



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I469967 B

(45) 公告日：中華民國 104 (2015) 年 01 月 21 日

- (21) 申請案號：099116847 (22) 申請日：中華民國 99 (2010) 年 05 月 26 日
- (51) Int. Cl. : C07D209/86 (2006.01) C07D209/88 (2006.01)
 C07D401/14 (2006.01) C07D403/04 (2006.01)
 C07D403/14 (2006.01) C07D405/14 (2006.01)
 C07D471/04 (2006.01) C07D487/04 (2006.01)
 C07D491/04 (2006.01) C07D495/04 (2006.01)
 C09K11/06 (2006.01) H01L51/50 (2006.01)
- (30) 優先權：2009/05/29 德國 102009023155.2
- (71) 申請人：麥克專利有限公司 (德國) MERCK PATENT GMBH (DE)
 德國
- (72) 發明人：普夫路姆 克里斯多夫 PFLUMM, CHRISTOF (DE)；布辛 雅恩 BUESING, ARNE (DE)；帕姆 安瑪 PARHAM, AMIR HOSSAIN (DE)；穆吉卡佛南 泰瑞莎 MUJICA-FERNAUD, TERESA (ES)；海爾 荷葛 HEIL, HOLGER (DE)；史托希爾 菲利普 STOESSEL, PHILIPP (DE)
- (74) 代理人：林志剛
- (56) 參考文獻：
 TW 200734340A
 T. Janosik et al., "Reactions of 2,3'-biindolyl: Synthesis of indolo[3,2-a]carbazoles", Tetrahedron, vol. 55, 1999, p.2371-2380.
- 審查人員：彭瓊嬋
- 申請專利範圍項數：17 項 圖式數：0 共 200 頁

(54) 名稱

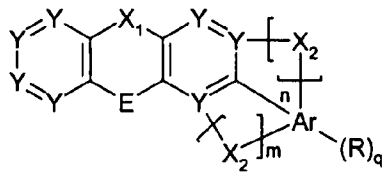
有機電發光裝置用的材料

MATERIALS FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICES

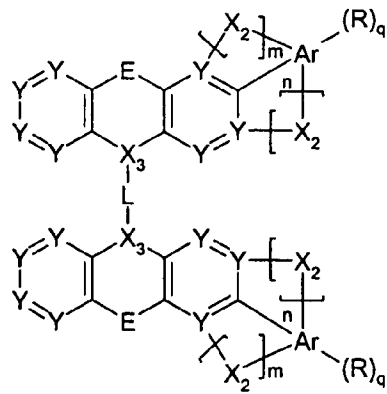
(57) 摘要

本發明敘述具有電子-及電洞-傳輸性質之茛並吡啶衍生物，特別用於有機電發光裝置的發光層及/或電荷傳輸層或者用做為基質材料。本發明另外關於一種用於製備根據本發明的化合物之方法及包含該化合物之電子裝置。

The present invention describes indenocarbazole derivatives having electron-and hole-transporting properties, in particular for use in the emission and/or charge-transport layer of electroluminescent devices or as matrix material. The invention furthermore relates to a process for the preparation of the compounds according to the invention and to electronic devices comprising same.



式 (1)



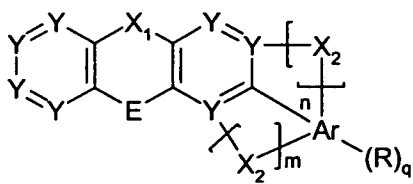
式 (1')

四、指定代表圖：

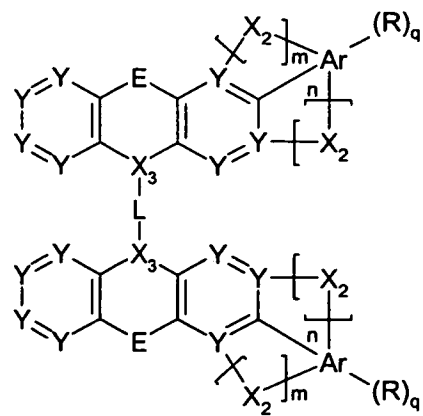
(一)、本案指定代表圖為：無

(二)、本代表圖之元件符號簡單說明：無

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：式 I、I'



式 (1)



式 (1')

六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明敘述具有電子-及電洞-傳輸性質之茚並呔啞衍生物，特別用於有機電發光裝置的發光層及／或電荷傳輸層或者用做為基質材料。本發明另外關於一種用於製備根據本發明的化合物之方法及包含該化合物之電子裝置。

【先前技術】

有機電發光裝置之一般結構敘述於例如 US 4539507、US 5151629、EP 0676461 及 WO 98/27136 中。然而，該等裝置仍有改進的需要：

1. 應改進在螢光亦及磷光 OLED 情況中的效率。
2. 操作壽命仍時常比較短，特別在發藍光的情況中，所以在此有進一步的改進需求。
3. 應減低在螢光及磷光 OLED 二者情況中的操作電壓，其造成功率效率的改進。這具有主要的重要性，特別對行動應用。
4. 在依照先前技藝的電洞傳輸材料中，電壓係取決於電洞傳輸層的厚度。實際上，可能時常希望較厚的電洞傳輸層，俾以改進光學耦合輸出及產出率。然而，由於相關的電壓增加而使此改進常不可能以依照先前技藝的材料達成。因此在此仍持續有改進的需求。

亦特別在電發磷光裝置的情況中，仍希望對上述性質

的改進。特別對發磷光體用的基質材料有改進的需求，該改進同時造成高效率、長壽命及低操作電壓。基質材料的性質特別常限制有機電發光裝置的壽命及效率。

依照先前技藝，咪唑衍生物（例如，雙（咪唑基）聯苯）常被用做為發磷光體的基質材料。在此仍有改進的需求，特別關於材料的壽命及玻璃轉換溫度。

此外，酮（WO 2004/093207）、氧化磷及砷（WO 2005/003253）被用做為發磷光體的基質材料。特別以酮達成低操作電壓及長壽命。不過在此仍有改進的要求，特別關於效率及與含有酮基酮根（ketoketone）配位基（例如，乙醯丙酮根）之金屬錯合物的相容性。

此外，金屬錯合物（例如， $BAlq_3$ 或雙[2-（2-苯並噻唑基）苯酚]鋅（II））被用做為發磷光體的基質材料。在此仍有改進的需求，特別關於操作電壓及化學穩定性。純有機化合物常比該等金屬錯合物更穩定。因此，一些該等金屬錯合物對水解敏感，其造成錯合物更難處理。

特別在發磷光體用的基質材料的情況中仍有改進的需求，該改進同時造成高效率、長壽命及低操作電壓且亦與攜帶酮基酮根配位基的發磷光體可相容。

在電子傳輸材料的情況中同樣亦仍希望改進性質，因為電子傳輸材料的性質亦確實對有機電發裝置的上述性質發揮顯著影響力。特別在電子傳輸材料的情況中有改進的需求，該改進同時造成高效率、長壽命及低操作電壓。電子傳輸材料的性質亦確實常限制有機電發光裝置的壽命、

效率及操作電壓。

在此可能希望具有效的電子傳輸材料，其造成更好的電子注射至發光層中，因為富含電子之發光層造成更高的效率。另外，更好的注射能減低操作電壓。因此就此目的需要進一步的電子傳輸材料的改進。

長期以來已知使用 AlQ_3 做為電子導體的電發光裝置且已早在 1993 年敘述於 US 4,539,507 中。從此 AlQ_3 常被用做為電子傳輸材料，但是其具有許多缺點：其不可以蒸氣沉積而沒有殘餘物，因為其在昇華溫度下部分分解，其出現大的問題，特別對製造工廠而言。此具有蒸氣沉積來源必須固定清潔或更換的結果。此外， AlQ_3 的分解產物進入 OLED 中，在此促成壽命縮短且量子及功率效率減低。 AlQ_3 另外具有低的電子移動性，其造成高電壓且因此較低的功率效率。為了避免在顯示器中短路，故希望增加層厚度，不可能使用 AlQ_3 ，由於低的電荷載體移動性及所得電壓增加。其他的電子導體的電荷載體移動性（US 4,539,507）同樣太低，為了藉此增進更厚的層，該 OLED 的壽命甚至比使用 AlQ_3 時更差。由於再吸收及弱的再發射可造成色移，亦證實不利於 AlQ_3 的固有色彩（在固體中的黃色），特別在藍光 OLED 的情況中。在此僅可製造具相當效率及色彩位置缺陷的藍光 OLED。因此，持續對有機電發光裝置中造成高效率且同時長壽命的電子傳輸材料有要求。

由於好的電洞移動性，茚並萘胺被用做為電荷傳輸材

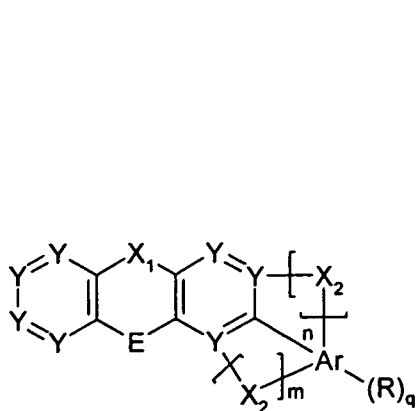
料及電荷注射材料。EP 1860097、WO 2006/100896、DE 102006025846、WO 2006/122630 及 WO 2008/006449 揭示用於電子裝置的茚並芘二胺。其中引述在用做為電洞傳輸材料時好的壽命，但是仍對減低操作電壓有需求，俾以達成更好的功率效率，尤其在發藍光的情況中。

【發明內容】

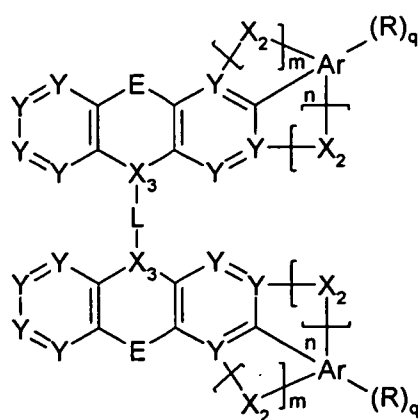
本發明的目的因此在於提供此等化合物。

驚訝地發現包含下列式 (1) 之茚並芘啞衍生物及相關化合物的電子發光裝置具有超越先前技藝的顯著改進，特別在用做為磷光摻雜劑的基質材料時，但是亦取決於在用做為電子傳輸或電洞傳輸化合物時的取代作用。

就此目的，本發明提供通式 (1) 或通式 (1') 化合物：



式 (1)



式 (1')

其中下列者適用於所使用的符號及下標：

Y 為 C (假設 X₂ 基團與 Y 基團鍵結) 或在各次出現係相同或不同地為 CR 或 N (假設沒有 X₂ 基團與 Y 基

團鍵結) ；

- E 在各次出現係相同或不同地為共價單鍵或選自 $N(R^1)$ 、 $B(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、 O 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $P(R^1)$ 及 $P(=O)R^1$ 之二價橋；
- X_1 在各次出現係相同或不同地為選自 $N(R^1)$ 、 $B(R^1)$ 、 O 、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $P(R^1)$ 及 $P(=O)R^1$ 之二價橋；
- X_2 在各次出現係相同或不同地為選自 $N(R^1)$ 、 $B(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 CR^1-CR^1 、 $P(R^1)$ 及 $P(=O)R^1$ 之二價橋；
- X_3 在各次出現係相同或不同地為選自 N 、 B 、 $C(R^1)$ 、 $Si(R^1)$ 、 P 及 $P(=O)$ 之二價橋；
- L 為具有 5 至 40 個芳族環原子之二價芳族或雜芳族環系統，其可被一或多個 R^1 基取代；
- Ar 在各次出現係相同或不同地為具有 5 至 40 個環原子之芳族或雜芳族環系統，較佳為芳基或雜芳基，其可被一或多個 R^1 基團取代；
- n, m 在各次出現係相同或不同地為 0 或 1，其先決條件為 $n+m=1$ 或 2；
- q 為 1、2、3、4、5 或 6；
- R 在各次出現係相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $N(Ar)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $P(=O)Ar_2$ 、 $S(=O)Ar$ 、 $S(=O)_2Ar$ 、 $CR^2=CR^2Ar$ 、 CN 、 NO_2 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 OSO_2R^2 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基

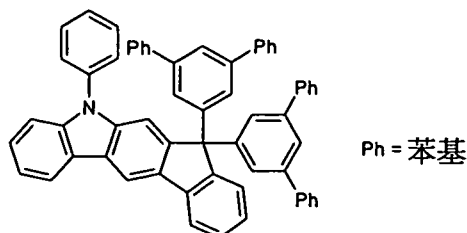
或硫烷基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷基或硫烷基（每個該等基團可被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個不相鄰的 CH_2 基團可被 $R^2C=CR^2$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 或 $CONR^2$ 置換，且其中一或多個 H 原子可被 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換）、或具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳氧基或雜芳氧基（其可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基（其可被一或多個 R^2 基取代）或該等系統之組合；二或多個與彼等鍵結之原子一起的取代基 R 在此亦可互相或與 Ar （假設該等取代基係與 Ar 鍵結）形成單-或多環脂肪族或芳族環系統；

R^1 在各次出現係相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 CF_3 、 $B(OR^2)_2$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷基或硫烷基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷基或硫烷基或具有 2 至 40 個 C 原子之烯基或炔基（每個該等基團可被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個不相鄰的 CH_2 基團可被 $-R^2C=CR^2-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $Si(R^2)_2$ 、

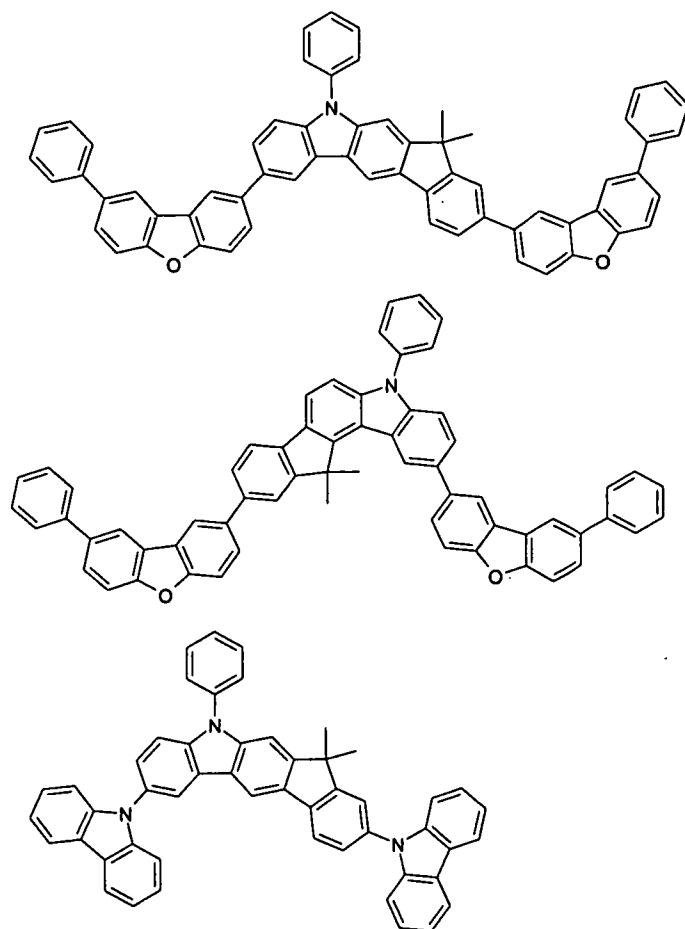
$\text{Ge}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{CONR}^2-$ 置換，且其中一或多個 H 原子可被 F、Cl、Br、I、CN 或 NO_2 置換）、或芳基胺、或經取代或未經取代之咪唑（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基（其可被一或多個芳族、雜芳族或非芳族 R^2 基取代）、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統（其可被一或多個非芳族 R^2 基取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳氧基或雜芳氧基（其可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基（其可被一或多個 R^2 基取代）或該等系統之組合；二或多個取代基 R^1 在此亦可互相或與彼等鍵結之原子一起形成單-或多環脂肪族或芳族環系統；

R^2 在各次出現係相同或不同地為 H、D 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂肪族烴基、或具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基或該等基團之組合；

在此排除其中 $\text{X}_1=\text{X}_2=\text{N}(\text{R}^1)$ ，且同時 E 代表共價單鍵及 Y 代表 CR 或 C 之結構；本發明另外排除下列化合物：



較佳地從本發明另外排除下列化合物：



就本發明的目的而言，具有 1 至 40 個 C 原子之烷基（其中個別的 H 原子或 CH_2 基團可另外被 $-\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{COO}-$ 或 $-\text{CONR}^2-$ 取代）較佳地意謂著甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、2-甲基丁基、正戊基、第二戊基、新戊基、環戊基、正己基、新己基、環己基、正庚基、環庚基、正辛基、環辛基、2-乙基己基、三氟甲基、五氟乙基及 2,2,2-三氟乙基。就本發明的目的而言，烯基特別意謂著乙烯基、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、辛烯基及環辛烯基。就本發明的目的而言，炔基特別意謂著乙炔基、丙炔基、丁炔

基、戊炔基、己炔基或辛炔基。C₁-C₄₀-烷氧基較佳地意謂著甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、異丁氧基、第二丁氧基，第三丁氧基或 2-甲基丁氧基。

就本發明的目的而言，芳基含有 6 至 40 個 C 原子，較佳為 6 至 25 個 C 原子，更佳為 6 至 20 個 C 原子；就本發明的目的而言，雜芳基含有 1 至 39 個 C 原子及至少 1 個雜原子，較佳為 2 至 25 個 C 原子及至少 1 個雜原子，更佳為 2 至 20 個 C 原子及至少 1 個雜原子，其先決條件係 C 原子與雜原子之總數為至少 5 個。雜原子較佳地選自 N、O 及 / 或 S。芳基或雜芳基在此意謂著簡單的芳族環（亦即苯），或簡單的雜芳族環（例如，吡啶、嘧啶、三吡、噻吩），或多環縮合芳基或雜芳基（例如，萘、蔥、菲、苯並蔥、喹啉、異喹啉、苯並噻吩、苯並呋喃及吲哚等）。

就本發明的目的而言，芳族環系統含有 6 至 60 個 C 原子，較佳為 6 至 40 個 C 原子，更佳為 6 至 24 個 C 原子於環系統中。就本發明的目的而言，雜芳族環系統含有 1 至 79 個 C 原子及至少 1 個雜原子，更佳為 2 至 40 個 C 原子及至少 1 個雜原子，最佳為 2 至 24 個 C 原子及至少 1 個雜原子於環系統中，其先決條件係 C 原子與雜原子之總數為至少 5 個。雜原子較佳地選自 N、O 及 / 或 S。就本發明的目的而言，意欲以芳族或雜芳族系統另外意謂著沒必要只含有芳基或雜芳基，反而其中複數個芳基或雜芳

基亦可以非芳族單元（較佳為少於 10% 非 H 之原子，諸如 C、N 或 O 原子）連接之系統。因此，例如亦意欲以諸如 9,9'-螺旋聯萸、9,9-二芳基萸、三芳基胺、二芳基醚、二苯乙烯等之系統為就本發明目的的芳族環系統，如其中二或多個芳基以例如直鏈或環狀烷基或以矽基連接之系統，且同樣為聯芳基或寡芳基。

具有 5-60 個環原子之芳族或雜芳族環系統（其亦可在每一情況中被上述 R 基取代且可經由任何所欲位置與芳族或雜芳族環系統連結）特別意謂著從下列者所衍生之基團：苯、萘、蔥、菲、芘、苝、苯並蔥、芘、螢蔥、並四苯、稠五苯、苯並芘、聯苯、亞聯苯、聯三苯、亞聯三苯、萸、螺旋聯萸、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛並萸、參茛並苯、異參茛並苯、螺旋參茛並苯、螺旋異參茛並苯、呋喃、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、噻吩、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、咪唑、順-或反-茛並咪唑、順-或反-吡啶並咪唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶、菲啶、苯並-5,6-喹啉、苯並-6,7-喹啉、苯並-7,8-喹啉、吩噻吡、吩噻吡、吡啶、咪唑、苯並咪唑、萘並咪唑、菲並咪唑、吡啶咪唑、吡啶咪唑、喹啉咪唑、噻吩、苯並噻吩、萘並噻吩、蔥並噻吩、菲並噻吩、異噻吩、1,2-噻吩、1,3-噻吩、苯並噻吩、噁吡、苯並噁吡、噁吡、喹噁啉、1,5-二氮雜蔥、2,7-二氮雜芘、2,3-二氮雜芘、1,6-二氮雜芘、1,8-二氮雜芘、4,5-二氮雜芘、4,5,9,10-四氮雜芘、

吡咻、吩咻、吩噁咻、吩嚟咻、螢紅環、蔡啖、氮雜呔啞、
 苯並呔啞、菲啞、1,2,3-三啞、1,2,4-三啞、苯並三啞、
 1,2,3-噁二啞、1,2,4-噁二啞、1,2,5-噁二啞、1,3,4-噁二
 啞、1,2,3-嚟二啞、1,2,4-嚟二啞、1,2,5-嚟二啞、1,3,4-
 嚟二啞、1,3,5-三咻、1,2,4-三咻、1,2,3-三咻、四啞、
 1,2,4,5-四咻、1,2,3,4-四咻、1,2,3,5-四咻、噁哈、蝶啖、
 咧啞咻及苯並嚟二啞，或該等系統之組合。

在具體例中，在通式(1)化合物中的 X_1 較佳地選自 $N(R^1)$ ，其中 R^1 係選自具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）或具有 5 至 60 個環原子之芳族或雜芳族環系統（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）。

在通式(1)化合物中的 X_2 較佳地在各次出現彼此獨立選自 $C(R^1)_2$ 、 $N(R^1)$ 及 S 。

在本發明特別佳的具體例中，在通式(1)化合物中的 X_1 代表 $N(R^1)$ ，其中 R^1 係選自具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）或具有 5 至 60 個環原子之芳族或雜芳族環系統（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代），且 X_2 代表 $C(R^1)_2$ 。

在通式(1a)化合物中的 X_3 較佳地在各次出現彼此獨立選自 N 或 $C(R^1)$ ，特別佳為 N 。

E 較佳地在各次出現彼此獨立選自共價單鍵或選自 $N(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 及 O 之二價橋。 E 特別佳地選自共價單鍵

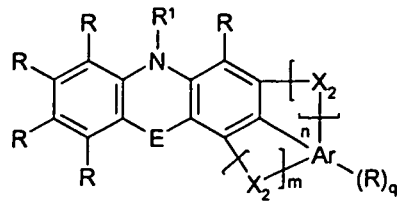
、 $N(R^1)$ 或 $C(R^1)_2$ 。E 最特別佳地代表共價單鍵。

L 較佳地代表具有 5 至 24 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其可被一或多個 R^1 基取代。如上述定義中已述及，L 沒必要一定只含有芳族基團。因此，例如亦優先選擇為具有式芳基-C(=O)-芳基之 L 基團，其中芳基在各次出現係相同或不同地代表具有 5 或 12 個芳族環原子之芳基、聯芳基、雜芳基或聯雜芳基，較佳地代表苯基或聯苯基。另外較佳的 L 基團為代表苯基與三吡啶基組合的基團，例如苯基-三吡啶-苯基，其中該等基團亦可被一或多個 R^1 基取代。

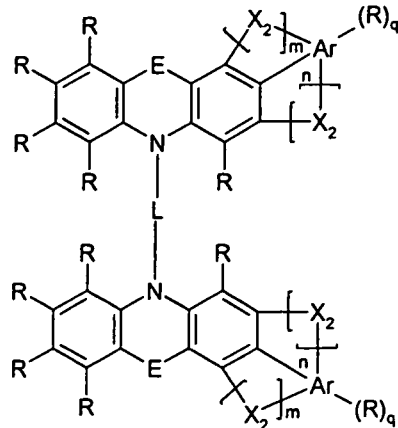
在通式 (1) 化合物中，R 較佳地選自 H、D、 $N(Ar)_2$ (較佳為二苯胺基)、經取代或未經取代之芳基胺、具有 1 至 20 個 C 原子 (較佳為 1 至 10 個 C 原子) 之直鏈烷基、具有 3 至 20 個 C 原子 (較佳為 1 至 10 個 C 原子) 之支鏈烷基或具有 5 至 40 個環原子之芳族或雜芳族環系統。芳族或雜芳族環系統在此較佳地選自經取代或未經取代之苯基、萘基、吡啶、三吡啶、嘧啶、苯並咪唑、噻吩、三苯胺或該等基團之組合。

在通式 (1) 化合物中，另外較佳的是 Ar 代表具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基，較佳為經取代或未經取代之苯基、萘基、三吡啶基、吡啶基、嘧啶基或咪唑基，特別佳為苯基。

依照本發明較佳的化合物係以例如下列的式 (2) 或式 (2') 代表：



式 (2)

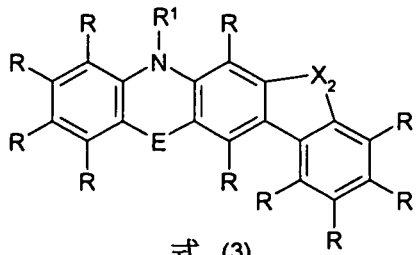


式 (2')

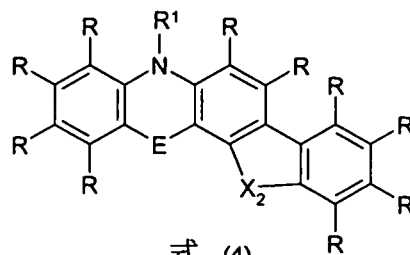
其中符號及下標具有上述所指示之意義。

更多在通式 (1) 內較佳的化合物係以下列的式 (3)

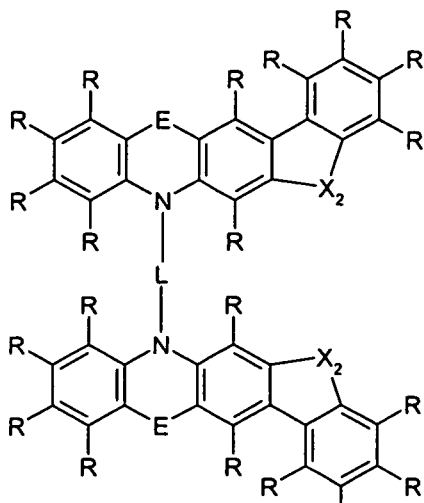
、 (4) 、 (3') 及 (4') 化合物代表：



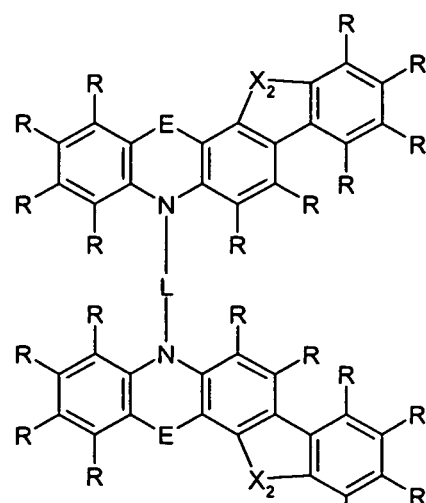
式 (3)



式 (4)



式 (3')

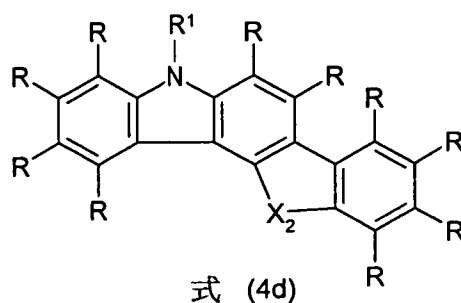
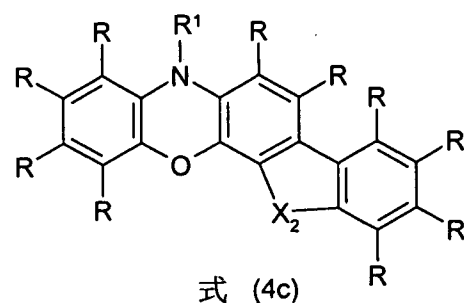
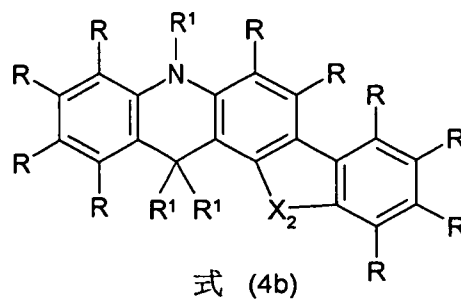
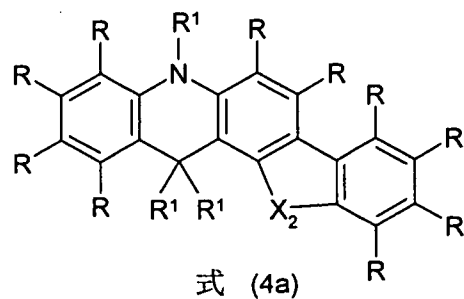
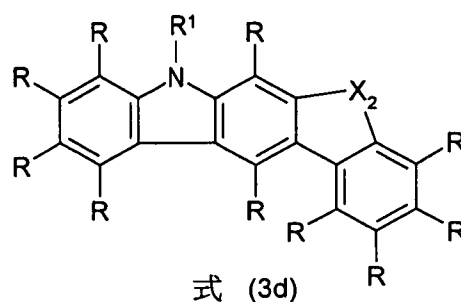
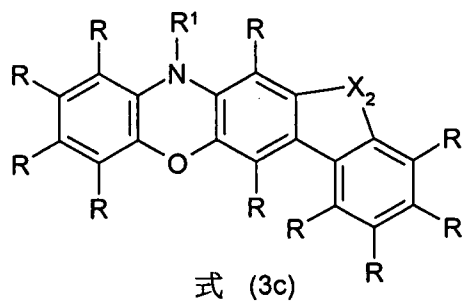
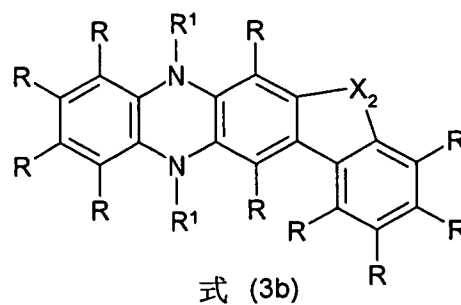
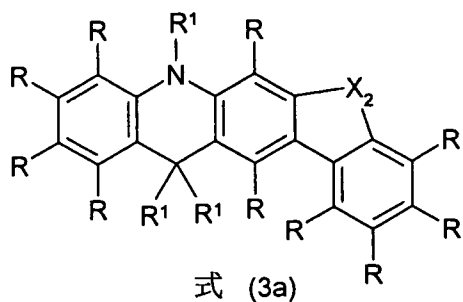


式 (4')

其中所使用的符號及下標具有上述所指示之意義。

在又另一具體例中，式 (1) 化合物係選自下列的通

用結構：



其中符號及下標具有上述所指示之意義且其中 X_2 較佳地選自 $C(R^1)_2$ 、 $N(R^1)$ 及 S ，其先決條件係式 (3d) 及式 (4d) 中的 X_2 不代表 $N(R^1)$ 。 R^1 在此較佳地在各次出現彼此獨立選自烷基、經取代或未經取代之三吡啶、吡啶、嘧啶、吡嗪、苯基、聯苯、聯三苯、萘基、蔥基及咪唑。

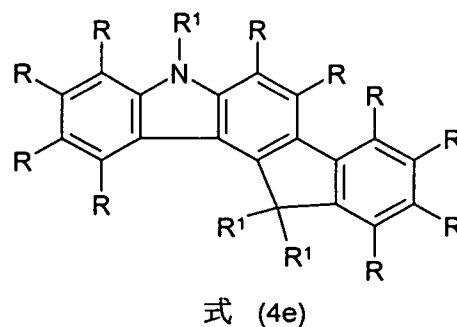
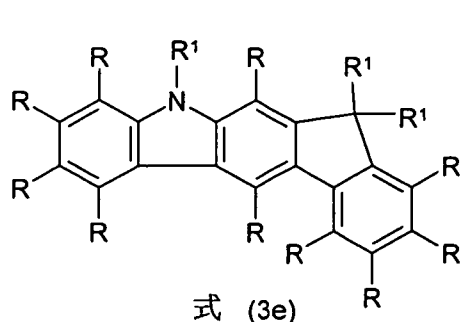
此外， R^1 較佳為 -芳基 -C(=O)-芳基，其中芳基代表具有 5 至 10 個芳族環原子之芳基或雜芳基，較佳為苯基。在此與相同的 C 原子鍵結的兩個 R^1 基與彼等鍵結在一起的原子亦可形成脂族、芳族或雜芳族環系統，例如萸。

對應的式 (1') 具體例可以類似方式完全建構且同樣為較佳的具體例。

在式 (3d) 及 (4d) 中，較佳的是假設沒有任何 R 基含有呋唑基或二苯並噻吩基。

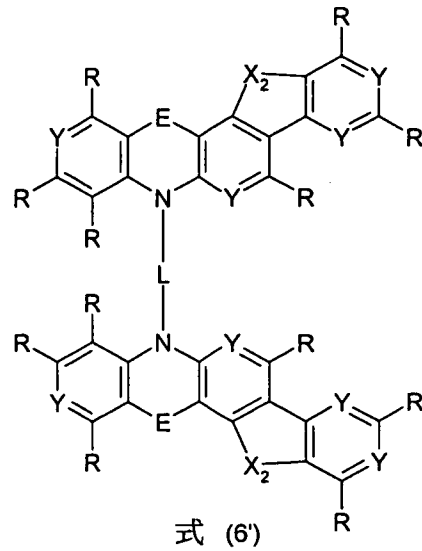
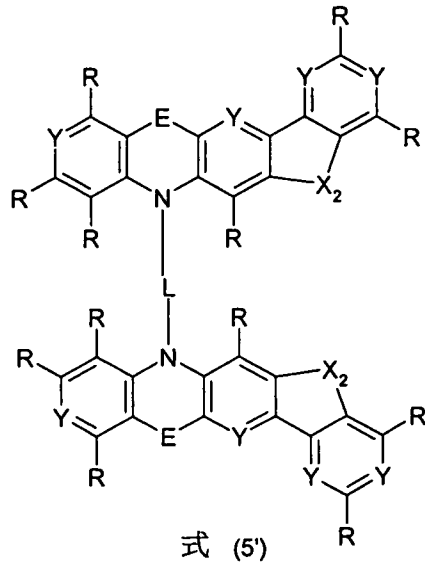
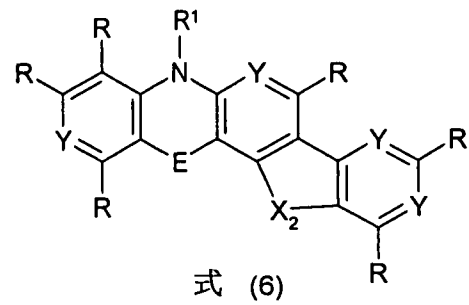
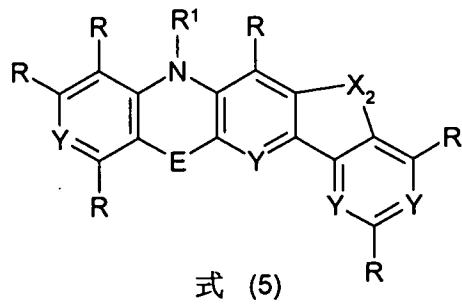
在式 (3a) 至 (3d) 及 (4a) 至 (4d) 中， X_2 最特別佳地代表 $C(R^1)_2$ 。

在此特別優先選擇為下列的式 (3e) 及 (4e) 結構：



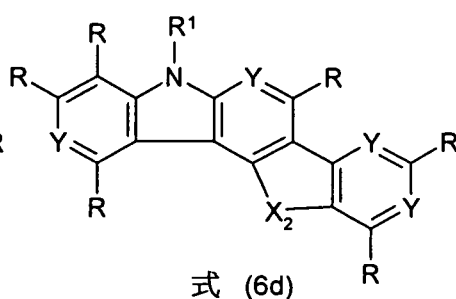
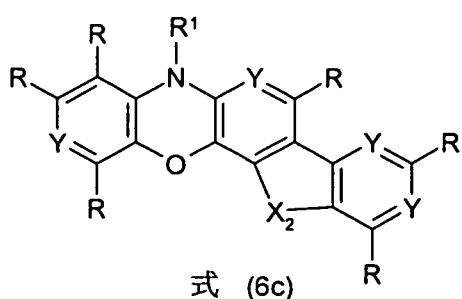
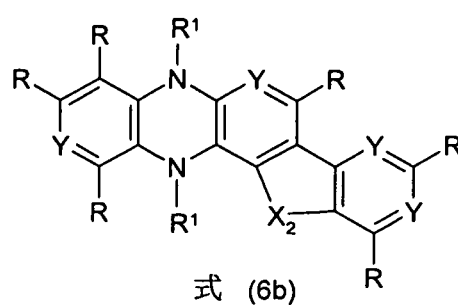
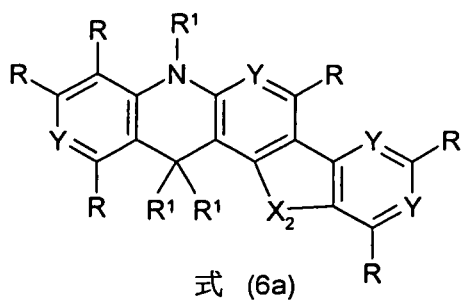
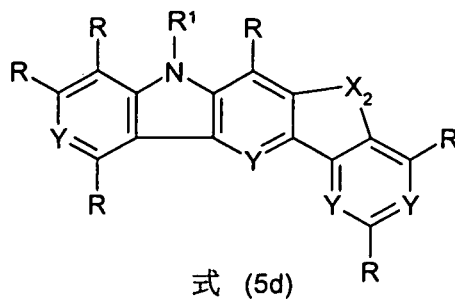
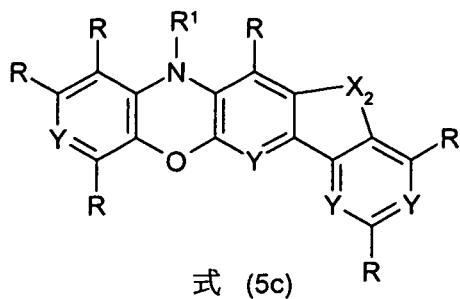
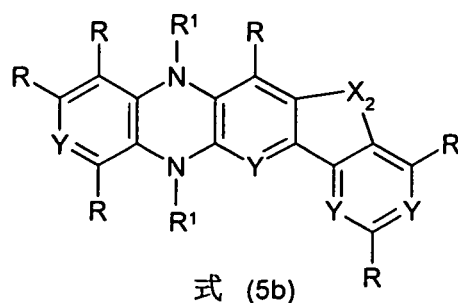
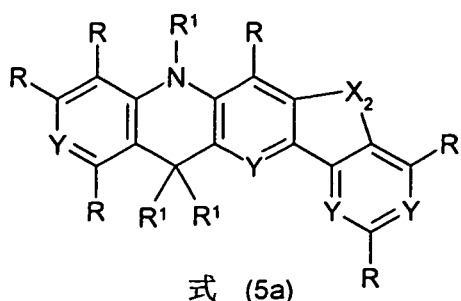
其中符號及下標具有上述所指示之意義。 R^1 在此較佳地在各次出現彼此獨立選自烷基、經取代或未經取代之三吡啶、吡啶、嘧啶、吡嗪、苯基、聯苯、聯三苯、萘基、蔥基及呋唑。在此與相同的 C 原子鍵結的兩個 R^1 基與彼等鍵結在一起的原子亦可形成脂族、芳族或雜芳族環系統，例如萸。

更特別佳的式 (1) 化合物為那些具有至少一個氮雜原子的化合物。較佳的氮原子位置係以下示結構中的 Y 代表：



至少一個 Y 基團在此代表 N 且其餘的 Y 基團代表 CR
 。 除此以外，所使用的符號及下標具有上述所指示之意義
 。

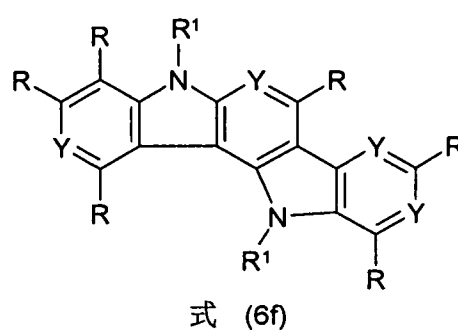
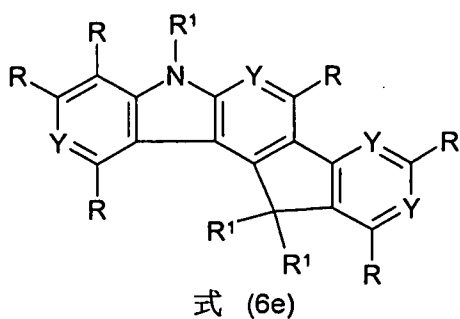
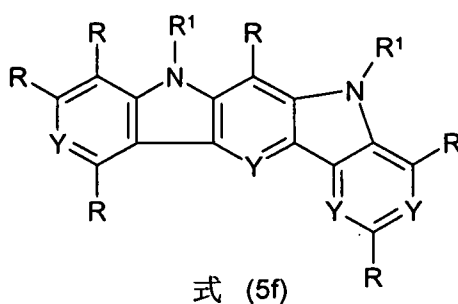
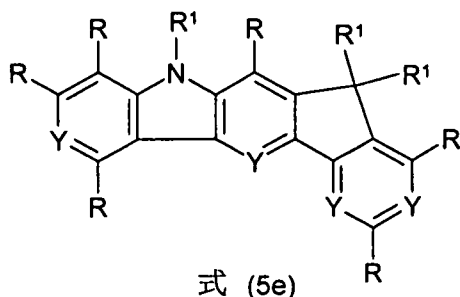
特別佳的化合物亦為下示之式 (5a) 至 (5d) 及 (6a)
) 至 (6d) 結構：



其中所使用的符號及下標具有上述所指示之意義，至少一個 Y 代表氮原子，且其中 X_2 較佳地選自 $C(R^1)_2$ 、 $N(R^1)$ 及 S。 R^1 在此較佳地在各次出現彼此獨立選自烷基、經取代或未經取代之三吡、吡啶、嘧啶、吡嘞、苯基、聯苯、聯三苯、萘基、蔥基及喹啉。在此與相同的 C 原子鍵結的兩個 R^1 基亦可形成脂族、芳族或雜芳族環系統，例如菲。

對應的式 (1') 具體例可以類似方式完全建構且同樣為較佳的具體例。

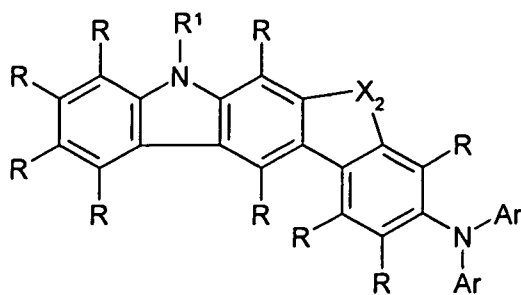
就本發明目的而言，同樣地優先選擇為下列結構：



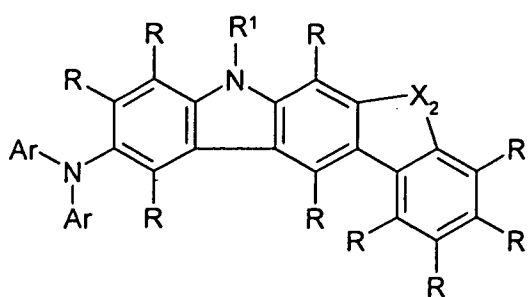
其中符號及下標具有上述所指示之意義。R¹ 在此較佳地在各次出現彼此獨立選自烷基、經取代或未經取代之三吡啶、吡啶、嘧啶、吡嗪、苯基、聯苯、聯三苯、萘基、蔥基及呋啶。在此與相同的 C 原子鍵結的兩個 R¹ 基與彼等鍵結在一起的原子亦可形成脂族、芳族或雜芳族環系統，例如萸。

對應的式 (1') 具體例可以類似方式完全建構且同樣為較佳的具體例。

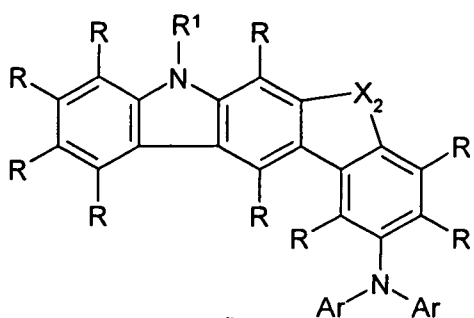
更特別佳的式 (1) 化合物為下列結構：



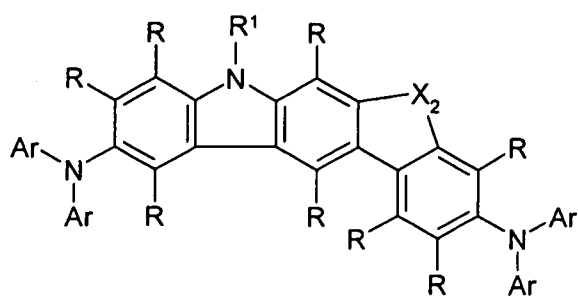
式 (3g)



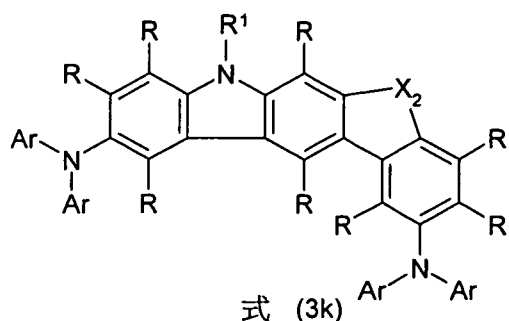
式 (3h)



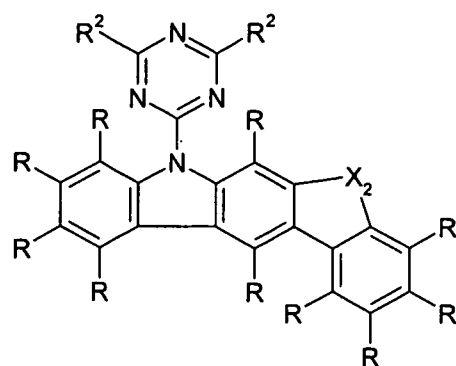
式 (3i)



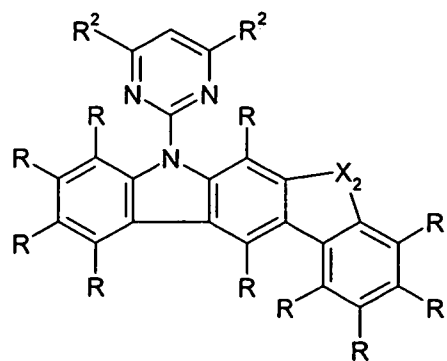
式 (3j)



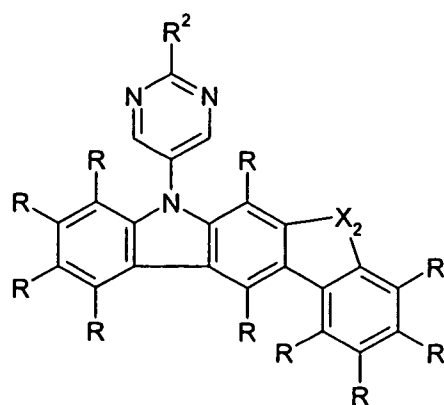
式 (3k)



式 (3l)



式 (3m)

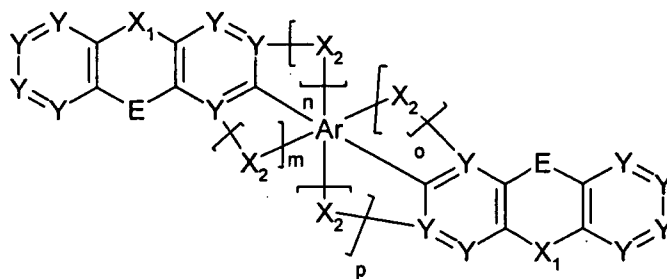


式 (3n)

其中所使用的符號及下標具有上述所指示之意義。X₂ 在此特別佳地代表 C(R¹)₂。R¹ 在此較佳地在各次出現彼此

獨立選自烷基、經取代或未經取代之三吡啶、吡啶、嘧啶、吡嗪、苯基、聯苯、聯三苯、萘基、蔥基及呋啶。在此與相同的 C 原子鍵結的兩個 R^1 基與彼等鍵結在一起的原子亦可形成脂族、芳族或雜芳族環系統，例如萘。

在本發明的又另一具體例中，根據本發明的化合物符合通式 (7)：



式 (7)

其中符號及下標具有以式 (1) 所指示之意義， o 及 p 彼此各自獨立為 0 或 1，且 $o+p=1$ 或 2。

在具體例中，在通式 (7) 化合物中的 X_1 較佳地在各次出現彼此獨立選自 $N(R^1)$ 或 $C(R^1)_2$ ，其中 R^1 係選自具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基（其被 R^2 取代或未被取代）或具有 5 至 40 個環原子之芳族或雜芳族環系統（其可被一或多個 R^2 基取代）。

在通式 (7) 化合物中的 X_2 較佳地在各次出現彼此地獨立選自 $C(R^1)_2$ 、 $N(R^1)$ 或 S。

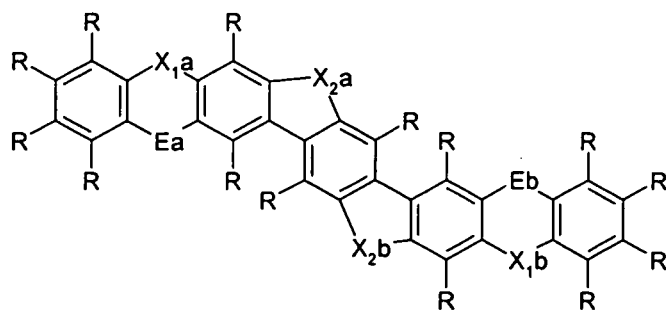
特別佳地， X_1 代表 $N(R^1)$ 及 X_2 代表 $C(R^1)_2$ ，或 X_1 代表 $C(R^1)_2$ 及 X_2 代表 $N(R^1)$ 。

在通式 (7) 化合物中，R 較佳地選自 H、D、 NAr_2 、經取代或未經取代之芳基胺、具有 1 至 20 個 C 原子（較

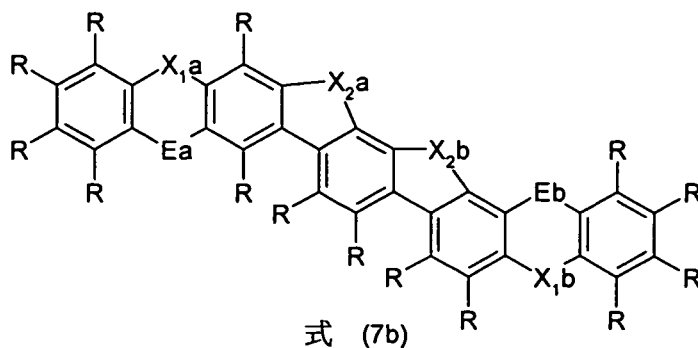
佳為 1 至 10 個 C 原子) 之直鏈烷基、具有 3 至 20 個 C 原子 (較佳為 3 至 10 個 C 原子) 之支鏈烷基或具有 5 至 40 個環原子之芳族或雜芳族環系統。芳族或雜芳族環系統在此較佳地選自苯基、聯苯、聯三苯、萘基、吡啶、三吡、嘧啶、吡嗪、噻吩或三苯胺，每個該等基團可被一或多個 R^1 基取代。

在通式 (7) 化合物中，另外較佳的是 Ar 代表芳基或雜芳基，較佳為苯基、聯苯、聯三苯、萘基、吡啶基、三吡基、嘧啶基、吡嗪基、噻吩基或經取代或未經取代之咪唑基，每個該等基團可被一或多個 R 基取代。

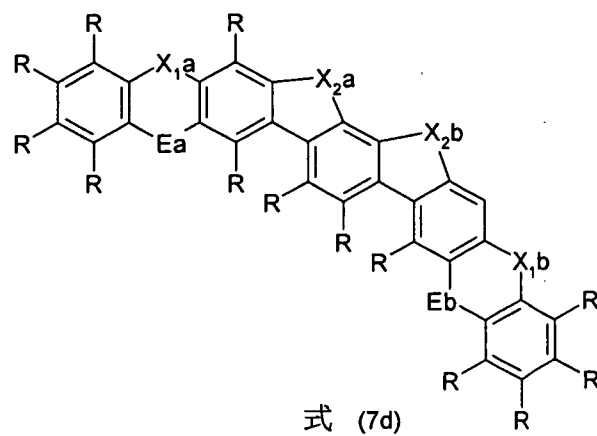
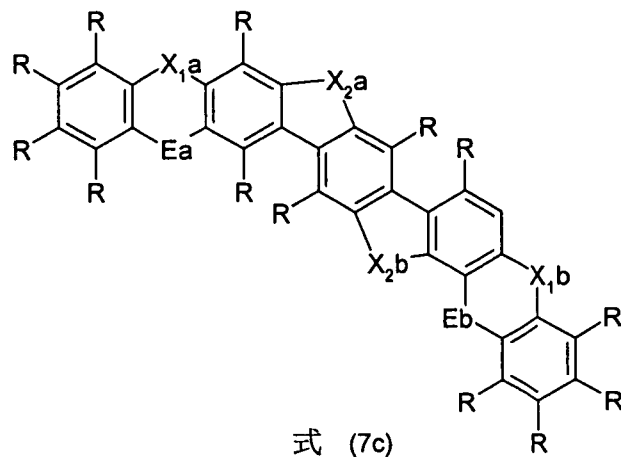
在式 (7) 化合物內較佳的結構為結構 (7a) 至 (7d)) :



式 (7a)



式 (7b)



其中所使用的符號及下標具有上述所指示之意義， X_{1a} 及 X_{1b} 在各次出現彼此獨立為 $C(R^1)_2$ 或 $N(R^1)$ ， Ea 及 Eb 在各次出現彼此獨立為共價單鍵、 $C(R^1)_2$ 、 $N(R^1)$ 或 O ，且 X_{2a} 及 X_{2b} 彼此各自獨立選自 $C(R^1)_2$ 、 $N(R^1)$ 或 S ，特別佳為 $C(R^1)_2$ 及 $N(R^1)$ 。

表 1 中所示之可能組合係以取代基 X_{1a} 、 X_{1b} 、 Ea 、 Eb 、 X_{2a} 及 X_{2b} 形成：

表1 ("-" 表示共價單鍵)：

X_{1a}	X_{1b}	Ea	Eb	X_{2a}	X_{2b}
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$

$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$

$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$

$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$

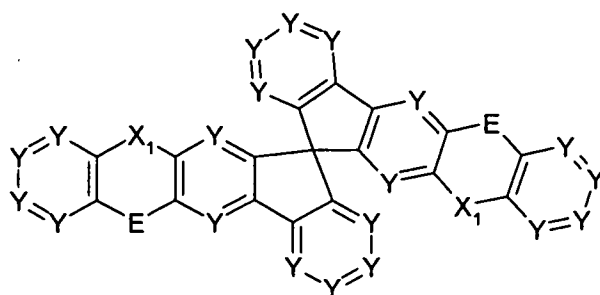
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$

$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$

$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	-	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$

$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	-	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	-	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	$N(R^1)$
$C(R^1)_2$	$N(R^1)$	O	$N(R^1)$	$N(R^1)$	$N(R^1)$

在本發明的又另一具體例中，根據本發明的化合物符合通式 (8)：



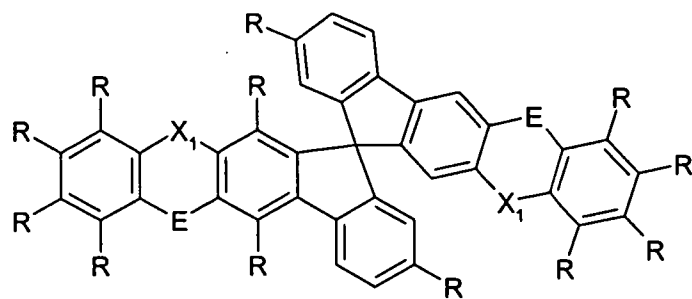
式 (8)

其中所使用的符號具有上述所指示之意義。

在較佳的式 (8) 具體例中， X_1 代表 $N(R^1)$ 。在更佳的式 (8) 具體例中，E 代表單鍵、 $N(R^1)$ 或 $C(R^1)_2$ ，特別佳為單鍵。最特別佳地， X_1 代表 $N(R^1)_2$ 及 E 代表單鍵。

在更佳的式 (8) 具體例中，最多一或兩個 Y 基團代表 N 及其餘的 Y 基團代表 CR。最特別佳地，所有的 Y 基團皆代表 CR。

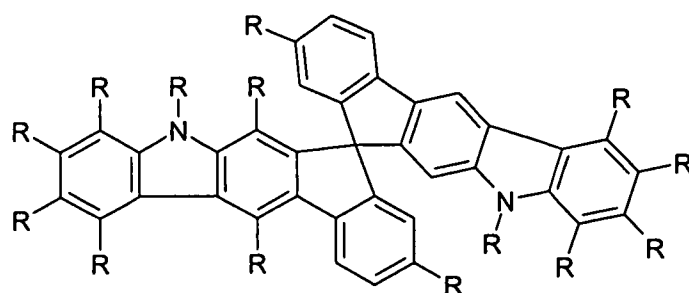
較佳的式 (8) 具體例為下列的式 (8a) 化合物：



式 (8a)

其中所使用的符號具有上述所提出之意義。

特別佳的式 (8) 具體例為下列的式 (8b) 化合物：

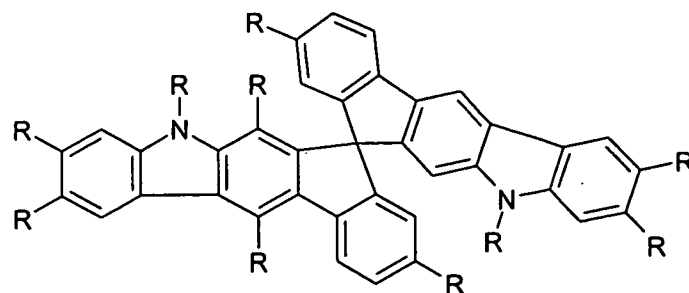


式 (8b)

其中所使用的符號具有上述所提出之意義。

最特別佳的式 (8) 具體例為下列的式 (8c) 化合物

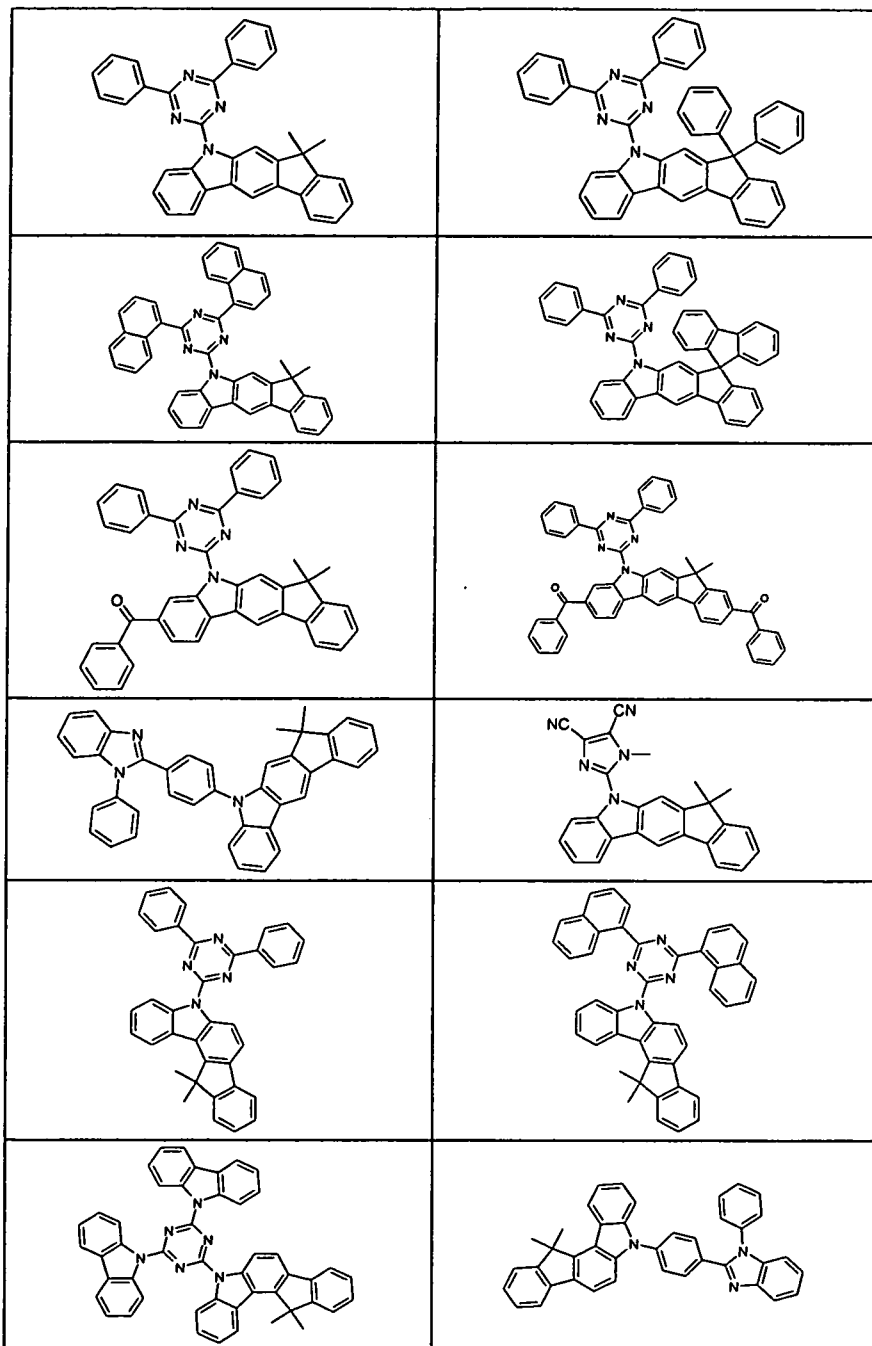
:

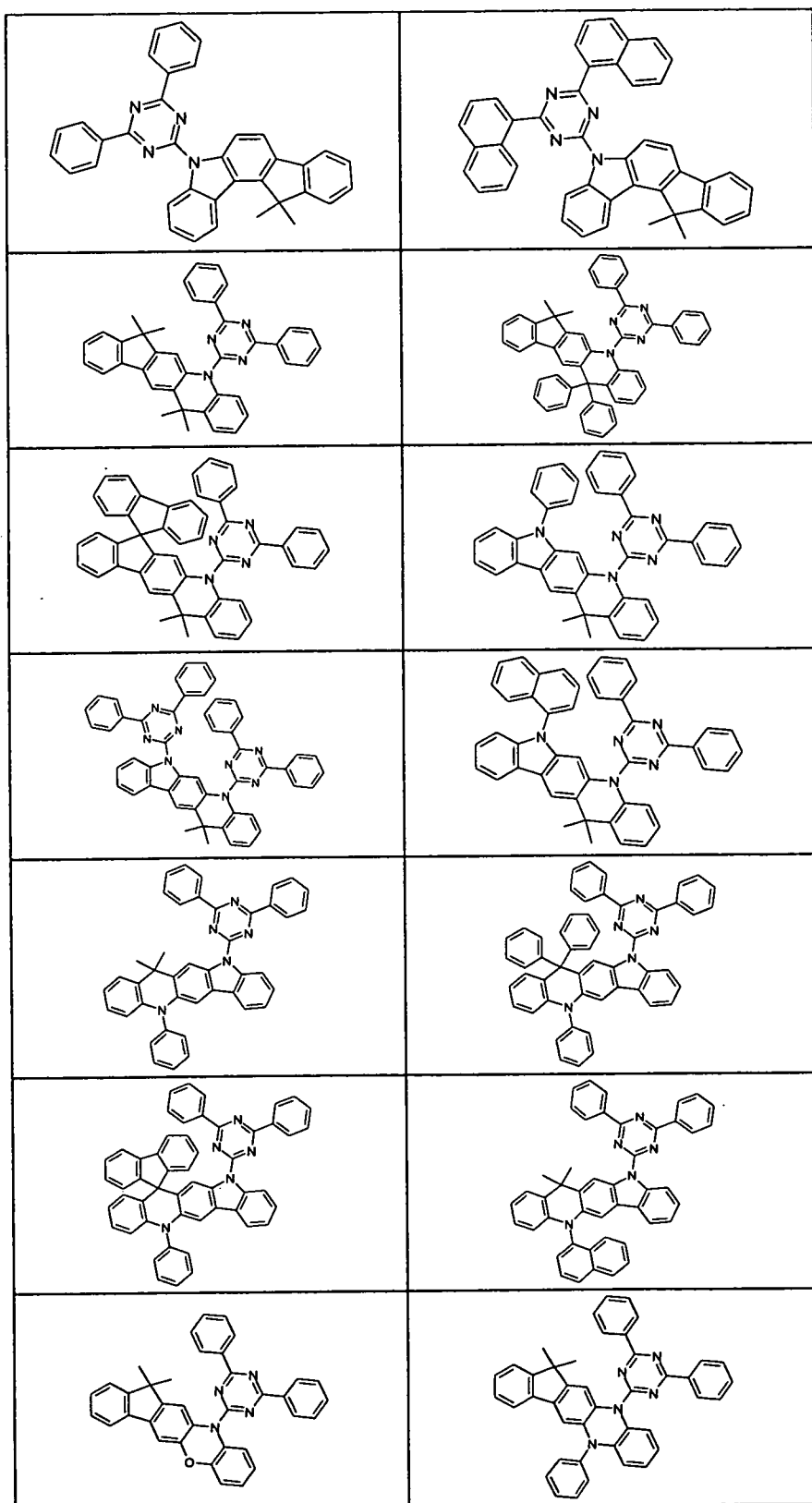


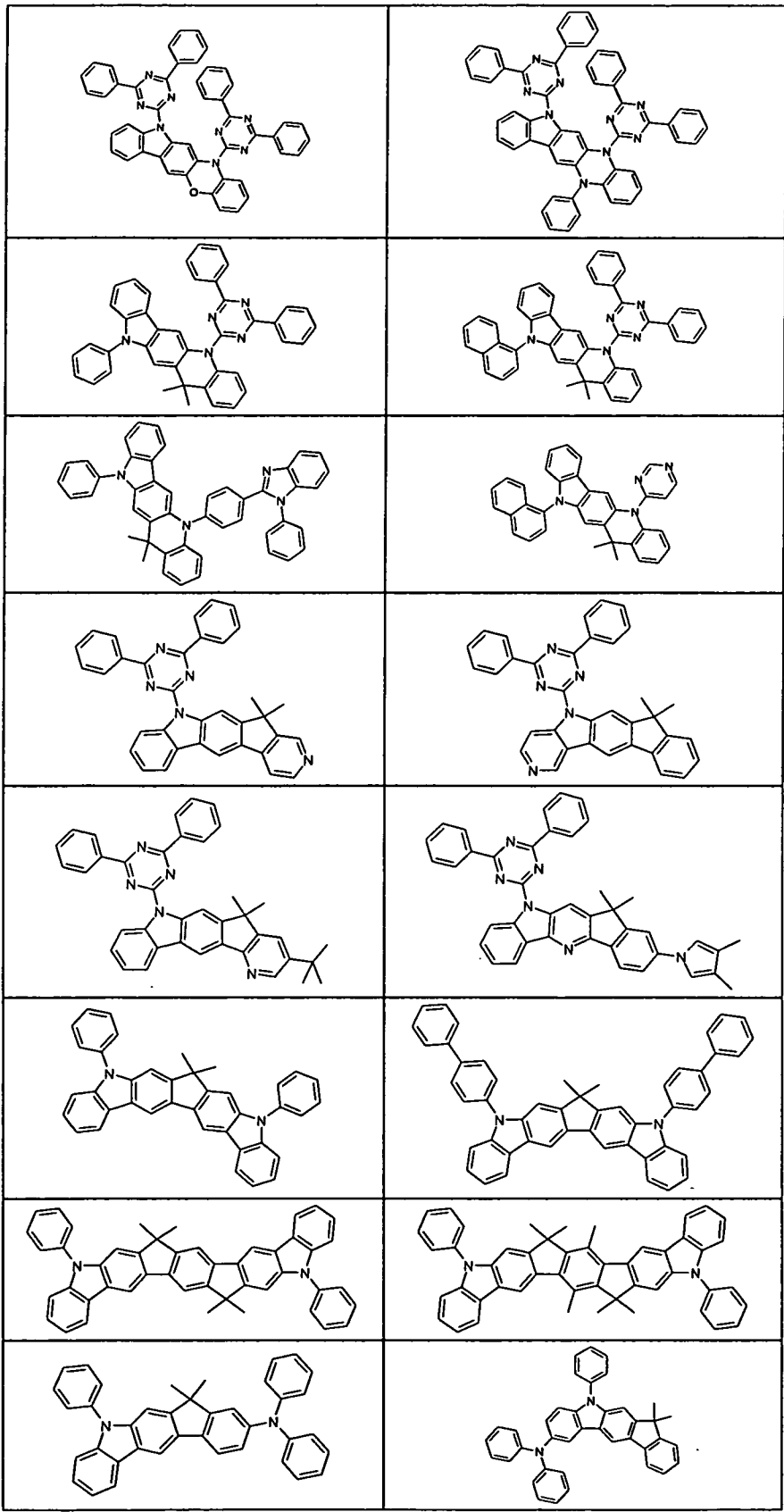
式 (8c)

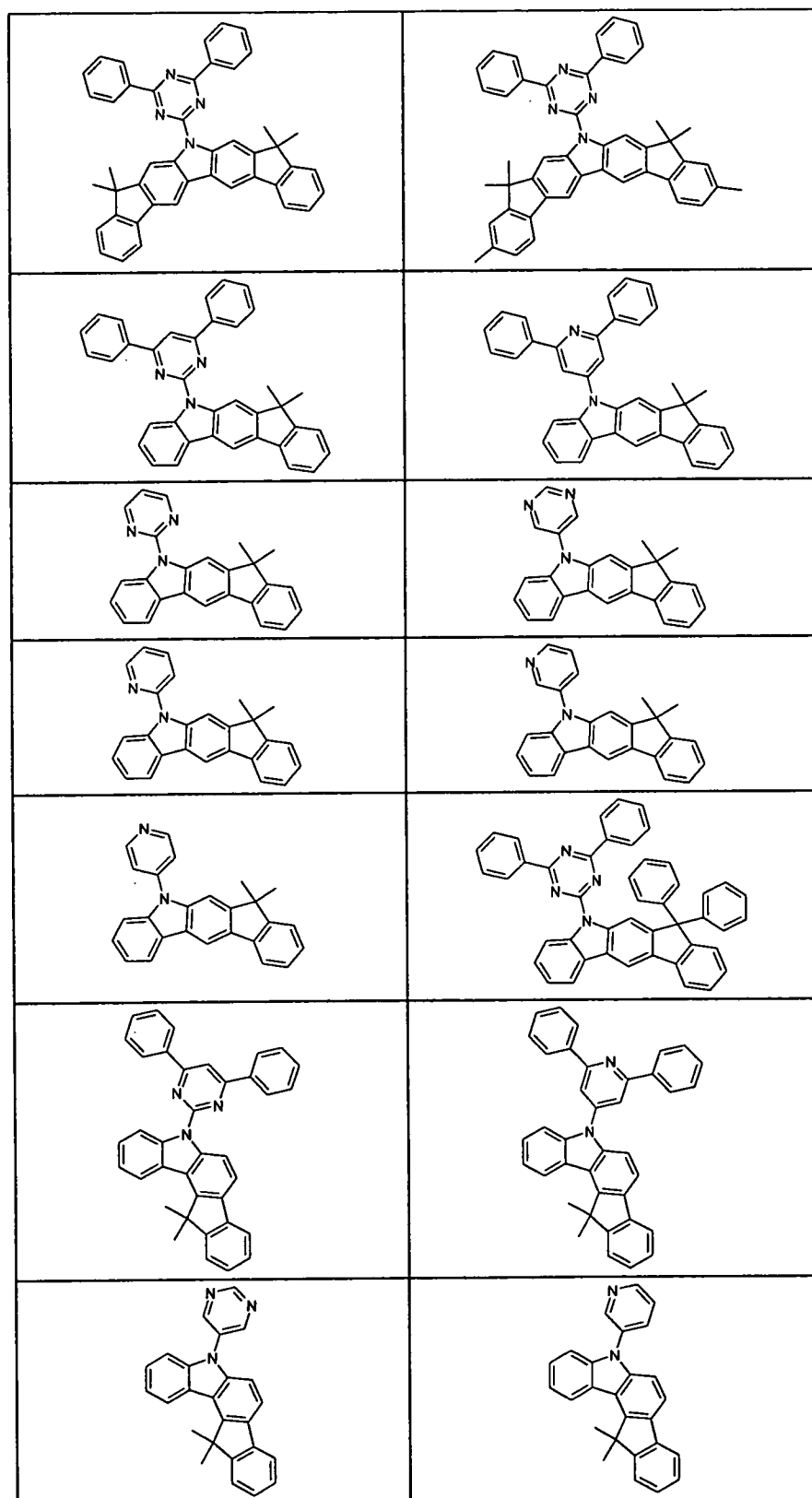
其中所使用的符號具有上述所提出之意義。

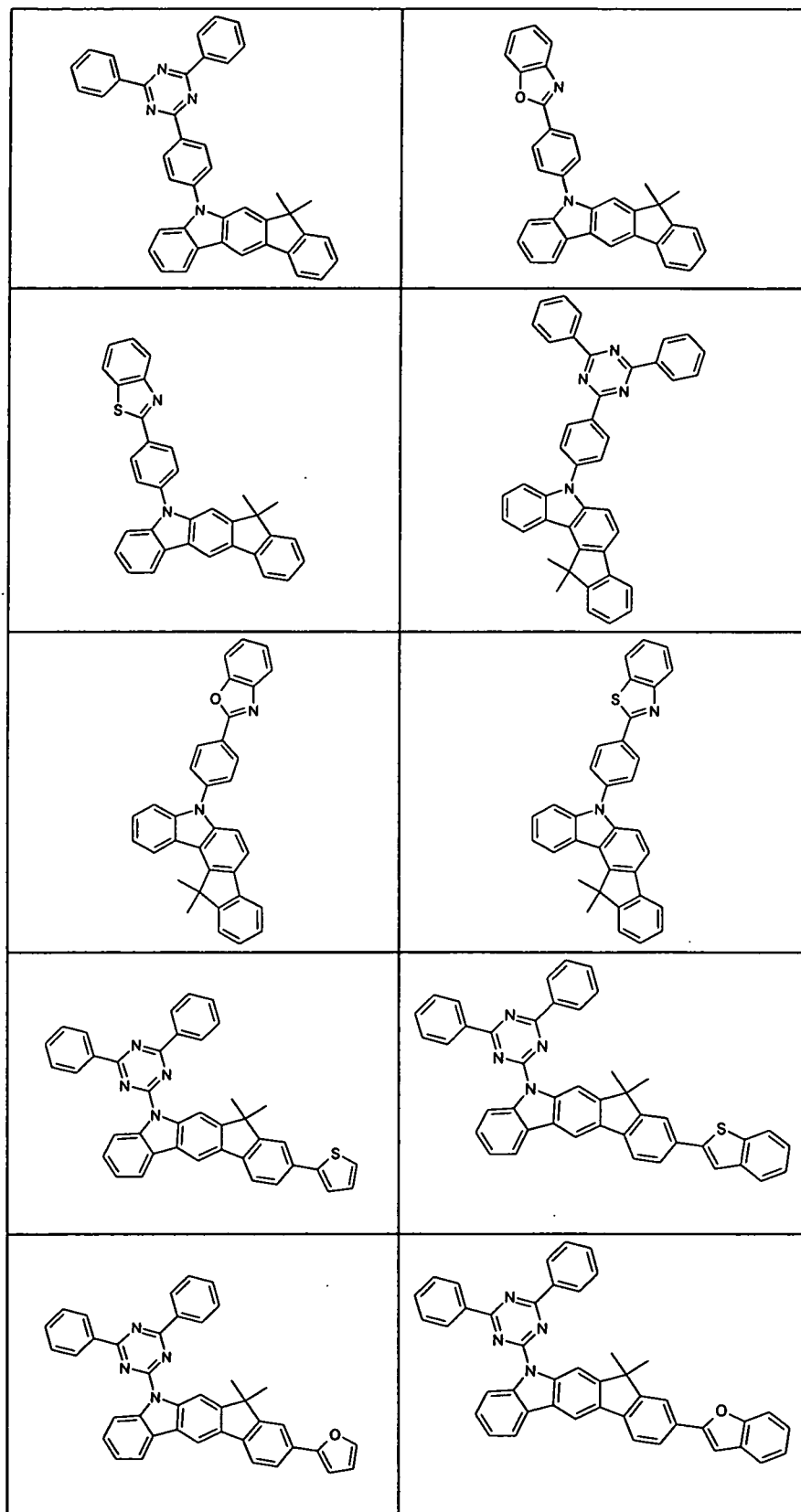
根據本發明的式 (1) 化合物之實例為例如以下所示之結構：

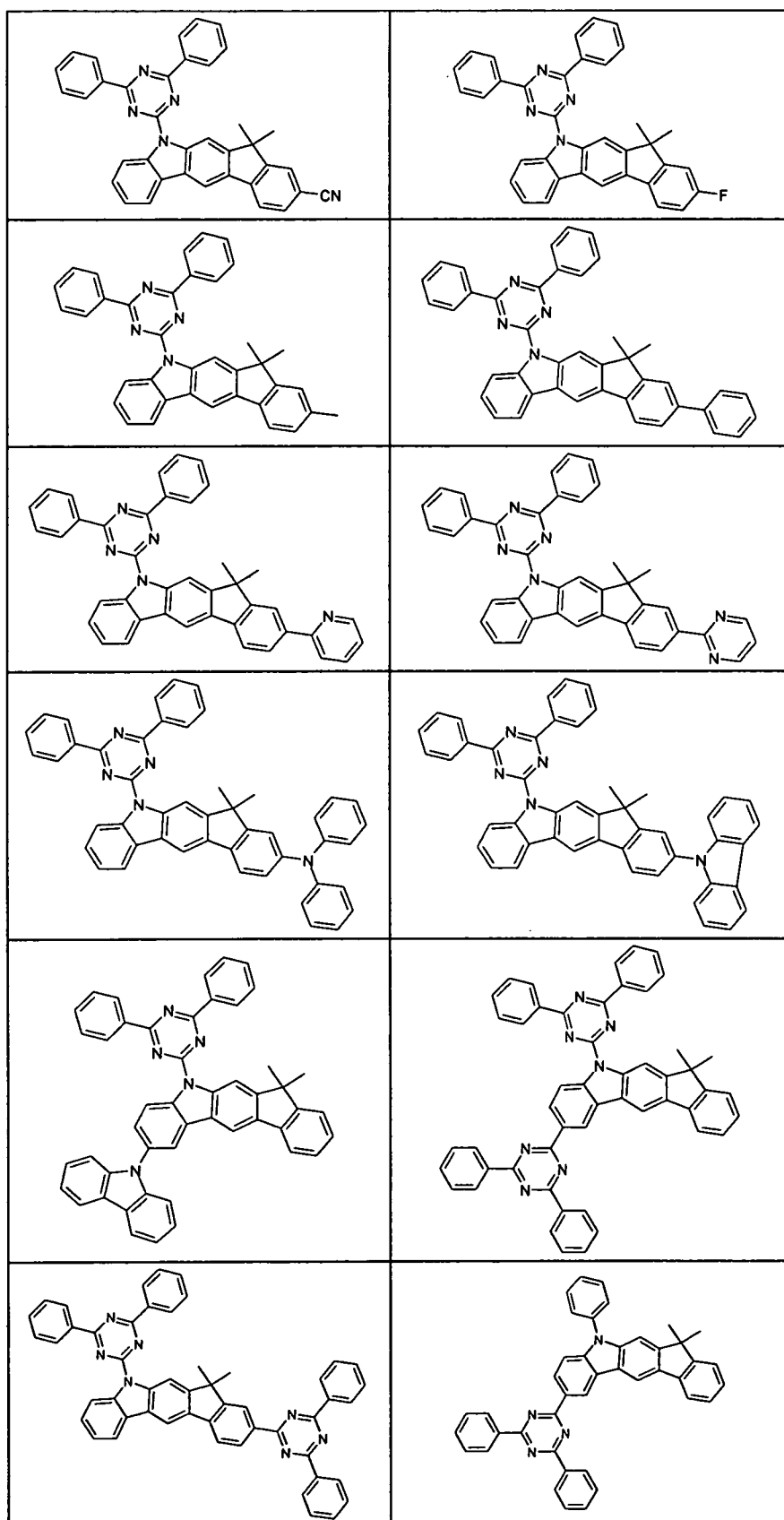


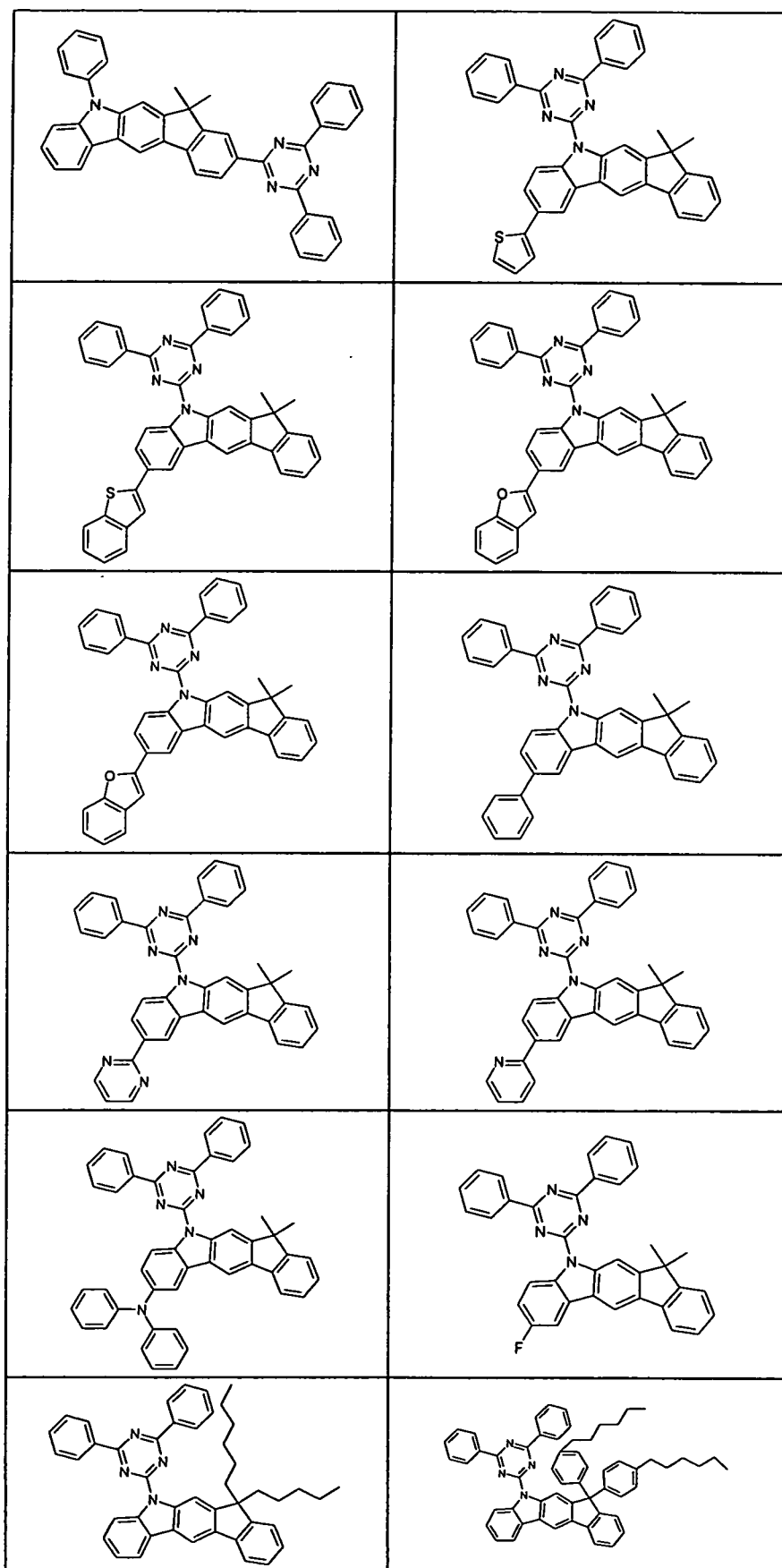


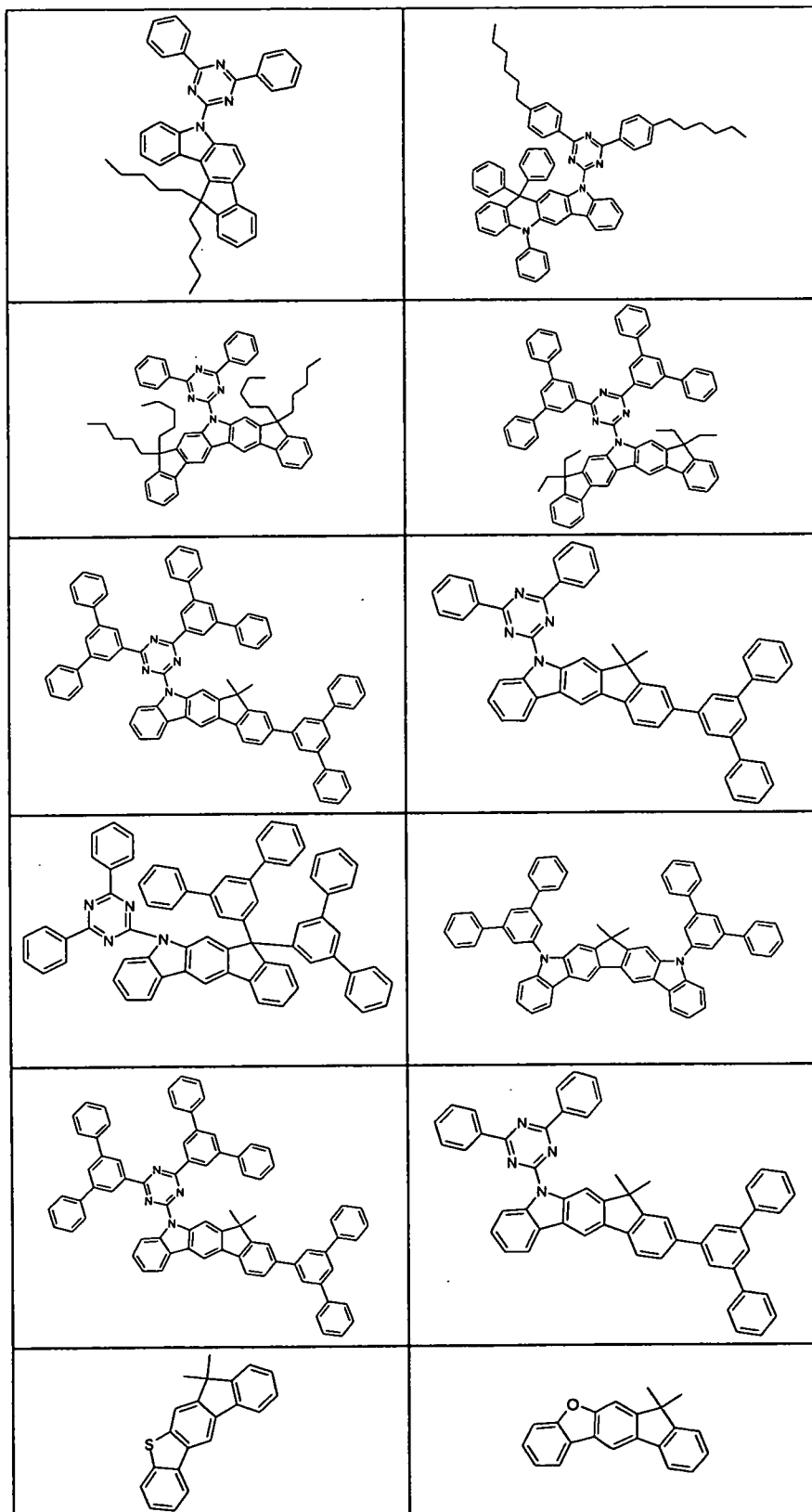


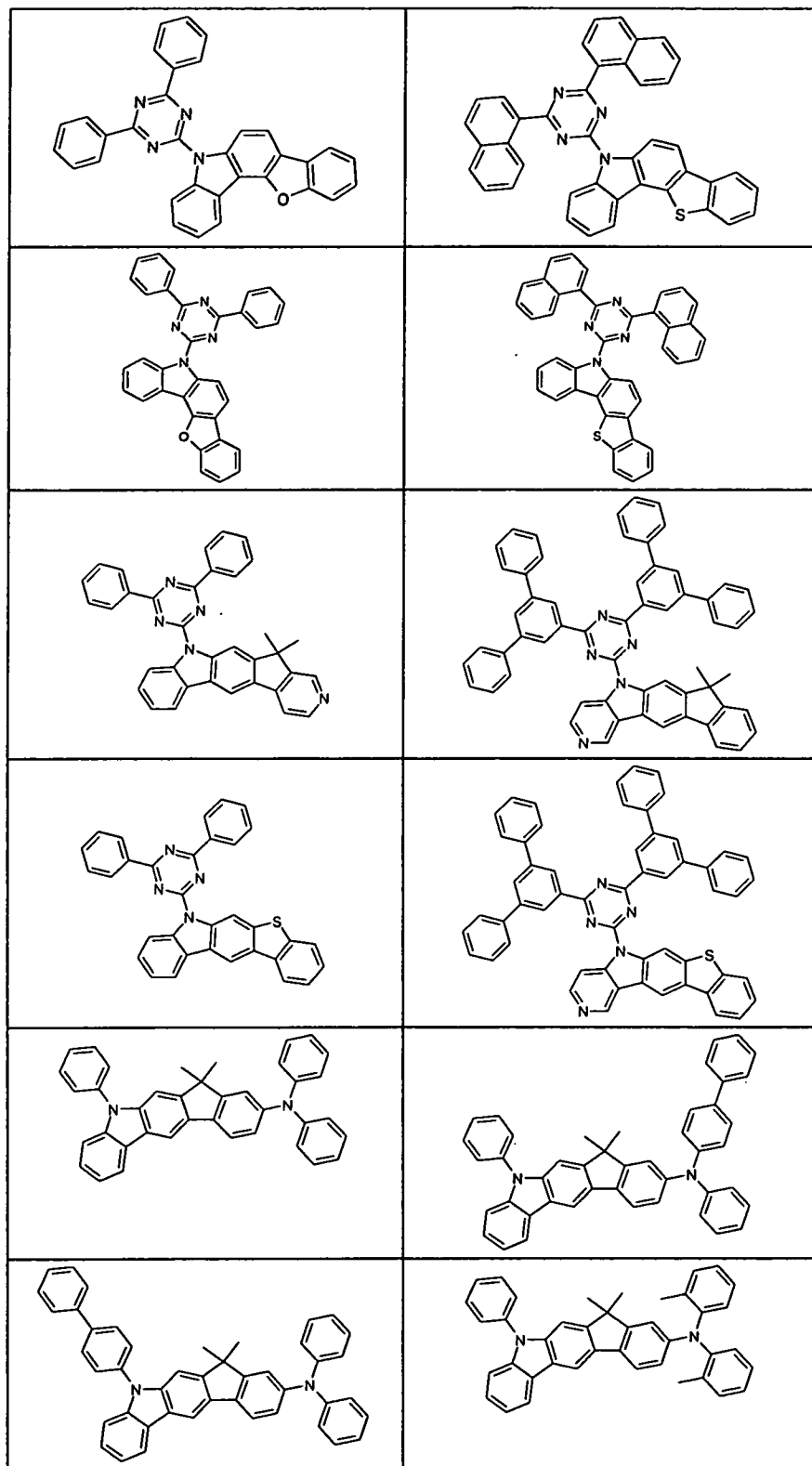


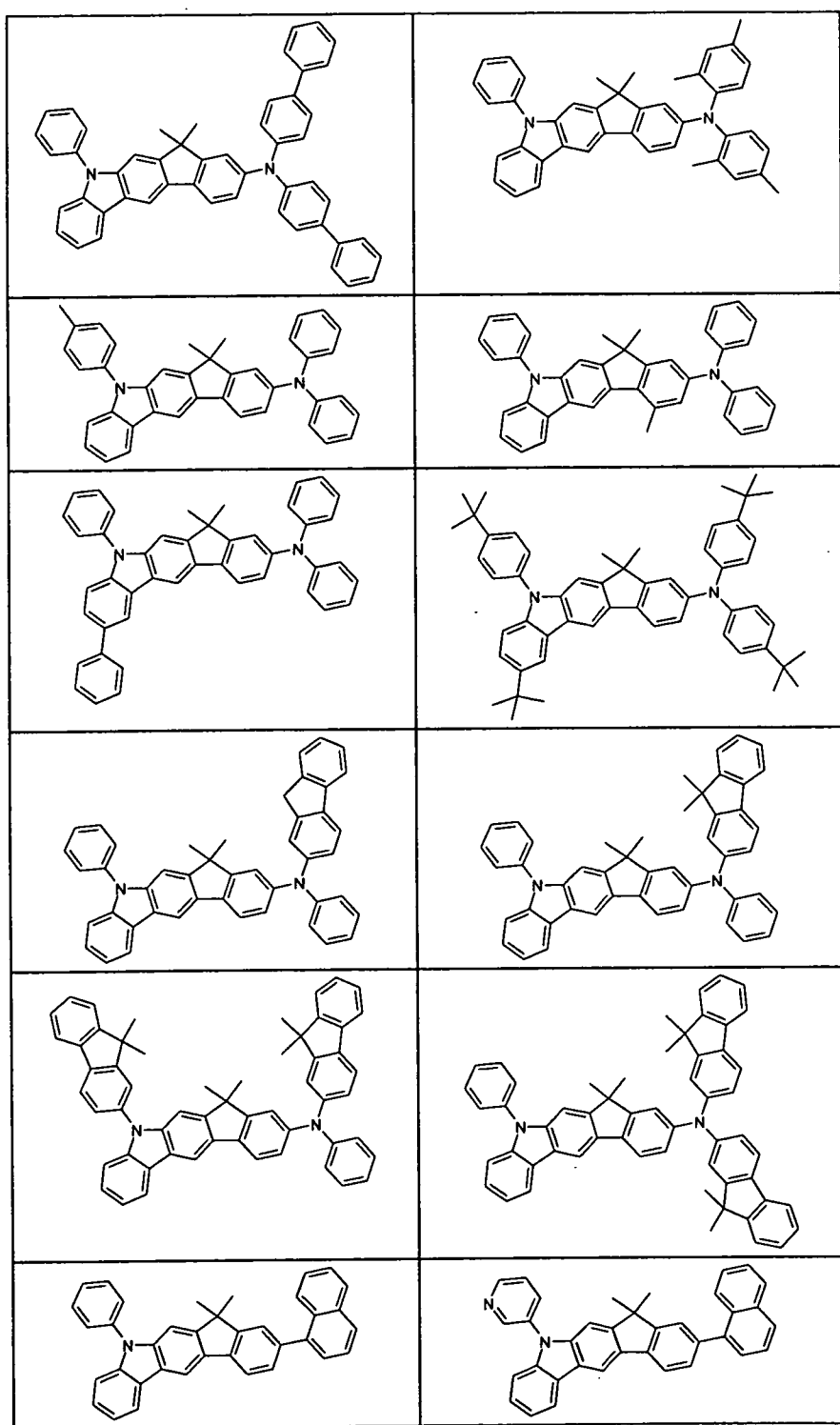


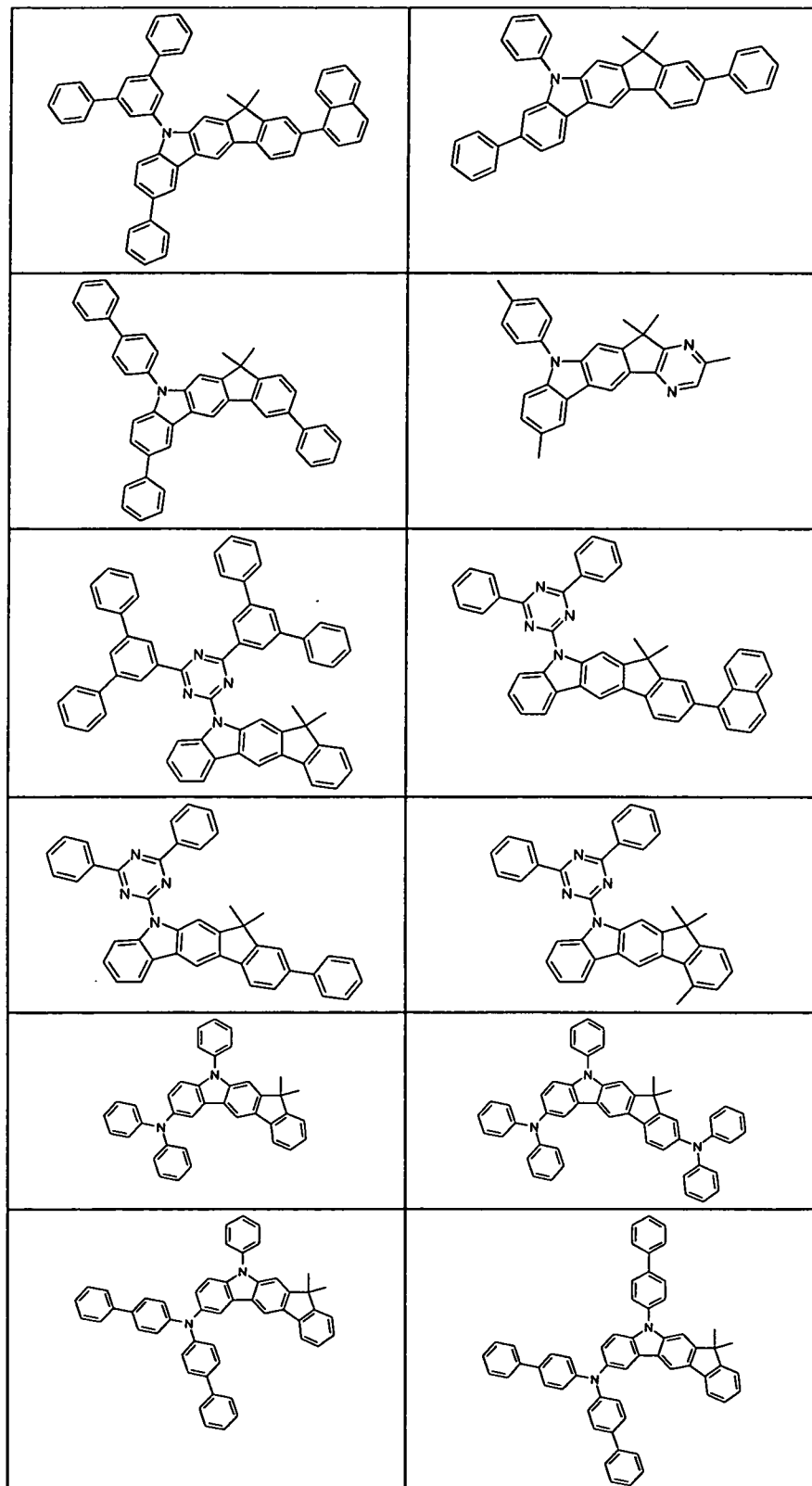


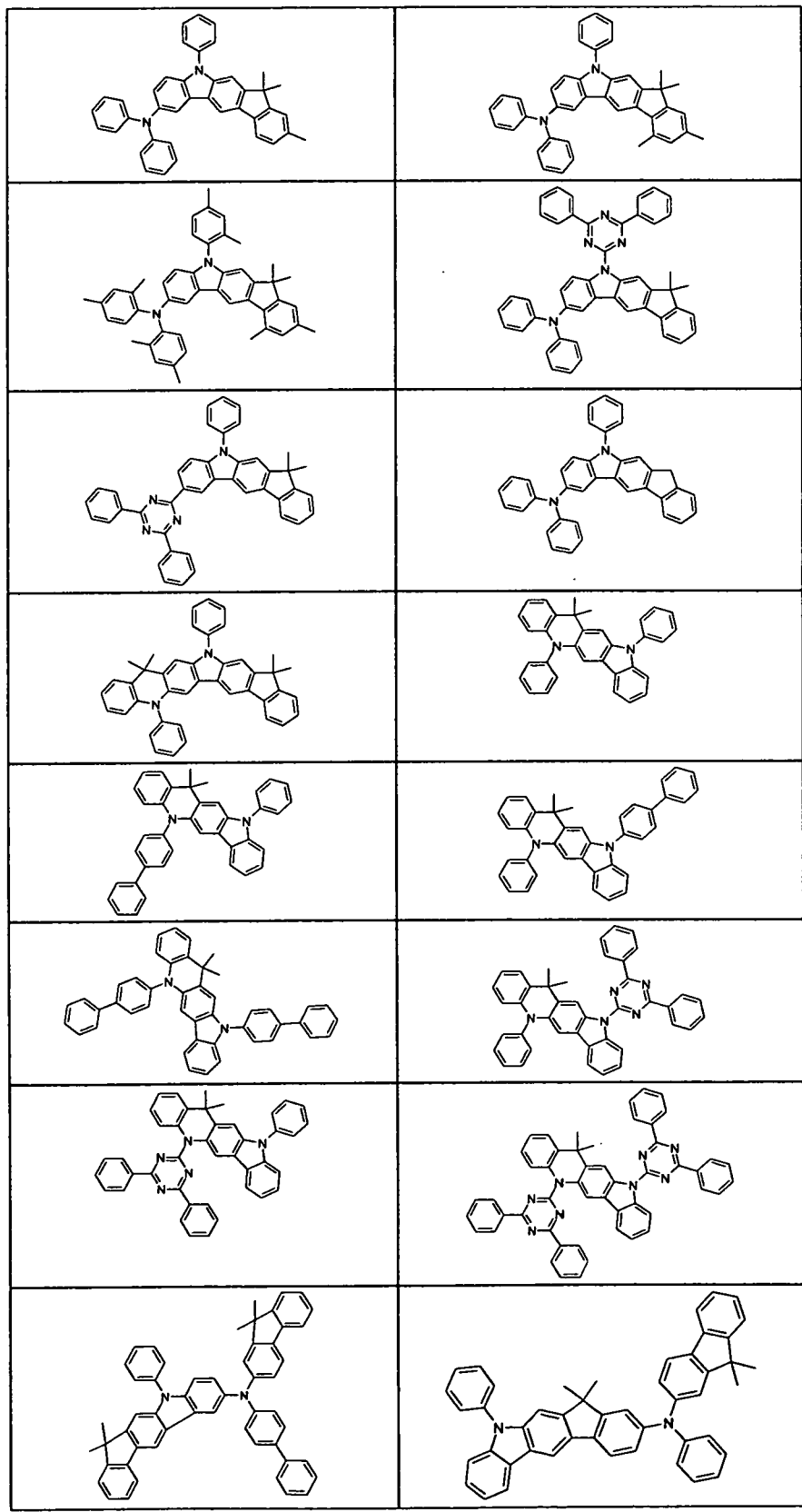


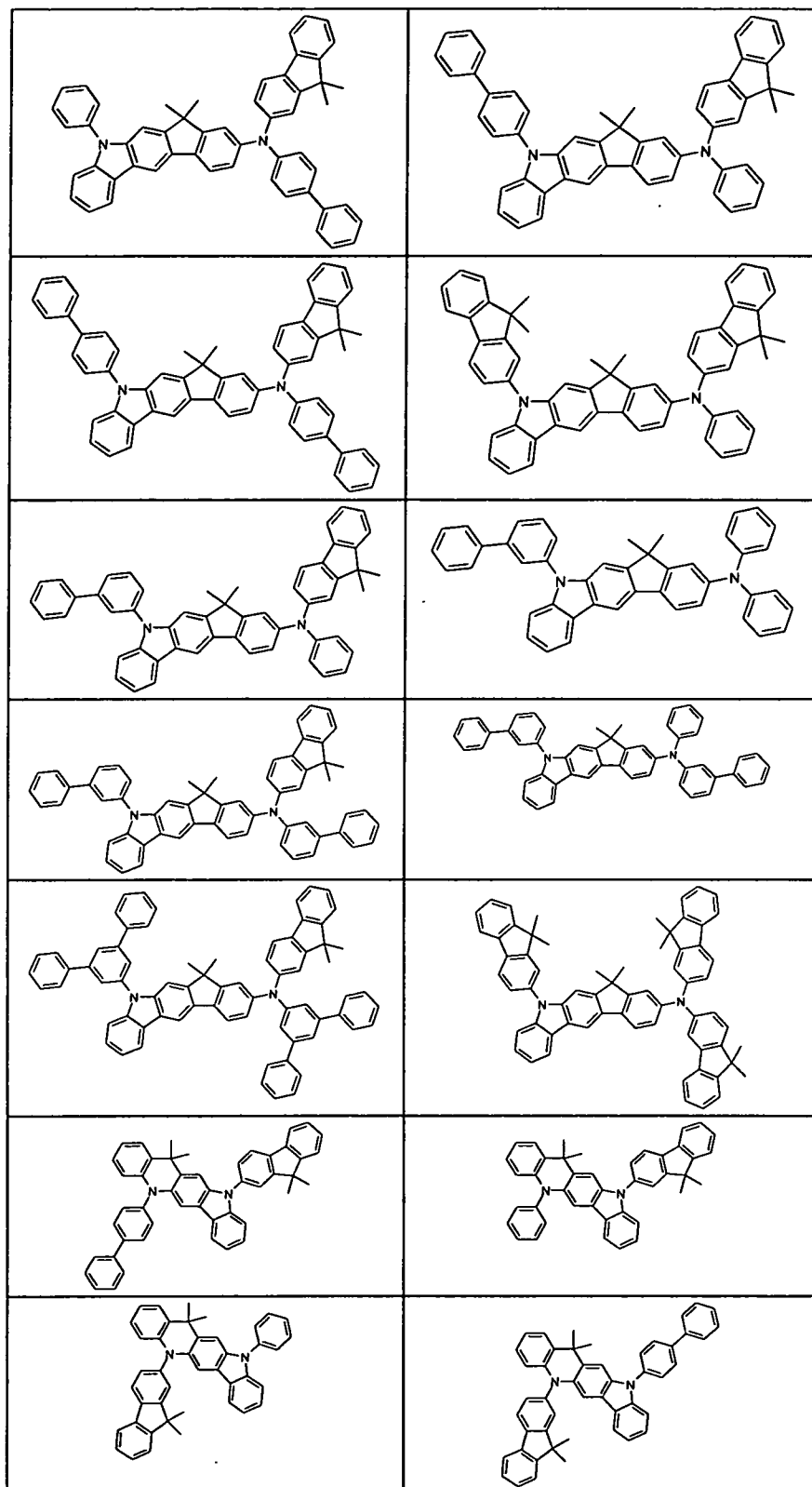


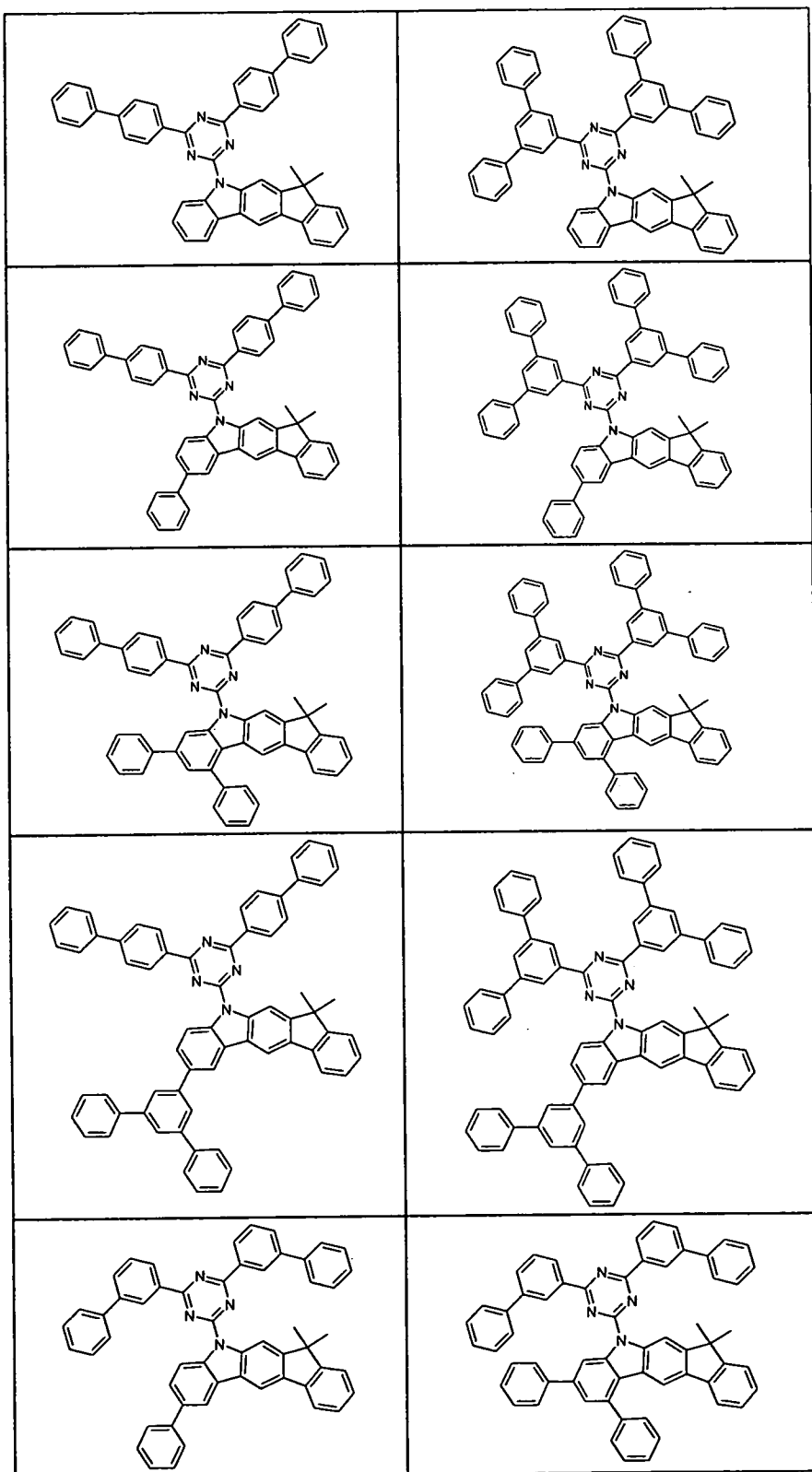


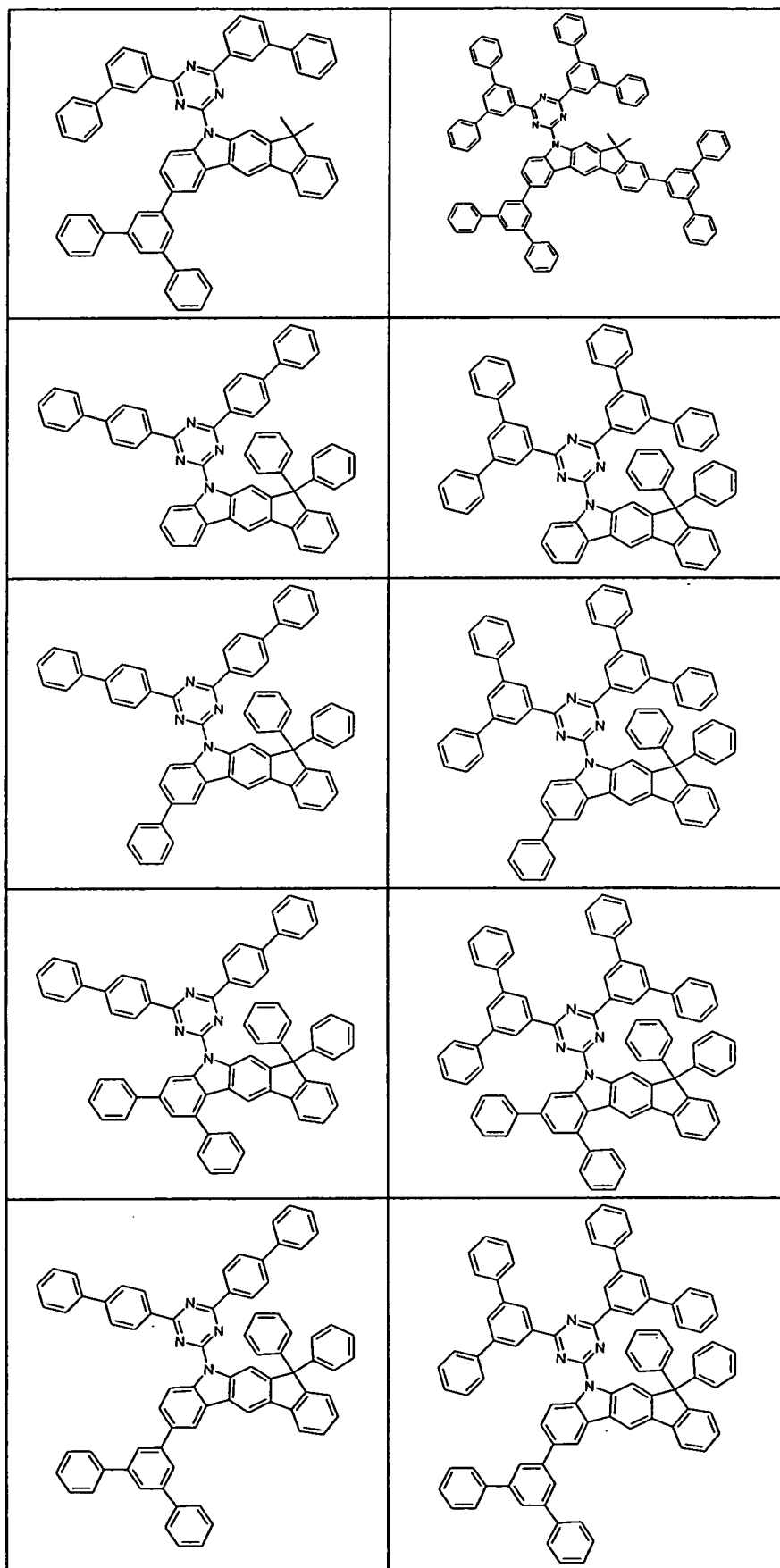


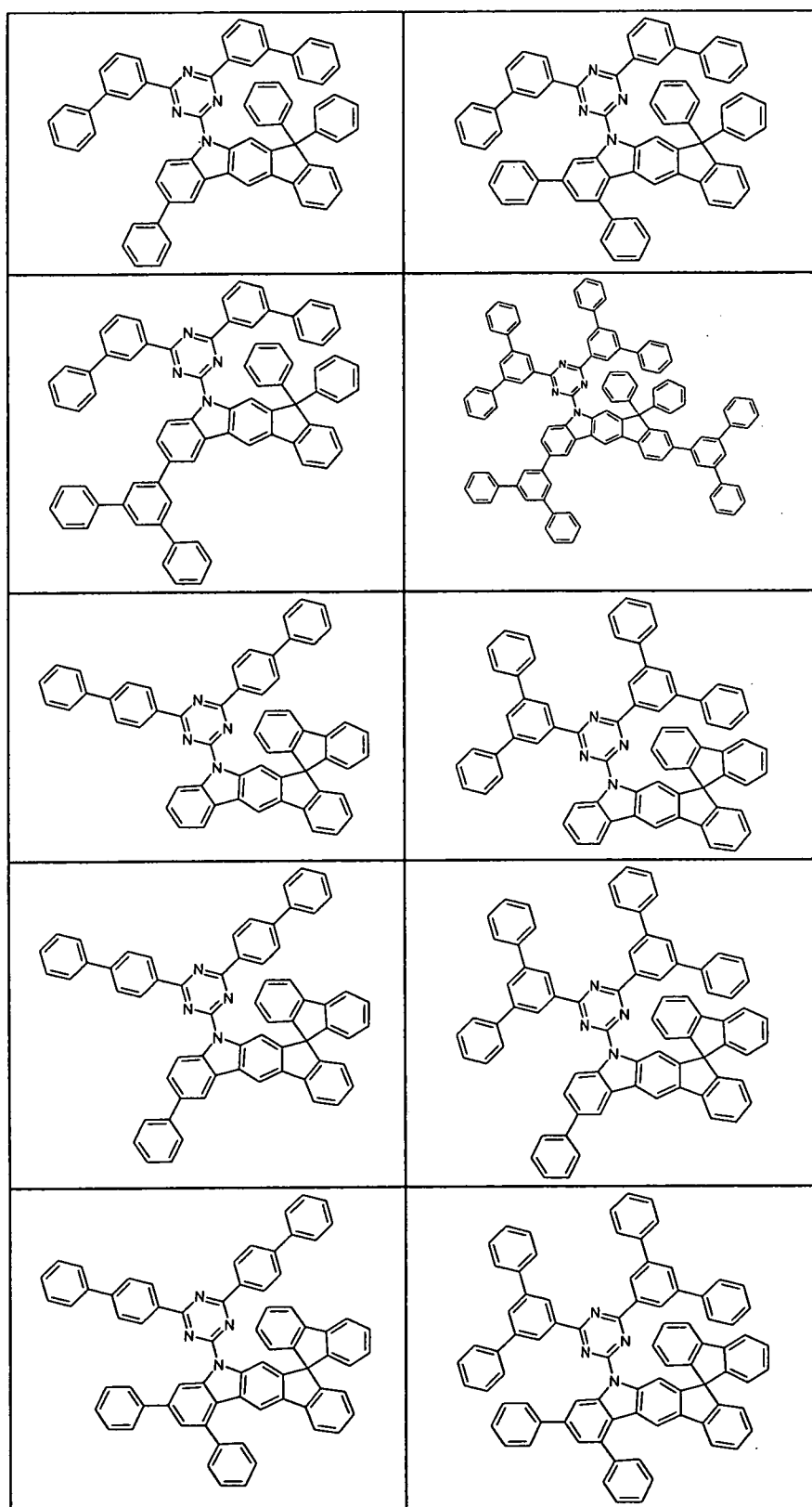


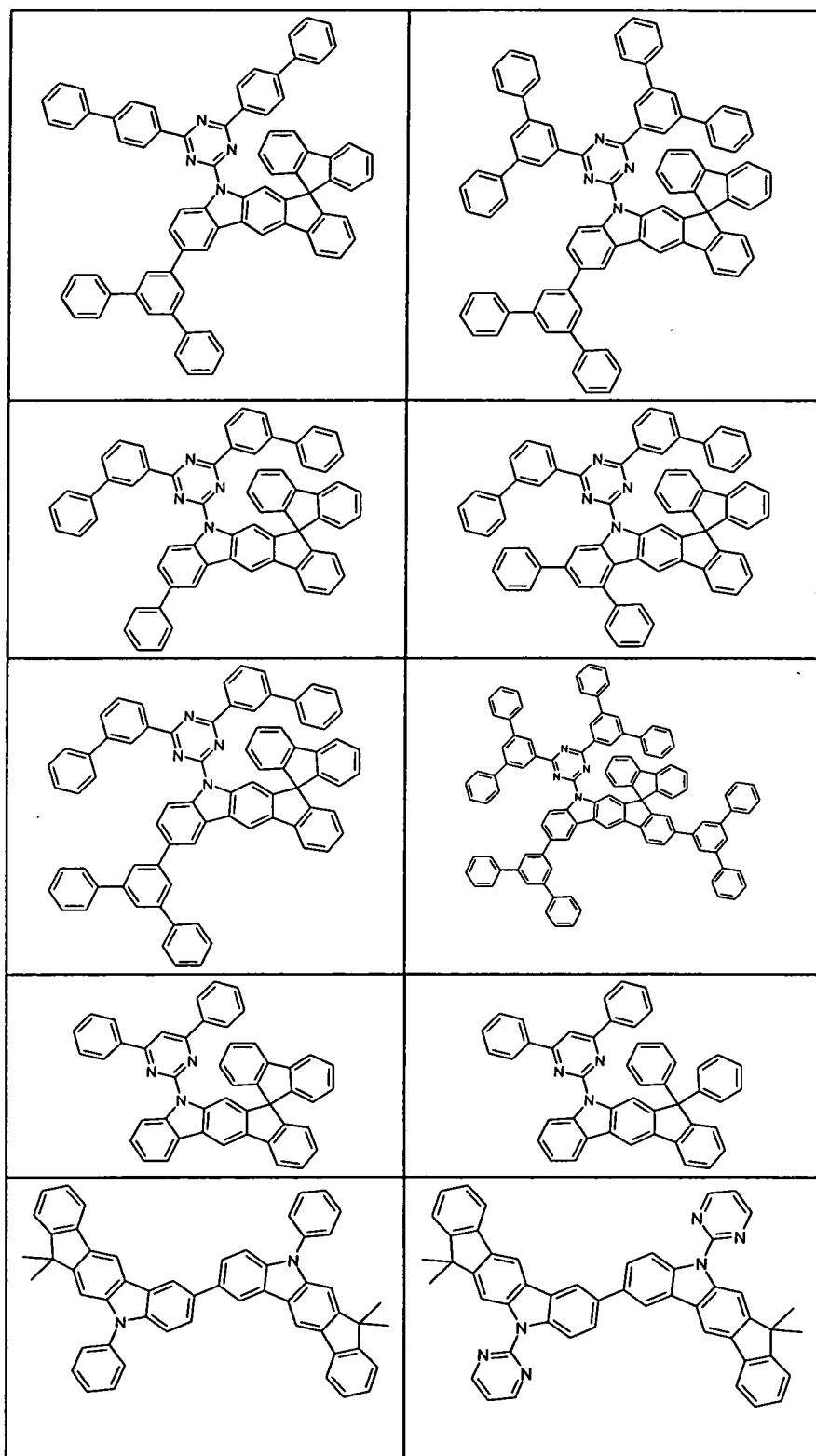


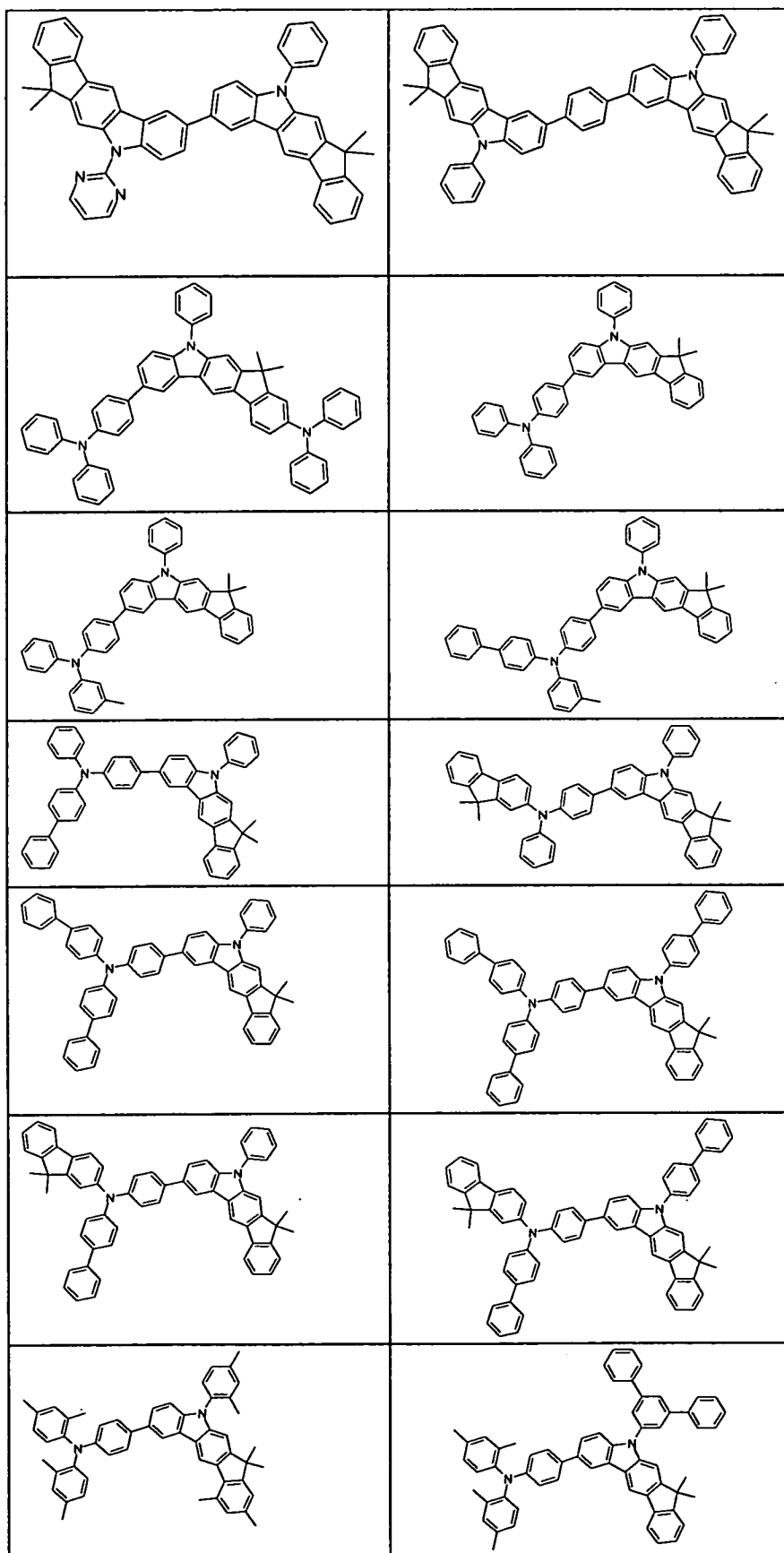


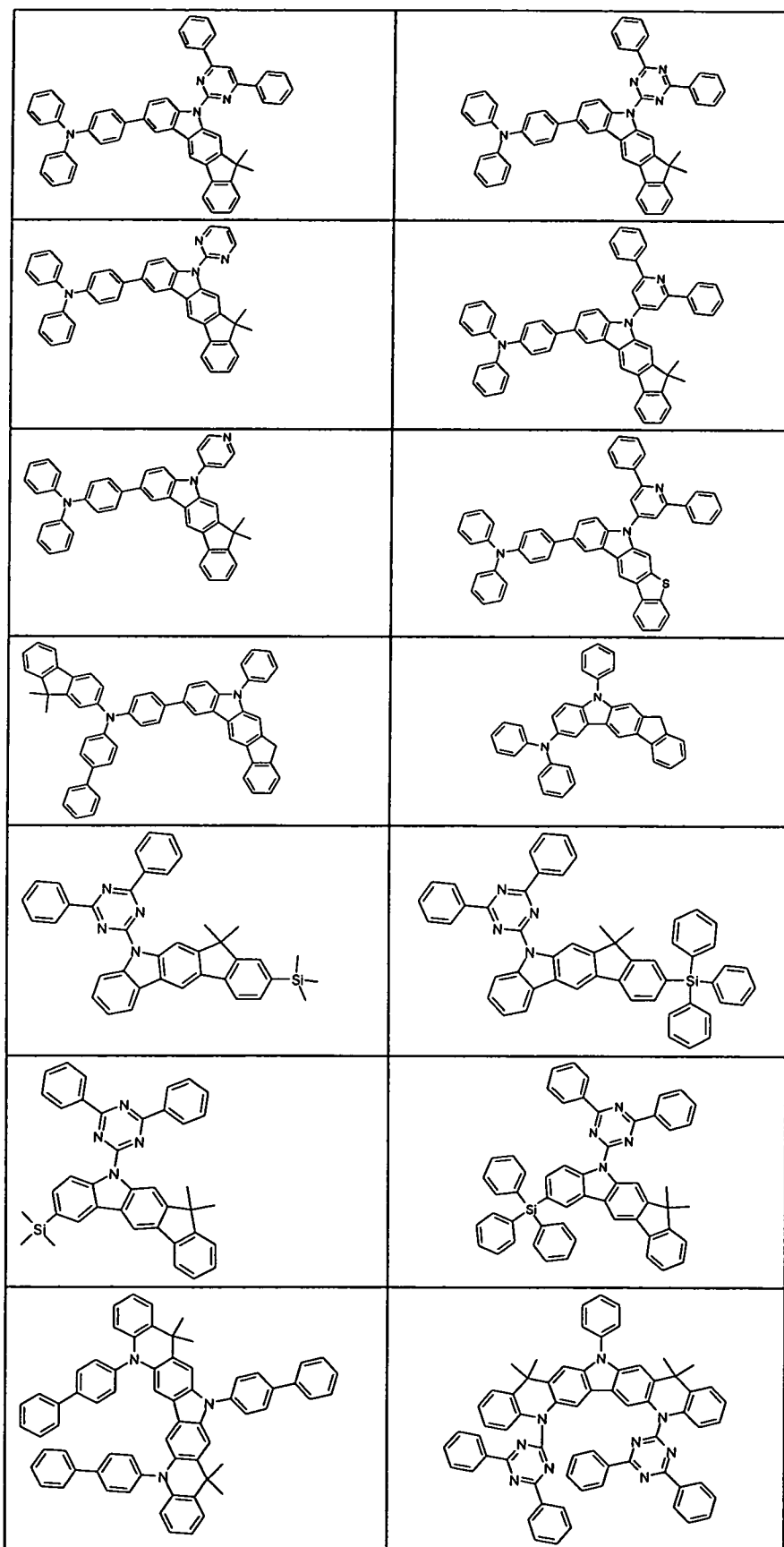


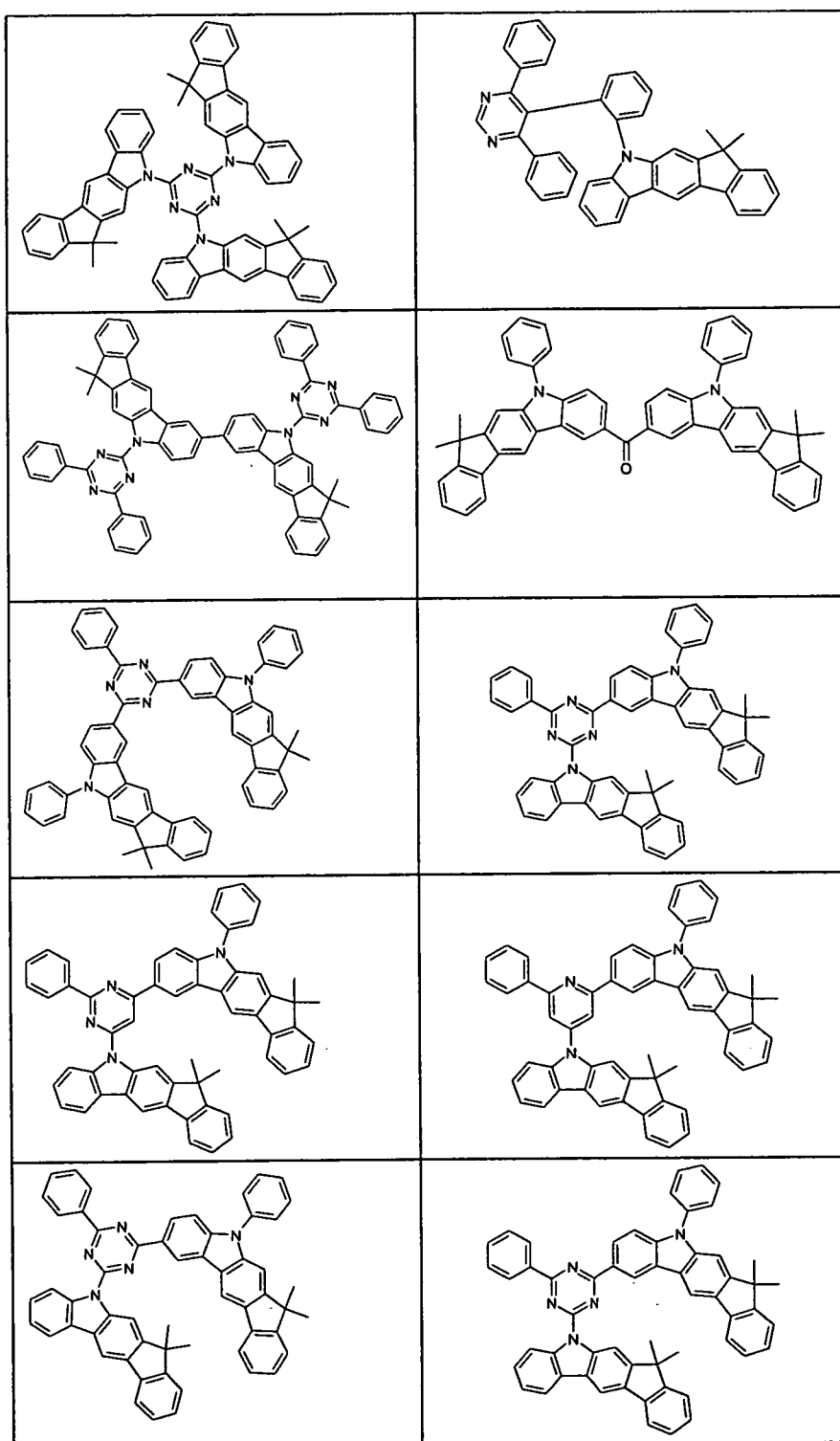


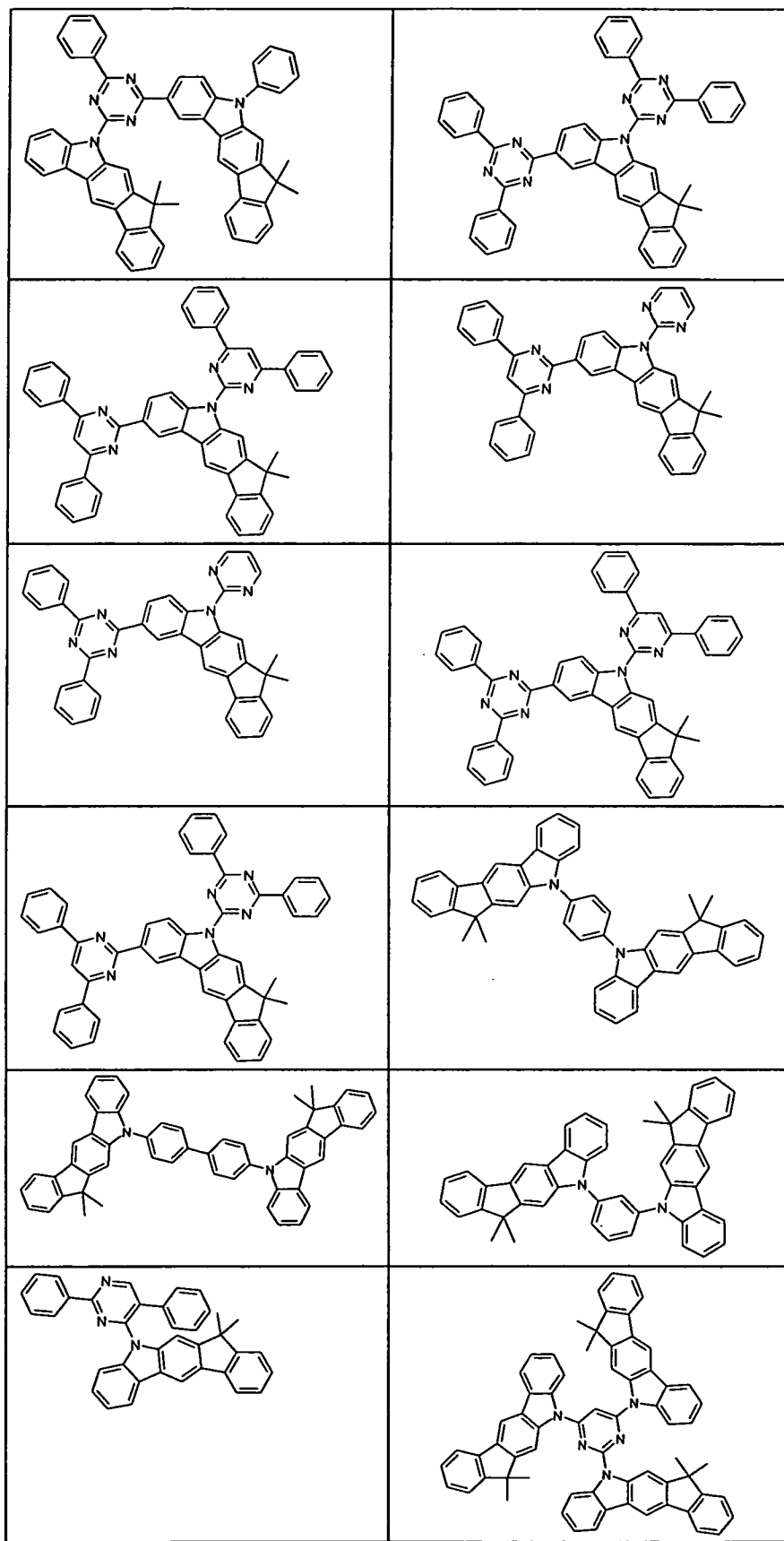


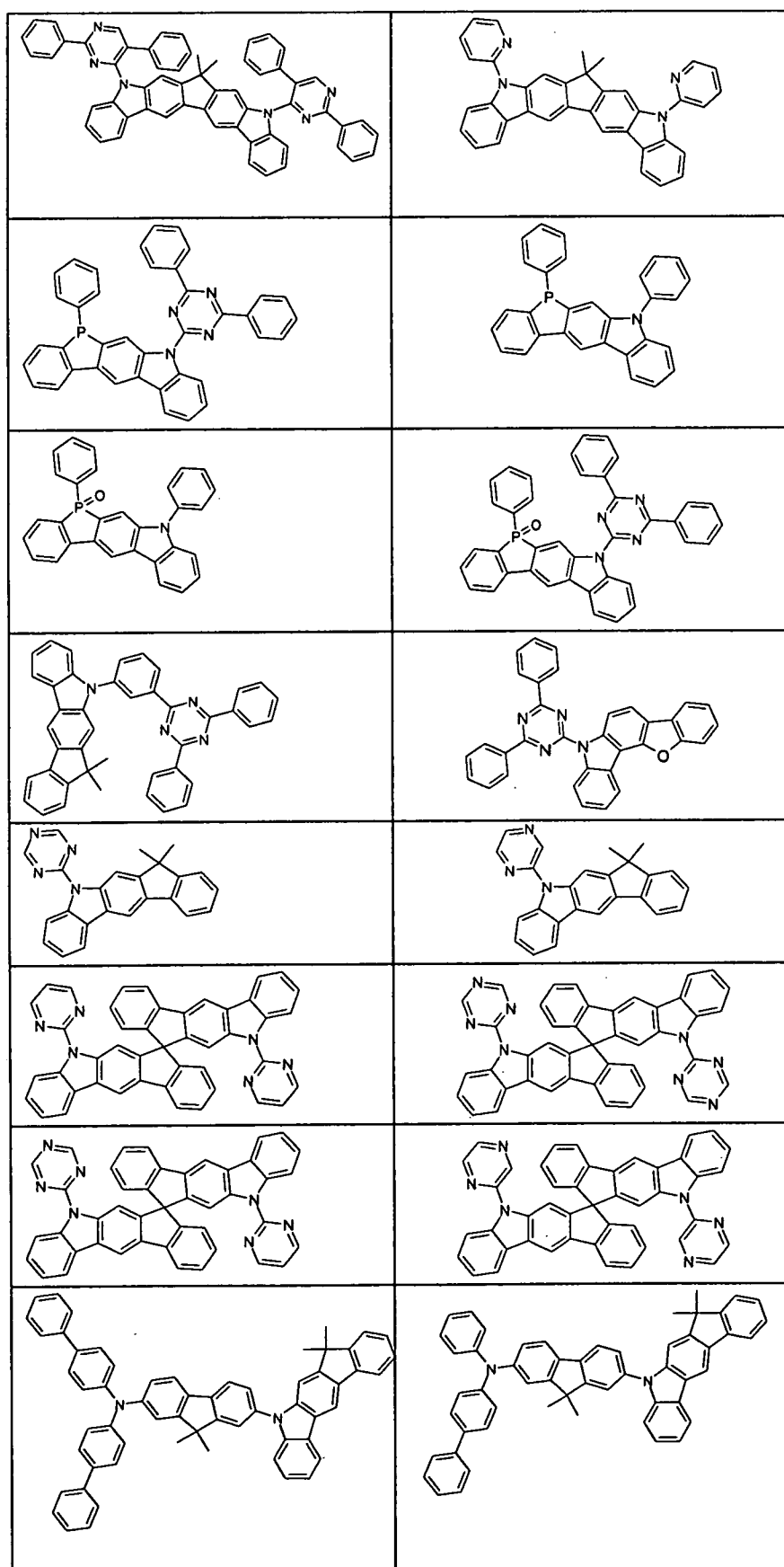


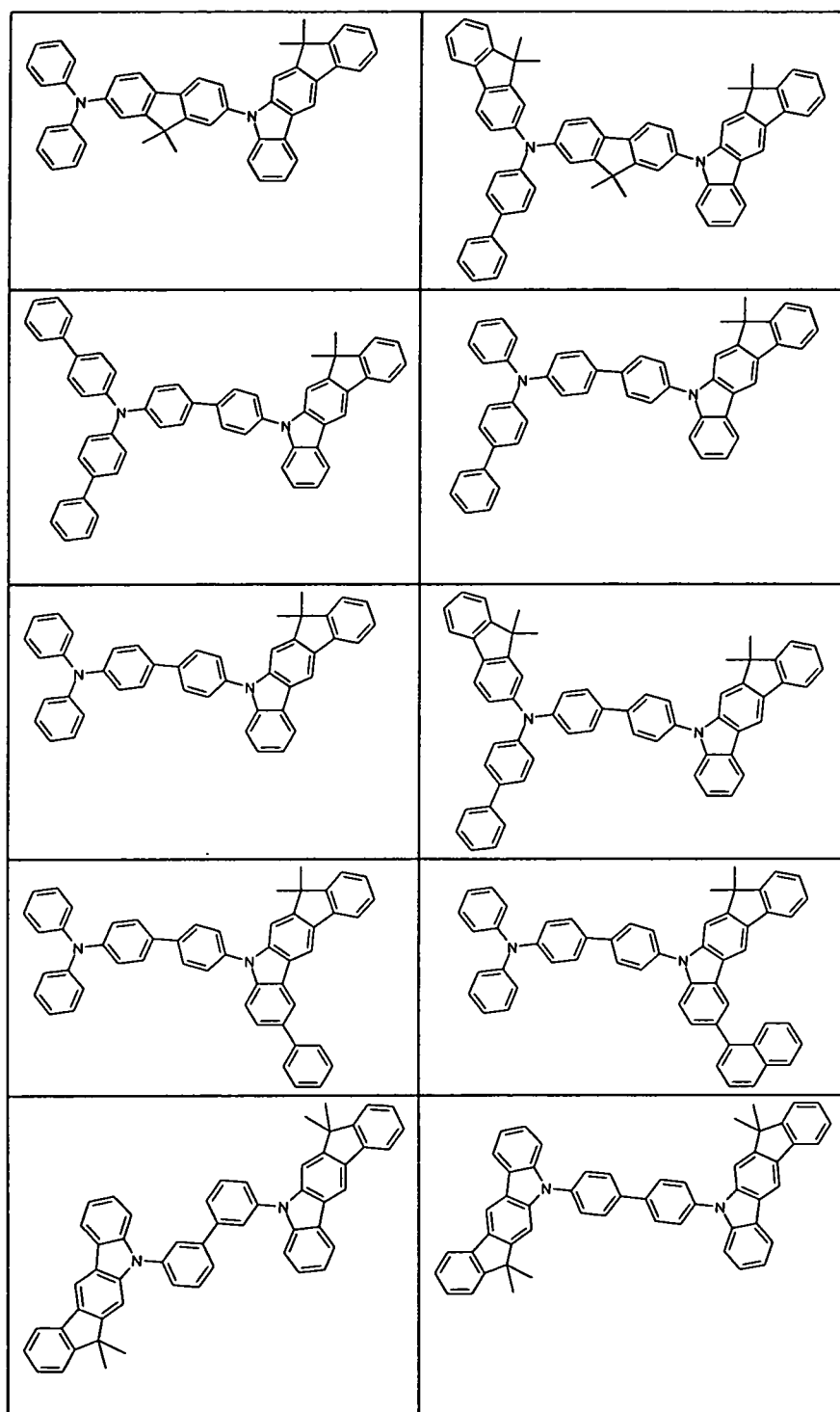


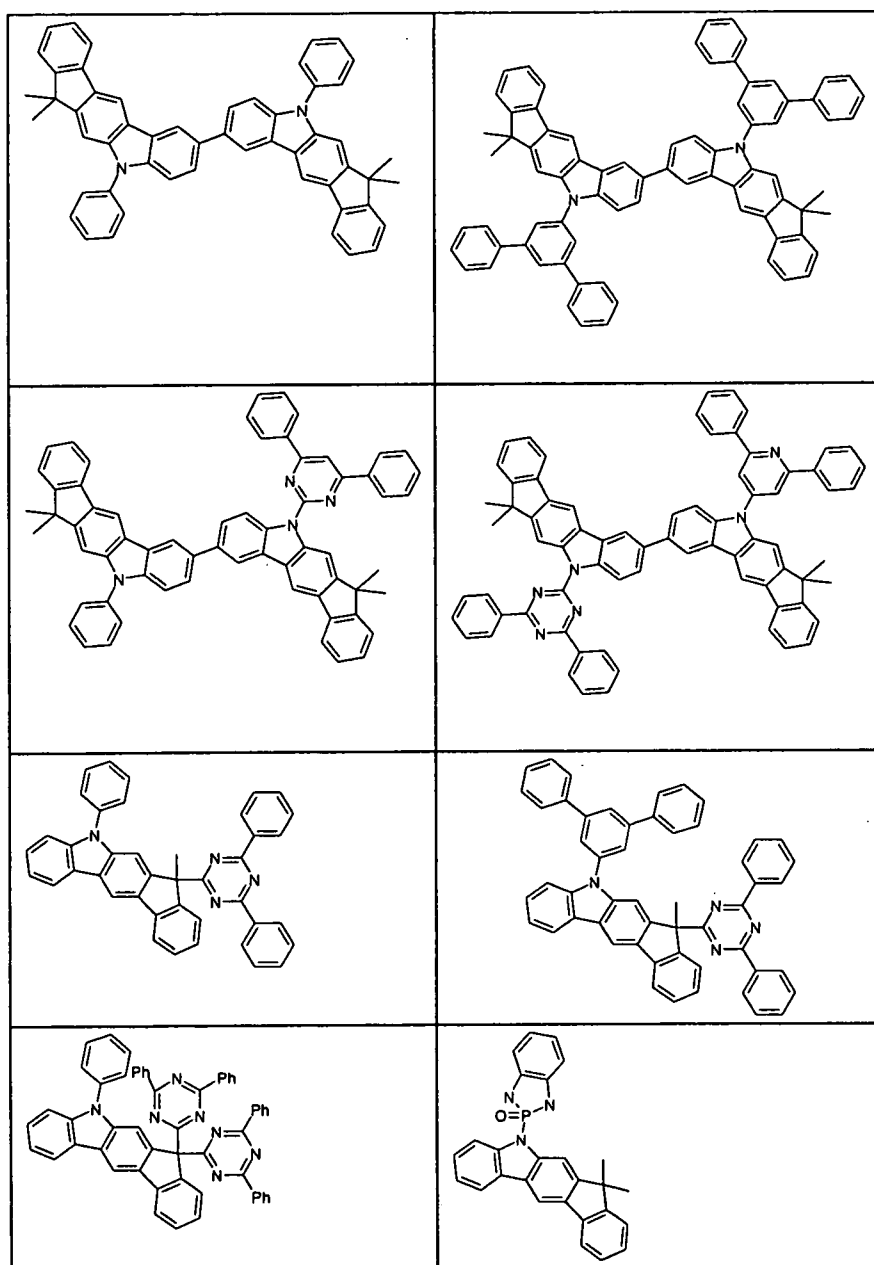










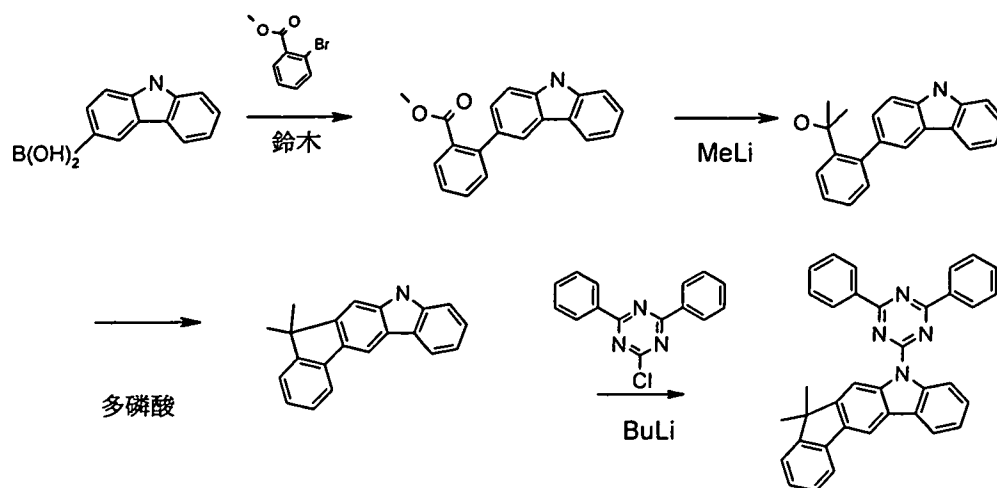


根據本發明的化合物可以熟習此技藝者已知的合成步驟製備，諸如溴化作用、鈴木（Suzuki）偶合、哈特維-布希沃德（Hartwig-Buchwald）偶合等。含有氮原子做為橋連原子的式（1）化合物的合成法概括地來說顯示於以下流程 1 至 6 中。

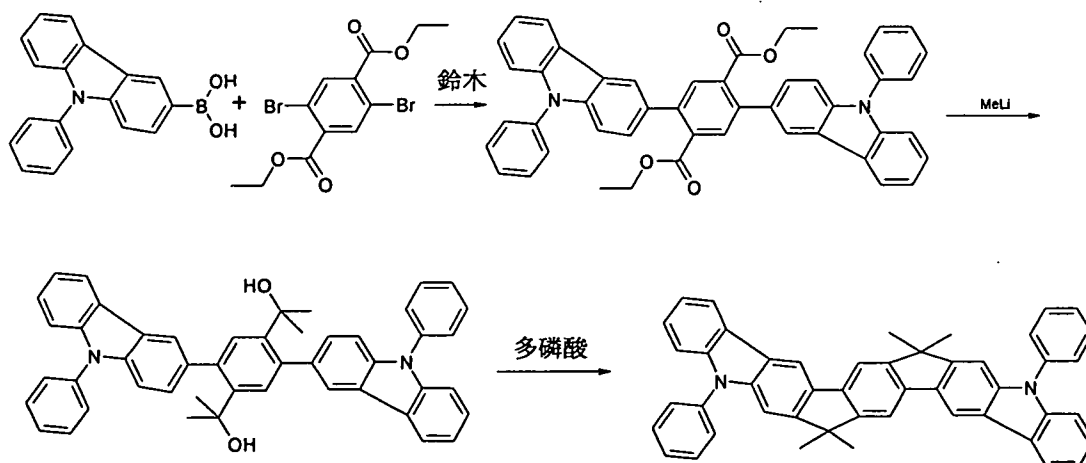
可使用例如（9-苯基-9H-咪唑-3-基）硼酸（Synlett, 2006, 17, 2841-2845）、對-胺基聯苯（J. Am. Chem. Soc.

2008, 130(32), 10512-10514) 及 2-溴-9,9-二甲芴 (Synlett, 2006, 5, 737-740) 做為起始點：

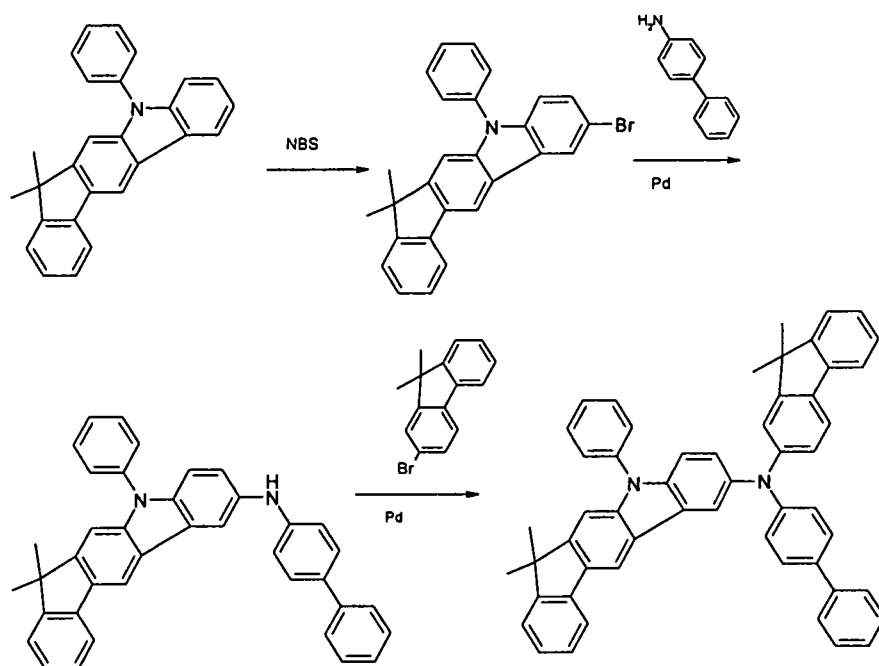
流程1：



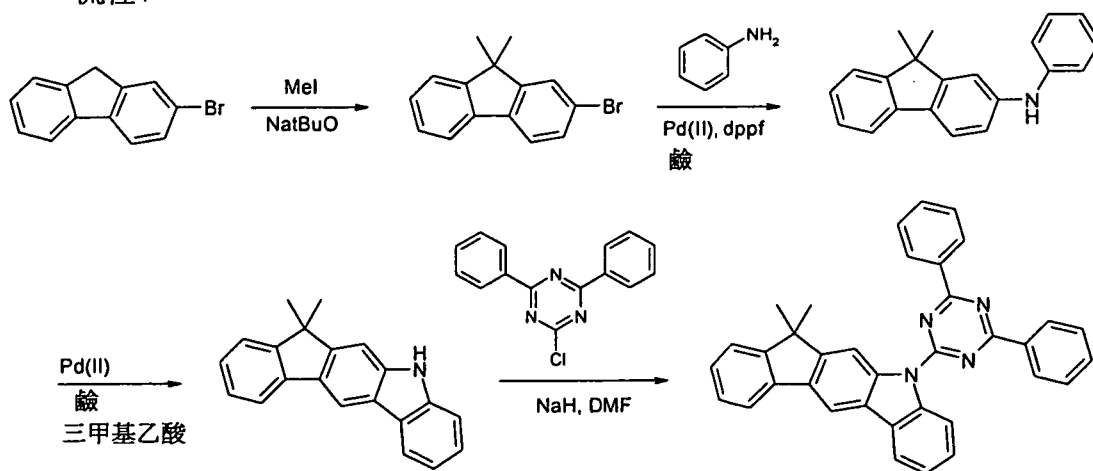
流程2：



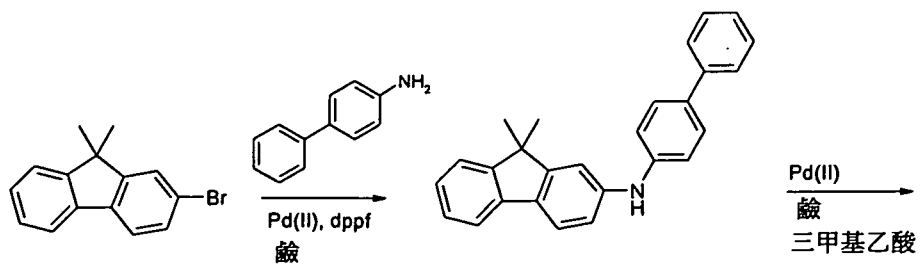
流程3：

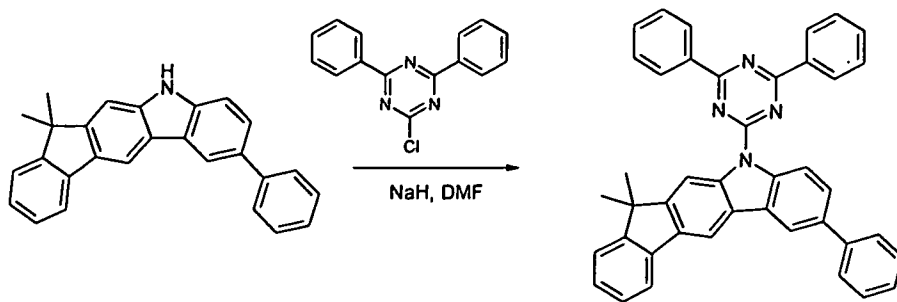


流程4：

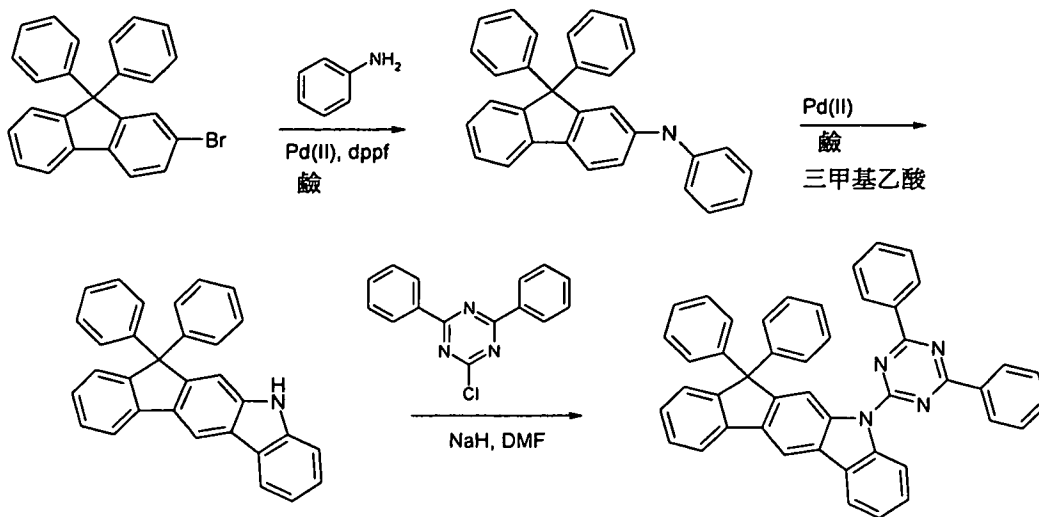


流程5：



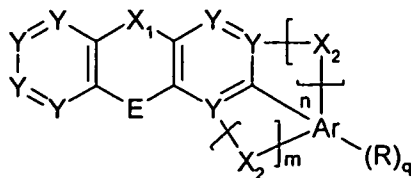


流程6：



根據本發明的實例化合物亦可以類似於流程 1 至 6 中所示之合成法以不同的取代基合成。例如，可使用苯基、聯苯、聯三苯、萘基、吡啶基、嘧啶基、蔥基及類似物代替三吡取代基做為在氮上的取代基。

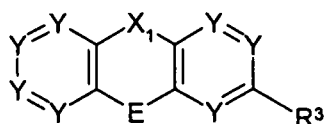
本發明另外關於一種製備通式 (1) 化合物的方法：



式 (1)

其中所使用的符號及下標具有上述所指示之意義，該方法係以下列步驟為特徵：

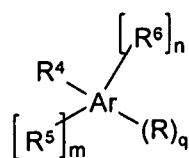
a) 將式 (I) 化合物：



式 (II)

其中 R^3 為反應性脫離基，較佳地選自溴、碘、氯、硼酸、硼酸酯、甲苯磺酸酯或三氟甲磺酸酯，

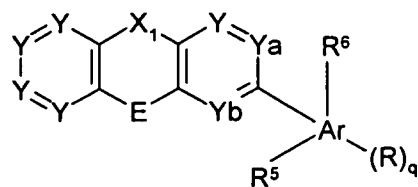
與式 (II) 化合物反應，



式 (III)

其中 R^4 為反應性脫離基，較佳地選自溴、碘、氯、硼酸、硼酸酯、甲苯磺酸酯或三氟甲磺酸酯，或反應性官能基，例如胺， R^5 及 R^6 彼此各自獨立適合於形成橋 X_2 ， n 及 m 彼此各自獨立為 0 或 1，其中 $n+m$ 大於或等於 1，

以形成式 (III) 化合物：



式 (III)

，及

b) 橋 X_2 係藉由 Y_a 及 / 或 Y_b 與 R^5 及 / 或 R^6 之間適合的環閉合反應及隨意地在 X_1 及 / 或 X_2 上的後續取代而形成，以形成式 (1) 化合物。

式 (1) 化合物可用於電子裝置中，特別於有機電發光裝置中。化合物的確實用途在此取決於取代基的確實結

構。

本發明因此另外關於式(1)化合物在電子裝置中的用途。

在本發明較佳的具體例中，將式(1)化合物用於發光層中，較佳地用在與至少一種另一化合物的混合物中。較佳的是在混合物中的式(1)化合物為基質材料。

在本發明較佳的具體例中，式(1)化合物因此被用做為摻雜劑(較佳為磷光摻雜劑)的基質材料(主體材料)。在此特別佳的是式(1)化合物被用做為有機電發光裝置中之摻雜劑的基質材料。

有機電發光裝置為包含陽極、陰極及至少一層排列在陽極與陰極之間的發光層。另外，可有一或多層電子傳輸層及一或多層電洞傳輸層的存在。根據本發明的有機電發光裝置包含至少一層介於陽極與陰極之間的層，其包含式(1)化合物例如做為基質材料、電洞傳輸材料或電子傳輸材料。基質材料較佳地包含發光化合物。在此情況中，該層為包含至少一種發光體(較佳為發磷光體)及至少一種上述式(1)化合物的發光層。

在本發明另一較佳的具體例中，有機電發光裝置亦可包含複數個發光層，其中至少一個發光層包含至少一種式(1)化合物及至少一種發光體，較佳為發磷光體。

本發明因此另外亦關於做為基質材料的一或多種式(1)化合物與一或多種摻雜劑(特別為發光化合物)之混合物。

做為基質材料的式(1)化合物與用在發光層中的發光體之混合物較佳地包含以發光體與基質材料的總混合物為基準計介於99與50體積%，較佳為介於98與50體積%，特別佳為介於97與60體積%，特別為介於95與85體積%之間的式(1)化合物。混合物對應地包含以發光體與基質材料的總混合物為基準計介於1與50體積%，較佳為介於2與50體積%，特別佳為介於3與40體積%，特別為介於5與15體積%之間的發光體。

另外亦優先選擇使用複數個基質材料做為混合物，其中一種基質材料係選自式(1)化合物。可與式(1)化合物組合使用的更多適合的基質材料為例如酮、氧化膦、亞砷及砷(例如，依照WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或未公開之申請案DE 102008033943.1)、三芳基胺(例如，NPB)、咪唑衍生物(例如，CBP(N,N-雙咪唑基聯苯)或在WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527或WO 2008/086851中所揭示之咪唑衍生物)、吡啶並咪唑衍生物(例如，依照WO 2007/063754或WO 2008/056746)、氮雜咪唑(例如，依照EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160)、雙極性基質材料(例如，依照WO 2007/137725)、矽烷(例如，依照WO 2005/111172)、氮雜硼烷或硼酸酯(例如，依照WO 2006/117052)、三吡啶衍生物(例如，依照未公開之申請案DE 102008036982.9、WO 2007/063754、

WO 2008/056746 或 WO 2010/015306) 或鋅錯合物 (例如, 依照 EP 652273 或 WO 2009/062578)。

在本發明更佳的具體例中, 根據本發明的化合物與兩種發磷光體一起使用。在較短波長下發光的發光體在此適任為在較長波長下發光的發光體之共基質。因此, 例如根據本發明的化合物可與發綠磷光體及發紅磷光體一起使用。

就本發明的目的而言, 磷光意謂著來自相對高自旋多重性 (亦即自旋態 > 1) 之激發態 (特別從激發三重態) 的發光。就本發明的目的而言, 所有的發光過渡金屬錯合物及發光鐳系錯合物 (特別為所有的鈦、鉑及銅錯合物) 被視為是磷光化合物。

適合的磷光化合物 (=三重發光體) 特別為在適合的激發時發光 (較佳在可見光區域內) 且另外含有至少一個具有原子數大於 20, 較佳為大於 38 及少於 84, 特別佳為大於 56 及少於 80 之原子 (特別為具有此原子數之金屬) 的化合物。所使用之發磷光體較佳為含有銅、鉬、鎢、銻、釷、鐵、銻、鈹、鉑、銀、金或鎘的化合物, 特別為含有鈦、鉑或銅的化合物。

上述發光體的實例係由申請案 WO 00/70655、WO 01/41512, WO 02/02714、WO 02/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373、US 2005/0258742 及 WO 2009/146770 披露。亦適合的是依照未公開之申請案 DE 102008036247.6

、 DE 102008048336.2、 DE 102008057050.8、
DE 102008057051.6、 DE 102009007038.9、
DE 102009011223.5 及 DE 102009013041.1 的錯合物。通常依照先前技藝用於磷光 OLED 且為熟習有機電發光裝置領域之技藝者已知的所有磷光錯合物皆適合，且熟習此技藝者能夠不以本發明的步驟使用更多的磷光錯合物。

在本發明的另一具體例中，式（1）化合物被用做為電子傳輸材料。在此情況中特別佳的化合物為含有缺電子之雜芳族基團（例如，三吡啶或嘧啶）的式（1）化合物。缺電子之雜芳族基團為例如含有至少 2 個雜原子之 5-員雜芳族環，或 6-員雜芳族環。

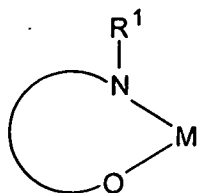
若式（1）化合物被用做為有機電發光裝置中的電子傳輸材料時，彼等亦可依照本發明與有機鹼金屬化合物組合使用。“與有機鹼金屬化合物組合”在此意謂式（1）化合物及鹼金屬化合物係呈在一層中的混合物形式或分開出現在兩個連續層中。

在本發明較佳的具體例中，式（1）化合物及有機鹼金屬化合物係呈在一層中的混合物形式。

就本發明的目的而言，意欲以有機鹼金屬化合物意謂著含有至少一個鹼金屬（亦即鋰、鈉、鉀、銣或銫）的化合物，且其另外含有至少一個有機配位基。

適合的有機鹼金屬化合物為例如在 WO 2007/050301、WO 2007/050334 及 EP 1144543 中所揭示之化合物。將該等以參考方式併入本申請書中。

較佳的有機鹼金屬化合物為下列的式 A 化合物：

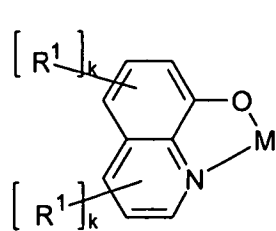


式 A

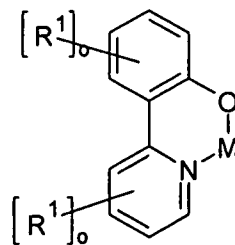
其中 R^1 具有與上述相同的意義，曲線代表二或三個原子及鏈且必須與 M 鍵結形成 5-或 6-員環，其中該等原子亦可被一或多個 R^1 基取代，且 M 代表選自鋰、鈉、鉀、銣及銱之鹼金屬。

式 A 錯合物在此有可能呈單體形式，如上所描述，或呈聚集體形式，例如包含兩個鹼金屬離子及兩個配位基、四個鹼金屬離子及四個配位基、六個鹼金屬離子及六個配位基，或其他的聚集體。

較佳的式 A 化合物為下列的式 B 及 C 化合物：



式 B

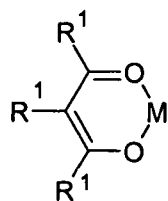


式 C

其中 k 等於 0、1、2 或 3 及 o 等於 0、1、2、3 或 4，且所使用的其他符號具有上述意義。

更多較佳的有機鹼金屬化合物為下式的式 D 化合物

:



式 D

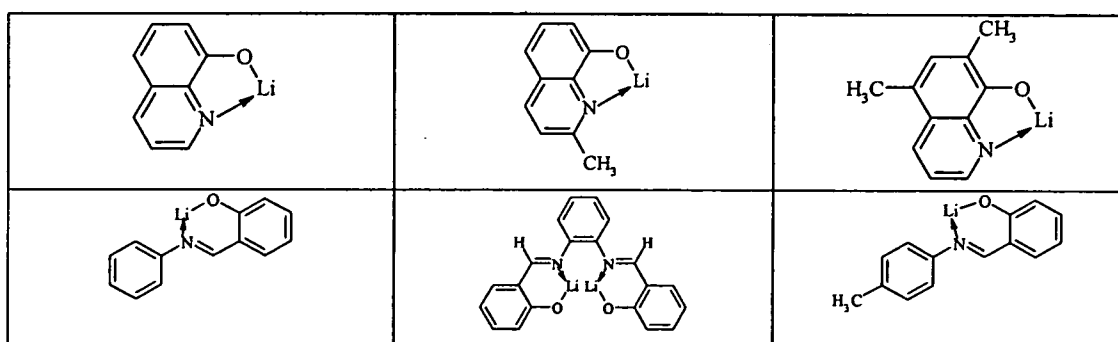
其中所使用的符號具有與上述相同的意義。

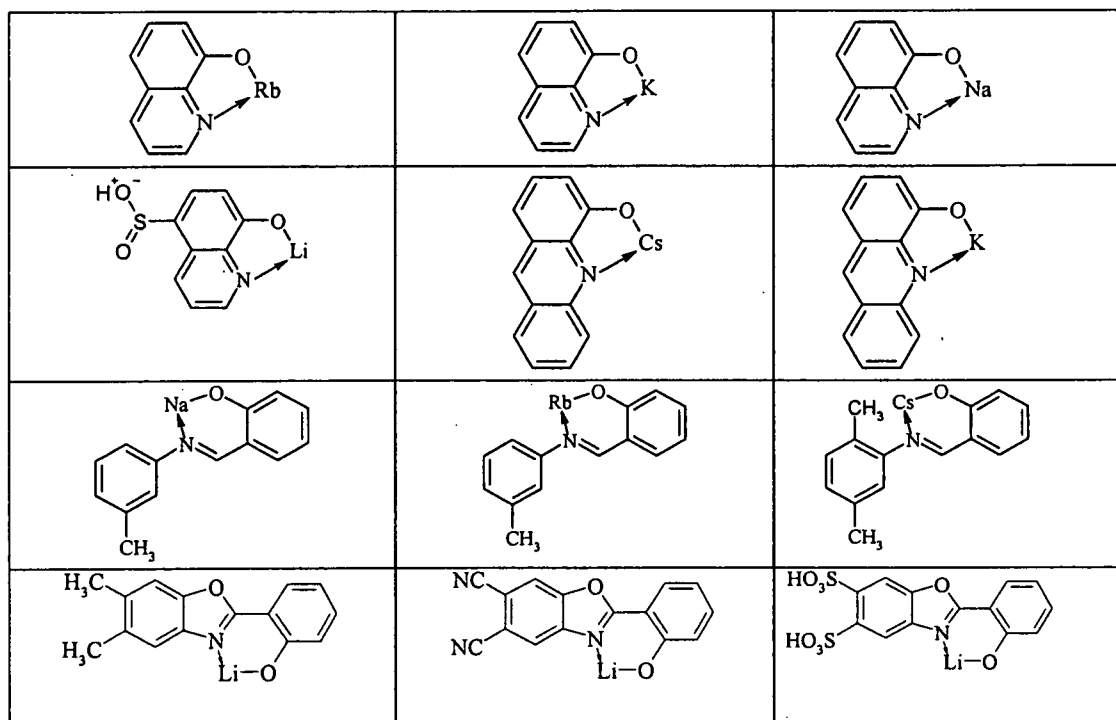
鹼金屬較佳地選自鋰、鈉及鉀，特別佳為鋰及鈉，最特別佳為鋰。

特別優先選擇為式 B 化合物，特別為其中 M=鋰。此外，下標 k 最特別佳 = 0。化合物因此最特別佳為未經取代之喹啉鋰。

有機電發光裝置最特別佳地包含含有缺電子雜芳族基團之式 (1) 化合物與式 B 之有機鹼金屬化合物（較佳為其中 M=鋰，特別為未經取代之喹啉酸鋰）之混合物。

適合的有機鹼金屬化合物之實例為下列表中所示之結構。





若式 (1) 化合物及有機鹼金屬化合物係呈混合物形式時，式 (1) 化合物對有機鹼金屬化合物之比率較佳為 20 : 80 至 80 : 20，特別佳為 30 : 70 至 70 : 30，最特別佳為 30 : 70 至 50 : 50，特別為 30 : 70 至 45 : 55。

若式 (1) 化合物及有機鹼金屬化合物係呈混合物形式時，則此電子傳輸層之層厚度較佳為介於 3 與 150 奈米之間，特別佳為介於 5 與 100 奈米之間，最特別佳為介於 10 與 60 奈米之間，特別為介於 15 與 40 奈米之間。

若式 (1) 化合物及有機鹼金屬化合物係呈兩個連續層的形式時，則包含式 (1) 化合物的層之層厚度較佳為介於 3 與 150 奈米之間，特別佳為介於 5 與 100 奈米之間，最特別佳為介於 10 與 60 奈米之間，特別為介於 15 與 40 奈米之間。包含有機鹼金屬化合物且排列在包含式 (1) 化合物之層與陰極之間的層之層厚度較佳為介於 0.5 與

20 奈米之間，特別佳為介於 1 與 10 奈米之間，最特別佳為介於 1 與 5 奈米之間，特別為介於 1.5 與 3 奈米之間。

此外，特別佳的是式 (1) 化合物被用做為電洞傳輸材料及 / 或做為電洞注射材料。此係若至少一個 R 代表經取代或未經取代之芳基胺及 / 或若 X_1 及 / 或 X_2 代表 $N(R^1)$ 時特別適合。化合物於是較佳地被用於電洞傳輸層及 / 或電洞注射層中。就本發明的目的而言，電洞注射層為與陽極直接相鄰的層。就本發明的目的而言，電洞傳輸層為介於電洞注射層與發光層之間的層。若式 (1) 化合物被用作電洞傳輸或電洞注射材料時，可能較佳的是將其與電子受體化合物摻雜，例如與 F_4 -TCNQ (四氟四氰醌二甲烷) 或與如 EP 1476881 或 EP 1596445 中所述之化合物。

若式 (1) 化合物被用做為電洞傳輸層中的電洞傳輸材料時，以 100% 之比例亦可能較佳，亦即使用此化合物做為純材料。

亦特別優先選擇以式 (1) 化合物用於與包含六氮雜亞聯三苯衍生物，特別為六氰基氮雜亞聯三苯之層 (例如，依照 EP 1175470) 組合的電洞傳輸層或注射層中。因此，優先選擇例如看來如下的組合：陽極 - 六氮雜亞聯三苯衍生物 - 電洞傳輸層，其中電洞傳輸層包含一或多種式 (1) 化合物。同樣有可能在此結構中使用複數個連續的電洞傳輸層，其中至少一個電洞傳輸層包含至少一種式 (1) 化合物。另一較佳的組合看來如下：陽極 - 電洞傳輸層 - 六氮雜亞聯三苯衍生物 - 電洞傳輸層，其中兩個電洞傳

輸層中至少一個包含一或多種式(1)化合物。同樣有可能在此結構中使用複數個連續的電洞傳輸層代替一個電洞傳輸層，其中至少一個電洞傳輸層包含至少一種式(1)化合物。

本發明另外關於包含至少一種如上述定義之式(1)化合物的電子裝置。

電子裝置較佳地選自有機電發光裝置(OLED)、有機場效電晶體(O-FET)、有機薄膜電晶體(O-TFT)、有機發光電晶體(O-LET)、有機積體電路(O-IC)、有機太陽能電池(O-SC)、有機場驟滅裝置(O-FQD)、發光電化學電池(LEC)、有機光感受器、有機雷射二極體(O-雷射)或光激升雷射。

就本發明的目的而言，較佳的是根據本發明的式(1)化合物被用做為電子裝置中的電洞傳輸層及/或電洞注射層中的電洞傳輸材料及式(1)化合物在該等層中隨意地與電子受體化合物摻雜。上述之優先選擇亦特別適用於此。

就本發明的目的而言，另外較佳的是根據本發明的式(1)化合物被用做為電子裝置中的電子傳輸層中的電子傳輸材料及/或做為電洞阻隔層中的電洞阻隔材料及/或做為發光層中的基質材料，特別做為三重基質材料。上述之優先選擇亦特別適用於此。

本發明又另外關於包含至少一種如上述定義之式(1)化合物的有機電子裝置，特別為包含陽極、陰極及至少

一個發光層的有機電發光裝置，其特徵在於至少一個可為發光層或另外的層之有機層包含至少一種如上述定義之式（1）化合物。

另外優先選擇為有機電發光裝置，其特徵在於將複數種發光化合物用於相同的層或不同的層中。該等化合物特別佳地總計具有複數個介於 380 奈米與 750 奈米之間的最大發光，整體上造成發白光，亦即除了式（1）化合物以外，還使用至少另一種能夠發螢光或發磷光且發黃光、橘光或紅光的發光化合物。特別優先選擇為三層系統，至少一層包含式（1）化合物且其中層顯出發藍光、綠光及橘光或紅光（其基礎結構參見例如 WO 05/011013）。寬帶發光體可同樣被用於發白光 OLED。

陰極較佳地包含具有低功函數的金屬、金屬合金或包含各種金屬的多層化結構，諸如鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑷系元素（例如，Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm 等）。在多層化結構的情況中，除了該等金屬以外，亦可使用具有相對高功函數的更多金屬，諸如 Ag，在該情況中通常使用金屬的組合，諸如 Mg/Ag、Ca/Ag 或 Ba/Ag。同樣地優先選擇為金屬合金，特別為包含鹼金屬或鹼土金屬與銀的合金，特別佳為 Mg 與 Ag 的合金。可能亦較佳的是在金屬陰極與有機半導體之間導入具有高介電常數之材料的薄中間層。適合於此目的材料為例如鹼金屬或鹼土金屬氟化物，但亦為對應之氧化物或碳酸鹽（例如，LiF、Li₂O、CsF、Cs₂CO₃、BaF₂、MgO、NaF 等）。

亦可使用有機金屬化合物，諸如喹啉酸鋰。此層之層厚度較佳為介於 0.5 與 5 奈米之間。

陽極較佳地包含具有高功函數的材料。陽極較佳地具有相對於真空而大於 4.5 eV 之功函數。適合於此目的的材料一方面為具有高還原氧化電位之金屬，諸如 Ag、Pt 或 Au。另一方面，金屬/金屬氧化物電極（例如，Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x）亦可為較佳者。就一些應用而言，電極中至少一者必須為透明或部分透明，俾以能使有機材料照射（O-SC）或光線耦合輸出（OLED/PLED、O-雷射）。較佳的陽極材料在此為導電性混合型金屬氧化物。特別優先選擇為氧化銦錫（ITO）或氧化銦鋅（IZO）。另外優先選擇為導電性摻雜型有機材料，特別為導電性摻雜型聚合物。

除了陰極、陽極及發光層以外，有機電發光裝置亦可包含更多層。該等層可為例如：電洞注射層、電洞傳輸層、電子阻隔層、激子阻隔層、電洞阻隔層、電子傳輸層、電子注射層及／或電荷產生層。然而，此時應指出每個該等層沒必要都存在。

另外優先選擇為有機電發光裝置，其特徵在於一或多層係以昇華法的方式塗覆，其中材料係藉由在真空昇華單元中在低於 10⁻⁵ 毫巴，較佳為低於 10⁻⁶ 毫巴之初壓力下以蒸氣沉積而塗覆。然而，應注意亦可以甚至更低的初壓力，例如低於 10⁻⁷ 毫巴。

同樣地優先選擇為有機電發光裝置，其特徵在於一或

多層係以 OVPD (有機蒸氣相沉積) 法或輔以載體-氣體昇華法的方式塗覆，其中材料係在介於 10^{-5} 毫巴與 1 巴之間的壓力下塗覆。此方法的特殊情況為 OVJP (有機蒸氣噴射印刷) 法，其中材料係經由噴嘴直接塗覆且因此結構化 (例如，M. S. Arnold 等人之 Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301)。

另外優先選擇為有機電發光裝置，其特徵在於一或多層係從溶液製造，諸如以旋轉塗佈或以任何所欲之印刷法方式，諸如網版印刷、快乾印刷、套版印刷、LITI (以光誘致熱成像，熱轉移印刷)、噴墨印刷或噴嘴印刷。可溶性式 (1) 化合物為就此目的所必要的。高溶解度可經由適合的化合物取代作用來達成。

有機電發光裝置亦可藉由從溶液塗覆一或多層且藉由蒸氣沉積法塗覆一或多個其他層而製成為混成系統。因此，例如有可能從溶液塗覆包含式 (1) 化合物及磷光摻雜劑的發光層且藉由真空蒸氣沉積法在頂層塗覆電洞阻隔層及/或電子傳輸層。包含式 (1) 化合物及磷光摻雜劑的發光層可同樣藉由真空蒸氣沉積法塗覆，且一或多個其他層可從溶液塗覆。另一選擇地或另外，亦有可能例如從溶液塗覆發光層且藉由真空蒸氣沉積法在頂層塗覆包含式 (1) 化合物 (隨意地與有機鹼金屬化合物組合) 的電子傳輸層。

該等方法通常為熟習此技藝者已知且可由其在沒有問題下應用於包含式 (1) 化合物的有機電發光裝置或上述

較佳的具體例。

本發明另外關於包含至少一種發磷光體及至少一種式(1)化合物的混合物。

本發明再另外關於式(1)化合物做為有機電發光裝置中的發磷光體之基質材料的用途。

將裝置對應地結構化(取決於應用而定)，配備有接觸點且最後以氣密封裝，因為此類型裝置的壽命在水及/或空氣的存在下戲劇性地縮短。

根據本發明的化合物在有機電發光裝置中使用時具有下列超越先前技藝之出乎意料的優點：

1. 與依照先前技藝的系統比較增加了對應裝置之功率效率。
2. 與依照先前技藝的系統比較增加了對應裝置之穩定性，特別從顯著較長的壽命證實。
3. 根據本發明的有機電發光裝置同時具有較低的操作電壓。
4. 根據本發明的有機電發光裝置具有非常高的效率。經改進之效率可歸因於從電子傳輸層至發射層中的經改進之電子注射。
5. 另外驚訝地發現在蒸氣沉積法中使用式(1)化合物時改進了根據本發明的化合物之結晶度。反之，依照先前技藝的化合物在蒸氣沉積期間在蒸氣沉積來源上結晶且因此在延長的蒸氣沉積期間造成來源阻塞，當進行工業量產時，此現象完全不

會在根據本發明的化合物之情況中觀察到，或僅至最低的程度。根據本發明的化合物因此比依照先前技藝的化合物更適合用於量產。

本發明的申請書亦及以下的實例係指向根據本發明的化合物關於 OLED 及對應的顯示器和照明元件的用途。雖然有此敘述上的限制，但是熟習此技藝者亦有可能以本發明的化合物而不以進一步的本發明步驟用於其他電子裝置中的更多用途，例如用於有機場效電晶體（O-FET）、有機薄膜電晶體（O-TFT）、有機發光電晶體（O-LET）、有機積體電路（O-IC）、有機太陽能電池（O-SC）、有機場驟滅裝置（O-FQD）、發光電化學電池（LEC）、有機光感受器或有機雷射二極體（O-雷射），有述及但是很少應用。

本發明同樣關於根據本發明的化合物在對應裝置中的用途及關於該等裝置本身。

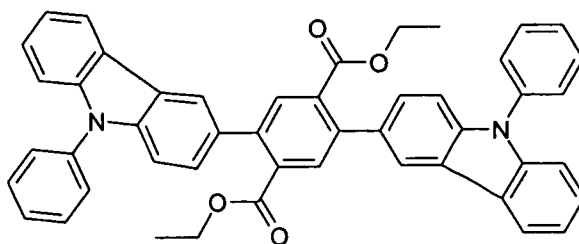
本發明現藉由下列的實例更詳細地解釋，不想要藉此限制本發明。

【實施方式】

下列的合成法係在保護性氣體環境下於無水溶劑中進行，除非另有指明。根據本發明的式（1）化合物可藉由熟習此技藝者一般已知的合成步驟製備。所使用的起始點為例如（9-苯基-9H-吡啶-3-基）硼酸：Synlett, 2006, 17, 2841-2845；對-胺基聯苯：J. Am. Chem. Soc. 2008, 130

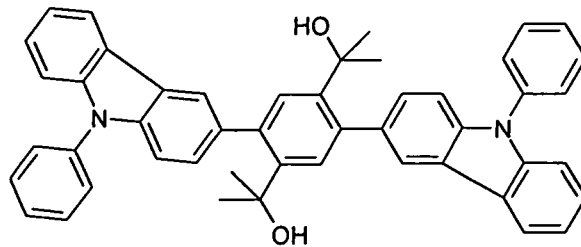
(32), 10512-10514 ; 2-溴 -9,9-二甲茚 : Synlett, 2006, 5, 737-740。

實例 1 : 2,5-雙 (9-苯基 -9H-咪唑 -3-基) 對苯二甲酸二乙酯的合成法 :



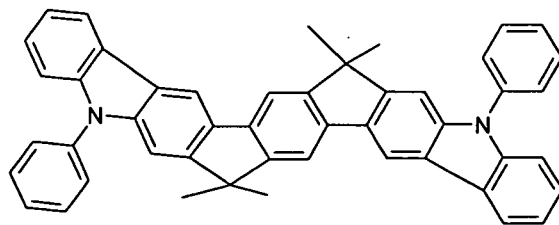
將 913 毫克 (3 毫莫耳) 三 -鄰 -甲苯膦及接著將 112 毫克 (0.5 毫莫耳) 乙酸鈮 (II) 添加至 380 毫升甲苯、190 毫升二噁烷與 480 毫升水之混合物中的 18.6 公克 (49.1 毫莫耳) 2,5-二溴對苯二甲酸二乙酯、38 公克 (102 毫莫耳) (9-苯基 -9H-咪唑 -3-基) 硼酸、5.1 公克 (221 毫莫耳) 磷酸三鉀的徹底攪拌之懸浮液中，且接著將混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻至室溫 (RT) 之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以 50 毫升甲苯清洗三次，以 50 毫升乙醇 : 水 (1 : 1, v : v) 清洗三次及以 100 毫升乙醇清洗三次，且從 DMF 再結晶三次 (約 10 毫升 / 公克) 。產量 : 22.6 公克 (32 毫莫耳) ， 63.0% 。

實例 2 : 2-[4-(1-羥基-1-甲基乙基)-2,5-雙(9-苯基-9H-咪唑-3-基)苯基]丙-2-醇合成法 :



將 6.8 公克 (9.67 毫莫耳) 2,5-雙 (9-苯基 -9H-咪唑 -3-基) 對苯二甲酸二乙酯溶解在 40 毫升 THF 中，在 -75°C 下添加 40 毫升 (42 毫莫耳) 在二乙醚中的 2M 甲基鋰溶液且將混合物在 -75°C 下攪拌 3 小時。在溫熱至 RT 之後，將混合物使用 NH_4Cl 溶液水解，以乙酸乙酯萃取且乾燥，並在減壓下移除溶劑。餘留的無色固體係從甲苯 / EtOH 再結晶，留下呈無色晶體形式的 4.2 公克 (6.2 毫莫耳) 二醇，62%。

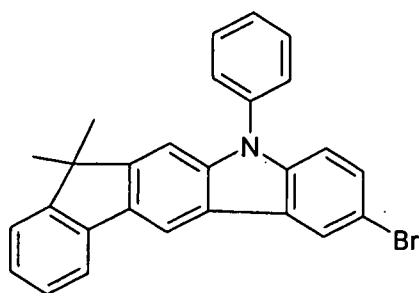
實例 3：



將 3.38 公克 (5 毫莫耳) 2-[4-(1-羥基 -1-甲基乙基) -2,5-雙 (9-苯基 -9H-咪唑 -3-基) 苯基]丙 -2-醇溶解在 30 毫升二氯甲烷中且冷卻至 5°C ，並添加在 3 毫升甲烷磺酸中的 4 公克多磷酸之混合物。在 5°C 下 30 分鐘之後，添加 50 毫升 EtOH 且將混合物在沸騰下加熱 1 小時。將無色沉澱物濾出，以 EtOH 及庚烷清洗兩次且從氯苯再結晶一次，得到成爲無色固體的產物 (2 公克，4 毫莫耳)，

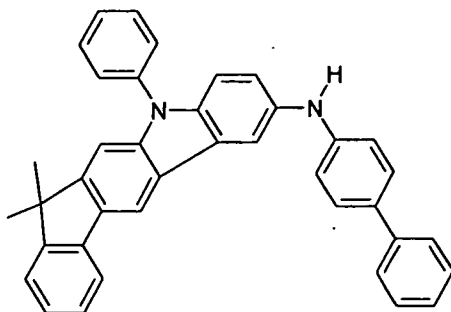
75%，其根據 RP-HPLC 具有 > 99.9% 之純度。

實例 4：7-溴-12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛的合成法：



將 9.51 公克（54 毫莫耳）N-溴琥珀醯亞胺在保護性氣體環境及蔽光下經 15 分鐘期間添加至 RT 下在 80 毫升氯仿中的 19.3 公克（54 毫莫耳）12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛之溶液中。將混合物攪拌 6 小時，接著添加 80 毫升飽和 Na_2CO_3 溶液，將有機相分離且經 Na_2SO_4 乾燥。在減壓下移除溶劑之後，將殘餘物再結晶，得到成爲無色固體的產物，具有 20 公克（45 毫莫耳），85% 產量。

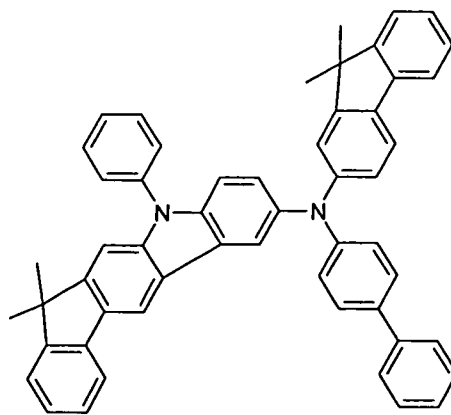
實例 5：聯苯-4-基-(12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛-7-基)胺的合成法：



將在 1000 毫升甲苯中的 175 公克（400 毫莫耳）7-

溴 -12,12-二甲基 -10-苯基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b] 茚及 67.7 公克 (401.8 毫莫耳) 對-胺基聯苯之脫氣溶液以 N_2 經 1 小時飽和。接著將 2.47 公克 (4.45 毫莫耳) 1,1-雙(二苯磷基)二茂鐵及 1 公克 (4.45 毫莫耳) $Pd(OAc)_2$ 添加至溶液中，且接著添加 50.01 公克 (521.25 毫莫耳) 固態 NaO^tBu 。將反應混合物在回流下加熱 5 小時。在冷卻至室溫之後，添加 1000 毫升水。將有機相以 4x250 毫升 H_2O 清洗，接著使用 $MgSO_4$ 乾燥且在減壓下移除溶劑。從二噁烷再結晶，獲得成爲無色固體的純產物，具有 182 公克 (347 毫莫耳)，87% 產量。

實例 6：聯苯 -4-基 - (9,9-二甲基 -9H-茚 -2-基) - (12,12-二甲基 -10-苯基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b] 茚 -7-基) 胺的合成法

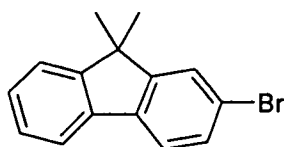


將 190 微升 (1 毫莫耳) 二-第三丁磷氮化物及接著將 112 毫克 (0.5 毫莫耳) 乙酸鈮 (II) 添加至 500 毫升甲苯中的 26.3 公克 (50 毫莫耳) 聯苯 -4-基 - (12,12-二甲基 -10-苯基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b] 茚 -7-基) 胺、

13.3 公克 (49 毫莫耳) 2-溴 -9,9-二甲萸及 7.7 公克 (80 毫莫耳) 第三丁醇鈉之懸浮液中，且接著將混合物在回流下加熱 5 小時。在冷卻至 60°C 之後，添加 500 毫升水，將有機相分離，經由矽膠過濾，在減壓及 80°C 下最終蒸發至乾燥且接著添加 300 毫升乙醇。在冷卻之後，將固體以抽氣濾出且接著從二噁烷再結晶五次。產量：31.5 公克 (43 毫莫耳) ， 88% ， 99.9% 純度 (HPLC) 。

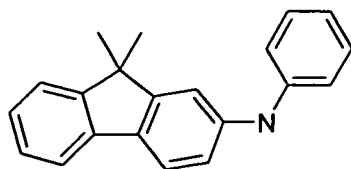
實例 7：10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡啶 -2-基) -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萸

步驟 a)：溴 -9,9-二甲基 -9H-萸的合成法



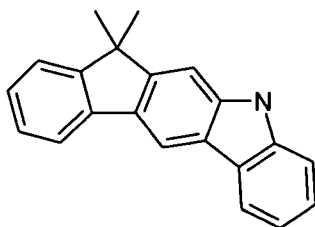
將 29.5 公克 (120.4 毫莫耳) 2-溴萸溶解在 220 毫升無水 DMSO 中。添加 34.7 公克第三丁醇鈉 (361 毫莫耳) 且將反應混合物在保護性環境下加熱至 65°C 之溫度。接著在此溫度下逐滴添加 22.5 毫升 MeI (361 毫莫耳) 且將混合物再攪拌 4 小時。在此時間之後，添加 120 毫升氨 (濃縮) / 水 (1/1, v/v) 之 60 毫升混合物。將批組加熱至 65°C 之溫度且再劇烈攪拌 1 小時。在冷卻至 RT 之後，將混合物分溶在乙酸乙酯與水之間，將水相以水萃取兩次且經 Na₂SO₄ 乾燥。將餘留的殘餘物蒸發。產量為 30.7 公克 (112 毫莫耳，93%) 。

步驟 b) : (9,9-二甲基 -9H-芴 -2-基) 苯胺的合成法



將 50 公克 溴 -9,9-二甲基 -9H-芴 (183 毫莫耳) 、 20 毫升 苯胺 (220 毫莫耳) 、 1.5 公克 DPPF (2.7 毫莫耳) 、 0.5 公克 乙酸鈣 (II) 及 45 公克 第三丁醇鈉 (486 毫莫耳) 在保護性環境下在 1.5 公升 甲苯 中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在 甲苯 與 水 之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物係從 庚烷 / 乙酸乙酯 再結晶。產量為 31.2 公克 (110 毫莫耳，52%)。

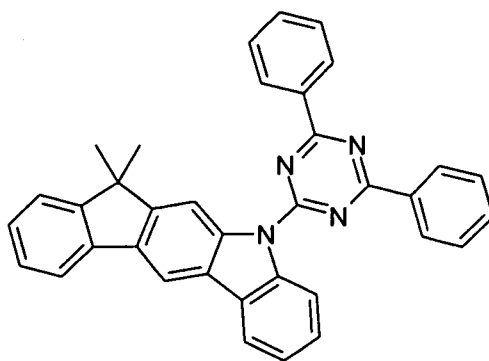
步驟 c) : 12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茚並 [2,1-b] 芴的合成法



將 35 毫升 三甲基乙酸 添加至 10 公克 (9,9-二甲基 -9H-芴 -2-基) 苯胺 (35 毫莫耳) 、 0.4 公克 乙酸鈣 (II) (1.78 毫莫耳) 及 0.5 公克 碳酸鉀 (3.62 毫莫耳) 中且將混合物在 120°C 下攪拌 9 小時。在此時間之後，添加 0.4 公克 乙酸鈣 (II) (1.78 毫莫耳) 且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 200 毫升 二氯甲烷 及 0.1M

Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 5 公克（5 毫莫耳，50%）。

步驟 d)：10-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘的合成法

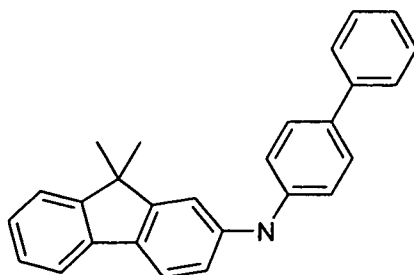


將 8 公克（28.2 毫莫耳）12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 225 毫升二甲基甲醯胺中且添加 1.5 公克在礦物油中的 60% NaH （37.5 毫莫耳）。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 75 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶（8.5 公克，31.75 毫莫耳）之溶液。接著將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取。產量為 12 公克（23 毫莫耳，83%）。

實例 9：10-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲

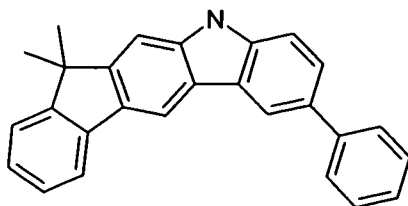
基-7-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸的合成法

步驟 a) : 聯苯-4-基-(9,9-二甲基-9H-萸-2-基)胺的合成法



將 50 公克溴-9,9-二甲基-9H-萸 (183 毫莫耳)、38 公克對-苯基苯胺 (220 毫莫耳)、1.5 公克 DPPF (2.7 毫莫耳)、0.5 公克乙酸鈣 (II) 及 45 公克第三丁醇鈉 (486 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 1.5 公升甲苯中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物係從庚烷/乙酸乙酯再結晶。產量為 33 公克 (91.5 毫莫耳, 50%)。

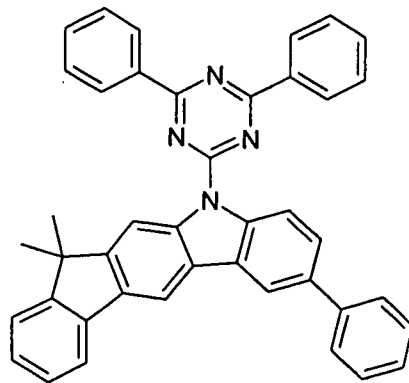
步驟 b) : 12,12-二甲基-7-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸的合成法



將 50 毫升三甲基乙酸添加至 20 公克聯苯-4-基-(9,9-二甲基-9H-萸-2-基)胺 (55.3 毫莫耳)、1.2 公克乙酸鈣 (II) (5.5 毫莫耳) 及 0.8 公克碳酸鉀 (5.5 毫莫耳)

) 中且將混合物在 120°C 下攪拌 9 小時。在此時間之後，添加 1.2 公克乙酸鈮 (II) (5.5 毫莫耳) 且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 300 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 10 公克 (27.7 毫莫耳, 50%)。

步驟 c) : 10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-7-苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘的合成法

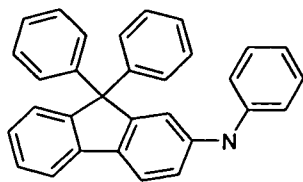


將 10 公克 (27.7 毫莫耳) 12,12-二甲基-7-苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 275 毫升二甲基甲醯胺中且添加 1.45 公克在礦物油中的 60% NaH (36 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 75 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶 (8.2 公克, 30.5 毫莫耳) 之溶液。接著將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取。產量為

14.7 公克 (24.9 毫莫耳 , 90%) 。

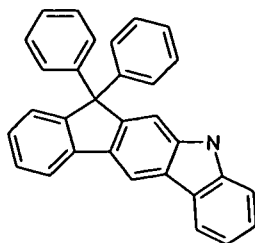
實例 10 : 10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -12,12-二苯基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萸的合成法

步驟 a) : (9,9-二苯基 -9H-萸 -2-基) 苯胺的合成法



將 40 公克 溴 -9,9-二苯基 -9H-萸 (100.7 毫莫耳) 、 12 毫升 苯胺 (121 毫莫耳) 、 0.85 公克 DPPF (1.5 毫莫耳) 、 0.3 公克 乙酸鈣 (II) 及 25 公克 第三丁醇鈉 (262 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 1.5 公升 甲苯中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在 甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物係從庚烷 / 乙酸乙酯再結晶。產量為 26.8 公克 (65 毫莫耳 , 65%) 。

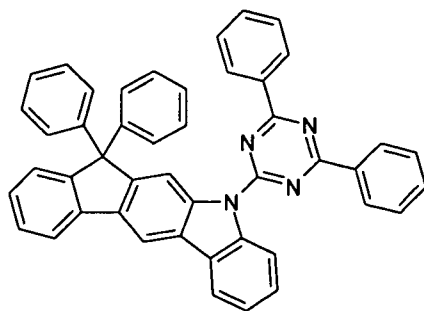
步驟 b) : 12,12-二苯基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萸的合成法



將 50 毫升 三甲基乙酸添加至 15 公克 (9,9-二苯基 -9H-萸 -2-基) 苯胺 (36.6 毫莫耳) 、 0.9 公克 乙酸鈣 (II

) (3.66 毫莫耳) 及 0.5 公克碳酸鉀 (3.66 毫莫耳) 中且將混合物在 120°C 下攪拌 9 小時。在此時間之後，添加 0.9 公克乙酸鈹 (II) (3.66 毫莫耳) 且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 200 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 6 公克 (14.6 毫莫耳，40%)。

步驟 c) : 10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘的合成法

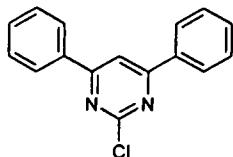


將 6 公克 (14.6 毫莫耳) 12,12-二苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 100 毫升二甲基甲醯胺中且添加 0.76 公克在礦物油中的 60% NaH (19 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 50 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氫-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶 (4.3 公克，16 毫莫耳) 之溶液。接著將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取。產量為 8.1 公克 (12.7

毫莫耳，87%）。

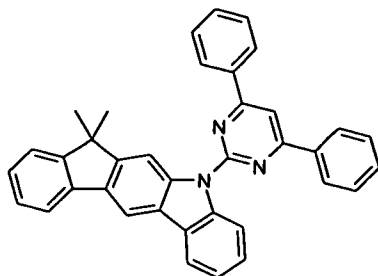
實例 11：10-（4,6-二苯基嘓啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛

步驟 a）：2-氯-4,6-二苯基嘓啶



將 75 公克（0.41 毫莫耳）1,3,5-三氯嘓啶、100 公克（0.82 莫耳）苯基硼酸及 625 毫升 4M NaHCO₃ 溶液懸浮在 2.5 公升乙二醇二甲醚中。將 2.3 公克（10.23 毫莫耳）Pd(OAc)₂ 及 10.35 公克（34 毫莫耳）P(o-Tol)₃ 添加至此懸浮液中，將反應混合物在回流下加熱 16 小時。接著將混合物分溶在乙酸乙酯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na₂SO₄ 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物係從庚烷/甲苯再結晶。產量為 43 公克（0.15 莫耳，38%）。

步驟 b）：10-（4,6-二苯基嘓啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛

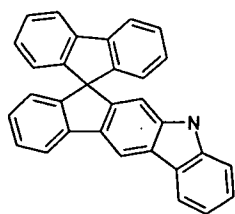


將 4.2 公克在礦物油中的 60% NaH（0.106 莫耳）在

保護性氣體環境下溶解在 300 毫升二甲基甲醯胺中。將 30 公克 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萸（0.106 莫耳）溶解在 250 毫升 DMF 中且逐滴添加至反應混合物中。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 200 毫升 THF 中的 2-氯-4,6-二苯基-1,3-嘓啶（34.5 公克，0.122 莫耳）之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時，倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯/正庚烷再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 23 公克（43%）。

實例 12：10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡-2-基)-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]-12,12-螺旋萸

步驟 a)：10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]-12,12-螺旋萸

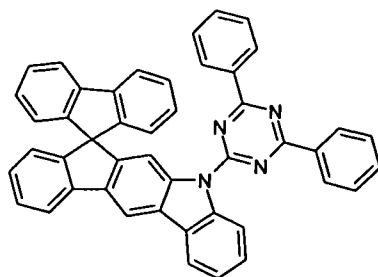


將 50 公克 2-溴-9,9'-螺旋聯萸（126 毫莫耳）、14 毫升苯胺（154 毫莫耳）、1.1 公克（2 毫莫耳）具有 DCM 的 1,1-雙（二苯膦基）二茂鐵-二氯化鈣（II）錯合物、0.4 公克乙酸鈣（II）（1.78 毫莫耳）及 31 公克第三丁醇鈉（323 毫莫耳）在保護性氣體環境下在 1 公升甲苯中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器

中蒸發。餘留的殘餘物 2-胺苯基 -9,9'-螺旋聯萸係從庚烷 / 乙酸乙酯再結晶。產量為 50 公克 (114 毫莫耳, 93%)

將 300 毫升三甲基乙酸添加至 30 公克 2-胺苯基 -9,9'-螺旋聯萸 (73.6 毫莫耳)、1.6 公克乙酸鈮 (II) (7.4 毫莫耳) 及 1.6 公克碳酸鉀 (11.4 毫莫耳) 中且將混合物在空氣下以 120°C 攪拌 9 小時。在此時間之後, 添加 1.6 公克乙酸鈮 (II) (7.4 毫莫耳) 且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 200 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間, 將水相以二氯甲烷萃取三次, 將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯 / 庚烷再結晶。產量為 11.9 公克 (29.4 毫莫耳, 40%)。

步驟 b) : 10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]-12,12-螺旋萸

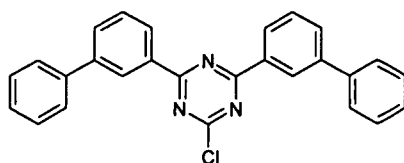


將 10 公克 (25 毫莫耳) 10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]-12,12-螺旋萸在保護性氣體環境下溶解在 100 毫升二甲基甲醯胺中且添加 1.38 公克在礦物油中的 60% NaH (34.5 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後, 逐滴添加在 100

毫升 THF 中的 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶 (7.3 公克, 27 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後, 將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取, 從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華, 純度為 99.9%。產量為 12 公克 (76%)。

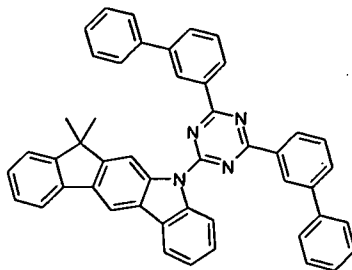
實例 13: 10-(4,6-雙聯苯-3-基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘

步驟 a): 2,4-雙聯苯-3-基-6-氯-1,3,5-三吡啶



將 5.2 公克鎂 (0.215 毫莫耳) 先引入 500 毫升四頸燒瓶中且緩慢地逐滴添加在 200 毫升 THF 中的 50 公克溴聯苯 (214 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物以沸騰加熱 1.5 小時且接著冷卻至室溫。將在 150 毫升 THF 中的氯化氫 (17.2 公克, 93 毫莫耳) 先引入第二個燒瓶中且冷卻至 0 °C。接著在此溫度下逐滴添加冷卻之格任亞 (Grignard) 試劑且將混合物在 RT 下攪拌 12 小時。在此時間之後, 將 150 毫升 HCl 添加至反應混合物中且將水相以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相以水清洗, 經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。殘餘物係從 EtOH 再結晶。產量為 32.8 公克 (78 毫莫耳, 84%)。

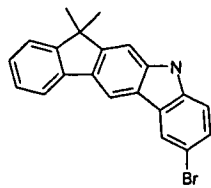
步驟 b) : 10- (4,6-雙聯苯 -3-基 -1,3,5-三吡 -2-基) -
12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜蒽並 [2,1-b]萘



將 18.6 公克 (64.6 毫莫耳) 12,12-二甲基 -10,12-二
氫 -10-氮雜蒽並 [2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 400
毫升二甲基甲醯胺中且添加 3.1 公克在礦物油中的 60%
NaH (77.5 毫莫耳) 。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在
100 毫升 THF 中的 2,4-雙聯苯 -3-基 -6-氯 -1,3,5-三吡 (
32.6 公克，64.6 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫
下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上
且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥
且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在
高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 41.5 公克 (61%
) ， 80% 理論值。

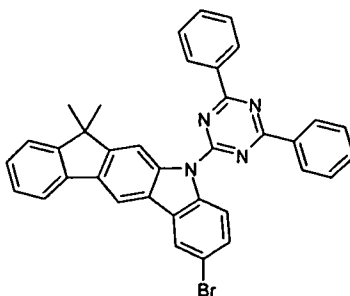
實例 14 : 10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -
12,12,12',12'-四甲基 -10,12-二氫 -12'H-[7,10']-雙 [10-氮
雜蒽並 [2,1-b]萘基]

步驟 a) : 7-溴 -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜蒽並
[2,1-b]萘



將 66.5 公克 (234.6 毫莫耳) 12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]茛先引入 1000 毫升乙腈中。接著以蔽光在 -15°C 下逐滴添加在 500 毫升 CH_3CN 中的 41.7 公克 (234.6 毫莫耳) NBS 之溶液，允許來到 RT 且在此溫度下再攪拌 4 小時。接著將 150 毫升水添加至混合物中，接著將其以 CH_2Cl_2 萃取。將有機相經 MgSO_4 乾燥且在真空中移除溶劑。產物係藉由與熱己烷攪拌而清洗且以抽氣濾出。產量：47.5 公克 (131 毫莫耳)，55.9% 理論值，根據 $^1\text{H-NMR}$ 的純度約 97%。

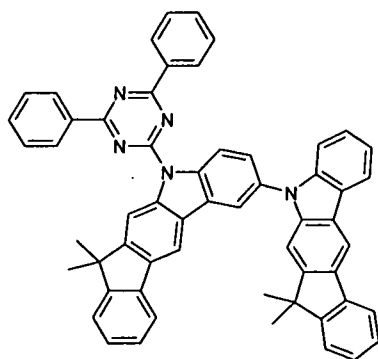
步驟 b) : 7-溴 -10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]茛



將 25.5 公克 (70.4 毫莫耳) 7-溴 -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]茛在保護性氣體環境下溶解在 400 毫升二甲基甲醯胺中且添加 3.1 公克在礦物油中的 60% NaH (78 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 100 毫升 THF 中的 2-氫 -4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 (

22.6 公克，84.5 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。殘餘物係從甲苯再結晶。產量：40 公克 (67 毫莫耳)，95% 理論值。

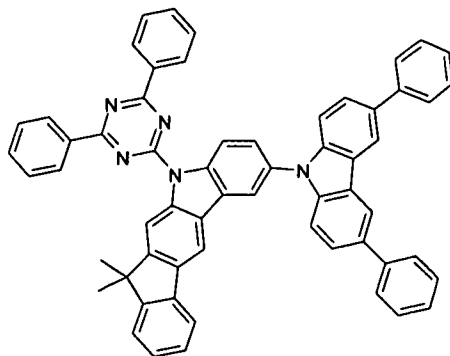
步驟 c) : 10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12,12',12'-四甲基-10,12-二氫-12'H-[7,10']雙[10-氮雜茛苳並[2,1-b]萘基]



將 25 公克 (42.12 毫莫耳) 7-溴-10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛苳並[2,1-b]萘、13.3 公克 (47 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛苳並[2,1-b]萘及 29.2 公克 Rb_2CO_3 懸浮在 250 毫升對-二甲苯中。將 0.95 公克 (4.2 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 12.6 毫升 1M 三-第三丁膦溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：25 公克 (31 毫莫耳)，

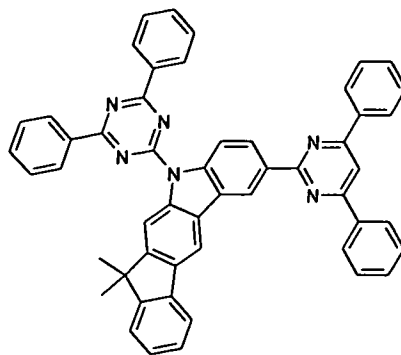
75% 理論值。

實例 15：7-（3,6-二苯基咪唑-9-基）-10-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘



將 20 公克（33.7 毫莫耳）7-溴-10-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘、12 公克（37.6 毫莫耳）3,6-二苯基-9H-咪唑及 23.34 公克 Rb_2CO_3 懸浮在 200 毫升對-二甲苯中。將 0.76 公克（3.4 毫莫耳） $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 10.1 毫升 1M 三-第三丁磷溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：20 公克（24 毫莫耳），72% 理論值。

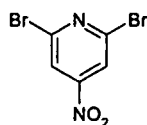
實例 16：7-（4,6-二苯基嘧啶-2-基）-10-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘



將 40 公克 (67.4 毫莫耳) 7-溴 -10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡啶 -2-基) -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萘、17.1 公克 (67.4 毫莫耳) 雙 (頻哪醇基) 二硼烷及 19.8 公克乙酸鉀懸浮在 700 毫升二噁烷中。將 2.8 公克 (3.4 毫莫耳) 具有 DCM 的 1,1-雙 (二苯膦基) 二茂鐵 - 二氧化鈮 (II) 錯合物添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。殘餘物係從甲苯再結晶。將 30 公克 (46.8 毫莫耳) 10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡啶 -2-基) -12,12-二甲基 -7- (4,4,5,5-四甲基 -1,3,2-二氧雜環戊硼烷 -2-基) -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萘、11.2 公克 (42.15 毫莫耳) 2-氯 -4,6-二苯基嘧啶及 9.9 公克碳酸鈉懸浮在 300 毫升二噁烷、300 毫升甲苯及 100 毫升水中。將 2.7 公克 (2.3 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 5 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：18 公克，59% 理論值。

實例 17：10-（2,6-二苯基吡啶-4-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘

步驟 a)：2,6-二溴-4-硝吡啶

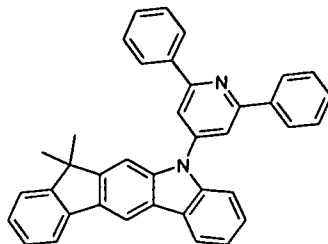


將在 250 毫升三氟乙酸中的 50 公克（211 毫莫耳）2,6-二溴吡啶之溶液溫熱至 90°C，逐滴添加 53 毫升（515 毫莫耳）33% 之過氧化氫溶液。在 3 小時之後，將反應混合物冷卻且倒入 200 毫升冰水中。將濾液以 DCM 萃取三次，將合併的有機相以 0.5M K_2CO_3 溶液清洗四次，經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。進一步使用殘餘物 2,6-二溴吡啶 1-氧化物（41.2 公克）。

將在 70 毫升 H_2SO_4 中的 20 公克（78 毫莫耳）2,6-二溴吡啶 1-氧化物之溶液溫熱至 40°C。將硝化酸（70 毫升 H_2SO_4 與 34 毫升發煙 HNO_3 ）添加至此溫度下的溶液中。將反應混合物在 90°C 下加熱 3 小時。在冷卻之後，將混合物倒入 800 毫升冰水中。將沉澱固體濾出且以水清洗。在乾燥之後，將 2,6-二溴-4-硝吡啶 1-氧化物（17.9 公克）懸浮在 200 毫升氯仿中，在室溫下添加 6 毫升三溴化磷（64 毫莫耳），將混合物攪拌 1 小時且接著在回流下加熱 2 天。在冷卻之後，將溶液倒入 500 毫升冰水中且使用固體 $NaHCO_3$ 中和。將水相分離且以 $CHCl_3$ 萃取數次，將合併的有機相以硫代硫酸鈉溶液清洗及接著以水清洗，乾

燥且蒸發。殘餘物係從 EtOH 再結晶。產量：41.7 公克（148 毫莫耳），70% 理論值。

步驟 b)：10-(2,6-二苯基吡啶-4-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸

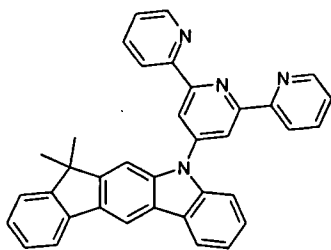


將 20 公克（70.7 毫莫耳）12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸在保護性氣體環境下溶解在 50 毫升二甲基甲醯胺中且添加 3.1 公克在礦物油中的 60% NaH（78 毫莫耳）。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 20 毫升 DMF 中的 2,6-二溴-4-硝吡啶（20 公克，70.7 毫莫耳）之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。殘餘物係從甲苯再結晶。產量：29.6 公克（80 毫莫耳），95% 理論值。

將 25 公克（48 毫莫耳）10-(2,6-二溴吡啶-4-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸及 12.9 公克苯基硼酸（106 毫莫耳）懸浮在 300 毫升乙二醇二甲醚中。將 75 毫升 2M Na_2CO_3 溶液添加至反應混合物中。將 2.8 公克（2.4 毫莫耳） $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 12 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱

甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：15 公克，60% 理論值。

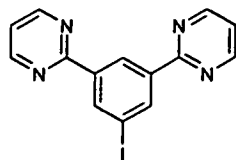
實例 18：12,12-二甲基-10-[2,2';6',2'']三吡啶-4'-基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸



將 15 公克 (29 毫莫耳) 10-(2,6-二溴吡啶-4-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸及 0.7 公克 (0.6 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 懸浮在 50 毫升 THF 中。將 69 毫升 (34.7 毫莫耳) 吡啶基溴化鋅/THF 溶液 (0.5M, 34.7 毫莫耳) 緩慢地添加至此懸浮液中。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。將混合物倒入 EDTA/ Na_2CO_3 溶液中且以 Et_2O 萃取三次。將殘餘物與 0.7 公克 (0.6 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 一起懸浮在 50 毫升 THF 中且緩慢地逐滴添加 69 毫升 (34.7 毫莫耳) 吡啶基溴化鋅/THF 溶液 (0.5M, 34.7 毫莫耳)。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。將混合物倒入 EDTA/ Na_2CO_3 溶液中且以 Et_2O 萃取三次。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：7.5 公克，50% 理論值。

實例 19：10-(3,5-二嘧啶-2-基苯基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸

步驟 a) : 5-碘 -1,3-雙 (2'-嘓啞基) 笨



將 40 公克 (127 毫莫耳) 三溴笨溶解在 800 毫升 Et_2O 中且將溶液冷卻至 -78°C 。將 88 毫升 (140 毫莫耳) $n\text{-BuLi}$ (在己烷中的 1.6M 溶液) 逐滴添加至此溶液中。在此溫度下攪拌 3 小時之後，逐滴添加 19.4 毫升氮三甲基矽烷且將反應混合物在室溫下再攪拌 1 小時。接著將混合物分溶在庚烷與水之間，將水相以庚烷萃取三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。將餘留的殘餘物 (31.4 公克，80% 產量) 蒸餾且進一步反應。

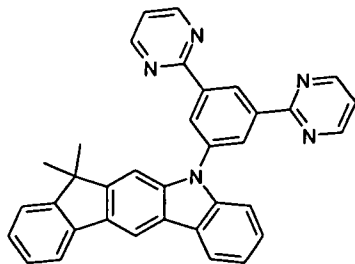
將 25 公克 (79.4 毫莫耳) 5-三甲基矽基 -1,3-溴笨、37.7 公克 (159 毫莫耳) 雙 (頻哪醇基) 二硼烷及 4 公克乙酸鉀 (350 毫莫耳) 懸浮在 700 毫升 DMSO 中。將 11.9 公克 (16 毫莫耳) 具有 DCM 的 1,1-雙 (二笨膦基) 二茂鐵 - 二氧化鈮 (II) 錯合物添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。殘餘物係從甲苯再結晶。產量：24 公克，75% 理論值。

將 20 公克 (49.7 毫莫耳) 5-三甲基矽笨 -1,3-雙 (硼酸) 二頻哪酯及 15.8 公克 2-溴嘓啞 (99.5 毫莫耳) 懸浮在 600 毫升乙二醇二甲醚中。將 100 毫升 2M Na_2CO_3 溶液添加至反應混合物中。將 1.5 公克 (4.9 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加

熱 12 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。殘餘物係從甲苯再結晶。產量：9.5 公克，60% 理論值。

將 15 公克 (49 毫莫耳) 5-三甲基矽基-1,3-(2'-嘧啶基) 苯在保護性氣體環境下溶解在 200 毫升二氯甲烷中且在 0°C 下添加 8.1 公克 ICI (50 毫莫耳)。接著將反應混合物在此溫度下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒入水中且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相以二硫亞磺酸鈉溶液清洗，經 Na₂SO₄ 乾燥且蒸發。殘餘物係以從庚烷/乙酸乙酯再結晶。產量：12.6 公克 (80 毫莫耳)，60% 理論值。

步驟 b)：10-(3,5-二嘧啶-2-基苯基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸

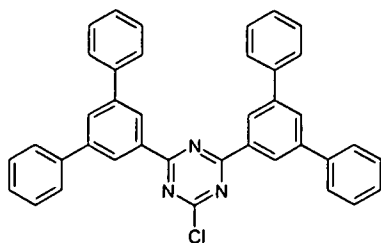


將 10.9 公克 (38.32 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸、12 公克 (38.32 毫莫耳) 5-碘-1,3-(2'-嘧啶基) 苯及 16 公克 K₂CO₃ 懸浮在 300 毫升對-二甲苯中。將 0.86 公克 (3.84 毫莫耳) Pd(OAc)₂ 及 7.6 毫升 1M 三-第三丁膦溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以

熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：13.7 公克（26.6 毫莫耳），80% 理論值。

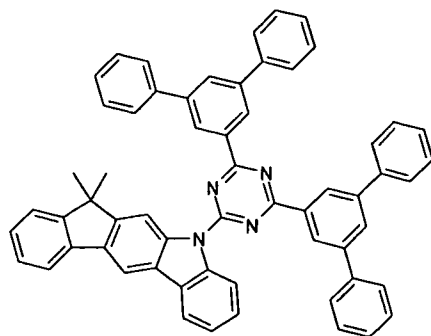
實例 20：10-（4,6-雙[1,1';3',1'']聯三苯-5'-基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘

步驟 a)：2-氯-4,6-雙[1,1';3',1'']聯三苯-5'-基-1,3,5-三吡啶



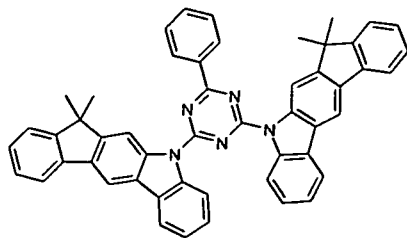
將 3.93 公克鎂（162 毫莫耳）先引入 500 毫升四頸燒瓶中且緩慢地逐滴添加在 150 毫升 THF 中的 50 公克 5'-溴-[1,1';3',1'']聯三苯（162 毫莫耳）之溶液。將反應混合物以沸騰加熱 1.5 小時且接著冷卻至室溫。將氯化氫（13 公克，70 毫莫耳）先引入在第二個燒瓶中的 150 毫升 THF 中且冷卻至 0°C。在此溫度下逐滴添加冷卻之格任亞試劑且將混合物在 RT 下攪拌 12 小時。在此時間之後，將 150 毫升 HCl 添加至反應混合物中且將水相以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相以水清洗，經 Na₂SO₄ 乾燥且蒸發。殘餘物係從 EtOH 再結晶。產量為 27.8 公克（49 毫莫耳，70%）。

步驟 b) : 10-(4,6-雙[1,1';3',1'']聯三苯-5'-基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘



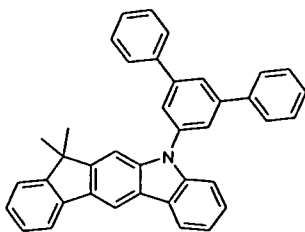
將 11.3 公克 (40 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 285 毫升二甲基甲醯胺中且添加 1.9 公克在礦物油中的 60% NaH (19 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 315 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氯-4,6-雙[1,1';3',1'']聯三苯-5'-基-1,3,5-三吡啶 (25.1 公克, 44 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取。產量為 23 公克 (28 毫莫耳, 70%)。

實例 21 : 2,6-雙(12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘)-4-苯基-1,3,5-三吡啶



將 30 公克 (107.5 毫莫耳) 12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛苳 [2,1-b]茛苳在保護性氣體環境下溶解在 185 毫升二甲基甲醯胺中且添加 1.29 公克在礦物油中的 60% NaH (129 毫莫耳) 。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 125 毫升二甲基甲醯胺中的 2,4-二氫 -6-苯基 -5'-基 -1,3,5-三吡 (12.3 公克，54 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氫甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 23 公克 (32 毫莫耳，60%)。

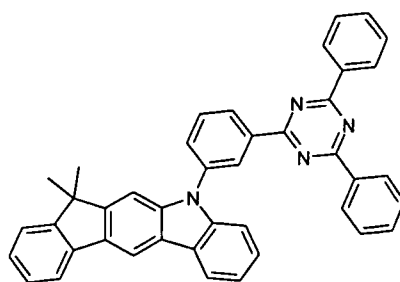
實例 22：12,12-二甲基 -10-[1,1';3',1'']聯三苯 -5'-基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛苳 [2,1-b]茛苳



將 30 公克 (106 毫莫耳) 12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛苳 [2,1-b]茛苳、13.3 公克 (114 毫莫耳) 5'-溴 -[1,1';3',1'']聯三苯及 30.5 公克 NaOtBu 懸浮在 1.5 公升

對-二甲苯中。將 0.5 公克 (2.11 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 1.6 毫升 1M 三-第三丁膦溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：15.8 公克 (31 毫莫耳，72%)。

實例 23：10-[3-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)苯基]-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘

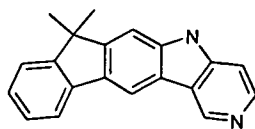


將 19 公克 (67 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘、28.6 公克 (74 毫莫耳) 3-溴-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)苯及 19.3 公克 NaOtBu 懸浮在 1 公升對-二甲苯中。將 0.3 公克 (1.34 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 1.0 毫升 1M 三-第三丁膦溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，添加二氯甲烷，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 25 公克 (43 毫莫耳，60%)。3-溴-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)苯係以類似於 J. Mater. Chem. 2007, 17, 3714-3719

的方式製備。

實例 24：12-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-10,10-二甲基-10,12-二氫-3,12-二氮雜蒽並[2,1-b]萘

步驟 a)：10,10-二甲基-10,12-二氫-3,12-二氮雜蒽並[2,1-b]萘

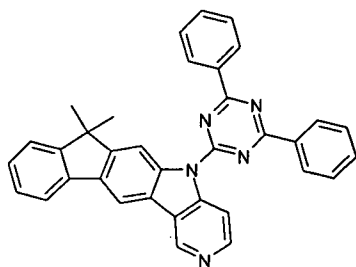


將 50 公克溴-9,9-二甲基-9H-萘（183 毫莫耳）、19 毫升 4-胺基吡啶（201 毫莫耳）、1.5 公克 DPPF（2.7 毫莫耳）、0.5 公克乙酸鈮（II）及 45 公克第三丁醇鈉（486 毫莫耳）在保護性氣體環境下在 1.5 公升甲苯中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從庚烷/乙酸乙酯再結晶。產量為 34 公克（118 毫莫耳，65%）。

將 70 毫升三甲基乙酸添加至 30 公克（9,9-二甲基-9H-萘-2-基）吡啶-4-胺（105 毫莫耳）、2.35 公克乙酸鈮（II）（10.5 毫莫耳）及 1.44 公克碳酸鉀（10.5 毫莫耳）中且將混合物在 120°C 下攪拌 9 小時。在此時間之後，添加 2.35 公克乙酸鈮（II）（10.5 毫莫耳）且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 200 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4

乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 13.4 公克 (13.5 毫莫耳, 45%)。

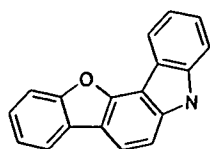
步驟 b) : 12-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-10,10-二甲基-10,12-二氫-3,12-二氮雜蒽並[2,1-b]萘



將 10 公克 (35.17 毫莫耳) 10,10-二甲基-10,12-二氫-3,12-二氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 150 毫升二甲基甲醯胺中且添加 1.7 公克在礦物油中的 60% NaH (42.2 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後, 逐滴添加在 100 毫升 THF 中的 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶 (10.7 公克, 38.68 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後, 將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取, 從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華, 純度為 99.9%。產量為 14.4 公克 (80%)。

實例 25 : 7-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-7H-12-氧雜-7-氮雜蒽並[1,2-a]萘

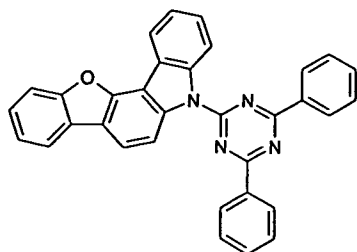
步驟 a) : 7H-12-氧雜-7-氮雜蒽並[1,2-a]萘



將 30 公克 (120.5 毫莫耳) 1-碘 -2-硝苯、30.6 公克 (144.6 毫莫耳) 二苯並呋喃 -4-硼酸及 76.7 公克 K_3PO_4 懸浮在 400 毫升甲苯、400 毫升二噁烷及 400 毫升水中。將 1.35 公克 (6 毫莫耳) $Pd(OAc)_2$ 及 5.5 公克鄰 - 甲苯膦添加至此懸浮液中且將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，經由矽膠過濾，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。產量為 22.7 公克 (78 毫莫耳)，對應於 65% 理論值。

將 20 公克 4- (2-硝苯基) 二苯並呋喃 (69 毫莫耳) 及 48 毫升亞磷酸三乙酯 (276 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 800 毫升 1,2-二氯苯中以沸騰加熱 48 小時。在此時間之後，將餘留的亞磷酸三乙酯及 1,2-二氯苯以蒸餾移除。餘留的殘餘物係從庚烷 / 乙酸乙酯再結晶。產量為 13 公克 (45 毫莫耳，65%)。

步驟 b) : 7- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -7H-12-氧雜 -7-氮雜茛並 [1,2-a]萘

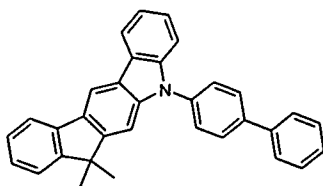


將 13 公克 (50.5 毫莫耳) 7H-12-氧雜 -7-氮雜茛並

[1,2-a]萸在保護性氣體環境下溶解在 150 毫升二甲基甲醯胺中且添加 2.4 公克在礦物油中的 60% NaH (60.6 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 100 毫升 THF 中的 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶 (14.9 公克, 55.6 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 18.4 公克 (75%)。

實例 26：10-聯苯-4-基-7-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萸

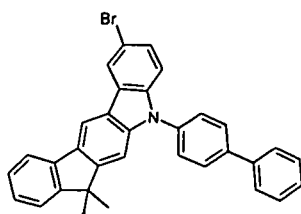
步驟 a)：10-聯苯-4-基-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萸



將 20 公克 (70.58 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萸及 24.6 公克 (105.87 毫莫耳) 4-溴聯苯溶解在甲苯中且藉由引入保護性氣體而脫氣。接著添加 4.94 毫升 (4.94 毫莫耳, 在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁磷、633.8 毫克 (2.82 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 10.2 公克 (105.87 毫莫耳) NaOtBu 。將固體預先脫氣，接著將反應混合物脫氣且接著在回流下攪拌 3 小時。將溫熱的

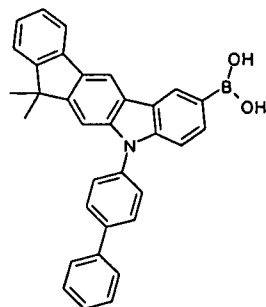
反應溶液經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。從甲苯再結晶得到成爲白色固體的 15.6 公克 (50.8%) 產物，具有 99.7% 純度。

步驟 b) : 10-聯苯-4-基-7-溴-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸



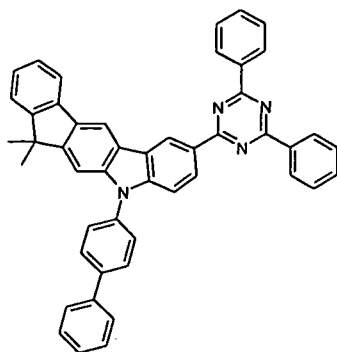
將 17.5 公克 (40.18 毫莫耳) 10-聯苯-4-基-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸懸浮在 450 毫升乙腈中且在 -20°C 下分批添加 7.15 公克 (40.18 毫莫耳) N-溴琥珀醯亞胺，以此添加速度使反應溫度不上升超過 -20°C。將混合物再攪拌 18 小時，在此期間允許溫度來到 RT。接著將反應混合物在旋轉蒸發氣中蒸發，溶解在二氯甲烷中且以水清洗。將殘餘物乾燥，蒸發且接著從甲苯再結晶至 99.3% 純度，得到成爲白色固體 10.9 公克 (53%) 的產物。

步驟 c) : 10-聯苯-4-基-7-硼酸-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸



將 26 公克 (51 毫莫耳) 10-聯苯 -4-基 -7-溴 -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萘溶解在 600 毫升無水 THF 中且將溶液冷卻至 -78°C 。在此溫度下經約 5 分鐘期間添加 26.2 毫升 (65.7 毫莫耳 / 在己烷中的 2.5M 溶液) $n\text{-BuLi}$ 且接著將混合物在 -78°C 下再攪拌 2.5 小時。在此溫度下儘可能快速添加 7.3 毫升 (65.7 毫莫耳) 硼酸三甲酯且允許反應混合物緩慢地來到 RT (約 18 小時)。將反應溶液以水清洗且將沉澱固體及有機相與甲苯共沸乾燥。粗產物係藉由在約 40°C 下與甲苯 / 二氯甲烷攪拌而清洗且以抽氣濾出，得到成爲白色固體的 20.1 公克 (83%) 產物。

步驟 d) : 10-聯苯 -4-基 -7- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萘

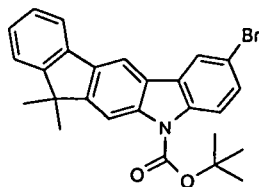


將 20.1 公克 (42 毫莫耳) 硼酸及 15.5 公克 (52.4 毫

莫耳) 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶溶解在 135 毫升水、315 毫升二噁烷與 315 毫升甲苯之脫氣混合物中且添加 5.33 公克 (50.31 毫莫耳) Na_2CO_3 。將反應混合物脫氣且添加 0.96 公克 (0.84 毫莫耳) Pd 肆 (三苯膦)。將混合物回流 18 小時。在冷卻之後，添加二氯甲烷 (不均勻混合物)，將水相分離且將有機相與甲苯共沸蒸發。反應產物係從 DMSO 結晶，在昇華之後得到成爲白色固體的 5.3 公克 (18%) 產物，具有 99.98% 純度。

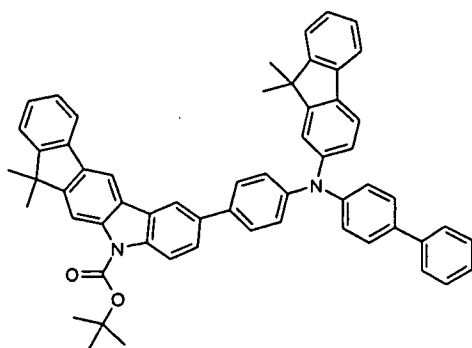
實例 27：聯苯-4-基-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-[4-(12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]芴-7-基)苯基]胺

步驟 a)：7-溴-12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]芴-10-羧酸第三丁酯



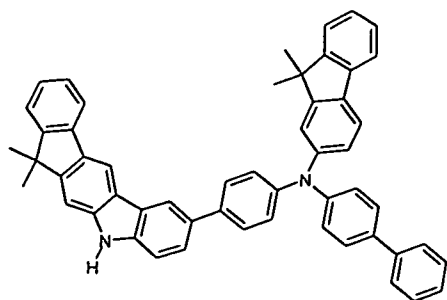
將 35.5 公克 (98 毫莫耳) 氮雜茛並芴溴化物溶解在 500 毫升無水 THF 中且添加 30.0 公克 (137.5 毫莫耳) BOC 酐及 1.21 公克 (9.82 毫莫耳) DMAP。將混合物在回流下加熱 1 小時，當反應完成時添加水，將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且蒸發。黃色油係藉由與庚烷攪拌而清洗，得到成爲白色固體的 35 公克 (77%) 產物。

步驟 b) : 7-{4-[聯苯-4-基-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)胺基]苯基}-12,12-二甲基-12H-10-氮雜蒽並[2,1-b]芴-10-羧酸第三丁酯



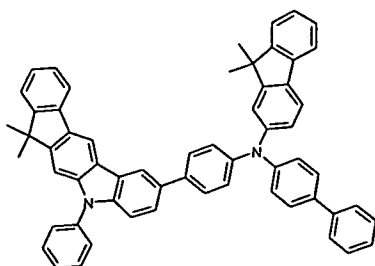
將 20.0 公克 (43.3 毫莫耳) 7-溴-12,12-二甲基-12H-10-氮雜蒽並[2,1-b]芴-10-羧酸第三丁酯及 22.9 公克 (47.6 毫莫耳) 對應之三芳基硼酸溶解在 80 毫升甲苯中且脫氣。添加 281 毫升脫氣之 2M K_2CO_3 及 2.5 公克 (2.2 毫莫耳) $Pd(OAc)_2$ 。接著將反應混合物在保護性氣體環境下以 80°C 攪拌 48 小時。將更多甲苯添加至冷卻溶液中，將其以水清洗數次，乾燥且蒸發。將產物在矽膠上以甲苯/庚烷 (1 : 2) 的管柱層析術純化，得到成為白色固體的 27 公克 (67.5%) 產物。

步驟 c) : 聯苯-4-基-[4-(12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]芴-7-基)苯基]-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)胺



將 20.0 公克 (24.4 毫莫耳) 7-{4-[聯苯-4-基-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)]苯基}-12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]芴-10-羧酸第三丁酯溶解在 250 毫升二氯甲烷及 2.65 毫升 (24.4 毫莫耳) 茴香醚中且接著添加 5.4 毫升三氟乙酸。將混合物在 40°C 下攪拌 3 小時，且當反應完成時以冰水及 20% NaOH 溶液的方式中和。將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且藉由從甲苯/庚烷再結晶而純化，得到成爲白色固體的 15.7 公克 (89%) 產物。

步驟 d) : 聯苯-4-基-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-[4-(12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]芴-7-基)]胺

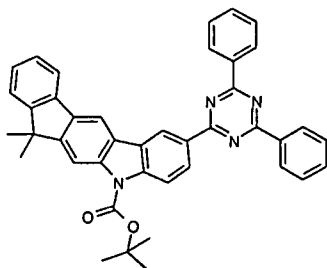


將 20.0 公克 (27.8 毫莫耳) 聯苯-4-基-[4-(12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]芴-7-基)]苯基-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)胺與 4.39 毫升 (41.7 毫莫耳) 溴苯溶解在 500 毫升甲苯中且脫氣。添加 1.94 毫升 (

1.94 毫莫耳 / 在甲苯中的 1M 溶液) 三 - 第三丁膦、249.8 毫克 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 4.01 公克 (41.7 毫莫耳) NaOtBu (將固體預先脫氣) , 且將混合物在回流下攪拌 5 小時。將溫熱 (45°C) 的混合物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾, 以水清洗, 乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以庚烷 / 甲苯萃取且從庚烷結晶, 在昇華之後得到成爲黃色固體的 14.7 公克 (67%) 產物, 具有 99.9% 純度。

實例 28 : 7- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡啶 -2-基) -12,12-二甲基 -10-[1,1';3',1"] 聯三苯 -5'-基 -10,12-二氫 -10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘

步驟 a) : 7- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡啶 -2-基) -12,12-二甲基 -12H-10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘 -10-羧酸第三丁酯



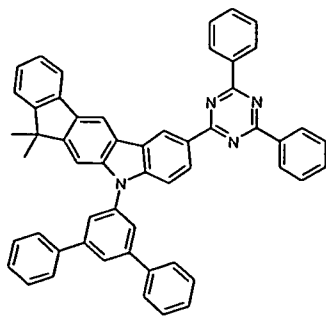
將 43.4 公克 (119.8 毫莫耳) 7-溴 -12,12-二甲基 -12H-10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘、33.5 公克 (131.8 毫莫耳) 雙 (頻哪醇基) 二硼烷及 34.1 公克 (347.8 毫莫耳) 乙酸鉀懸浮在 770 毫升二噁烷中。將 2.9 公克 (3.6 毫莫耳) 具有 DCM 的 1,1-雙 (二苯膦基) 二茂鐵 - 二氯化鈹 (II) 錯合物添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後, 將有機相分離, 以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。殘餘物係從甲苯再結晶 (39 公克

， 80% 產量) 。

將 39 公克 (95 毫莫耳) 氮雜茛並萘硼酸酯溶解在 1400 毫升無水乙腈中且添加 40.8 公克 (186.8 毫莫耳) BOC 酐及 23.65 公克 (191.65 毫莫耳) DMAP。將混合物在回流下加熱 1 小時，當反應完成時添加水，將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且蒸發。黃色油係藉由與庚烷攪拌而清洗，得到成爲白色固體的 37 公克 (75%) 產物。

將 36.7 公克 (70.1 毫莫耳) 硼酸酯、19.3 公克 (72 毫莫耳) 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶及 8.2 公克碳酸鈉懸浮在 900 毫升二噁烷、900 毫升甲苯及 400 毫升水中。將 4.25 公克 (3.7 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 5 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取且從甲苯再結晶。純度爲 99.9%。產量：36 公克，81% 理論值。

步驟 b) : 7-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10-[1,1';3',1'']聯三苯-5'-基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萘

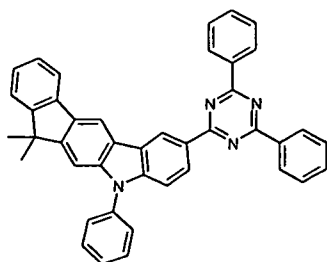


將 34.4 公克 (56 毫莫耳) 7-(4,6-二苯基-1,3,5-三

吡啶-2-基) -12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛苳並[2,1-b]萸-10-羧酸第三丁酯溶解在 420 毫升茴香醚且接著添加 11.5 毫升三氟乙酸。將混合物在 40°C 下攪拌 3 小時，且當反應完成時以冰水及 20% NaOH 溶液的方式中和。將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且藉由從甲苯/庚烷結晶而純化，得到成爲白色固體的 20 公克 (70%) 產物。

將 11.7 公克 (22.7 毫莫耳) 胺及 7.7 公克 (24.8 毫莫耳) 溴聯三苯溶解在 180 毫升二甲苯中且脫氣。添加 1.2 毫升 (1.2 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁膦、106 毫克 (0.47 毫莫耳) Pd(OAc)₂ 及 5.9 公克 (61.5 毫莫耳) NaOtBu 且將混合物在回流下攪拌 5 小時。將溫熱 (45°C) 的混合物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以庚烷/甲苯萃取且從庚烷結晶，在昇華之後得到成爲黃色固體的 10 公克 (65%) 產物，具有 99.9% 純度。

實例 29：7-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛苳並[2,1-b]萸



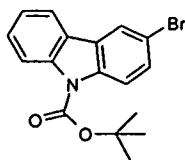
將 34.4 公克 (56 毫莫耳) 7-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛苳並[2,1-b]萸-10-羧酸第三丁酯溶解在 420 毫升茴香醚且接著添加 11.5 毫升

三氟乙酸。將混合物在 40°C 下攪拌 3 小時，且當反應完成時以冰水及 20% NaOH 溶液的方式中和。將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且藉由從甲苯/庚烷再結晶而純化，得到成爲白色固體的 20 公克（70%）產物。

將 8.1 公克（15.8 毫莫耳）胺及 1.7 毫升（16.2 毫莫耳）溴苯溶解在 200 毫升二甲苯中且脫氣。添加 0.8 毫升（0.8 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液）三-第三丁膦、66 毫克（0.29 毫莫耳）Pd(OAc)₂ 及 4 公克（42.6 毫莫耳）NaOtBu 且將混合物在回流下攪拌 5 小時。將溫熱（45°C）的混合物經由 Alox B（活性等級 1）過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以庚烷/甲苯萃取且從庚烷結晶，在昇華之後得到成爲黃色固體的 5.6 公克（60%）產物，具有 99.9% 純度。

實例 30：6,13-雙聯苯-4-基-11,11-二甲基-11,13-二氫-6H-6,13-二氮雜茛並[1,2-b]蔥

步驟 a)：3-溴吡啶-9-羧酸第三丁酯

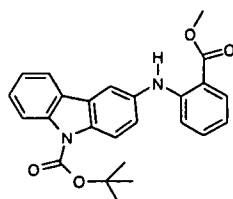


將 150 公克（0.85 莫耳）吡啶溶解在 2.5 公升 DMF 中且在 -10°C 下緩慢地添加溶解在 DMF 中的 153.2 公克（0.85 莫耳）N-溴琥珀醯亞胺。當反應完成時，在旋轉蒸發器中移除 DMF，將沉澱物溶解在二氯甲烷中，以水清洗，乾燥且蒸發。接著粗產物係藉由與熱 MeOH/庚烷（1：

1) 攪拌數次而清洗，得到成爲白色固體的 141.6 公克 (67.5%) 產物。

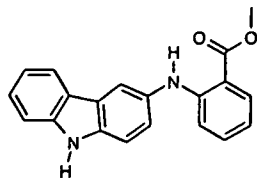
將 70.0 公克 (284 毫莫耳) 溴咪唑溶解在 100 毫升無水 THF 中且添加 86.9 公克 (398.2 毫莫耳) BOC 酐及 3.51 公克 (28.4 毫莫耳) DMAP。將混合物在回流下攪拌 2.5 小時，且當反應完成時在 RT 下添加水及二氯甲烷。將有機相分離，乾燥且從庚烷結晶 (超聲波浴)，得到成爲白色固體的 91.9 公克 (93.3%) 產物。

步驟 b) : 3-(2-甲氧基羰基苯基胺基)咪唑-9-羧酸第三丁酯



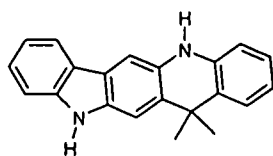
將 50.0 公克 (144 毫莫耳) 經 BOC 保護之溴咪唑與 30.7 毫升 (238 毫莫耳) 甲胺苯甲酸甲酯溶解在 1000 毫升無水甲苯中且脫氣。添加 21.6 毫升 (21.6 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液) 參-第三丁磷、2.6 公克 (11.5 毫莫耳) 脫氣之 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 81.3 公克 (249 毫莫耳) Cs_2CO_3 且將混合物在回流下攪拌 2.5 小時。將冷卻之反應溶液經由矽膠過濾且粗產物係從 MeOH/庚烷 (1:1) 結晶，得到成爲白色固體的 45.5 公克 (76%) 產物。

步驟 c) : 2-(9H-咪唑-3-基胺基)苯甲酸甲酯



將 5.0 公克 (12 毫莫耳) 咪唑溶解在 50 毫升二氯甲烷中，在 RT 下添加 2 毫升 (26 毫莫耳) 三氟乙酸及 0.26 毫升 (2.4 毫莫耳) 茴香醚且將混合物在 40°C 下攪拌 2 小時。當反應完成時，將混合物小心地滴入冰水中且使用 20% NaOH 儘可能快速地調整至 pH=7。將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且蒸發。將殘餘物經由矽膠過濾且藉由與熱庚烷攪拌而清洗，得到成爲白色固體的 3.24 公克 (85.3 %) 產物。

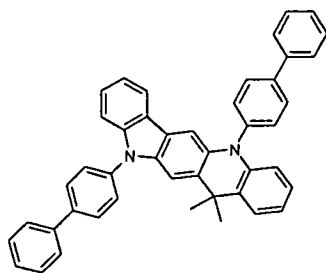
步驟 d) : 11,11-二甲基-11,13-二氫-6H-6,13-二氮雜茚並 [1,2-b] 蒽



將 10.0 公克 (31.6 毫莫耳) 2- (9H-咪唑 -3-基胺基) 苯甲酸甲酯溶解在 300 毫升無水 THF 中且將溶液冷卻至 -78°C。在此溫度下逐滴添加 71.8 毫升 (158.0 毫莫耳 / 在二乙醚中的 2.2M 溶液) MeLi。接著允許混合物經 5 小時期間來到 -40°C，且當在反應完成時使用 50 毫升 MeOH 小心地中止。接著將混合物以乙酸乙酯及水稀釋，將有機相乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係藉由與熱庚烷攪拌而清洗，得到成爲白色固體的 7.7 公克 (77%) 產物。

將 10.0 公克 (31.6 毫莫耳) 醇溶解在 150 毫升二氯甲烷中且將溶液及冷卻至 -20°C 。小心地混合 27.8 公克 (284 毫莫耳) 多磷酸及 20.5 毫升 (316 毫莫耳) 甲烷磺酸且在 -20°C 下經 15 分鐘期間逐滴添加至反應混合物中。當反應完成時，將反應溶液小心地倒入冰水中且將沉澱物以抽氣濾出。將沉澱物以二氯甲烷沖洗，在真空乾燥櫃中乾燥之後得到成爲白色固體的 6.7 公克 (71%) 產物。

步驟 e) : 6,13-雙聯苯-4-基-11,11-二甲基-11,13-二氫-6H-6,13-二氮雜茛並[1,2-b]蔥

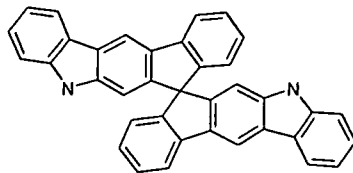


將 20.0 公克 (67.0 毫莫耳) 11,11-二甲基-11,13-二氫-6H-6,13-二氮雜茛並[1,2-b]蔥及 46.8 公克 (201.1 毫莫耳) 4-溴聯苯溶解在 250 毫升甲苯中且脫氣。添加 4.69 毫升 (4.69 毫莫耳 / 在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁磷、19.3 公克 (201 毫莫耳) 脫氣之 NaOtBu 及 601 毫克 (2.68 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ ，接著將混合物脫氣且在回流下加熱 10 小時。當反應完成時，將溫熱的混合物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中使用甲苯/庚烷 (1 : 1) 純化且從甲苯結晶，在昇華之後得到成爲黃色固體的 21.8 公克 (54%)

) 產物，具有 99.9% 純度。

實例 31：10,10'-二-(1,3-嘓啶-2-基)-10,10',12,12'-四氫-10,10'-二氮雜蒽並[2,1-b]-12,12-螺旋萸

步驟 a)：10,10',12,12'-四氫-10,10'-二氮雜蒽並[2,1-b]-12,12-螺旋萸

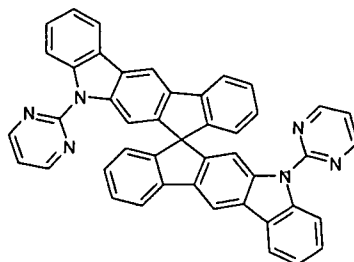


將 50 公克 2,2'-二溴-9,9'-螺旋聯萸 (105.4 毫莫耳)、21.2 毫升苯胺 (232 毫莫耳)、2.9 公克 DPPF (5.2 毫莫耳)、1.18 公克乙酸鈮 (II) (5.3 毫莫耳) 及 50.7 公克第三丁醇鈉 (527 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 1 公升甲苯中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物 2,2'-二胺苯基-9,9'-螺旋聯萸係從庚烷/乙酸乙酯再結晶。產量為 42 公克 (80%)。

將 300 毫升三甲基乙酸添加至 40 公克 2,2'-二胺苯基-9,9'-螺旋聯萸 (80 毫莫耳)、1.7 公克乙酸鈮 (II) (8 毫莫耳) 及 1.6 公克碳酸鉀 (11.4 毫莫耳) 中且將混合物在空氣下以 120°C 攪拌 9 小時。在此時間之後，添加 1.7 公克乙酸鈮 (II) (8 毫莫耳) 且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 200 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水

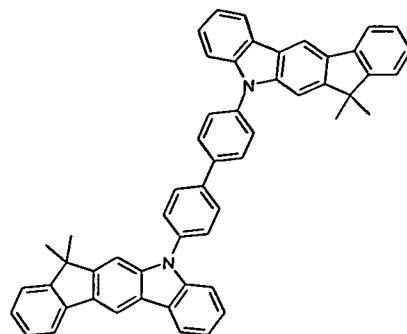
相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 19.8 公克（40 毫莫耳，50%）。

步驟 b)：10,10'-二-(1,3-嘓啶-2-基)-10,10',12,12'-四氫-10,10'-二氮雜蒽並[2,1-b]-12,12-螺旋萸



將 18 公克（36.4 毫莫耳）10,10',12,12'-四氫-10,10'-二氮雜蒽並[2,1-b]-12,12-螺旋萸在保護性氣體環境下溶解在 200 毫升二甲基甲醯胺中且添加 3.35 公克在礦物油中的 60% NaH （83.7 毫莫耳）。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 100 毫升 THF 中的 2-溴-1,3-嘓啶（12.7 公克，80 毫莫耳）之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 19 公克（80%）。

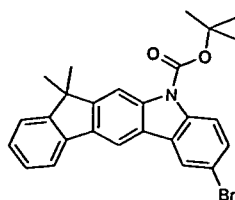
實例 32：4,4'-二(12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萸-10-基)聯苯



將 30.3 公克 (107 毫莫耳) 12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛苳並 [2,1-b]茛苳、16.9 公克 (54.2 毫莫耳) 4,4'-二溴聯苯及 29.2 公克 (304 毫莫耳) NaOtBu 懸浮在 1.35 公升對 -二甲苯中。將 490 毫克 (2.1 毫莫耳) Pd(OAc)₂ 及 1.7 毫升 (6.72 毫莫耳) 三 -第三丁膦溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 37.8 公克 (53 毫莫耳，90%)。

實例 33 : 12,12,12',12'-四甲基 -10,10'-二苯基 -10,12,10',12'-四氫 -[7,7']雙 [10-氮雜茛苳並 [2,1-b]茛苳基]

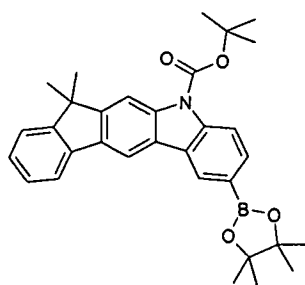
步驟 a) : 7-溴 -12,12-二甲基 -12H-10-氮雜茛苳並 [2,1-b]茛苳 -10-羧酸第三丁酯



將 35.5 公克 (98 毫莫耳) 7-溴 -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛苳並 [2,1-b]茛苳溶解在 500 毫升無水 THF 中且

添加 30.0 公克 (137.5 毫莫耳) BOC 酐及 1.21 公克 (9.82 毫莫耳) DMAP。將混合物在回流下加熱 1 小時，當反應完成時添加水，將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且蒸發。黃色油係藉由與庚烷攪拌而清洗，得到成爲白色固體的 35 公克 (77%) 產物。

步驟 b) : 12,12-二甲基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜環戊硼烷-2-基)-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]茛-10-羧酸第三丁酯

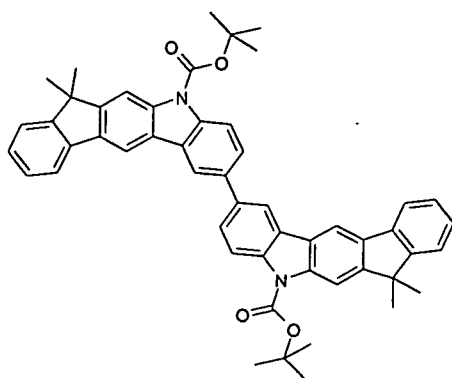


將 43.4 公克 (119.8 毫莫耳) 7-溴-12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]茛、33.5 公克 (131.8 毫莫耳) 雙(頻哪醇基)二硼烷及 34.1 公克 (347.8 毫莫耳) 乙酸鉀懸浮在 770 毫升二噁烷中。將 2.9 公克 (3.6 毫莫耳) 具有 DCM 的 1,1-雙(二苯膦基)二茂鐵-二氧化鈮(II)錯合物添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。殘餘物係從甲苯再結晶 (39 公克，80% 產量)。

將 39 公克 (95 毫莫耳) 氮雜茛並茛硼酸酯溶解在 1400 毫升無水乙腈中且添加 40.8 公克 (186.8 毫莫耳)

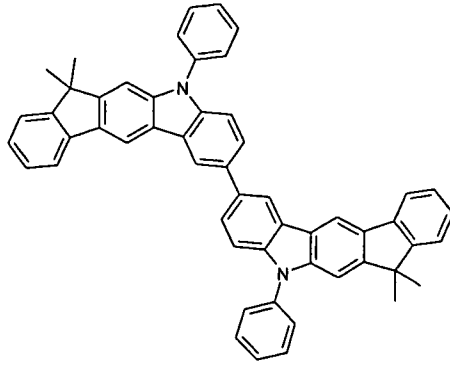
BOC 酐及 23.65 公克 (191.65 毫莫耳) DMAP。將混合物在回流下加熱 1 小時，當反應完成時添加水，將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且蒸發。黃色油係藉由與庚烷攪拌而清洗，得到成爲白色固體的 37 公克 (75%) 產物。

步驟 c) : 12,12,12',12'-四甲基-12H,12'H-[7,7']雙[10-氮雜茛並[2,1-b]萘基]-10,10'-二羧酸二-第三丁酯



將 37 公克 (72.6 毫莫耳) 硼酸酯，33.6 公克 (72.6 毫莫耳) 7-溴-12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]萘-10-羧酸第三丁酯及 11.6 公克碳酸鈉懸浮在 900 毫升二噁烷、900 毫升甲苯及 400 毫升水中。將 4.2 公克 (3.6 毫莫耳) Pd(PPh₃)₄ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 5 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取且從甲苯再結晶。產量：47 公克，85% 理論值。

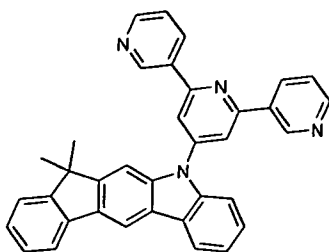
步驟 d) : 12,12,12',12'-四甲基-10,10'-二苯基-10,12,10',12'-四氫-[7,7']雙[10-氮雜茛並[2,1-b]萘基]



將 47 公克 (61.4 毫莫耳) 12,12,12',12'-四甲基 - 12H,12'H-[7,7']雙 [10-氮雜茛並 [2,1-b]萘基]-10,10'-二羧酸二-第三丁酯溶解在 500 毫升二氯甲烷中且接著添加 5 毫升茴香醚及 13.7 毫升三氟乙酸。將混合物在 40°C 下攪拌 3 小時，且當反應完成時以冰水及 20% NaOH 溶液的方式中和。將產物以二氯甲烷萃取，乾燥且藉由從甲苯再結晶而純化，得到成爲固體的 32 公克 (90%) 產物。

將 32 公克 (56.7 毫莫耳) 胺與 22 公克 (141.7 毫莫耳) 溴苯溶解在 1 公升甲苯中且脫氣。添加 5.7 毫升三-第三丁磷 (在甲苯中的 1M 溶液)、640 毫克 (2.83 毫莫耳) Pd(OAc)₂ 及 16.3 公克 (170 毫莫耳) NaOtBu 且將混合物在回流下攪拌 5 小時。將溫熱 (45°C) 的混合物經由 Alox B 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以甲苯萃取且再結晶，得到成爲黃色固體的 28 公克 (70%) 產物。最後將固體在高真空中昇華。純度爲 99.9%。

實例 34 : 12,12-二甲基-10-[3,2';6',3'']三吡啶-4'-基-10,12-二氫-10-氮雜茛並 [2,1-b]萘

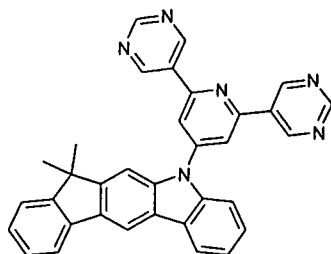


將 11 毫升 (113 毫莫耳) 3-溴吡啶溶解在 225 毫升無水 THF 中，將溶液冷卻至 -70°C 且添加 26.3 毫升 (115 毫莫耳) 硼酸三甲酯。將 46 毫升 (115 毫莫耳/在己烷中的 2.5M 溶液) $n\text{-BuLi}$ 在此溫度下經約 10 分鐘期間添加至反應混合物中且接著將混合物在 -78°C 下再攪拌 1 小時。允許溫度上升至 -40°C 且將混合物再攪拌 20 分鐘，接著允許來到 -20°C ，在此期間逐滴添加 100 毫升 2N 氫氨酸。將有機相分離且將水相使用 4N 氫氧化鈉溶液調整至 pH 7。將水相以氯化鈉飽和且以 THF 萃取三次。將有機相合併且蒸發。產量：12.0 公克 (90% 理論值)。

將 20 公克 (38.6 毫莫耳) 10-(2,6-二溴吡啶-4-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘及 10.4 公克 3-吡啶硼酸 (84.9 毫莫耳) 懸浮在 400 毫升乙二醇二甲醚中。將 85 毫升 2M Na_2CO_3 溶液添加至反應混合物中。將 2.23 公克 (1.93 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 12 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：12 公克，60% 理論值。

實例 35：10-(2,6-二嘧啶-5-基吡啶-4-基)-12,12-二甲

基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萘

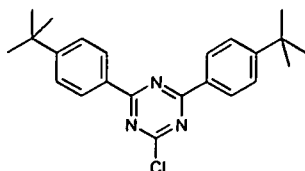


將 30 公克 (189 毫莫耳) 5-溴嘧啶溶解在 900 毫升無水 THF 中，將溶液冷卻至 -78°C 且添加 87 毫升 (337 毫莫耳) 硼酸三甲酯。將 77.7 毫升 (194 毫莫耳/在己烷中的 2.5M 溶液) $n\text{-BuLi}$ 在此溫度下經約 30 分鐘期間添加至反應混合物中且接著將混合物在 -78°C 下再攪拌 4.5 小時。接著將 110 毫升水添加至反應混合物中，接著緩慢溫熱至室溫。將 THF 在旋轉蒸發器中移除且將水相使用 5% NaOH 調整至 pH 10。接著將混合物以二乙醚清洗。將水相使用 48% HBr 調整至 pH 4 且將沉澱固體濾出。產量：11 公克 (47% 理論值)。

將 15 公克 (29 毫莫耳) 10-(2,6-二溴吡啶-4-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萘及 7.9 公克 5-嘧啶硼酸 (63.7 毫莫耳) 懸浮在 300 毫升乙二醇二甲醚中。將 65 毫升 2M Na_2CO_3 溶液添加至反應混合物中。將 1.67 公克 (1.45 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 12 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量：8.5 公克，57% 理論值。

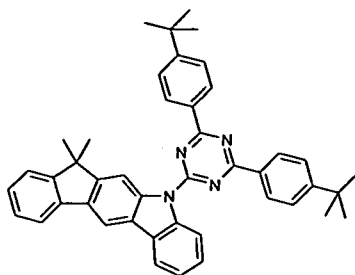
實例 36：10-[4,6-雙(4-第三丁苯基)-1,3,5-三吡-2-基]-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茚

步驟 a)：2,4-雙(4-第三丁苯基)-6-氯-1,3,5-三吡



將 5.7 公克鎂 (234.6 毫莫耳) 先引入 500 毫升四頸燒瓶中且緩慢地逐滴添加在 200 毫升 THF 中的 50 公克溴-4-第三丁苯 (234.6 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物以沸騰加熱 1.5 小時且接著冷卻至室溫。將在 200 毫升 THF 中的氯化氫 (18.8 公克, 102 毫莫耳) 先引入第二個燒瓶中且冷卻至 0°C。在此溫度下逐滴添加冷卻之格任亞試劑且將混合物在 RT 下攪拌 12 小時。在此時間之後, 將 150 毫升 HCl 添加至反應混合物中且將水相以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相以水清洗, 經 Na₂SO₄ 乾燥且蒸發。殘餘物係從 EtOH 再結晶。產量為 31 公克 (81.6 毫莫耳, 80%)。

步驟 b)：10-[4,6-雙(4-第三丁苯基)-1,3,5-三吡-2-基]-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茚

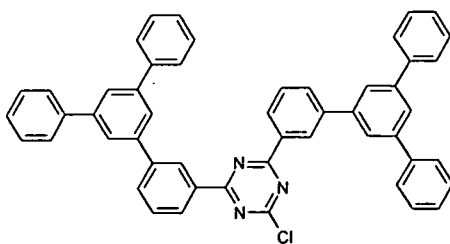


將 12.5 公克 (44 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-

10-氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 200 毫升二甲基甲醯胺中且添加 2.1 公克在礦物油中的 60% NaH (52.7 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 100 毫升 THF 中的 2,4-雙(4-第三丁苯基)-6-氯-1,3,5-三吡啶(20 公克，52.7 毫莫耳)之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na₂SO₄ 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華。產量：17 公克，60%。純度為 99.9%。

實例 37：10-(4,6-雙(3-([3,1';5,1''])聯三苯-1-基)苯-1-基)-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘

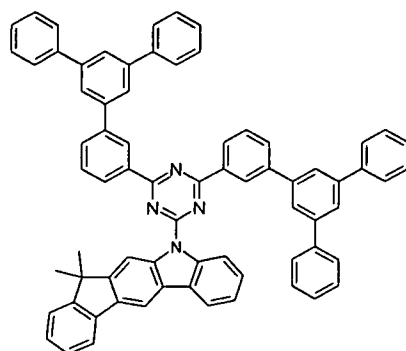
步驟 a)：2-氯-4,6-雙(3-([3,1';5,1''])聯三苯-1-基)苯-1-基)-1,3,5-三吡啶



將 2.0 公克鎂 (81 毫莫耳) 先引入 500 毫升四頸燒瓶中且緩慢地逐滴添加在 100 毫升 THF 中的 31.2 公克 5'-(3-溴苯基)-[1,1';3',1'']聯三苯 (81 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物以沸騰加熱 1.5 小時且接著冷卻至室溫。將在 50 毫升 THF 中的氯化氫 (6.4 公克，35 毫莫耳) 先引入第二個燒瓶中且冷卻至 0°C。在此溫度下逐滴添加冷卻之

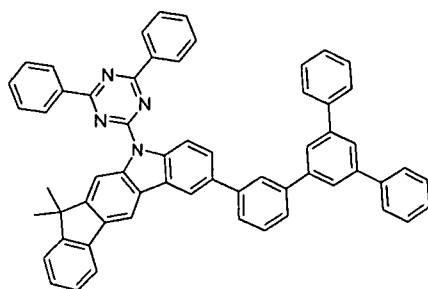
格任亞試劑且將混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將 150 毫升 HCl 添加至反應混合物中，將水相以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相以水清洗，經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。殘餘物係從甲苯再結晶。產量為 6.8 公克（9.4 毫莫耳，28%）。

步驟 b) : 10-(4,6-雙(3-([3,1';5,1"] 聯三苯-1-基) 苯-1-基)-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘



將 8.0 公克（28 毫莫耳）12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 210 毫升二甲基甲醯胺中且添加 1.4 公克在礦物油中的 60% NaH（35 毫莫耳）。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 250 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氯-[4,6-雙-5'-(3-溴苯基)-[1,1';3',1"] 聯三苯-5'-基]-1,3,5-三吡啶（22.5 公克，31 毫莫耳）之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。殘餘物係從庚烷/甲苯再結晶。產量為 12.2 公克（13 毫莫耳，44%）

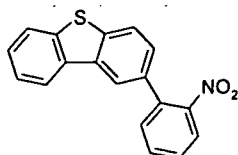
實例 38：7-（3-（[3,1';5,1''']聯三苯-1-基）苯-1-基）-10-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘



將 25.0 公克（42.1 毫莫耳）7-溴-10-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘及 19.9 公克 1-頻哪基硼酸 3-（[3,1';5,1''']聯三苯-1-基）苯酯（46.3 毫莫耳）溶解在 80 毫升甲苯中且脫氣。添加 281 毫升脫氣之 2M K_2CO_3 及 2.4 公克（2.1 毫莫耳） $Pd(PPh_3)_4$ 。接著將反應混合物在保護性氣體環境下以 80°C 攪拌 48 小時。將更多甲苯添加至冷卻溶液中，將其以水清洗數次，乾燥且蒸發。殘餘物係從庚烷/甲苯再結晶。產量為 21.8 公克（26.6 毫莫耳，63.2%）。

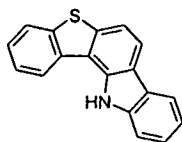
實例 39：12-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基）-7-硫雜-12-氮雜蒽並[1,2-a]萘

步驟 a)：2-（3-硝苯基）二苯並噻吩



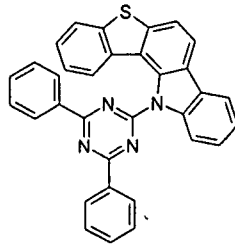
將 15.0 公克 2-溴二苯並噻吩 (57.0 毫莫耳) 及 14.3 公克 2-硝苯基硼酸 (85.5 毫莫耳) 溶解在 400 毫升甲苯中且脫氣。添加 370 毫升脫氣之 2M K_2CO_3 及 1.6 公克 $Pd(PPh_3)_4$ (1.4 毫莫耳)。將反應混合物在保護性氣體環境下以 80°C 攪拌 48 小時。將更多甲苯添加至冷卻溶液中，將其以水清洗數次，乾燥且蒸發。呈黃色油形式的殘餘物以未進一步純化而用於後續反應中。產量為 16.9 公克 (55.4 毫莫耳，89%)。

步驟 b) : 12H-7-硫雜-12-氮雜茛並 [1,2-a] 萘



將 21.0 公克 2-(3-硝苯基)二苯並噻吩 (68.8 毫莫耳) 溶解在 140 毫升 1,2-二氯苯。添加 30 毫升亞磷酸三乙酯 (172 毫莫耳)。在 135°C 下 24 小時之後，允許批組冷卻且在旋轉蒸發器中蒸發。將殘餘物在矽膠上以庚烷 / 乙酸乙酯 (3 : 1) 的管柱層析術純化。產量為 15.1 公克 (55.4 毫莫耳，81%)。

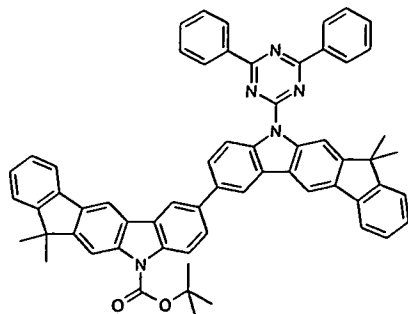
步驟 c) : 12-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-7-硫雜-12-氮雜茛並 [1,2-a] 萘



將 15.1 公克 (55.4 毫莫耳) 12H-7-硫雜 -12-氮雜茛並 [1,2-a] 萸在保護性氣體環境下溶解在 315 毫升二甲基甲醯胺中且添加 2.4 公克在礦物油中的 60% NaH (61 毫莫耳) 。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 80 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氯-[4,6-雙苯基]-1,3,5-三吡啶 (17.8 公克，66.5 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。殘餘物係從甲苯再結晶。在昇華之後的產量為 23.8 公克 (47.1 毫莫耳，85%)，具有 99.9% 純度。

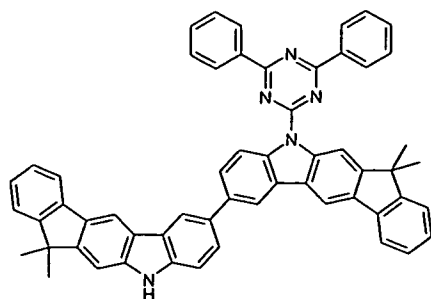
實例 40：7-{10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸基}-12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸

步驟 a)：7-{10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萸基}-12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]萸-10-羧酸第三丁酯



將 21.0 公克 (41.2 毫莫耳) 12,12-二甲基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜環戊硼烷-2-基)-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]茛-10-羧酸第三丁酯、24.5 公克 (41.0 毫莫耳) 7-溴-10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛及 4.8 公克碳酸鈉懸浮在 500 毫升二噁烷、500 毫升甲苯及 400 毫升水中。將 2.4 公克 (2.1 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 5 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取且從甲苯再結晶。產量為 32.1 公克 (36 毫莫耳，87%)。

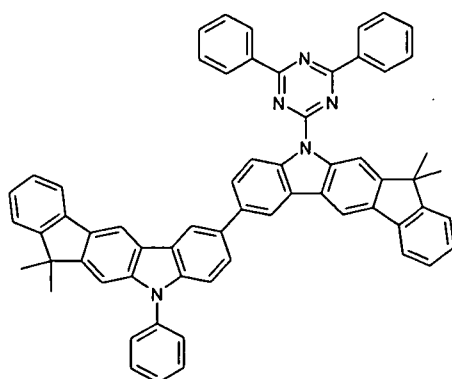
步驟 b) : 7-{10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛基}-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]茛



將 30.2 公克 (34.0 毫莫耳) 7-{10-(4,6-二苯基-

1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並 [2,1-b]萸基}-12,12-二甲基-12H-10-氮雜蒽並 [2,1-b]萸-10-羧酸第三丁酯溶解在 900 毫升甲苯及 200 毫升茴香醚中且接著添加 50 毫升三氟乙酸。將混合物在 40°C 下攪拌 3 小時，且當反應完成時以冰水及 20% NaOH 溶液的方式中和。將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且從甲苯再結晶。產量為 23.6 公克 (30 毫莫耳，88%)。

步驟 c) : 7-{10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並 [2,1-b]萸基}-12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並 [2,1-b]萸

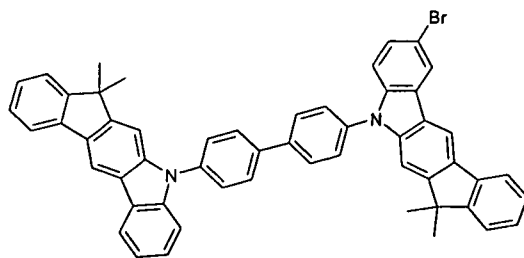


將 21.0 公克 (26 毫莫耳) 7-{10-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並 [2,1-b]萸基}-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並 [2,1-b]萸、2.8 公克 (27 毫莫耳) 溴苯及 6.8 公克 (71 毫莫耳) NaOtBu 懸浮在 1000 毫升對-二甲苯中。將 0.11 公克 (0.5 毫莫耳) Pd(OAc)₂ 及 0.33 毫升 1M 三-第三丁磷溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 100 毫升水清洗三次且接著

蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華。產量為 15.3 公克（18 毫莫耳，66.5 %）。

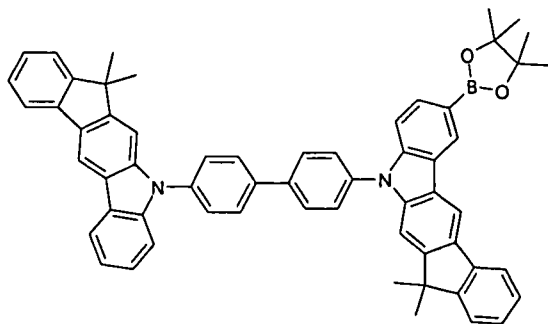
實例 41：4-（7-（4,6-二苯基-1,3,5-三吡-2-基）-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘-10-基）-4'-（12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘-10-基）聯苯

步驟 a)：4-（7-溴-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘-10-基）-4'-（12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘-10-基）聯苯



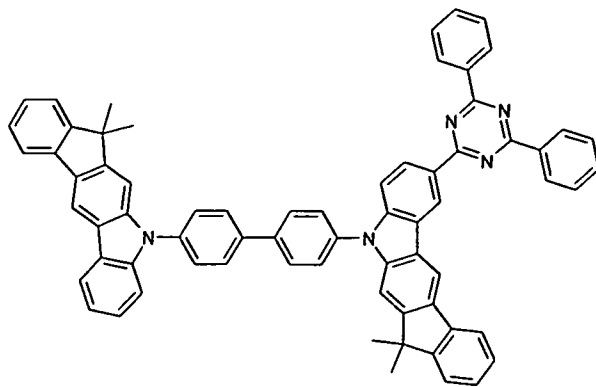
將 9.42 公克（13.1 毫莫耳）4,4'-雙（12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘-10-基）聯苯先引入 77 毫升 THF 中。接著以蔽光在 -15°C 下逐滴添加在 25 毫升 THF 中的 2.36 公克（13.2 毫莫耳）NBS 之溶液，允許來到室溫且在此溫度下再攪拌 4 小時。接著將 150 毫升水添加至混合物中，接著將其以 CH_2Cl_2 萃取。將有機相經 MgSO_4 乾燥且在真空中移除溶劑。產物係藉由與熱乙醇攪拌而清洗且以抽氣濾出。產量為 7.5 公克（9.4 毫莫耳，72 %）。

步驟 b) : 4- (7- (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜環戊硼烷-2-基) -12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並 [2,1-b] 萸-10-基) -4'- (12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並 [2,1-b]萸-10-基) 聯苯



將 7.1 公克 (9.0 毫莫耳) 4- (7-溴-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並 [2,1-b]萸-10-基) -4'- (12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並 [2,1-b]萸-10-基) 聯苯、2.5 公克 (9.85 毫莫耳) 雙 (頻哪醇基) 二硼烷及 2.6 公克 (26 毫莫耳) 乙酸鉀懸浮在 500 毫升二噁烷中。將 0.22 公克 (0.27 毫莫耳) 具有二氯甲烷的 1,1-雙 (二苯膦基) 二茂鐵-二氯化鈮 (II) 錯合物添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 150 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。殘餘物係從甲苯再結晶。產量為 6.8 公克 (8 毫莫耳，90%) 。

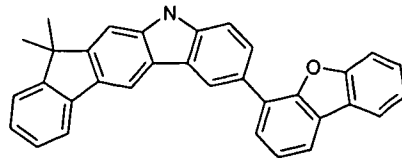
步驟 c) : 4- (7- (4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶-2-基) -12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並 [2,1-b]萸-10-基) -4'- (12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並 [2,1-b]萸-10-基) 聯苯



將 6.0 公克 (7.0 毫莫耳) 4- (7- (4,4,5,5-四甲基 - 1,3,2-二氧雜環戊硼烷 -2-基) -12,12-二甲基 -10,12-二氫 - 10-氮雜茛並 [2,1-b]萸 -10-基) -4'- (12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萸 -10-基) 聯苯、1.9 公克 (7.1 毫莫耳) 2-氯 -4,6-二苯基 -1,3,5-三吡及 0.83 公克 (7.8 毫莫耳) 碳酸鈉懸浮在 400 毫升二噁烷、400 毫升甲苯及 200 毫升水中。將 0.42 公克 (3.6 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 5 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華。在昇華之後的產量為 5.2 公克 (5 毫莫耳，77%)，具有 99.9% 純度。

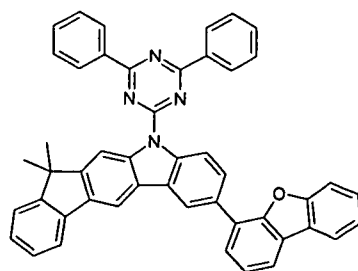
實例 42：7-二苯並呋喃 -4-基 -10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萸

步驟 a)：7-二苯並呋喃 -4-基 -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]萸



將 32 公克 (90.6 毫莫耳) 7-溴 -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]茛、19.9 公克 (94 毫莫耳) 二苯並呔喃 -4-硼酸及 164 毫升飽和 NaHCO_3 溶液懸浮在 1640 毫升甲苯及 164 毫升乙醇中。將 1.9 公克 (1.6 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中且將反應混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將有機相分離，經由矽膠過濾，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。產量為 26.7 公克 (59 毫莫耳)，對應於 65% 理論值。

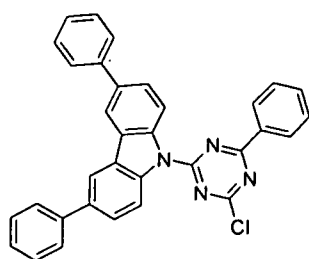
步驟 b) : 7-二苯並呔喃 -4-基 -10- (4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 -2-基) -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]茛



將 16.6 公克 (58.78 毫莫耳) 7-二苯並呔喃 -4-基 -12,12-二甲基 -10,12-二氫 -10-氮雜茛並 [2,1-b]茛在保護性氣體環境下溶解在 225 毫升二甲基甲醯胺中且添加 2.8 公克在礦物油中的 60% NaH (70 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 75 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氯 -4,6-二苯基 -1,3,5-三吡 (18.6 公克，66.2 毫莫耳) 之溶液。將

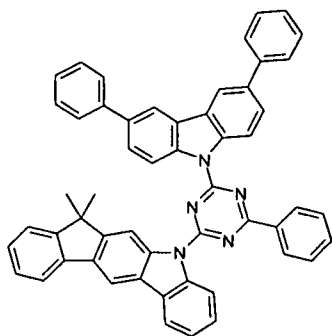
反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從二氯甲烷/異丙醇再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 18.3 公克（27 毫莫耳，45.7%）。

實例 43：10-[4-(3,6-二苯基咪唑-9-基)-6-苯基-1,3,5-三吡啶-2-基]-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘
 步驟 a)：9-(4-氯-6-苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-3,6-二苯基-9H-咪唑



將 29.9 公克（93.6 毫莫耳）3,6-二苯基-9H-咪唑在保護性氣體環境下溶解在 660 毫升 THF 中且添加 7.49 公克在礦物油中的 60% NaH（187 毫莫耳）。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 300 毫升 THF 中的 2,4-二氯-6-苯基-1,3,5-三吡啶（63.1 公克，279.3 毫莫耳）之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取且從二氯甲烷/異丙醇再結晶。產量為 28.4 公克（56 毫莫耳，60%）。

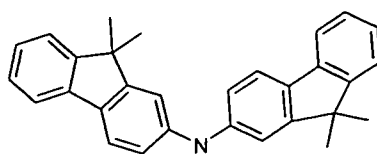
步驟 b) : 10-[4-(3,6-二苯基吡啶-9-基)-6-苯基-1,3,5-三吡啶-2-基]-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘



將 18.7 公克 (66.3 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]萘在保護性氣體環境下溶解在 200 毫升二甲基甲醯胺中且添加 5.3 公克在礦物油中的 60% NaH (73 毫莫耳)。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 150 毫升二甲基甲醯胺中的 9-(4-氯-6-苯基-1,3,5-三吡啶-2-基)-3,6-二苯基-9H-吡啶 (40.5 公克, 79.5 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na₂SO₄ 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從二氯甲烷/異丙醇再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 21.4 公克 (28 毫莫耳, 42%)。

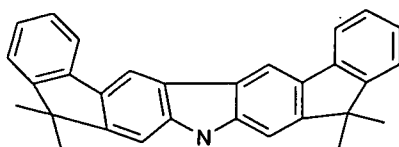
實例 44 :

步驟 a) : 雙(9,9-二甲基-9H-萘-2-基)胺



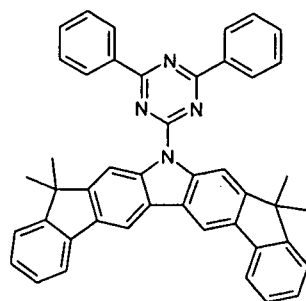
將 81 公克 2-溴-9,9-二甲基-9H-芴 (300 毫莫耳)、93 公克 2-胺基-9,9-二甲基-9H-芴 (444 毫莫耳)、5 公克 DPPF (9 毫莫耳)、2 公克乙酸鈣 (II) 及 86 公克第三丁醇鈉 (486 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 1.5 公升甲苯中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物係從庚烷/乙酸乙酯再結晶。產量為 93 公克 (231 毫莫耳，77%)。

步驟 b)：雙 (9,9-二甲基-9H-芴-2-基) 胺與鈣的反應



將 35 毫升三甲基乙酸添加至 10 公克 (9,9-二甲基-9H-芴-2-基) 苯胺 (35 毫莫耳)、0.4 公克乙酸鈣 (II) (1.78 毫莫耳) 及 0.5 公克碳酸鉀 (3.62 毫莫耳) 中且將混合物在 120°C 下攪拌 9 小時。在此時間之後，添加 0.4 公克乙酸鈣 (II) (1.78 毫莫耳) 且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 200 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 5 公克 (5 毫莫耳，50%)。

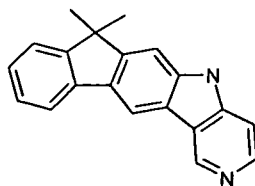
步驟 c)：與二苯基-1,3,5-三吡啶反應



將 25 公克 (62.5 毫莫耳) 產物 b) 在保護性氣體環境下溶解在 200 毫升二甲基甲醯胺中且添加 7.7 公克在礦物油中的 60% NaH (194 毫莫耳) 。在室溫下 1 小時之後，逐滴添加在 300 毫升二甲基甲醯胺中的 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶 (25 公克，68 毫莫耳) 之溶液。將反應混合物在室溫下攪拌 12 小時。在此時間之後，將反應混合物倒在冰上且以二氯甲烷萃取三次。將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且蒸發。將殘餘物以熱甲苯萃取，從二氯甲烷/異丙醇再結晶且最後在高真空中昇華，純度為 99.9%。產量為 17 公克 (27 毫莫耳，44%) 。

實例 45：雙 [3'- (10,10-二甲基-10H-3,12-二氮雜茛並 [2,1-b] 萘-12-基) 聯苯-3-基] 甲酮

步驟 a)：10,10-二甲基-10,12-二氫-3,12-二氮雜茛並 [2,1-b] 萘

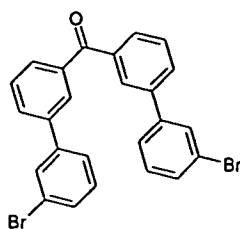


將 62.5 公克 2-溴-9,9-二甲基-9H-萘 (230 毫莫耳)、29.6 公克 3-氯吡啶-4-胺 (230 毫莫耳)、1.9 公克 (

3.5 毫莫耳) 1,1-雙(二苯膦基)二茂鐵、0.6 公克乙酸鈹(II) (2.8 毫莫耳) 及 57.2 公克第三丁醇鈉(598 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 1.5 公升甲苯中以沸騰加熱 18 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物(3-氯吡啶-4-基)-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)胺係從庚烷/乙酸乙酯再結晶。產量為 66.4 公克(207 毫莫耳, 90%)。

將 500 毫升二噁烷添加至 42 公克(3-氯吡啶-4-基)-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)胺(130 毫莫耳)、1.46 公克乙酸鈹(II) (6.5 毫莫耳)、75 公克第三丁醇鈉(780 毫莫耳) 及 7.8 毫升在甲苯中的 1M $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 溶液(7.8 毫莫耳) 中且將混合物在 105°C 及氮氣下攪拌 24 小時。接著添加 200 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 18.5 公克(65.1 毫莫耳, 50%)。

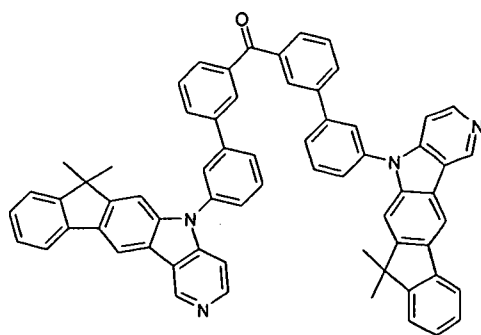
步驟 b) : 雙(3'-溴聯苯-3-基)甲酮



對應之格任亞試劑係從在 300 毫升 THF 中的 31.5 公

克 (101 毫莫耳) 3,3'-二溴聯苯、1 毫升二氯乙烷及 30 毫升 1,2-二甲氧基乙烷之溶液與 2.8 公克 (115 毫莫耳) 鎂在沸騰溫度下製備。將在 130 毫升 THF 與 130 毫升甲苯之混合物中的 26.06 公克 (101 毫莫耳) 3-溴-3'-氰聯苯之溶液在 0-5°C 下經 20 分鐘期間逐滴添加至此格任亞溶液中。接著將混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將反應混合物蒸發至乾燥。將固體溶解在 1100 毫升 NMP 中且與 40 毫升水及 5 毫升冰醋酸在回流下加熱 24 小時。添加 600 毫升甲醇與 600 毫升 1N 氫氯酸之混合物，將沉澱固體以過濾分離且乾燥。粗產物係從甲苯/庚烷再結晶。根據 HPLC 具有純度 > 97% 之產量為 34.8 公克 (70.7 毫莫耳)，對應於 70.1% 理論值。

步驟 c) : 雙 [3'- (10,10-二甲基-10H-3,12-二氮雜茛並 [2,1-b] 茚 -12-基) 聯苯-3-基] 甲酮

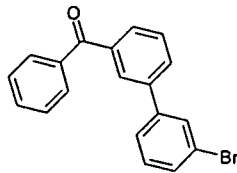


將 11.6 公克 (23.5 毫莫耳) 雙 (3'-溴聯苯-3-基) 甲酮、13.36 公克 (47 毫莫耳) 10,10-二甲基-10,12-二氫-3,12-二氮雜茛並 [2,1-b] 茚及 29.2 公克 Rb_2CO_3 懸浮在 250 毫升對-二甲苯中。將 0.95 公克 (4.2 毫莫耳) $Pd(OAc)_2$ 及 12.6 毫升 1M 三-第三丁膦溶液添加至此懸浮液中。將

反應混合物在回流下加熱 24 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶三次且最後在高真空中昇華，得到 10.56 公克（14.7 毫莫耳），對應於 50% 理論值。純度為 99.9%。

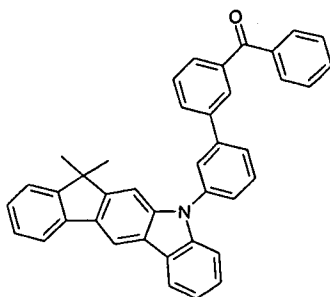
實例 46：[3'-（12,12-二甲基-12H-10-氮雜蒽並[2,1-b]芴-10-基）聯苯-3-基]苯基甲酮

步驟 a)：（3'-溴聯苯-3-基）苯基甲酮



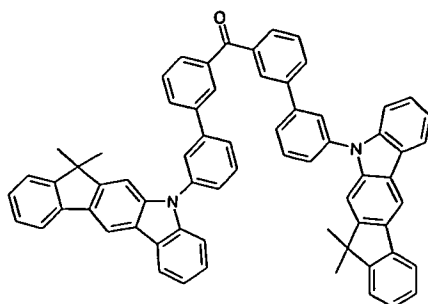
對應之格任亞試劑係從在 30 毫升 1,2-二甲氧基乙烷及 300 毫升 THF 中的 31.5 公克（101 毫莫耳）3,3'-二溴聯苯及 1 毫升 1,2-二氯乙烷之溶液與 2.8 公克（115 毫莫耳）鎂在沸騰溫度下製備。將在 130 毫升 THF 與 130 毫升甲苯之混合物中的 10.4 公克（101 毫莫耳）苯甲腈之溶液在 0-5°C 下經 20 分鐘期間逐滴添加至此格任亞溶液中。接著將混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將反應混合物蒸發至乾燥。將固體溶解在 1000 毫升 NMP 中且與 40 毫升水及 2 毫升冰醋酸在回流下加熱 12 小時。添加 600 毫升甲醇與 600 毫升 1N 氫氯酸之混合物，將沉澱固體以過濾分離且乾燥。粗產物係從甲苯/庚烷再結晶。根據 HPLC 具有純度 > 98% 之產量為 27.1 公克（80.5 毫莫耳），對應於 79.7% 理論值。

步驟 b) : [3'- (12,12-二甲基 -12H-10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘 -10-基) 聯苯 -3-基] 苯基甲酮



將 15.8 公克 (47 毫莫耳) (3'-溴聯苯 -3-基) 苯基甲酮、 13.36 公克 (47 毫莫耳) 10,10-二甲基 -10,12-二氫 -3,12-二氮雜蒽並 [2,1-b] 萘及 29.2 公克 Rb_2CO_3 懸浮在 250 毫升對 -二甲苯中。將 0.95 公克 (4.2 毫莫耳) $Pd(OAc)_2$ 及 12.6 毫升 1M 三 -第三丁膦溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 24 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 150 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶三次且最後在高真空中昇華，得到 14.2 公克 (26.3 毫莫耳)，對應於 56% 理論值。純度為 99.9%。

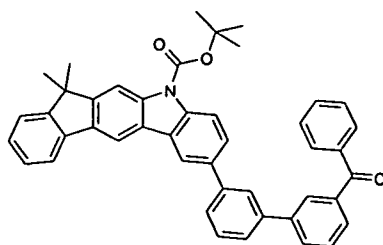
實例 47 : 雙 [3'- (12,12-二甲基 -12H-10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘 -10-基) 聯苯 -3-基] 甲酮



將 11.6 公克 (23.5 毫莫耳) 雙 (3'-溴聯苯-3-基) 甲酮、 13.36 公克 (47 毫莫耳) 10,10-二甲基-10,12-二氫-3,12-二氮雜蒽並 [2,1-b] 萘及 29.2 公克 Rb_2CO_3 懸浮在 250 毫升對-二甲苯中。將 0.95 公克 (4.2 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 12.6 毫升 1M 三-第三丁磷溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 24 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且接著蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶三次且最後在高真空中昇華，得到 14.56 公克 (16.2 毫莫耳)，對應於 70% 理論值。純度為 99.9%。

實例 48：[3'- (12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘-7-基) 聯苯-3-基] 苯基甲酮

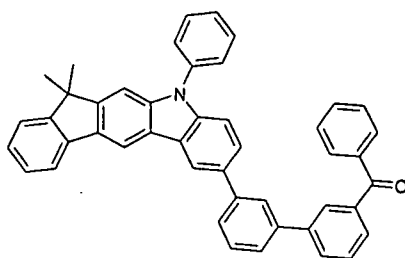
步驟 a)：7- (3'-苯甲醯基聯苯-3-基) -12,12-二甲基-12H-10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘-10-羧酸第三丁酯



將 16.8 公克 (33.0 毫莫耳) 12,12-二甲基-7- (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜環戊硼烷-2-基) -12H-10-氮雜蒽並 [2,1-b] 萘-10-羧酸第三丁酯、 13.4 公克 (40 毫莫耳) (3'-溴聯苯-3-基) 苯基甲酮及 11.6 公克碳酸鈉懸浮在 900 毫升二噁烷、 900 毫升甲苯及 400 毫升水中。將 4.2 公克 (3.6 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 添加至此懸浮液中。將反應

混合物在回流下加熱 7 小時。在冷卻之後，將沉澱固體以抽氣濾出，以水及乙醇清洗且乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取且從甲苯再結晶。產量：14.7 公克（23 毫莫耳，70% 理論值）。

步驟 b)：[3'-（12,12-二甲基-10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萘-7-基）聯苯-3-基]苯基甲酮



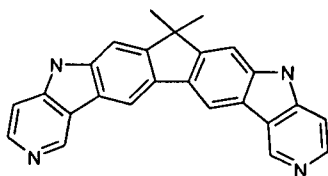
將 12.8 公克（20.1 毫莫耳）7-（3'-苯甲醯基聯苯-3-基）-12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]萘-10-羧酸第三丁酯溶解在 250 毫升二氯甲烷及 3 毫升茴香醚中且接著添加 4.5 毫升三氟乙酸。將混合物在 40°C 下攪拌 3 小時，且當反應完成時以冰水及 20% NaOH 溶液的方式中和。將混合物以二氯甲烷萃取，乾燥且藉由從甲苯再結晶而純化，得到成爲固體的 9.6 公克（17.9 毫莫耳）（89%）產物。

將 9.6 公克（17.9 毫莫耳）[3'-（12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萘-7-基）聯苯-3-基]苯基甲酮與 3.14 公克（20 毫莫耳）溴苯溶解在 300 毫升甲苯中且脫氣。添加 1.9 毫升三-第三丁膦（在甲苯中的 1M 溶液）、214 毫克（0.94 毫莫耳）Pd(OAc)₂ 及 5.4 公克（56.7 毫莫耳）NaOtBu 且將混合物在回流下攪拌 7 小時。

將溫熱（45℃）的混合物經由 Alox B 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以甲苯萃取且從甲苯/庚烷再結晶，得到成爲白色固體的 7.4 公克（12.1 毫莫耳，60%）產物。最後將產物在高真空中昇華，純度爲 99.9%。

實例 49：

步驟 a)：

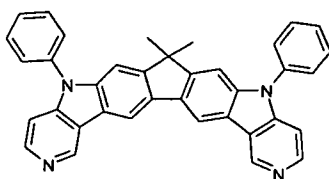


將 40.48 公克 2,7-二溴-9,9-二甲基-9H-芴（115 毫莫耳）、29.6 公克 3-氯吡啶-4-胺（230 毫莫耳）、1.91 公克（3.5 毫莫耳）1,1-雙（二苯膦基）二茂鐵、0.64 公克乙酸鈣（II）（2.8 毫莫耳）及 57.2 公克第三丁醇鈉（598 毫莫耳）在保護性氣體環境下在 1.6 公升甲苯中以沸騰加熱 24 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物 N,N'-雙（3-氯吡啶-4-基）-9,9-二甲基-9H-芴-2,7-二胺係從甲苯/乙酸乙酯再結晶。產量爲 36.4 公克（81 毫莫耳，70.8%）。

將 300 毫升二噁烷添加至 29 公克 N,N'-雙（3-氯吡啶-4-基）-9,9-二甲基-9H-芴-2,7-二胺（65 毫莫耳）、0.73 公克乙酸鈣（II）（3.25 毫莫耳）、37.5 公克第三丁

醇鈉 (390 毫莫耳) 及 3.9 毫升在甲苯中的 1M $\text{P}^{\text{Bu}}\text{-t}_3$ 溶液 (3.9 毫莫耳) 中且將混合物在 105°C 及氮氣下攪拌 48 小時。接著添加 100 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 12.9 公克 (34.45 毫莫耳, 53%)。

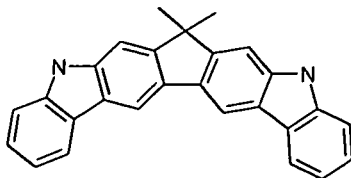
步驟 b) :



將 5.21 公克 (13.9 毫莫耳) 來自步驟 a) 之產物與 4.39 毫升 (41.7 毫莫耳) 溴苯溶解在 500 毫升甲苯中且脫氣。添加 1.94 毫升 (1.94 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁磷、249.8 毫克 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 4.01 公克 (41.7 毫莫耳) NaOt-Bu 且將混合物在回流下攪拌 12 小時。將溫熱 (40°C) 的混合物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以庚烷/甲苯萃取，從甲苯再結晶，得到成為黃色固體的 4.75 公克 (9.2 毫莫耳) (66%) 產物。最後將產物在高真空中昇華，純度為 99.9%。

實例 50 :

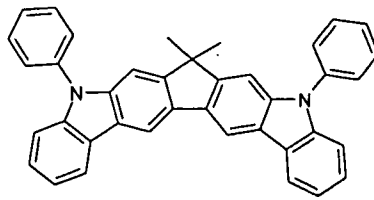
步驟 a) :



將 40.48 公克 2,7-二溴-9,9-二甲基-9H-芴 (115 毫莫耳)、21.4 公克 (21.5 毫升) 苯胺 (230 毫莫耳)、1.91 公克 (3.5 毫莫耳) 1,1-雙(二苯膦基)二茂鐵、0.64 公克乙酸鈣 (II) (2.8 毫莫耳) 及 57.2 公克第三丁醇鈉 (598 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 1.3 公升甲苯中以沸騰加熱 20 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物 N,N'-雙(2-氯苯基)-9,9-二甲基-9H-芴-2,7-二胺係從甲苯/乙酸乙酯再結晶。產量為 32.5 公克 (73 毫莫耳, 63.5%)。

將 300 毫升二噁烷添加至 28.9 公克 N,N'-雙(2-氯苯基)-9,9-二甲基-9H-芴-2,7-二胺 (65 毫莫耳)、0.73 公克乙酸鈣 (II) (3.25 毫莫耳)、37.5 公克第三丁醇鈉 (390 毫莫耳) 及 3.9 毫升在甲苯中的 1M $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 溶液 (3.9 毫莫耳) 中且將混合物在 105°C 及氮氣下攪拌 48 小時。接著添加 100 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 7.9 公克 (21.32 毫莫耳, 57.3%)。

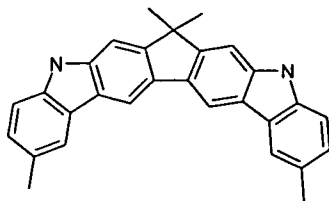
步驟 b) :



將 5.6 公克 (15 毫莫耳) 來自步驟 a) 之產物與 4.39 毫升 (41.7 毫莫耳) 溴苯溶解在 300 毫升甲苯中且脫氣。添加 1.94 毫升 (1.94 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁磷、252 毫克 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 4.1 公克 (41.7 毫莫耳) NaOt-Bu 且將混合物在回流下攪拌 10 小時。將混合物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以甲苯萃取，從甲苯/庚烷再結晶，得到成爲白色固體的 5.7 公克 (10.9 毫莫耳，72.5%) 產物。最後將產物在高真空中昇華，純度爲 99.9%。

實例 51：

步驟 a)：

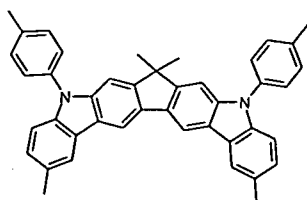


將 40.48 公克 2,7-二溴-9,9-二甲基-9H-芴 (115 毫莫耳)、24.7 公克對-甲苯胺 (230 毫莫耳)、1.91 公克 (3.5 毫莫耳) 1,1-雙(二苯磷基)二茂鐵、0.64 公克乙酸鈮(II) (2.8 毫莫耳) 及 57.2 公克第三丁醇鈉 (598 毫莫耳) 在保護性氣體環境下在 1.3 公升甲苯中以沸騰加熱 20 小時。接著將混合物分溶在甲苯與水之間，將有機相

以水清洗三次，經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。餘留的殘餘物 N,N' -雙(2-氯-4-甲基苯基)-9,9-二甲基-9H-芴-2,7-二胺係從甲苯/EtOH 再結晶。產量為 29.95 公克(63 毫莫耳, 63.5%)。

將 300 毫升二噁烷添加至 2.95 公克 N,N' -雙(2-氯苯基)-9,9-二甲基-9H-芴-2,7-二胺(63 毫莫耳)、0.73 公克乙酸鈣(II)(3.25 毫莫耳)、37.5 公克第三丁醇鈉(390 毫莫耳)及 3.9 毫升在甲苯中的 1M $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 溶液(3.9 毫莫耳)中且將混合物在 105°C 及氮氣下攪拌 48 小時。接著添加 100 毫升二氯甲烷及 0.1M Na_2CO_3 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na_2SO_4 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 15.1 公克(37.5 毫莫耳, 59.5%)。

步驟 b) :

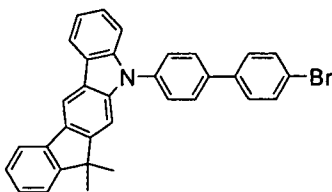


將 6.8 公克(17 毫莫耳)來自步驟 a) 之產物與 4.4 毫升(41.7 毫莫耳) 4-甲溴苯溶解在 300 毫升甲苯中且脫氣。添加 1.94 毫升(1.94 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁磷、252 毫克 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 4.1 公克(41.7 毫莫耳) NaOBu-t 且將混合物在回流下攪拌 10 小時。將混合

物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以甲苯萃取，從甲苯/庚烷再結晶，得到成爲白色固體的 4.8 公克 (8.3 毫莫耳，49%) 產物。最後將產物在高真空中昇華，純度爲 99.9%。

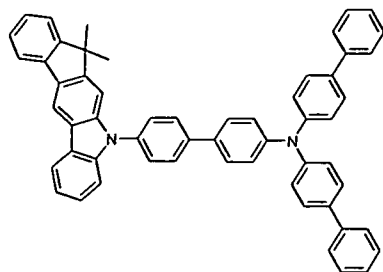
實例 52：雙聯苯-4-基-[4'-(12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛並[2,1-b]萘-10-基)聯苯-4-基]胺

步驟 a)：10-(4'-溴聯苯-4-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萘



將 20 公克 (70.58 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛並[2,1-b]萘及 33 公克 (105.87 毫莫耳) 4,4'-二溴聯苯溶解在甲苯中且藉由引去保護性氣體而脫氣。接著添加 4.94 毫升 (4.94 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁膦、633.8 毫克 (2.82 毫莫耳) Pd(OAc)₂ 及 10.2 公克 (105.87 毫莫耳) NaOtBu。將固體預先脫氣，接著將反應混合物脫氣且接著在回流下攪拌 5 小時。將溫熱的反應混合物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。從甲苯結晶得到成爲白色固體的 15.6 公克 (30.4 毫莫耳) (43%) 產物。

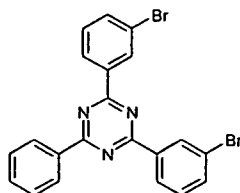
步驟 b) : 雙聯苯-4-基-[4'-(12,12-二甲基-12H-10-氮雜茛苳並[2,1-b]茛-10-基)聯苯-4-基]胺



將 10 公克 (19.4 毫莫耳) 10-(4'-溴聯苯-4-基)-12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜茛苳並[2,1-b]茛與 9.6 公克 (30 毫莫耳) 雙(4-聯苯基)胺溶解在 300 毫升甲苯中且脫氣。添加 1.94 毫升 (1.94 毫莫耳/在甲苯中的 1M 溶液) 三-第三丁磷、252 毫克 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 4.1 公克 (41.7 毫莫耳) NaOt-Bu 且將混合物在回流下攪拌 10 小時。將混合物經由 Alox B (活性等級 1) 過濾，以水清洗，乾燥且蒸發。將粗產物在 Soxhlet 萃取器中以甲苯萃取，從甲苯/庚烷再結晶，得到成爲黃色固體的 6.7 公克 (8.9 毫莫耳，46%) 產物。最後將產物在高真空中昇華，純度爲 99.9%。

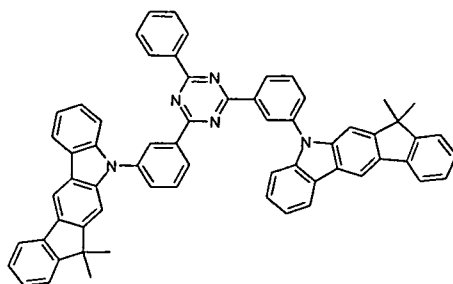
實例 53 :

步驟 a) : 2,4-雙(3-溴苯基)-6-苯基-1,3,5-三吡



將 49 毫升 (392 毫莫耳) 苯甲醯氯、52.3 公克 (392 毫莫耳) AlCl_3 及 8.5 毫升亞磺醯氯先在保護性氣體環境下引入 500 毫升 1,2-二氯苯中。將溶解在 300 毫升 1,2-二氯苯中的 150 公克 (824 毫莫耳) 溴苯甲腈經由滴液漏斗逐滴添加至室溫下的該溶液中，接著將混合物在 100°C 下攪拌 1 小時，接著在 40°C 下攪拌 18 小時。在此時間之後，將 1.5 公升 MeOH 添加至反應混合物中且將殘餘物分離。殘餘物係藉由與熱 MeOH 攪拌而清洗，得到 59 公克 (126 毫莫耳) (32%) 產物。

步驟 b) : 與二苯基-1,3,5-三吡啶反應

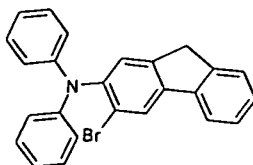


將 10.9 公克 (23.5 毫莫耳) 2,4-雙(3-溴苯基)-6-苯基-1,3,5-三吡啶、13.3 公克 (47 毫莫耳) 12,12-二甲基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]菲及 29.2 公克 Rb_2CO_3 懸浮在 250 毫升對-二甲苯中。將 0.95 公克 (4.2 毫莫耳) $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 及 12.6 毫升 1M 三-第三丁磷溶液添加至此懸浮液中。將反應混合物在回流下加熱 24 小時。在冷卻之後，將有機相分離，以 200 毫升水清洗三次且蒸發至乾燥。將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶三次且最後在高真

空中昇華，得到 13.1 公克（15 毫莫耳），對應於 53% 理論值。純度為 99.9%。

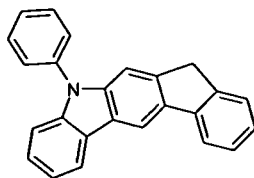
實例 54：

步驟 a)：(3-溴-9H-芴-2-基)二苯胺



將 8.0 公克（42.2 毫莫耳）碘化銅（I）及 11.7 毫升（97.5 毫莫耳）反式-環己烷二胺添加至在 1170 毫升二噁烷中的 47.7 公克（234 毫莫耳）碘苯、26 公克（100 毫莫耳）3-溴-9H-芴-2-胺及 416.4 公克（1961 毫莫耳）磷酸鉀之劇烈攪拌懸浮液中且將混合物在回流下加熱 16 小時。在冷卻之後，將沉澱物體以抽氣濾出，以 50 毫升甲苯清洗三次，以 50 毫升乙醇：水（1：1，v：v）清洗三次及以 100 毫升乙醇清洗三次。產量：33 公克（80 毫莫耳），80%。

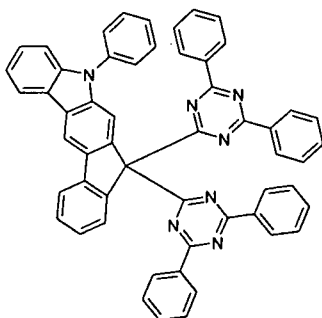
步驟 b)：10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]芴



將 35 毫升三甲基乙酸添加至 14.4 公克（35 毫莫耳）

(3-溴-9H-芴-2-基)二苯胺、0.4 公克乙酸鈮(II) (1.78 毫莫耳) 及 0.5 公克碳酸鉀 (3.62 毫莫耳) 中且將混合物在 120°C 下攪拌 9 小時。在此時間之後，添加 0.4 公克乙酸鈮(II) (1.78 毫莫耳) 且將混合物在 120°C 下再攪拌 9 小時。接著添加 200 毫升二氯甲烷及 0.1M Na₂CO₃ 溶液。將混合物分溶在水與二氯甲烷之間，將水相以二氯甲烷萃取三次，將合併的有機相經 Na₂SO₄ 乾燥且在旋轉蒸發器中蒸發。殘餘物係從甲苯/庚烷再結晶。產量為 4.7 公克 (14 毫莫耳，42%)。

步驟 c) : 與 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶反應



將 31.4 公克 (95 毫莫耳) 10-苯基-10,12-二氫-10-氮雜蒽並[2,1-b]芴溶解在 1500 毫升無水 THF 中，在 -70°C 下逐滴添加 420 毫升 (840 毫莫耳) 在環己烷中的 2M 正丁基鋰溶液，在 1 小時之後，逐滴添加溶解在 800 毫升無水 THF 中的 64.3 公克 (237 毫莫耳) 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡啶，將混合物經 1 小時期間溫熱至室溫，移除溶劑，將殘餘物以熱甲苯萃取，從甲苯再結晶且最後在高真空中昇華。產量：53 公克 (68 毫莫耳)，72.0%，99.9

% 純度 (HPLC) 。

實例 55：經真空蒸發之 OLED 的製造

根據本發明的經真空蒸發之 OLED 及依照先前技藝之 OLED 係依照 WO 2004/058911 之通用方法製造，該方法適合於在此所述之環境（層厚度變化、所使用的材料）。

各種 OLED 的數據呈現於下列的實例 C1 至 E106（參見表 2 及 3）。具有 150 奈米厚度的經結構化 ITO（氧化銦錫）塗佈之玻璃板以 20 奈米 PEDOT（聚（3,4-伸乙二氧基-2,5-噻吩）），從水旋轉塗佈，購自 H. C. Starck, Goslar, Germany）塗佈，以改進加工。該等經塗佈之玻璃板形成適用於 OLED 之基板。OLED 原則上具有下列的層結構：基板/隨意的電洞注射層（HIL）/電洞傳輸層（HTL）/隨意的中間層（IL）/電子阻隔層（EBL）/發射層（EML）/隨意的電洞阻隔層（HBL）/電子傳輸層（ETL）/隨意的電子注射層（EIL）及最後的陰極。陰極係由 100 奈米厚度的鋁層所形成。精確的 OLED 結構顯示於表 2 中。製造 OLED 所需之材料顯示於表 4 中。

材料係藉由在真空室中的熱蒸氣沉積法塗覆。發射層在此總是由至少一種基質材料（主體材料）及與基質材料摻雜的發射摻雜劑（發光體）或藉由共同蒸發而具有特定的體積比例之材料所組成。諸如 ST1：CBP：TER1（55%：35%：10%）之表述在此意謂材料 ST1 係以 55% 之體積比例存在於層中，CBP 係以 35% 之體積比例存在及

TER1 係以 10% 之體積比例存在。電子傳輸層亦可類似地由兩種材料之混合物所組成。

OLED 係以標準方法特徵化。就此目的而測定電發光光譜、電流效率（以 cd/A 測量）、功率效率（以 lm/W 測量）及從電流-電壓-發光強度特徵線（IUL 特徵線）所計算以發光密度為函數之外部量子效率（EQE，以百分比測量）及壽命。壽命被定義成發光密度從特定的初發光密度下降至特定比例之後的時間。LD50 之表述意謂所提出之壽命為發光密度下降至 50% 之初發光密度（亦即從例如 4000 cd/m^2 至 2000 cd/m^2 ）的時間。壽命之值可以熟習此技藝者已知的轉換公式輔助下轉換成其他的首發光密度之數值。以 1000 cd/m^2 之初發光密度的壽命在此為常見的表述。

將各種 OLED 的數據總結於表 3 中。實例 C1-C22 為依照先前技藝的比較性實例。實例 E1-E106 顯示其中使用根據本發明的材料之 OLED 的數據。

將一些實例更詳細地解釋於下，俾以例證根據本發明的化合物優點。然而，應指出此僅代表挑選出在表 3 中所示之結果。在所有參數的一些情況中，可從表中看出使用根據本發明而未更詳細地敘述的化合物時亦達成超越先前技藝之顯著改進，但是在一些情況中僅觀察到效率或電壓或壽命的改進。然而，甚至該等參數中之一的改進亦代表顯著的進步。

使用根據本發明的化合物做爲電子傳輸材料

OLED C1-C3、C9 爲其中使用依照先前技藝之材料 Alq₃、ETM1 及 ST1 做爲電子傳輸材料的比較性實例。所使用的發光體爲分別摻雜至基質材料 H1、H2 及 H4 中的發藍光材料 D1 及發綠光材料 D2 和 TEG1。

發藍光 OLED C1、C2、E1、E3 及 E5 展現在 6000 cd/m² 之初發光下約 150 小時的可比較壽命。若使用熟習此技藝者已知的轉換公式爲基準時，此對應於在 1000 cd/m² 之初發光下約 5500 小時。發綠光 OLED C3 及 E2 展現在 25,000 cd/m² 之初發光下約 470 小時的可比較壽命，其對應於在 1000 cd/m² 下約 300,000 小時。

OLED E1-E3 及 E5 包含根據本發明的化合物 H4 或 H7 做爲電子傳輸材料。可看出使用 H4 能顯著增加欲達成的效率及操作電壓的改進。若比較 OLED C1 與 E1 或 C3 與 E2 時，可看出使用 H4 在發綠光的情況中改進了 0.8 V 的操作電壓及在發藍光的情況中改進了 2.1 V 的操作電壓。獲得與顯著增加的外部量子效率（在發綠光的情況中從 5% 至 6.3% 及在發藍光的情況中從 4.2% 至 6.7%）一起大爲改進的功率效率（在發綠光的情況中爲 1.5 倍及在發藍光的情況中爲 2.5 倍）。

與先前技藝比較，使用以 50：50% 體積比之混合型 H4：LiQ 層亦引起顯著的改進。與 ETM1 比較，在發藍光 OLED 中使用 H4 時，獲得低了 0.6 V 的操作電壓、改進的外部量子效率（從 6.3% 至 7.2%）及因此顯著地改進

的功率效率。在此增加約 30%（實例 E3 與實例 C2 的比較）。

在使用包含發綠磷光摻雜劑 TEG1 的發光層時，經由使用根據本發明的化合物 H7 做為電子傳輸層及 LiQ 做為電子注射層獲得顯著改進的壽命且同時略微減低的功率效率（實例 C9 及 E6）。

在 OLED 的電子傳輸層中使用根據本發明的化合物因此能達成關於操作電壓、外部量子效率及因此尤其亦關於功率效率的顯著增加。此外，在磷光摻雜劑的情況中獲得改進的壽命。

使用根據本發明的化合物做為電洞傳輸或電子阻隔材料

此外，根據本發明的材料可有利地用於 OLED 的電洞傳輸面上，更確實地做為電洞傳輸或電子阻隔材料。此係參考實例 E4、E7-E15 及 E74-77 顯示。依照先前技藝的比較性實例 C1-C3、C6、C9、C12 及 C20 包含材料 HTM1 或 SpNPB 做為電洞傳輸材料及 NPB 或 EMB1 做為電子阻隔材料。

若比較實例 E4 與實例 C3，可看出經由在電洞傳輸層中使用根據本發明的材料 HTM2 可減少 0.5 V 的操作電壓，與略微改進的量子效率組合造成從 10.7 lm/W 至 12.1 lm/W 之功率效率的改進，亦即約 15%。

與 NPB 比較（實例 E7 與實例 C2 或實例 E8 與實例 V3 的比較），若使用 HTM3 做為電子阻隔材料時，同樣

達成略微改進的操作電壓及功率效率。然而，還更重要是在發藍光的情況中經由使用與 NPB 比較的 HTM3 可使壽命在 1000 cd/m^2 下增加至約 7400 小時（實例 E7）。在發綠光的情況中，壽命的改進較為少些，獲得約 25% 增加，對應於實例 E8 的約 375,000 小時的壽命。在使用 HTM5 做為電子阻隔材料時見到類似的改進（E14 及 E15）。

在磷光 OLED 中，根據本發明的化合物特別展現至多 25% 之功率效率的顯著改進，具有同樣地略微改進壽命（實例 C9 及 E11 或 E15）。特別應該述及化合物 HTM4 亦被用做為單層，其顯著地減少加工複雜性。在此情況中，功率效率增加約 15%，但是與先前技藝比較的壽命大致維持相同（實例 C9 及 E12）。

在 OLED 的電洞傳輸面上使用根據本發明的化合物因此得到關於操作電壓、功率效率、壽命及加工複雜性的顯著改進。

使用根據本發明的化合物做為磷光 OLED 中的基質材料

根據本發明的化合物可另外被用做為磷光摻雜劑的基質材料（主體材料）。化合物 H4-H27、H31-H42 及 H44-H48 在此被用做為個別材料或亦與 CBP 組合。化合物 ST1 及 Ket1 被用做為與依照先前技藝的比較。比較包含發綠光摻雜劑 TEG1 及發紅光摻雜劑 TER1 和 TER2 的 OLED。

與使用依照先前技藝的 ST1 或 Ket1 比較，使用根據

本發明的化合物引起關於效率、操作電壓及壽命的顯著改進（參見表 3）。應強調在改進壽命的同時亦增加功率效率，因為能量消耗扮演重要角色，特別在行動裝置中。只要是 10% 的改進在此被視為顯著的增加。

因此，使用紅磷光摻雜劑 TER1 及 TER2 與 H4 的組合用做為基質材料得到至多 1.7 V 的操作電壓減少、約 5% 之電流效率增加及因此約 45% 之功率效率的顯著增加。同時獲得大約 30% 之壽命增加（實例 C5 與實例 E17 的比較）。在使用兩種基質材料時，化合物 H4 亦展現超越依照先前技藝之 ST1 的顯著優點（實例 C6 與實例 E18 的比較）。在此改進的壽命為 20%，且功率效率增加約 15%。

甚至更顯著的更多改進可經由在包含綠磷光摻雜劑之組份中使用根據本發明的化合物而達成。雖然依照先前技藝的化合物 ST1 已引起至多 37 lm/W、55 cd/A 的高效率及 27,000 小時的壽命（實例 C7 及 C8），但是使用化合物 H4 能使功率效率增加至 50 lm/W（實例 E20）。所達成的最好壽命在使用 H11 與 ST1 用做為電洞阻隔體時為 51,000 小時（實例 33）或沒有電洞阻隔體時為 47,000 小時（實例 34）。應強調具有最好壽命的實例 E33 具有與先前技藝比較而改進了超過 40% 之功率效率。

使用由 ST1 所組成的電子傳輸層及具有 3 奈米厚度的 LiQ 電子注射層與做為基質材料的材料 H4 的組合（實例 E26）能達成 59 lm/W 之極高的功率效率，其中 30,000 小

時的壽命仍大於依照先前技藝的 OLED 之最佳值（27,000 小時，實例 C7）。

與先前技藝比較，根據本發明的材料在用做為磷光 OLED 中的基質材料時因此引起所有參數的顯著改進，尤其關於壽命及功率效率。在使用根據本發明的材料時大的功率效率改進特別可歸因於操作壓力的顯著改進。

使用根據本發明的化合物做為混合型基質系統中的組份

混合型基質系統，亦即具有由三或多個組份所組成的發光層之 OLED 在一些情況中展現超越包含單一基質材料之系統的顯著優點。根據本發明的化合物亦可有利地用於此類型的系統中。與依照先前技藝的混合型基質組份比較，關於效率、電壓及壽命出現顯著的改進。依照先前技藝所使用的化合物為材料 CBP、TCTA 及 FPh（參見表 4）

。對應的 OLED 係以 C6、C10 及 C13-C18 表示。所使用的根據本發明的材料為與基質材料 ST1、Ket1 及 DAP1 組合的化合物 H17、H28-30 及 H43。對應的 OLED 係以 E60-E72 及 E78 表示。

首先比較包含發綠光摻雜劑 TEG1 的混合型基質材料。依照先前技藝最好的 OLED（C10）與包含根據本發明的化合物最差的 OLEC（E61）比較，以根據本發明的化合物 H28、H29 及 H30 代替 CBP 或 TCTA 時獲得 0.9 V 的操作電壓改進、約 30% 的功率效率增加及 30% 的壽命增加（比較：實例 E60-E63 與 C10 或 C18）。包含 H30 的

OLED (E63) 甚至展現 1.1 V 的操作電壓、約 60% 的功率效率及 60% 的壽命改進。若使用基質材料 Ket1 及 DAP1 代替 ST1 時 (比較: 實例 C13-C17 及 E64-E68), 亦出現類似的改進。

在發紅光的混合型基質系統中, 同樣獲得顯著的改進 (比較: 實例 C6 與 E69-E72)。可在此述及的實例為使用經吡啶取代之化合物 H17。以 H17 代替 CBP 時獲得 0.8 V 的電壓改進、約 30% 的功率效率增加及約 60% 的壽命增加 (比較: 實例 C6 與 E72)。

在混合型基質系統中使用根據本發明的材料因此得到關於 OLED 的電壓、效率及尤其亦關於壽命的顯著改進。該等改進可以非常不同類別的基質材料的組合 (酮類 Ket1、螺旋三吡啶類 ST1、二氮雜磷唑 DAP1) 達成。可因此認為類似的改進亦可藉由根據本發明的化合物與其他類別的材料組合而達成。

表 2: OLED 的結構

實例	HIL 厚度	HTL 厚度	IL 厚度	EBL 厚度	EML 厚度	HBL 厚度	ETL 厚度	EIL 厚度
C1	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	NPB 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
C2	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	NPB 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 奈米	---
C3	HIL1 5 奈米	HTM1 110 奈米	---	NPB 20 奈米	H2:D2 (90%:10%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米

C4	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	ST1:TER1 (85%:15%) 30 奈米	--	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
C5	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	ST1:TER2 (85%:15%) 30 奈米	--	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
C6	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	ST1:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
C7	--	HTM1 160 奈米	--	EBM1 20 奈米	ST1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
C8	--	HTM1 160 奈米	--	EBM1 20 奈米	ST1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
C9	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H4:TEG1 (85%:15%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
C10	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:CBP:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
C11	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
C12	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
C13	HIL1 20 奈米	--	--	EBM1 20 奈米	Ket1:FTPh:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	Ket1 10 奈米	ETM2 20 奈米	LiF 1 奈米
C14	HIL1 20 奈米	--	--	EBM1 20 奈米	Ket1:FTPh:TEG1 (60%:30%:10%) 30 奈米	Ket1 10 奈米	ETM2 20 奈米	LiF 1 奈米
C15	HIL1 20 奈米	--	--	EBM1 20 奈米	Ket1:TCTA:TEG1 (60%:30%:10%) 30 奈米	Ket1 10 奈米	ETM2 20 奈米	LiF 1 奈米
C16	HIL1 20 奈米	--	--	EBM1 20 奈米	Ket1:CBP:TEG1 (60%:30%:10%) 30 奈米	Ket1 10 奈米	ETM2 20 奈米	LiF 1 奈米
C17	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	DAP1:CBP:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
C18	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:TCTA:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
C19	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	Ket1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
C20	HIL1 5 奈米	SpNBP 40 奈米	--	NPB 20 奈米	H2:D3 (98.5%:1.5%) 30 奈米	--	ST2:LiQ (50%:50%) 20 奈米	--
C21	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
C22	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--

E1	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	NPB 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	H4 20 奈米	LiF 1 奈米
E2	HIL1 5 奈米	HTM1 110 奈米	---	NPB 20 奈米	H2:D2 (90%:10%) 30 奈米	---	H4 20 奈米	LiF 1 奈米
E3	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	NPB 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	H4:LiQ (50%:50%) 20 奈米	---
E4	HIL1 5 奈米	HTM2 110 奈米	---	NPB 20 奈米	H2:D2 (90%:10%) 30 奈米	---	Alq3 20 奈米	LiF 1 奈米
E5	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	NPB 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	H7:LiQ (50%:50%) 20 奈米	---
E6	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H4:TEG1 (85%:15%) 30 奈米	---	H7 40 奈米	LiQ 3 奈米
E7	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	HTM3 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 奈米	---
E8	HIL1 5 奈米	HTM1 110 奈米	---	HTM3 20 奈米	H2:D2 (90%:10%) 30 奈米	---	Alq3 20 奈米	LiF 1 奈米
E9	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	HTM4 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 奈米	---
E10	HIL1 5 奈米	HTM1 110 奈米	---	HTM4 20 奈米	H2:D2 (90%:10%) 30 奈米	---	Alq3 20 奈米	LiF 1 奈米
E11	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	HTM4 90 奈米	H4:TEG1 (85%:15%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E12	HIL1 5 奈米	---	---	HTM4 200 奈米	H4:TEG1 (85%:15%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E13	HIL1 5 奈米	HTM1 140 奈米	---	HTM5 20 奈米	H1:D1 (95%:5%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20 奈米	---
E14	HIL1 5 奈米	HTM1 110 奈米	---	HTM5 20 奈米	H2:D2 (90%:10%) 30 奈米	---	Alq3 20 奈米	LiF 1 奈米
E15	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	HTM5 90 奈米	H4:TEG1 (85%:15%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E16	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H4:TER1 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq3 20 奈米	LiF 1 奈米
E17	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H4:TER2 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq3 20 奈米	LiF 1 奈米
E18	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H4:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq3 20 奈米	LiF 1 奈米
E19	---	HTM1 160 奈米	---	EBM1 20 奈米	H4:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E20	---	HTM1 160 奈米	---	EBM1 20 奈米	H4:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E21	---	HTM1 160 奈米	---	EBM1 20 奈米	H5:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E22	---	HTM1 160 奈米	---	EBM1 20 奈米	H5:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---

E23	--	HTM1 160 奈米	--	EBM1 20 奈米	H6:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E24	--	HTM1 160 奈米	--	EBM1 20 奈米	H6:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E25	--	HTM1 160 奈米	--	EBM1 20 奈米	H4:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	H4 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E26	--	HTM1 160 奈米	--	EBM1 20 奈米	H4:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ST1 40 奈米	LiQ 3 奈米
E27	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	H4:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E28	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H4:CBP:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E29	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H9:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E30	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H9:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E31	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H10:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E32	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	H10:TER2 (85%:15%) 30 奈米	--	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E33	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H11:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E34	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H11:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E35	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	H11:TER1 (85%:15%) 30 奈米	--	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E36	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	H11:TER2 (85%:15%) 30 奈米	--	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E37	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H12:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E38	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H13:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E39	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H14:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E40	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H15:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E41	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H16:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E42	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H17:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E43	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H18:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E44	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	H19:TER1 (85%:15%) 30 奈米	--	Alq ₃ 20m	LiF 1 奈米

E45	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H19:TER2 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LIF 1 奈米
E46	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H19:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LIF 1 奈米
E47	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H20:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E48	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H21:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E49	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H21:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E50	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H22:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E51	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H23:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E52	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H24:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E53	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H25:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E54	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H25:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E55	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H26:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E56	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H26:TER2 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LIF 1 奈米
E57	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H26:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LIF 1 奈米
E58	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H27:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E60	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:H28:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E61	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:H28:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E62	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:H29:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E63	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:H30:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E64	HIL1 20 奈米	---	---	EBM1 20 奈米	Ket1:H28:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	Ket1 10 奈米	ETM2 20 奈米	LIF 1 奈米

E65	HIL1 20 奈米	--	--	EBM1 20 奈米	Ket1:H28:TEG1 (60%:30%:10%) 30 奈米	Ket1 10 奈米	ETM2 20 奈米	LiF 1 奈米
E66	HIL1 20 奈米	--	--	EBM1 20 奈米	Ket1:H30:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	Ket1 10 奈米	ETM2 20 奈米	LiF 1 奈米
E67	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	DAP1:H28:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E68	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	DAP1:H30:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E69	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	ST1:H28:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E70	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	ST1:H29:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E71	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	ST1:H30:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E72	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	ST1:H17:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E73	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H8:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E74	HIL1 5 奈米	SpNBP 40 奈米	--	HTM6 20 奈米	H2:D3 (98.5%:1.5%) 30 奈米	--	ST2:LiQ (50%:50%) 20 奈米	--
E75	HIL1 5 奈米	SpNBP 40 奈米	--	HTM7 20 奈米	H2:D3 (98.5%:1.5%) 30 奈米	--	ST2:LiQ (50%:50%) 20 奈米	--
E76	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	HTM8 90 奈米	ST1:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E77	--	HTM1 20 奈米	--	HTM8 20 奈米	ST1:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E78	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	ST1:H43:TEG1 (30%:60%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E79	--	HTM1 160 奈米	--	EBM1 20 奈米	H32:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ETM1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	--
E80	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H32:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--
E81	--	HTM1 20 奈米	--	NPB 20 奈米	H32:TER1 (85%:15%) 30 奈米	--	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E82	--	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈米	EBM1 90 奈米	H33:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	--	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	--

E83	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H34:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E84	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H35:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E85	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H36:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E86	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H31:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E87	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H31:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E88	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H37:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E89	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H37:TER2 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E90	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H38:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E91	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H39:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E92	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H40:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E93	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H41:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E94	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H41:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E95	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H41:TER1 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E96	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H42:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E97	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H44:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E98	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H45:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E99	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H46:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E100	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H47:TER1 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E101	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H47:TER2 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E102	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H48:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	ST1 10 奈米	ST1:LiQ (50%:50%) 30 奈米	---
E103	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H48:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---
E104	---	HTM1 20 奈米	---	NPB 20 奈米	H48:TER1 (85%:15%) 30 奈米	---	Alq ₃ 20 奈米	LiF 1 奈米
E105	---	HTM1 70 奈米	HIL1 5 奈 米	EBM1 90 奈米	H7:TEG1 (90%:10%) 30 奈米	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 奈米	---

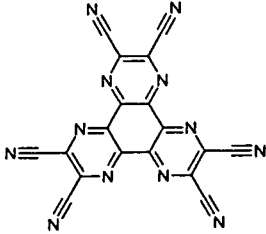
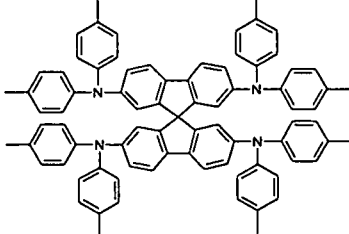
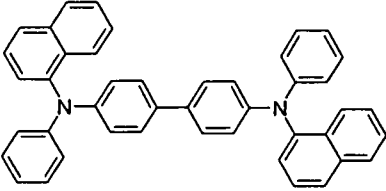
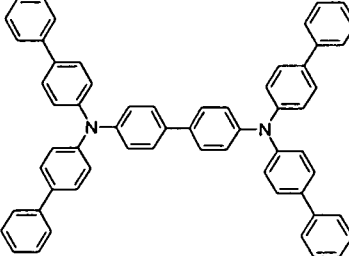
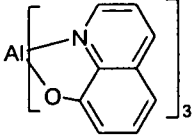
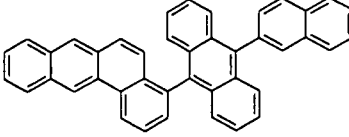
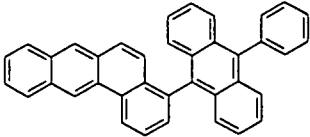
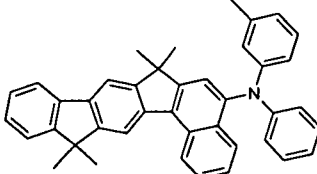
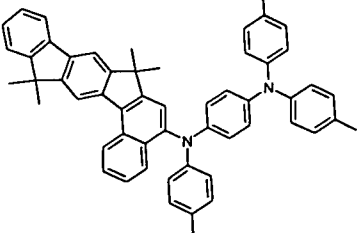
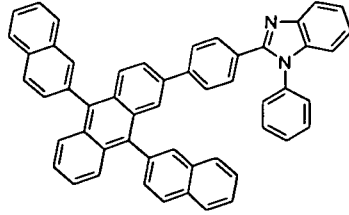
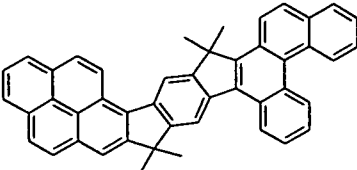
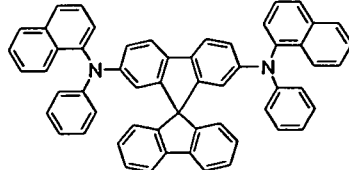
表 3：OLED 用的數據

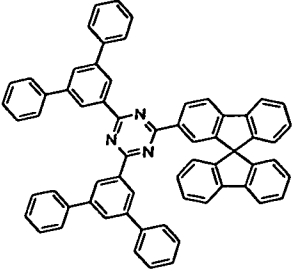
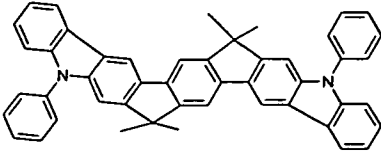
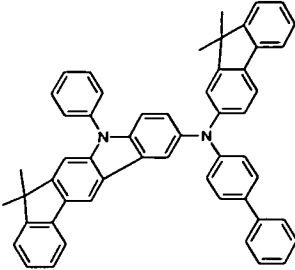
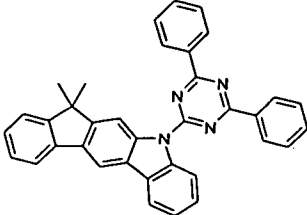
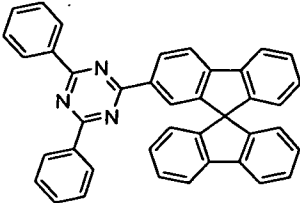
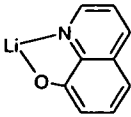
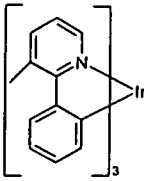
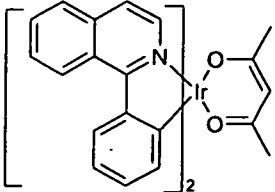
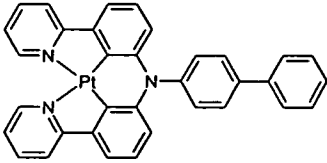
實例	以 1000 cd/m ² 之電 壓	在 1000 cd/m ² 下的 效率	在 1000 cd/m ² 下的效 率	在 1000 cd/m ² 下的 EQE	在 1000 cd/m ² 下的 CIE x/y	從 1000 cd/m ² 之 LD50
C1	6.4 V	5.1 cd/A	2.5 lm/W	4.2%	0.142/0.151	5500 h
C2	4.7 V	8.1 cd/A	5.4 lm/W	6.3%	0.142/0.155	5200 h
C3	5.0 V	17.1 cd/A	10.7 lm/W	5.0%	0.28/0.61	300000 h
C4	5.0 V	7.2 cd/A	4.5 lm/W	12.0%	0.69/0.31	14000 h
C5	6.5 V	9.0 cd/A	4.3 lm/W	8.3%	0.66/0.33	18000 h
C6	5.2 V	8.1 cd/A	4.9 lm/W	11.4%	0.68/0.32	15000 h
C7	4.7 V	55 cd/A	37 lm/W	15.4%	0.36/0.61	27000 h
C8	4.6 V	54 cd/A	37 lm/W	15.0%	0.37/0.60	24000 h
C9	3.6 V	52 cd/A	45 lm/W	14.6%	0.37/0.60	31000 h
C10	4.4 V	48 cd/A	34 lm/W	13.3%	0.37/0.60	37000 h
C11	4.2 V	52 cd/A	39 lm/W	14.5%	0.36/0.60	25000 h
C12	4.1 V	50 cd/A	38 lm/W	13.9%	0.37/0.61	23000 h
C13	4.3 V	45 cd/A	33 lm/W	12.6%	0.36/0.61	39000 h
C14	4.0 V	46 cd/A	36 lm/W	12.8%	0.36/0.61	34000 h
C15	3.9 V	42 cd/A	34 lm/W	11.6%	0.35/0.60	14000 h
C16	4.1 V	44 cd/A	34 lm/W	12.3%	0.36/0.61	25000 h
C17	4.6 V	47 cd/A	32 lm/W	13.2%	0.36/0.60	43000 h
C18	4.2 V	43 cd/A	32 lm/W	12.0%	0.35/0.60	17000 h
C19	3.9 V	41 cd/A	33 lm/W	11.0%	0.36/0.61	22000 h
C20	4.3 V	9.8 cd/A	7.1 lm/W	7.6%	0.14/0.16	7600 h
C21	4.5 V	53 cd/A	37 lm/W	14.9%	0.36/0.61	27000 h
C22	4.5 V	53 cd/A	37 lm/W	14.7%	0.37/0.60	25000 h
E1	4.3 V	8.6 cd/A	6.3 lm/W	6.7%	0.142/0.153	5100 h
E2	4.2 V	21.5 cd/A	16.1 lm/W	6.3%	0.29/0.60	290000 h
E3	4.1 V	9.3 cd/A	7.1 lm/W	7.2%	0.142/0.154	5400 h
E4	4.5 V	17.4 cd/A	12.1 lm/W	5.1%	0.28/0.60	375000 h
E5	4.5 V	8.8 cd/A	6.1 lm/W	7.1%	0.142/0.153	5300 h
E6	3.7 V	49 cd/A	42 lm/W	13.8%	0.37/0.60	39000 h
E7	4.6 V	8.4 cd/A	5.7 lm/W	6.5%	0.142/0.152	7400 h
E8	4.8 V	17.8 cd/A	11.6 lm/W	5.2%	0.142/0.153	375000 h
E9	4.4 V	9.3 cd/A	6.6 lm/W	7.2%	0.142/0.155	7800 h
E10	4.9 V	17.9 cd/A	11.5 lm/W	5.1%	0.28/0.61	390000 h
E11	3.5 V	59 cd/A	53 lm/W	16.4%	0.36/0.59	33000 h
E12	3.6 V	58 cd/A	51 lm/W	16.2%	0.37/0.60	32000 h
E13	4.5 V	9.0 cd/A	7.0 lm/W	7.2%	0.142/0.155	6900 h
E14	4.9 V	17.3 cd/A	11.1 lm/W	5.0%	0.28/0.61	370000 h
E15	3.4 V	62 cd/A	57 lm/W	17.4%	0.37/0.60	35000 h
E16	4.7 V	7.1 cd/A	4.7 lm/W	11.8%	0.69/0.31	15000 h

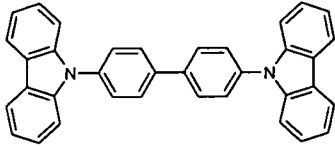
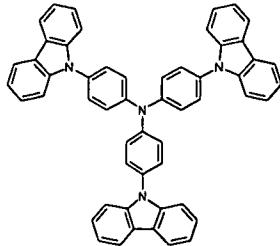
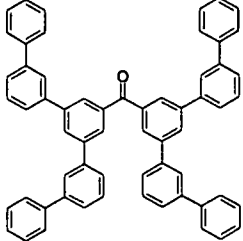
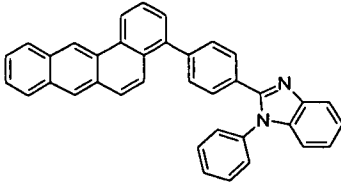
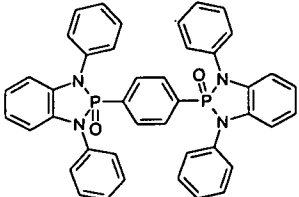
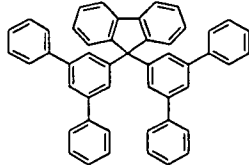
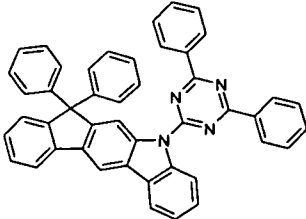
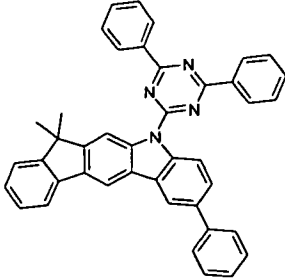
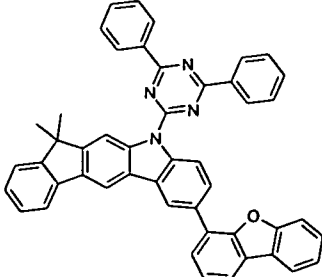
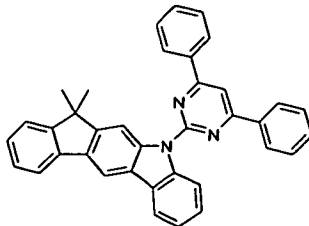
E17	4.8 V	9.5 cd/A	6.2 lm/W	8.7%	0.66/0.33	23000 h
E18	4.7 V	8.6 cd/A	5.7 lm/W	12.0%	0.69/0.32	18000 h
E19	3.8 V	57 cd/A	47 lm/W	15.9%	0.37/0.61	38000 h
E20	3.4 V	54 cd/A	50 lm/W	15.2%	0.37/0.61	33000 h
E21	4.0 V	58 cd/A	46 lm/W	16.1%	0.38/0.59	41000 h
E22	3.7 V	53 cd/A	45 lm/W	14.8%	0.37/0.60	35000 h
E23	3.9 V	54 cd/A	43 lm/W	15.3%	0.37/0.61	36000 h
E24	3.5 V	53 cd/A	48 lm/W	14.9%	0.37/0.60	29000 h
E25	3.6 V	56 cd/A	49 lm/W	15.7%	0.38/0.60	32000 h
E26	2.9 V	54 cdy/A	59 lm/W	15.1%	0.37/0.60	30000 h
E27	4.7 V	8.0 cd/A	5.3 lm/W	11.3%	0.68/0.32	21000 h
E28	3.7 V	52 cd/A	44 lm/W	14.4%	0.37/0.60	48000 h
E29	3.8 V	59 cd/A	49 lm/W	16.5%	0.37/0.60	38000 h
E30	3.6 V	56 cd/A	48 lm/W	15.5%	0.36/0.60	36000 h
E31	3.6 V	46 cd/A	40 lm/W	12.6%	0.36/0.59	24000 h
E32	5.3 V	9.2 cd/A	5.5 lm/W	8.5%	0.66/0.33	23000 h
E33	3.5 V	58 cd/A	52 lm/W	16.0%	0.35/0.59	51000 h
E34	3.4 V	55 cd/A	51 lm/W	15.2%	0.35/0.59	47000 h
E35	4.1 V	7.5 cd/A	5.7 lm/W	12.6%	0.69/0.31	22000 h
E36	4.3 V	8.8 cd/A	6.4 lm/W	8.1%	0.66/0.33	27000 h
E37	4.1 V	47 cd/A	36 lm/W	13.0%	0.36/0.59	34000 h
E38	3.6 V	45 cd/A	39 lm/W	12.4%	0.36/0.60	21000 h
E39	3.6 V	53 cd/A	46 lm/W	14.9%	0.36/0.60	31000 h
E40	3.5 V	58 cd/A	52 lm/W	16.2%	0.36/0.60	28000 h
E41	3.6 V	42 cd/A	37 lm/W	11.7%	0.37/0.61	22000 h
E42	3.9 V	46 cd/A	37 lm/W	12.9%	0.36/0.60	44000 h
E43	3.8 V	43 cd/A	36 lm/W	11.9%	0.35/0.59	20000 h
E44	4.1 V	8.1 cd/A	6.2 lm/W	13.6%	0.69/0.31	22000 h
E45	4.3 V	9.9 cd/A	7.2 lm/W	9.1%	0.66/0.33	23000 h
E46	4.0 V	9.3 cd/A	7.3 lm/W	13.1%	0.68/0.32	31000 h
E47	3.8 V	47 cd/A	39 lm/W	13.0%	0.36/0.60	29000 h
E48	3.4 V	45 cd/A	42 lm/W	12.7%	0.36/0.59	25000 h
E49	3.7 V	49 cd/A	42 lm/W	13.5%	0.36/0.59	28000 h
E50	3.7 V	55 cd/A	47 lm/W	15.3%	0.37/0.60	40000 h
E51	3.8 V	44 cd/A	36 lm/W	12.4%	0.36/0.61	27000 h
E52	4.1 V	59 cd/A	45 lm/W	16.4%	0.36/0.60	35000 h
E53	3.5 V	55 cd/A	49 lm/W	15.7%	0.37/0.60	39000 h
E54	3.6 V	61 cd/A	53 lm/W	17.0%	0.36/0.60	41000 h
E55	4.2 V	46 cd/A	34 lm/W	12.9%	0.37/0.59	26000 h
E56	5.7 V	9.8 cd/A	5.4 lm/W	9.0%	0.66/0.33	26000 h
E57	4.6 V	8.5 cd/A	5.9 lm/W	12.1%	0.68/0.32	23000 h
E58	4.0 V	50 cd/A	39 lm/W	13.9%	0.36/0.61	43000 h
E60	3.5 V	57 cd/A	51 lm/W	15.8%	0.36/0.61	53000h
E61	3.5 V	51 cd/A	45 lm/W	14.3%	0.36/0.61	49000h
E62	3.6 V	55 cd/A	48 lm/W	15.5%	0.36/0.60	54000h

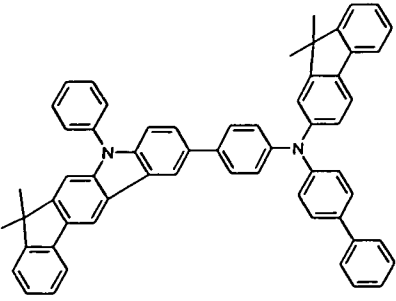
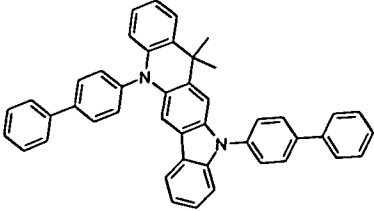
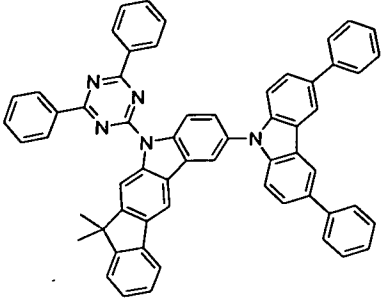
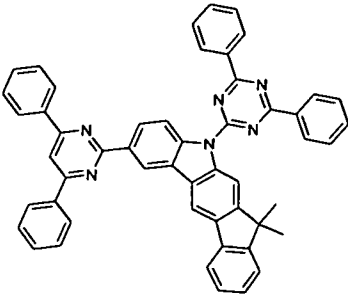
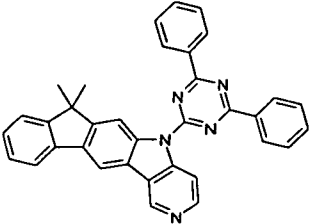
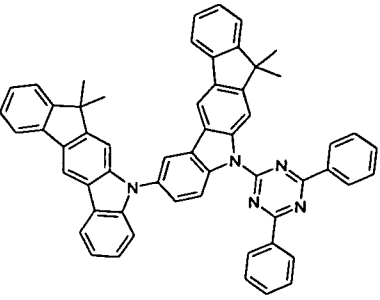
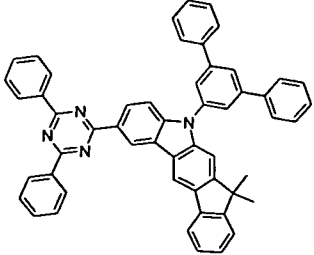
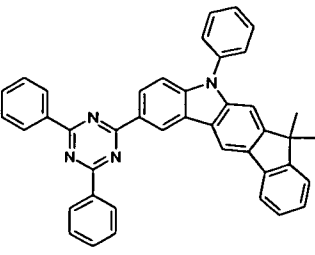
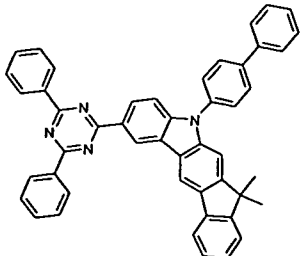
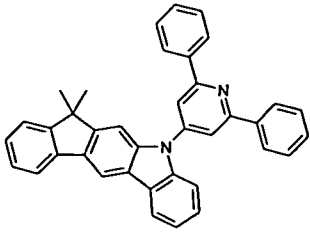
E63	3.3 V	57 cd/A	54 lm/W	16.0%	0.36/0.61	59000h
E64	3.2 V	49 cd/A	48 lm/W	13.6%	0.36/0.61	48000h
E65	3.7 V	47 cd/A	40 lm/W	13.2%	0.36/0.61	43000 h
E66	3.1 V	49 cd/A	50 lm/W	13.7%	0.36/0.61	55000 h
E67	4.1 V	45 cd/A	34 lm/W	12.6%	0.36/0.60	51000 h
E68	3.9 V	48 cd/A	39 lm/W	13.4%	0.36/0.60	58000 h
E69	4.3 V	9.3 cd/A	6.8 lm/W	13.0%	0.68/0.32	27000 h
E70	4.5 V	8.9 cd/A	6.2 lm/W	12.5%	0.68/0.32	24000 h
E71	4.0 V	9.4 cd/A	7.4 lm/W	13.1%	0.68/0.32	31000 h
E72	4.4 V	8.8 cd/A	6.3 lm/W	12.2%	0.68/0.32	23000 h
E73	3.9 V	47 cd/A	38 lm/W	12.9%	0.36/0.61	28000 h
E74	4.1 V	10.5 cd/A	8.1 lm/W	8.1%	0.14/0.16	11500 h
E75	4.4 V	9.3 cd/A	6.6 lm/W	7.2%	0.14/0.16	9500 h
E76	4.2 V	53 cd/A	40 lm/W	14.7%	0.37/0.61	27000 h
E77	5.1 V	7.8 cd/A	4.8 lm/W	11.1%	0.68/0.32	19000 h
E78	3.7 V	54 cd/A	46 lm/W	14.9%	0.36/0.61	47000 h
E79	3.8 V	57 cd/A	47 lm/W	16.1%	0.36/0.61	33000 h
E80	3.5 V	53 cd/A	48 lm/W	14.8%	0.37/0.61	31000 h
E81	4.0 V	7.1 cd/A	5.5 lm/W	11.9%	0.69/0.31	21000 h
E82	4.0 V	54 cd/A	42 lm/W	15.1%	0.37/0.60	29000 h
E83	3.6 V	50 cd/A	44 lm/W	14.0%	0.36/0.60	29000 h
E84	3.9 V	47 cd/A	38 lm/W	13.0%	0.36/0.61	27000 h
E85	3.5 V	44 cd/A	40 lm/W	12.2%	0.26/0.60	23000 h
E86	3.6 V	51 cd/A	44 lm/W	14.3%	0.36/0.60	39000 h
E87	3.5 V	47 cd/A	42 lm/W	13.2%	0.37/0.61	35000 h
E88	3.3 V	43 cd/A	41 lm/W	12.1%	0.37/0.61	43000 h
E89	5.3 V	9.5 cd/A	5.6 lm/W	8.8%	0.66/0.33	29000 h
E90	3.8 V	46 cd/A	38 lm/W	12.9%	0.37/0.60	26000 h
E91	4.1 V	48 cd/A	37 lm/W	13.5%	0.37/0.61	23000 h
E92	3.4 V	50 cd/A	46 lm/W	13.9%	0.37/0.61	30000 h
E93	3.5 V	49 cd/A	44 lm/W	13.6%	0.37/0.61	36000 h
E94	3.4 V	47 cd/A	43 lm/W	13.1%	0.36/0.61	35000 h
E95	4.5 V	7.5 cd/A	5.3 lm/W	12.6%	0.69/0.31	24000 h
E96	3.5 V	47 cd/A	42 lm/W	13.1%	0.37/0.61	22000 h
E97	4.1 V	51 cd/A	39 lm/W	14.2%	0.36/0.60	29000 h
E98	4.2 V	53 cd/A	39 lm/W	14.7%	0.36/0.60	26000 h
E99	3.9 V	46 cd/A	37 lm/W	12.7%	0.37/0.60	29000 h
E100	4.4 V	7.7 cd/A	5.5 lm/W	12.8%	0.69/0.31	29000 h
E101	5.2 V	10.5 cd/A	6.4 lm/W	9.7%	0.66/0.33	30000 h
E102	3.4 V	58 cd/A	53 lm/W	16.1%	0.36/0.61	44000 h
E103	3.4 V	55 cd/A	51 lm/W	15.4%	0.37/0.61	39000 h
E104	4.3 V	7.6 cd/A	5.5 lm/W	12.6%	0.69/0.31	28000 h
E105	3.7 V	52 cd/A	44 lm/W	14.5%	0.37/0.61	31000 h

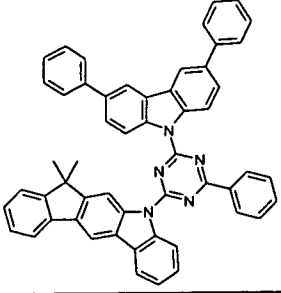
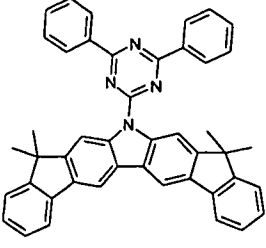
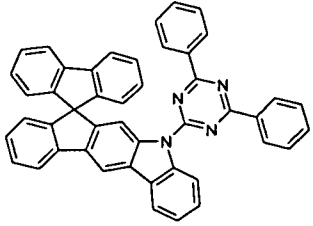
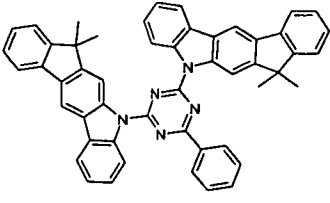
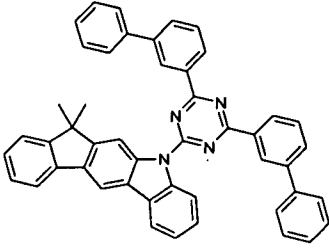
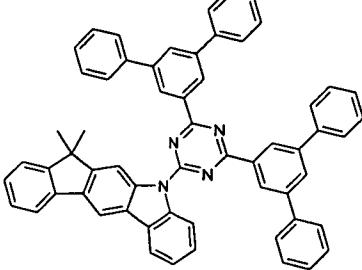
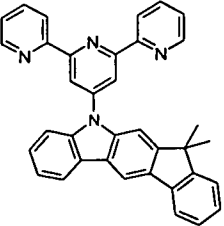
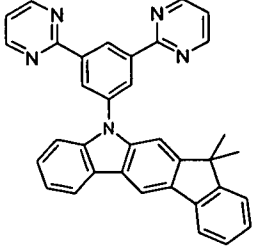
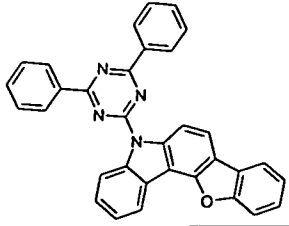
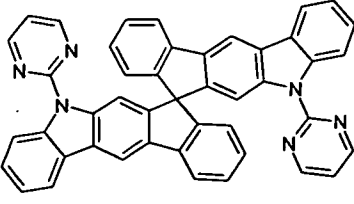
表 4：OLED 用的材料之結構式

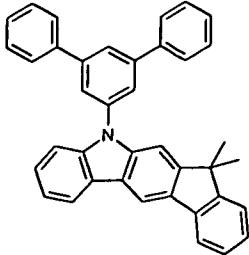
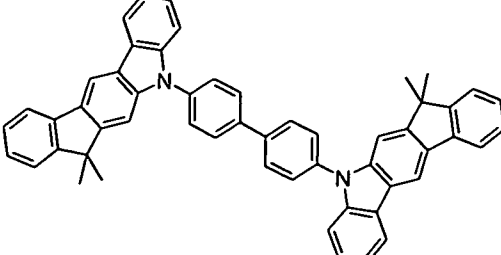
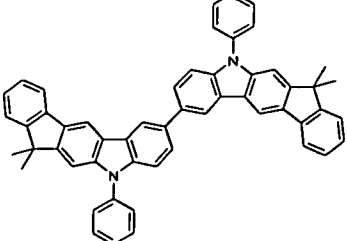
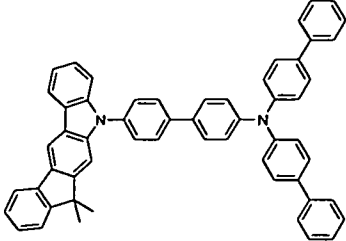
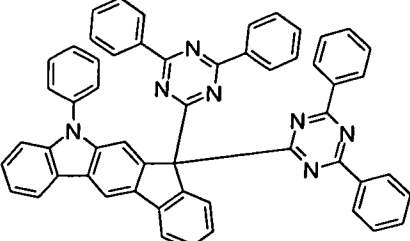
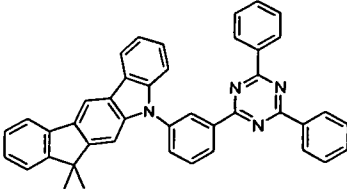
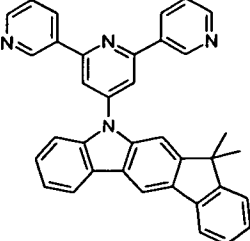
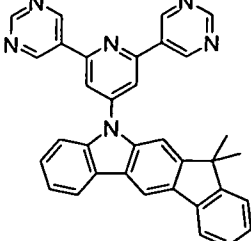
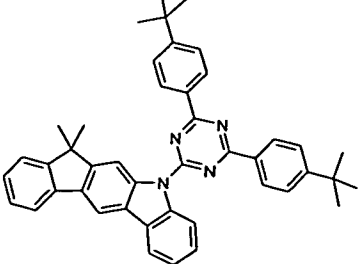
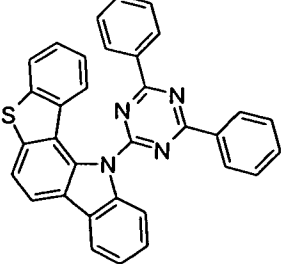
	
HIL1	HTM1 (先前技藝)
	
NPB (先前技藝)	EBM1 (先前技藝)
	
Alq ₃ (先前技藝)	H1
	
H2	D1
	
D2	ETM1 (先前技藝)
	

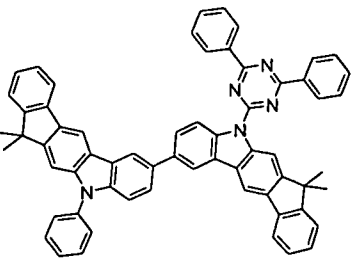
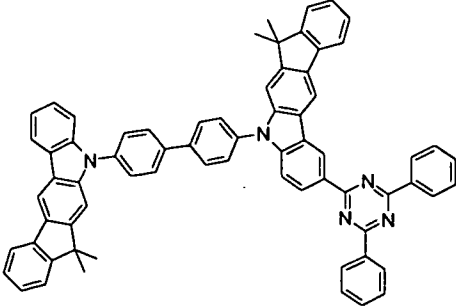
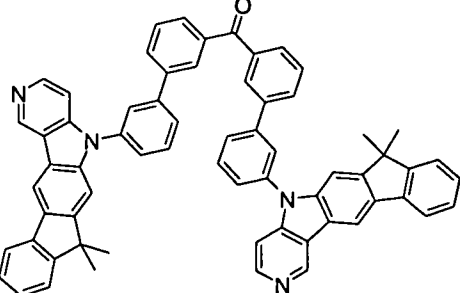
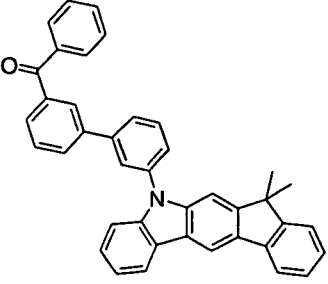
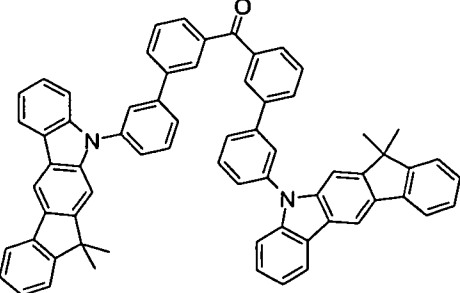
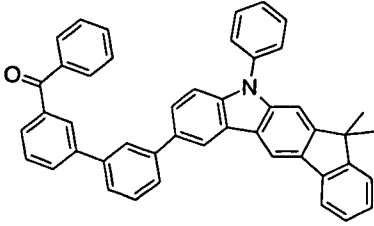
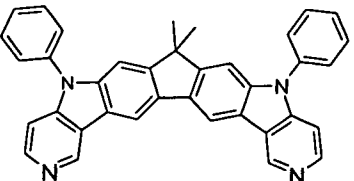
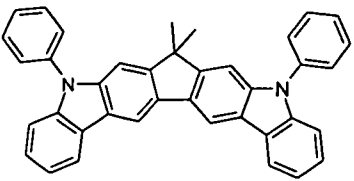
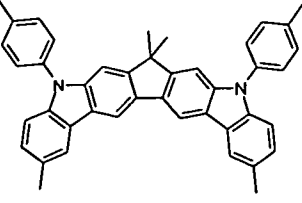
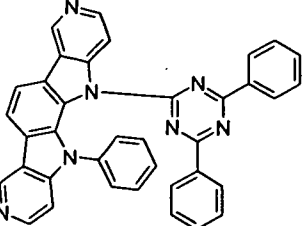
<p style="text-align: center;">D3</p> 	<p style="text-align: center;">SpNBP</p>
<p style="text-align: center;">ST2</p> 	
<p style="text-align: center;">HTM2 (根據本發明)</p> 	<p style="text-align: center;">HTM3 (根據本發明)</p> 
<p style="text-align: center;">H4 (根據本發明)</p> 	<p style="text-align: center;">ST1 (先前技藝)</p> 
<p style="text-align: center;">LiQ</p> 	<p style="text-align: center;">TEG1</p> 
<p style="text-align: center;">TER1</p>	<p style="text-align: center;">TER2</p>

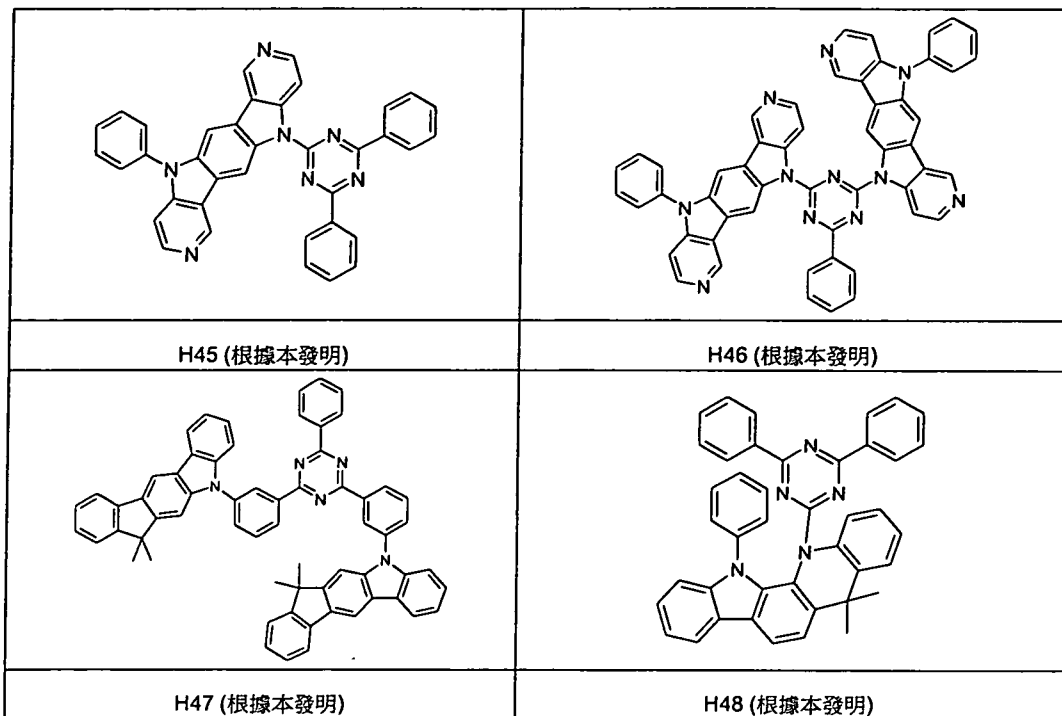
	
<p>CBP (先前技藝)</p>	<p>TCTA (先前技藝)</p>
	
<p>Ket1 (先前技藝)</p>	<p>ETM2 (先前技藝)</p>
	
<p>DAP1 (先前技藝)</p>	<p>FTPh (先前技藝)</p>
	
<p>H5 (根據本發明)</p>	<p>H6 (根據本發明)</p>
	
<p>H7 (根據本發明)</p>	<p>H9 (根據本發明)</p>

	
HTM4 (根據本發明)	HTM5 (根據本發明)
	
H10 (根據本發明)	H11 (根據本發明)
	
H12 (根據本發明)	H13 (根據本發明)
	
H14 (根據本發明)	H15 (根據本發明)
	
H16 (根據本發明)	H17 (根據本發明)

	
H18 (根據本發明)	H19 (根據本發明)
	
H20 (根據本發明)	H21 (根據本發明)
	
H22 (根據本發明)	H23 (根據本發明)
	
H24 (根據本發明)	H25 (根據本發明)
	
H26 (根據本發明)	H27 (根據本發明)

	
H28 (根據本發明)	H29 (根據本發明)
	
H30 (根據本發明)	HTM6 (根據本發明)
	
H31 (根據本發明)	H32 (根據本發明)
	
H33 (根據本發明)	H34 (根據本發明)
	
H35 (根據本發明)	H36 (根據本發明)

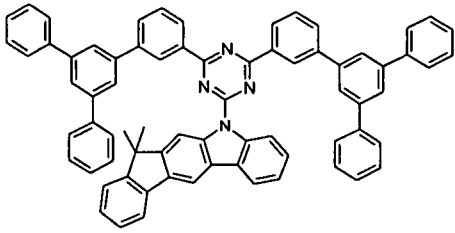
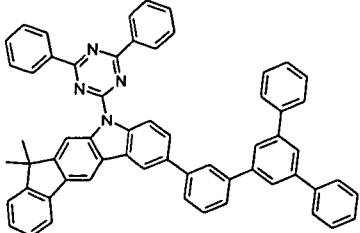
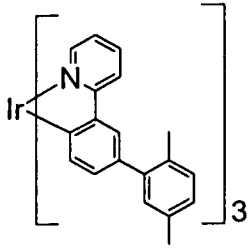
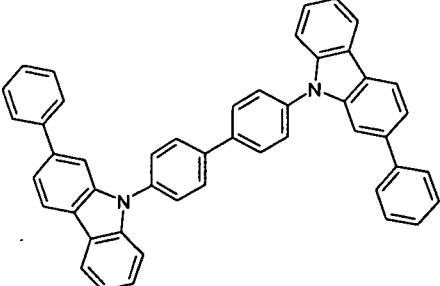
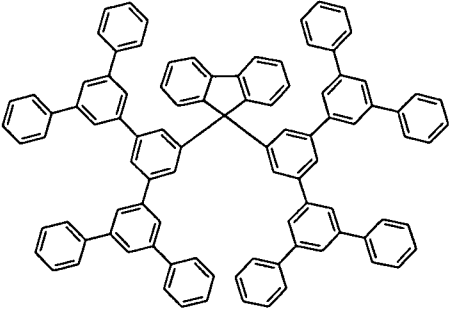
	
H37 (根據本發明)	H38 (根據本發明)
	
H39 (根據本發明)	H40 (根據本發明)
	
H41 (根據本發明)	H42 (根據本發明)
	
H43 (根據本發明)	HTM7 (根據本發明)
	
HTM8 (根據本發明)	H44 (根據本發明)



實例 56：經溶液加工之 OLED 的製造

為清楚起見，將經溶液加工之 OLED 中所使用的發光體 T1 結構、根據本發明的基質材料 SH1、SH2 及更多基質組份 C1 和 C2 描述於表 5 中。

表 5：在經溶液加工之 OLED 中所使用的材料結構

	
SH1	SH2
	
T1	C1
	
C2	

亦可從溶液使用根據本發明的材料，該等材料在此造成顯著更簡單的裝置，不過仍具有好的性質。此等組份的製造係以聚合物發光二極體（PLED）的製造為基準，其已於文獻中敘述過許多次（例如，在 WO 2004/037887 A2 中）。在本發明的情況中，將根據本發明的化合物溶解在甲苯或氯苯中。在此提出的實例中所使用的濃度為 20 重量%之發光體及 80 重量%之化合物 SH1 和 SH2。在此若裝置用的 80 奈米典型的層厚度係以旋轉塗佈法方式達成時，則此等溶液典型的固體含量係介於 16 與 25 公克/公

升之間。經溶液加工之 OLED 的典型結構如下：ITO 陽極 //80 奈米緩衝層 (PEDOT) //20 奈米中間層 (HIL-012) //80 奈米發光層 (在 SH1 或 SH2 中的 T1) //陰極 (3 奈米 Ba, 150 奈米 Al)。此結構亦被用於表 6 中所述及之 OLED 的情況中。發光層 (EML) 包含經溶解之基質材料及呈非晶形層形式的發光體。結構化 ITO 基板及所謂的緩衝層用的材料 (PEDOT, 實際為 PEDOT:PSS) 係自商業上取得 (ITO 係取自 Technoprint 及其他等, 成為 Clevios P 水性分散液的 PEDOT:PSS 係取自 H. C. Starck)。所使用的中間層適任於電洞注射; 在此情況中, 使用取自 Merck 的 HIL-012。發光層係在惰性氣體環境中 (在本發明的情況中為氬) 以旋轉塗佈法塗覆, 且藉由在 160°C (SH1) 或 180°C (SH2) 下加熱 10 分鐘而乾燥。最後鋇及鋁陰極係藉由真空蒸氣沈積法塗覆。在上述實例中所使用的層 HBL 及 ETL 亦可以蒸氣沈積法塗覆在 EML 與陰極之間, 且中間層亦可以一或多個層置換, 該一或多個層僅必須滿足不會因 EML 沈積法的後續加工步驟而從溶液再脫離的條件。

經溶液加工之裝置係以標準方法特徵化且未達最優化。

將化合物 SH1 及 SH2 用於經溶液加工之 OLED 中時所獲得的結果總結於表 6 中。

表 6：在上述指示之裝置組態中的結果

實例	EML 80 奈米	最大效率 [cd/A]	在 100 cd/m ² 下的電壓[V]	CIE (x,y)	壽命[小時], 初發光密度 1000 cd/m ²
1	SH1:T1	26	4.1	0.34/ 0.62	7400
2	SH2:T1	28	4.0	0.34/ 0.62	8100

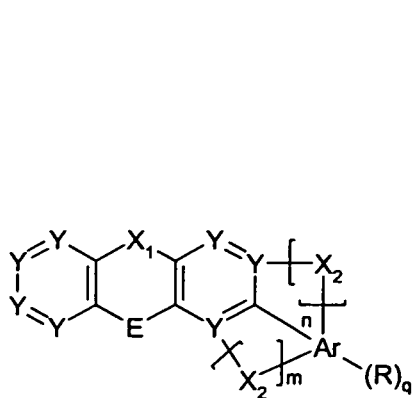
除了較不貴的製造法以外，以溶液為主之 OLED 亦具有材料可輕易地組合在層中且具有可再現之濃度的優點。根據本發明的材料 SH1 及 SH2 因此亦可與其他的基質材料組合（“共主體”）。使用分別以其他的基質組份 SH1 或 SH2 為基準計各自以 1：1 之比的材料 C1 及 C2。關於濃度，此意謂秤重出 40 毫克/毫升之 SH1 或 SH2，40 毫克/毫升之共主體及 20 毫克/毫升之 T1。所使用的溶劑在 C1 的情況中為氯苯及在 C2 的情況中為甲苯。除此以外，OLED 係與用於簡單組份的上述相同的方式製造。經溶液加工之 OLED 的結構如下：ITO 陽極//80 奈米緩衝層（PEDOT）//20 奈米中間層（HIL-012）//80 奈米發光層（在 SH1 或 SH2 中的 T1，在每一情況中+共主體）//陰極（3 奈米 Ba，150 奈米 Al）。此結構亦被用於表 7 中所示之 OLED 的情況中。

表 7：在上述指示之裝置組態中的結果

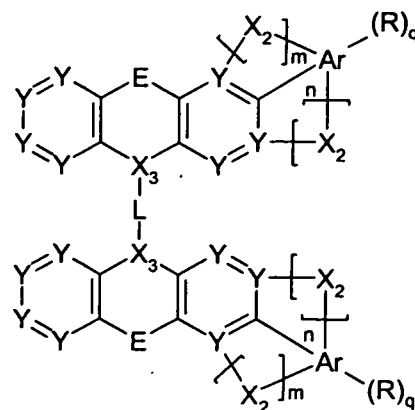
實例	EML80 奈米	最大效率 [cd/A]	在 100 cd/m ² 下的電壓[V]	CIE (x,y)	壽命[小時], 初發光密度 1000 cd/m ²
3	(SH1+C1):T1	30	4.1	0.34/0.62	27000
4	(SH1+C2):T1	32	4.4	0.33/0.62	24000
5	(SH2+C1):T1	25	3.8	0.32/0.63	20000
6	(SH2+C2):T1	26	4.3	0.33/0.62	20000

七、申請專利範圍：

1. 一種式 (1) 或式 (1') 化合物，



式 (1)



式 (1')

其中下列者適用於所使用的符號及下標：

Y 為 C (假設 X_2 基團與 Y 基團鍵結) 或在各次出現係相同或不同地為 CR 或 N (假設沒有 X_2 基團與 Y 基團鍵結)；

E 在各次出現係相同或不同地為共價單鍵或選自 $N(R^1)$ 、 $B(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、O、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、S、 $S=O$ 、 SO_2 、 $P(R^1)$ 及 $P(=O)R^1$ 之二價橋；

X_1 在各次出現係相同或不同地為選自 $N(R^1)$ 、 $B(R^1)$ 、O、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、S、 $S=O$ 、 SO_2 、 $P(R^1)$ 及 $P(=O)R^1$ 之二價橋；

X_2 在各次出現係相同或不同地為選自 $N(R^1)$ 、 $B(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^1$ 、 $C=C(R^1)_2$ 、S、 $S=O$ 、 SO_2 、 CR^1-CR^1 、 $P(R^1)$ 及 $P(=O)R^1$ 之二價橋；

X_3 在各次出現係相同或不同地為選自 N、B、 $C(R^1)$ 、 $Si(R^1)$ 、P 及 $P(=O)$ 之二價橋；

- L 為具有 5 至 40 個芳族環原子之二價芳族或雜芳族環系統，其可被一或多個 R^1 基取代；
- Ar 在各次出現係相同或不同地為具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基，其可被一或多個 R^1 基團取代；
- n, m 在各次出現係相同或不同地為 0 或 1，其先決條件為 $n+m=1$ 或 2；
- q 為 1、2、3、4、5 或 6；
- R 在各次出現係相同或不同地為 H、D、F、Cl、Br、I、 $N(Ar)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $P(=O)Ar_2$ 、 $S(=O)Ar$ 、 $S(=O)_2Ar$ 、 $CR^2=CR^2Ar$ 、CN、 NO_2 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 OSO_2R^2 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷氧基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷氧基（每個該等基團可被一或多個 R^2 基取代，其中一或多個不相鄰的 CH_2 基團可被 $R^2C=CR^2$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 或 $CONR^2$ 置換，且其中一或多個 H 原子可被 D、F、Cl、Br、I、CN 或 NO_2 置換）、或具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳氧基或雜芳氧基（其可被一或多個 R^2 基取代）、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基（其可被一

或多個 R^2 基取代) 或該等系統之組合; 二或多個與彼等鍵結之原子一起的取代基 R 在此亦可互相或與 Ar (假設該等取代基係與 Ar 鍵結) 形成單-或多環脂肪族或芳族環系統;

R^1 在各次出現係相同或不同地為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 CF_3 、 $B(OR^2)_2$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷氧基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷氧基或具有 2 至 40 個 C 原子之烯基或炔基 (每個該等基團可被一或多個 R^2 基取代, 其中一或多個不相鄰的 CH_2 基團可被 $-R^2C=CR^2-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-COO-$ 或 $-CONR^2-$ 置換, 且其中一或多個 H 原子可被 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換)、或芳基胺、或經取代或未經取代之咪唑 (其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代)、或具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基 (其可被一或多個芳族、雜芳族或非芳族 R^2 基取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統 (其可被一或多個非芳族 R^2 基取代)、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳氧基或雜芳氧基 (其可被一或多個 R^2 基取代)、或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基 (其可被一或多個 R^2 基取代) 或該等系統之組合; 二或多個取代基 R^1 在此亦可互相或與彼等鍵結之原子一起形成單-或多環脂肪

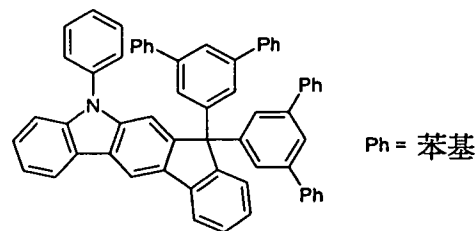
族或芳族環系統；

R^2 在各次出現係相同或不同地為 H、D 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂肪族烴基、或具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基或該等基團之組合；

在此排除其中 $X_1 = X_2 = N(R^1)$ 之結構；

亦在此排除其中 $X_2 = N(R^1)$ 且 $X_3 = N$ 之結構；

另外排除下列化合物：

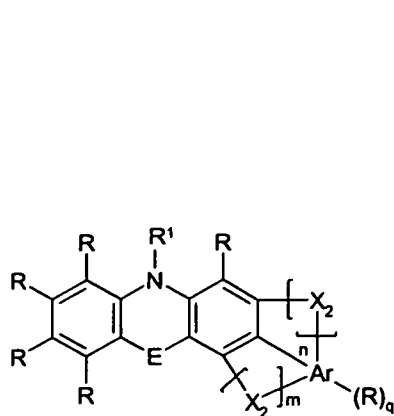


2. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中 X_1 代表 $N(R^1)$ ，其中 R^1 係選自具有 5 至 40 個環原子之芳基或雜芳基（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代）或具有 5 至 60 個環原子之芳族或雜芳族環系統（其在每一情況中可被一或多個 R^2 基取代），及 X_2 代表 $C(R^1)_2$ 。

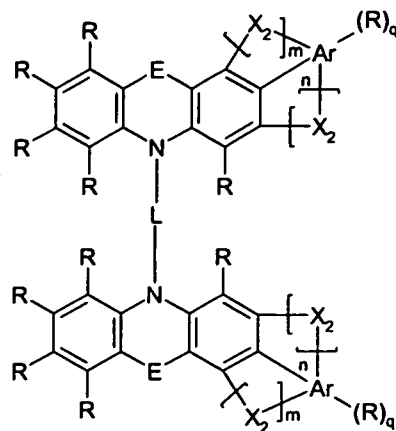
3. 根據申請專利範圍第 1 項之化合物，其中 E 在各次出現係彼此獨立選自單共價鍵或選自 $N(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 及 O 之二價橋。

4. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其中 Ar 代表經取代或未經取代之苯基、萘基、三吡基、吡啶基、嘧啶基或咪唑。

5. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其具有式 (2) 或式 (2')：



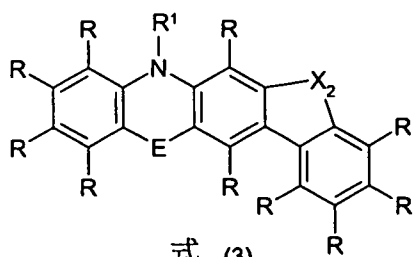
式 (2)



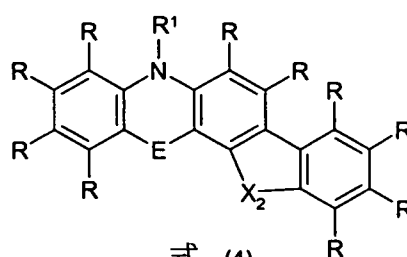
式 (2')

其中符號及下標具有在申請專利範圍第 1 項中所指示之意義。

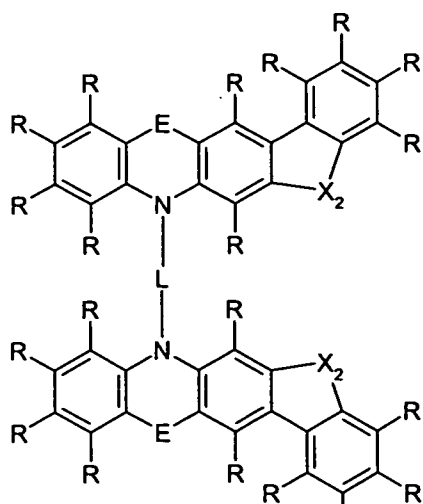
6. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其係選自式 (3)、(4)、(3') 及 (4') 化合物：



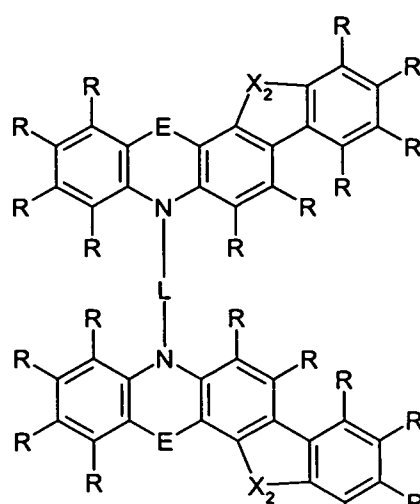
式 (3)



式 (4)



式 (3')

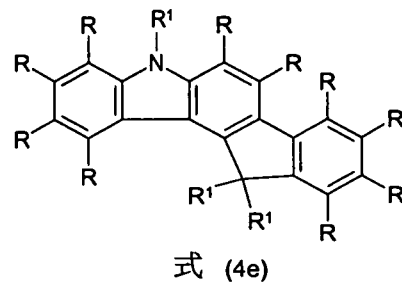
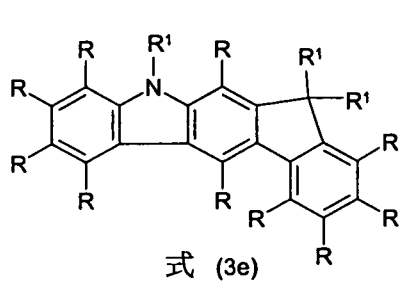


式 (4')

其中所使用的符號及下標具有在申請專利範圍第 1 項中所

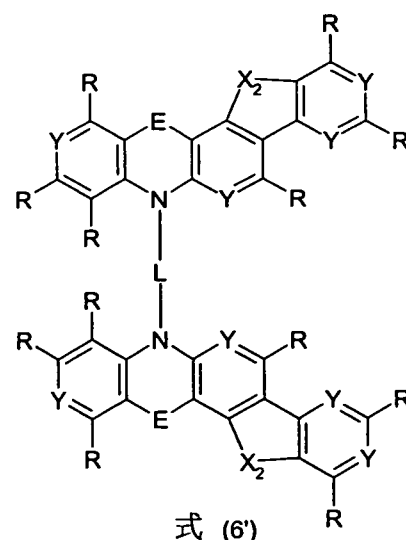
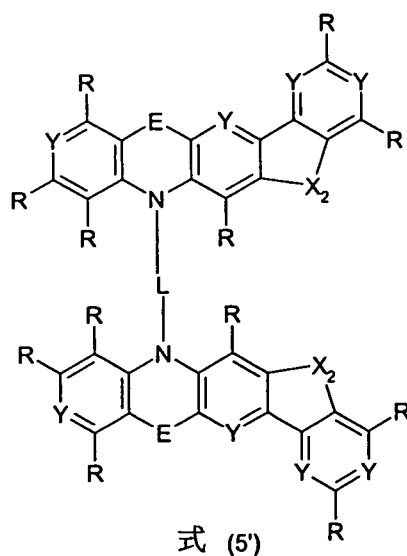
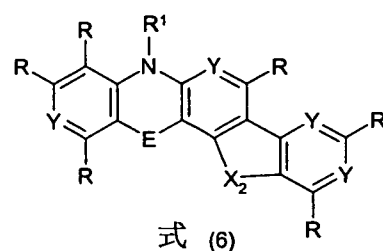
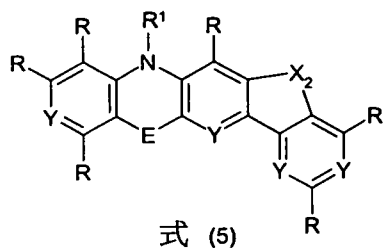
指示之意義。

7. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其係選自式 (3e) 及 (4e) 結構：



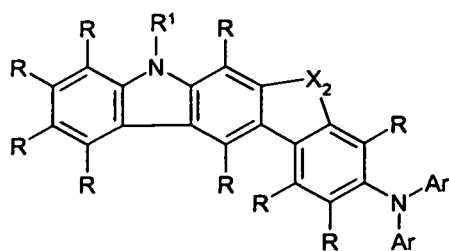
其中符號及下標具有在申請專利範圍第 1 項中所指示之意義。

8. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其係選自式 (5)、(5')、(6) 及 (6') 結構：

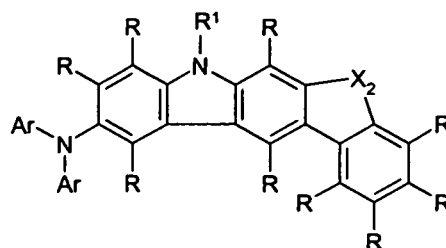


其中至少一個 Y 基團代表 N 及其餘的 Y 基團代表 CR，而其他的符號具有在申請專利範圍第 1 項中所指示之意義。

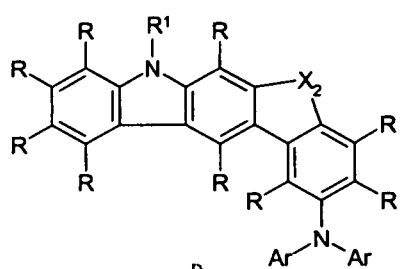
9. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其係選自式 (3g) 至 (3n) 結構：



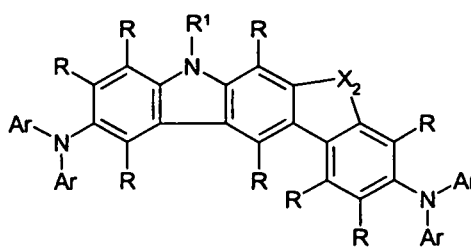
式 (3g)



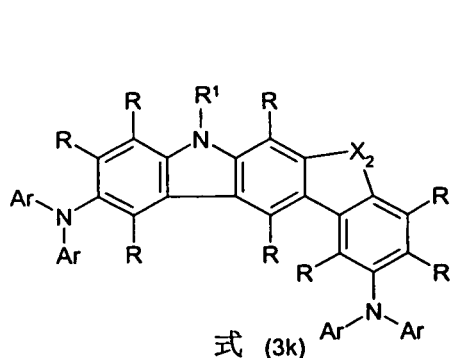
式 (3h)



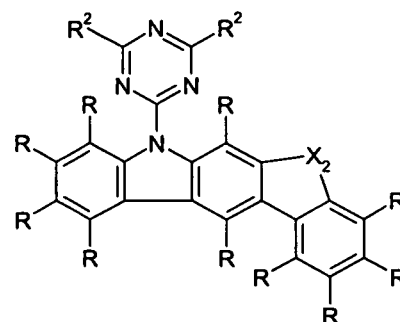
式 (3i)



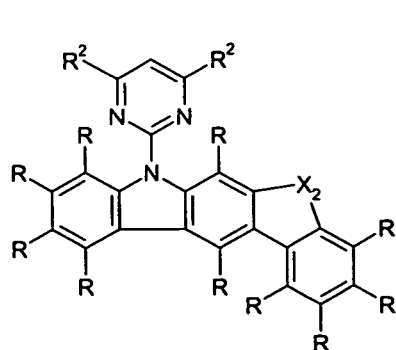
式 (3j)



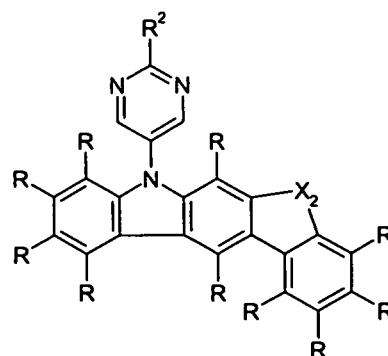
式 (3k)



式 (3l)



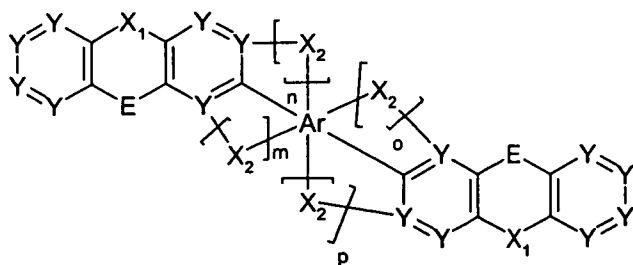
式 (3m)



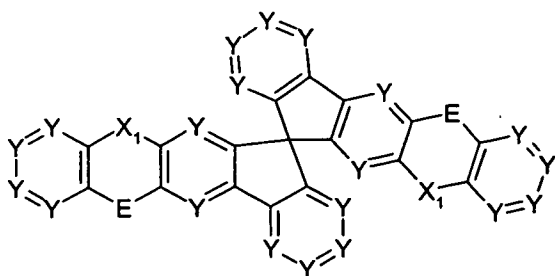
式 (3n)

其中所使用的符號及下標具有在申請專利範圍第 1 項中所指示之意義。

10. 根據申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之化合物，其具有通式 (7) 或 (8)：



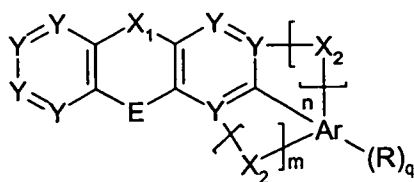
式 (7)



式 (8)

其中符號及下標具有在申請專利範圍第 1 項中所指示之意義， o 及 p 彼此各自獨立為 0 或 1，且 $o+p=1$ 或 2。

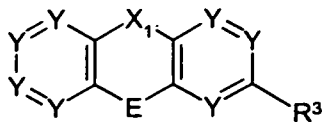
11. 一種用於製備根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之式 (1) 化合物的方法：



式 (1)

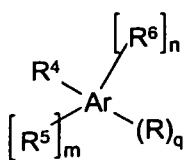
其中所使用的符號及下標具有上述所指示之意義，該方法係以下列步驟為特徵：

a) 將式 (1) 化合物：



式 (I)

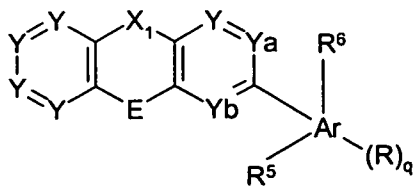
其中 R^3 為選自溴、碘、氯、硼酸、硼酸酯、甲苯磺酸酯或三氟甲磺酸酯之反應性脫離基，
與式 (II) 化合物反應，



式 (II)

其中 R^4 為選自溴、碘、氯、硼酸、硼酸酯、甲苯磺酸酯或三氟甲磺酸酯之反應性脫離基，或反應性官能基， R^5 及 R^6 彼此各自獨立適合於形成橋 X_2 ， n 及 m 彼此各自獨立為 0 或 1，其中 $n+m$ 大於或等於 1，

以形成式 (III) 化合物：



式 (III)

，及

b) 橋 X_2 係藉由 Y_a 及 / 或 Y_b 與 R^5 及 / 或 R^6 之間適合的環閉合反應及隨意地在 X_1 及 / 或 X_2 上的後續取代而形成，以形成式 (I) 化合物。

12. 一種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物的用途，其係用於電子裝置中。

13. 一種電子裝置，其包含至少一種根據申請專利範

圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物。

14. 根據申請專利範圍第 13 項之電子裝置，其為有機電發光裝置，其中將根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物用於發光層中，及／或用做為電子傳輸材料，及／或用做為電洞傳輸材料，及／或用做為電洞注射材料，及／或用做為電洞阻隔材料。

15. 根據申請專利範圍第 14 項之電子裝置，其中將根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物用做為磷光發光體之基質材料。

16. 一種混合物，其包含至少一種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物及至少一種磷光發光體。

17. 一種調配物，其包含至少一種根據申請專利範圍第 1 至 10 項中之一或多項之化合物或根據申請專利範圍第 16 項之混合物及至少一種溶劑。