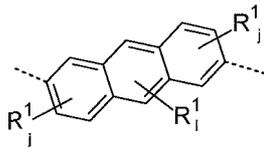
式 (L¹-82)



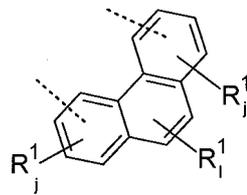
式 (L¹-83)



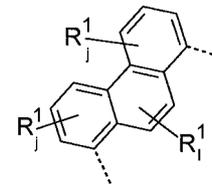
式 (L¹-84)



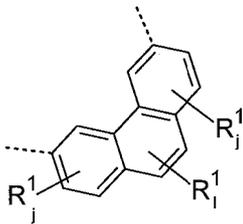
式 (L¹-85)



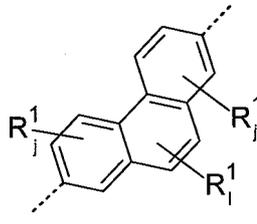
式 (L¹-86)



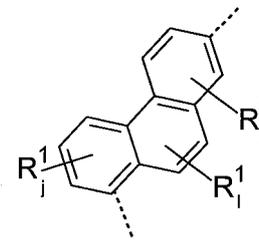
式 (L¹-87)



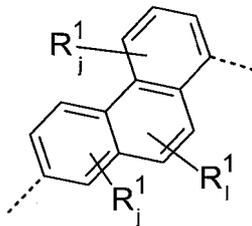
式 (L¹-88)



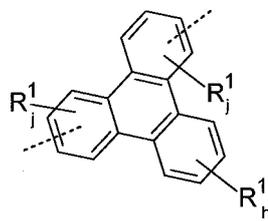
式 (L¹-89)



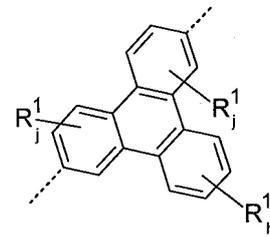
式 (L¹-90)



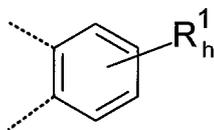
式 (L¹-91)



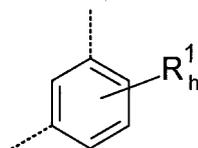
式 (L¹-92)



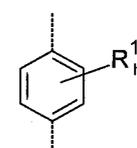
式 (L¹-93)



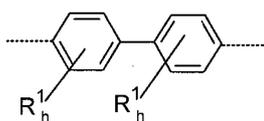
式 (L¹-94)



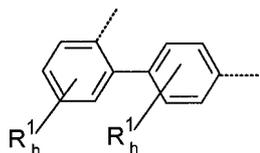
式 (L¹-95)



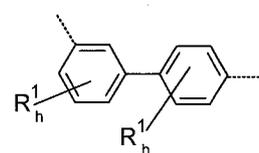
式 (L¹-96)



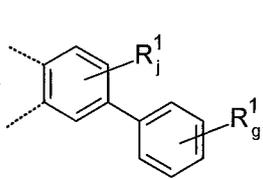
式 (L¹-97)



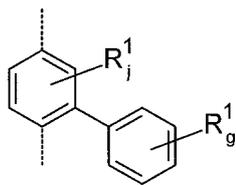
式 (L¹-98)



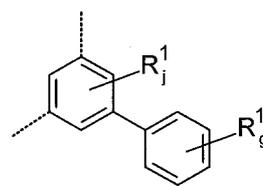
式 (L¹-99)



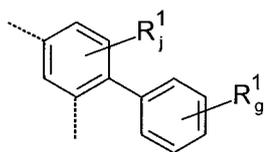
式 (L¹-100)



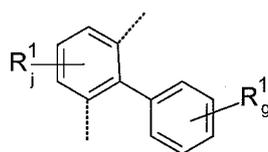
式 (L¹-101)



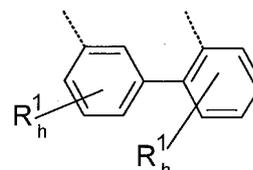
式 (L¹-102)



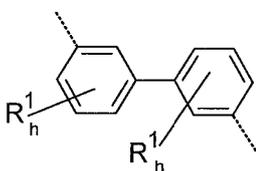
式 (L¹-103)



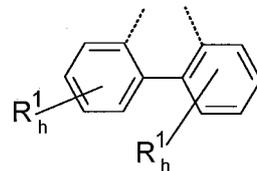
式 (L¹-104)



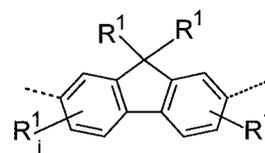
式 (L¹-105)



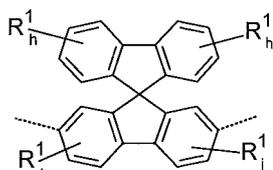
式 (L¹-106)



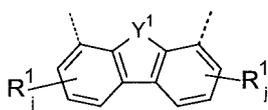
式 (L¹-107)



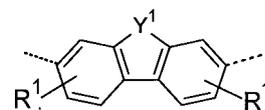
式 (L¹-108)



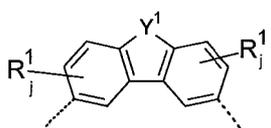
式 (L¹-109)



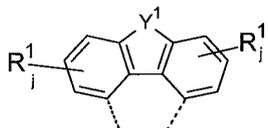
式 (L¹-110)



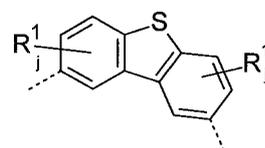
式 (L¹-111)



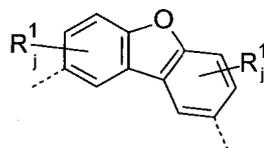
式 (L¹-112)



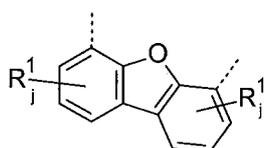
式 (L¹-113)



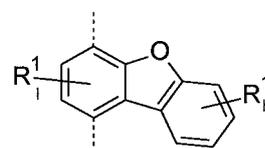
式 (L¹-114)



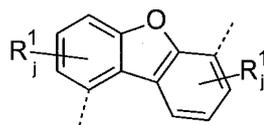
式 (L¹-115)



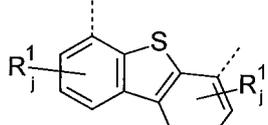
式 (L¹-116)



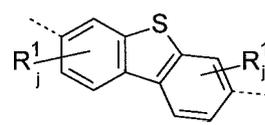
式 (L¹-117)



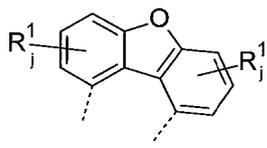
式 (L¹-118)



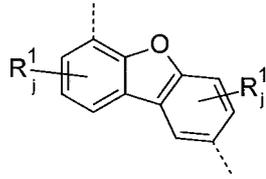
式 (L¹-119)



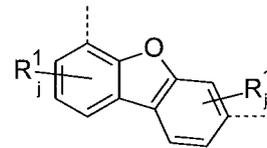
式 (L¹-120)



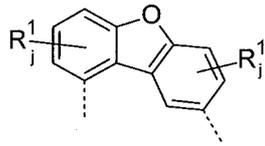
式 (L¹-121)



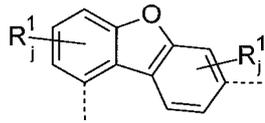
式 (L¹-122)



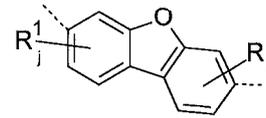
式 (L¹-123)



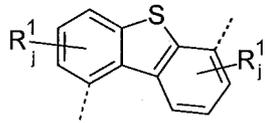
式 (L¹-124)



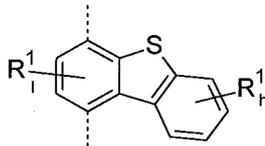
式 (L¹-125)



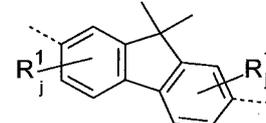
式 (L¹-126)



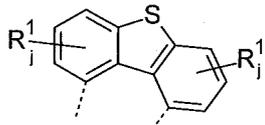
式 (L¹-127)



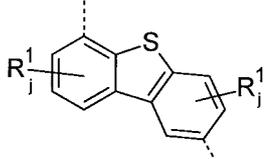
式 (L¹-128)



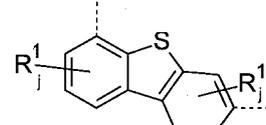
式 (L¹-129)



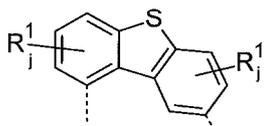
式 (L¹-130)



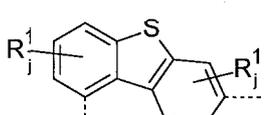
式 (L¹-131)



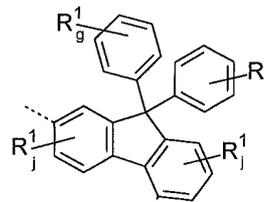
式 (L¹-132)



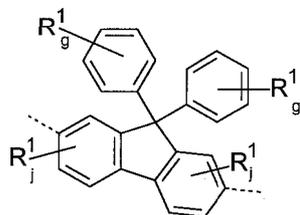
式 (L¹-133)



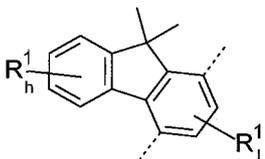
式 (L¹-134)



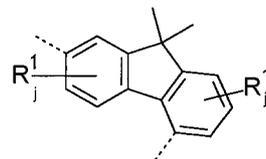
式 (L¹-135)



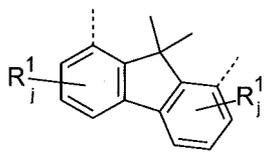
式 (L¹-136)



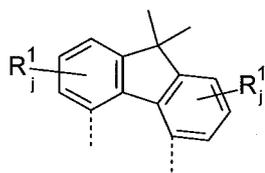
式 (L¹-137)



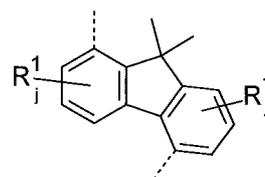
式 (L¹-138)



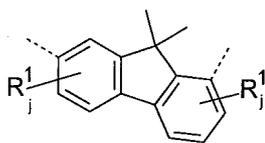
式 (L¹-139)



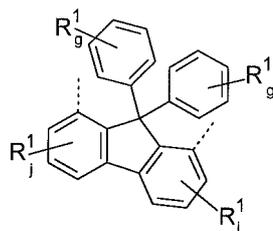
式 (L¹-140)



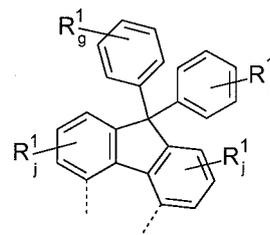
式 (L¹-141)



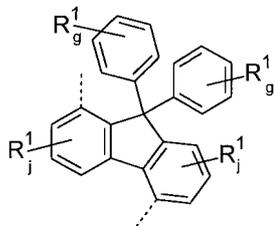
式 (L¹-142)



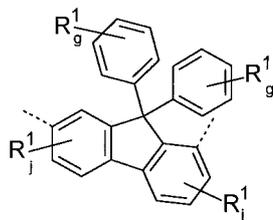
式 (L¹-143)



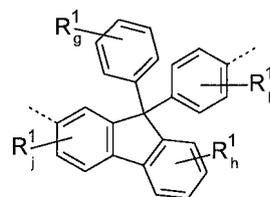
式 (L¹-144)



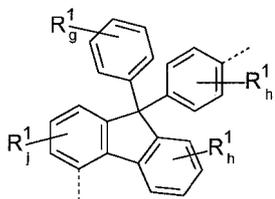
式 (L¹-145)



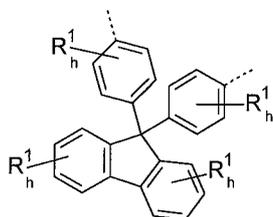
式 (L¹-146)



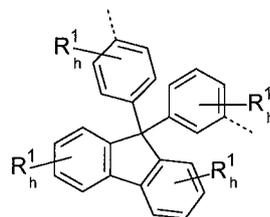
式 (L¹-147)



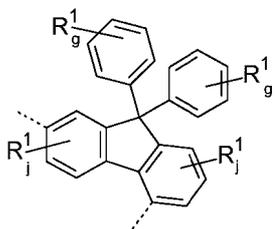
式 (L¹-148)



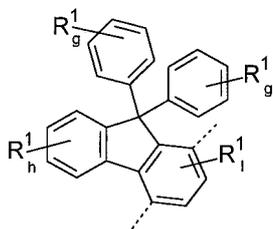
式 (L¹-149)



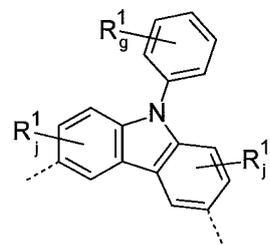
式 (L¹-150)



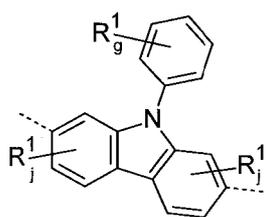
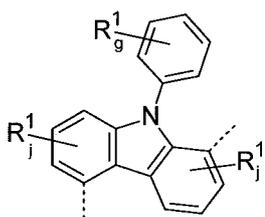
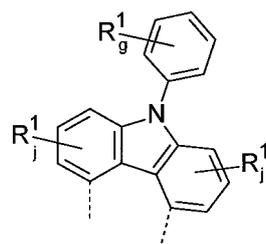
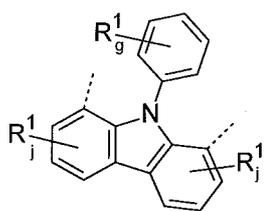
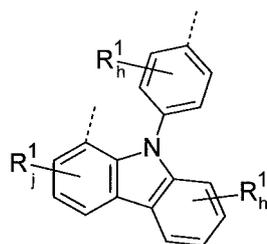
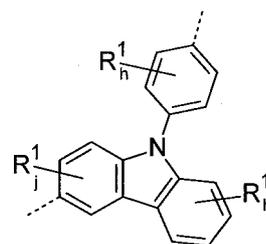
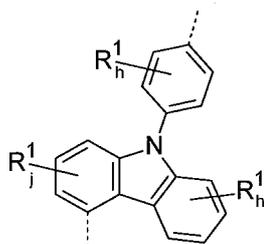
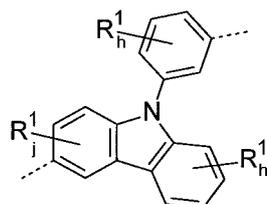
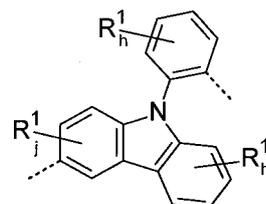
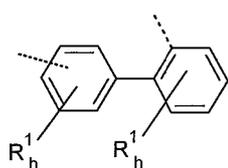
式 (L¹-151)



式 (L¹-152)



式 (L¹-153)

式 (L¹-154)式 (L¹-155)式 (L¹-156)式 (L¹-157)式 (L¹-158)式 (L¹-159)式 (L¹-160)式 (L¹-161)式 (L¹-162)式 (L¹-163)

其中，虛線鍵於各情況下係標記附接位置，下標 k 為 0 或 1，下標 l 為 0、1 或 2，下標 j 於各情況下獨立地為 0、1、2 或 3；下標 h 於各情況下獨立地為 0、1、2、3 或 4，下標 g 為 0、1、2、3、4 或 5；符號 Y^1 為 O、S 或 NR^1 ，較佳為 O 或 S；符號 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 者。

【0085】較佳可為以下情況：式 (L¹-1) 至 (L¹-163) 之結構中的下標 k 、 l 、 g 、 h 及 j 之總和總數於各情況下為至多

3、較佳為至多2、更佳為至多1。

【0086】具有式(QL)或(L¹-Z)之基團的本發明較佳化合物包含L¹基團，其表示鍵，或其係選自式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-162)中之一者，較佳選自式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-162)中之一者，尤佳選自式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-162)中之一者。有利的，式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-162)之結構，較佳為式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-162)之結構，尤佳為式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-162)之結構中的下標k、l、g、h及j之總和總數於各情況下可不超過3，較佳不超過2，及更佳不超過1。

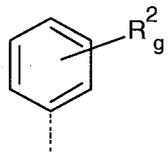
【0087】具有式(H-1)或(H-26)之基團的本發明較佳化合物係包含Ar²基團，其係選自式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-162)中之一者，較佳選自式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-162)中之一者，尤佳選自式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-162)中之一者。有利的，式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-162)之結構，較佳為式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-162)之結構，尤佳為式(L¹-163)、(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-162)之結構中的下標k、l、g、h及j之總和總數於各情況下可不超過3，較佳不超過2，及更佳不超過1。

【0088】較佳的，式(L¹-1)至(L¹-163)中之R¹基不與R¹

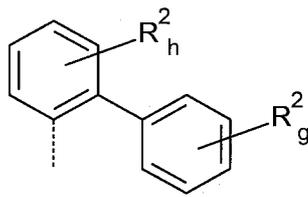
基所鍵結的芳基或雜芳基之環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係不形成任何稠合環系統。此包括與可鍵結至 R^1 或 R^2 基之可能的取代基 R^2 、 R^3 形成稠合環系統。

【0089】可進一步為以下情況： Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 、 Ar^4 及/或 R^1 基係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基，芘基，三吡基，咪唑基，苯并咪唑基，苯并噁唑基，苯并噻唑基，1-、2-、3-或4-呋唑基，1-或2-萘基，蔥基(較佳為9-蔥基)，菲基及/或聯伸三苯基(triphenylenyl)，其各可經一或多個 R^1 或 R^2 基取代，但較佳為未經取代，特佳者為苯基、螺雙萸基、萸基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、蔥基、菲基、聯伸三苯(triphenylene)基。

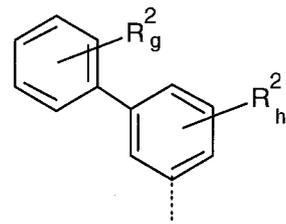
【0090】可進一步為以下情況：於式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)、(IVa)至(IVy)、(Va)至(Vh)及/或(VIa)至(VIt)之結構中，至少一個 R^1 或 Ar^1 基為選自式(R^1 -1)至(R^1 -177)之基團，或於式(H-1)至(H-26)、(Q-1)至(Q-44)、(Z-1)至(Z-91)之結構中，至少一個 Ar^1 或 R^1 基為選自式(R^1 -1)至(R^1 -177)之基團



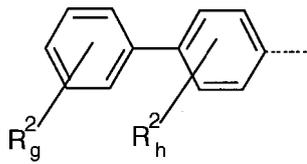
式 (R¹-1)



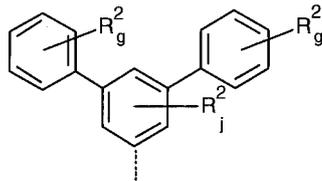
式 (R¹-2)



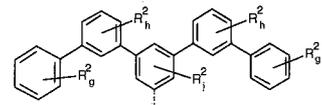
式 (R¹-3)



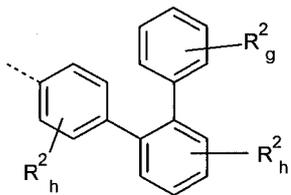
式 (R¹-4)



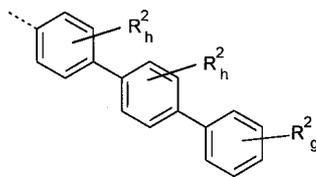
式 (R¹-5)



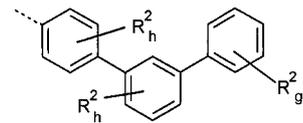
式 (R¹-6)



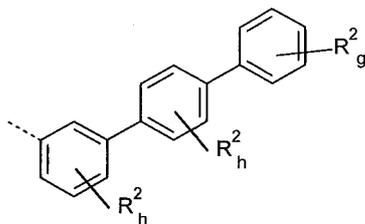
式 (R¹-7)



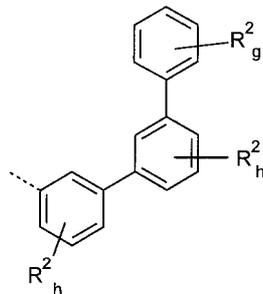
式 (R¹-8)



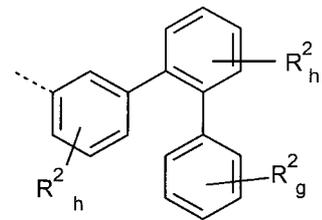
式 (R¹-9)



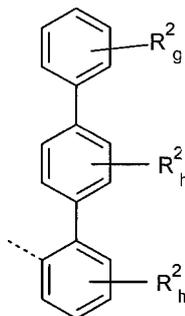
式 (R¹-10)



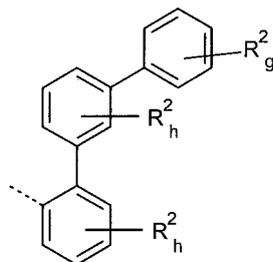
式 (R¹-11)



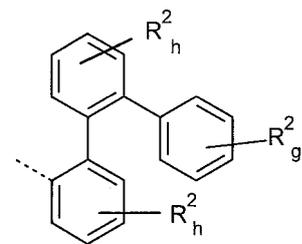
式 (R¹-12)



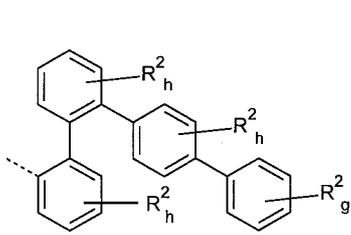
式 (R¹-13)



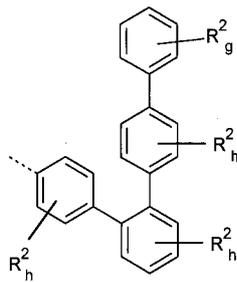
式 (R¹-14)



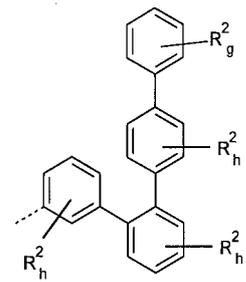
式 (R¹-15)



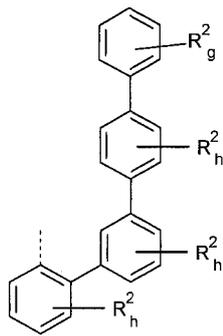
式 (R¹-16)



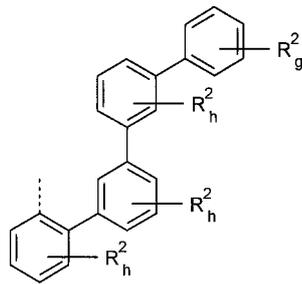
式 (R¹-17)



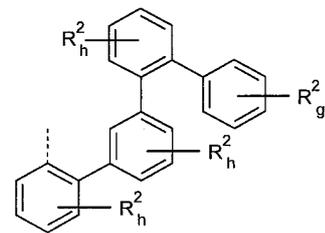
式 (R¹-18)



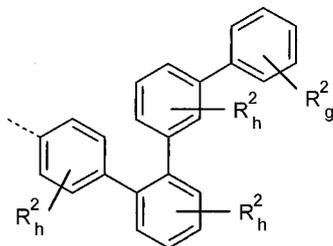
式 (R¹-19)



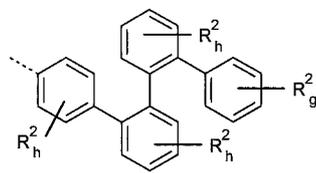
式 (R¹-20)



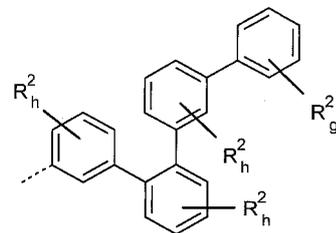
式 (R¹-21)



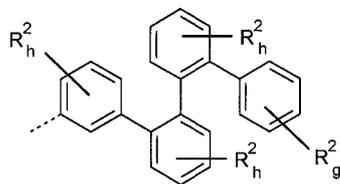
式 (R¹-22)



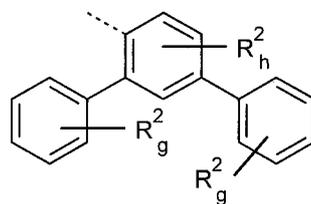
式 (R¹-23)



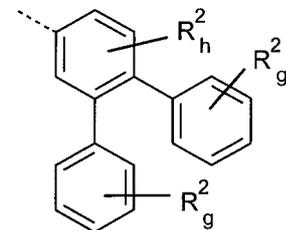
式 (R¹-24)



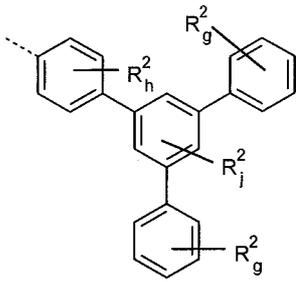
式 (R¹-25)



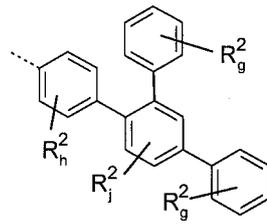
式 (R¹-26)



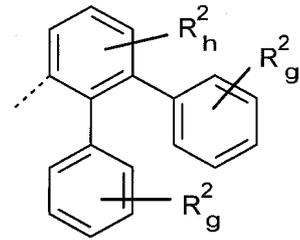
式 (R¹-27)



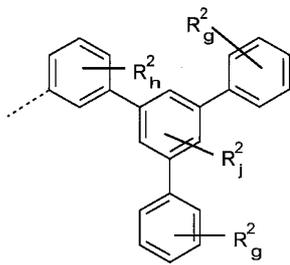
式 (R¹-28)



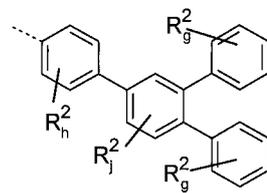
式 (R¹-29)



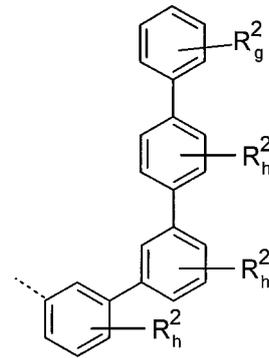
式 (R¹-30)



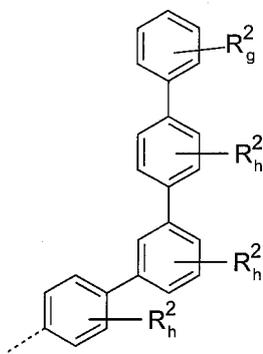
式 (R¹-31)



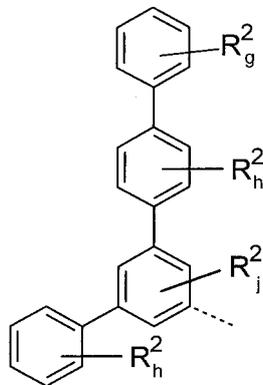
式 (R¹-32)



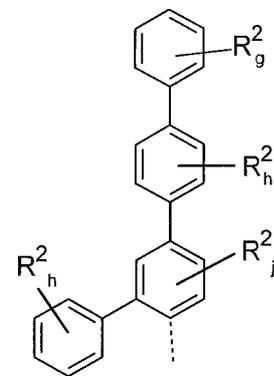
式 (R¹-33)



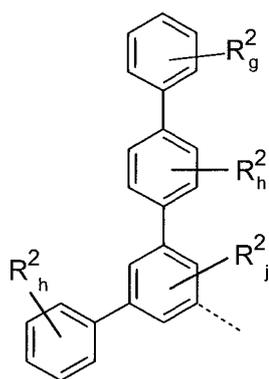
式 (R¹-34)



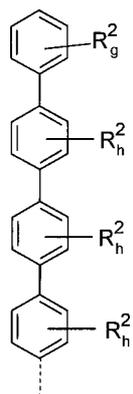
式 (R¹-35)



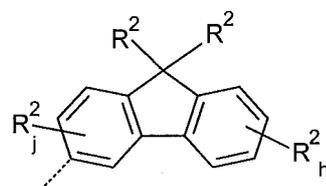
式 (R¹-36)



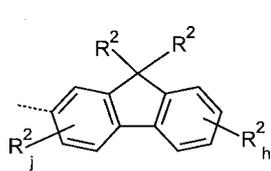
式 (R¹-37)



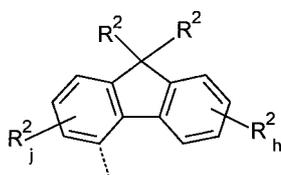
式 (R¹-38)



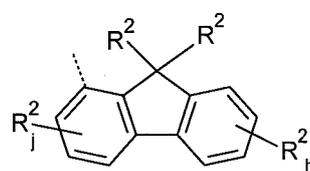
式 (R¹-39)



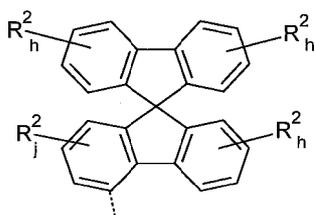
式 (R¹-40)



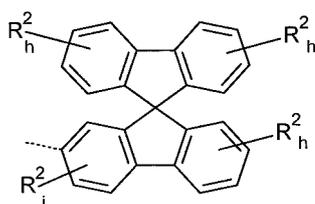
式 (R¹-41)



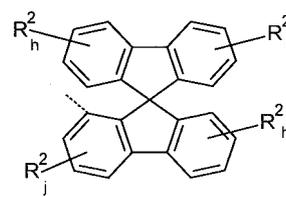
式 (R¹-42)



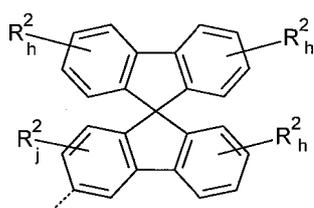
式 (R¹-43)



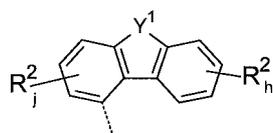
式 (R¹-44)



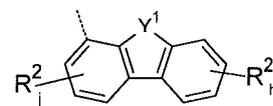
式 (R¹-45)



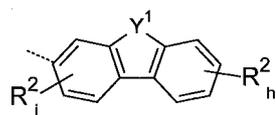
式 (R¹-46)



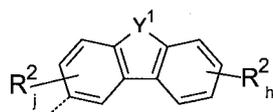
式 (R¹-47)



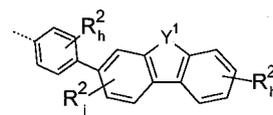
式 (R¹-48)



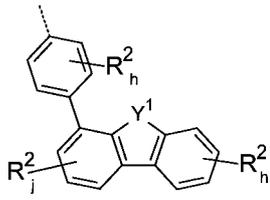
式 (R¹-49)



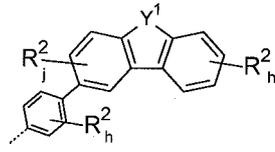
式 (R¹-50)



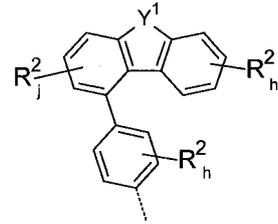
式 (R¹-51)



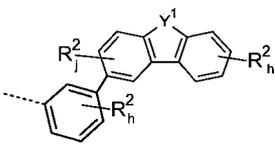
式 (R¹-52)



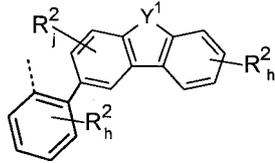
式 (R¹-53)



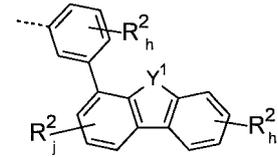
式 (R¹-54)



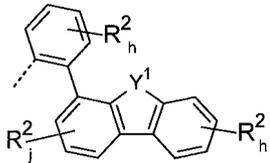
式 (R¹-55)



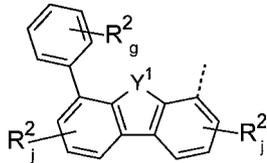
式 (R¹-56)



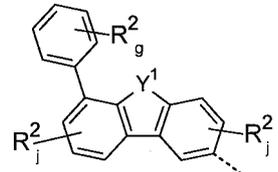
式 (R¹-57)



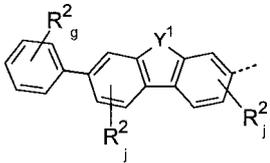
式 (R¹-58)



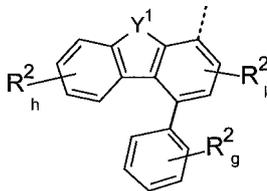
式 (R¹-59)



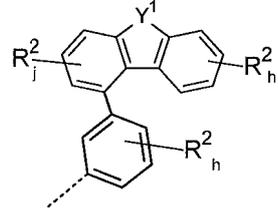
式 (R¹-60)



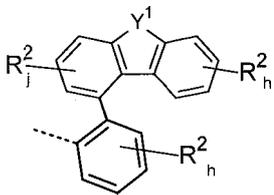
式 (R¹-61)



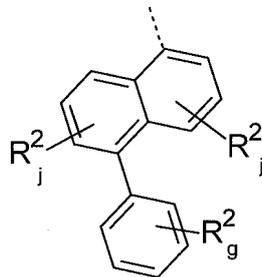
式 (R¹-62)



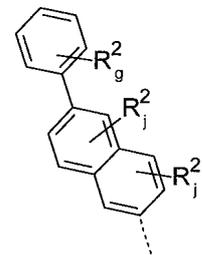
式 (R¹-63)



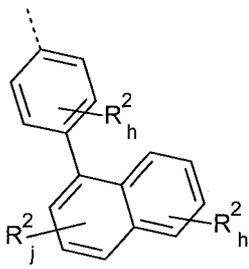
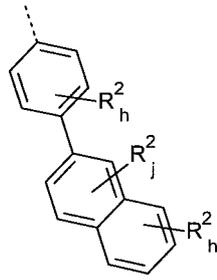
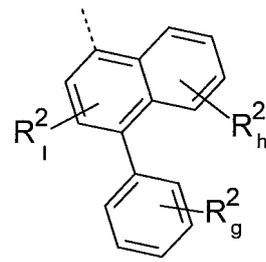
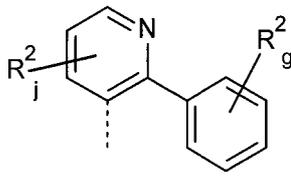
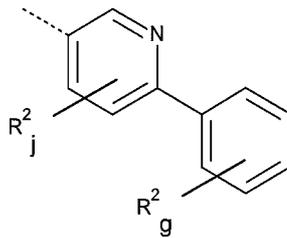
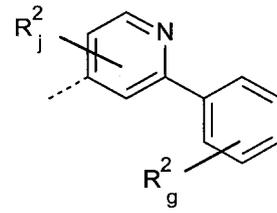
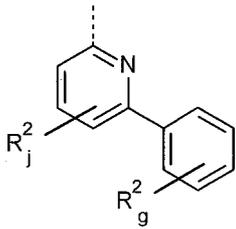
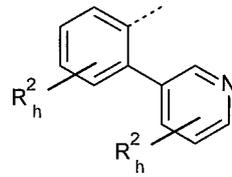
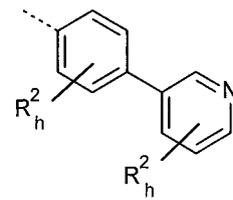
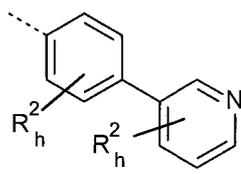
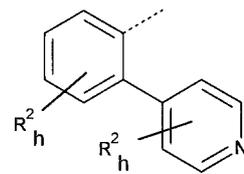
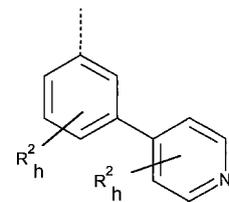
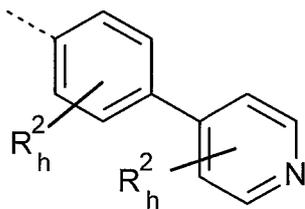
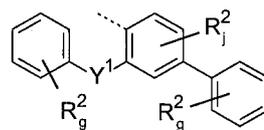
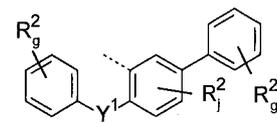
式 (R¹-64)

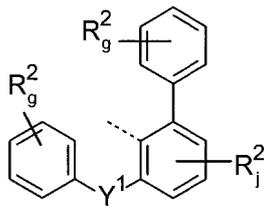


式 (R¹-65)

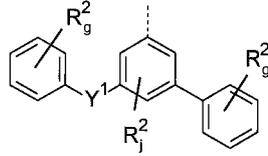


式 (R¹-66)

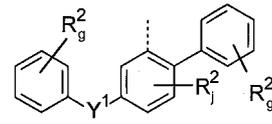
式 (R¹-67)式 (R¹-68)式 (R¹-69)式 (R¹-70)式 (R¹-71)式 (R¹-72)式 (R¹-73)式 (R¹-74)式 (R¹-75)式 (R¹-76)式 (R¹-77)式 (R¹-78)式 (R¹-79)式 (R¹-80)式 (R¹-81)



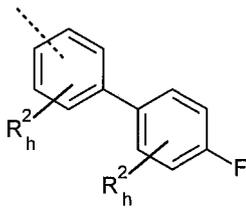
式 (R¹-82)



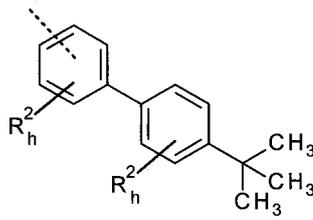
式 (R¹-83)



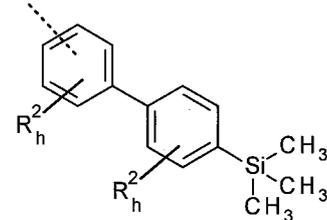
式 (R¹-84)



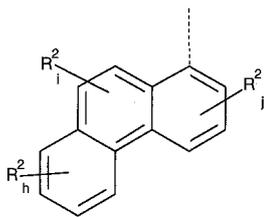
式 (R¹-85)



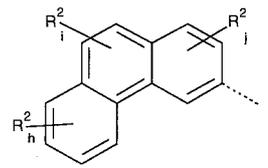
式 (R¹-86)



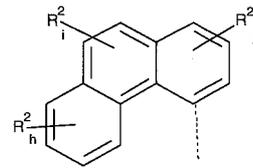
式 (R¹-87)



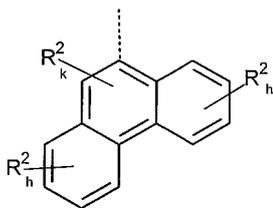
式 (R¹-88)



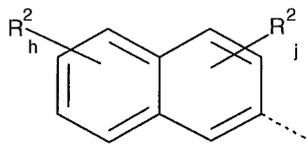
式 (R¹-89)



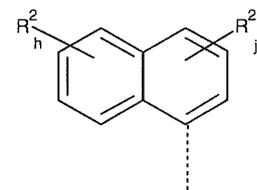
式 (R¹-90)



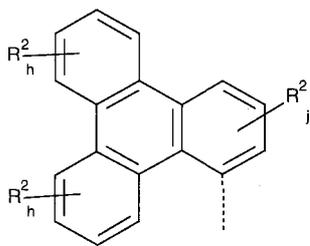
式 (R¹-91)



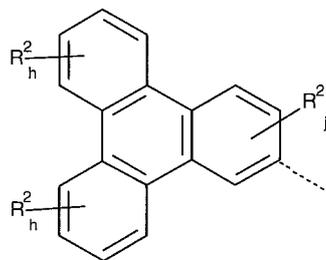
式 (R¹-92)



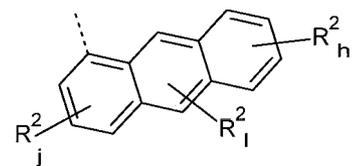
式 (R¹-93)



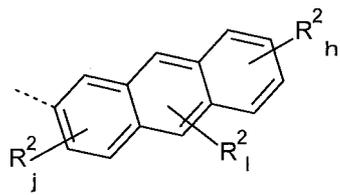
式 (R¹-94)



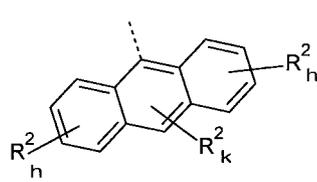
式 (R¹-95)



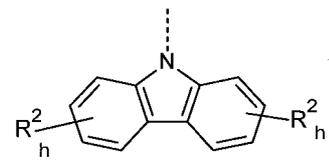
式 (R¹-96)



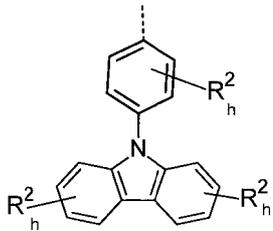
式 (R¹-97)



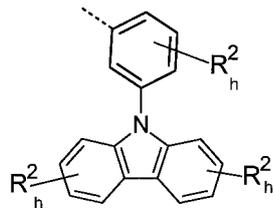
式 (R¹-98)



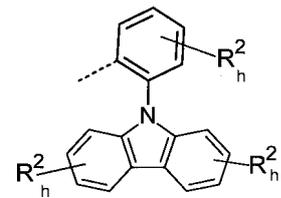
式 (R¹-99)



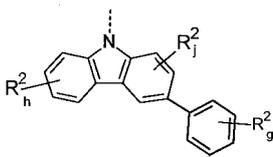
式 (R¹-100)



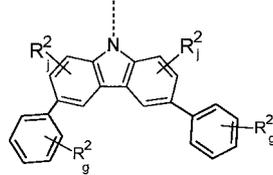
式 (R¹-101)



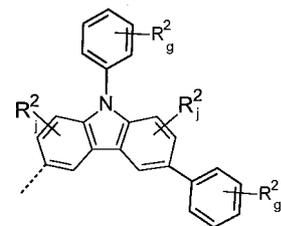
式 (R¹-102)



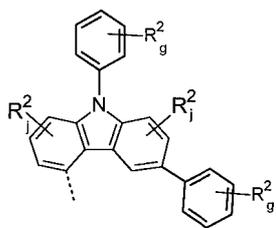
式 (R¹-103)



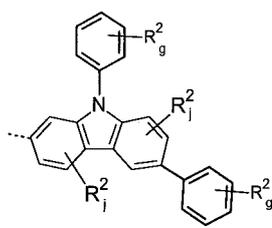
式 (R¹-104)



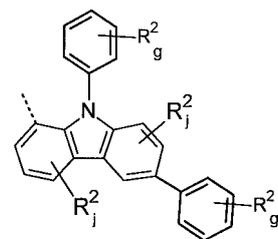
式 (R¹-105)



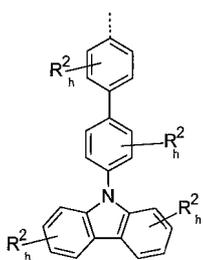
式 (R¹-106)



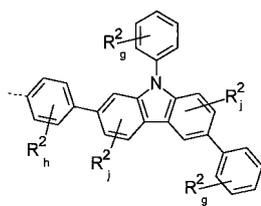
式 (R¹-107)



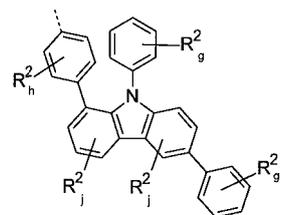
式 (R¹-108)



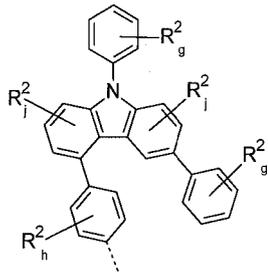
式 (R¹-109)



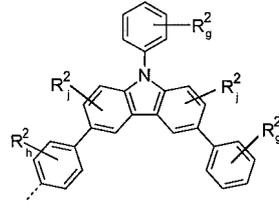
式 (R¹-110)



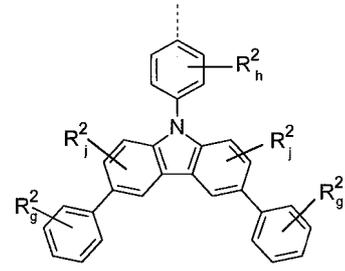
式 (R¹-111)



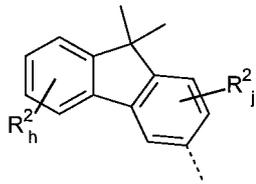
式 (R¹-112)



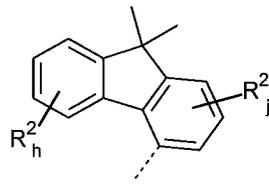
式 (R¹-113)



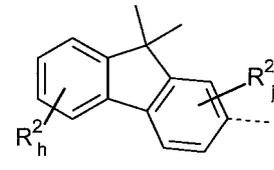
式 (R¹-114)



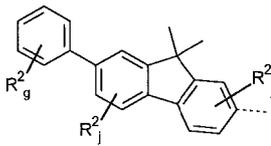
式 (R¹-115)



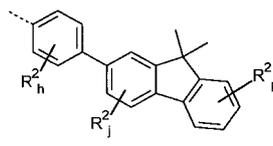
式 (R¹-116)



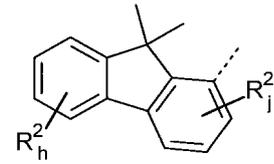
式 (R¹-117)



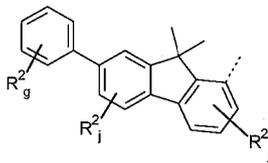
式 (R¹-118)



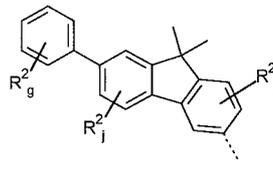
式 (R¹-119)



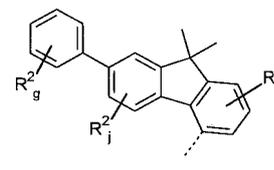
式 (R¹-120)



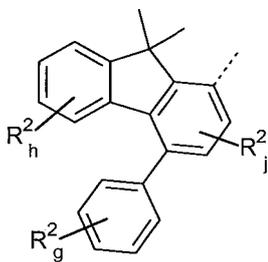
式 (R¹-121)



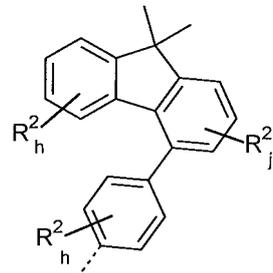
式 (R¹-122)



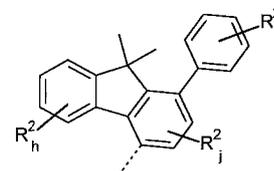
式 (R¹-123)



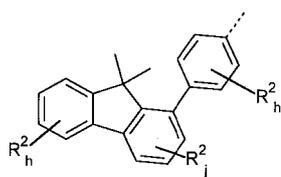
式 (R¹-124)



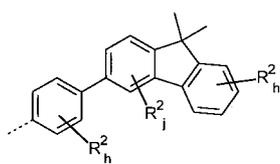
式 (R¹-125)



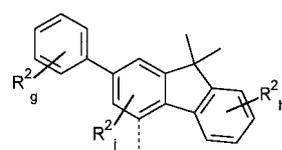
式 (R¹-126)



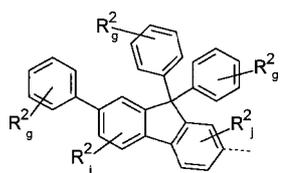
式 (R¹-127)



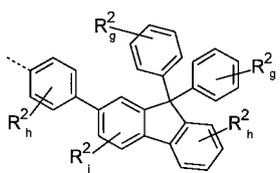
式 (R¹-128)



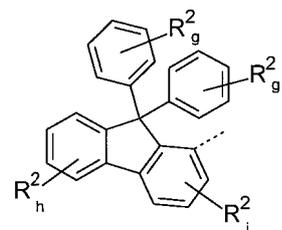
式 (R¹-129)



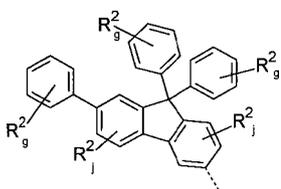
式 (R¹-130)



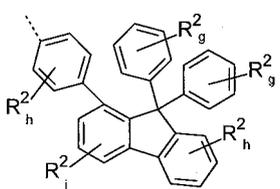
式 (R¹-131)



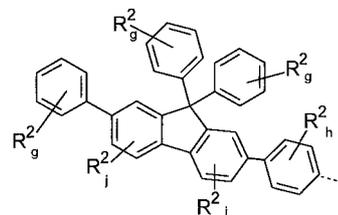
式 (R¹-132)



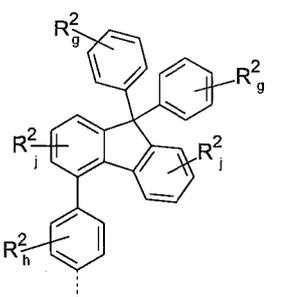
式 (R¹-133)



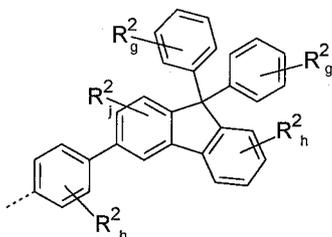
式 (R¹-134)



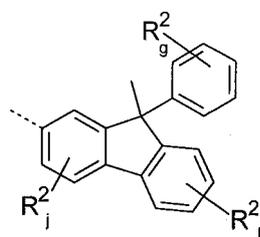
式 (R¹-135)



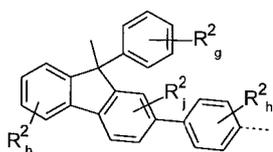
式 (R¹-136)



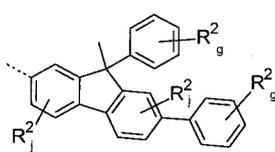
式 (R¹-137)



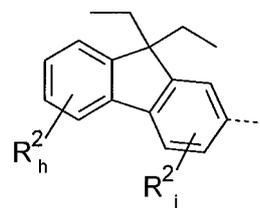
式 (R¹-138)



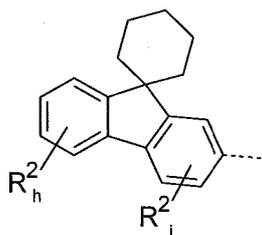
式 (R¹-139)



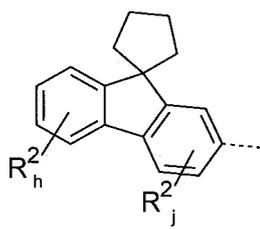
式 (R¹-140)



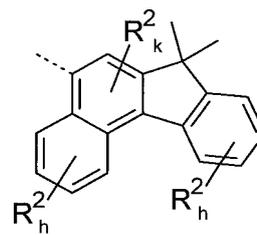
式 (R¹-141)



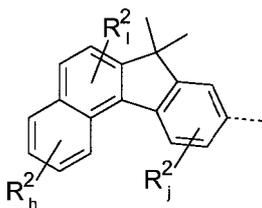
式 (R¹-142)



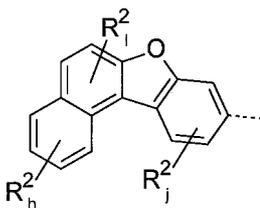
式 (R¹-143)



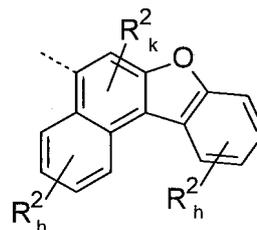
式 (R¹-144)



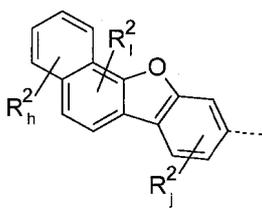
式 (R¹-145)



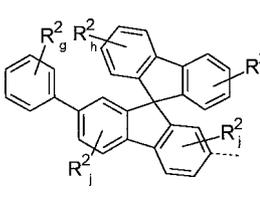
式 (R¹-146)



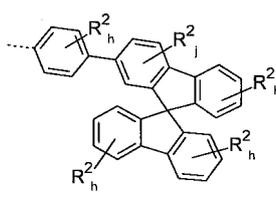
式 (R¹-147)



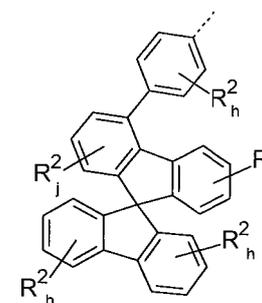
式 (R¹-148)



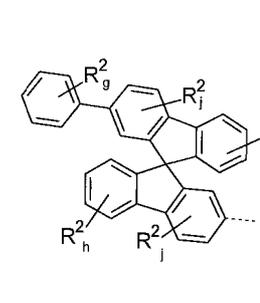
式 (R¹-149)



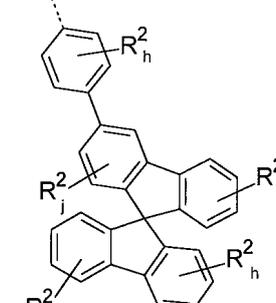
式 (R¹-150)



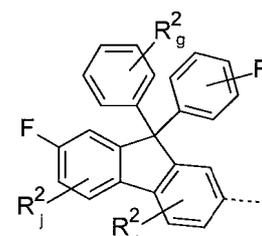
式 (R¹-151)



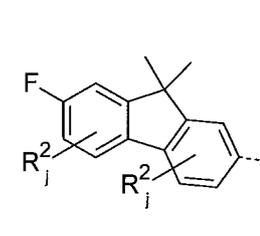
式 (R¹-152)



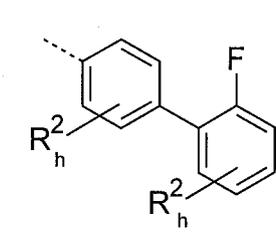
式 (R¹-153)



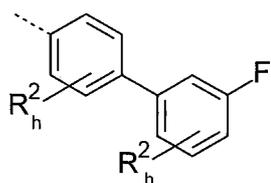
式 (R¹-154)



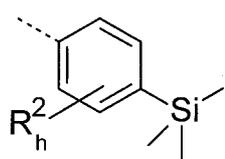
式 (R¹-155)



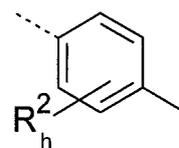
式 (R¹-156)



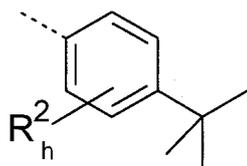
式 (R¹-157)



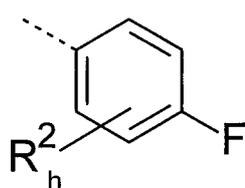
式 (R¹-158)



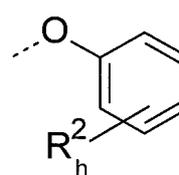
式 (R¹-159)



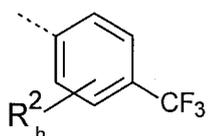
式 (R¹-160)



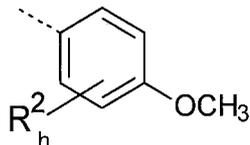
式 (R¹-161)



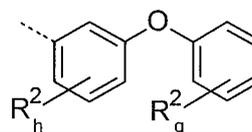
式 (R¹-162)



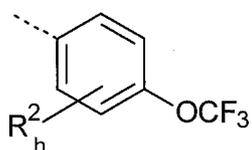
式 (R¹-163)



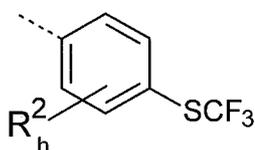
式 (R¹-164)



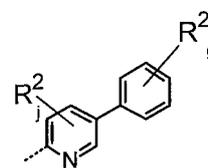
式 (R¹-165)



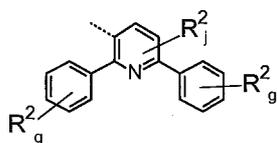
式 (R¹-166)



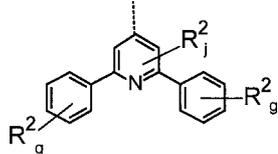
式 (R¹-167)



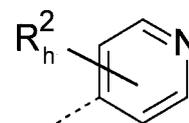
式 (R¹-168)



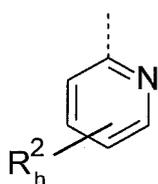
式 (R¹-169)



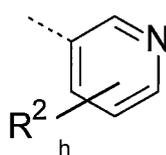
式 (R¹-170)



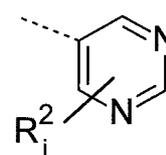
式 (R¹-171)



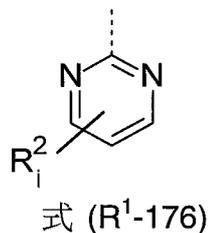
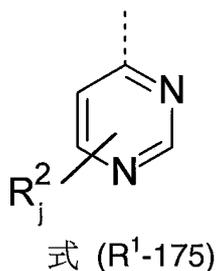
式 (R¹-172)



式 (R¹-173)



式 (R¹-174)



其中，所使用之符號如下：

Y¹ 為 O、S 或 NR²，較佳為 O 或 S；

i 於各情況下獨立地為 0、1 或 2；

j 於各情況下獨立地為 0、1、2 或 3；

h 於各情況下獨立地為 0、1、2、3 或 4；

g 於各情況下獨立地為 0、1、2、3、4 或 5；

R² 可具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 及 / 或 (II) 者，以及

虛線鍵標記附接位置。

【0091】於上述式 (R¹-1) 至 (R¹-177) 之結構中，較佳者為式 (R¹-1) 至 (R¹-64) 及 (R¹-94) 至 (R¹-177) 之基團，特佳者為式 (R¹-1) 至 (R¹-64) 及 (R¹-115) 至 (R¹-177) 之基團。

【0092】較佳可為以下情況：式 (R¹-1) 至 (R¹-177) 之結構中的下標 i、j、h 及 g 之總和總數於各情況下不超過 3，較佳不超過 2，及更佳不超過 1。

【0093】較佳的，式 (R¹-1) 至 (R¹-177) 中之 R² 基不與 R² 基所鍵結的芳基或雜芳基之環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係不形成任何稠合環系統。此包括與可鍵結至 R² 基之可能的 R³ 取代基形成稠合環系統。

【0094】於本發明之化合物係經芳族或雜芳族 R^1 或 R^2 基取代時，尤其是於其構造作為主體材料、電子傳輸材料或電洞傳輸材料的情況下，較佳係其不具任何具有超過兩個彼此直接稠合之芳族六員環的芳基或雜芳基之情況。更佳的，取代基完全不具任何具有彼此直接稠合之六員環的芳基或雜芳基。此較佳之原因係此等結構的低三重態能量 (triplet energy)。具有超過兩個彼此直接稠合之芳族六員環但儘管如此亦適用於本發明之稠合芳基為菲 (phenanthrene) 及聯伸三苯 (triphenylene)，原因係此等亦具有高三重態能階 (triplet level)。

【0095】在本發明一更佳實施態樣中， R^2 ，例如於式 (I) 之結構及此結構或參考此等式之結構的較佳實施態樣中者，在各情況下係相同或不同且係選自由下列所組成之群組：H，D，具有 1 至 10 個碳原子、較佳具有 1、2、3 或 4 個碳原子之脂族烴基 (aliphatic hydrocarbyl radical)，或具有 5 至 30 個芳族環原子、較佳具有 5 至 24 個芳族環原子、更佳具有 5 至 13 個芳族環原子及可經一或多個各具有 1 至 4 個碳原子之烷基所取代 (但較佳係未經取代) 之芳族或雜芳族環系統。

【0096】在本發明一更佳實施態樣中， R^3 ，例如於式 (I) 之結構及此結構或參考此等式之結構的較佳實施態樣中者，在各情況下係相同或不同且係選自由下列所組成之群組：H，D，F，CN，具有 1 至 10 個碳原子、較佳具有 1、2、3 或 4 個碳原子之脂族烴基，或具有 5 至 30 個芳族環原

子、較佳具有5至24個芳族環原子、更佳具有5至13個芳族環原子及可經一或多個各具有1至4個碳原子之烷基所取代(但較佳係未經取代)之芳族或雜芳族環系統。

【0097】特佳者為具有式(I)或(IIa)至(IIId)之結構的本發明化合物，其中總數不超過4個、較佳不超過2個式X之基不為CH或CD，其中至少一個R^a或R基包含電子傳輸基團，較佳為三吡基，更佳為其中之Q為式(Q-23)之基團的式(QL)基團或其中之Z為式(Z-48)之基團的式(L1-Z)基團，其具有以下性質：

R, 不為 H 或 D, 或 Ar ¹	較佳的	於式 (QL) 或 (L ¹ -Z) 中: L ¹	較佳的
R ¹ -1 至 R ¹ -177	R ¹ -1 至 R ¹ -64 及 (R ¹ -115) 至 (R ¹ -177)	鍵(bond) 或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -163)	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -78) 及/或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)
R ¹ -1 至 R ¹ -177	R ¹ -1 至 R ¹ -64 及 (R ¹ -115) 至 (R ¹ -177)	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -29) 或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)	鍵
R ¹ -1 至 R ¹ -4	R ¹ -1	鍵或 (L ¹ -1) 至 (L ¹ -163)	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -78) 及/或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)
R ¹ -1 至 R ¹ -4	R ¹ -1	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -29) 或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)	鍵

【0098】較佳者進一步為具有式(IIIa)之結構的本發

明化合物，其中 $p=0$ 以及其中下標 m 之總和總數不超過 3，較佳不超過 2，尤佳為 1，其中至少一個 R 為電子傳輸基團，較佳為三吡基，更佳為其中 Q 為式 (Q-23) 之基團的式 (QL) 基團或其中 Z 為式 (Z-48) 之基團的式 (L¹-Z) 基團，其具有以下性質：

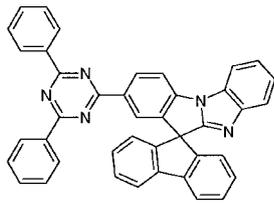
R, 不為 H 或 D, 或 Ar ¹	較佳的	於式 (QL) 或 (L ¹ -Z) 中 : L ¹	較佳的
R ¹ -1 至 R ¹ -177	R ¹ -1 至 R ¹ -64 及 (R ¹ -115) 至 (R ¹ -177)	鍵 (bond) 或 (L ¹ -1) 至 (L ¹ -163)	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -78) 及/或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)
R ¹ -1 至 R ¹ -177	R ¹ -1 至 R ¹ -64 及 (R ¹ -115) 至 (R ¹ -177)	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -29) 或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)	鍵
R ¹ -1 至 R ¹ -4	R ¹ -1	鍵或 (L ¹ -1) 至 (L ¹ -163)	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -78) 及/或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)
R ¹ -1 至 R ¹ -4	R ¹ -1	鍵或 (L ¹ -163), (L ¹ -1) 至 (L ¹ -29) 或 (L ¹ -92) 至 (L ¹ -162)	鍵

【0099】特佳者為具有式 (IVa)、(IVb)、(IVc) 較佳為 (IVa) 之結構的本發明化合物，或為具有式 (Va)、(Vb)、(Ve) 較佳為 (Vb) 之結構的化合物，其中下標 m 及 n 之總和總數不超過 3，較佳不超過 2，尤佳為 0，其中式 (L¹-Z) 之基團包含至少一電子傳輸基團，較佳為三吡基，更佳為其中

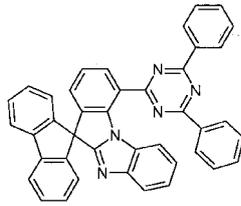
Z為式(Z-48)之基團的式(L1-Z)之基團，其具有以下性質：

R ¹ , 不為 H 或 D, 或 Ar ¹	較佳的	L ¹	較佳的
R ¹⁻¹ 至 R ¹⁻¹⁷⁷	R ¹⁻¹ 至 R ¹⁻⁶⁴ 及 (R ¹⁻¹¹⁵) 至 (R ¹⁻¹⁷⁷)	鍵或 (L ¹⁻¹) 至 (L ¹⁻¹⁶³)	鍵或 (L ¹⁻¹⁶³), (L ¹⁻¹) 至 (L ¹⁻⁷⁸) 及/或 (L ¹⁻⁹²) 至 (L ¹⁻¹⁶²)
R ¹⁻¹ 至 R ¹⁻¹⁷⁷	R ¹⁻¹ 至 R ¹⁻⁶⁴ 及 (R ¹⁻¹¹⁵) 至 (R ¹⁻¹⁷⁷)	鍵或 (L ¹⁻¹⁶³), (L ¹⁻¹) 至 (L ¹⁻²⁹) 或 (L ¹⁻⁹²) 至 (L ¹⁻¹⁶²)	鍵
R ¹⁻¹ 至 R ¹⁻⁴	R ¹⁻¹	鍵或 (L ¹⁻¹) 至 (L ¹⁻¹⁶³)	鍵或 (L ¹⁻¹⁶³), (L ¹⁻¹) 至 (L ¹⁻⁷⁸) 及/或 (L ¹⁻⁹²) 至 (L ¹⁻¹⁶²)
R ¹⁻¹ 至 R ¹⁻⁴	R ¹⁻¹	鍵或 (L ¹⁻¹⁶³), (L ¹⁻¹) 至 (L ¹⁻²⁹) 或 (L ¹⁻⁹²) 至 (L ¹⁻¹⁶²)	鍵

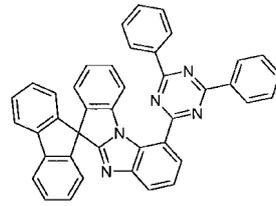
【0100】適用本發明化合物之實例為如下所示之下列式1至407的結構：



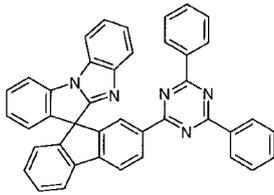
1



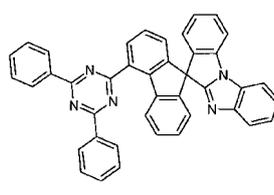
2



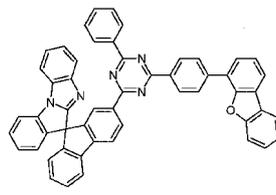
3



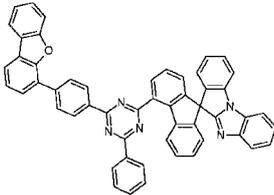
4



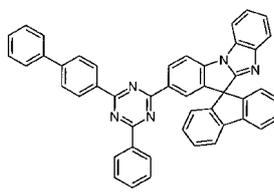
5



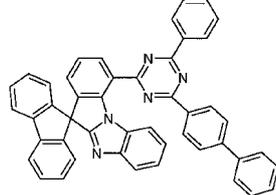
6



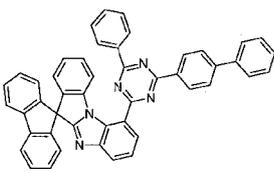
7



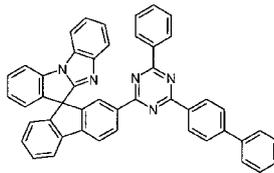
8



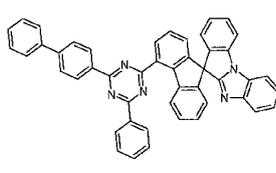
9



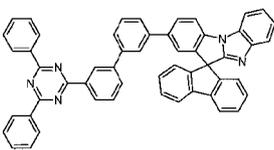
10



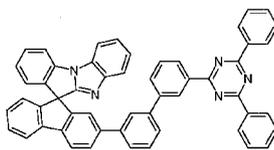
11



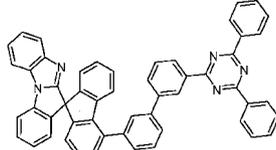
12



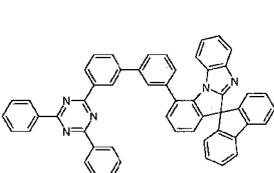
13



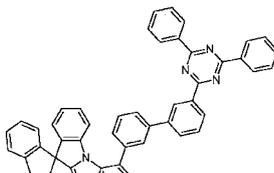
14



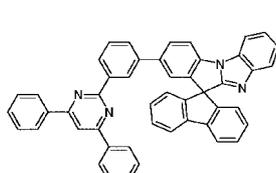
15



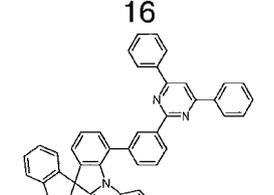
16



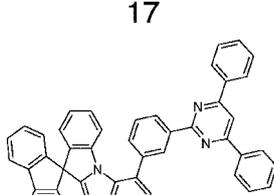
17



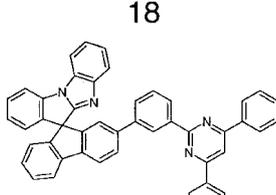
18



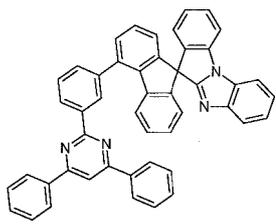
19



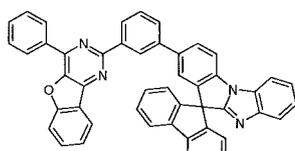
20



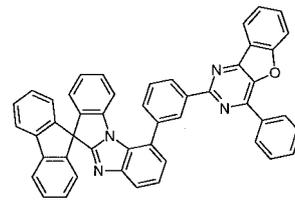
21



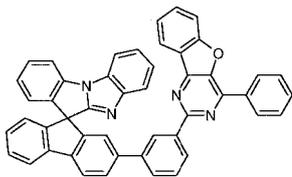
22



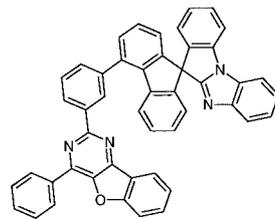
23



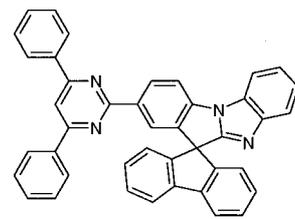
24



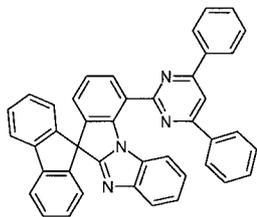
25



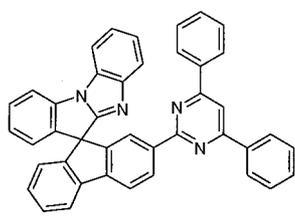
26



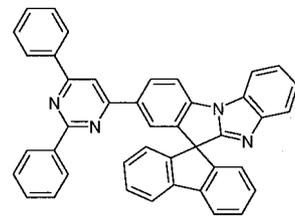
27



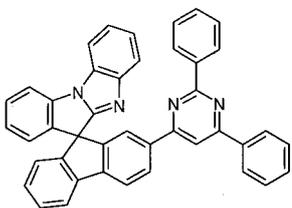
28



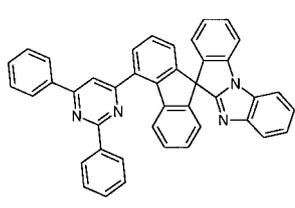
29



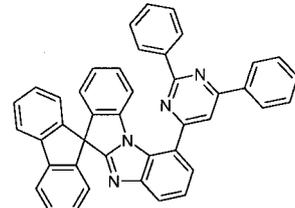
30



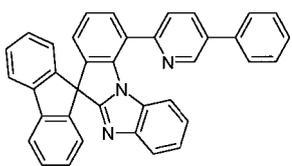
31



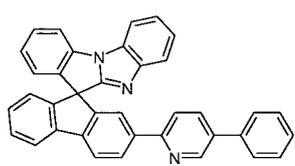
32



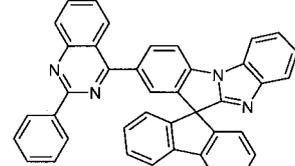
33



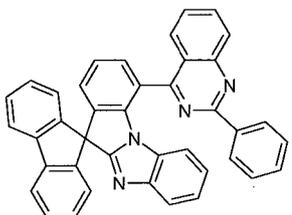
34



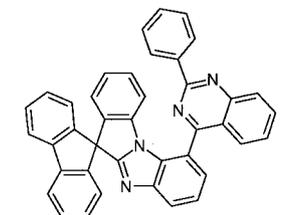
35



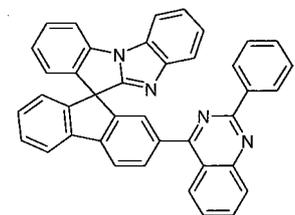
36



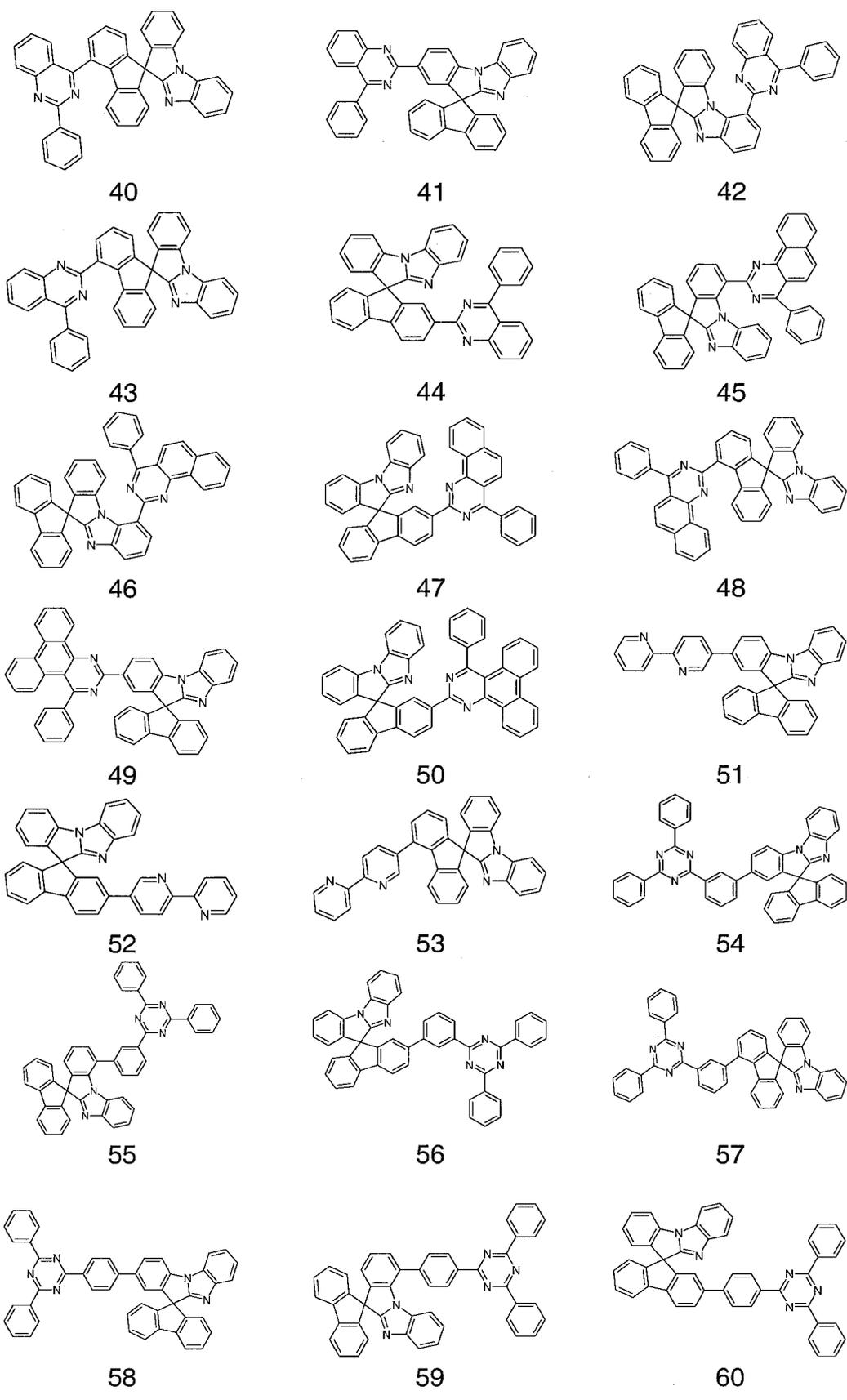
37

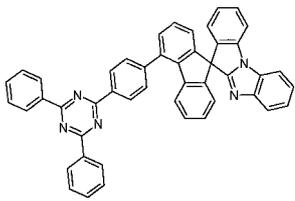


38

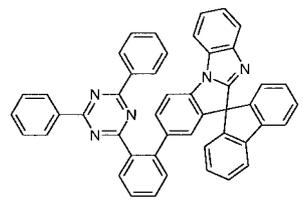


39

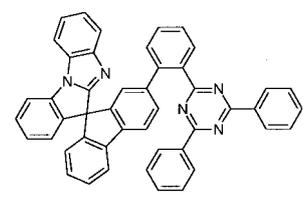




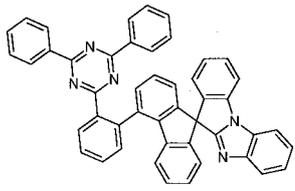
61



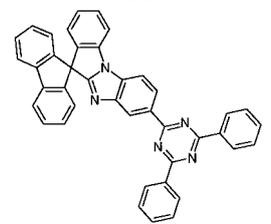
62



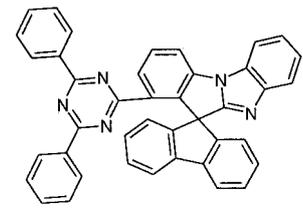
63



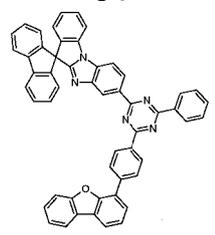
64



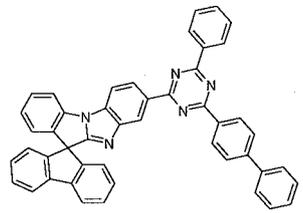
65



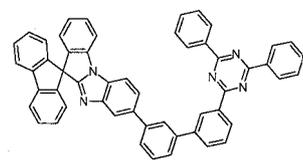
66



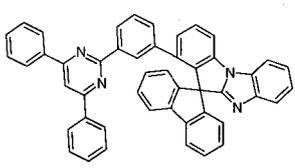
67



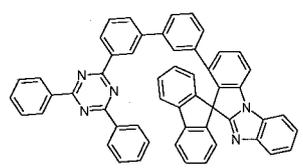
68



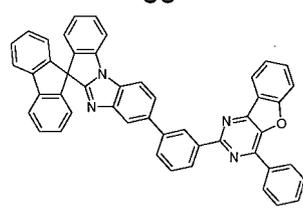
69



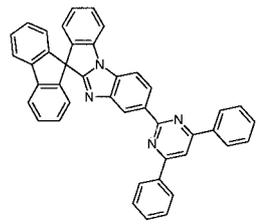
70



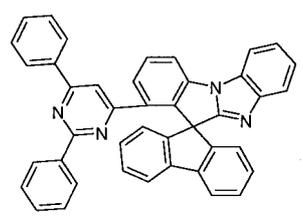
71



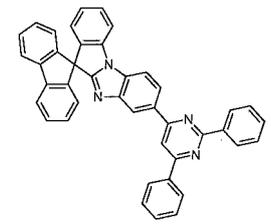
72



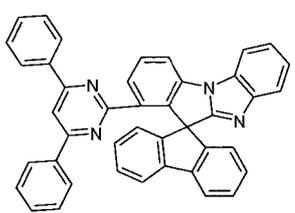
73



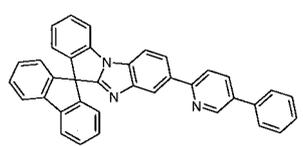
74



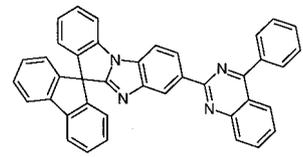
75



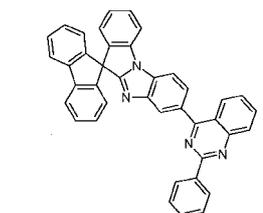
76



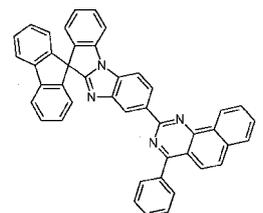
77



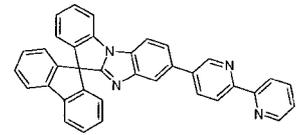
78



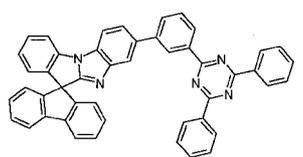
79



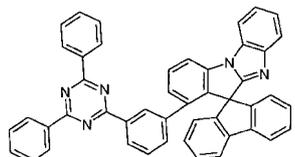
80



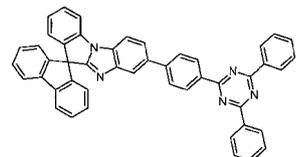
81



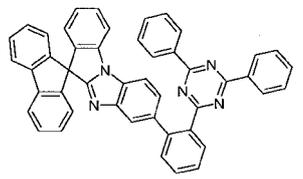
82



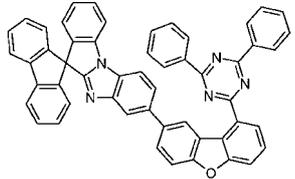
83



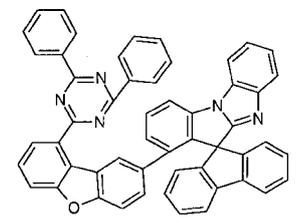
84



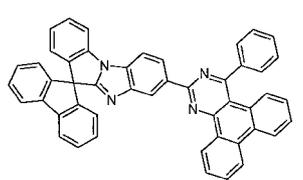
85



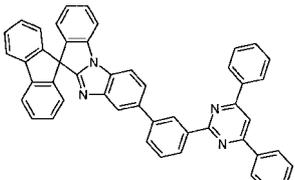
86



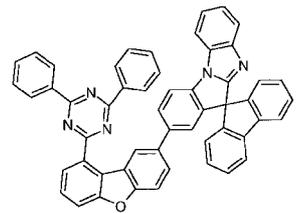
87



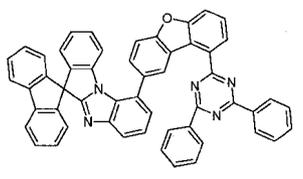
88



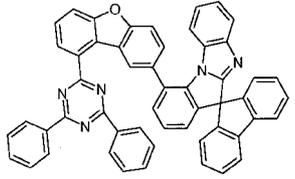
89



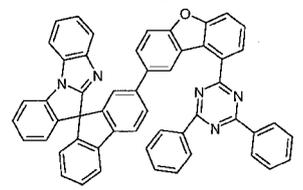
90



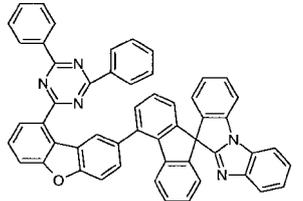
91



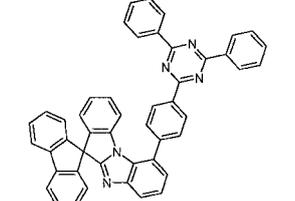
92



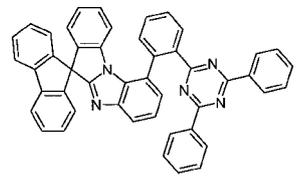
93



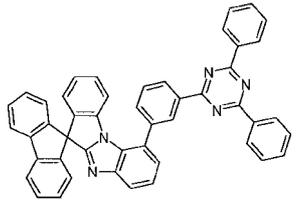
94



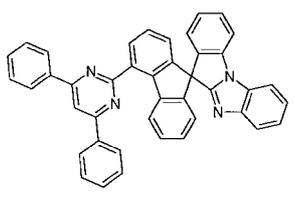
95



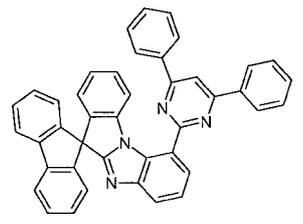
96



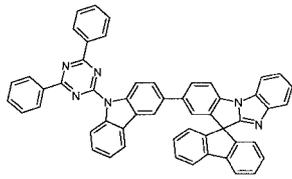
97



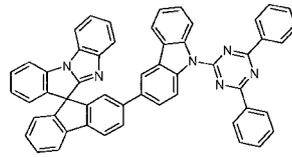
98



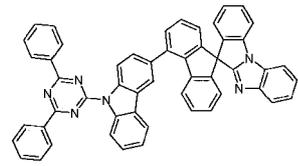
99



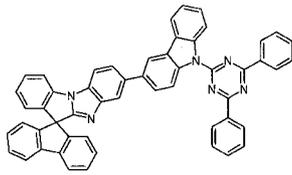
100



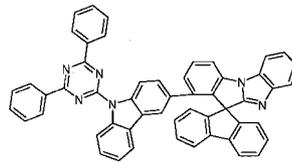
101



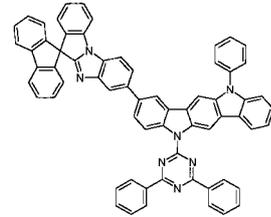
102



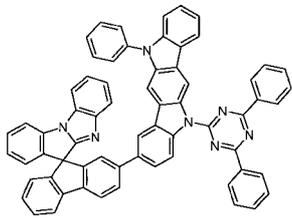
103



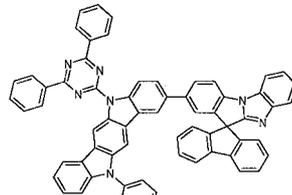
104



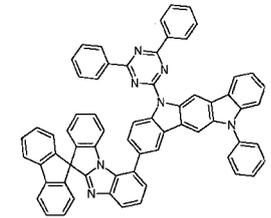
105



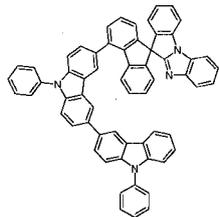
106



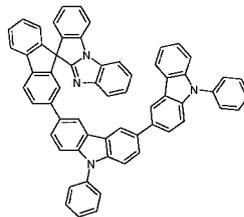
107



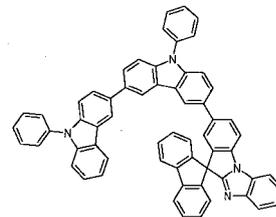
108



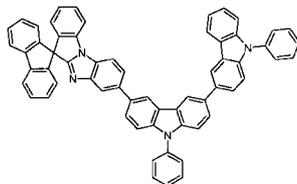
109



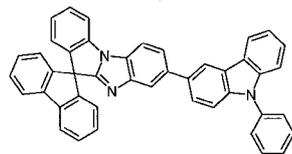
110



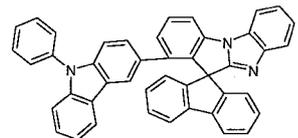
111



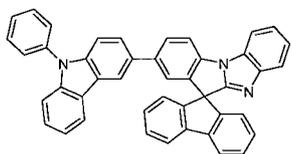
112



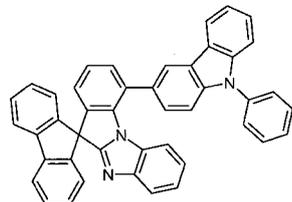
113



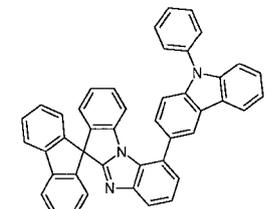
114



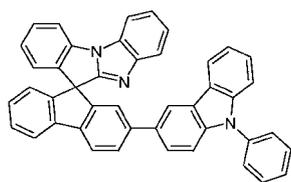
115



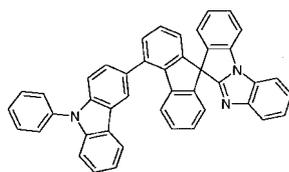
116



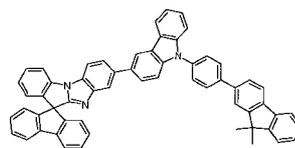
117



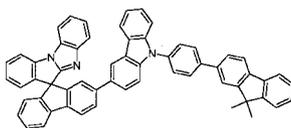
118



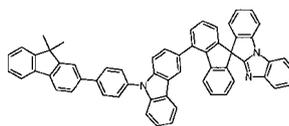
119



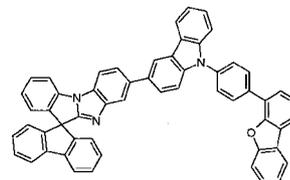
120



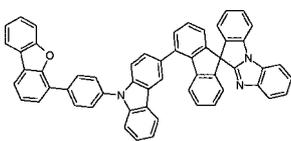
121



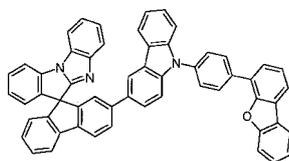
122



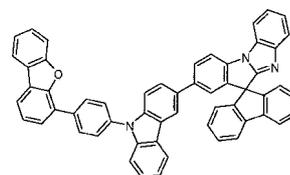
123



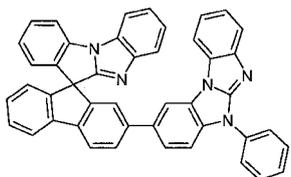
124



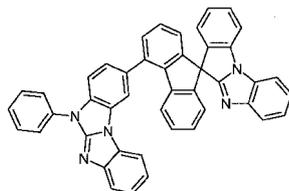
125



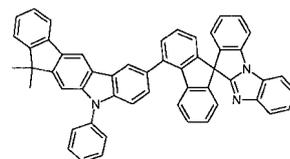
126



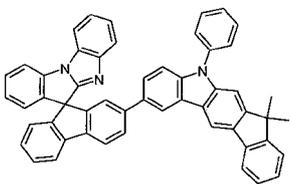
127



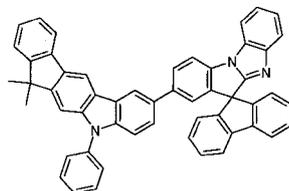
128



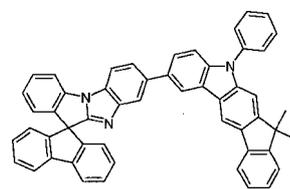
129



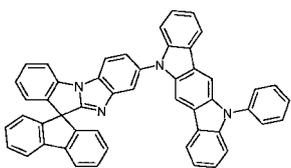
130



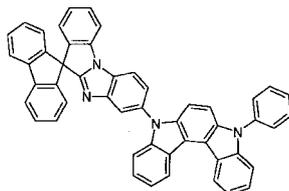
131



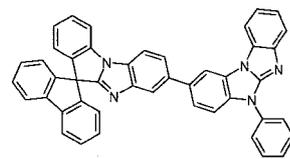
132



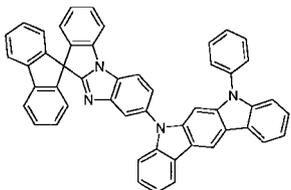
133



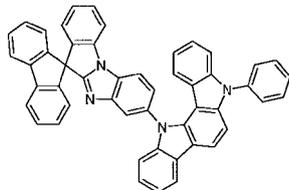
134



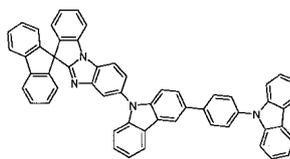
135



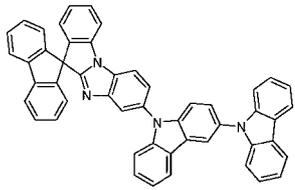
136



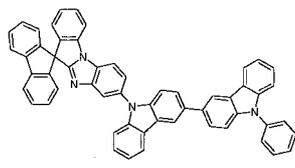
137



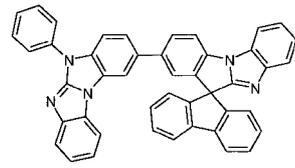
138



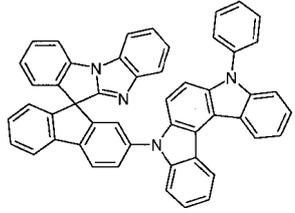
139



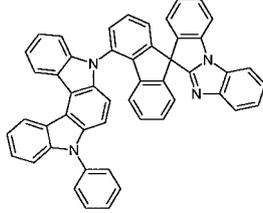
140



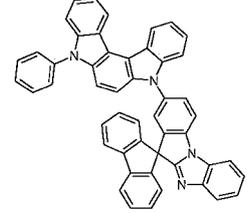
141



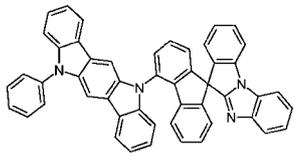
142



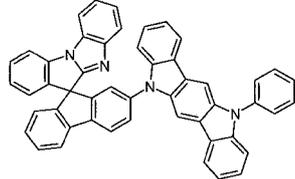
143



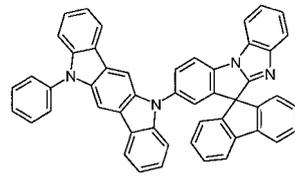
144



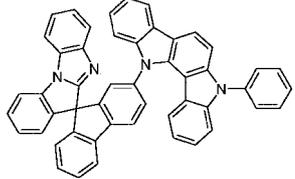
145



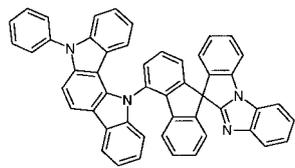
146



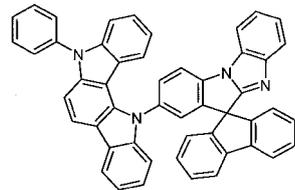
147



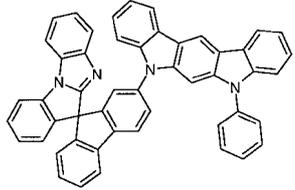
148



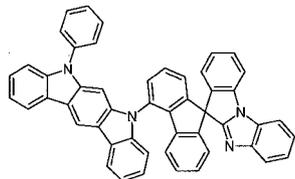
149



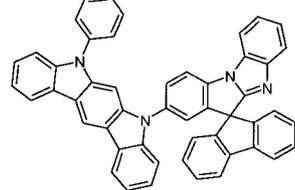
150



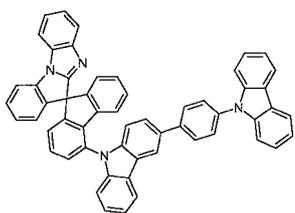
151



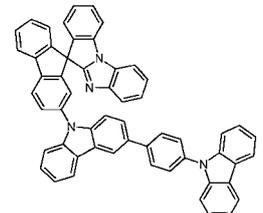
152



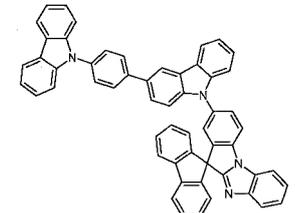
153



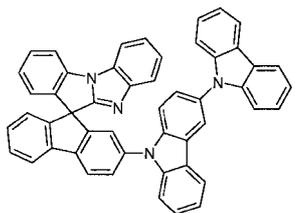
154



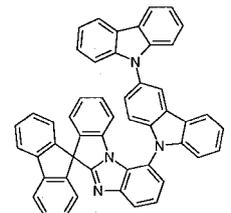
155



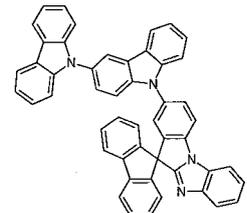
156



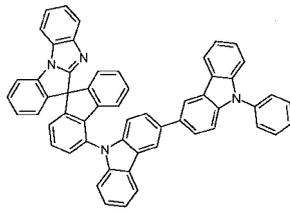
157



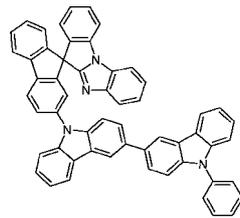
158



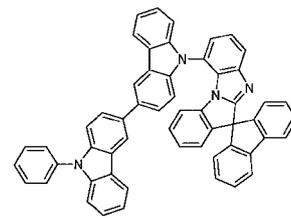
159



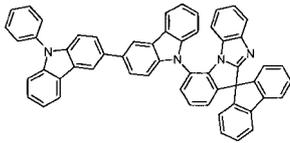
160



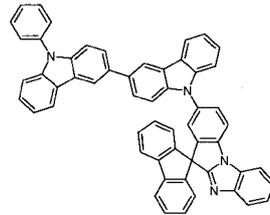
161



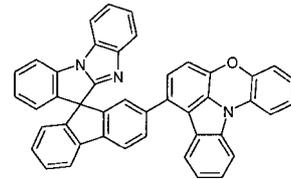
162



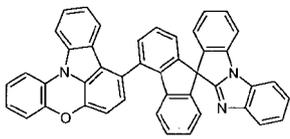
163



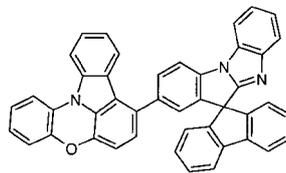
164



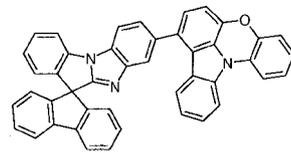
165



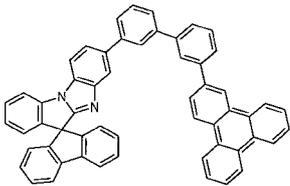
166



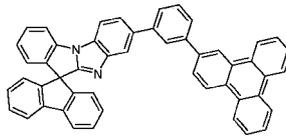
167



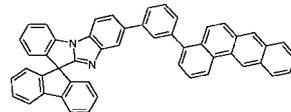
168



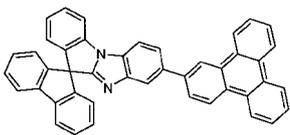
169



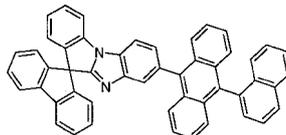
170



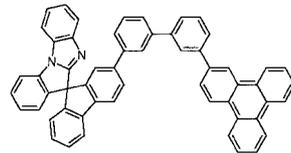
171



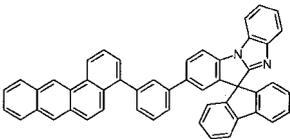
172



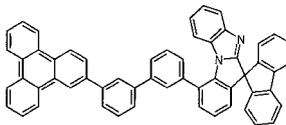
173



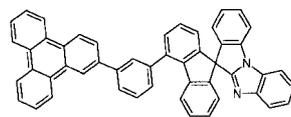
174



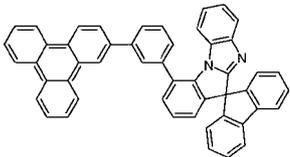
175



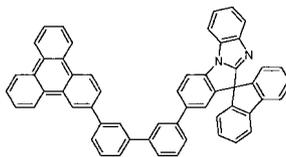
176



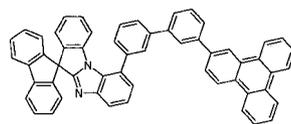
177



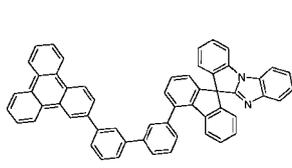
178



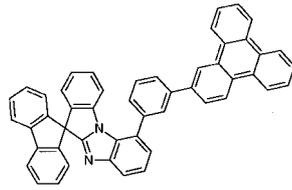
179



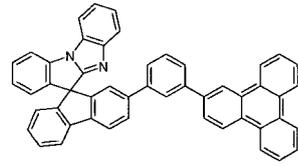
180



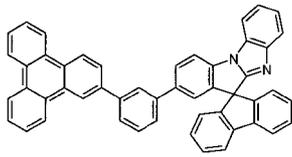
181



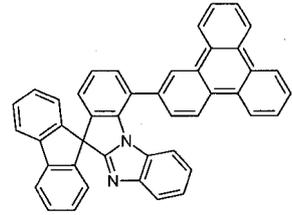
182



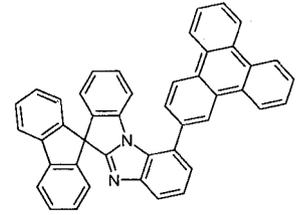
183



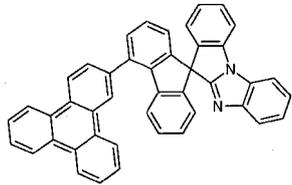
184



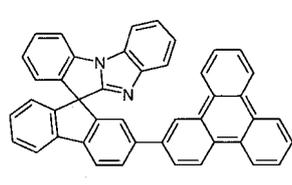
185



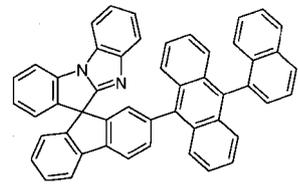
186



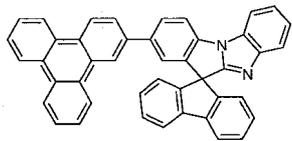
187



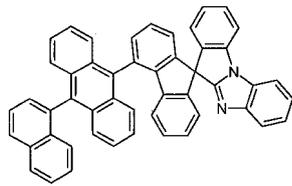
188



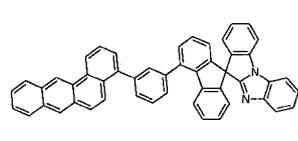
189



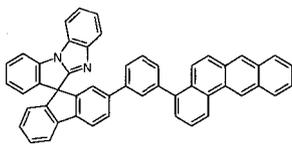
190



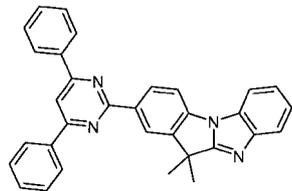
191



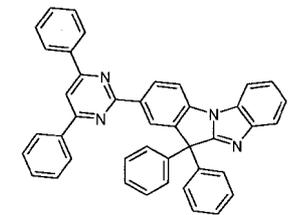
192



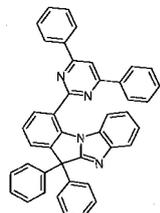
193



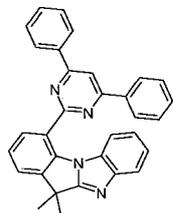
194



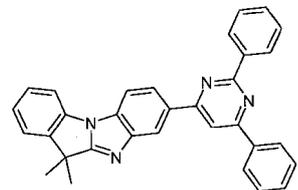
195



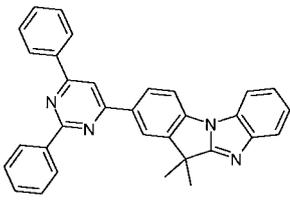
196



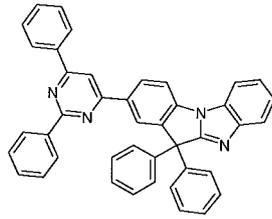
197



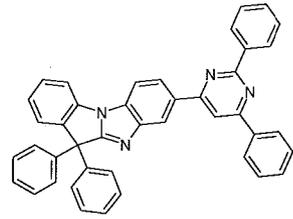
198



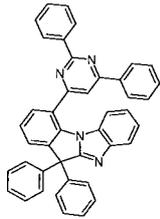
199



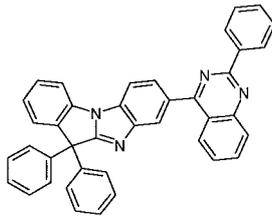
200



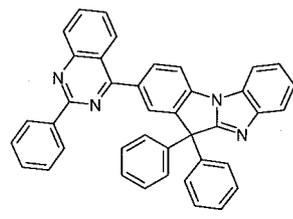
201



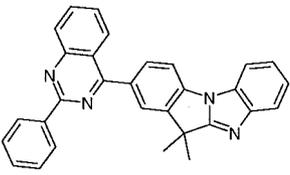
202



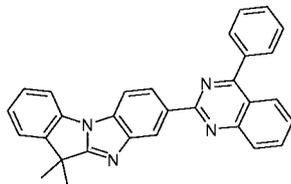
203



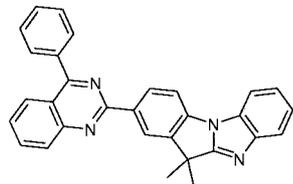
204



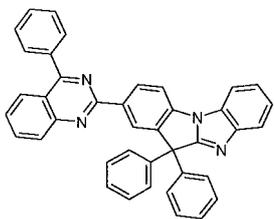
205



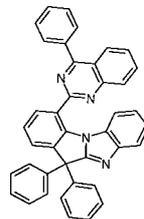
206



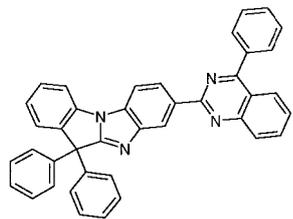
207



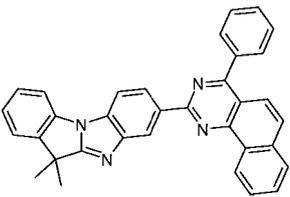
208



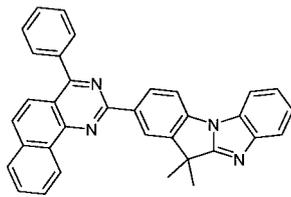
209



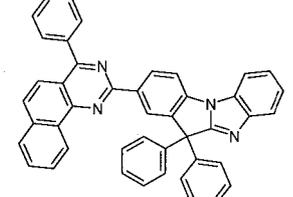
210



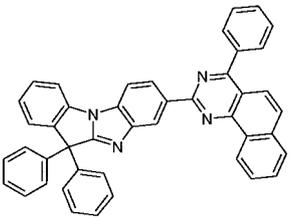
211



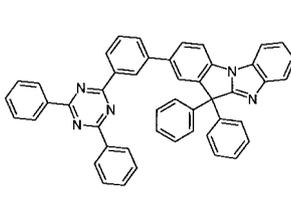
212



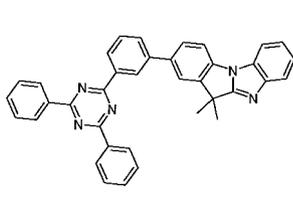
213



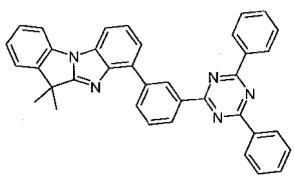
214



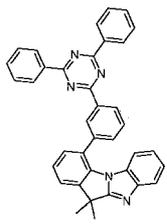
215



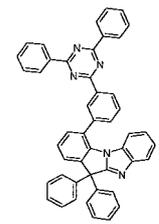
216



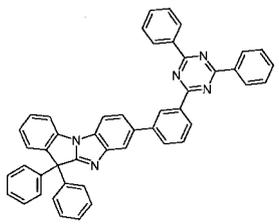
217



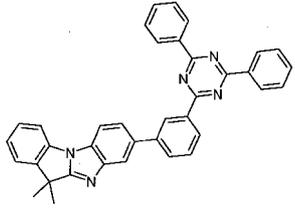
218



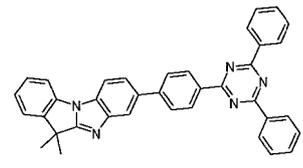
219



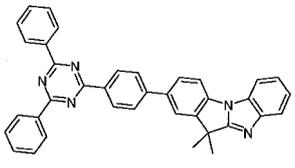
220



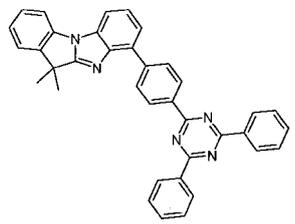
221



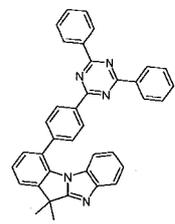
222



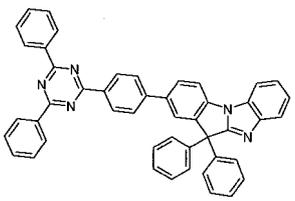
223



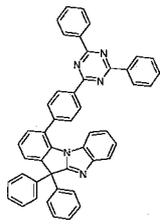
224



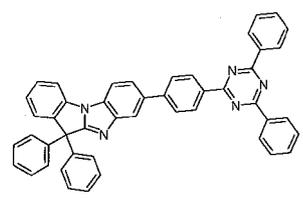
225



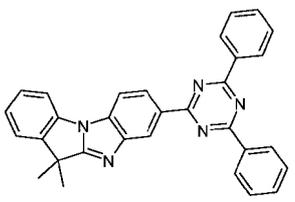
226



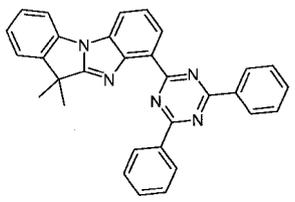
227



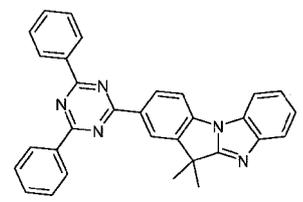
228



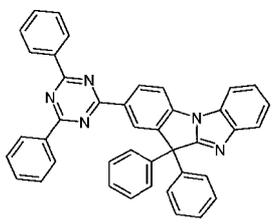
229



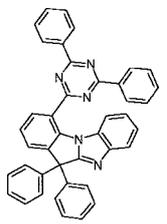
230



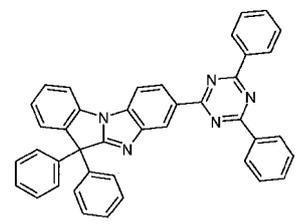
231



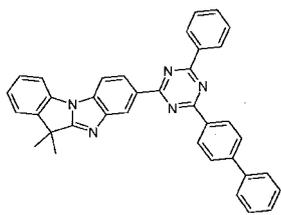
232



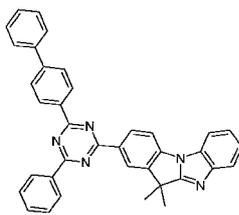
233



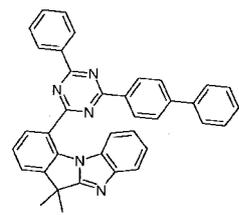
234



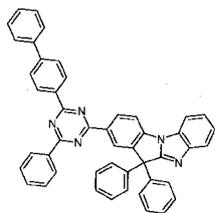
235



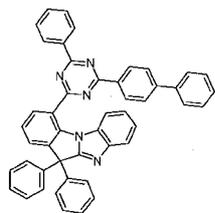
236



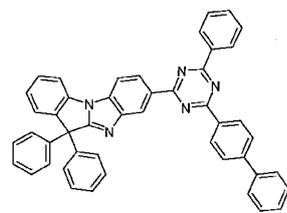
237



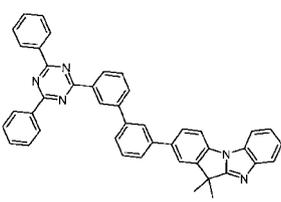
238



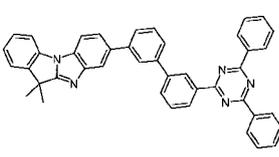
239



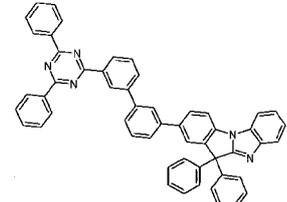
240



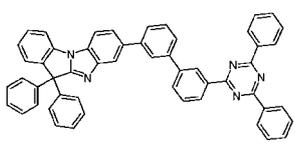
241



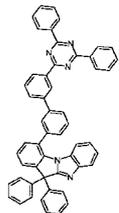
242



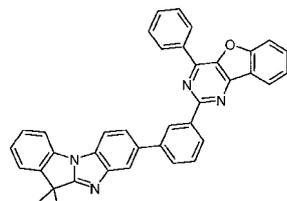
243



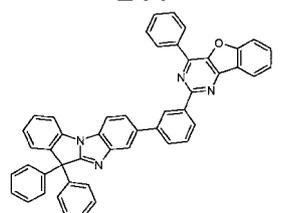
244



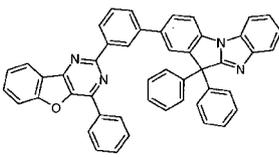
245



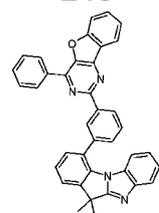
246



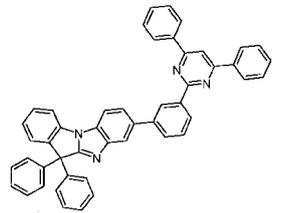
247



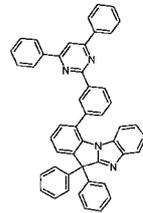
248



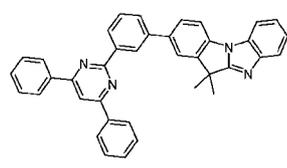
249



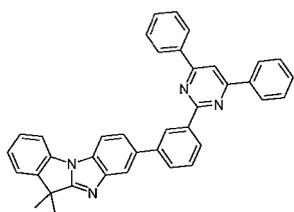
250



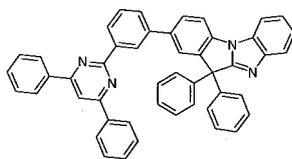
251



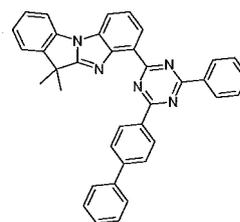
252



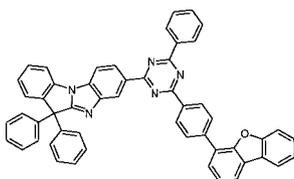
253



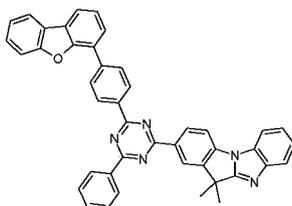
254



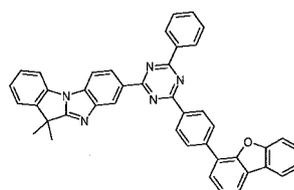
255



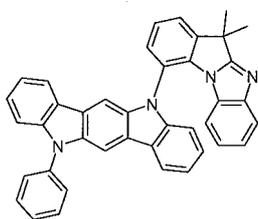
256



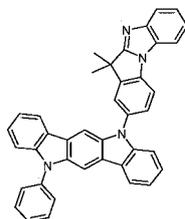
257



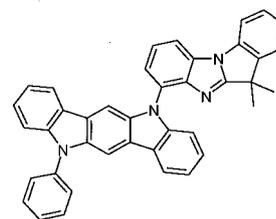
258



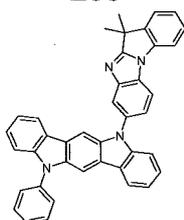
259



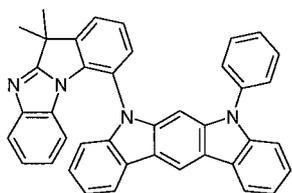
260



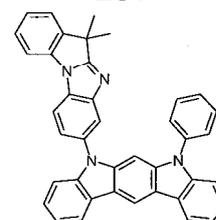
261



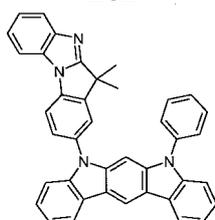
262



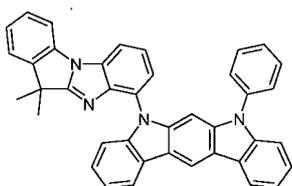
263



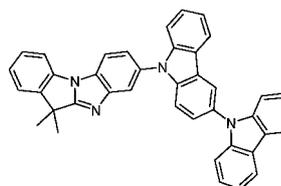
264



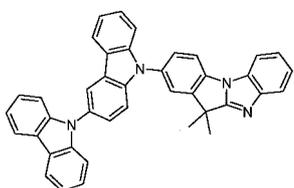
265



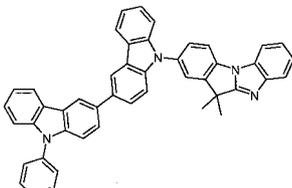
266



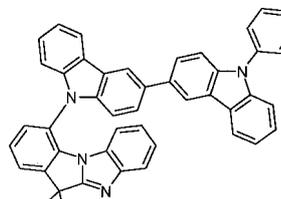
267



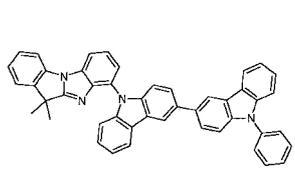
268



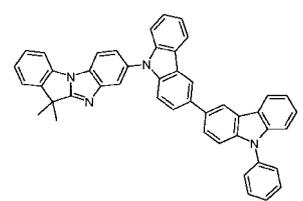
269



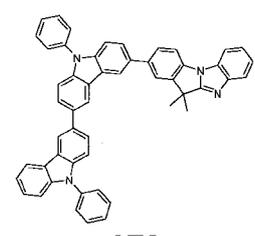
270



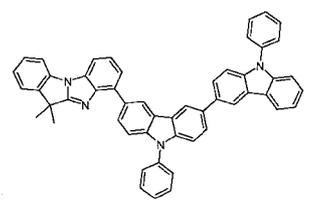
271



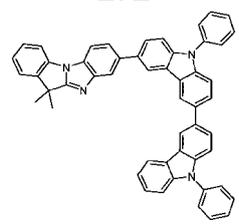
272



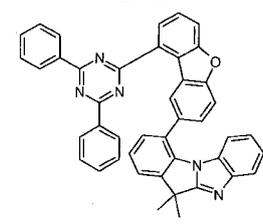
273



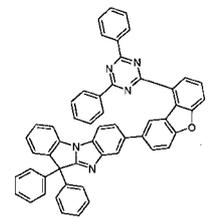
274



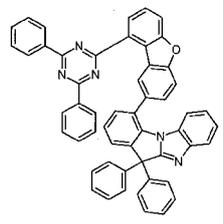
275



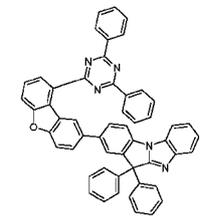
276



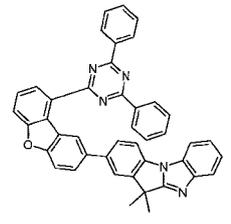
277



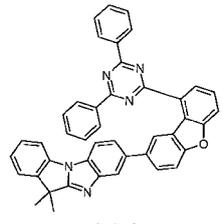
278



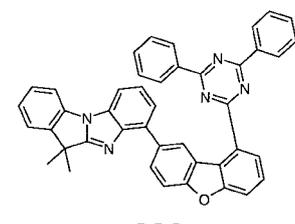
279



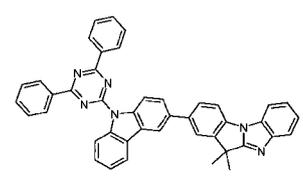
280



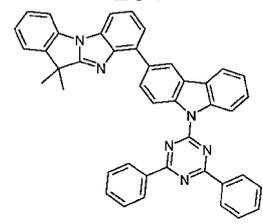
281



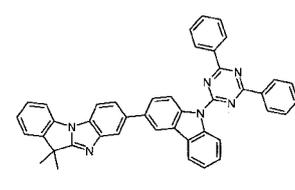
282



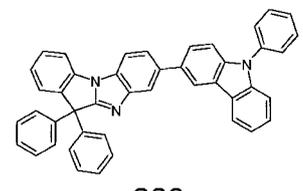
283



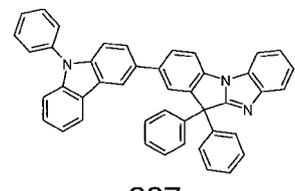
284



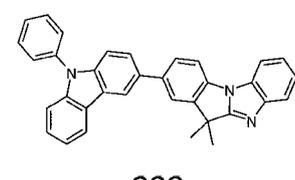
285



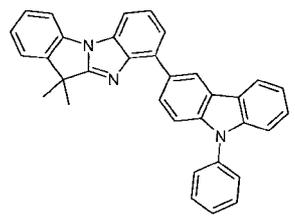
286



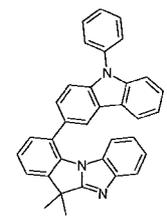
287



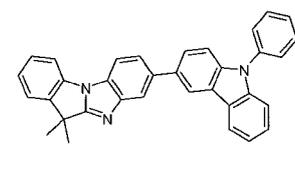
288



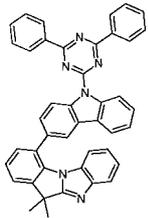
289



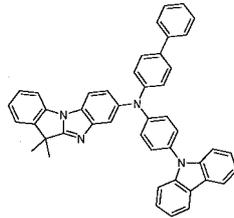
290



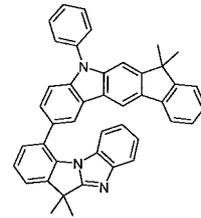
291



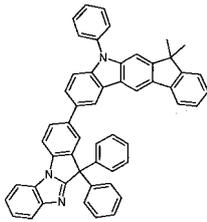
292



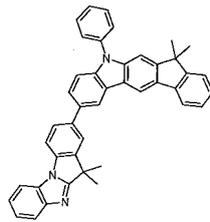
293



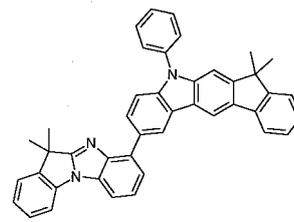
294



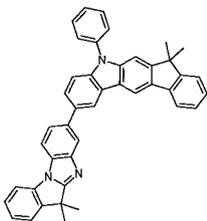
295



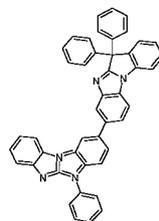
296



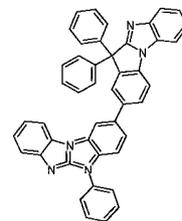
297



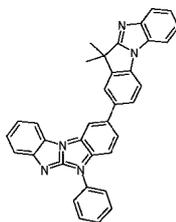
298



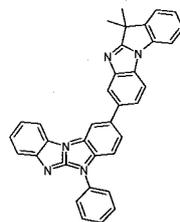
299



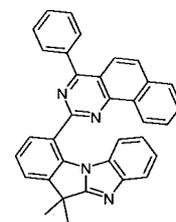
300



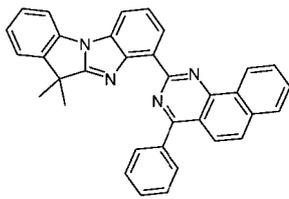
301



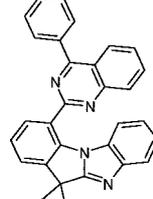
302



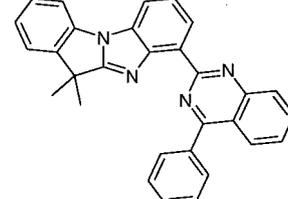
303



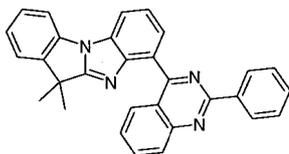
304



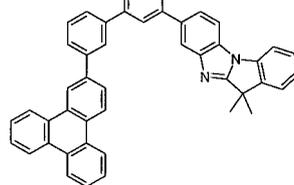
305



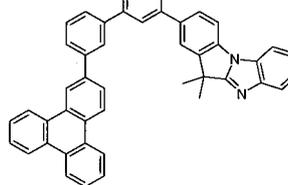
306



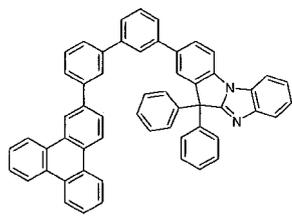
307



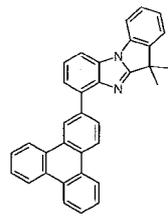
308



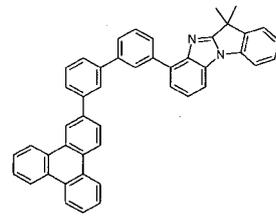
309



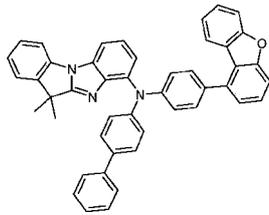
310



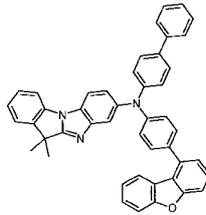
311



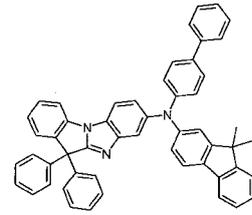
312



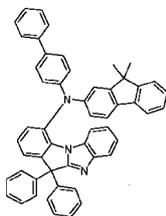
313



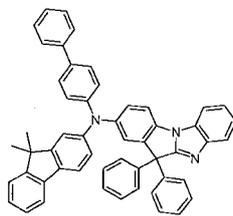
314



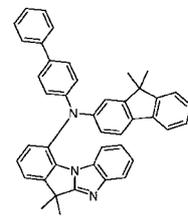
315



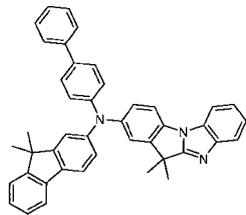
316



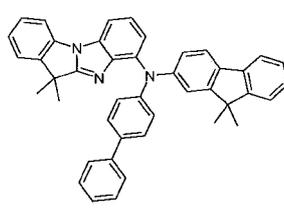
317



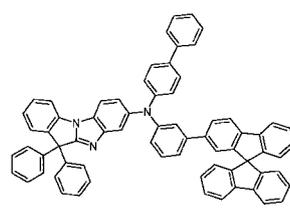
318



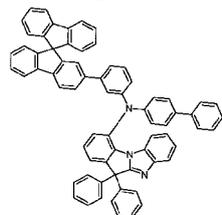
319



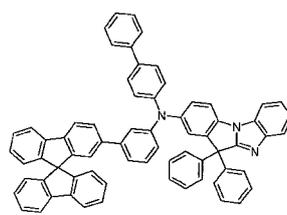
320



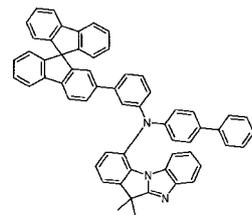
321



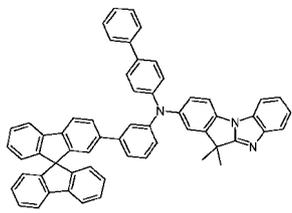
322



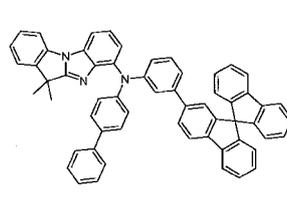
323



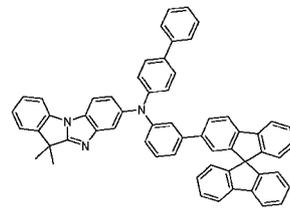
324



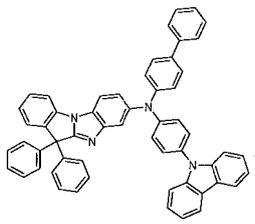
325



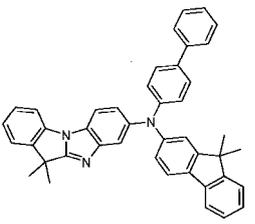
326



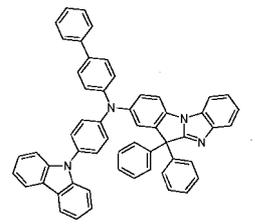
327



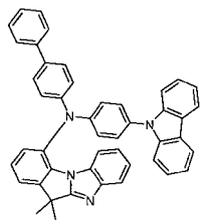
328



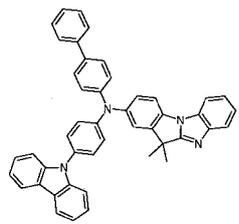
329



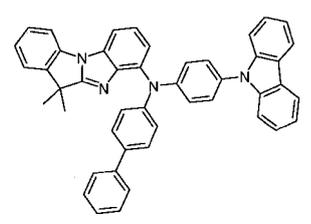
330



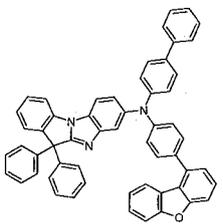
331



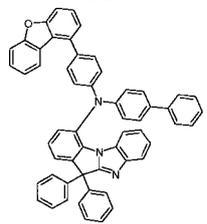
332



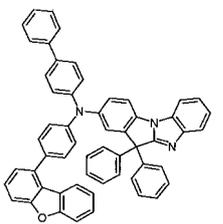
333



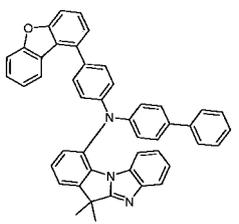
334



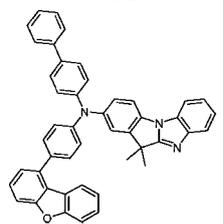
335



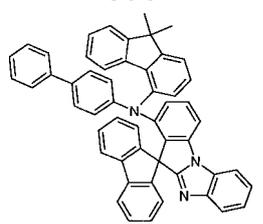
336



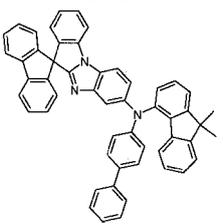
337



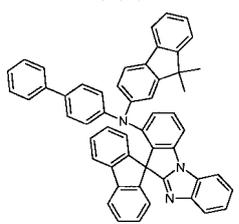
338



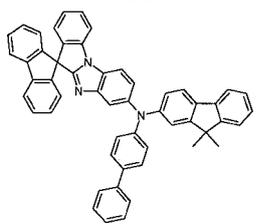
339



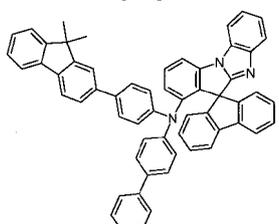
340



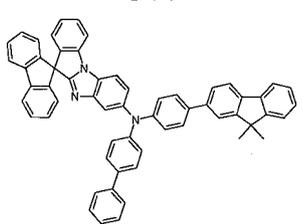
341



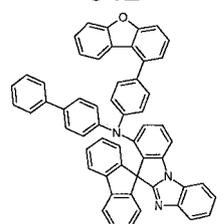
342



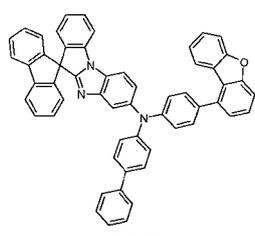
343



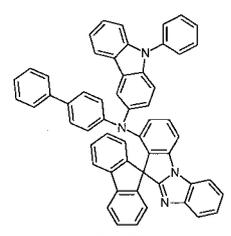
344



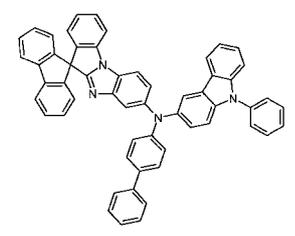
345



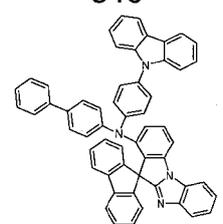
346



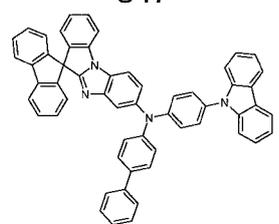
347



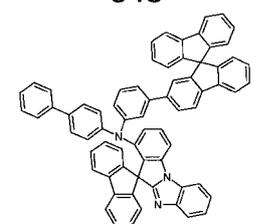
348



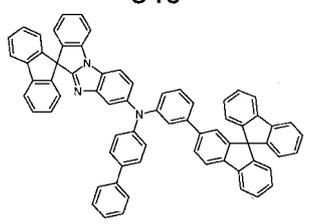
349



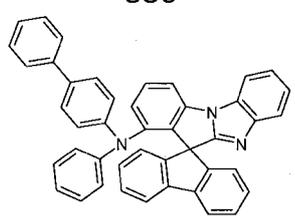
350



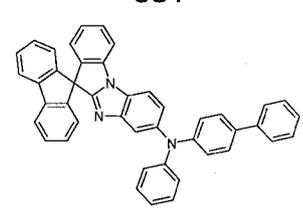
351



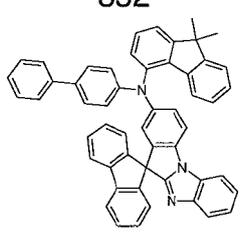
352



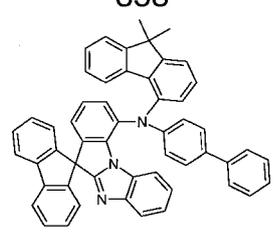
353



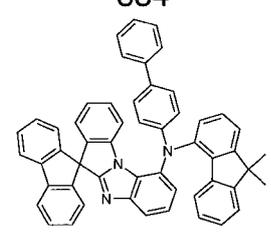
354



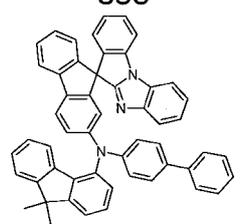
355



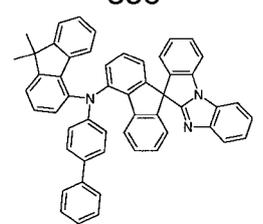
356



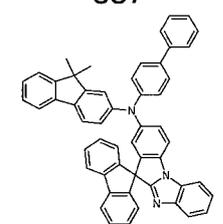
357



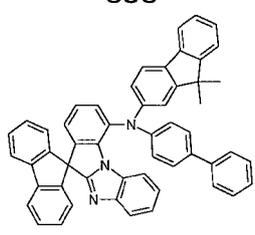
358



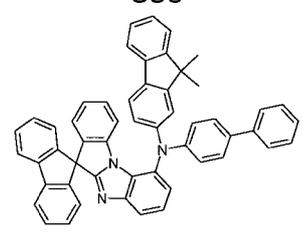
359



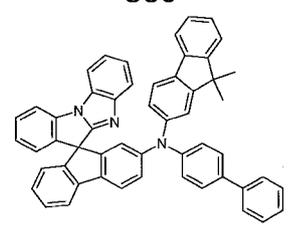
360



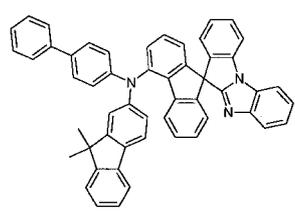
361



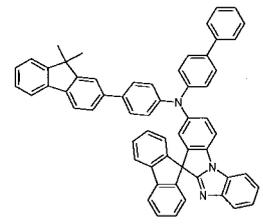
362



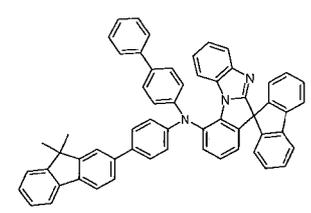
363



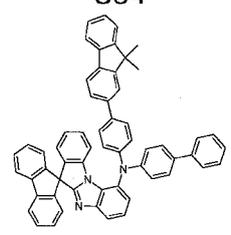
364



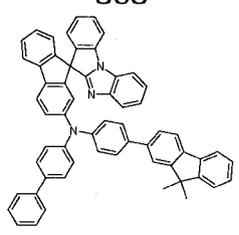
365



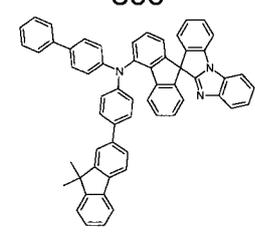
366



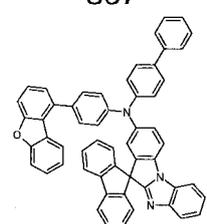
367



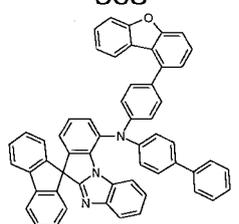
368



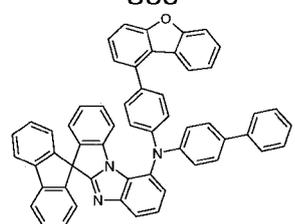
369



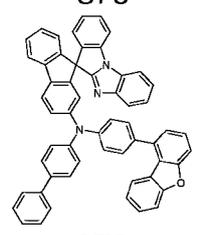
370



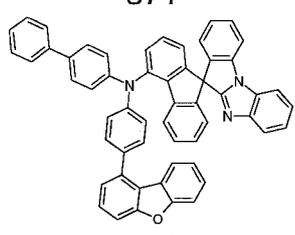
371



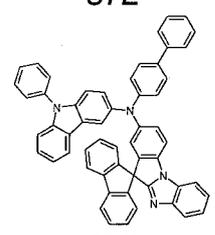
372



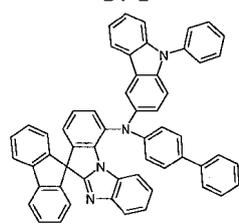
373



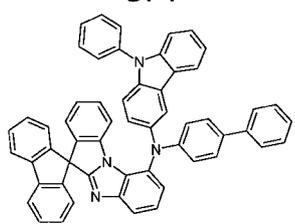
374



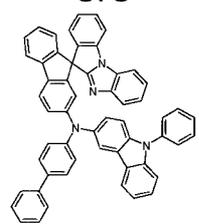
375



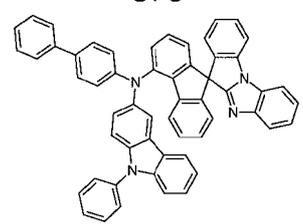
376



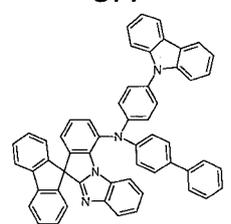
377



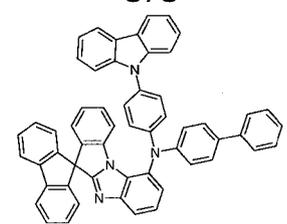
378



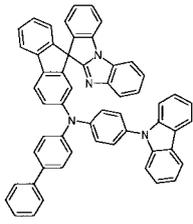
379



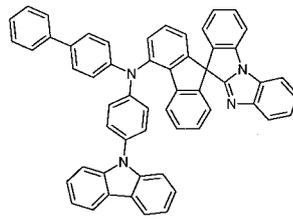
380



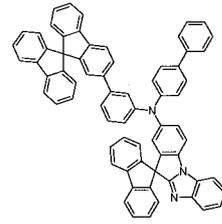
381



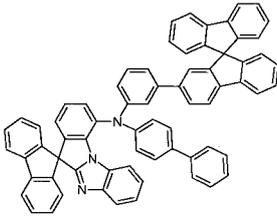
382



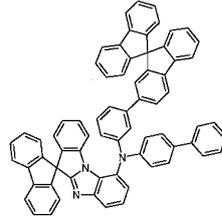
383



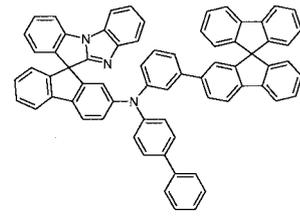
384



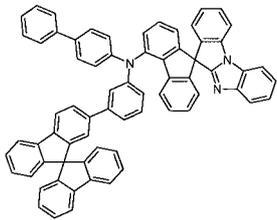
385



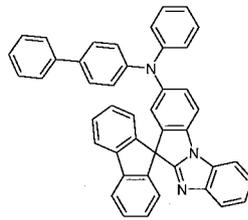
386



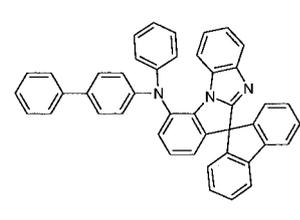
387



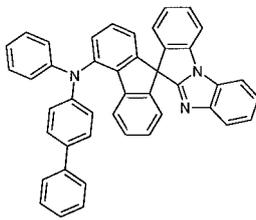
388



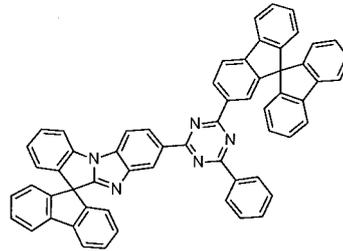
389



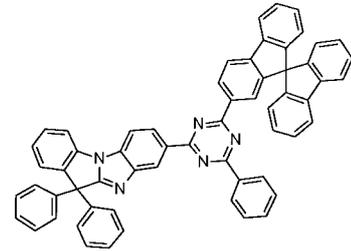
390



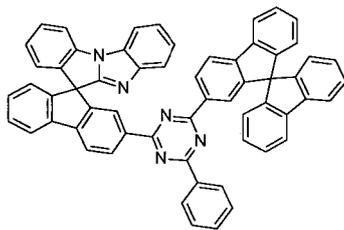
391



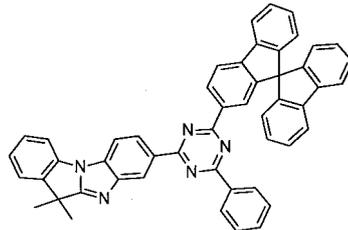
392



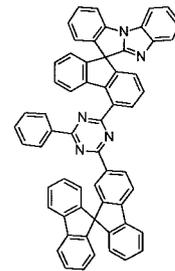
393



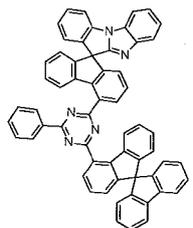
394



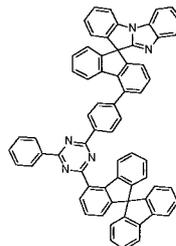
395



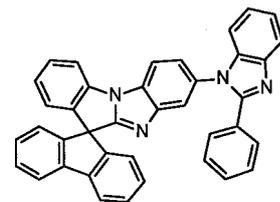
396



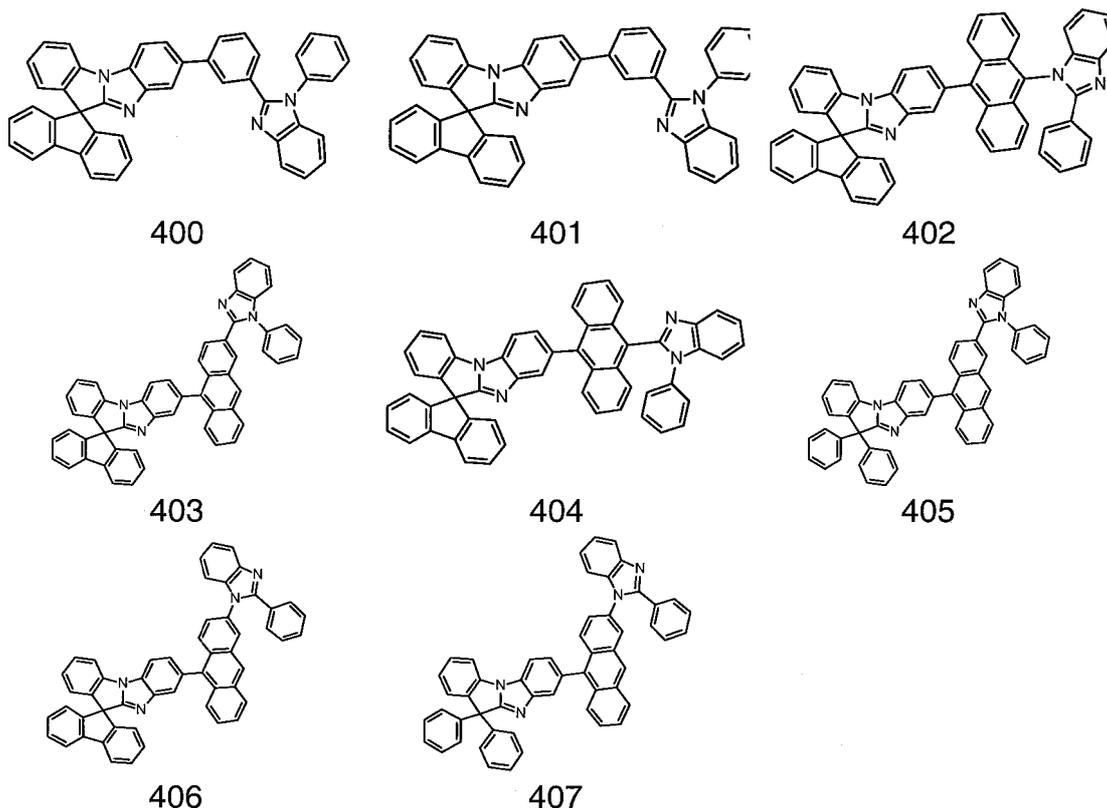
397



398



399



【0101】本發明化合物之較佳實施態樣係具體述於實例中，該等化合物可單獨使用或基於本發明所有目的而與另外的化合物併用。

【0102】先決條件係符合申請專利範圍第1項中所指明的條件，上述較佳實施態樣可視需要彼此組合。在本發明一特佳實施態樣中，上述較佳實施態樣同時適用。

【0103】本發明之化合物原則上可藉由各種不同方法製備。然而，已發現下文所述之方法特別適合。

【0104】因此，本發明進一步提供製備包含式(I)之結構的化合物之方法，其中，在偶合反應(coupling reaction)中，包含至少一個含氮雜環基團之化合物係接合至包含至少一個芳族或雜芳族基團之化合物。

【0105】包含至少一個含氮雜環基團之適用化合物在

許多情況下為市售者，以及在實例中詳細說明之起始化合物可藉由已知方法獲得，因此以其為參考。

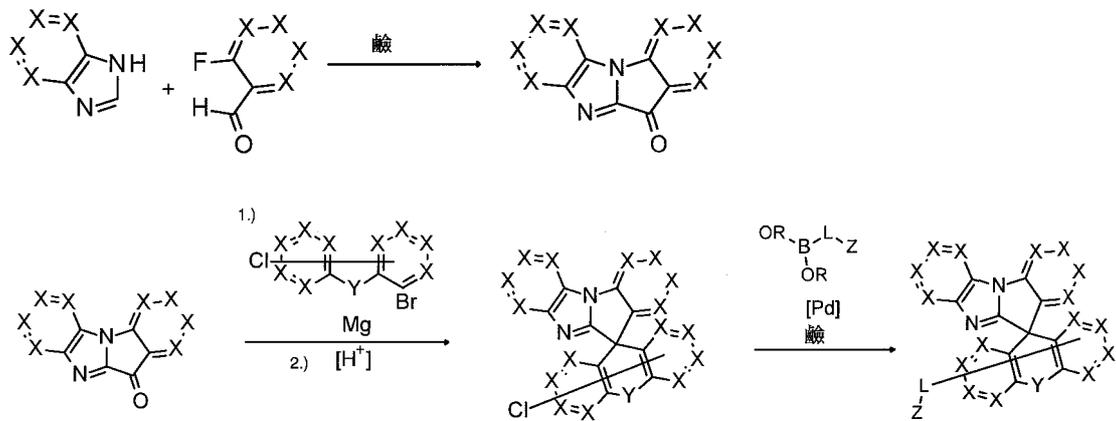
【0106】 包含至少一個含氮雜環基團之化合物可藉由已知偶合反應與其他芳基或雜芳基化合物反應，就此目的之所需條件為熟習本領域之人士已知，以及實例中之詳述使熟習本領域之人士得以進行該等反應。

【0107】 均導致 C-C 鍵形成及 / 或 C-N 鍵形成之特別適用及較佳的偶合反應為根據 BUCHWALD, SUZUKI, YAMAMOTO, STILLE, HECK, NEGISHI, SONOGASHIRA 及 HIYAMA 者。此等反應廣為知悉，以及實例會提供熟習本領域之人士更多指示。

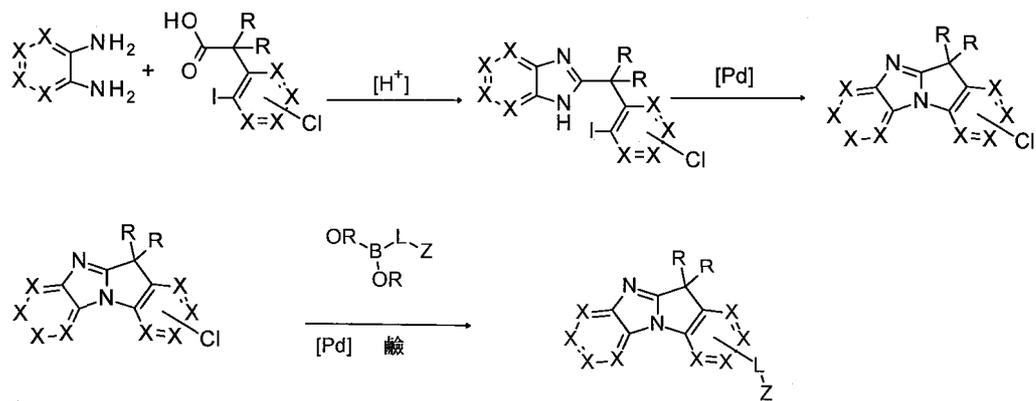
【0108】 在所有如下之合成反應式中，化合物係以具少量取代基來顯示以簡化結構。但此並非排除該等方法中存在任何所希望之另外的取代基。

【0109】 例示性實施方式係由如下反應式提供，並未意欲以此等加諸限制。個別反應式之組成步驟可視需要彼此組合。

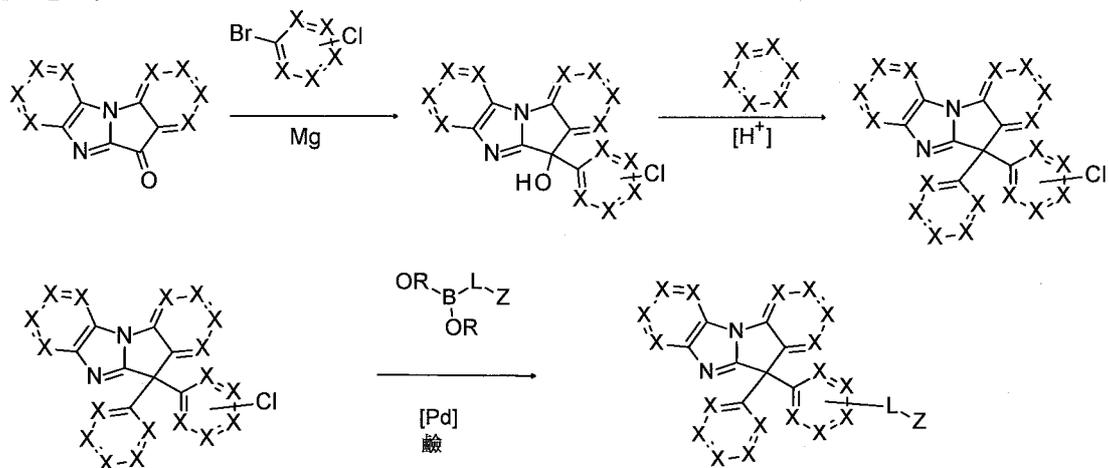
反應式1：



反應式2：



反應式3：



【0110】反應式1至3中所使用之符號的定義基本上對應於式(I)或L¹-Z中所定義者，基於清楚之因素而省去編

號。

【0111】應瞭解所示用於合成本發明化合物之方法為舉例說明。熟習本領域之人士在其關於本領域之常識範圍內能發展替代的合成途徑。

【0112】前文詳細說明之製備方法的原理原則上可從相似化合物之文獻獲知以及可容易由熟習本領域之人士採用以製備本發明化合物。其他資訊可見於實例。

【0113】若隨後需進行純化(例如再結晶或昇華)，則藉由該等方法可能以高純度獲得包含式(I)之結構的本發明化合物，較佳超過99%(利用¹H NMR及/或HPLC測定)。

【0114】本發明化合物亦可具有適用取代基，例如可經下列者取代：相對長鏈烷基(約4至20個碳原子)，尤其是支鏈烷基，或視情況(optionally)經取代之芳基，例如二甲苯基(xylyl)、萊基(mesityl)或支鏈聯三苯基或聯四苯基，其致使在標準有機溶劑中的溶解性，使化合物於室溫下以足夠濃度而可溶於例如甲苯或二甲苯以能由溶液處理該等化合物。此等可溶性化合物特佳適用於由溶液處理，例如藉由印刷方法(printing method)。此外，應強調包含至少一式(I)之結構的本發明化合物已加強在該等溶劑中之溶解性。

【0115】本發明化合物亦可與聚合物混合。同樣可能將該等化合物共價併入聚合物。尤其可能的是採用經反應性脫離基(reactive leaving group)(諸如溴、碘、氯、硼酸或硼酸酯)取代、或經反應性可聚合基團(reactive

polymerizable group)(諸如烯烴(olefin)或氧呔(oxetane))取代之化合物。彼等可用作用以製造對應寡聚物(oligomer)、樹枝狀聚合物(dendrimer)或聚合物之單體。寡聚(oligomerization)或聚合(polymerization)較佳係經由鹵素官能基或硼酸官能基、或經由可聚合基團進行。另外可能的是經由此類基團而交聯聚合物。本發明之化合物及聚合物可以交聯或未交聯層之形式使用。

【0116】因此，本發明進一步提供含有一或更多前文詳述之式(I)結構或本發明化合物的寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中，存在從本發明化合物或式(I)結構至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物的一或多個鍵。根據式(I)結構或化合物之鍵聯，彼等因此形成寡聚物或聚合物之側鏈，或係鍵結在主鏈內。聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物可為共軛(conjugated)、部分共軛(partly conjugated)或非共軛(nonconjugated)。寡聚物或聚合物可為直鏈、支鏈或樹枝狀(dendritic)。至於寡聚物、樹枝狀聚合物及聚合物中之本發明化合物的重複單元，適用如上述之相同較佳者。

【0117】就寡聚物或聚合物之製備而言，本發明之單體係同元聚合(homopolymerized)或與另外的單體共聚(copolymerized)。較佳者係其中式(I)的單元或上文及下文所述之較佳實施態樣之存在達0.01至99.9 mol%、較佳5至90 mol%、更佳20至80 mol%之範圍的共聚物。形成聚合物基本架構之適合且較佳的共聚單體(comonomer)係選自第

(例如根據 EP 842208 或 WO 2000/022026)、螺雙萘(例如根據 EP 707020、EP 894107 或 WO 2006/061181)、對苯(paraphenylene)(例如根據 WO 92/18552)、呋啞(例如根據 WO 2004/070772 或 WO 2004/113468)、噻吩(例如根據 EP 1028136)、二氫萘(例如根據 WO 2005/014689)、順-及反-茛并萘(例如根據 WO 2004/041901 或 WO 2004/113412)、酮(例如根據 WO 2005/040302)、萘(例如根據 WO 2005/104264 或 WO 2007/017066)或者複數種此等單元。共聚物、寡聚物與樹枝狀聚合物可再含有另外的單元，例如電洞傳輸單元(尤其是以三芳胺為主者)及/或電子傳輸單元。

【0118】另外特別關注的是特徵為高玻璃轉移溫度(glass transition temperature)之本發明化合物。在這方面，較佳者尤其是具有根據 DIN 51005(2005-08版)測定為至少 70°C、更佳係至少 110°C、又更佳係至少 125°C、尤佳係至少 150°C 之玻璃轉移溫度的包含通式(I)之結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的本發明化合物。

【0119】就由液相(from a liquid phase)處理(processing)本發明化合物而言，例如藉由旋塗或藉由印刷法，需要本發明化合物之調配物。此等調配物可為例如溶液、分散液或乳液。基於此目的，較佳可使用二或更多種溶劑之混合物。適合且較佳之溶劑為例如甲苯、苯甲醚、鄰二甲苯、間二甲苯或對二甲苯、苯甲酸甲酯、萊(mesitylene)、四氫萘、藜蘆醚(veratrole)、THF、甲基-

THF、THP、氯苯、二噁烷、苯氧基甲苯(尤其是3-苯氧基甲苯)、(-)-荳蔻酮((-)-fenchone)、1,2,3,5-四甲苯、1,2,4,5-四甲苯、1-甲萘、2-甲萘并噻唑、2-苯氧乙醇、2-吡咯啉酮、3-甲基苯甲醚、4-甲基苯甲醚、3,4-二甲基苯甲醚、3,5-二甲基苯甲醚(3,5-dimethylanisole)、苯乙酮、 α -萜品醇(α -terpineol)、萘并噻唑、苯甲酸丁酯、異丙苯、環己醇、環己酮、環己苯、十氫萘、十二基苯、苯甲酸乙酯、二氫茛(indane)、苯甲酸甲酯、NMP、對異丙基甲苯(p-cymene)、苯乙醚(phenetole)、1,4-二異丙苯、二苄醚、二乙二醇丁基甲基醚、三乙二醇丁基甲基醚、二乙二醇二丁基醚、三乙二醇二甲基醚、二乙二醇一丁基醚、三丙二醇二甲基醚、四乙二醇二甲基醚、2-異丙基萘、戊苯、己苯、庚苯、辛苯、1,1-雙(3,4-二甲苯基)乙烷、六甲基二氫茛(hexamethylindane)或該等溶劑之混合物。

【0120】 本發明因此進一步提供包含本發明化合物及至少一另外的化合物之調配物。該另外的化合物可為例如溶劑，尤其是上述溶劑其中一者或該等溶劑之混合物。該另外的化合物或者可為至少一同樣用於電子裝置之另外的有機或無機化合物，例如發光化合物，尤其是磷光摻雜劑(phosphorescent dopant)，及/或另外的基質材料。該另外的化合物亦可為聚合的。

【0121】 本發明因此又進一步提供包含本發明化合物及至少一另外的有機功能性材料之組成物。功能性材料(functional material)通常為引入陽極與陰極之間的有機或

無機材料。較佳的，有機功能性材料(organically functional material)係選自由下列所組成之群組：螢光發射體(fluorescent emitter)、磷光發射體(phosphorescent emitter)、多牙發射體(polypodal emitter)、展現TADF(熱活化延遲螢光(thermally activated delayed fluorescence))之發射體、主體材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞傳輸材料、電洞注入材料、電子阻擋材料、電洞阻擋材料、寬能帶隙材料(wide band gap material)及n-摻雜劑。

【0122】本發明之一特別態樣中，本發明化合物可用作基質材料，尤其用於磷光發射體，以及基質材料於許多情況下係與另外的基質材料併用。

【0123】本發明因此亦關於包括至少一包含式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的化合物以及至少一另外的基質材料的組成物。

【0124】本發明進一步提供包括至少一包含至少一式(I)結構之化合物或上文及下文所述之較佳實施態樣以及至少一寬能帶隙材料的組成物，寬能帶隙材料係理解為意指在US 7,294,849之揭示意義中的材料。該等系統在電致發光裝置中展現格外有利的性能數據。

【0125】較佳的，額外化合物可具有2.5 eV或更高、較佳3.0 eV或更高、極佳為3.5 eV或更高之能帶隙。計算能帶隙的方式之一係透過最高佔用分子軌域(HOMO)及最低未佔用分子軌域(LUMO)之能階。

【0126】材料之分子軌域(molecular orbital)(尤其是

最高佔用分子軌域 (HOMO) 及最低未佔用分子軌域 (LUMO)、其能階以及最低三重態 T_1 之能量及最低激發單重態 S_1 之能量係透過量子-化學計算 (quantum-chemical calculation) 測定。為了計算有機物質，首先藉由「基態/半經驗/原定自旋/AM1/電荷 0/自旋單重態 (Ground State/Semi-empirical/Default Spin/AM1/Charge 0/Spin Singlet)」法進行幾何之最佳化。隨後，根據該最佳化幾何 (optimized geometry) 進行能量計算。此處使用具有「6-31G(d)」基組 (電荷 0，自旋單重態) 之「TD-SCF/DFT/原定自旋/B3PW91 (TD-SCF/DFT/Default Spin/B3PW91)」法。由能量計算求得以哈崔單位 (Hartree unit) 計之 HOMO 能階 HEh 或 LUMO 能階 LEh。此用以測定以電子伏特計之 HOMO 及 LUMO 能階，藉由循環伏安法測量 (cyclic voltammetry measurement) 校正，其係如下：

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

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

【0127】在本案之內容中，這些值視為材料的 HOMO 及 LUMO 能階。

【0128】最低三重態 T_1 係定義為具有最低能量的三重態之能量 (由所述量子-化學計算顯而可知)。

【0129】最低激發單重態 S_1 係定義為具有最低能量的激發單重態之能量 (由所述量子-化學計算顯而可知)。

【0130】本文所述之方法無關乎所使用之套裝軟體，且始終獲得相同結果。為此目的之經常使用的程式實例為

「 Gaussian09W 」 (Gaussian Inc.) 及 Q-Chem 4.1(Q-Chem, Inc.)。

【0131】本發明亦關於包括至少一包含式(I)結構之化合物或上文及下文所述之較佳實施態樣以及至少一磷光發射體的組成物，用語「磷光發射體(phosphorescent emitter)」亦理解為意指磷光摻雜劑(phosphorescent dopant)。

【0132】在包含基質材料及摻雜劑之系統中的摻雜劑係理解為意指在混合物中具有較小比例之組分。相應的，在包含基質材料及摻雜劑之系統中的基質材料係理解為意指在混合物中具有較大比例之組分。

【0133】用於基質系統(較佳為混合的基質系統)之較佳磷光摻雜劑為下文所指之較佳磷光摻雜劑。

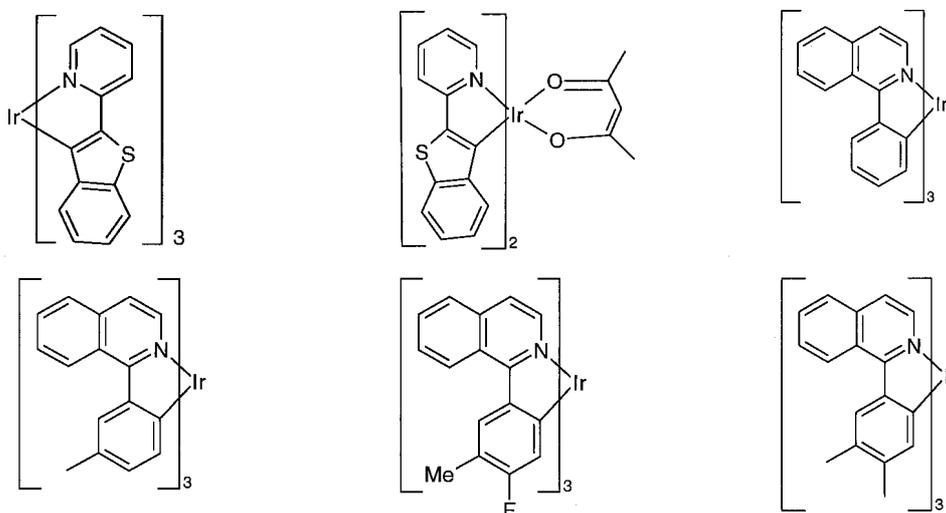
【0134】用語「磷光摻雜劑」通常包括其中光之發射係經由自旋禁止躍遷(spin-forbidden transition)(例如從激發三重態或具有更高自旋量子數之狀態(例如五重態(quintet state))躍遷)進行的化合物。

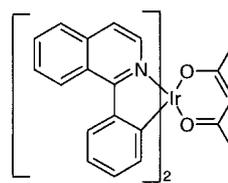
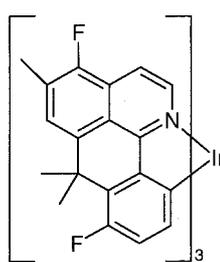
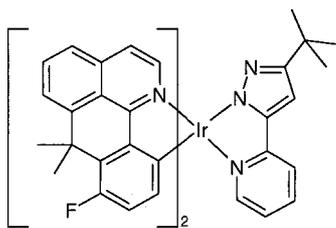
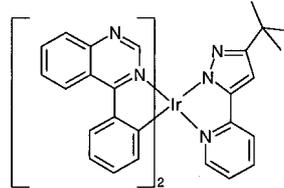
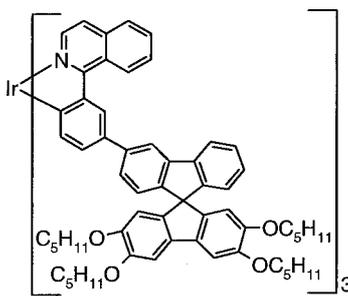
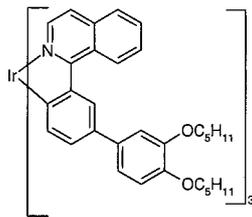
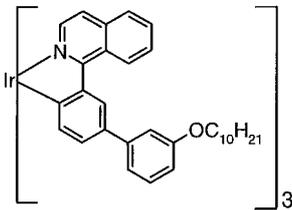
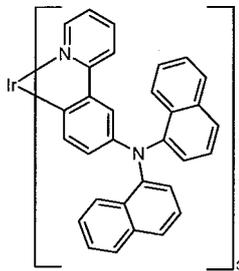
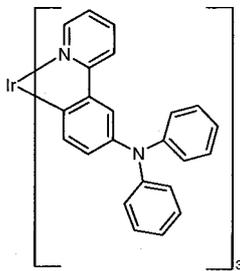
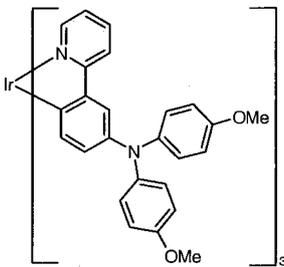
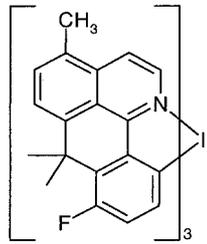
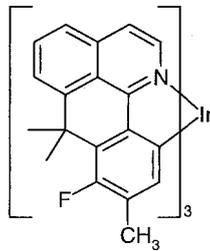
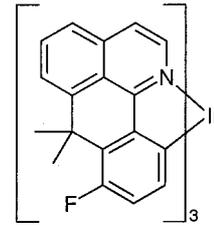
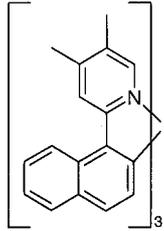
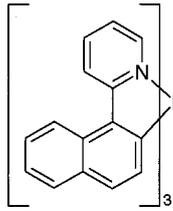
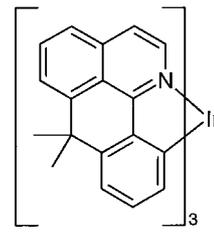
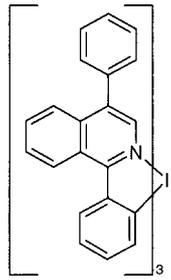
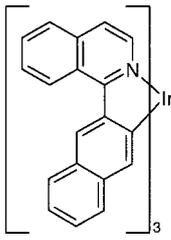
【0135】適合的磷光化合物(= 三重態發射體)尤其為如下之化合物：於適當激發時發光(較佳在可見光區)以及亦含有至少一個原子序大於20、較佳大於38且小於84、更佳大於56且小於80之原子，尤其是具有該原子序之金屬。所使用之較佳磷光發射體為含有銅、鋁、鎢、銻、鈺、鐵、銻、銻、鈹、鉑、銀、金或鎔的化合物，尤其是含有銻或鉑的化合物。在本發明內容中，含有上述金屬之所有

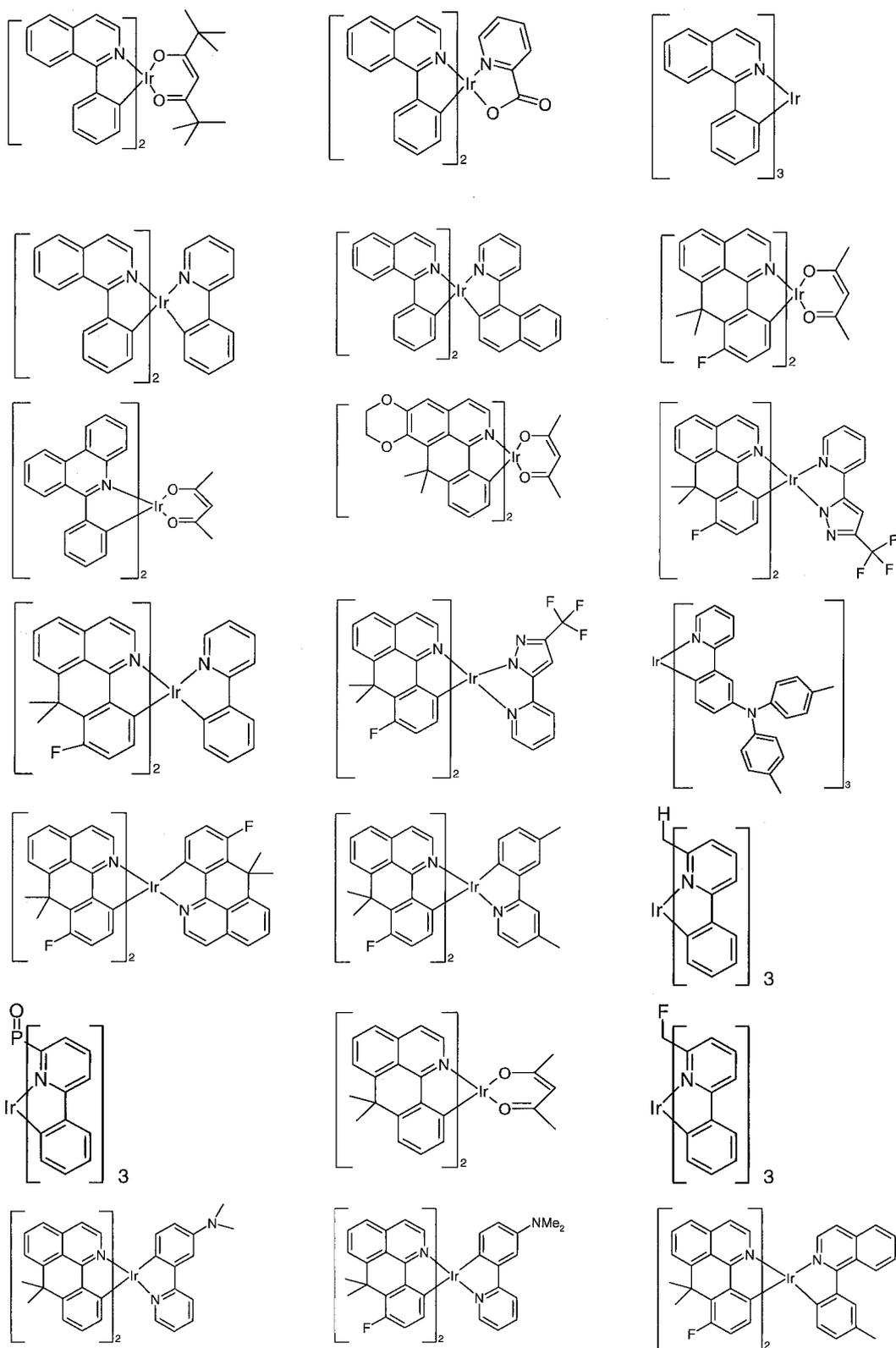
發光化合物被視為磷光化合物。

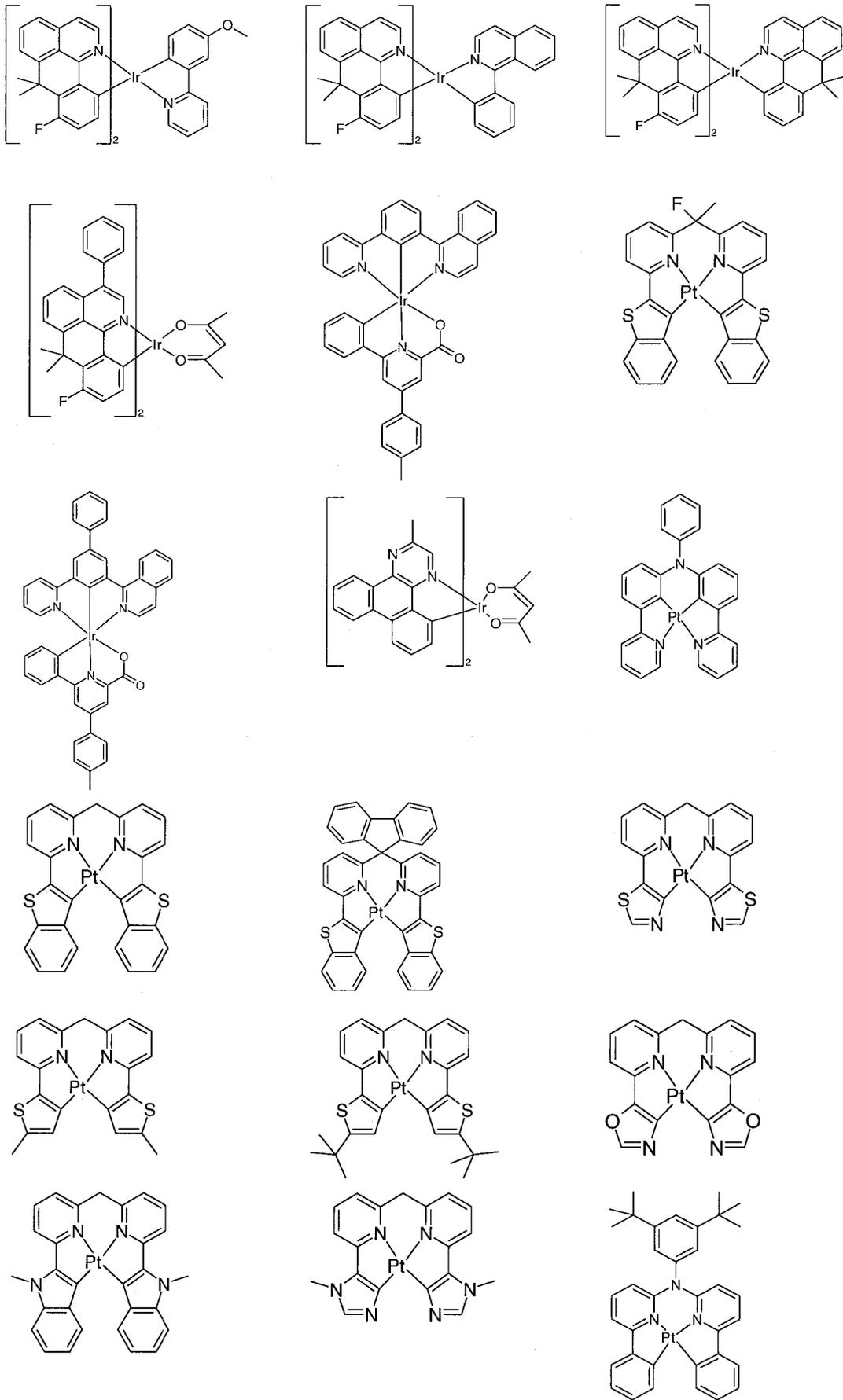
【0136】上述發射體之實例可見於申請案 WO 00/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373、US 2005/0258742、WO 2009/146770、WO 2010/015307、WO 2010/031485、WO 2010/054731、WO 2010/054728、WO 2010/086089、WO 2010/099852、WO 2010/102709、WO 2011/032626、WO 2011/066898、WO 2011/157339、WO 2012/007086、WO 2014/008982、WO 2014/023377、WO 2014/094961、WO 2014/094960、WO 2016/124304、WO 2016/015815、WO 2016/000803、WO 2015117718、WO 2015104045及 WO 2015036074。通常，根據先前技術用於磷光 OLED 以及熟習有機電致發光領域之人士已知的所有磷光錯合物均適合，且熟習本領域之人士能在不運用創作性技巧下使用另外的磷光錯合物。

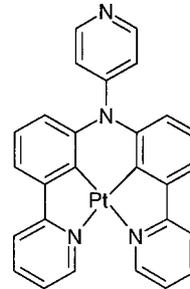
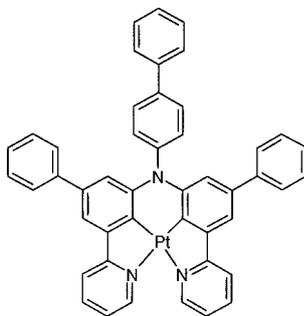
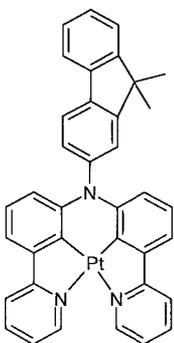
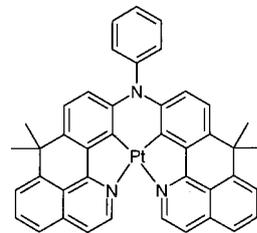
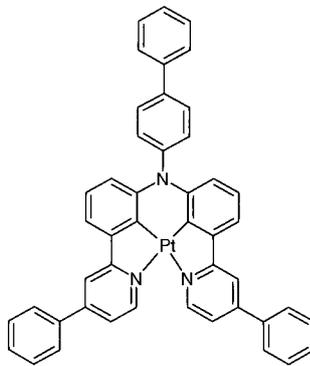
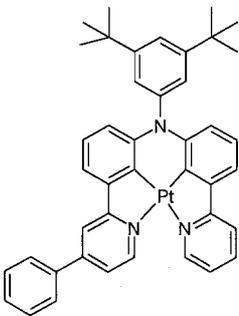
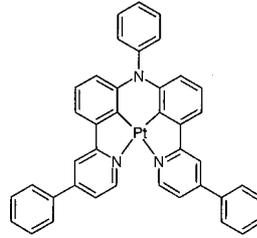
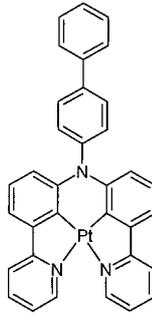
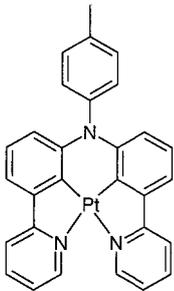
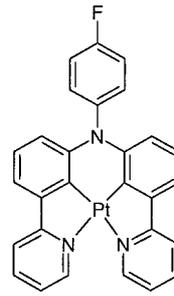
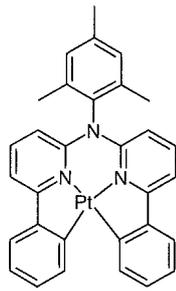
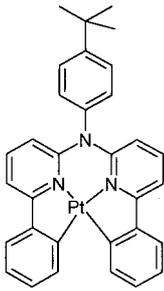
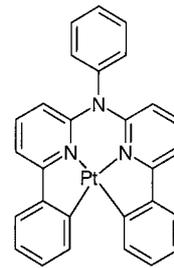
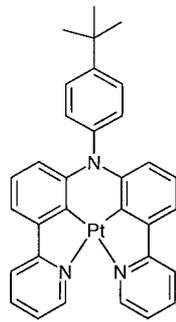
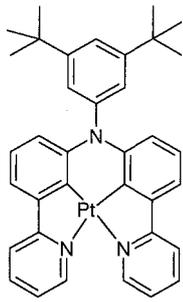
【0137】磷光摻雜劑之明確實例列舉於下表：

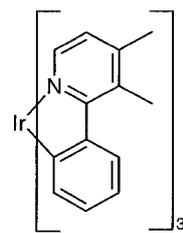
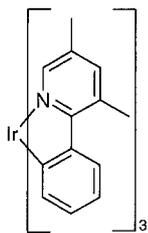
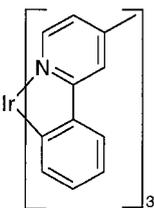
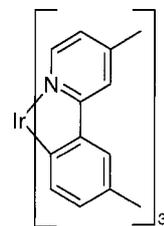
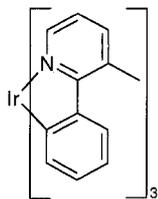
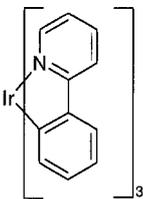
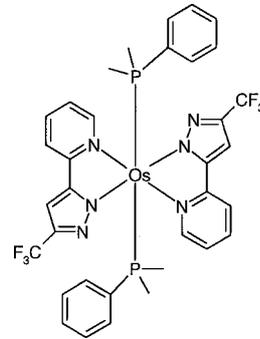
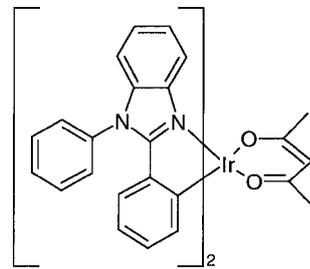
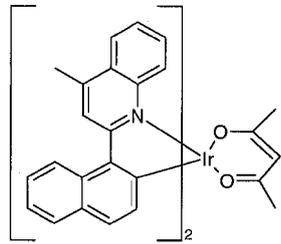
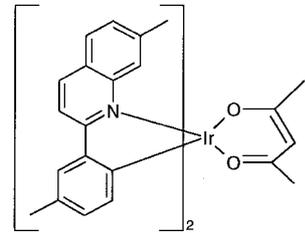
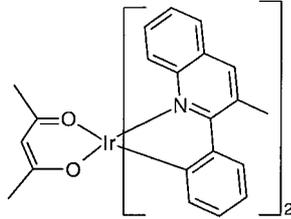
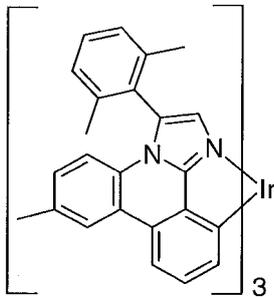
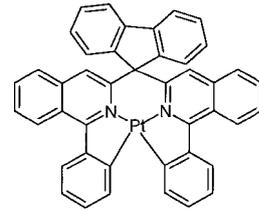
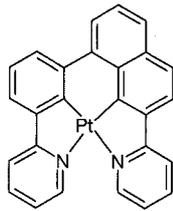
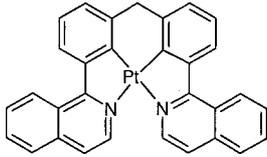
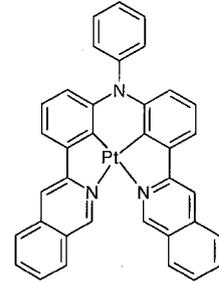
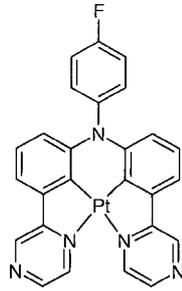
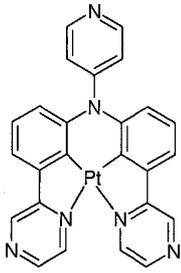


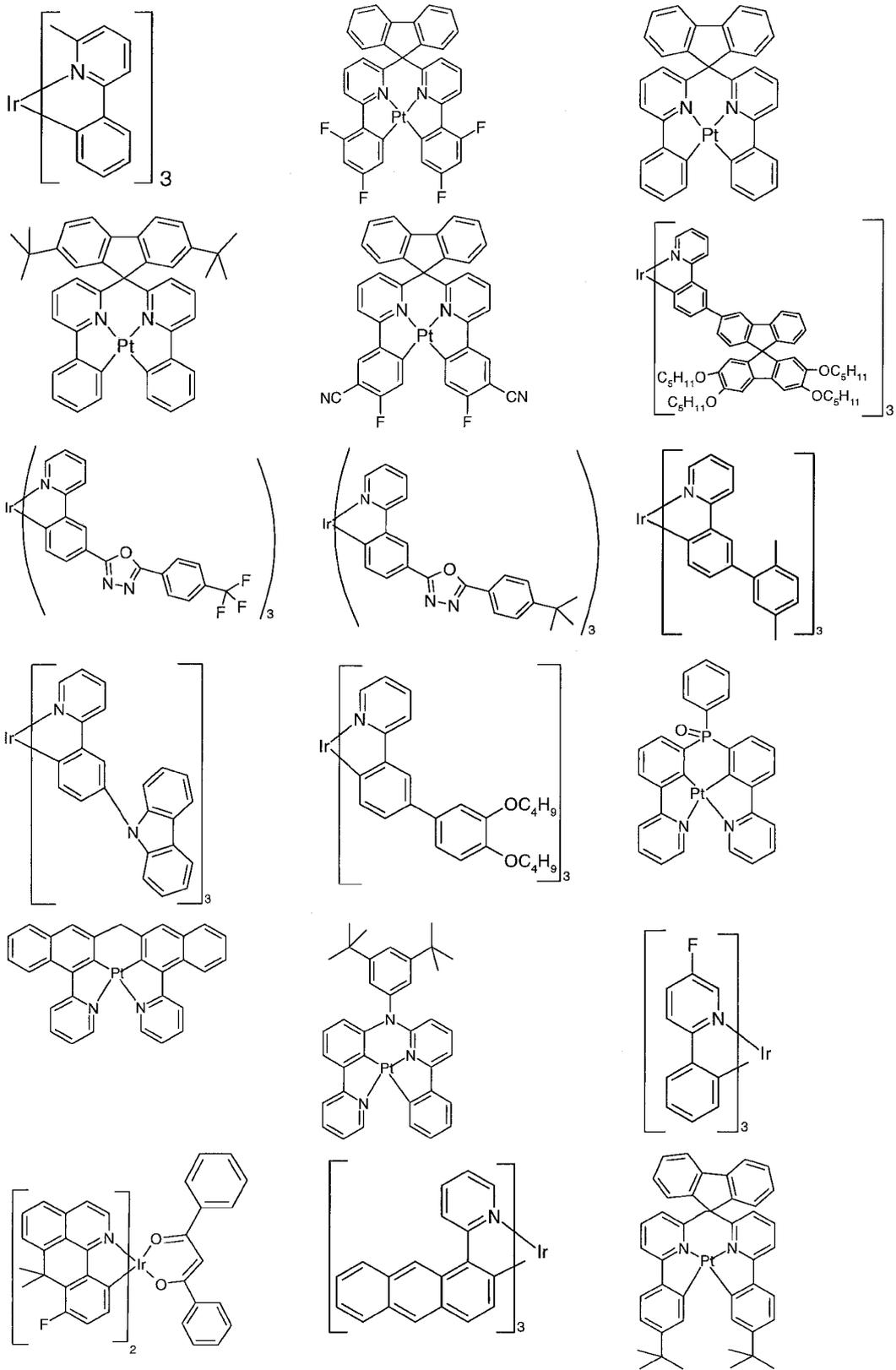


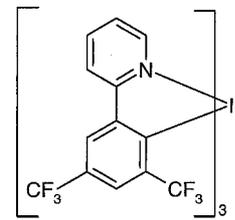
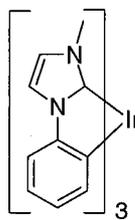
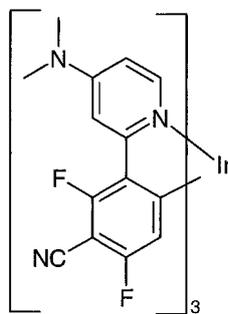
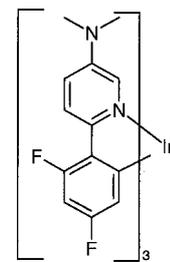
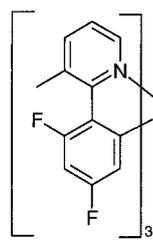
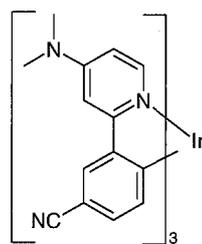
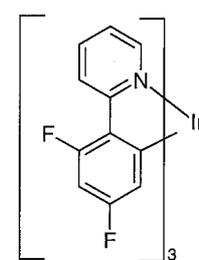
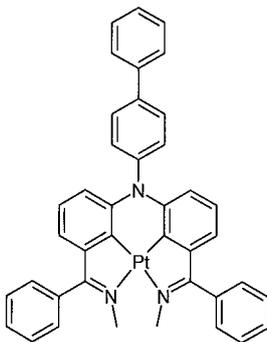
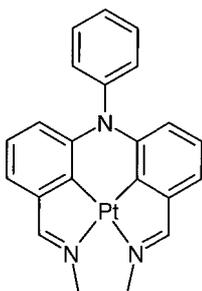
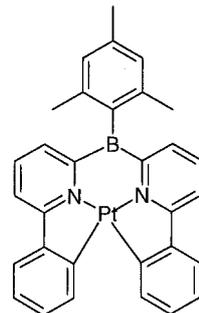
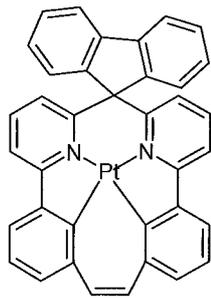
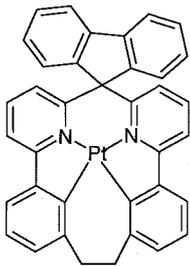
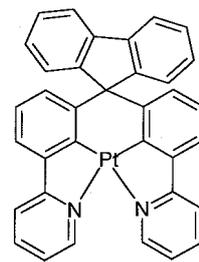
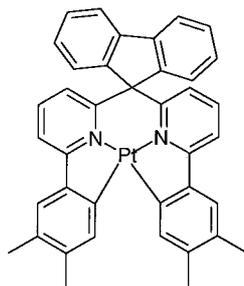
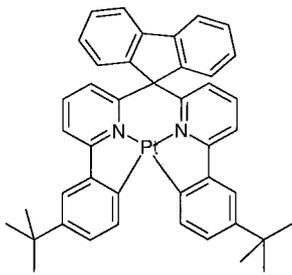


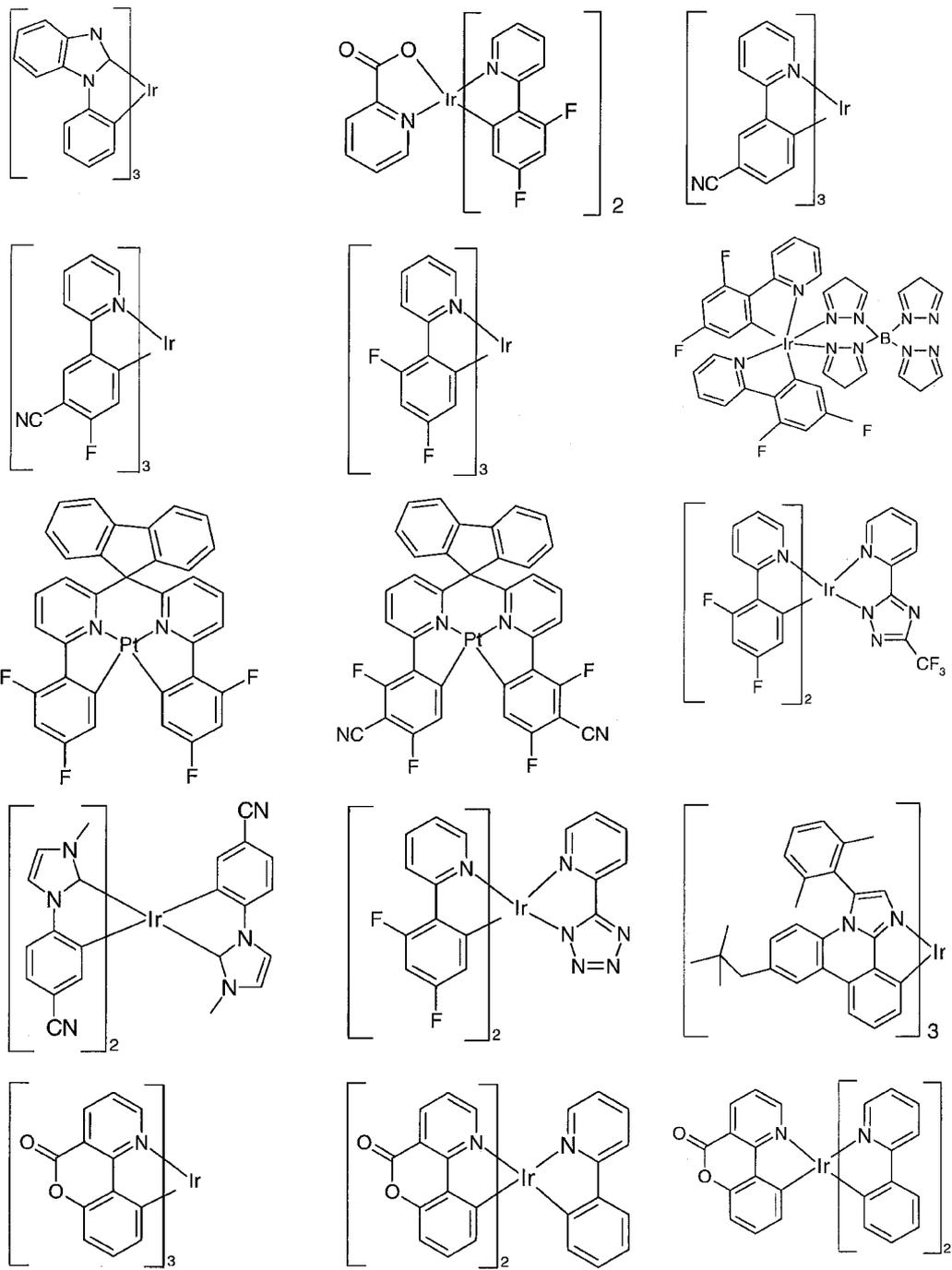


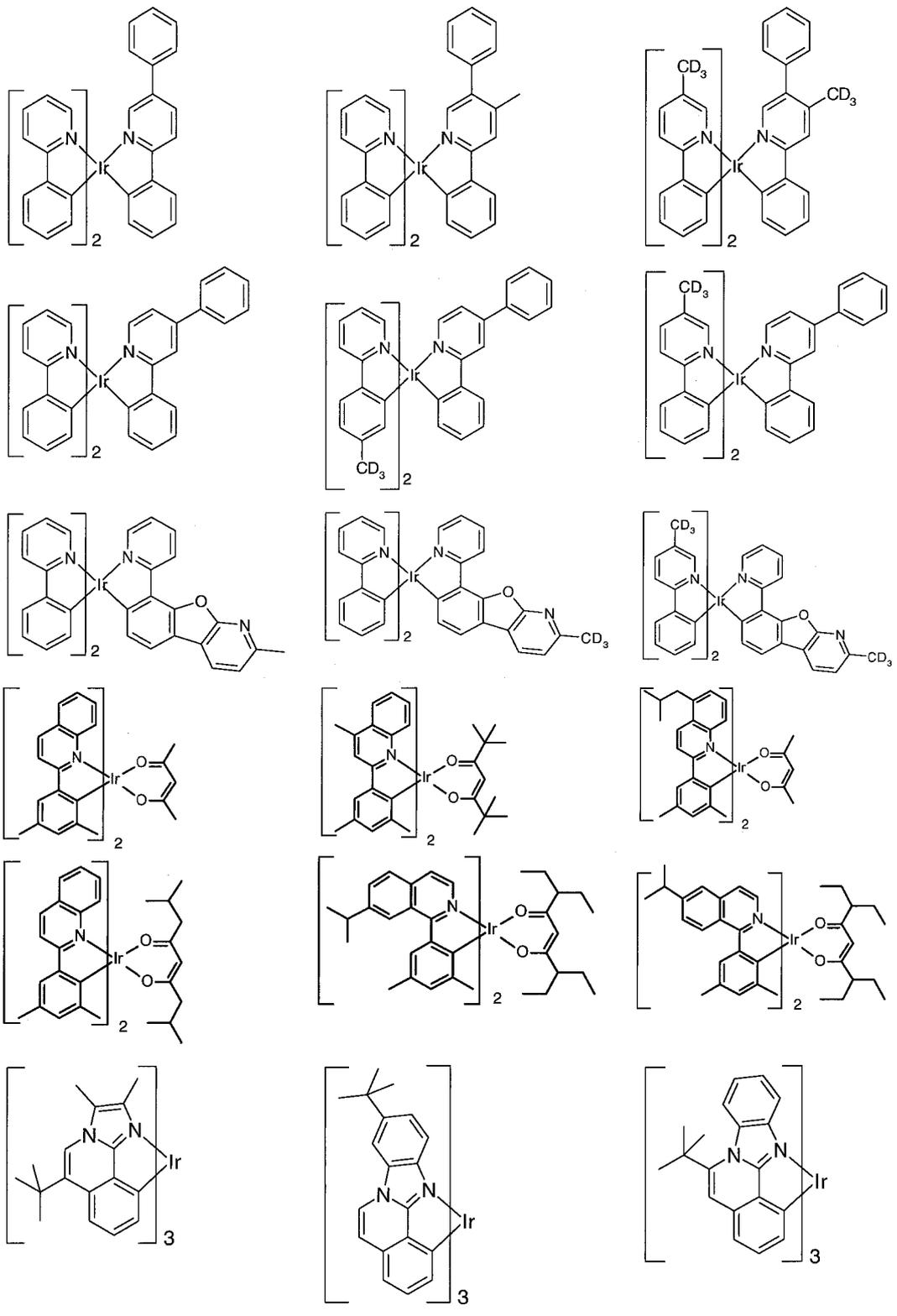


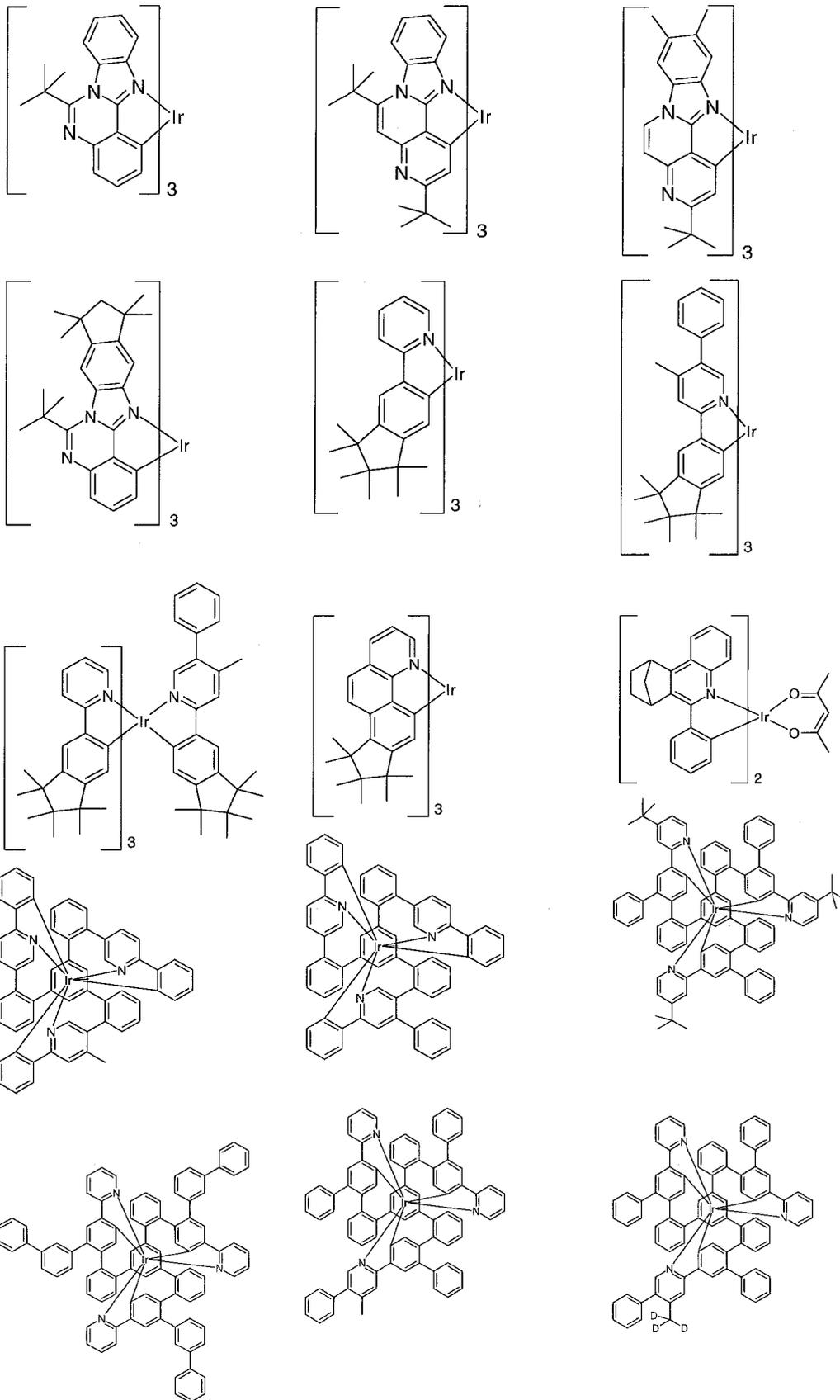


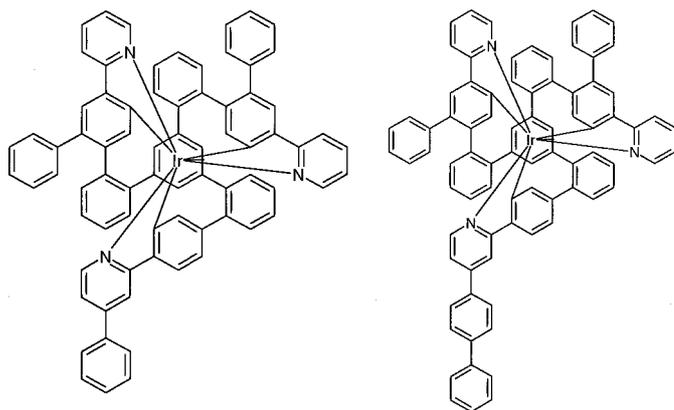












【0138】本發明之一特別態樣中，本發明化合物可用作電洞阻擋材料，較佳用於電洞阻擋層，於該情況下，用作電洞阻擋材料之本發明化合物包含至少一電子傳輸基團。於一較佳實施態樣中，用作電洞阻擋材料之本發明化合物包含的電洞傳輸基團少於電子傳輸基團，更佳係無電洞傳輸基團。

【0139】可進一步為以下情況：本發明化合物係用作電子或激子(exciton)阻擋材料，較佳係用於電子或激子阻擋層，於該情況下，用作電子或激子阻擋材料之本發明化合物包含至少一電洞傳輸基團。於一較佳實施態樣中，用作電子或激子阻擋材料之本發明化合物包含的電子傳輸基團少於電洞傳輸基團，更佳係無電子傳輸基團，如上文及下文由式(QL)定義之 R^a 或R基。

【0140】上述包含式(I)的結構之化合物或前文詳細說明之較佳實施態樣可較佳用作電子裝置中的活性組分。電子裝置係理解為意指包含陽極、陰極及介於陽極與陰極之間的至少一層之任何裝置，該層包含至少一有機或有機金屬化合物。本發明之電子裝置因而包含陽極、陰極及至少

一個含有至少一包含式(I)結構的化合物之中間層。此處較佳之電子裝置係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置(OLED、PLED)、有機積體電路(organic integrated circuit)(O-IC)、有機場效電晶體(organic field-effect transistor)(O-FET)、有機薄膜電晶體(organic thin-film transistor)(O-TFT)、有機發光電晶體(organic light-emitting transistor)(O-LET)、有機太陽能電池(organic solar cell)(O-SC)、有機光學偵測器(organic optical detector)、有機感光器(organic photoreceptor)、有機場淬滅裝置(organic field-quench device)(O-FQD)、有機電感測器(organic electrical sensor)、發光電化學電池(light-emitting electrochemical cell)(LEC)、有機雷射二極體(organic laser diode)(O-雷射)及有機電漿子發射裝置(organic plasmon emitting device)(D. M. Koller et al., Nature Photonics 2008, 1-4)，較佳為有機電致發光裝置(OLED、PLED)，尤其是在至少一層中含有至少一包含式(I)結構的化合物之磷光OLED。特佳者係有機電致發光裝置。活性組分(active component)通常為導入陽極與陰極之間的有機或無機材料，例如電荷注入、電荷傳輸或電荷阻擋材料，但尤其是發射材料及基質材料。

【0141】本發明之一較佳實施態樣為有機電致發光裝置。該有機電致發光裝置包含陰極、陽極與至少一發光層。除了此等層之外，還可包含其他層，例如在各情況下一或更多電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、電子

傳輸層、電子注入層、激子阻擋層、電子阻擋層、電荷產生層及/或有機或無機 p/n 介面。同時，一或更多電洞傳輸層可為 p-摻雜，例如用金屬氧化物(諸如 MoO_3 或 WO_3)，或用(全)氟化缺電子芳族系統；及/或一或更多電子傳輸層可經 n-摻雜。也可將中間層導入兩個發光層之間，該等係具有例如激子阻擋功能及/或控制電致發光裝置中之電荷平衡。然而，應指出不一定需要存在此等層之每一層。

【0142】在此情況下，有機電致發光裝置可含有發光層(emitting layer)，或其可含有複數個發光層。若存在複數個發光層，彼等較佳具有整體係介於 380 nm 與 750 nm 之間的數個最大發射(emission maxima)，以使整體結果為白色發光；換言之，可發出螢光或發出磷光之各種發光化合物係用於發光層中。尤佳者為三層系統，其中這三層展現藍色、綠色及橙色或紅色發光(其基本構造參見例如 WO 2005/011013)，或具有超過三個發光層之系統。該系統亦可為其中一或更多層發出螢光以及一或更多其他層發出磷光之混合系統。

【0143】在本發明一較佳實施態樣中，有機電致發光裝置在一或更多發光層中含有包含式(I)結構之本發明化合物或前文詳細說明之較佳實施態樣作為基質材料，較佳作為電子傳導基質材料，較佳係與另外的基質材料(較佳為電洞傳導基質材料)併用。發光層包含至少一發光化合物。在一更佳實施態樣中，另外的基質材料為不顯著涉入(若有的話)層中之電洞及電子傳輸的具有大的能帶隙之化

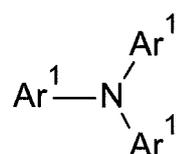
合物。在本發明一更佳實施態樣中，在一或更多發光層中存在包含式(I)結構之本發明化合物或前文詳細說明之較佳實施態樣作為基質材料，較佳作為電洞傳導基質材料，較佳係與另外的基質材料(較佳為電子傳導基質材料)併用。

【0144】可與式(I)或根據較佳實施態樣之化合物併用的適合之基質材料為芳族酮、芳族磷氧化物或芳族亞砷或砷，例如根據WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或WO 2010/006680；三芳胺(triarylamine)，尤其是單胺(monoamine)，例如根據WO 2014/015935；咪唑衍生物，例如CBP(N,N-雙咪唑基聯苯(N,N-biscarbazolylbiphenyl))或揭示於WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527或WO 2008/086851之咪唑衍生物；吡啶并咪唑衍生物，例如根據WO 2007/063754或WO 2008/056746；茚并咪唑衍生物，例如根據WO 2010/136109及WO 2011/000455；吡嗪衍生物(azacarbazole derivative)，例如根據EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160；雙極性基質材料，例如根據WO 2007/137725；矽烷，例如根據WO 2005/111172；氮雜硼雜環戊二烯(azaborole)或硼酸酯，例如根據WO 2006/117052；三吡啶衍生物，例如根據WO 2010/015306、WO 2007/063754或WO 2008/056746；鋅錯合物，例如根據EP 652273或WO 2009/062578；二氮矽呢(diazasilole)或四氮矽呢(tetraazasilole)衍生物，例如根據WO 2010/054729；二氮磷呢(diazaphosphole)衍生

物，例如根據 WO 2010/054730；橋聯咔唑衍生物 (bridged carbazole derivative)，例如根據 US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877 或 WO 2012/143080；聯伸三苯衍生物，例如根據 WO 2012/048781；內醯胺，例如根據 WO 2011/116865、WO 2011/137951 或 WO 2013/064206；或 4-螺咔唑衍生物 (4-spirocarbazole derivative)，例如根據 WO 2014/094963 或尚未公開之申請案 EP 14002104.9。同樣可能的是存在有所發射之波長比實質發射體 (actual emitter) 還短之另外的磷光發射體作為混合物中的共主體 (co-host)。

【0145】較佳之共主體材料為三芳胺衍生物，尤其是單胺、茛并咔唑衍生物、4-螺咔唑衍生物、內醯胺及咔唑衍生物。

【0146】與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳三芳胺衍生物係選自下式 (TA-1) 之化合物：



式 (TA-1)

其中， Ar^1 於各情況下係相同或不同，且為具有 6 至 40 個碳原子及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有 5 至 60 個芳族環原子及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基、或具有 5 至 60 個芳族環原子及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基，其中二或更多個相鄰 R^2 取

代基可視情況形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統，較佳為單環或多環之脂族環系統，其可經一或多個 R^3 基取代，其中符號 R^2 具有前文所提供之定義，尤其用於式 (I) 者。較佳的， Ar^1 於各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 24 個、較佳為 5 至 12 個芳族環原子及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代但較佳係未經取代之芳基或雜芳基。

【0147】適用之 Ar^1 基團的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基，及1-、2-、3-或4-呋唑基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

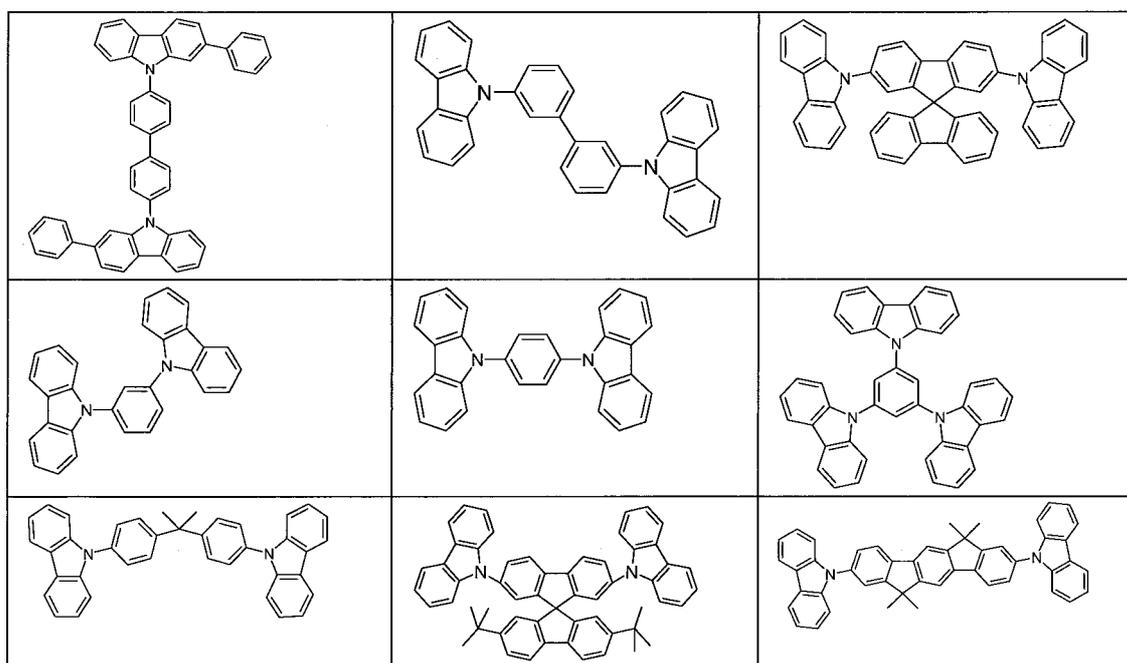
【0148】較佳的， Ar^1 基團於各情況下係相同或不同，以及係選自上述 R^1-1 至 R^1-177 基團，更佳為 R^1-1 至 R^1-64 。

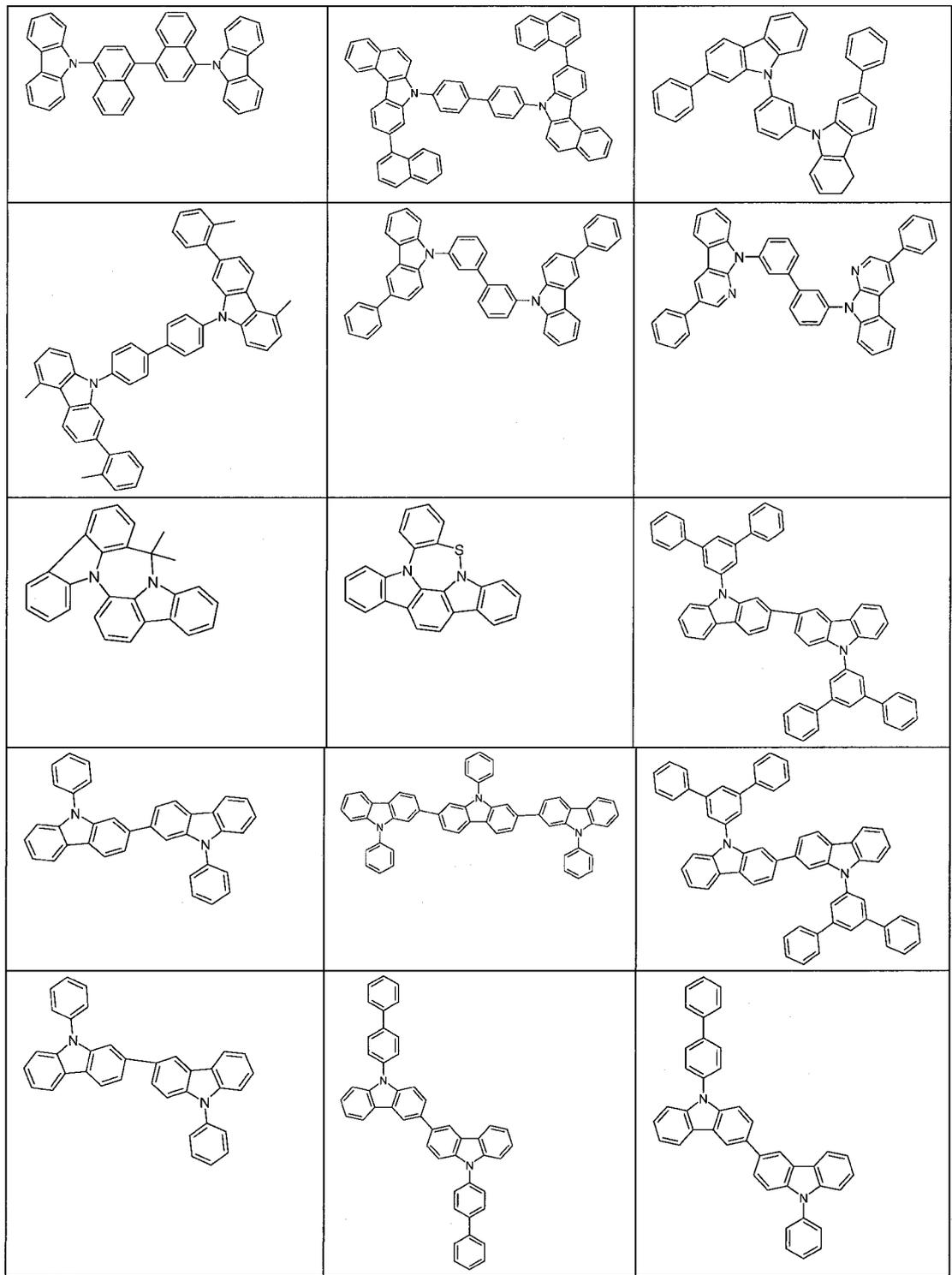
【0149】在式 (TA-1) 之化合物之一較佳實施態樣中，至少一個 Ar^1 基團係選自聯苯基 (biphenyl group) (其可為鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基)。在式 (TA-1) 化合物之更佳實施態樣中，至少一個 Ar^1 基團係選自萸基或螺雙萸基 (spirobifluorene group)，其中，該等基團各可鍵結至第 1、2、3 或 4 位置之氮原子。在式 (TA-1) 化合物之又一更佳實施態樣中，至少一個 Ar^1 基團係選自伸苯基或聯苯基(其

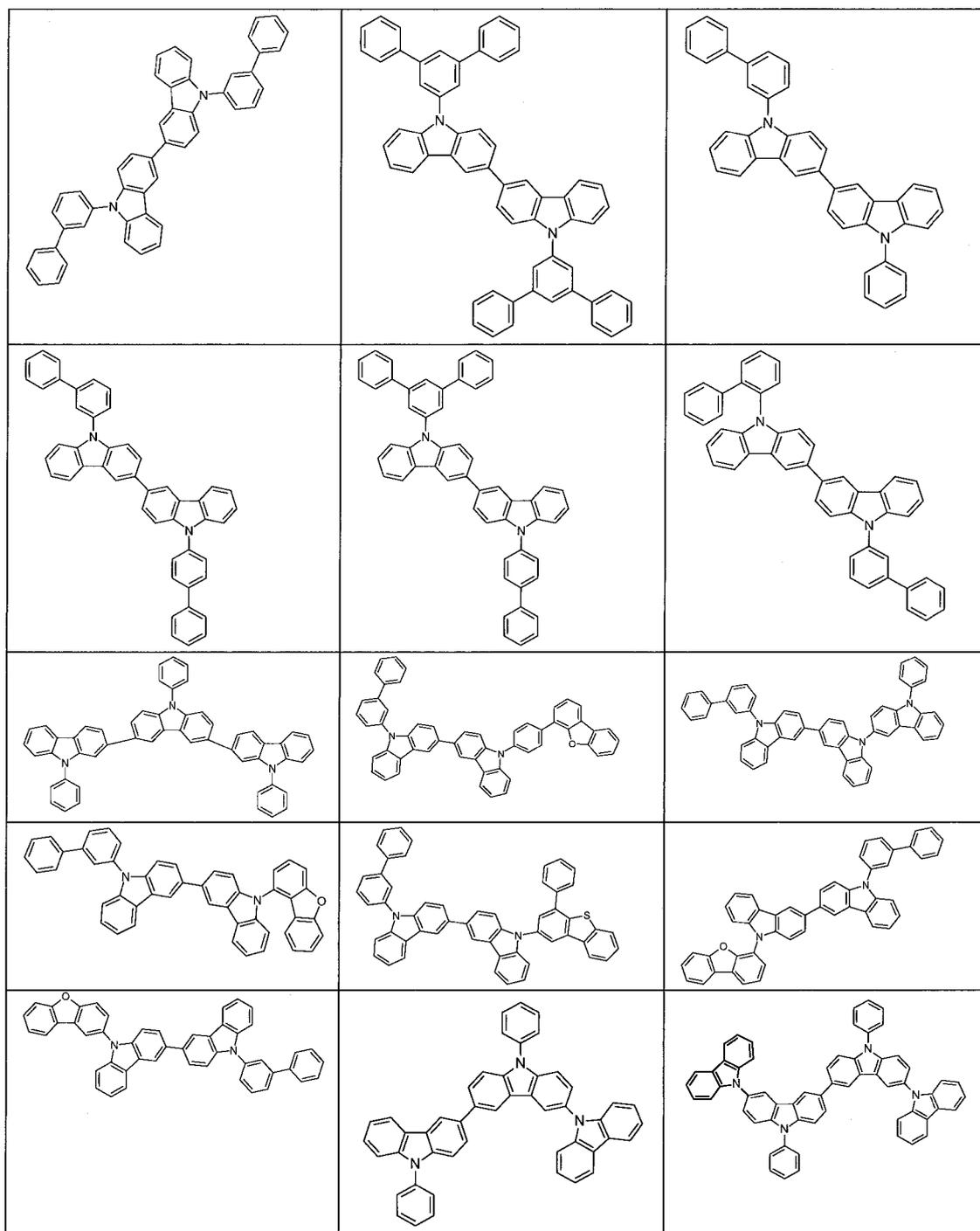
中該基團為鄰-、間-或對-鍵結之基團)，經二苯并呋喃基、二苯并噻吩基或咔唑基(尤其是二苯并呋喃基)取代，其中二苯并呋喃或二苯并噻吩基係經由第1、2、3或4位置鍵結至伸苯基或聯苯基，且其中咔唑基係經由第1、2、3或4位置或經由氮原子而鍵結至伸苯基或聯苯基。

【0150】在式(TA-1)之化合物的一特佳實施態樣中，一個 Ar^1 基團係選自萸或螺雙萸基(尤其是4-萸或4-螺雙萸基)，且一個 Ar^1 基團係選自聯苯基(尤其是對聯苯基)、或萸基(尤其是2-萸基)，且第三個 Ar^1 基團係選自對伸苯基或對聯苯基，經二苯并呋喃基(尤其是4-二苯并呋喃基)、或咔唑基(尤其是N-咔唑基或3-咔唑基)取代。

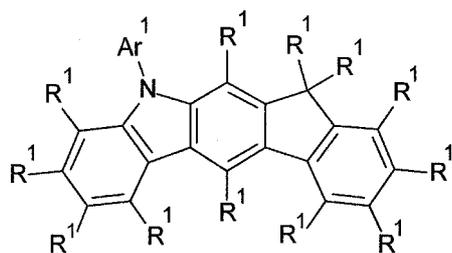
【0151】於一較佳實施態樣中，共主體材料(co-host material)為咔唑化合物，特佳係咔唑化合物為雙咔唑(biscarbazole)或參咔唑(triscarbazole)化合物之情況，極特佳為咔唑化合物係選自下列結構之化合物之情況：







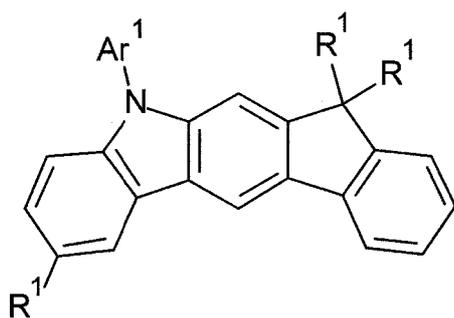
【0152】與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳茛苈吡啶衍生物係選自下式(TA-2)之化合物：



式(TA-2)

其中， Ar^1 及 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)及/或(TA-1)者。 Ar^1 基團之較佳實施態樣為上列結構 R^1 -1至 R^1 -177，更佳為 R^1 -1至 R^1 -64。

【0153】式(TA-2)化合物之一較佳實施態樣為下式(TA-2a)之化合物：

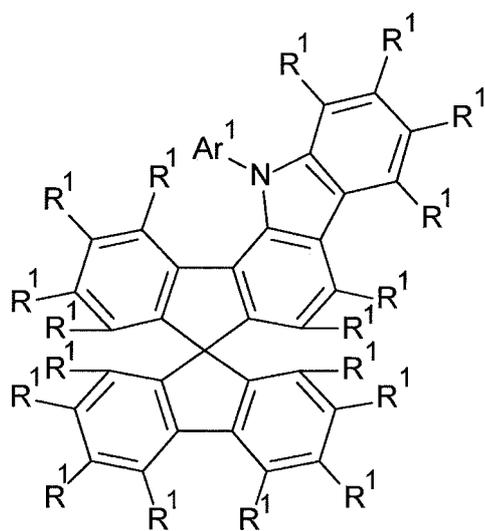


式(TA-2a)

其中， Ar^1 及 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)及/或(TA-1)者。此處，鍵結至茛苳并碳原子(indeno carbon atom)的兩個 R^1 基團較佳係相同或不同，且為具有1至4個碳原子之烷基(尤其是甲基)、或為具有6至12個碳原子之芳族環系統(尤其是苯基)。更佳的，鍵結至茛苳并碳原子之兩個 R^1 基團為甲基。更佳的，鍵結至式(TA-2a)中之茛苳并吡啶基本架構(indenocarbazole base skeleton)的 R^1 取代基為H或吡啶基，其可經由第1、2、3或4位置或經由氮原子(尤其是經由第3位置)鍵結至該茛苳并吡啶基本架構。

【0154】作為共主體之其他較佳茛苈吡啶為 WO 2010/136109及 WO 2013/041176中所揭示者。

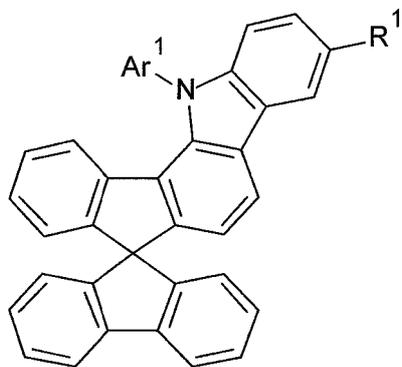
【0155】與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳的4-螺吡啶衍生物係選自下式(TA-3)之化合物：



式 (TA-3)

其中， Ar^1 及 R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)、(II)及/或(Q-1)者。 Ar^1 基團之較佳實施態樣為上列結構 R^1 -1至 R^1 -177，更佳為 R^1 -1至 R^1 -64。

【0156】式(TA-3)化合物之一較佳實施態樣為下式(TA-3a)之化合物：

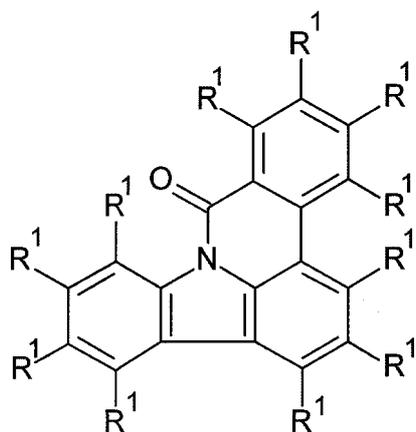


式 (TA-3a)

其中， Ar^1 及 R^1 具有前文所列之定義，尤其用於式(I)、(II)及/或(Q-1)者。 Ar^1 基團之較佳實施態樣為上列結構 R^1 -1至 R^1 -177，更佳為 R^1 -1至 R^1 -64。

【0157】較佳之共主體材料亦為連同三吡基亦含有呋啞基者，特佳係這兩個基團藉由二苯并呋喃或二苯并噻吩而呈橋(bridge)形式之情況。極特佳之具有三吡-二苯并呋喃/二苯并噻吩-呋啞結構單元的共主體材料係揭示於WO 2015/169412。

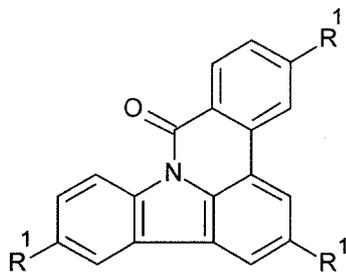
【0158】與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳內醯胺(lactam)係選自下式(LAC-1)之化合物：



式 (LAC-1)

其中， R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)者。

【0159】式(LAC-1)化合物之一較佳實施態樣為下式(LAC-1a)之化合物：



式 (LAC-1a)

其中， R^1 具有前文所提供之定義，尤其用於式(I)者。此處之 R^1 較佳為於各情況下係相同或不同且為H或具有5至40個芳族環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統，其中 R^2 可具有前文提供之定義，尤其用於式(I)者。最佳的， R^1 取代基係選自由下列所組成之群組：H，以及具有6至18個芳族環原子、較佳6至13個芳族環原子以及於各情況下可經一或多個非芳族 R^2 基取代但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統。適用之 R^1 取代基的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萘基，1-、2-、3-或4-螺雙萘基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基，及1-、2-、3-或4-咪唑基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。此處適用之 R^1 結構係如同上述R-1至R-177、更佳為 R^1 -1至 R^1 -64之結構。

【0160】亦可較佳係使用呈混合物之多種不同基質材料，尤其是至少一種電子傳導基質材料及至少一種電洞傳導基質材料。較佳者同樣為使用電荷傳輸基質材料及不顯

著涉入(若有的話)電荷傳輸之電荷性基質材料的混合物，如例如 WO 2010/108579 中所述。

【0161】又較佳係使用二或更多三重態發射體之混合物連同基質。在此情況下，具有較短波長之發射光譜的三重態發射體係用作具有較長波長之發射光譜的三重態發射體之共基質。

【0162】更佳的，在一較佳實施態樣中，可使用包含式(I)結構的本發明化合物作為有機電子裝置(尤其是有機電致發光裝置，例如 OLED 或 OLEC)之發光層中的基質材料。在此情況下，含有包含式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之化合物的基質材料係與一或多種摻雜劑(較佳為磷光摻雜劑)組合存在於電子裝置中。

【0163】此情況下，發光層中之基質材料的比例，就螢光發光層而言，係介於 50.0 體積%與 99.9 體積%之間、較佳係介於 80.0 體積%與 99.5 體積%之間、更佳係介於 92.0 體積%與 99.5 體積%之間，以及，就磷光發光層而言，係介於 85.0 體積%與 97.0 體積%之間。

【0164】對應的，摻雜劑之比例，就螢光發光層而言，係介於 0.1 體積%與 50.0 體積%之間、較佳係介於 0.5 體積%與 20.0 體積%之間、更佳係介於 0.5 體積%與 8.0 體積%之間，以及，就磷光發光層而言，係介於 3.0 體積%與 15.0 體積%之間。

【0165】有機電致發光裝置之發光層亦可包含包括複數種基質材料(混合基質系統)及/或複數種摻雜劑之系統。

在此情況下，摻雜劑亦通常為在該系統中具有較小比例的材料，而基質材料為在該系統中具有較大比例之材料。然而，在個別情況下，系統中之單一基質材料的比例可低於單一摻雜劑的比例。

【0166】 在本發明一更佳實施態樣中，包含式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之化合物係用作混合基質系統之組分。混合基質系統較佳包含二或三種不同基質材料，更佳為兩種不同基質材料。較佳的，在此情況下，這兩種材料中之一者為具有電洞傳輸性質的材料，而另一材料為具有電子傳輸性質的材料。然而，混合基質組分之所希望的電子傳輸及電洞傳輸性質亦可主要或完全地組合於單一混合基質組分，在該情況下，其他混合基質組分實行其他功能。這兩種不同基質材料可以1:50至1:1之比存在，較佳為1:20至1:1，更佳為1:10至1:1，最佳為1:4至1:1。較佳者係於磷光有機電致發光裝置中使用混合基質系統。有關混合基質系統之更詳細資訊之一來源為申請案WO 2010/108579。

【0167】 本發明進一步提供電子裝置，較佳為有機電致發光裝置，其包含一或更多本發明之化合物及/或至少一本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於一或更多電洞傳導層中作為電洞傳導化合物。

【0168】 本發明一較佳實施態樣中，有機電致發光裝置包括包含式(I)之結構或前文詳述之較佳實施態樣的本發明化合物及/或至少一本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀

聚合物作為電子傳導層中之電子傳導化合物。

【0169】本發明進一步提供電子裝置，較佳為有機電致發光裝置，其包含一或更多本發明之化合物及/或至少一本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於一或更多電子傳輸層中，較佳係與具有高介電常數之材料組合，例如鹼金屬或鹼土金屬氟化物，還有對應的氧化物或碳酸鹽(例如，LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃等)或有機鹼金屬錯合物例如 Liq (喹啉酸鋰 (lithium quinolate))，特佳者為有機鹼金屬錯合物(較佳為Liq)與本發明之化合物及/或本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物之組合。電子傳輸層中之這兩種不同材料可以1:50至50:1、較佳為1:10至10:1、更佳為1:4至4:1、最佳為1:2至2:1之比存在。

【0170】本發明進一步提供電子裝置，較佳為有機電致發光裝置，其包含一或更多本發明之化合物及/或至少一本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於發光層中作為基質材料，較佳係與磷光發射體組合。

【0171】較佳之陰極為具有低功函數(work function)之金屬、金屬合金、或由各種不同金屬(例如鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑰系元素(例如Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等))所構成之多層結構。其他適用者為由鹼金屬或鹼土金屬及銀所構成的合金，例如由鎂及銀所構成的合金。在多層結構之情況下，除了已提及的金屬之外，亦可能使用具有相對高功函數之其他金屬，例如Ag，

在該情況下，通常使用金屬之組合，諸如例如 Mg/Ag、Ca/Ag 或 Ba/Ag。亦可較佳係在金屬陰極及有機半導體之間引入具有高介電常數之材料的薄中間層。本目的之可用材料的實例為鹼金屬或鹼土金屬氟化物，還有對應之氧化物或碳酸鹽(例如，LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃等)。也可用於此目的是有機鹼金屬錯合物，例如 Liq(喹啉酸鋰)。該層之層厚度較佳係介於 0.5 與 5 nm 之間。

【0172】較佳之陽極為具有高功函數之材料。較佳的，陽極係具有相對於真空為大於 4.5 eV 之功函數。首先，具有高氧化還原電位之金屬係適合此目的，例如 Ag、Pt 或 Au。其次，金屬/金屬氧化物電極(例如，Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x)亦會較佳。就一些應用而言，電極中之至少一者必須為透明或部分透明以能照射有機材料(O-SC)或發光(OLED/PLED、O-雷射)。此處較佳之陽極材料為傳導性合金屬氧化物。特佳者係銦錫氧化物(ITO)或銦鋅氧化物(IZO)。較佳者另外為傳導性經摻雜有機材料，尤其是傳導性經摻雜聚合物，例如 PEDOT、PANI 或此等聚合物之衍生物。另外較佳係 p-摻雜之電洞傳輸材料係應用至陽極作為電洞注入層的情況，在該情況下適合的 p-摻雜劑為金屬氧化物，例如 MoO₃ 或 WO₃、或(全)氟化缺電子芳族系統。其他適用之 p-摻雜劑為 HAT-CN(六氰基六氮雜聯伸三苯(hexacyanohexaazatriphenylene))或來自 Novaled 之化合物 NPD9。這樣的層使電洞注入具有低 HOMO(即，就數值而

言為大HOMO)之材料變簡單。

【0173】在其他層中，通常可使用如根據先前技術用於該層的任何材料，且熟習本領域之人士能在不運用創作性技巧下即能將該等材料任一者與本發明材料組合於電子裝置中。

【0174】裝置係對應地(根據應用)結構化(structured)、觸點連接(contact-connected)以及最終密封，因為此等裝置之使用壽命在水及/或空氣存在下會嚴重縮短。

【0175】另外較佳的是電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其特徵在於一或更多層係藉由昇華方法(sublimation process)塗布。在該情況下，材料係在真空昇華系統中在通常低於 10^{-5} mbar、較佳係低於 10^{-6} mbar之初始壓力下藉由蒸鍍(vapour deposition)施加。亦可能的是，初始壓力更低或更高，例如低於 10^{-7} mbar。

【0176】較佳者還有電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其特徵在於一或更多層係藉由OVPD(有機氣相沉積(organic vapour phase deposition))法或借助於載氣昇華作用(carrier gas sublimation)塗布。在該情況下，材料係在介於 10^{-5} mbar與1 bar之間的壓力下施加。該方法的一具體實例為OVJP(有機蒸氣噴射印刷(organic vapour jet printing))法，其中材料係藉由噴嘴直接施加，因此結構化(例如M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett. **2008**, 92, 053301)。

【0177】另較佳者為電子裝置，尤其是有機電致發光

裝置，其特徵在於一或更多層係自溶液製造，例如藉由旋塗、或藉由任何印刷法，例如網版印刷、快乾印刷、平版印刷或噴嘴印刷，但更佳為LITI(光引發熱成像(light-induced thermal imaging)、熱轉印印刷(thermal transfer printing))或噴墨印刷。基於此目的，需要可溶性化合物，其係例如經由適合之取代所獲得。

【0178】電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，亦可藉由自溶液施加一或多層及藉由蒸鍍施加一或更多其他層而製造成混合系統。例如，可自溶液施加包含包括式(I)結構的本發明化合物以及基質材料的發光層，以及藉由在減壓下蒸鍍施加電洞阻擋層及/或電子傳輸層至彼。

【0179】此等方法大體上為熟習本領域之人士已知以及可毫無困難地應用至電子裝置，尤其是包含包括式(I)結構或前文詳述之較佳實施態樣之本發明化合物的有機電致發光裝置。

【0180】本發明之電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，值得注意的是優於先前技術的下列令人意外的一或更多優點：

1. 電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其包含具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，尤其是作為主體材料或是作為電子傳導材料，具有非常良好的使用壽命(lifetime)。於該背景下，此等化合物尤其實現低衰減(roll-off)，即，裝置於高光度下功率效率(power

efficiency)之下降幅度小。

2. 電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其包含具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，作為電子傳導材料、電洞傳導材料及/或主體材料，具有優異的效率。於該背景下，具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的本發明之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物在用於電子裝置中時實現低的操作低電壓(operating voltage)。
3. 具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的本發明之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物展現非常高的安定性以及使用壽命。
4. 採用具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，可能避免電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)中形成光損失通道(optical loss channel)。結果，此等裝置表現發射體之高PL效率特徵，因此表現高EL效率，以及基質至摻雜劑之優異的能量傳遞(energy transmission)。
5. 將具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物用於電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)之層中，導致電子導體結構(electron conductor structure)之高移動率(mobility)。
6. 具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之

化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物表現優異的熱安定性特徵，以及具有低於約 1200 g/mol 之莫耳質量的化合物具有良好昇華性(sublimability)。

7. 具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物具有優異的玻璃膜形成性(glass film formation)。
8. 具有式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物由溶液形成非常良好的膜。
9. 包含式(I)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物具有令人驚訝的高三重態能階 T_1 。

【0181】上述優點並未伴隨其他電子性質的劣化。

【0182】本發明之化合物及混合物適合用於電子裝置。此處之電子裝置係理解為意指含有至少一個含有至少一種有機化合物之層的裝置。然而，組件亦可包含無機材料或是完全由無機材料形成的層。

【0183】本發明因此進一步提出本發明之化合物或混合物用於電子裝置(尤其是用於有機電致發光裝置)之用途。

【0184】本發明更進一步提出本發明之化合物及/或本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物之用途，係於有機裝置中作為磷光發射體之主體材料、電子傳輸材料及/或電洞傳輸材料，較佳作為紅色或綠色磷光化合物之主體

材料或作為具有螢光發射體之有機電致發光裝置中的電子傳輸材料。

【0185】本發明更進一步提出本發明之化合物及/或本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於電子裝置中作為電子傳輸層之一部分(尤其與具有高介電常數(dielectric constant)之材料組合)的用途。

【0186】本發明進一步提供包含前文詳述之至少一本發明化合物或混合物的電子裝置。在該情況下，前文詳述之較佳化合物亦適用於電子裝置。更佳的，電子裝置係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置(OLED、PLED)、有機積體電路(O-IC)、有機場效電晶體(O-FET)、有機薄膜電晶體(O-TFT)、有機發光電晶體(O-LET)、有機太陽能電池(O-SC)、有機光學偵測器、有機感光器、有機場淬滅裝置(O-FQD)、有機電感測器、發光電化學電池(LEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機電漿子發射裝置(D. M. Koller et al., Nature Photonics 2008, 1-4)，較佳為有機電致發光裝置(OLED、PLED)，尤其是磷光OLED。

【0187】在本發明另一實施態樣中，本發明之有機電致發光裝置不含有任何獨立的電洞注入層及/或電洞傳輸層及/或電洞阻擋層及/或電子傳輸層，此意指發光層直接毗鄰電洞注入層或陽極，及/或發光層直接毗鄰電子傳輸層或電子注入層或陰極，如例如WO 2005/053051中所述。另外可能使用與發光層中之金屬錯合物相同或相似的金屬錯合物作為直接毗鄰該發光層之電洞傳輸或電洞注入材

料，如例如 WO 2009/030981 中所述。

【0188】 在本發明之有機電致發光裝置的其他層中，可能使用根據先前技術經常使用的任何材料。熟習本領域之人士因此能在不運用創造性技巧下將已知用於有機電致發光裝置的任何材料與式(I)或根據較佳實施態樣的本發明化合物組合。

【0189】 本發明化合物在用於有機電致發光裝置時通常具有極良好性質。尤其是在本發明化合物用於有機電致發光裝置之情況下，使用壽命明顯優於根據先前技術之相似化合物。同時，有機電致發光裝置之其他性質，尤其是效率及電壓，也為較佳或至少相當。

【0190】 應指出本發明中所述之實施態樣的變化係涵蓋在本發明範圍內。除非明確排除，否則本發明所揭示之任何特徵可與用於相同目的或相等或類似目的之替代性特徵交換。因此，除非另有陳述，否則本發明中所揭示之任何特徵應視為大類之一實例或視為相等或類似特徵。

【0191】 除非特定特徵及/或步驟相互排斥，否則本發明所有特徵可以任何方式彼此組合。本發明之較佳特徵尤其如此。同樣地，可獨立(且非組合)使用非基本組合之特徵。

【0192】 亦應指出許多特徵，尤其是本發明較佳實施態樣之特徵，本身應視為具有進步性而且不僅為本發明實施態樣中的一些特徵。就此等特徵而言，除了任何目前主張之發明之外的或作為其替代的，可尋求獨立保護。

【0193】本發明揭示之技術性教示可予以摘要及與其他實例組合。

【0194】本發明係以下列實例更詳細說明，但並未意欲藉此限制本發明。

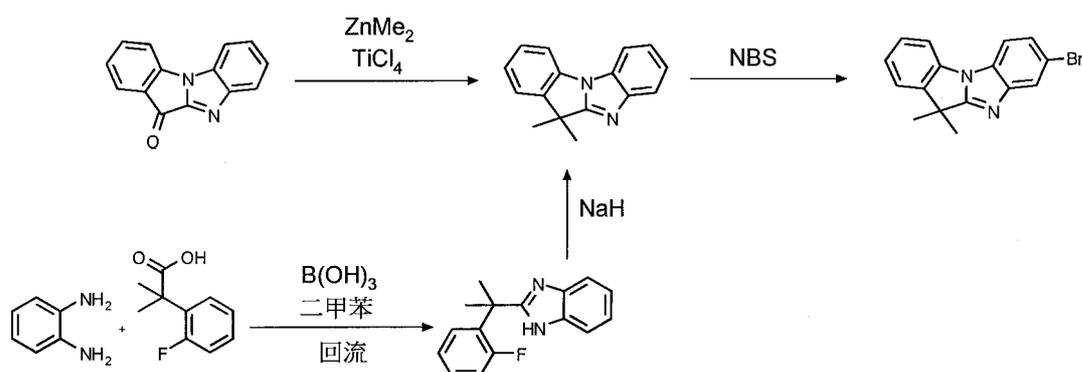
【0195】熟習本領域之人士將能在不運用創造性技巧下使用所提供的細節，以製造本發明之其他電子裝置且因而實現在所主張的整個範圍內的發明。

【實施方式】

實施例

【0196】除非另有指明，否則以下之合成係在保護氣體氣氛 (protective gas atmosphere) 下於無水溶劑 (dried solvent) 中進行。反應物可來自 ALDRICH。從文獻已知之反應物編號，其中一些係以中括號表示，為對應之 CAS 編號。

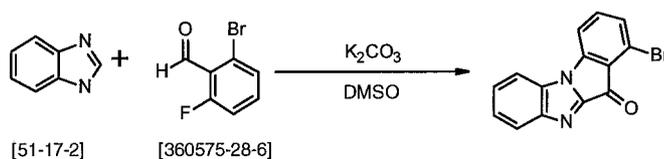
合成實例



合成實例

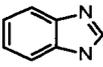
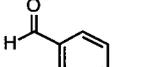
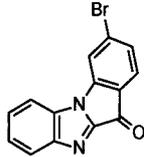
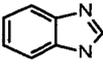
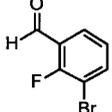
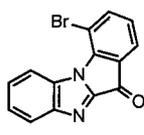
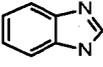
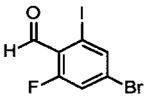
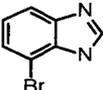
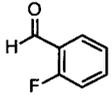
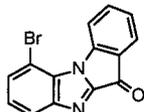
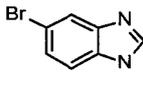
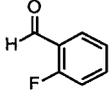
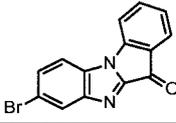
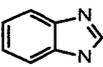
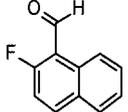
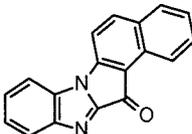
【0197】

a) 1-溴-4b,9-二吡啶并[1,2-a]茛-10-酮 (1-Bromo-4b,9-diazaindeno[1,2-a]inden-10-one)



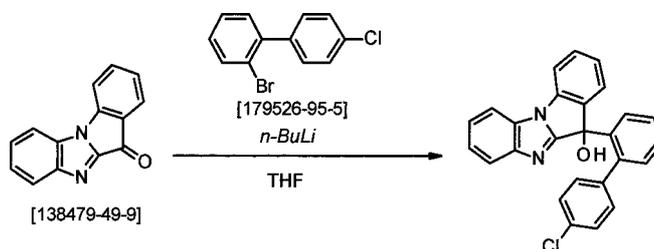
於一 2 升 (l) 燒瓶中，將 89.0 g (754 mmol；1.50 當量 (eq)) 之苯并咪唑 [CAS 51-17-2]、102 g (502 mmol；1.00 當量) 之 2-溴-6-氟苯甲醛 (2-bromo-6-fluorobenzaldehyde) [CAS 360575-28-6] 及 108 g (778 mmol；1.55 當量) 之碳酸鉀 [CAS 584-08-7] 懸浮於 1500 ml 之 DMSO [CAS 67-68-5] 中。反應混合物係在引入空氣的情況下於 105°C 攪拌 18 小時。於冷卻至室溫之後，將反應倒至 2.5 升 (l) 之冰水上。將沉澱之固體濾除並以乙酸乙酯 [CAS 141-78-6] 清洗。獲得呈橙色固體之產物 43.3 g (144.7 mmol，29% 理論值 (theory))。

以類似方式，可獲得下列化合物：

編號	反應物1	反應物2	產物	產率
1a	 [51-17-2]	 [57848-46-1]		17%
2a	 [51-17-2]	 [149947-15-9]		21%
3a	 [51-17-2]	 [1935375-88-4]		19%
4a	 [83741-35-9]	 [446-52-6]		15%
5a	 [4889-88-1]	 [446-52-6]		25%
6a	 [51-17-2]	 [82128-49-2]		16%

【 0198 】

b) 10-(4'-氯聯苯-2-基)-10H-4b,9-二吡啶并[1,2-a]吡-10-醇



於一1升(l)燒瓶中，於保護氣體(protective gas)下，將20.9 g (78.2 mmol；1.07當量)之2-溴-4'-氯聯苯(2-bromo-4'-chlorobiphenyl)[CAS 179526-95-5]溶於50 ml之無水THF(dry THF)[CAS 109-99-9]並冷卻至-78°C。然後將30.7

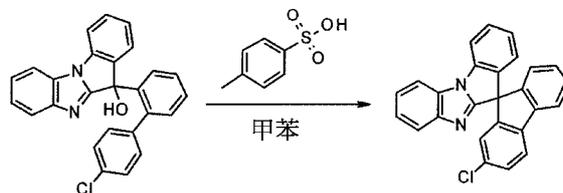
ml(2.5 mol/l ; 76.7 mmol ; 1.05當量)之正丁基鋰[CAS 109-72-8]逐滴加入且再攪拌該混合物2小時。將16.1 g(73.0 mmol , 1.00當量)之4b,9-二吡啶并[1,2-a]吡-10-酮[CAS 138479-49-9]於370 ml之無水THF[CAS 109-99-9]中的懸浮液逐滴添加至該混合物。將所得混合物逐漸回溫至室溫，且再攪拌18小時。藉由添加300 ml之水終止反應，並將所得之相(phases)分離。於以乙酸乙酯(3×150 ml) [CAS 141-78-6]萃取水相之後，以水(2×150 ml)清洗組合之有機相。在減壓下去除溶劑而產生粗製產物(crude product)，其最後係溶於二氯甲烷[CAS 75-09-2]以及藉由添加庚烷予以沉澱。過濾之後，獲得呈棕色過濾殘留物之25.3 g (61.8 mmol ; 85%)產物。

以類似方式，可獲得下列化合物：

編號	反應物1	反應物2	產物	產率
1b				82%
2b				62%
3b				79%
4b				88%
5b				55%
6b				73%
7b				78%
8b				48%

【 0199】

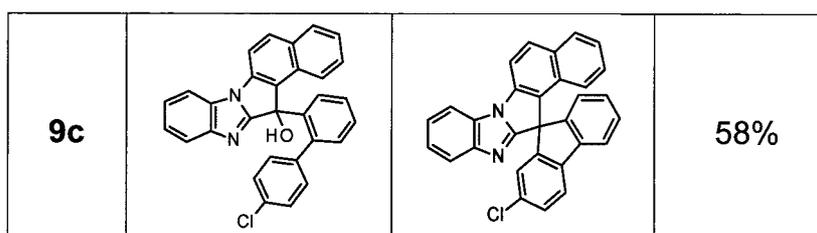
c) 2-氯螺[萘-9,11'-吡啶并[1,2-a]苯并咪唑]



於一 500 ml 燒瓶中，將 24.9 g (60.9 mmol；1.00 當量) 之 10-(4'-氯聯苯-2-基)-10H-4b,9-二吡啶并[1,2-a]茛-10-醇 (10-(4'-chlorobiphenyl-2-yl)-10H-4b,9-diazainden-10-ol) 及 116 g (609 mmol；10.0 當量) 之 甲苯磺酸一水合物 (toluenesulfonic acid monohydrate) [CAS 6192-52-5] 懸浮於 290 ml 之 甲苯 [CAS 108-88-3] 中，且於 115°C 攪拌混合物 72 小時。於轉化完成時，將混合物冷卻至室溫並將反應溶液濃縮。將粗製產物收集於 乙酸乙酯 (500 ml) [CAS 141-78-6] 中，並用水 (2×250 ml) 清洗。經過矽膠 (silica gel) 過濾以及用庚烷沉澱之後，獲得呈米黃色固體形式之 19.1 g (80%，48.8 mmol) 產物。

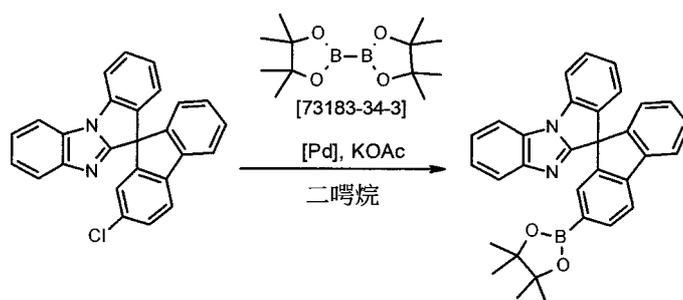
以類似方式，可獲得下列化合物：

編號	反應物1	產物	產率
1c			80%
2c			76%
3c			66%
4c			73%
5c			81%
6c			69%
7c			77%
8c			81%



【 0200 】

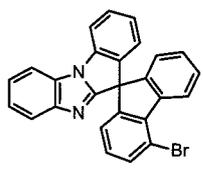
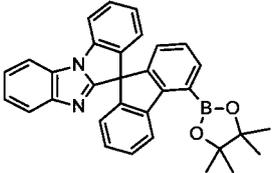
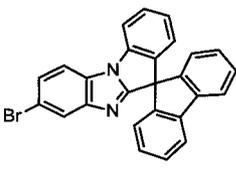
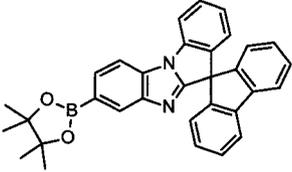
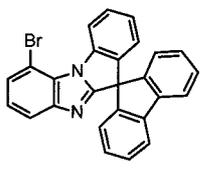
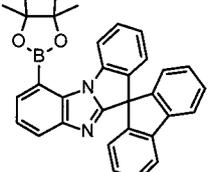
d) 2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼雜環戊烷-2-基)螺[芴-9,11'-吲哚并[1,2-a]苯并咪唑](2-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)spiro[fluorene-9,11'-indolo[1,2-a]benzimidazole])



於一 1 升 (l) 燒瓶中，於保護氣體下，將 18.6 g (47.5 mmol；1.00 當量) 之 2-氯螺[芴-9,11'-吲哚并[1,2-a]苯并咪唑](2-chlorospiro[fluorene-9,11'-indolo[1,2-a]benzimidazole]) 及 14.5 g (57 mmol，1.20 當量) 之雙(醞并)二硼烷 (bis(pinacolato)diborane) [CAS 73183-34-3] 溶於 450 ml 之無水二噁烷 (dry dioxane) [CAS 123-91-1] 以及將混合物除氣 (degass) 30 分鐘。隨後，添加 10.2 g (105 mmol，2.20 當量) 之乙酸鉀 [CAS 127-08-2] 及 1.76 g (2.38 mmol，5 mol%) 之反-二氯雙(三環己基膦)鈀 (II) 錯合物 (trans-dichlorobis(tricyclohexylphosphine)palladium(II) complex) [CAS 29934-17-6]，將混合物加熱至 90°C 一夜。在反應結

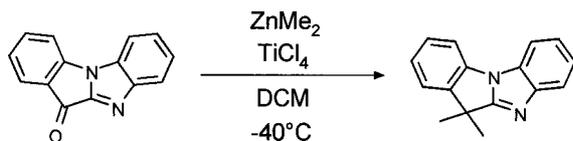
束之後，混合物係以 300 ml 之甲苯 [CAS 108-88-3] 稀釋並以水萃取。於旋轉蒸氣器上去除溶劑，以及將所獲得之固體乾燥。轉化成 17.9 g 之產物 (37.1 mmol, 78% 理論值 (theory))，無進一步純化。

以類似方式，可獲得下列化合物：

編號	反應物1	產物	產率
1d			83%
2d			73%
3d			72%

【 0201 】

e) 10,10-二甲基-1,8-二吡四環 [7.7.0.0^{2,7}.0^{11,16}]十六-2,4,6,8,11(16),12,14-庚烯 (10,10-dimethyl-1,8-diazatetracyclo[7.7.0.0^{2,7}.0^{11,16}]hexadeca-2,4,6,8,11(16),12,14-heptaene)

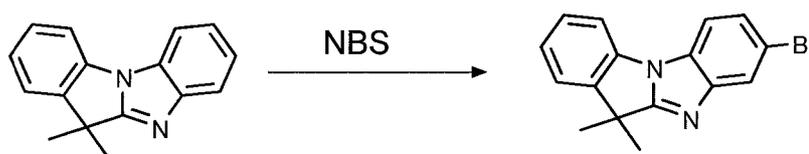


於惰性化氣氛 (inertized atmosphere) 下，先於 -40°C 裝入 147 g (774 mmol, 4.00 當量) 之氯化鈦 (IV) [CAS 7550-45-

0]及二氯甲烷[CAS 75-09-2]。然後，以使溫度不超過-35 °C之速率添加387 ml(2 mol/l, 774 mmol, 4.00當量)之二甲基鋅溶液[CAS 544-97-8]。隨後，添加42.6 g(193.6 mmol, 1.00當量)之4b,9-二吡啶并[1,2-a]吡-10-酮。將所獲得之溶液逐漸回溫至室溫，且藉由添加乙醇然後添加水終止反應。將相(phase)分離，以及將有機相濃縮成固體。粗製產物係從庚烷[CAS 142-82-5]及乙酸乙酯[CAS 141-78-6]之混合物重複再結晶。獲得5.03 g(21.3 mmol, 11%理論值(theory))之產物。

【0202】

f) 5-溴-10,10-二甲基-1,8-二吡四環[7.7.0.0^{2,7}.0^{11,16}]十六-2,4,6,8,11(16),12,14-庚烯 (5-bromo-10,10-dimethyl-1,8-diazatetracyclo[7.7.0.0^{2,7}.0^{11,16}]hexadeca-2,4,6,8,11(16),12,14-heptaene)

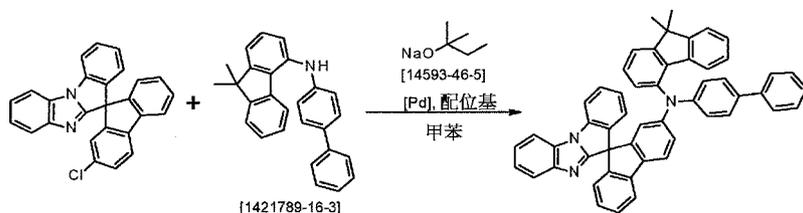


於保護氣體下，將4.83 g (20.6 mmol, 1.00當量)之3-[3'-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡-2-基)-[1,1'-聯苯]-3-基]-9-(聯伸三苯-2-基)-9H-吡啶(3-[3'-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-[1,1'-biphenyl]-3-yl]-9-(triphenylen-2-yl)-9H-carbazole)懸浮於30 ml之無水DMF(dry DMF)[CAS 68-12-2]且冷卻至0°C。然後添加4.03 g(22.7 mmol, 1.1當量)之NBS[CAS 128-08-5]，將反應混合物攪拌16小時，期間將其回溫至室

溫。藉由添加 150 ml 之水且攪拌 30 分鐘使反應終止。於過濾及乾燥之後，獲得 5.48 g (17.5 mmol；85% 理論值 (theory)) 之產物。

【0203】

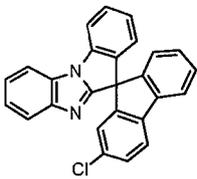
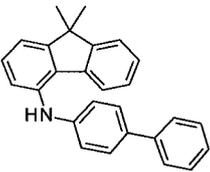
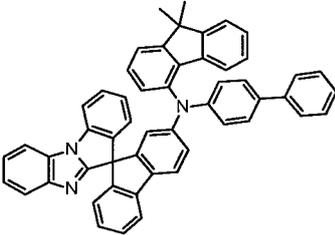
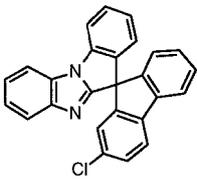
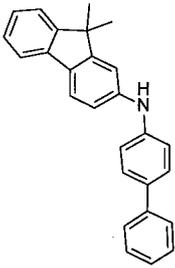
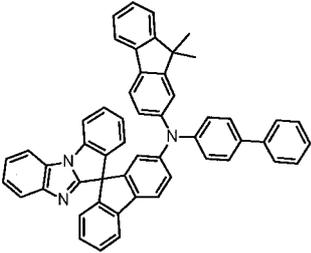
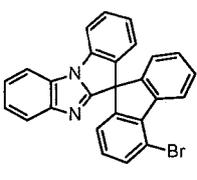
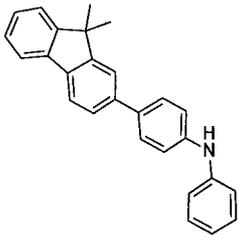
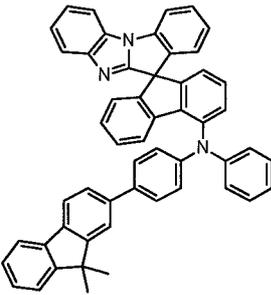
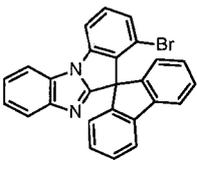
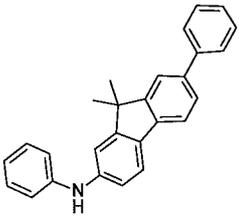
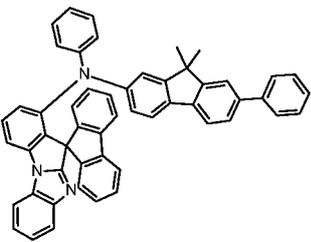
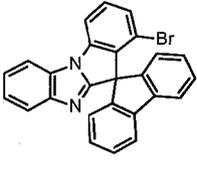
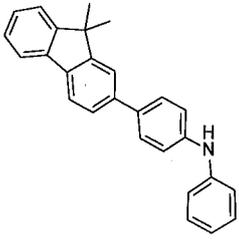
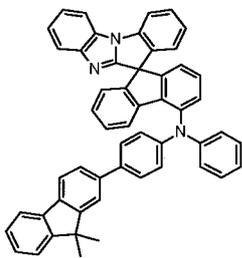
g) N-(9,9-二甲基芴-4-基)-N-(4-苯基苯基)螺[芴-9,11'-吡啶并[1,2-a]苯并咪唑]-2-胺 (N-(9,9-Dimethylfluorene-4-yl)-N-(4-phenylphenyl)spiro[fluorene-9,11'-indolo[1,2-a]benzimidazole]-2-amine)

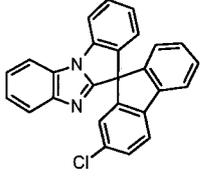
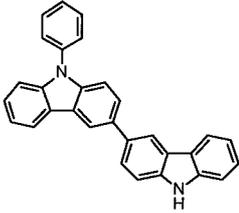
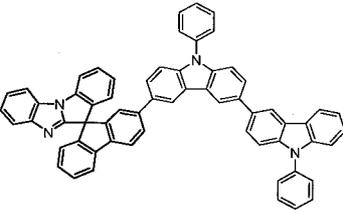
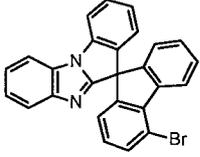
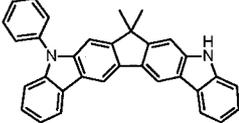
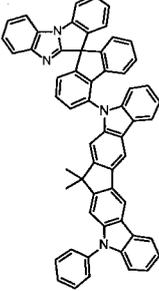
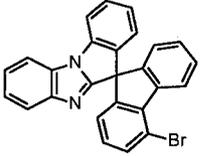
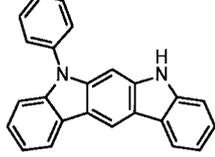
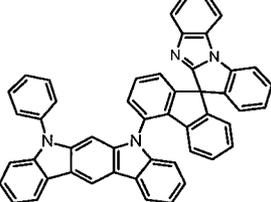
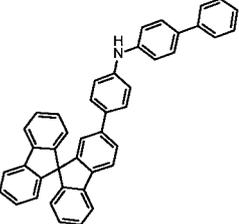
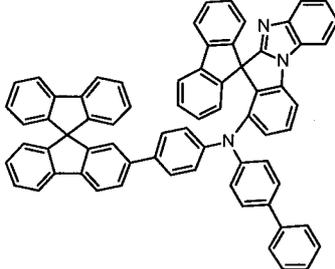
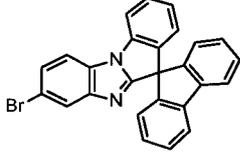
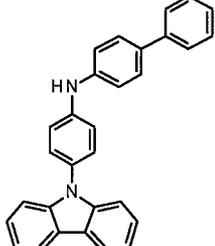
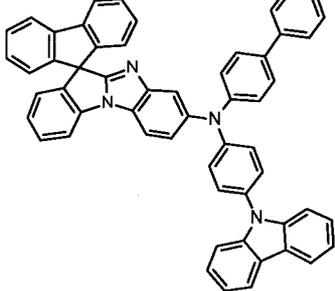
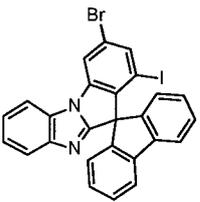
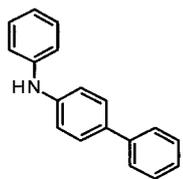
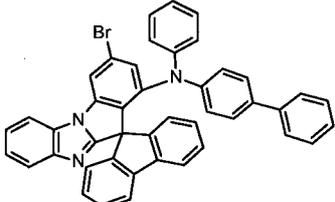


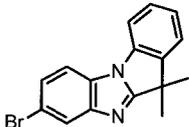
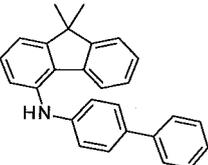
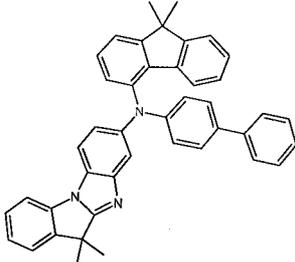
15.2 g (38.9 mmol；1.00 當量) 之 2-氯螺[芴-9,11'-吡啶并[1,2-a]苯并咪唑]、14.5 g (39.3 mmol；1.01 當量) 之 聯苯-4-基-(9,9-二甲基-9H-芴-4-基)胺 [CAS 1421789-16-3] 及 4.96 g (42.7 mmol；1.10 當量) 之 三級-五氧化鈉 (sodium tert-pentoxide) [CAS 14593-46-5] 於 200 ml 之 甲苯 [CAS 108-88-3] 中的初始進料係於氬流中惰性化 (inertized) 30 分鐘。然後添加 479 mg (1.17 mmol；3 mol%) 之二環己基-(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦 (SPhos) [CAS 657408-07-6]、262 mg (1.17 mmol；3 mol%) 之乙酸鈣 [CAS 3375-31-3]，將混合物加熱至回流 18 小時。在轉化完成且冷卻至室溫之後，於反應中添加 500 ml 之水。將相分離及以甲苯 [CAS 108-88-3] 萃取水相之後，將組合有機相濃縮以及添加庚烷。將沉澱之固體分離。藉由 Soxhlet 萃取 (Soxhlet extraction)、再結

晶 (recrystallization) 及真空昇華 (vacuum sublimation) 之純化提供所欲產物 (6.63 g ; 9.26 mmol ; 24% 理論值 (theory))。

以類似方式，可獲得下列化合物：

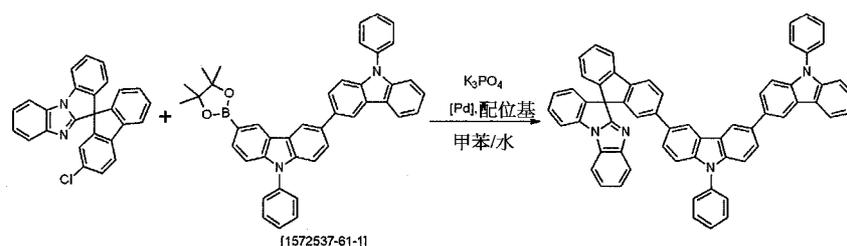
編號	反應物1		產物	產率
1g		 [1421789-16-3]		30%
2g		 [897671-69-1]		33%
3g		 [1159425-90-7]		28%
4g		 [1222633-97-7]		44%
5g		 [1159425-90-7]		45%

6g		 [1060735-14-9]		40%
7g		 [1618097-04-3]		21%
8g		 [1448296-00-1]		35%
9g		 [1812175-69-1]		46%
10g		 [1210470-43-1]		39%
11g		 [32228-99-2]		51%

12g		 [1421789-16-3]	 49%
-----	---	---	---

【 0204 】

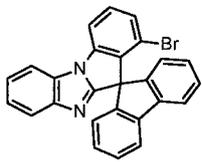
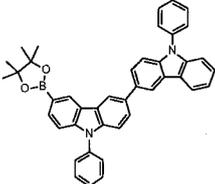
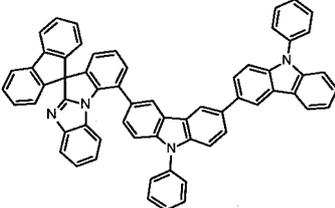
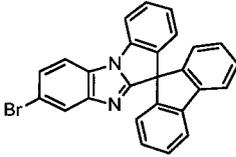
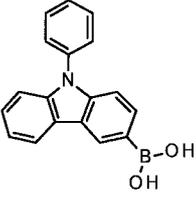
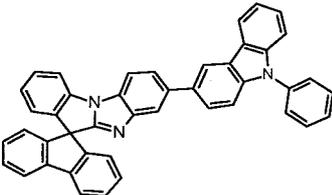
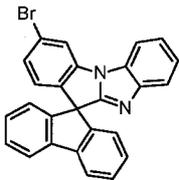
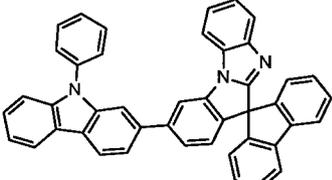
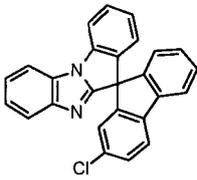
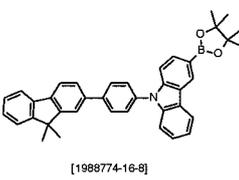
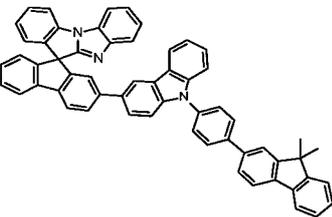
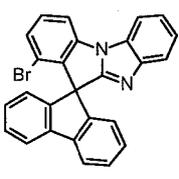
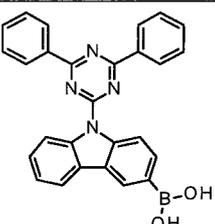
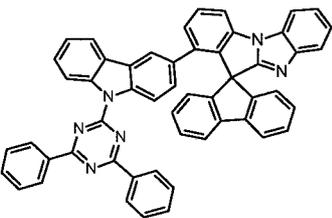
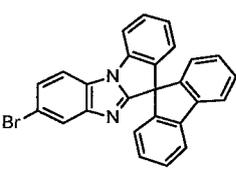
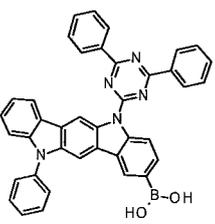
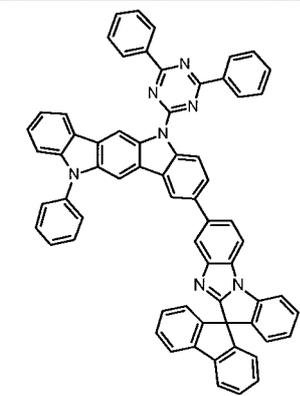
h) 2-[9-苯基-6-(9-苯基咔唑-3-基)咔唑-3-基]螺[芴-9,11'-吲哚并[1,2-a]苯并咪唑](2-[9-Phenyl-6-(9-phenylcarbazol-3-yl)carbazol-3-yl]spiro[fluorene-9,11'-indolo[1,2-a]benzimidazole])

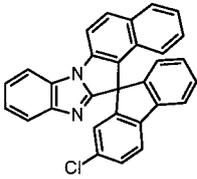
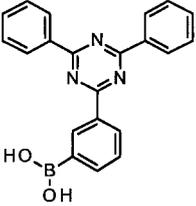
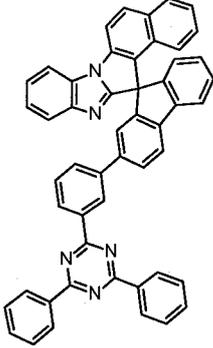
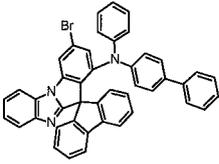
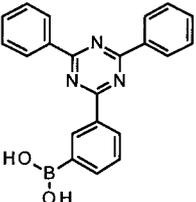
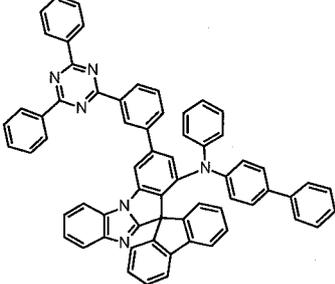
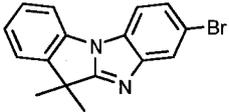
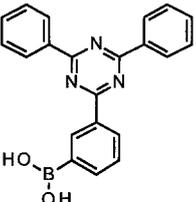
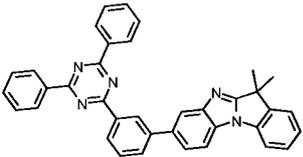
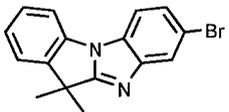
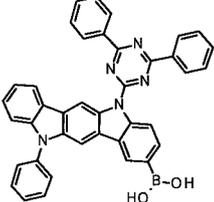
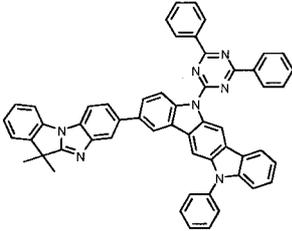


將 6.36 g (16.3 mmol ; 1.00 當量) 之 2-氯螺[芴-9,11'-吲哚并[1,2-a]苯并咪唑]、11.4 g (18.7 mmol ; 1.15 當量) 之 9,9'-二苯基-6-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼雜環戊烷-2-基)-9H,9'H-[3,3']聯咔唑基 (9,9'-diphenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-[1,3,2]dioxaborolan-2-yl)-9H,9'H-[3,3']bicarbazolyl) [CAS 1572537-61-1] 及 7.49 g (32.5 mmol ; 2.00 當量) 之 磷酸三鉀 [CAS 14593-46-5] 懸浮於 210 ml 之 甲苯 [CAS 108-88-3] 及 20 ml 之 水中。於該懸浮液中添加 334 mg (814 μmol ; 5 mol%) 之二環己基-(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦 (SPhos) [CAS 657408-07-6]、183 mg (814 μmol ; 5 mol%)

之乙酸鈣[CAS 3375-31-3]，反應混合物係於回流下加熱16小時。於冷卻之後，將有機相移除，經過矽膠過濾、以150 ml之水清洗三次，然後濃縮至乾。殘留物係從甲苯再結晶，最後於高度真空下昇華。產量為4.70 g(5.60 mmol，34%理論值(theory))。

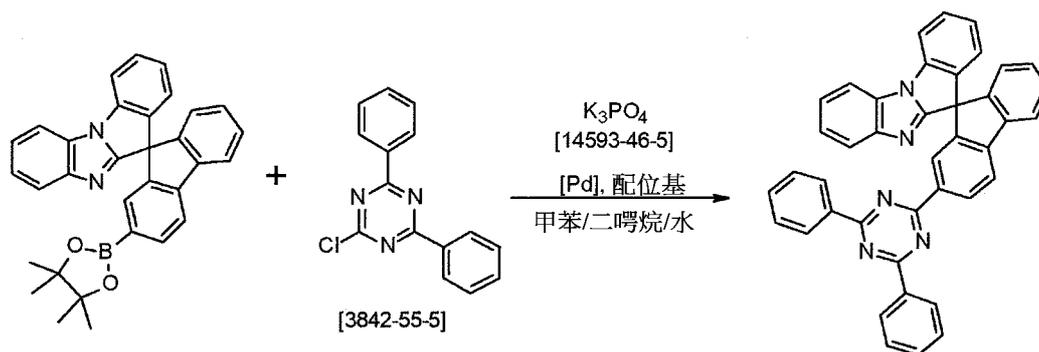
以類似方式，可獲得下列化合物：

編號	反應物1	反應物2	產物	產率
1h		 [1572537-61-1]		38%
2h		 [854952-58-2]		44%
3h		 [1001911-63-2]		35%
4h		 [1988774-16-8]		49%
5h		 [1266389-18-7]		47%
6h		 [2097446-07-4]		41%

7h		 [1612243-82-9]		58%
8h		 [1612243-82-9]		31%
9h		 [1612243-82-9]		40%
10h		 [2097446-07-4]		25%

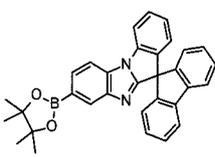
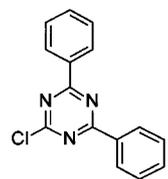
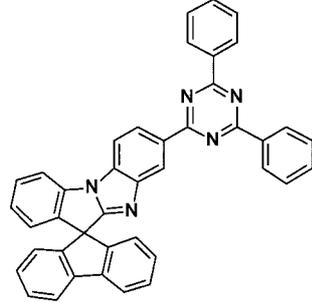
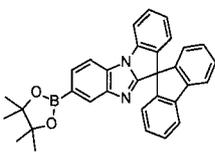
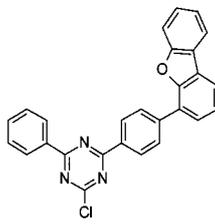
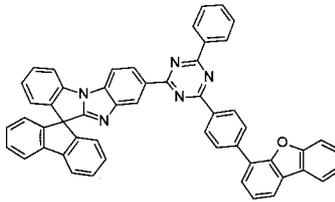
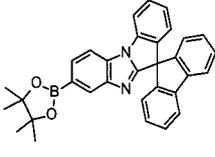
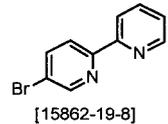
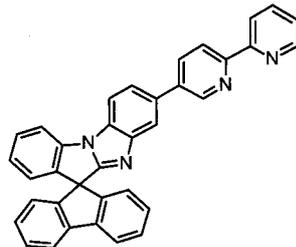
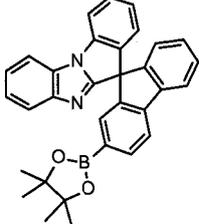
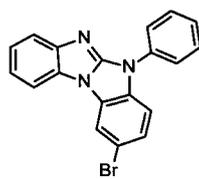
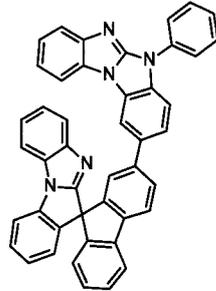
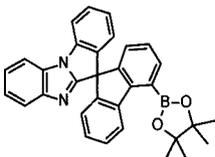
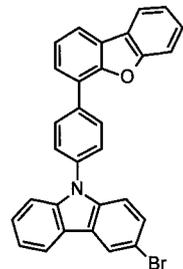
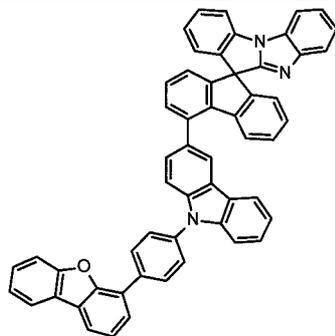
【 0205 】

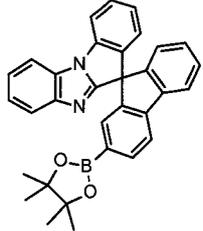
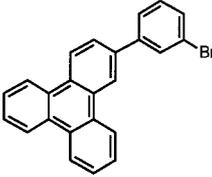
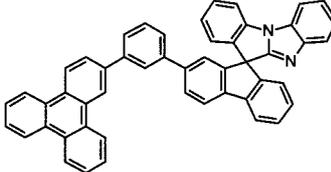
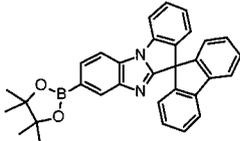
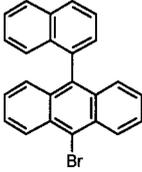
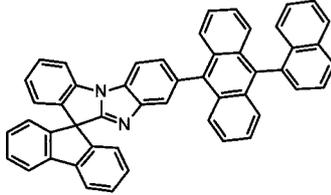
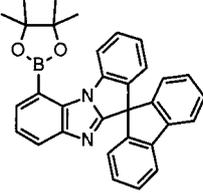
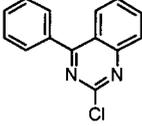
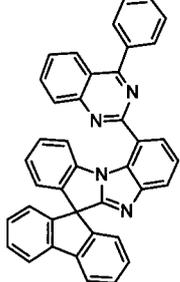
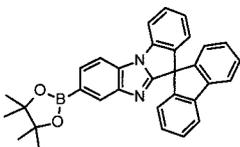
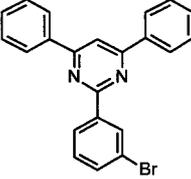
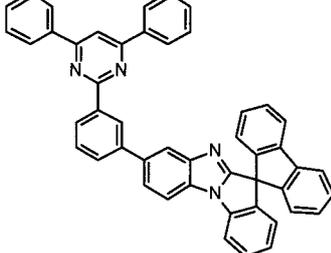
i) 2-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡-2-基)螺[第-9,11'-吡啶并[1,2-a]苯并咪唑]



將 10.8 g (22.4 mmol ; 1,20 當量) 之 2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼雜環戊烷-2-基)螺[芴-9,11'-吲哚并[1,2-a]苯并咪唑](2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)spiro[fluorene-9,11'-indolo[1,2-a]benzimidazole])、5.00 g (18.7 mmol ; 1.00 當量) 之 2-氯-4,6-二苯基-[1,3,5]三吡及 8.58 g (39.2 mmol ; 2.10 當量) 之 磷酸三鉀 [CAS 14593-46-5] 懸浮於 45 ml 之 甲苯 [CAS 108-88-3]、45 ml 之 二噁烷 [CAS 123-91-1] 及 45 ml 之 水中。於該懸浮液中添加 383 mg (934 μ mol ; 5 mol%) 之 二環己基-(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦 (SPhos) [CAS 657408-07-6]、210 mg (934 μ mol ; 5 mol%) 之 乙酸鈣 [CAS 3375-31-3]，反應混合物係於回流 (reflux) 下加熱 16 小時。於冷卻之後，將有機相移除，經過矽膠過濾、以 500 ml 之 水清洗三次，然後濃縮至乾。殘留物係從 甲苯 [CAS 108-88-3] 再結晶，最後於高度真空下昇華。產量為 5.32 g (9.05 mmol, 48% 理論值 (theory))。

以類似方式，可獲得下列化合物：

編號	反應物1	反應物2	產物	產率
1i		 [3842-55-5]		55%
2i		 [2074632-09-8]		63%
3i		 [15862-19-8]		36%
4i		 [1537905-29-5]		45%
5i		 [1978375-86-8]		56%

6i		 [1313514-53-2]		39%
7i		 [400607-04-7]		43%
8i		 [29874-83-7]		59%
9i		 [864377-22-0]		66%

OLED之製造

【0206】以下之實例I1至I12（見表1）呈現本發明材料用於OLED中。

【0207】實例I1至I12之前置處理：塗有厚度為50 nm之結構化(structured)ITO(銦錫氧化物(indium tin oxide))的玻璃板係在塗布之前使用氧電漿(oxygen plasma)、然後氬電漿(argon plasma)處理之。此等經電漿處理之玻璃板(plasma-treated glass plaque)形成其上施加OLED之基板。

【0208】該等OLED基本上具有以下之層結構：基板/

電洞注入層(HIL)/電洞傳輸層(HTL)/電子阻擋層(EBL)/發射層(EML)/視情況(optional)之電洞阻擋層(HBL)/電子傳輸層(ETL)/視情況(optional)之電子注入層(EIL)及最後為陰極。陰極係由厚度為100 nm之鋁層形成。OLED之確切結構可見於表1。OLED製造所需之材料係示於表2。OLED之數據係列於表3。

【0209】所有材料係於真空室(vacuum chamber)中藉熱蒸鍍(thermal vapour deposition)施加。在該情況下，發射層(emission layer)始終由至少一基質材料(主體材料)及藉由共蒸發(co-evaporation)以特定體積比例添加至基質材料的發射摻雜劑(emitting dopant)(發射體(emitter))所組成。以如EG1:IC2:TEG1(49%:44%:7%)之形式提供的細節於此處意指材料EG1於該層中之存在比例(以體積計)為49%，IC2之存在比例為44%及TEG1之存在比例為7%。類似的，電子傳輸層亦可由兩種材料之混合物所組成。

【0210】OLED係以標準方式定性(characterize)。基於該目的，測定電致發光光譜(electroluminescence spectra)、電流效率(current efficiency)(CE，測量為cd/A)及外部量子效率(external quantum efficiency)(EQE，測量為%)(為光度(luminance)之函數)(由電流-電壓-光度特徵計算，採藍伯特發光特性(Lambertian emission characteristics))，如使用壽命。電致發光光譜係於1000 cd/m²之光度測定，以及自其計算CIE 1931 x及y色坐標(colour coordinate)。在表3中之參數U1000係指光度為1000 cd/m²所需之電壓。

CE1000及EQE1000分別表示於1000 cd/m²達到的電流效率及外部量子效率。

使用壽命(lifetime)LT係定義的時間為在那之後光度便從起始光度(starting luminance)降至某比例L1(以固定電流密度(constant current density) j_0 操作的過程中)。表3中之數值L1=80%意指LT欄中所報告之使用壽命所對應的時間為在那之後光度便降至其起始值的80%。

本發明化合物作為電子傳輸材料之用途

【0211】本發明之材料可用於OLED之電子傳輸層(ETL)。本發明化合物EG1可用於實施例I1、I2、I5及I6作為螢光藍色OLED中之電子傳輸材料。此外，本發明之材料可成功地用於電洞阻擋層(HBL)。此係顯示於實驗I3、I4、I7及I8。

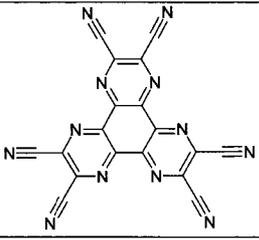
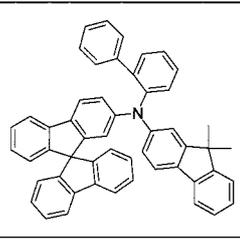
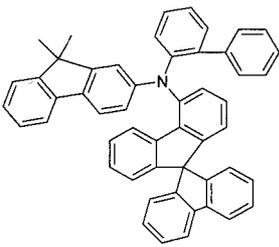
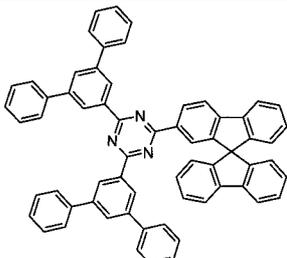
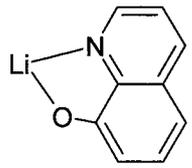
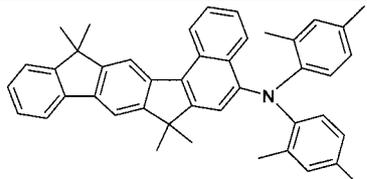
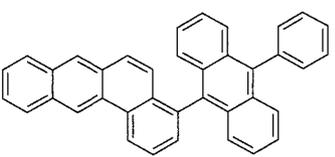
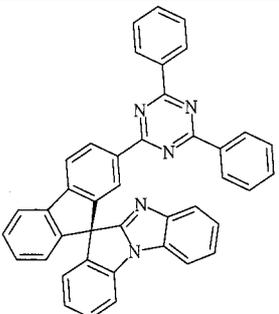
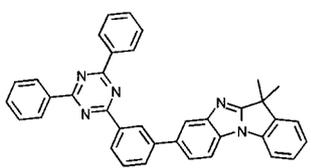
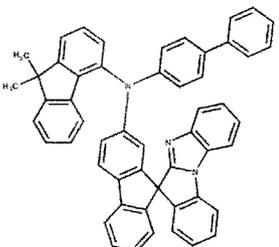
本發明化合物作為磷光OLED中之基質材料之用途

【0212】本發明之材料可用於磷光(例如綠色)OLED中之發射層(emission layer)。本發明化合物EG1至EG4可用於實例I9至I12作為發射層中之基質材料。

表1：OLED之結構

實例	HIL 厚度	HTL 厚度	EBL 厚度	EML 厚度	HBL 厚度	ETL 厚度	EIL 厚度
I1	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	---	EG1 30nm	LiQ 3nm
I2	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	---	EG1:LiQ 30nm	LiQ 1nm
I3	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	EG1 10nm	ST2 20nm	LiQ 3nm
I4	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	EG1 10nm	ST2:LiQ 20nm	LiQ 1nm
I5	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	---	EG2 30nm	LiQ 3nm
I6	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	---	EG2:LiQ 30nm	LiQ 1nm
I7	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	EG2 10nm	ST2 20nm	LiQ 3nm
I8	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 10nm	M2:SEB (95%:5%) 20nm	EG2 10nm	ST2:LiQ 20nm	LiQ 1nm
I9	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG1:IC2:TEG1 (49%:44%:7%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I10	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG2:IC2:TEG1 (49%:44%:7%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I11	HATCN 5nm	SpMA1 215nm	SpMA2 20nm	IC1:EG3:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I12	HATCN 5nm	SpMA1 195nm	SpMA2 20nm	IC1:EG4:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

表2：OLED之材料的結構式

	
HATCN	SpMA1
	
SpMA2	ST2
	
LiQ	SEB
	
M2	EG1
	
EG2	EG3

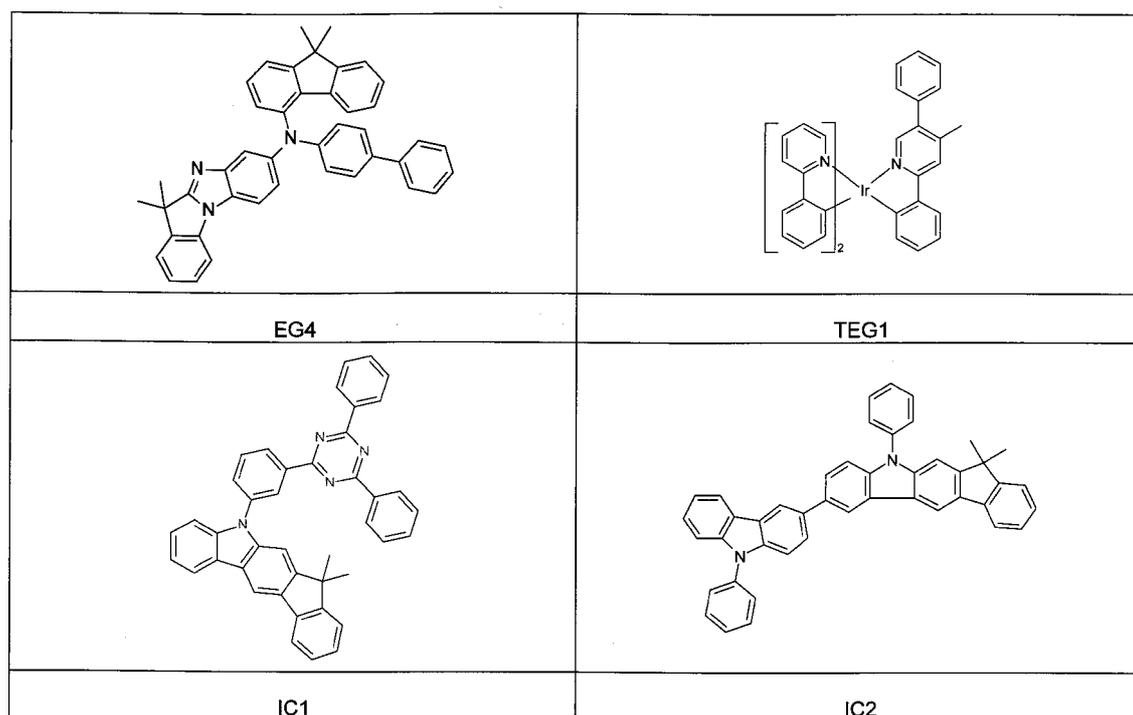


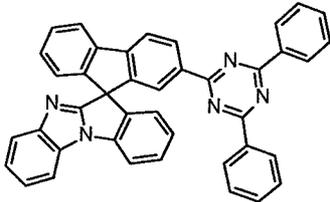
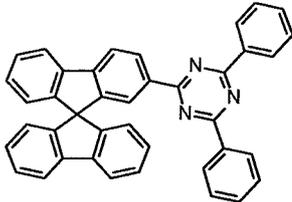
表3：OLED之數據

實例	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	EQE 1000 (%)	CIE x/y 於 1000 cd/m ²	j ₀ (mA/cm ²)	L1 (%)	LT (h)
I1	5.5	5	3.8	0.14/0.16	20	95	1040
I2	4.3	7	6.0	0.14/0.15	20	95	650
I3	4.8	7	5.5	0.14/0.16	20	95	200
I4	4.9	7	5.4	0.14/0.15	20	95	620
I5	5.3	6	4.4	0.14/0.16	20	95	950
I6	4.5	7	5.9	0.14/0.15	20	95	680
I7	4.7	7	5.6	0.14/0.16	20	95	420
I8	4.7	7	5.4	0.14/0.15	20	95	550
I9	3.2	62	16.9	0.36/0.61	20	80	730
I10	3.3	63	17.2	0.36/0.62	20	80	690
I11	3.3	64	17.4	0.35/0.62	20	80	450
I12	3.5	66	17.8	0.35/0.62	20	80	390

熱安定性

【0213】本發明化合物 **EG1**，相較於文獻化合物 **ST3**，顯示出熱安定性顯著提高。安定性係藉由在抽空之玻璃安甌 (evacuated glass ampoule) 中於 350°C 對二材料進

行熱處理7天所測定。純度之分析測定(HPLC)顯示下列結果：

	 EG1	 ST3
起始純度	>99.9%	>99.9%
於350°下7天後之純度	>99.9%	96.0%



201938562

【發明摘要】

【中文發明名稱】

雜環化合物

【英文發明名稱】

HETEROCYCLIC COMPOUNDS

【中文】

本發明係關於雜環化合物，尤其是用於電子裝置者。本發明進一步關於製備本發明化合物之方法以及關於包含該等化合物之電子裝置。

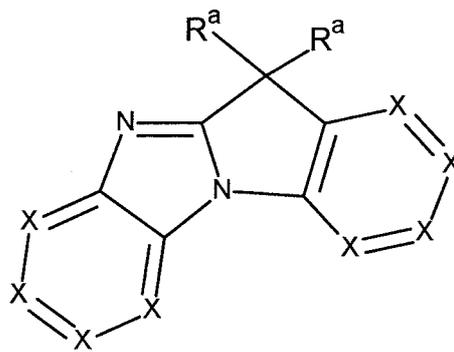
【英文】

The present invention relates to heterocyclic compounds, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

【指定代表圖】無

【代表圖之符號簡單說明】無

【特徵化學式】式 I

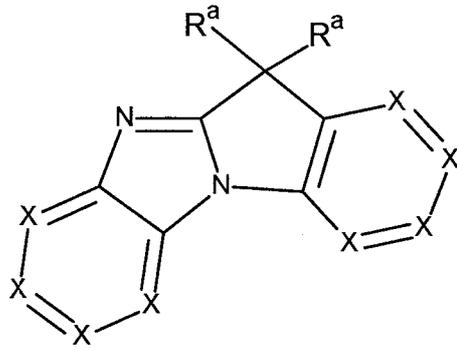


式 (I)

【發明申請專利範圍】

【第1項】

一種化合物，其包含至少一式(I)之結構：



式 (I)

其中，所使用之符號如下：

X 於各情況下係相同或不同，且為 N 或 CR，較佳為 CR；

R^a 於各情況下係相同或不同，且為 H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar^a)₂、N(R)₂、C(=O)Ar^a、C(=O)R²、P(=O)(Ar^a)₂、P(Ar^a)₂、B(Ar^a)₂、B(OR)₂、Si(Ar^a)₃、Si(R)₃、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基，其各可經一或多個 R 基取代，其中一或多個非相鄰 CH₂ 基團可經 -RC=CR-、-C≡C-、Si(R)₂、Ge(R)₂、Sn(R)₂、C=O、C=S、-O-、-Se-、-S-、C=Se、-C(=O)O-、-C(=O)NR-、C=NR、NR、P(=O)(R)、SO 或 SO₂ 置換，以及其中一或多個氫原子

可經 D、F、Cl、Br、I、CN 或 NO₂ 置換，或為各可經一或多個 R 基取代之具有 5 至 60 個芳族環原子的芳族或雜芳族環系統、或具有 5 至 60 個芳族環原子及可經一或多個 R 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 60 個芳族環原子及可經一或多個 R 基取代之芳烷基或雜芳烷基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^a 基可與彼此或與 R 基形成環系統；

Ar^a 於各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個非芳族 R 基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至相同矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個 Ar^a 基亦可能經由單鍵之橋接 (bridge) 或選自下列之橋接而接合在一起：B(R)、C(R)₂、Si(R)₂、C=O、C=NR、C=C(R)₂、O、S、Se、S=O、SO₂、N(R)、P(R) 及 P(=O)R；

R 於各情況下係相同或不同，且為 H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar)₂、N(R¹)₂、C(=O)Ar、C(=O)R¹、P(=O)(Ar)₂、P(Ar)₂、B(Ar)₂、B(OR¹)₂、Si(Ar)₃、Si(R¹)₃、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基，其各可經一或多個 R² 基取代，其中一或多個非相鄰 CH₂ 基團可經 -R¹C=CR¹-、-C≡C-、Si(R¹)₂、Ge(R¹)₂、Sn(R¹)₂、C=O、C=S、C=Se、-C(=O)O-、-C(=O)NR¹-、C=NR¹、NR¹、P(=O)(R¹)、-O-、-S-、

-Se-、SO或SO₂置換，以及其中一或多個氫原子可經D、F、Cl、Br、I、CN或NO₂置換，或為各可經一或多個R¹基取代之具有5至60個芳族環原子的芳族或雜芳族環系統、或具有5至60個芳族環原子及可經一或多個R¹基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有5至60個芳族環原子及可經一或多個R¹基取代之芳烷基或雜芳烷基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之R¹基可與彼此形成環系統；

Ar 於各情況下係相同或不同，且為具有5至30個芳族環原子及可經一或多個非芳族R¹基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至相同矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個Ar基亦可能經由單鍵之橋接或選自下列之橋接而接合在一起：B(R¹)、C(R¹)₂、Si(R¹)₂、C=O、C=NR¹、C=C(R¹)₂、O、S、Se、S=O、SO₂、N(R¹)、P(R¹)及P(=O)R¹；

R¹ 於各情況下係相同或不同，且為H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar¹)₂、N(R²)₂、C(=O)Ar¹、C(=O)R²、P(=O)(Ar¹)₂、P(Ar¹)₂、B(Ar¹)₂、B(OR²)₂、Si(Ar¹)₃、Si(R²)₃、具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有2至40個碳原子之烯基或炔基，其各可經一或多個R²基取代，其中一或多個非相鄰CH₂基團可經-R²C=CR²-、-C≡C-、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、

$C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^2-$ 、 NR^2 、 $P(=O)(R^2)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 SO 或 SO_2 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換，或為具有 5 至 40 個芳族環原子及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、或具有 5 至 40 個芳族環原子及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 40 個芳族環原子及可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^1 基可與彼此形成環系統；

Ar^1 於各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個非芳族 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至相同矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個 Ar^1 基亦可能經由單鍵之橋接或選自下列之橋接而接合在一起： $B(R^2)$ 、 $C(R^2)_2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^2$ 、 $C=C(R^2)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^2)$ 、 $P(R^2)$ 及 $P(=O)R^2$ ；

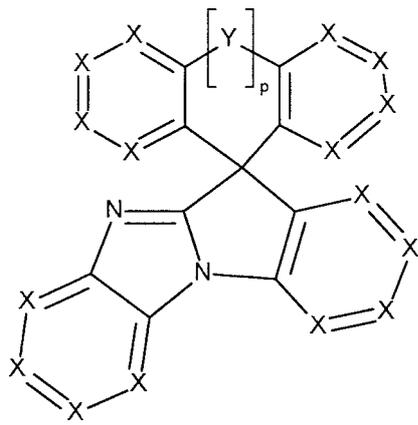
R^2 於各情況下係相同或不同，且為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 $B(OR^3)_2$ 、 NO_2 、 $C(=O)R^3$ 、 $CR^3=C(R^3)_2$ 、 $C(=O)OR^3$ 、 $C(=O)N(R^3)_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $P(R^3)_2$ 、 $B(R^3)_2$ 、 $N(R^3)_2$ 、 NO_2 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 OSO_2R^3 、 OR^3 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其各可經一或多個 R^3

基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^3$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^3-$ 、 NR^3 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{Se}-$ 、 SO 或 SO_2 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換，或為具有 5 至 40 個芳族環原子及於各情況下可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統、或具有 5 至 40 個芳族環原子及可經一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或該等系統之組合；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^2 取代基亦可與彼此形成環系統；

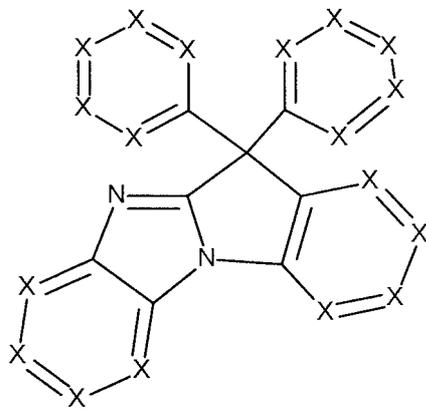
R^3 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 CN ，具有 1 至 20 個碳原子之脂族烴基，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 或 CN 置換及其可經一或多個各具有 1 至 4 個碳原子之烷基取代的具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統；同時，二或更多個較佳係相鄰之 R^3 取代基可與彼此形成環系統。

【第 2 項】

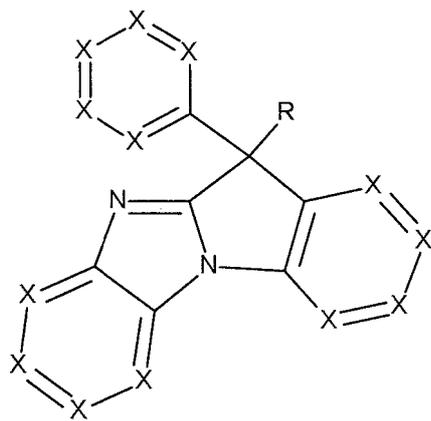
如申請專利範圍第 1 項之化合物，其包含至少一式 (IIa)、(IIb)、(IIc) 或 (IId) 之結構



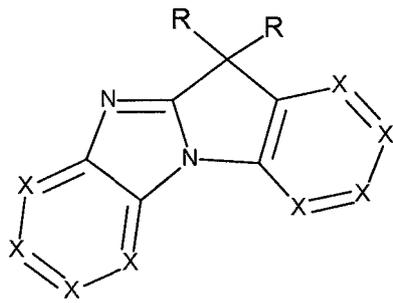
式 (IIa)



式 (IIb)



式 (IIc)

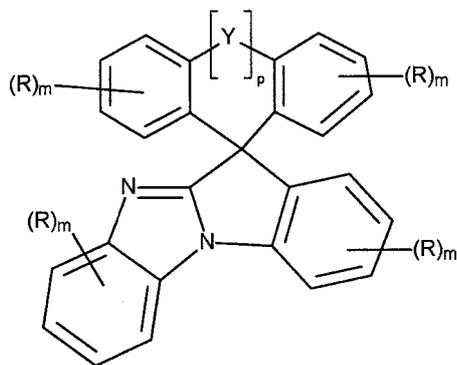


式 (IIId)

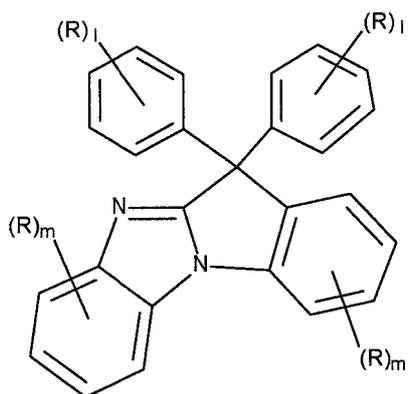
其中，符號 R 及 X 具有如申請專利範圍第 1 項中所提供之定義，p 為 0 或 1 以及 Y 為 B(R)、C(R)₂、Si(R)₂、C=O、C=NR、C=C(R)₂、O、S、Se、S=O、SO₂、N(R)、P(R) 及 P(=O)R，較佳為 B(R)、C(R)₂、Si(R)₂、O、S、Se、S=O、SO₂、N(R)、P(R) 及 P(=O)R。

【第 3 項】

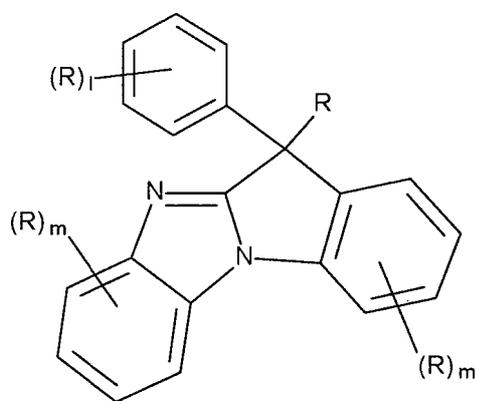
如申請專利範圍第 1 項之化合物，其包含至少一式 (IIIa)、(IIIb)、(IIIc) 或 (IIId) 之結構



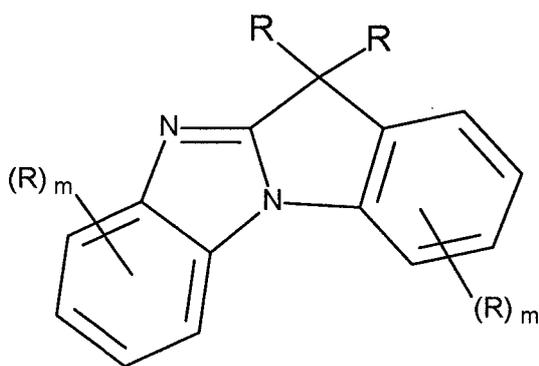
式 (IIIa)



式 (IIIb)



式 (IIIc)



式 (IIIId)

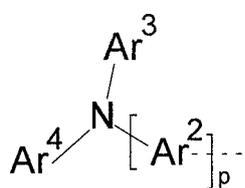
其中，符號 **R** 具有如申請專利範圍第 1 項中所提供之定義，符號 **Y** 及 **p** 具有如申請專利範圍第 4 項中所提供之定義，**l** 為 1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2，以及 **m** 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0、1 或 2。

【第4項】

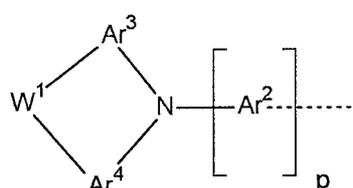
如申請專利範圍第1項之化合物，其中，該化合物包含電洞傳輸基團，其中較佳係 R^a 基中之一者或 R 基中之一者包含且較佳為電洞傳輸基團。

【第5項】

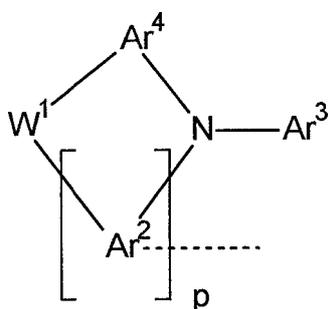
如申請專利範圍第4項之化合物，其中，該電洞傳輸基團包含基團且較佳為選自式(H-1)至(H-3)之基團



式 (H-1)



式 (H-2)



式 (H-3)

其中，虛線鍵標記附接位置，以及

Ar^2 、 Ar^3 、 Ar^4 各自獨立地為具有6至40個碳原子之芳族環系統或具有3至40個碳原子之雜芳族環系統，其各可經一或多個 R^1 基取代；

p 為0或1，以及

W^1 為 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $N-Ar^1$ 、 BR^1 、 PR^1 、 POR^1 、 SO 、 SO_2 、 Se 、 O 或 S ，較佳為 $C(R^1)_2$ 、 $N-Ar^1$ 、 O 或

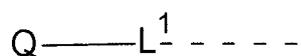
S，其中，符號 Ar^1 及 R^1 具有如申請專利範圍第1項中所提供之定義，其中較佳係排除存在 N-N 鍵，因此於該情況下 $\text{Y}=\text{NR}$ 或 NAr ，下標 $p=1$ 。

【第6項】

如申請專利範圍第1項之化合物，其中，該化合物包含電子傳輸基團，其中較佳係 R^a 基中之一者或 R 基中之一者包含且較佳為電子傳輸基團。

【第7項】

如申請專利範圍第6項之化合物，其中， R^a 基中之一者或 R 基中之一者包含且較佳為可以式 (QL) 表示之電洞傳輸基團



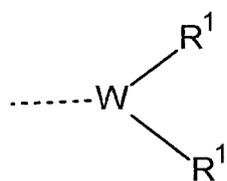
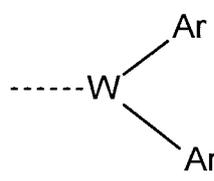
式 (QL)

其中， L^1 表示鍵或者具有 5 至 40 個、較佳為 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統，以及 Q 為電子傳輸基團，其中 R^1 具有如申請專利範圍第1項中所提供之定義。

【第8項】

如申請專利範圍第1至3項中任一項之化合物，其中，式 (I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc) 或 (IIId) 中至少一個 R^a 或 R 基為可以式 $\text{L}^1\text{-Z}$ 表示之基團，其中， L^1 表示鍵或者具有 5 至 40 個、較佳為 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統， Z 為

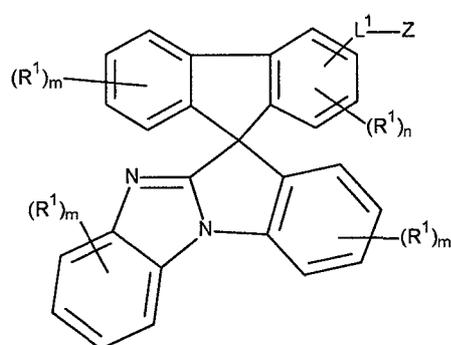
R^1 、Ar或式 Z^a 或 Z^b 之基團，其中符號Ar及 R^1 具有如申請專利範圍第1項中所提供之定義，以及 Z^a 或 Z^b 為

式 Z^a 式 Z^b

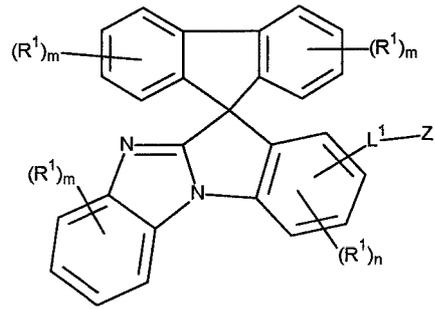
其中，W於各情況下係相同或不同，且為具有5至30個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統、氮原子、硼原子、磷原子或氧化磷基團(phosphine oxide group)，虛線鍵標記附接位置，以及符號Ar及 R^1 具有如申請專利範圍第1項中所提供之定義。

【第9項】

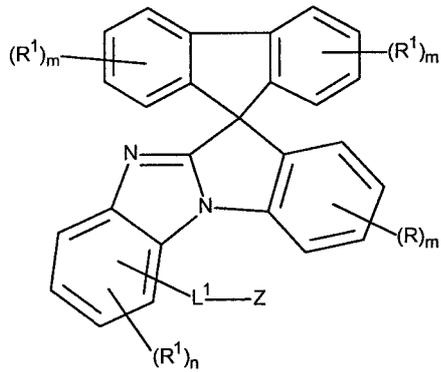
如申請專利範圍第8項之化合物，其包含至少一式(IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe)、(IVf)、(IVg)、(IVh)、(IVi)、(IVj)、(IVk)、(IVl)、(IVm)、(IVn)、(IVo)、(IVp)、(IVq)、(IVr)、(IVs)、(IVt)、(IVu)、(IVv)、(IVw)、(IVx)或(IVy)之結構



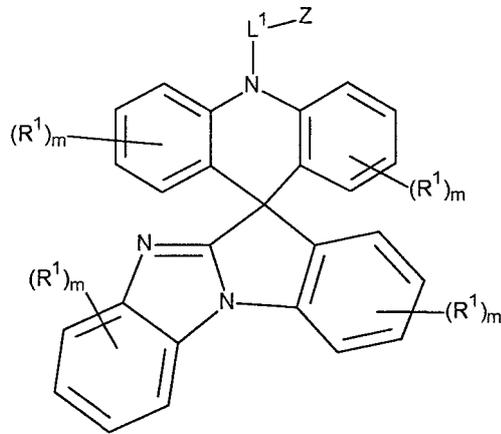
式 (IVa)



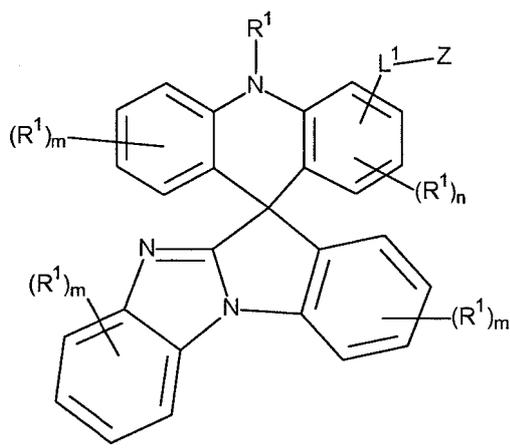
式 (IVb)



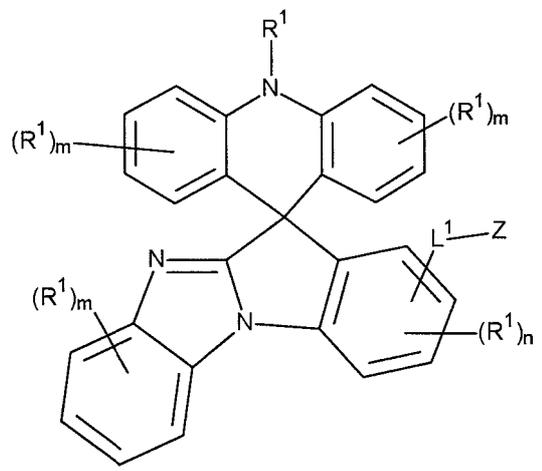
式 (IVc)



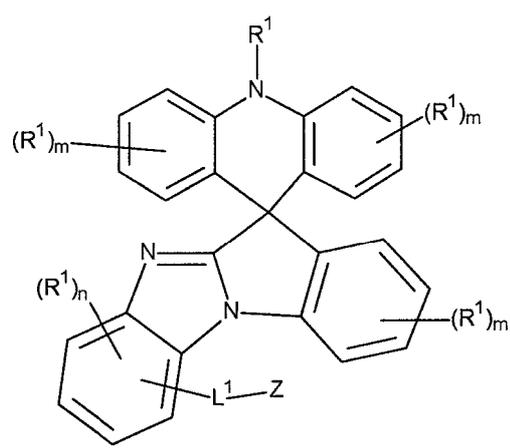
式 (IVd)



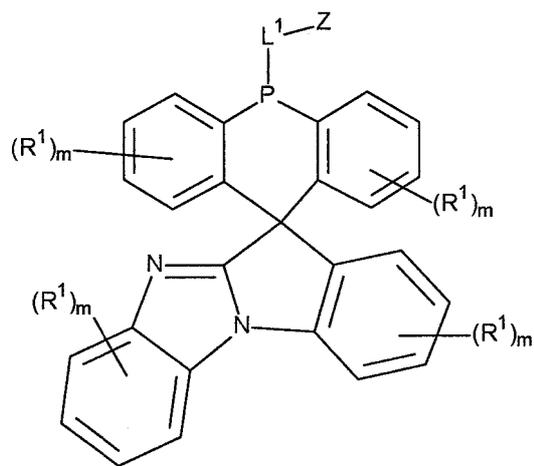
式 (IVe)



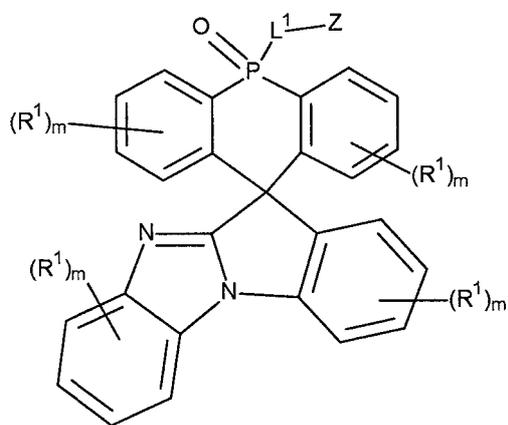
式 (IVf)



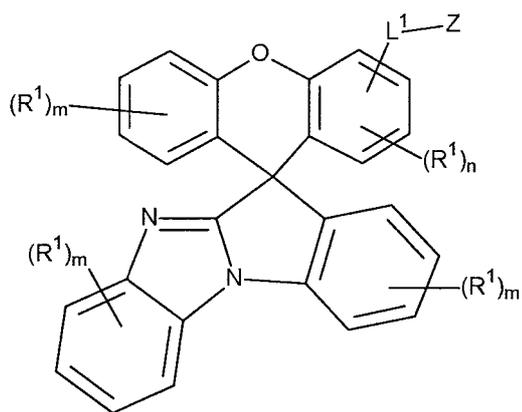
式 (IVg)



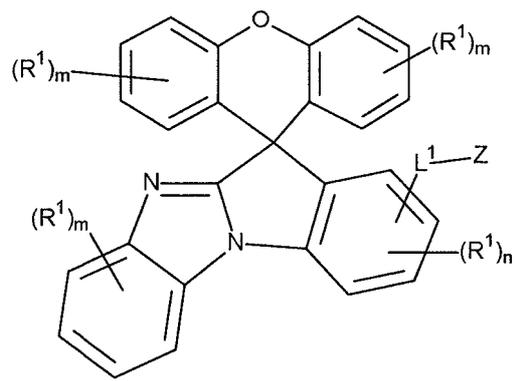
式 (IVh)



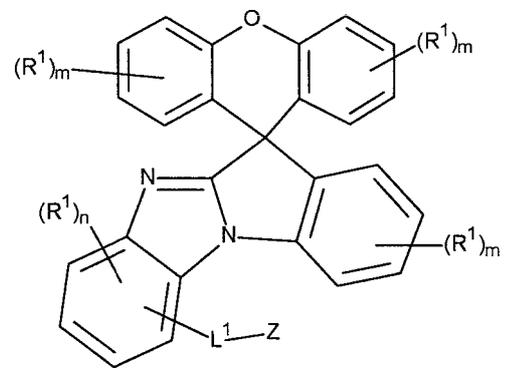
式 (IVi)



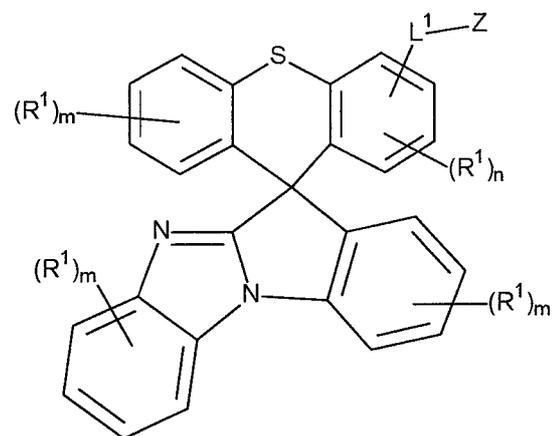
式 (IVj)



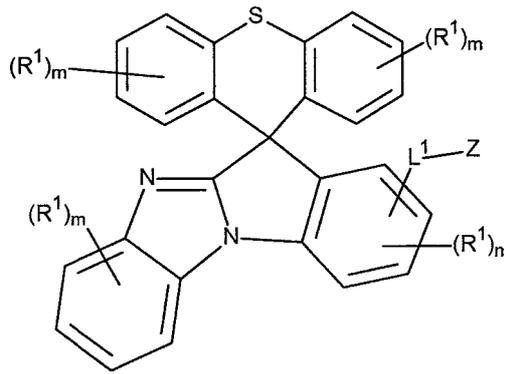
式 (IVk)



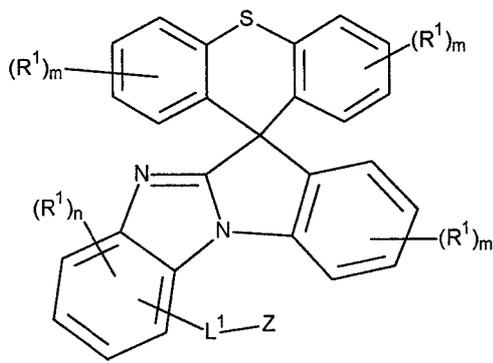
式 (IVl)



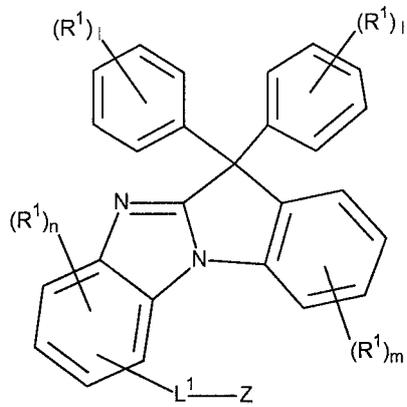
式 (IVm)



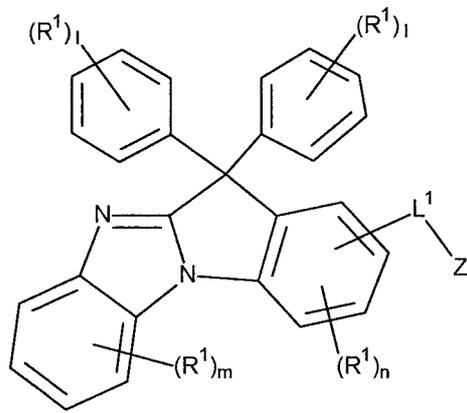
式 (IVn)



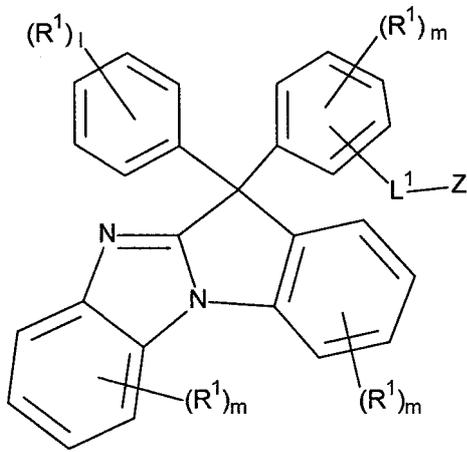
式 (IVo)



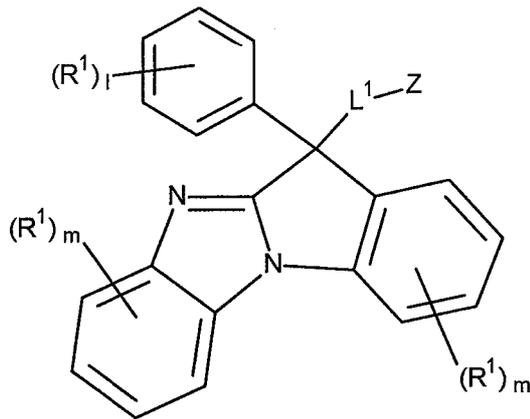
式 (IVp)



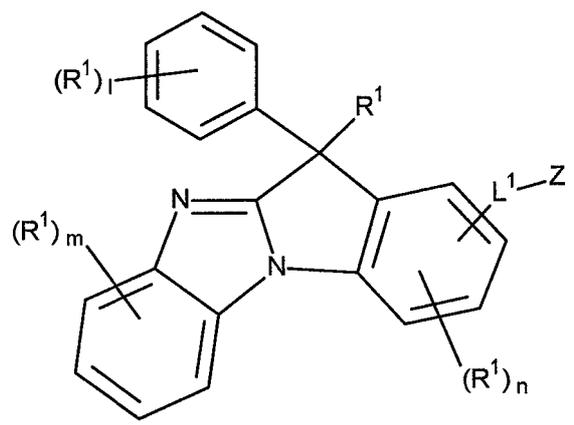
式 (IVq)



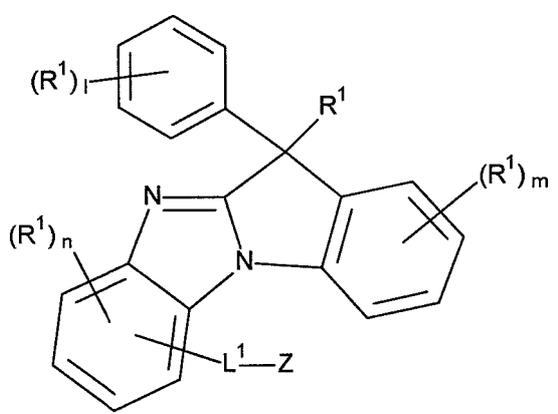
式 (IVr)



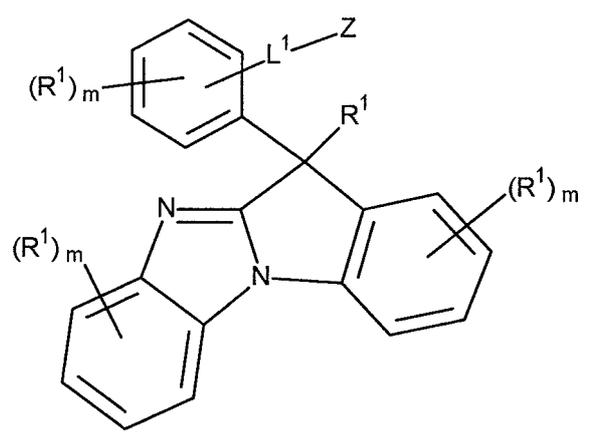
式 (IVs)



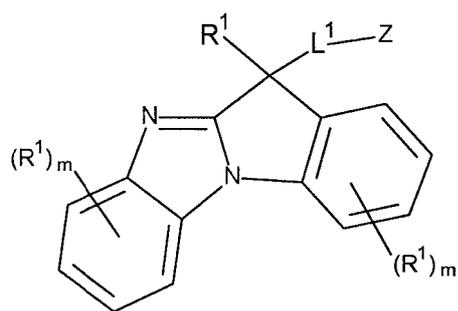
式 (IVt)



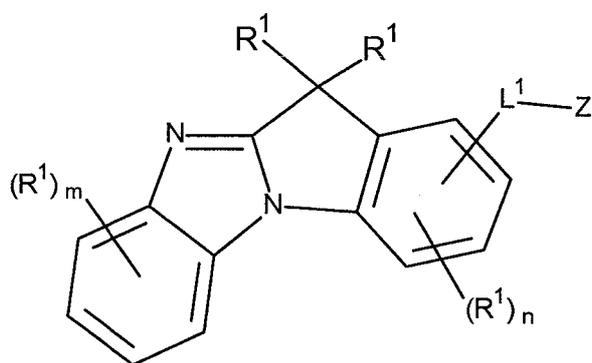
式 (IVu)



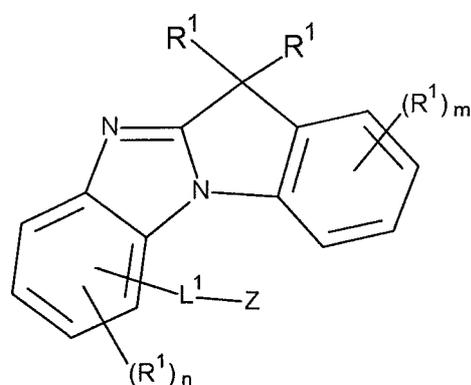
式 (IVv)



式 (IVw)



式 (IVx)

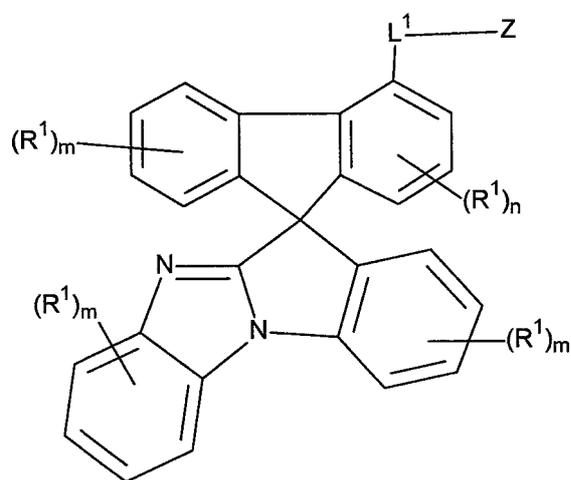


式 (IVy)

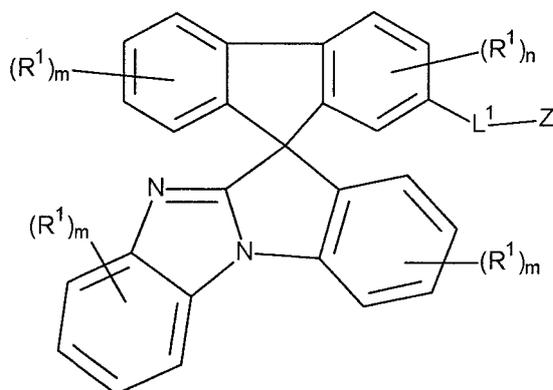
其中，符號 R^1 具有如申請專利範圍第 1 項中所提供之定義，符號 L^1 及 Z 具有如申請專利範圍第 8 項中所提供之定義， l 為 1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2， m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0、1 或 2，以及 n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，更佳為 0 或 1。

【第10項】

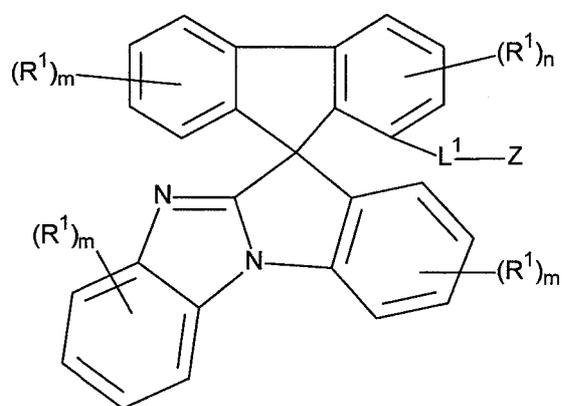
如申請專利範圍第8項之化合物，其包含至少一式 (Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)、(Vf)、(Vg)或(Vh)之結構



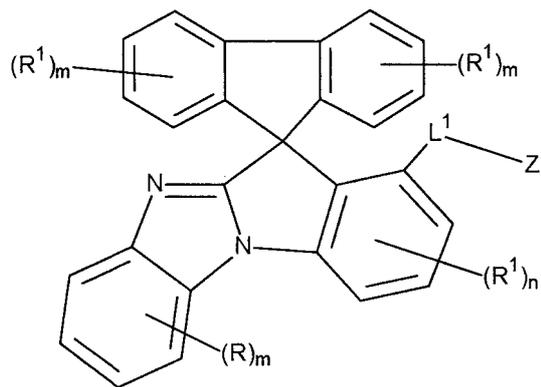
式 (Va)



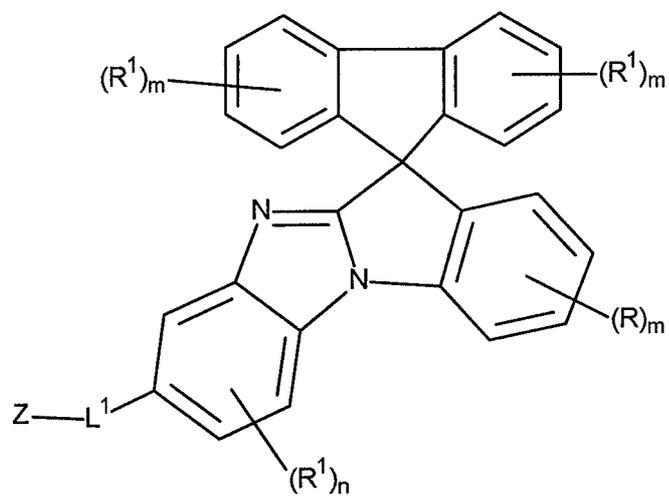
式 (Vb)



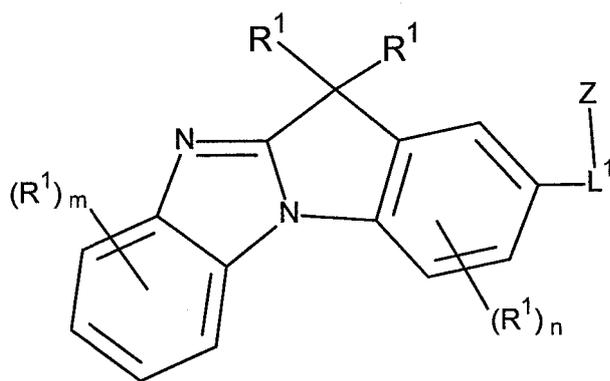
式 (Vc)



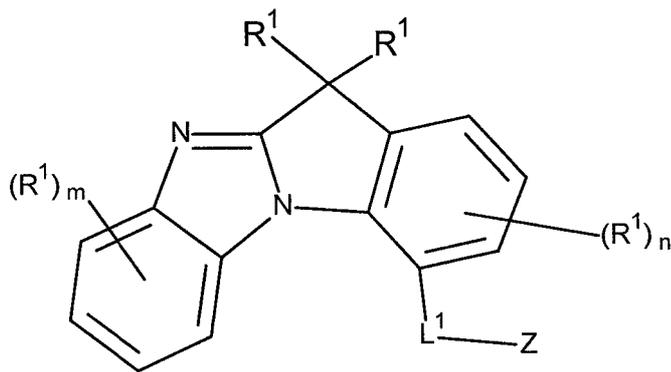
式 (Vd)



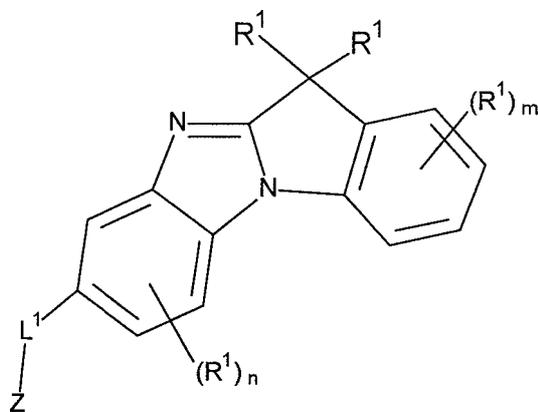
式 (Ve)



式 (Vf)



式 (Vg)

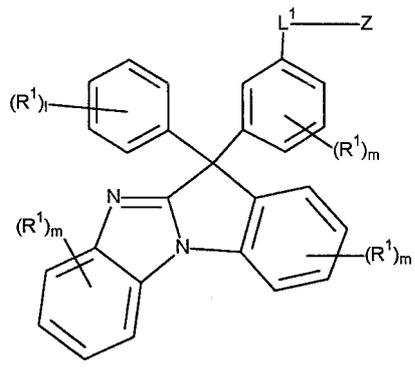


式 (Vh)

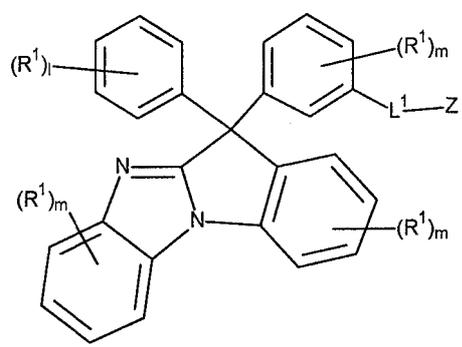
其中，符號 R^1 具有如申請專利範圍第 1 項中所提供之定義，符號 L^1 及 Z 具有如申請專利範圍第 8 項中所提供之定義， m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0、1 或 2，以及 n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，更佳為 0 或 1。

【第 11 項】

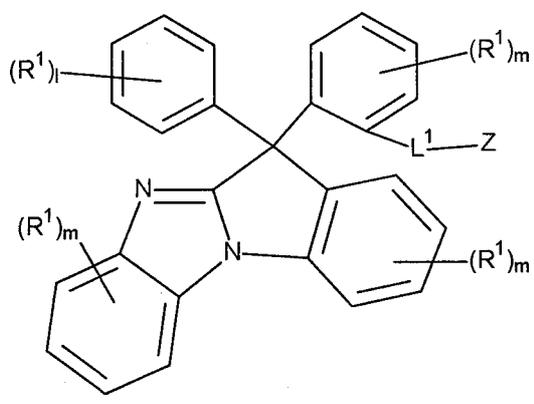
如申請專利範圍第 8 項之化合物，其包含至少一式 (VIa)、(VIb)、(VIc)、(VI d)、(VIe)、(VI f)、(VI g)、(VI h)、(VI i)、(VI j)、(VI k)、(VI l)、(VI m)、(VI n)、(VI o)、(VI p)、(VI q)、(VI r)、(VI s) 或 (VI t) 之結構



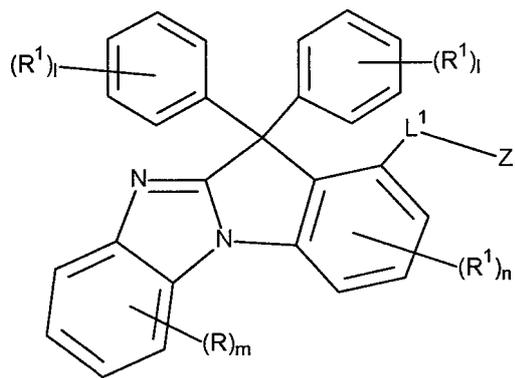
式 (VIa)



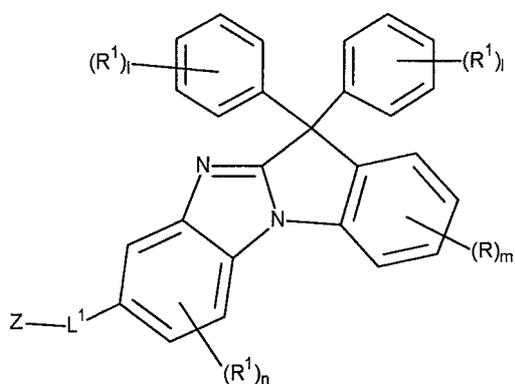
式 (VIb)



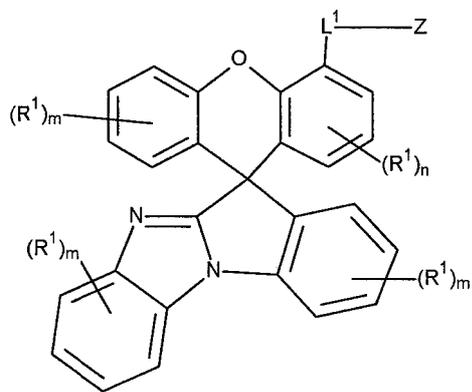
式 (VIc)



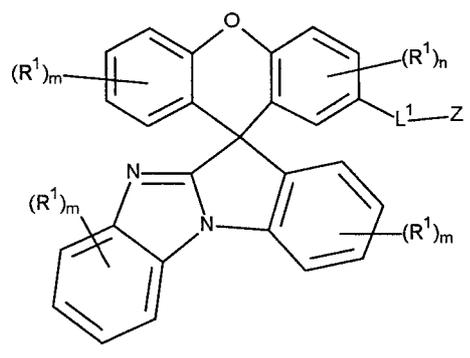
式 (VI d)



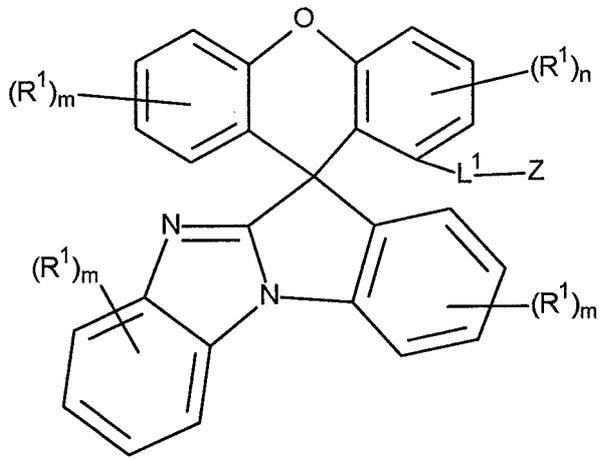
式 (VI e)



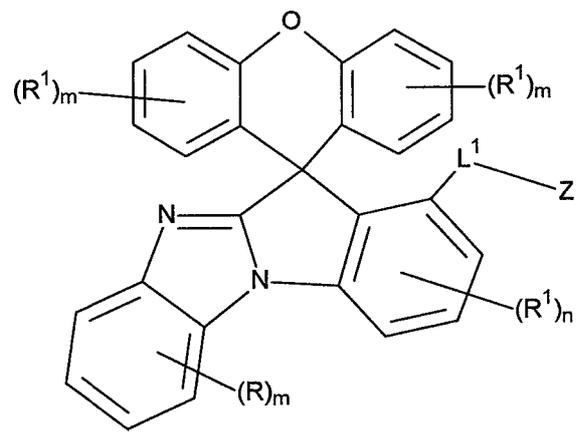
式 (VI f)



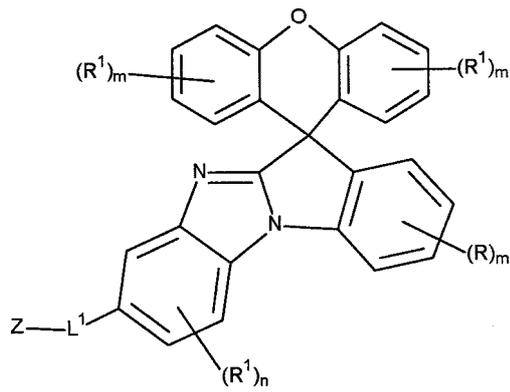
式 (VIg)



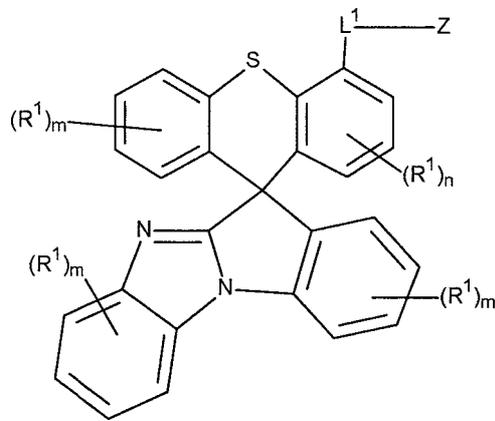
式 (VIh)



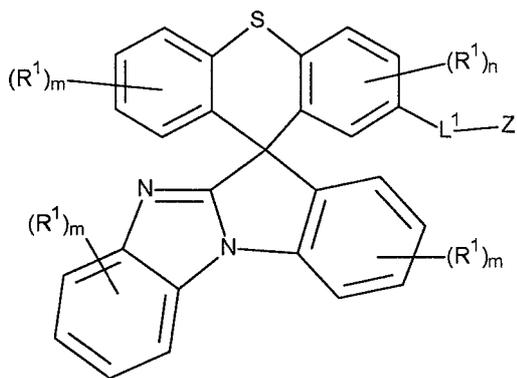
式 (VIi)



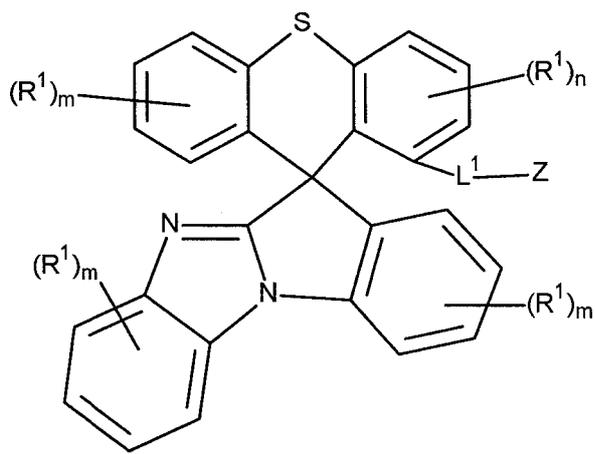
式 (VIj)



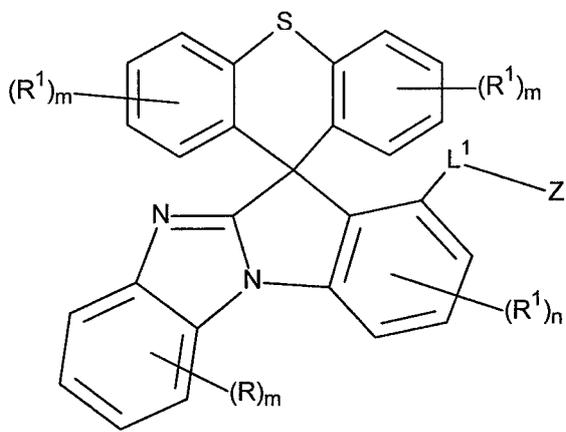
式 (VIk)



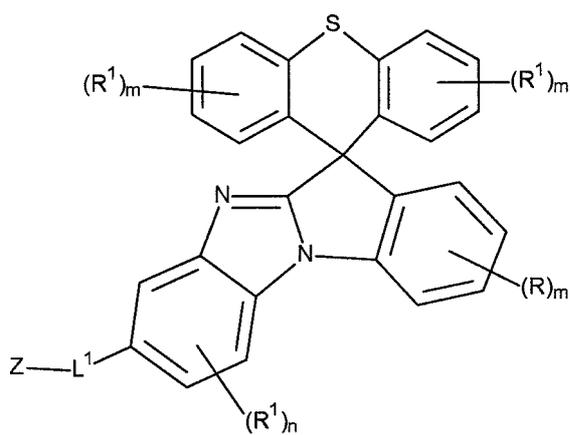
式 (VII)



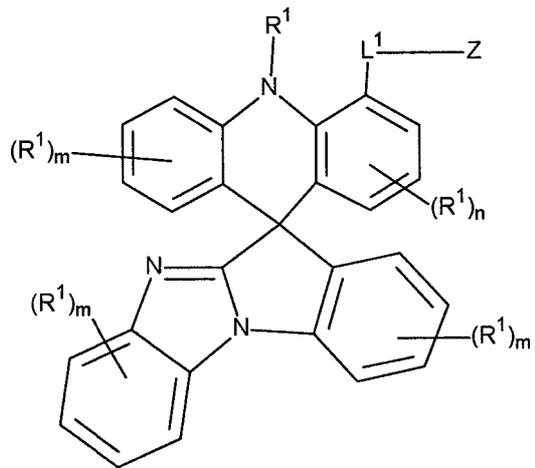
式 (VI m)



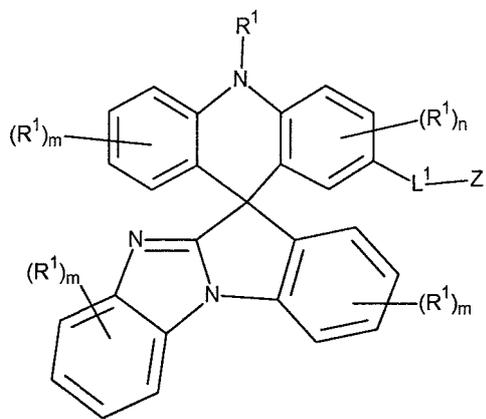
式 (VI n)



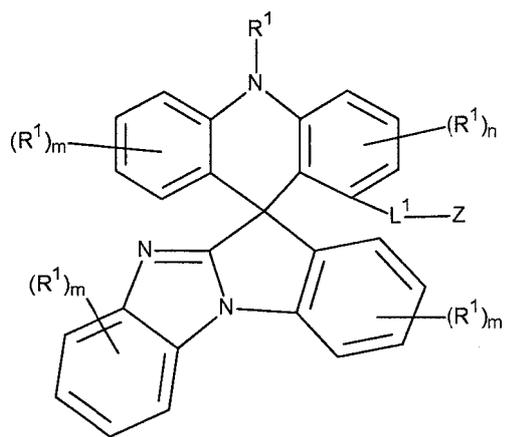
式 (VI o)



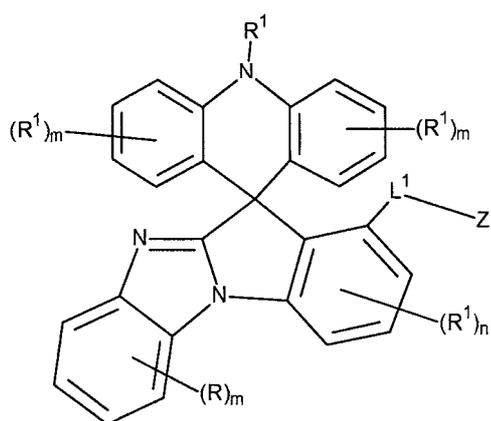
式 (VIp)



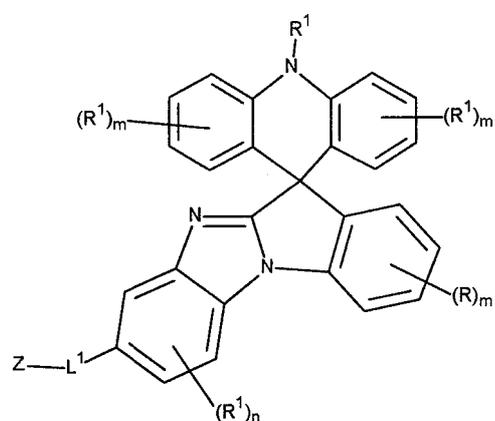
式 (VIq)



式 (VIr)



式 (VI s)



式 (VI t)

其中，符號 R^1 具有如申請專利範圍第 1 項中所提供之定義，符號 L^1 及 Z 具有如申請專利範圍第 8 項中所提供之定義， l 為 1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2， m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0、1 或 2，以及 n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，更佳為 0 或 1。

【第 12 項】

一種寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物(dendrimer)，其含有一或更多如申請專利範圍第 1 至 11 項中任一項之化合物，其中，存在一或多個該化合物至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物之鍵而非氫原子或取代基。

【第13項】

一種組成物，其包含至少一如申請專利範圍第1至11項中之一或多項的化合物或如申請專利範圍第12項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物以及至少一選自由下列所組成之群組的另外的化合物：螢光發射體、磷光發射體、多牙發射體 (polypodal emitter)、展現TADF (熱活化延遲螢光) 之發射體、主體材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞傳輸材料、電洞注入材料、電子阻擋材料以及電洞阻擋材料。

【第14項】

一種調配物，其包含至少一如申請專利範圍第1至11項中之一或多項的化合物或如申請專利範圍第12項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或如申請專利範圍第13項之組成物以及至少一種溶劑。

【第15項】

一種如申請專利範圍第1至11項中之一或多項的化合物、或如申請專利範圍第12項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或如申請專利範圍第13項之組成物之用途，係用於電子裝置中作為主體材料、電洞傳輸材料或電子傳輸材料。

【第16項】

一種製備如申請專利範圍第1至11項中之一或多項的化合物或如申請專利範圍第12項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物的方法，其特徵在於，在偶合反應中，包含至少

一個含氮雜環基團之化合物係接合至包含至少一個芳族或雜芳族基團之化合物。

【第17項】

一種電子裝置，其包含至少一如申請專利範圍第1至11項中之一或多項的化合物、如申請專利範圍第12項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或如申請專利範圍第13項之組成物，其中，該電子裝置較佳係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置、有機積體電路、有機場效電晶體、有機薄膜電晶體、有機發光電晶體、有機太陽能電池、有機光學偵測器、有機感光器、有機場淬滅裝置 (organic field-quench device)、發光電化學電池 (light-emitting electrochemical cell) 以及有機雷射二極體。