



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201111345 A1

(43)公開日：中華民國 100 (2011) 年 04 月 01 日

(21)申請案號：099123183

(22)申請日：中華民國 99 (2010) 年 07 月 14 日

(51)Int. Cl.：

C07D209/86 (2006.01)

C07C255/58 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30)優先權：2009/07/14

世界智慧財產權組織

PCT/SG2009/000251

(71)申請人：新加坡科技研究局 (新加坡) AGENCY FOR SCIENCE, TECHNOLOGY AND RESEARCH (SG)

新加坡

(72)發明人：陳志寬 CHEN, ZHIKUAN (CN)；劉沁德 LIU, QINDE (CA)；馬諄 MA, ZHUN (CN)；甄常刮 ZHEN, CHANGGUA (CN)

(74)代理人：陳長文

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：38 項 圖式數：7 共 104 頁

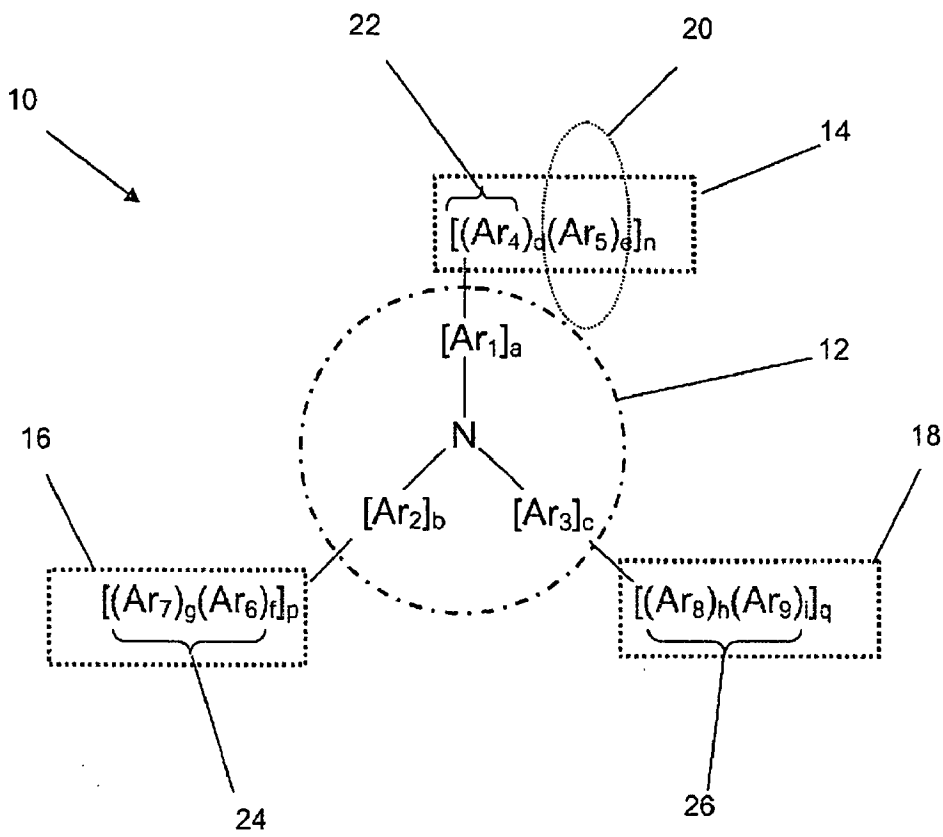
(54)名稱

有機雙極發光材料

ORGANIC AMBIPOLAR LIGHT EMITTING MATERIALS

(57)摘要

本發明提供藍色發光化合物，其包含：(1)電洞傳輸核心部分，該電洞傳輸核心部分包含三級氮部分；及(2)至少三個電子傳輸臂部分，其自該核心部分延伸，每一電子傳輸臂部分包含電子傳輸部分及發射部分。



- 10：化合物
- 12：核心部分
- 14：臂
- 16：臂
- 18：臂
- 20：缺電子部分
- 22：發射部分



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公開本

(11) 公開編號：TW 201111345 A1

(43) 公開日：中華民國 100 (2011) 年 04 月 01 日

(21) 申請案號：099123183

(22) 申請日：中華民國 99 (2010) 年 07 月 14 日

(51) Int. Cl. :

C07D209/86 (2006.01)

C07C255/58 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2009/07/14

世界智慧財產權組織

PCT/SG2009/000251

(71) 申請人：新加坡科技研究局 (新加坡) AGENCY FOR SCIENCE, TECHNOLOGY AND RESEARCH (SG)

新加坡

(72) 發明人：陳志寬 CHEN, ZHIKUAN (CN)；劉沁德 LIU, QINDE (CA)；馬諄 MA, ZHUN (CN)；甄常刮 ZHEN, CHANGGUA (CN)

(74) 代理人：陳長文

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：38 項 圖式數：7 共 104 頁

(54) 名稱

有機雙極發光材料

ORGANIC AMBIPOLAR LIGHT EMITTING MATERIALS

(57) 摘要

本發明提供藍色發光化合物，其包含：(1)電洞傳輸核心部分，該電洞傳輸核心部分包含三級氮部分；及(2)至少三個電子傳輸臂部分，其自該核心部分延伸，每一電子傳輸臂部分包含電子傳輸部分及發射部分。

六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明概言之係關於發光有機材料、尤其電致發光有機材料，且係關於含有該等化合物之發光裝置。

【先前技術】

某些有機材料因在分子中包括 π 鍵延伸系統而能夠傳導電荷。即，具有相連或共軛 π 系統之化合物(例如聚伸芳基化合物或聚伸芳基伸乙烯基化合物(例如聚(伸苯基伸乙烯基)及聚萘))具有重疊並沿該分子延伸之一系列 π 分子軌道。當向分子施加電壓時，此等延伸 π 分子軌道在未充滿時或僅部分地充滿電子時可為額外電子沿該分子之傳輸提供「通道」。可跨越導電有機材料形成若干該等延伸 π 軌道，其每一者皆具有不同結構及能級。具有最低能級之分子軌道通常係用於傳輸由電極提供之電子的有效路徑。

為使此等材料(且具體而言聚合物)在跨越分子傳輸電子時發光，一或多個電子必須自充滿或部分充滿之較高能量軌道移動至未充滿或部分充滿之較低能量軌道。若電子在自高能態傳遞至低能態時所釋放出之能量在可見光譜中，則此等分子將發射光。

簡言之，當將電洞注入導電有機分子中時，該分子變為帶正電荷，且反之當將電子注入此一分子中時，其變為帶負電荷。帶電荷分子可自毗鄰分子獲得相反電荷，從而在含有該導電有機分子之組合物中引起電荷傳輸。注入電子及電洞可在發射層內重新結合，形成結合電子/電洞對(稱

為激發子)，當其自激發態鬆弛至較低能態時可發射能量。視所發射能量之波長而定，能量可以紫外光或可見光形式釋放。

電致發光有機材料可為共軛聚合物或有機小分子。聚合電致發光有機材料之實例包括聚(1,4-伸苯基伸乙烯基)、聚萘、及其衍生物。電致發光聚合物因其溶液可處理性而具有吸引力，故係製造含有電致發光有機材料之電子裝置之相對具有成本效益之方法。然而，因聚合材料可能在聚合物骨架中含有一定量的結構缺陷、於聚合期間產生之副產物、及留在聚合物鏈上之末端基團，故聚合發光材料可能難以達成高純度。在聚合物中存在此等雜質/缺陷將顯著影響裝置效率及壽命。

非聚合有機小分子代表另一類發光材料。小分子之極高純度可藉助昇華或重結晶製程達成，故較發光聚合物有利。小分子已作為發射體或作為電荷傳輸材料廣泛地用於OLED裝置中。然而，小分子通常係藉助真空沈積進行處理，故不具有成本效益。此一製程對於大量生產係不合意的。為克服聚合發光材料純度差及小分子高成本處理之缺點，需要研發出可藉助溶液製程處理之新發光材料。

聚合材料及非聚合材料二者均已用於有機發光裝置(例如有機發光二極體(OLED))中。

然而，當前許多有機發光材料通常具有不平衡電荷傳輸特性。通常，發光材料僅能傳導一種電荷載流子(電洞或電子)，但通常不能同時傳導二者。舉例而言，聚(1,4-伸



苯基伸乙烯基)或經烷氧基取代之聚(1,4-伸苯基伸乙烯基)係良好之電洞傳輸體，而參-(8-羥基喹啉)鋁(III)(Alq3)係電子傳輸體。OLED裝置中之不平衡電荷傳輸導致低裝置效率。

為解決此問題，已開發出具有電洞注入層、電洞傳輸層、電子注入層及電子傳輸層中一者或多者之多層裝置。典型構造包括電洞傳輸層、發射層及電子傳輸層，可能包括電洞注入層及/或電子注入層。此方法可改良裝置效率，但會增加複雜性及成本。

解決此問題之另一方法係藉由向材料中納入電洞傳輸部分、或電子傳輸部分或該二者來調整材料之電荷傳輸性質以試圖改良裝置性能。

儘管已研發出一些包含電洞傳輸部分及電子傳輸部分中一者或二者之材料，且性能可能優於僅含有一種組份之材料，但迄今基於該等材料之報導裝置性能仍不令人滿意。原則上，當使用含有電洞傳輸部分及電子傳輸部分二者之雙極化合物作為發射層時，可簡化OLED裝置結構並藉此具有成本效益。然而，本發明者已觀察到雙極化合物通常具有較大偶極矩，此將導致較強之分子內及/或分子間相互作用。具體而言，供電子部分及拉電子部分二者共存於分子中將在分子中引發偶極矩。本發明者已觀察到各組份之供電子及拉電子作用越強，則分子中偶極矩越大。另外，供電子部分與拉電子部分越靠近，偶極矩就越大。

分子中之偶極矩通常將會引起較強之分子相互作用，尤

其係在固態時。眾所周知分子間相互作用將導致較低之裝置效率，此係由於在OLED裝置中形成激發子(excimer)/激態複合物(exciplex)所致。另外，激發子/激態複合物發射將使發射光譜向較長波長側移動。此會導致低裝置效率及發射光譜之紅移。

作為OLED關鍵組份中之一者，可應用於全彩色顯示器或固態照明中之藍色發光材料，與綠色或紅色發光材料相比，因其相對較低之裝置效率及較短壽命，故在OLED研究中其係最具挑戰性之課題。舉例而言，上文所提及之雙極化合物之不期望行為使得研發高性能深藍色發光材料極具挑戰性。具體而言，該等雙極化合物之紅移特性對於藍光發射係不合意的。

因此，需要可用於電致發光裝置中有機發光層中之新材料且具體而言新藍色發光材料。

【發明內容】

本發明提供發光化合物及材料、其製備方法及其在發光裝置(包括電致發光二極體)中之用途。

本發明係關於同時具有用於電洞傳輸之供電子部分及多個用於電子傳輸之拉電子部分的雙極化合物。

本發明實施例對電洞及電子二者皆具有平衡電荷傳輸性質。此外，本文所述發光材料之實施例具有受控分子偶極矩，從而可消除或減小分子內或分子間相互作用，以達成高效率及深藍色光發射。各實施例亦可達成較佳之藍光色純度。

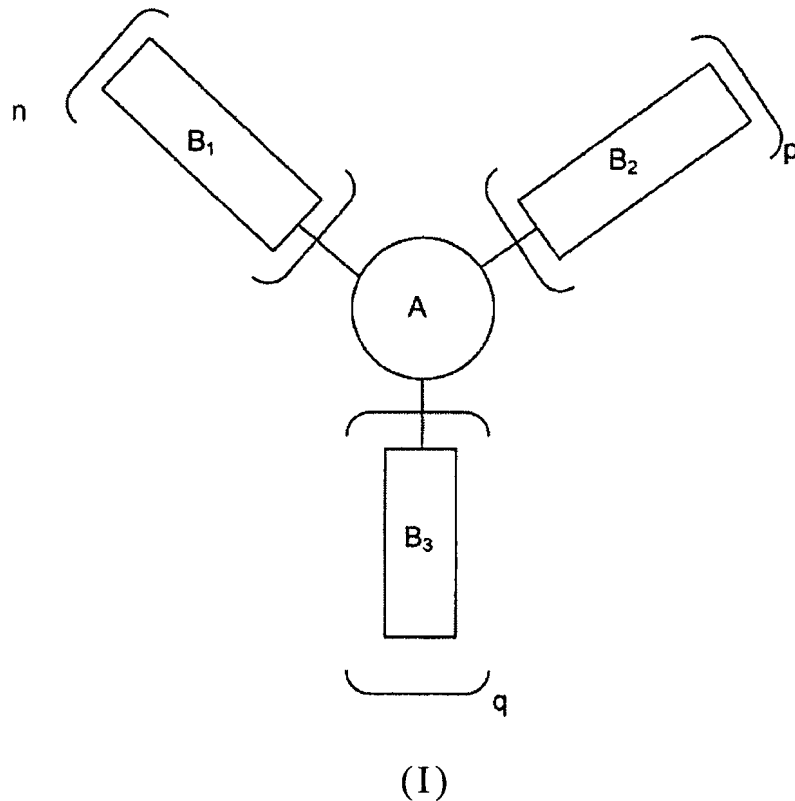


在其最一般之情形下，本發明提出雙極化合物包含中心電洞傳輸核心及至少三個與該核心相連之臂，其中每一臂皆包含電子傳輸部分及發射部分。

更具體而言，本發明係關於電致發光雙極材料，其包含核心中供電子三級氮基團及用以提供電子傳輸功能之三個或更多個具有缺電子基團之共軛臂；其製造方法及納入該等發光材料之電致發光裝置。

在一個態樣中，本發明提供化合物，其包含：(1)電洞傳輸核心部分，該電洞傳輸核心部分包含三級氮部分；及(2)至少三個電子傳輸臂部分，其自該核心延伸，每一電子傳輸臂部分皆包含電子傳輸部分及發射部分。

在又一態樣中，本發明提供包含式I結構之化合物，



其中：

核心部分 $\textcircled{\text{A}}$ 包含至少一個含有三級氮之部分，其視情況經取代；

臂部分 $\boxed{\text{B}_1}$ 、 $\boxed{\text{B}_2}$ 及 $\boxed{\text{B}_3}$ 中之每一者獨立地包含芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基，且視情況經取代；

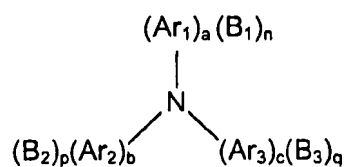
且

n 、 p 及 q 中每一者獨立地為1至50

且其中

該等臂部分中至少三者係電子傳輸臂部分且獨立地包含發射部分及可視情況經取代之缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

在又一態樣中，本發明提供包含式II結構之化合物：



(II)

其中：

Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基、伸芳基伸乙炔基或胺基伸芳基且視情況經取代；

B_1 、 B_2 及 B_3 中之每一者獨立地係如上文所定義；

且

a 、 b 及 c 中之每一者獨立地為0至20；且

n 、 p 及 q 中之每一者獨立地係如上文所定義；

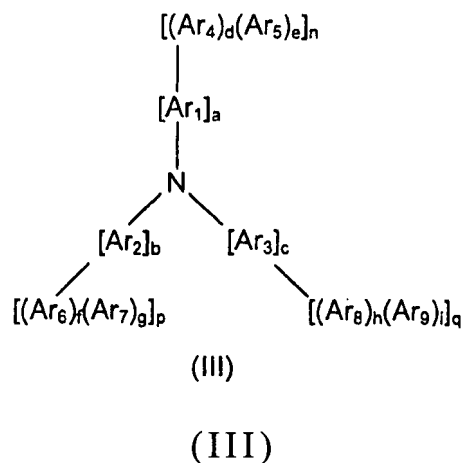
且其中：

至少三個選自 $(\text{B}_1)_n$ 、 $(\text{B}_2)_p$ 及 $(\text{B}_3)_q$ 之 B_x 各自獨立地包含



發射部分及可視情況經取代之缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

在又一態樣中，本發明提供包含式 III 結構之化合物：



其中

Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 係如上文所定義；且

a 、 b 、 c 、 n 、 p 及 q 中之每一者皆係如上文所定義；

且其中

Ar_4 、 Ar_5 、 Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 及 Ar_9 中之每一者獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基且視情況經取代；

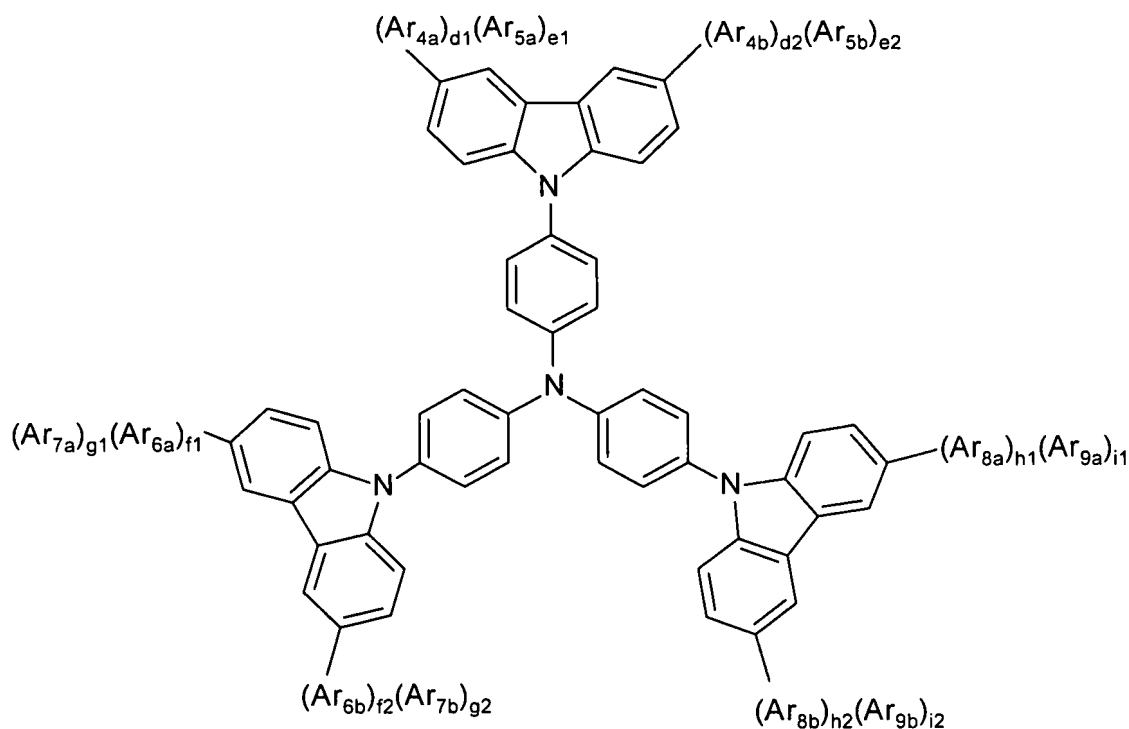
d 、 f 及 h 中之每一者獨立地為 1 至 20；且

e 、 g 及 i 中之每一者獨立地為 1 至 20；

且其中

選自 $[(Ar_4)_d(Ar_5)_e]_n$ 、 $[(Ar_6)_f(Ar_7)_g]_p$ 及 $[(Ar_8)_h(Ar_9)_i]_q$ 之 Ar_5 、 Ar_7 及 Ar_9 中之至少三者各自獨立地包含缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

在又一態樣中，本發明提供式 (IV) 化合物：



(IV)

其中

Ar_{4a} 及 Ar_{4b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_4 所定義；
 Ar_{5a} 及 Ar_{5b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_5 所定義；
 Ar_{6a} 及 Ar_{6b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_6 所定義；
 Ar_{7a} 及 Ar_{7b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_7 所定義；
 Ar_{8a} 及 Ar_{8b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_8 所定義；且
 Ar_{9a} 及 Ar_{9b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_9 所定義；

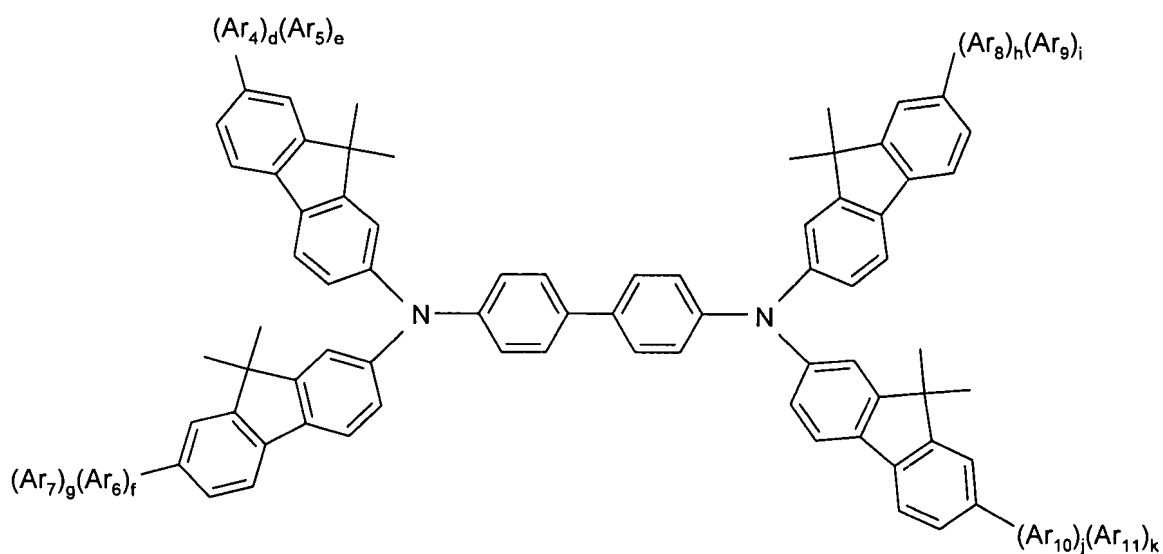
且其中

d_1 及 d_2 中之每一者獨立地係如上文針對 d 所定義；
 e_1 及 e_2 中之每一者獨立地係如上文針對 e 所定義；
 f_1 及 f_2 中之每一者獨立地係如上文針對 f 所定義；
 g_1 及 g_2 中之每一者獨立地係如上文針對 g 所定義；
 h_1 及 h_2 中之每一者獨立地係如上文針對 h 所定義；且
 i_1 及 i_2 中之每一者獨立地係如上文針對 i 所定義；

且其中

選自 $(Ar_{4a})_{d1}(Ar_{5a})_{e1}$ 、 $(Ar_{4b})_{d2}(Ar_{5b})_{e2}$ 、 $(Ar_{6a})_{f1}(Ar_{7a})_{g1}$ 、 $(Ar_{6b})_{f2}(Ar_{7b})_{g2}$ 、 $(Ar_{8a})_{h1}(Ar_{9a})_{i1}$ 及 $(Ar_{8b})_{h2}(Ar_{9b})_{i2}$ 之 Ar_{5a} 、 Ar_{5b} 、 Ar_{7a} 、 Ar_{7b} 、 Ar_{9a} 及 Ar_{9b} 中之至少三者各自獨立地為缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基且視情況經取代。

在又一態樣中，本發明提供式(V)化合物：



(V)

其中

Ar_4 、 Ar_5 、 Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 及 Ar_9 中之每一者獨立地係如上文所定義；

Ar_{10} 獨立地係如上文針對 Ar_4 所定義；

Ar_{11} 獨立地係如上文針對 Ar_5 所定義；

d 、 e 、 f 、 g 、 h 及 i 中之每一者獨立地係如上文所定義；

j 獨立地係如上文針對 d 所定義；且

k 獨立地係如上文針對 e 所定義；

且其中

選自 $(Ar_4)_d(Ar_5)_e$ 、 $(Ar_6)_f(Ar_7)_g$ 、 $(Ar_8)_h(Ar_9)_i$ 及 $(Ar_{10})_j(Ar_{11})_k$ 之 Ar_5 、 Ar_7 、 Ar_9 及 Ar_{11} 中之至少三者各自獨立地為缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基且視情況經取代。

在又一態樣中，本發明提供包含兩個或更多個衍生自如本文所述化合物之單元之寡聚物或聚合物。

在又一態樣中，本發明提供包含兩個或更多個衍生自如本文所述化合物之單元之樹枝狀聚合物。

在又一態樣中，本發明提供包含如本文所述化合物之發光裝置。

在另一態樣中，本發明提供包含如本文所述化合物之有機電致發光裝置。

在相關態樣中，本發明提供包含如本文所述化合物之有機發光二極體(OLED)。

在另一態樣中，提供包含如本文所述化合物之薄膜。

在又一態樣中，提供包含陽極、陰極及如本文所述薄膜之裝置，該薄膜佈置於該陽極與該陰極之間。

在又一態樣中，提供裝置，其包含：陽極；佈置於該陽極上之發射層，該發射層包含如本文所述化合物；及佈置於該發射層上之陰極。

在另一態樣中，本發明提供包含發射層之裝置，其中該發射層包含如本文所述化合物或薄膜。

在另一態樣中，提供裝置，其包含：陽極；佈置於該陽



極上之電洞傳輸層；佈置於該電洞傳輸層上之發射層；佈置於該發射層上之電子傳輸層；及佈置於該電子傳輸層上之陰極；其中該電洞傳輸層、該發射層及該電子傳輸層中之至少一者包含如本文所述化合物或薄膜。

在再一態樣中，提供裝置，其包含：陽極；佈置於該陽極上之電洞注入層；佈置於該電洞注入層上之電洞傳輸層；佈置於該電洞傳輸層上之發射層；佈置於該發射層上之電子傳輸層；及佈置於該電子傳輸層上之電洞阻擋層；佈置於該發射層上之電子注入層；佈置於該電子注入層上之陰極；其中該電洞傳輸層、該發射層或該電子傳輸層中之至少一者包含如本文所述化合物或薄膜。

在又一態樣中，本發明提供包含作用層之光電伏打電池，其中該作用層包含如本文所述化合物或薄膜。

在又一態樣中，本發明提供包含感測層之化學或生物感測器，其中該感測層包含如本文所述化合物或薄膜。

適宜地，本文所提及之裝置係顯示器裝置，例如顯示器面板。

因此，本發明之又一態樣提供包含如本文所述化合物或薄膜之顯示器裝置。

在又一態樣中，本發明提供製備如本文所述化合物之方法。

在又一態樣中，本發明提供製備如本文所述裝置(例如OLED或顯示器裝置)之方法。

在又一態樣中，本發明提供如本文所述化合物在如本文

所述裝置(例如 OLED 或顯示器裝置)中之用途。

如結合附圖進行閱讀，在審閱本發明之以下說明(包括各實例)後，業內一般技術人員將明瞭本發明之其他態樣及特徵。

該等態樣中之任一者皆可與其他態樣中之任一者或多者組合，與一個態樣相關之可選及較佳特徵適宜應用於其他態樣中之任一者。具體而言，參照方法或用途所闡述之特徵亦適宜應用於產物(化合物、裝置等)且反之亦然。

【實施方式】

本文所述化合物之實施例可電致發光，此意味著當電流經過此等化合物時其可發射光。因此，此等化合物適合用於有機電子裝置中之電荷傳輸層或發光層中。

方便地，如本文所述化合物係由化合物核心中之電洞傳輸部分及至少三個自該核心延伸之臂組成，每一臂皆包含電子傳輸部分。結構特徵之此組合不僅賦予化合物雙極傳輸功能性，而且達成平衡電荷傳輸性質。適宜地，當將化合物納入發光裝置中時此提供良好之裝置性能。具體而言，如本文所闡述及闡釋，藉由採用本文所述組份之特定排列可有利地改變(例如視需要增加、或減少或消除)色純度、發射紅移、裝置效率、裝置壽命及驅動電壓中之一者或多者。此外，適宜地，此等化合物係溶液可處理的，且可容易地將其純化至相對較高程度。因此，各實施例可解決上文所述問題並提供(例如)在 OLED 中表現良好之化合物。



因此，在一個態樣中，本發明提供化合物，其包含：

(1)電洞傳輸核心部分，該電洞傳輸核心部分包含三級氮部分；及(2)至少三個電子傳輸臂部分，其自該核心延伸，每一電子傳輸臂部分皆包含電子傳輸部分及發射部分。

適宜地，該化合物包含(3)至少一個額外臂部分。在各實施例中，該(等)額外臂中之至少一者包含帶隙大於該(等)電子傳輸臂之該發射部分之帶隙的發射部分。此排列適宜地確保發射僅自電子傳輸臂之該發射部分(如上文所說明，其通常係存於與缺電子部分相同之臂上)發生，而不會自額外臂上之發射部分發生。

電洞傳輸部分、電子傳輸臂部分、電子傳輸部分及(若存在)額外臂部分係如本文所述適宜地選擇。

較佳地，臂部分(電子傳輸及額外)之總數量為4或更多、5或更多、6或更多、或10或更多。通常，臂部分之最大數量為100，較佳為50，且最佳為20。臂部分可直接地或間接地連接至電洞傳輸核心部分。在各實施例中，臂部分中之一些或全部係具支鏈結構之一部分。即，化合物之周圍(非核心)部分可具支鏈且適宜地，該等支鏈中之一些或全部包含臂部分。

符合此設計之化合物適宜地允許降低分子內偶極矩。此外，具有因存在三個或更多個臂而產生之龐大結構之化合物能防止分子彼此靠近，藉此可有效地減少分子間相互作用。分子內偶極矩及分子間相互作用之減少適宜地達成OLED裝置之高效率且可避免發射光譜紅移之副作用。

具體而言，本發明實施例藉由提供具有三個或更多個臂之雙極化合物可解決上文所論述之缺點，其中電洞傳輸功能提供於核心中且電子傳輸功能分佈於在三個或更多個周圍臂中。

因此，例如藉由在發射層中提供如本文所述化合物，可將電洞及電子二者注入發射層中並使其在發射層中傳輸。

具體而言，藉由提供三個或更多個周圍臂，本發明者已達成平衡電荷傳輸性質問題之顯著改良。特定而言，本發明者已發現在此等臂中放置缺電子基團結合核心中之含有三級氮之部分(例如三芳基胺)可顯著降低化合物之偶極矩。

當臂圍繞核心實質上對稱地排列及/或實質上均勻地間隔開時此方法尤其有效。就此而言，本文所提及圍繞核心之該等對稱排列及/或均勻間隔開將為熟習此項技術之閱讀者所理解且適宜地關於臂圍繞核心之排列以便在假定每一臂之尺寸及形狀相同之情況下，當化合物以正常方式繪示及/或圍繞核心之臂的分佈以規則間隔、較佳以相鄰臂或臂群組之間之實質上相同角度發生時，可識別延伸穿過一組臂中之一個臂之一或多條對稱線。

此外，本發明者已發現藉由提供三個或更多個圍繞電洞傳輸核心之臂，能夠更有效地調整或「微調」化合物之電子傳輸特性。舉例而言，此可藉由調節該等臂中僅一者之電子傳輸部分及/或在不同臂中提供不同電子傳輸部分來達成。



另一優點係提供三個或更多個臂允許可促成化合物偶極矩之基團之更平衡分佈。藉此，(例如)藉由改變該等臂中僅一者或一些之組份或取代基可更容易地對偶極矩進行調節。較佳地，化合物之偶極矩在0至5德拜(debye)範圍內、較佳為0至4德拜、較佳為0至3.5德拜且最佳為0至3.25德拜。

在各實施例中，該等臂中之一者或多者(例如全部)之結構足夠龐大以幫助減少或阻止分子間相互作用。因此，本文所述化合物之設計可適宜地增強發光材料之顏色穩定性、尤其對於藍光發射應用而言且具體而言對於基於芴之發光材料而言。

如本文所述發光化合物可用於發光裝置之發射層中，或作為摻雜物用於此一裝置中之適宜層中。又一用途係作為電致發光發光二極體之主體材料。可(例如)藉助溶液製程將本文所定義化合物製作成LED裝置。

適宜地，化合物發射藍色、綠色、紅色或白色的光。

較佳地，化合物係藍色發光化合物。適宜地，化合物在400 nm至495 nm範圍內、較佳400 nm至480 nm之波長下發射光。適宜地，最大發射波長小於450 nm、較佳小於440 nm、較佳小於430 nm且最佳小於420 nm。尤佳之範圍係400 nm至420 nm、較佳係405 nm至415 nm。

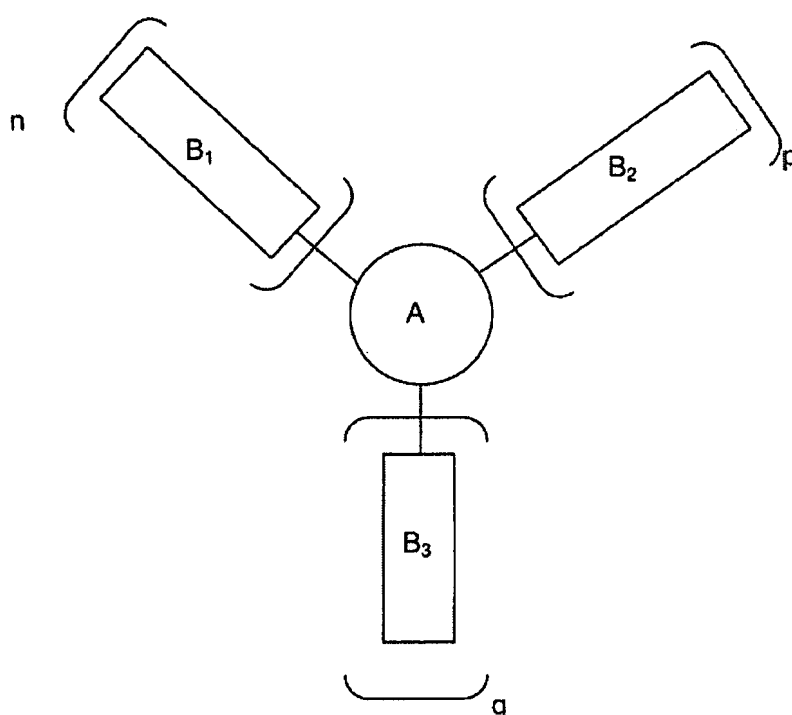
在其他實施例中，化合物係綠色發光化合物。

在其他實施例中，化合物係紅色發光化合物。

在其他實施例中，化合物係白色發光化合物。

可調節臂部分之發射部分以產生期望顏色輸出。提供三個或更多個臂之優點在於可提供更具撓性之發射部分。在其中在電子傳輸臂部分中之一些或全部中發射部分毗鄰缺電子部分之實施例中，由於發射部分接近缺電子部分可改良發射效率，故可尤其有效地控制輸出之調節。

適宜地，化合物具有式I之結構：



(I)

其中：

核心部分 \textcircled{A} 包含至少一個含有三級氮之部分，其視情況經取代；

臂部分 B_1 、 B_2 及 B_3 中之每一者獨立地包含芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基，且視情況經取代；

且

n、p及q中之每一者獨立地為1至50

且其中

該等臂部分中之至少三者係電子傳輸臂部分且獨立地包含發射部分及可視情況經取代之缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

根據式I，該化合物具有至少三個臂($n+p+q \geq 3$)。適宜地，該等臂部分係實質上對稱地圍繞該核心部分排列。

選自任一次出現的 B_1 、 B_2 及 B_3 之 B_1 中一者或多者、 B_2 中一者或多者及 B_3 中一者或多者之任一組合皆可提供所需缺電子基團。

適宜地，至少一個 B_1 、至少一個 B_2 及至少一個 B_3 提供所需缺電子基團。

適宜之發射部分已為熟習此項技術之讀者所知且實例將在本文中予以論述。

適宜地，該等臂部分中之至少一者(例如出現至少一次的 B_2)包含帶隙大於電子傳輸臂部分之該發射部分之帶隙的補充發射部分。

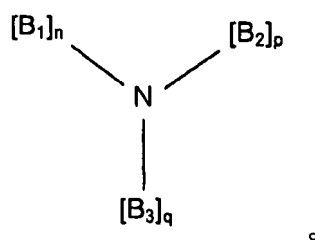
通常，三級氮部分選自氮、三芳基胺及聚(芳基胺基)。適宜地，核心部分包含一個、兩個、三個或更多個三級氮。

在各實施例中，三級氮部分適宜地具有式 $N(\text{Ar})_3$ 或 $(\text{Ar})_2\text{-N-(Ar)-N-(Ar)}_2$ ，其中每一Ar皆係如本文所述獨立地加以選擇。然而，三級氮之數量可能更多，例如3個或更多個、4個或更多個、5個或更多個、或10個或更多個三級

氮。通常，每一三級氮皆經三個芳基或伸芳基取代(其中之一者或多者可依次鍵結至又一氮)。

藉由提供具有一個或多個三級氮之核心部分(例如三芳基胺或聚(芳基胺基))，適宜地，可增加化合物之HOMO能級，尤其在包含該化合物之OLED裝置之作業電壓較低時可促進電洞注入及傳輸。

在含有三級氮之核心 (A) 係氮之情形下，該氮適宜地係直接連接至臂部分，例如如下所示：



適宜地，每一 B_1 皆獨立地包含 C_{5-100} 芳基、 C_{5-100} 芳基伸乙烯基或 C_{5-100} 芳基伸乙炔基，較佳 C_{5-80} 芳基、 C_{5-80} 芳基伸乙烯基或 C_{5-80} 芳基伸乙炔基，且更佳 C_{5-50} 芳基、 C_{5-50} 芳基伸乙烯基或 C_{5-50} 芳基伸乙炔基且視情況經取代。

適宜地，每一 B_2 皆獨立地包含 C_{5-100} 芳基、 C_{5-100} 芳基伸乙烯基或 C_{5-100} 芳基伸乙炔基，較佳 C_{5-80} 芳基、 C_{5-80} 芳基伸乙烯基或 C_{5-80} 芳基伸乙炔基，且更佳 C_{5-50} 芳基、 C_{5-50} 芳基伸乙烯基或 C_{5-50} 芳基伸乙炔基且視情況經取代。

適宜地，每一 B_3 皆獨立地包含 C_{5-100} 芳基、 C_{5-100} 芳基伸

乙烯基或 C₅₋₁₀₀ 芳基伸乙炔基，較佳 C₅₋₈₀ 芳基、C₅₋₈₀ 芳基伸乙烯基或 C₅₋₈₀ 芳基伸乙炔基，且更佳 C₅₋₅₀ 芳基、C₅₋₅₀ 芳基伸乙烯基或 C₅₋₅₀ 芳基伸乙炔基且視情況經取代。

適宜地，每一 B₁ 皆如下文所述獨立地為 (Ar₄)_d(Ar₅)_e。

適宜地，每一 B₂ 皆如下文所述獨立地為 (Ar₆)_f(Ar₇)_g。

適宜地，每一 B₃ 皆如下文所述獨立地為 (Ar₈)_h(Ar₉)_i。

較佳地 n、p 及 q 中之每一者獨立地為 1 至 20，更佳為 1 至 10，更佳為 1 至 5，更佳為 1 至 3 且最佳為 1 或 2。

適宜地，n+p+q ≤ 100、較佳 ≤ 50、且更佳 ≤ 10。

適宜地，該化合物含有 4 個或更多個、5 個或更多個、或 6 個或更多個臂部分。因此，在各實施例中，n、p 及 q 中之一者或多者係 2 或更多。

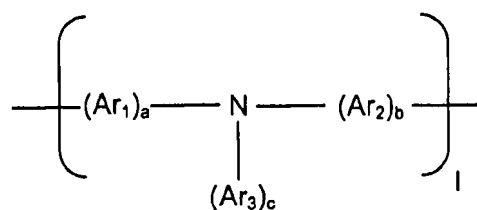
可藉由(例如)在連接至核心中三級氮之芳基上提供兩個或更多個臂使 n、p 及 q 中每一者之值皆 > 1。實例係其中至少一個連接至氮之芳基經兩個或更多個臂取代之三芳基胺核心。

另一選擇為或另外，可將連接至含有三級氮之核心(例如三芳基胺)之芳基中之一者或多者連接至又一含有三級氮之基團(例如三芳基胺或聚(芳基胺)基團)。

藉此，如上文所論述，可達成臂結構之支化。適宜芳基及支化之實例將在本文中予以闡述。

在各實施例中，核心部分  包含單個三級胺單元或多

個三級氮單元，例如如式 Ia 中所示者：



(Ia)

其中

Ar₁、Ar₂及Ar₃中每一者獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基、伸芳基伸乙炔基或胺基伸芳基，且視情況經取代；

a、b及c中之每一者獨立地為0至20；且

l獨立地為1至20。

因此，在一些實施例中，若l>1且b=0，則毗鄰三級氮可共享共用芳基，例如Ar₁。

適宜地，Ar₁、Ar₂及Ar₃中之每一者獨立地為C₅₋₁₀₀伸芳基、C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙烯基、C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙炔基或胺基C₅₋₁₀₀伸芳基，較佳為C₅₋₅₀伸芳基、C₅₋₅₀伸芳基伸乙烯基、C₅₋₅₀伸芳基伸乙炔基或胺基C₅₋₅₀伸芳基，更佳為C₅₋₃₀伸芳基、C₅₋₃₀伸芳基伸乙烯基、C₅₋₃₀伸芳基伸乙炔基或胺基C₅₋₃₀伸芳基，更佳為C₅₋₁₅伸芳基、C₅₋₁₅伸芳基伸乙烯基、C₅₋₁₅伸芳基伸乙炔基或胺基C₅₋₁₅伸芳基，且視情況經取代。

適宜地，Ar₁、Ar₂及Ar₃中每一者之伸芳基皆獨立地為碳伸芳基或雜伸芳基。較佳地，Ar₁、Ar₂及Ar₃中每一者之伸



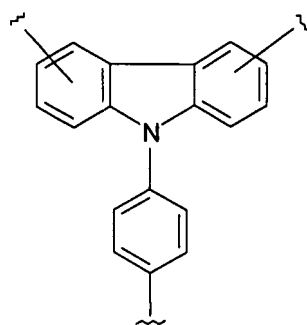
芳基皆為碳伸芳基。

適宜地， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之任兩者係相連的。即， Ar_1 及 Ar_2 、或 Ar_1 及 Ar_3 、或 Ar_2 及 Ar_3 中之任一者或多者較佳適宜地藉助單鍵或O、S、Si或視情況經取代之伸烷基(較佳 C_{1-3} 伸烷基)彼此相連。

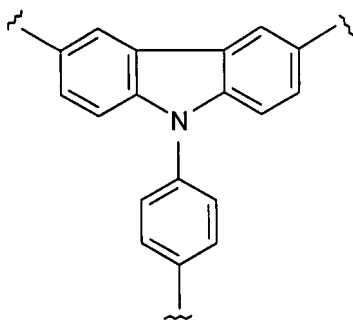
較佳地 Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為伸苯基、伸萸基、伸咪唑基、二芳基胺基、螺伸聯萸基、螺矽雜伸聯萸基、茛并伸咪唑基、茛并伸萸基或胺基伸芳基且視情況經取代。

較佳地 Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為伸苯基或伸萸基且視情況經取代。

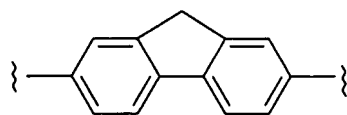
在各實施例中， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為經咪唑基取代之伸苯基且視情況進一步經取代，適宜地如下所示：



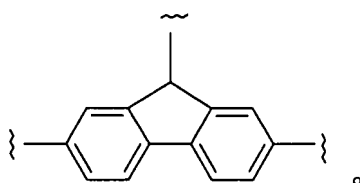
在各實施例中，咪唑基係在3-位及6-位中之一者或兩者處鍵結，適宜地如下所示：



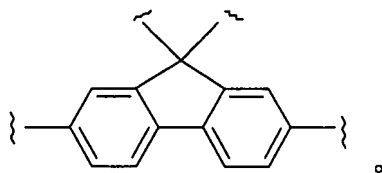
在各實施例中， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為伸萸基且視情況經取代，適宜地如下所示：



通常， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為經取代之伸萸基，較佳在9-位經取代，適宜地如下所示：

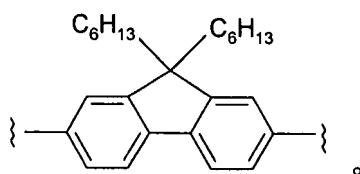


較佳地， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為經取代之伸萸基，較佳在9-位經二取代，適宜地如下所示：



尤佳之取代基係烷基，較佳係 C_{2-15} 烷基，更佳係 C_{2-10} 烷基，更佳係 C_{3-8} 烷基，更佳係 C_{5-7} 烷基且最佳係 C_6 烷基，且該烷基取代基視情況經取代。

在尤佳實施例中， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為

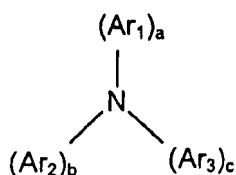


適宜地， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 相同。然而，在其他實施例中， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 不同。

較佳地， a 、 b 及 c 中之每一者獨立地為1至20，更佳為1至10，更佳為1至5，更佳為1至3且最佳為1或2。

在各實施例中， a 、 b 及 c 相同。在其他實施例中，並非所有 a 、 b 及 c 均相同。在一些實施例中，所有 a 、 b 及 c 均不同。

適宜地，核心部分 (A) 係式 Ib 之三芳基胺：



(Ib)

其中

Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地係如上文所定義；且

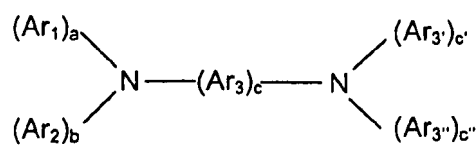
a 、 b 及 c 中之每一者獨立地係如上文所定義。

適宜地， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者皆如本文所述係直接地或間接地鍵結至臂部分。

在各實施例中， Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之一者或多者獨立地為胺基芳基且較佳地該胺基芳基具有結構 $-(Ar_1)-$

$N(Ar_2')(Ar_3')$ ，其中 Ar_1' 、 Ar_2' 及 Ar_3' 中之每一者獨立地係如上文分別針對 Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 所定義。適宜地， Ar_1' 、 Ar_2' 及 Ar_3' 中之一者或兩者、較佳地 Ar_2' 及 Ar_3' 中之一者或兩者係如本文所述獨立地鍵結至臂部分。

因此，在一個實施例中，核心部分 \textcircled{A} 係式 Ic 之包含兩個三級氮之聚(芳基胺)：



(Ic)

其中

Ar_3 獨立地係如上文所定義；

Ar_3' 及 Ar_3'' 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_3 所定義；

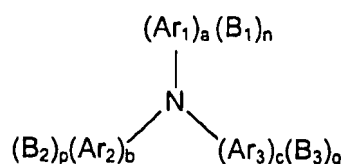
a 、 b 及 c 中之每一者獨立地係如上文所定義；且

c' 及 c'' 中之每一者獨立地係如上文針對 c 所定義；

在此一排列中，適宜地， Ar_3 、 Ar_3' 及 Ar_3'' 獨立地不為胺基芳基。

藉此， Ar_1 、 Ar_2 、 Ar_3' 及 Ar_3'' 中之任三者或更多者可直接地或間接地鍵結至臂部分。

較佳地，該化合物包含式 II 之結構：



(II)

其中：

Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地係如上文所定義；

B_1 、 B_2 及 B_3 中之每一者獨立地係如上文所定義；

a 、 b 及 c 中之每一者獨立地係如上文所定義；且

n 、 p 及 q 中之每一者獨立地係如上文所定義；

且其中：

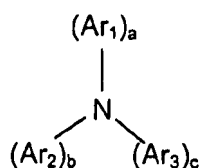
選自 $(\text{B}_1)_n$ 、 $(\text{B}_2)_p$ 及 $(\text{B}_3)_q$ 之至少三個 B_x 各自獨立地包含發射部分及可視情況經取代之缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

因此，該至少三個缺電子(即電子傳輸)部分可由任一次出現的 B_1 、 B_2 或 B_3 提供。換言之，該至少三個 B_x 中之任一者可為 B_1 、 B_2 及 B_3 中之任一者。

較佳地，該至少三個 B_x 中之至少一者包含發射部分。

適宜地，至少一個另外的 B_1 、 B_2 或 B_3 包含帶隙大於該發射部分之帶隙的補充發射部分。

因此，在該等化合物中，電洞傳輸功能係由以下部分提供：



如上文所述，其可包含多個氮中心(例如聚(芳基胺))，例

如符合式 Ia 或 Ic 者。

電子傳輸功能係由該至少三個包含缺電子部分之 B_x 提供。適宜之缺電子部分已為熟習此項技術之讀者所知且實例將在本文中予以陳述。可藉由使用固有地缺電子/拉電子之芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基及/或藉由將拉電子基團連接至芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基來達成電子缺失。

適宜地，每一 B_1 皆獨立地為 $(Ar_4)_d(Ar_5)_e$ ，其中每一 Ar_4 及每一 Ar_5 皆獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基且視情況經取代；且 d 及 e 中之每一者獨立地為 1 至 20。

較佳地， d 及 e 中之每一者獨立地為 1 至 10，更佳為 1 至 5，更佳為 1 至 3 且最佳為 1 或 2。在各實施例中， d 係 1 至 3 且 e 係 1。

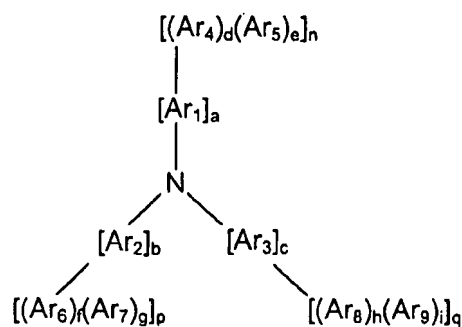
適宜地，每一 B_2 皆獨立地為 $(Ar_6)_f(Ar_7)_g$ ，其中每一 Ar_6 及每一 Ar_7 皆獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基且視情況經取代；且 f 及 g 中之每一者獨立地為 1 至 20。

較佳地， f 及 g 中之每一者獨立地為 1 至 10，更佳為 1 至 5，更佳為 1 至 3 且最佳為 1 或 2。在各實施例中， f 係 1 至 3 且 g 係 1。

適宜地，每一 B_3 皆獨立地為 $(Ar_8)_h(Ar_9)_i$ ，其中每一 Ar_8 及每一 Ar_9 皆獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基且視情況經取代；且 h 及 i 中之每一者獨立地為 1 至 20。

較佳地， h 及 i 中之每一者獨立地為 1 至 10，更佳為 1 至 5，更佳為 1 至 3 且最佳為 1 或 2。在各實施例中， h 係 1 至 3 且 i 係 1。

較佳地，化合物具有式 III 之結構：



(III)

其中

Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 係如上文所定義；且

a 、 b 、 c 、 n 、 p 及 q 中之每一者皆係如上文所定義；

且其中

Ar_4 、 Ar_5 、 Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 及 Ar_9 中之每一者獨立地係如上文所定義；

d 、 f 及 h 中之每一者獨立地係如上文所定義；且

e 、 g 及 i 中之每一者獨立地係如上文所定義；

且其中

選自 $[(Ar_4)_d(Ar_5)_e]_n$ 、 $[(Ar_6)_f(Ar_7)_g]_p$ 及 $[(Ar_8)_h(Ar_9)_i]_q$ 之 Ar_5 、 Ar_7 及 Ar_9 中之至少三者各自獨立地包含缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

因此，該至少三個缺電子(即電子傳輸)部分可由任一次出現的 Ar_5 、 Ar_7 或 Ar_9 提供。

適宜地， Ar_4 、 Ar_6 及 Ar_8 中之每一者獨立地為 C_{5-100} 伸芳基、 C_{5-100} 伸芳基伸乙烯基或 C_{5-100} 伸芳基伸乙炔基，較佳為 C_{5-50} 伸芳基、 C_{5-50} 伸芳基伸乙烯基或 C_{5-50} 伸芳基伸乙炔基，更佳為 C_{5-30} 伸芳基、 C_{5-30} 伸芳基伸乙烯基或 C_{5-30} 伸芳基伸乙炔基，且最佳為 C_{5-15} 伸芳基、 C_{5-15} 伸芳基伸乙烯基或 C_{5-15} 伸芳基伸乙炔基，且視情況經取代。

適宜地， Ar_4 、 Ar_6 及 Ar_8 中每一者之伸芳基皆獨立地為碳伸芳基或雜伸芳基。

在 Ar_4 、 Ar_6 及 Ar_8 中任一者或多者之伸芳基係雜伸芳基之情形下，該雜伸芳基可含有一個或多個選自 O、S、N、Si 及 P、較佳一個或多個選自 O、S 及 N、更佳一個或多個選自 O 及 N、且最佳為 N 的雜原子。

適宜地，若 Ar_4 、 Ar_6 及 Ar_8 中任一者或多者之伸芳基係雜伸芳基，則該雜伸芳基含有一個、兩個、三個或四個雜原子。若存在複數個雜原子，則該等雜原子可相同或不同。

較佳地， Ar_4 、 Ar_6 及 Ar_8 中每一者之伸芳基皆係碳伸芳基。

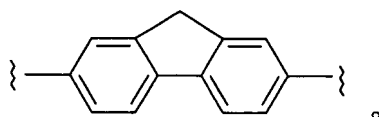
適宜地，各對 Ar 基團 Ar_4 與 Ar_5 、 Ar_6 與 Ar_7 、及 Ar_8 與 Ar_9



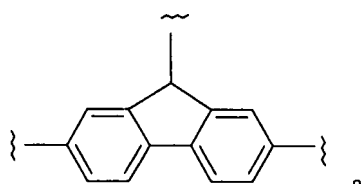
中之任一者或多者係藉助單鍵或O、S、Si或視情況經取代之伸烷基(較佳C₁₋₃伸烷基)彼此相連。

較佳地，Ar₄、Ar₆及Ar₈中之每一者獨立地為伸苯基、伸萸基、伸咪唑基、二芳基胺基、螺伸聯萸基、螺矽雜伸聯萸基、茛并伸咪唑基、茛并伸萸基或胺基芳基且視情況經取代。

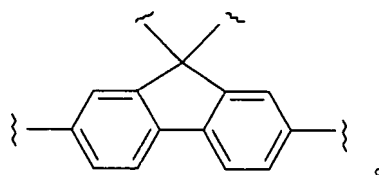
較佳地，Ar₄、Ar₆及Ar₈中之每一者獨立地為伸萸基且視情況經取代，適宜地如下所示：



通常，Ar₄、Ar₆及Ar₈中之每一者獨立地為經取代之伸萸基，較佳在9-位經取代，適宜地如下所示：

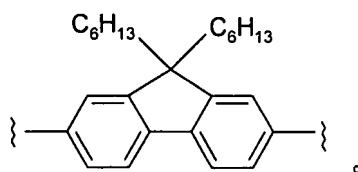


較佳地，Ar₄、Ar₆及Ar₈中之每一者獨立地為經取代之伸萸基，較佳在9-位經二取代，適宜地如下所示：



尤佳之取代基係烷基，較佳係C₂₋₁₅烷基，更佳係C₂₋₁₀烷基，更佳係C₃₋₈烷基，更佳係C₅₋₇烷基且最佳係C₆烷基，且該烷基取代基視情況經取代。

在尤佳實施例中，Ar₄、Ar₆及Ar₈中之每一者獨立地為



適宜地，Ar₄、Ar₆及Ar₈相同。然而，在其他實施例中，Ar₄、Ar₆及Ar₈不同。

適宜地，Ar₅、Ar₇及Ar₉中之每一者獨立地為C₅₋₁₀₀伸芳基、C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙烯基或C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙炔基，較佳為C₅₋₃₀伸芳基、C₅₋₃₀伸芳基伸乙烯基或C₅₋₃₀伸芳基伸乙炔基，且最佳為C₅₋₁₅伸芳基、C₅₋₁₅伸芳基伸乙烯基或C₅₋₁₅伸芳基伸乙炔基，且視情況經取代。

視需要，且(例如)根據式III，Ar₅、Ar₇及Ar₉中之每一者獨立地係缺電子的。舉例而言，Ar₅、Ar₇及Ar₉中之每一者獨立地為缺電子C₅₋₁₀₀伸芳基、C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙烯基或C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙炔基。

適宜地，電子缺失可藉由提供具有拉電子基團之伸芳基來達成。因此，伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基通常經至少一個拉電子基團取代。適宜之拉電子基團已為熟習此項技術之讀者所知。實例在本文中給出。

較佳地，每一拉電子基團皆獨立地選自：鹵基、氟基、硝基、羰基、亞硫醯基、磺醯基及全氟烷基。尤佳者係氟基。

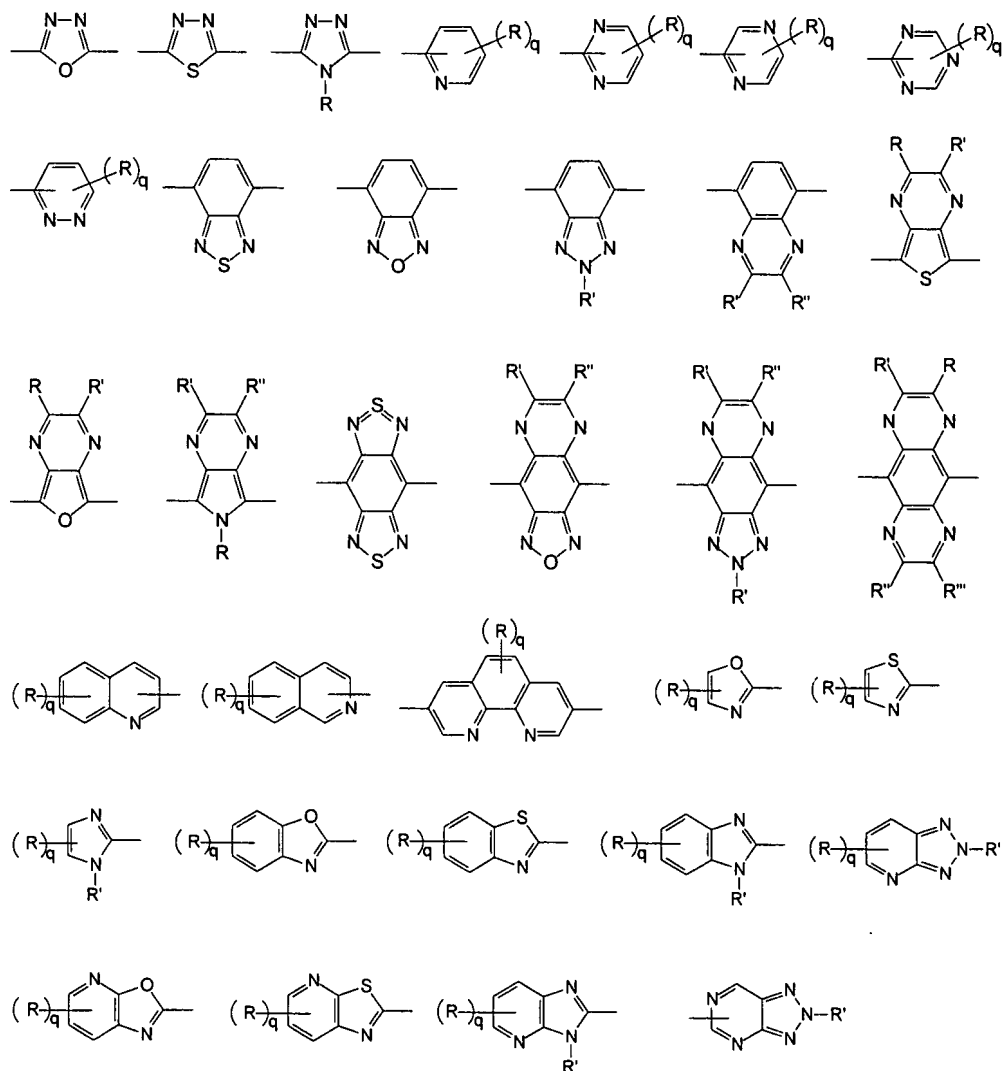
適宜地，Ar₅、Ar₇及Ar₉中每一者之伸芳基皆獨立地為碳

伸芳基或雜伸芳基。

在 Ar₅、Ar₇及 Ar₉中任一者或多者之伸芳基係雜伸芳基之情形下，該雜伸芳基可含有一個或多個選自 O、S、N、Si 及 P、較佳一個或多個選自 O、S及 N、更佳一個或多個選自 O及 N且最佳為 N 的雜原子。

適宜地，若 Ar₅、Ar₇及 Ar₉中任一者或多者之伸芳基係雜伸芳基，則該雜伸芳基含有一個、兩個、三個或四個雜原子。若存在複數個雜原子，則該等雜原子可相同或不同。

較佳地，Ar₅、Ar₇及 Ar₉中之每一者獨立地選自以下基團：



其中

R、R'、R''及R'''中之每一者獨立地為鹵基(尤其-F或-Cl)、-CN、-NO₂、-CO、亞硫醯基、磺醯基、C₁₋₂₀烷基、C₁₋₂₀全氟烷基、C₁₋₂₀烷氧基、C₅₋₅₀芳基、C₅₋₅₀伸芳基伸乙烯基、或C₅₋₅₀伸芳基伸乙炔基，且q係0至6之整數。

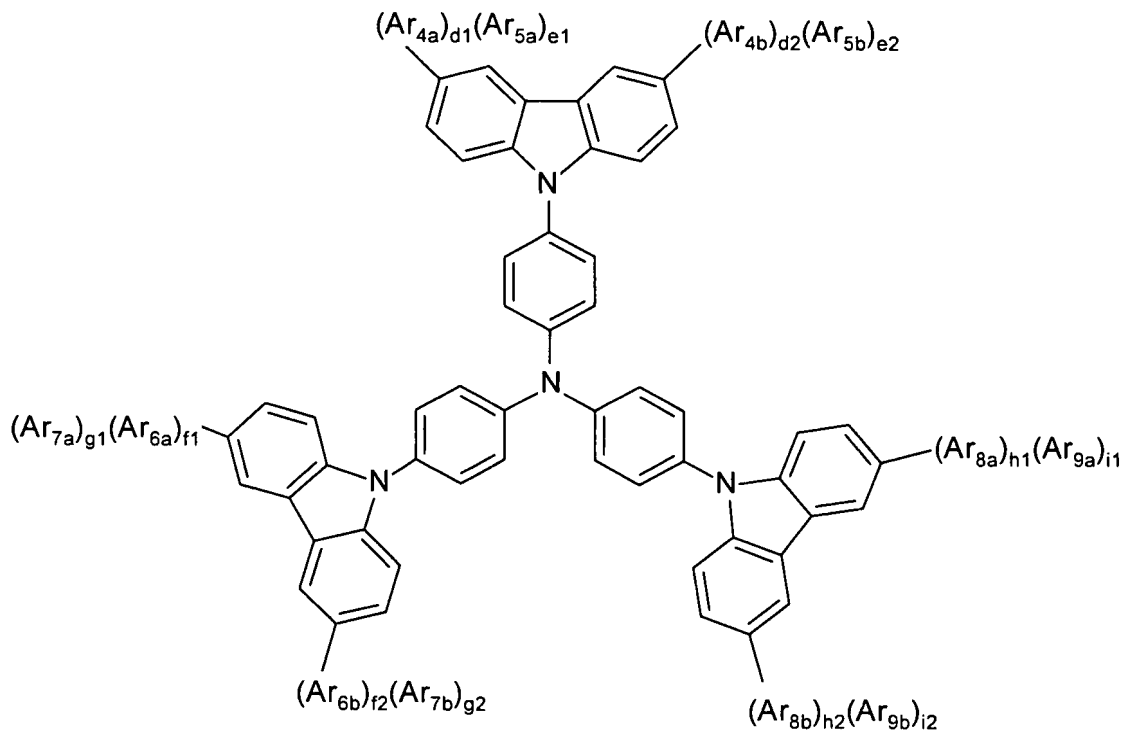
應瞭解，儘管上文某些芳基繪示為單價或二價，但端視芳基出現在如本文所述化合物中所處之背景，彼等基團中之任一者皆可為單價或二價。此外，某些化合物繪示成將基團連接至化合物之其餘部分之鍵如同在原子處或跨越一鍵進入芳基環之中心一般。應瞭解，該繪示意欲代表可在環上之可用位置藉助鍵將特定芳基連接至該化合物之其餘部分。

較佳地，Ar₅、Ar₇及Ar₉中每一者之伸芳基皆係碳伸芳基。

較佳地，Ar₅、Ar₇及Ar₉中之每一者獨立地為伸苯基且視情況經取代。較佳地，Ar₅、Ar₇及Ar₉中之每一者獨立地為經氟基取代之伸苯基。

較佳地，該化合物具有式(IV)之結構：





(IV)

其中

Ar_{4a} 及 Ar_{4b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_4 所定義；
 Ar_{5a} 及 Ar_{5b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_5 所定義；
 Ar_{6a} 及 Ar_{6b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_6 所定義；
 Ar_{7a} 及 Ar_{7b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_7 所定義；
 Ar_{8a} 及 Ar_{8b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_8 所定義；且
 Ar_{9a} 及 Ar_{9b} 中之每一者獨立地係如上文針對 Ar_9 所定義；

且其中

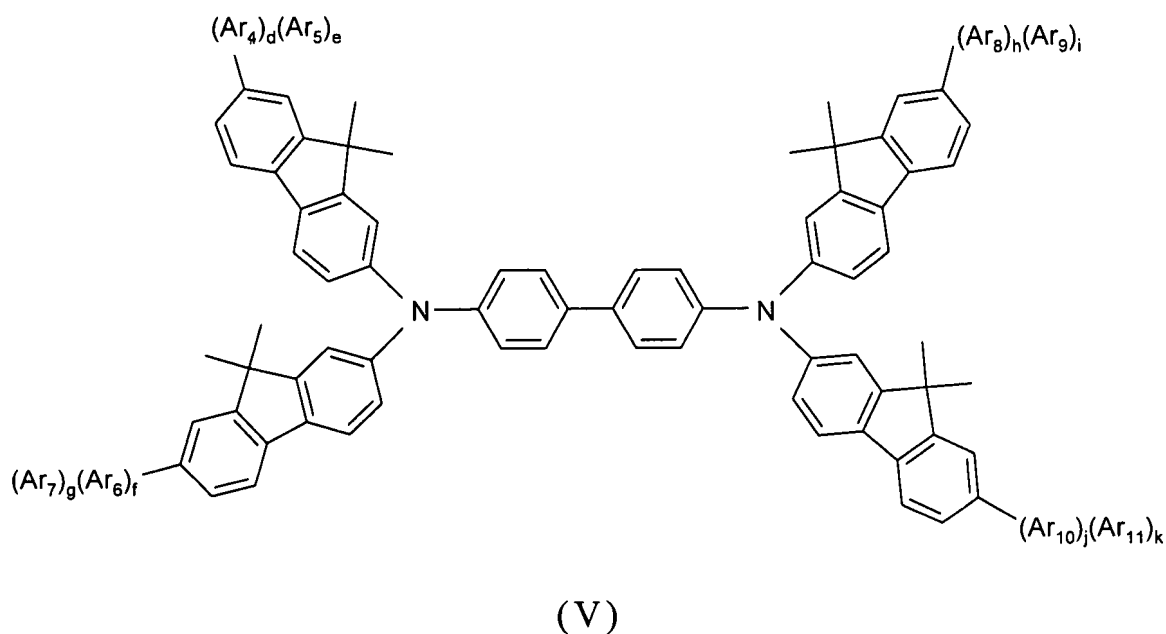
d_1 及 d_2 中之每一者獨立地係如上文針對 d 所定義；
 e_1 及 e_2 中之每一者獨立地係如上文針對 e 所定義；
 f_1 及 f_2 中之每一者獨立地係如上文針對 f 所定義；
 g_1 及 g_2 中之每一者獨立地係如上文針對 g 所定義；
 h_1 及 h_2 中之每一者獨立地係如上文針對 h 所定義；且
 i_1 及 i_2 中之每一者獨立地係如上文針對 i 所定義；

且其中

選自 $(Ar_{4a})_{d1}(Ar_{5a})_{e1}$ 、 $(Ar_{4b})_{d2}(Ar_{5b})_{e2}$ 、 $(Ar_{6a})_{f1}(Ar_{7a})_{g1}$ 、 $(Ar_{6b})_{f2}(Ar_{7b})_{g2}$ 、 $(Ar_{8a})_{h1}(Ar_{9a})_{i1}$ 及 $(Ar_{8b})_{h2}(Ar_{9b})_{i2}$ 之 Ar_{5a} 、 Ar_{5b} 、 Ar_{7a} 、 Ar_{7b} 、 Ar_{9a} 及 Ar_{9b} 中之至少三者各自獨立地為缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基且視情況經取代。

因此，該至少三個缺電子(即電子傳輸)部分中之每一者皆可由任一次出現的 Ar_{5a} 、 Ar_{5b} 、 Ar_{7a} 、 Ar_{7b} 、 Ar_{9a} 及 Ar_{9b} 提供。

較佳地，化合物具有式(V)之結構：



其中

Ar_4 、 Ar_5 、 Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 及 Ar_9 中之每一者獨立地係如上文所定義；

Ar_{10} 獨立地係如上文針對 Ar_4 所定義；

Ar_{11} 獨立地係如上文針對 Ar_5 所定義；

d 、 e 、 f 、 g 、 h 及 i 中之每一者獨立地係如上文所定義；

j 獨立地係如上文針對 d 所定義；且

k 獨立地係如上文針對 e 所定義；

且其中

選自 $(Ar_4)_d(Ar_5)_e$ 、 $(Ar_6)_f(Ar_7)_g$ 、 $(Ar_8)_h(Ar_9)_i$ 及 $(Ar_{10})_j(Ar_{11})_k$ 之 Ar_5 、 Ar_7 、 Ar_9 及 Ar_{11} 中之至少三者各自獨立地為缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基且視情況經取代。

因此，該至少三個缺電子(即電子傳輸)部分中之每一者皆可由任一次出現的 Ar_5 、 Ar_7 、 Ar_9 及 Ar_{11} 提供。

如圖1中所示意性顯示，如本文所述之化合物10可為離散化合物或為寡聚物或聚合物(例如樹形聚合物)中之重複單元。化合物10包括可提供電洞傳輸功能之含有三級氮之核心部分12。在一些實施例中，此係三芳基胺，在其他實施例中存在兩個、三個或更多個氮中心。

化合物10具有三個臂14、16及18。臂可能多於三個，例如4個、5個或6個或更多個。

該等臂中之每一者皆具有電子傳輸部分，在臂14上其圖解說明為20。在臂14之情形下，電子傳輸(即缺電子部分)基團係 $(Ar_5)_e$ ，其中 Ar_5 係缺電子的且視情況經一個或多個拉電子基團取代(該等拉電子基團可提供所需電子缺失)。

臂14亦包括發射部分22，在此實例中，其包含基

團 $-(Ar_4)_d$ 。缺電子部分20接近發射部分適宜地幫助裝置效率。

臂16及18亦包括各自之電子傳輸部分及發射部分，其分別圖解說明為特徵24及26。

在各實施例中，(例如)當n、p及q中之任一者大於1時，臂14、16及18中之每一者皆可具支鏈。

適宜地， Ar_1 、 Ar_{1a} 、 Ar_{1b} 、 Ar_2 、 Ar_{2a} 、 Ar_{2b} 、 Ar_3 、 Ar_{3a} 、 Ar_{3b} 、 $Ar_{3'}$ 、 $Ar_{3''}$ 、 Ar_4 、 Ar_{4a} 、 Ar_{4b} 、 Ar_5 、 Ar_{5a} 、 Ar_{5b} 、 Ar_6 、 Ar_{6a} 、 Ar_{6b} 、 Ar_7 、 Ar_{7a} 、 Ar_{7b} 、 Ar_8 、 Ar_{8a} 、 Ar_{8b} 、 Ar_9 、 Ar_{9a} 、 Ar_{9b} 、 Ar_{10} 及 Ar_{11} 中之任一者或多者獨立地經取代。適宜之取代基包括具支鏈或不具支鏈烷基、具支鏈或不具支鏈雜烷基、具支鏈或不具支鏈烯基、具支鏈或不具支鏈雜烯基、具支鏈或不具支鏈炔基、具支鏈或不具支鏈雜炔基、具支鏈或不具支鏈烷氧基、芳基及雜芳基中之一者或多者。

適宜地，若該等Ar基團經取代，則 Ar_1 、 Ar_{1a} 、 Ar_{1b} 、 Ar_2 、 Ar_{2a} 、 Ar_{2b} 、 Ar_3 、 Ar_{3a} 、 Ar_{3b} 、 $Ar_{3'}$ 、 $Ar_{3''}$ 、 Ar_4 、 Ar_{4a} 、 Ar_{4b} 、 Ar_5 、 Ar_{5a} 、 Ar_{5b} 、 Ar_6 、 Ar_{6a} 、 Ar_{6b} 、 Ar_7 、 Ar_{7a} 、 Ar_{7b} 、 Ar_8 、 Ar_{8a} 、 Ar_{8b} 、 Ar_9 、 Ar_{9a} 、 Ar_{9b} 、 Ar_{10} 及 Ar_{11} 中之每一者獨立地經 C_{1-20} 烷基、 C_{1-20} 烷氧基及 C_{5-50} 芳基中之一者或多者取代，該等取代基視情況進一步經取代。

若 a 、 b 、 c 、 d 、 d_1 、 d_2 、 e 、 e_1 、 e_2 、 f 、 f_1 、 f_2 、 g 、 g_1 、 g_2 、 h 、 h_1 、 h_2 、 i 、 i_1 、 i_2 、 j 、 k 、 l 、 n 、 p 或 q 中之任一者大於 1，則相關 Ar 基團 (例如對於 a 而言為 Ar_1) 係針對每次出現的彼 Ar 基團獨立地加以選擇。舉例而言，若 a 係 3，則 3 個 Ar_1 基團中之每一者獨立地選自其餘 2 個 Ar_1 基團。

同樣，舉例而言，若 n 大於 1，則括號部分內之相關基團 (即 $[(Ar_4)_d(Ar_5)_e]$) 係針對每次出現的 n 獨立地加以選擇。

因此，舉例而言，對於每次出現的 e 及 / 或 n ，存在不同的電子傳輸部分係可能的。

適宜地，如本文所述化合物係寡聚物或聚合物。較佳地，該化合物係樹形聚合物或樹枝狀聚合物。

較佳地，該化合物 (其可為 (例如) 樹枝狀聚合物) 之分子量 M_w 在 500 Da 至 1,000,000 Da 範圍內，更佳為 500 Da 至 300,000 Da。

本發明化合物之實施例可發光，適宜地可電致發光，且因此可用於發光裝置 (例如有機電致發光裝置) 中。

在又一態樣中，本發明提供包含如本文所述化合物之發光裝置。

適宜地，有機電致發光裝置係有機發光二極體 (OLED) 或包含有機發光二極體 (OLED)。即，本文所述化合物可用於有機發光二極體 (OLED) 中。

因此，在另一態樣中，本發明提供包含如本文所述化合物之有機電致發光裝置。

在相關態樣中，本發明提供包含如本文所述化合物之有機發光二極體(OLED)。

適宜地，如本文所述化合物可用作有機電致發光裝置之發射層。

因此，在另一態樣中，本發明提供包含發射層之有機電致發光裝置，其中該發射層包含如本文所述化合物。

通常，在該等有機電致發光裝置中本發明化合物係存於有機層中。該等實施例可用於形成發射層、電荷注入層、電荷傳輸層或電洞阻擋層中之一者或多者。通常，該層具有薄膜形式。

因此，在另一態樣中，提供包含如本文所述化合物之薄膜。

薄膜(例如形成發射層之薄膜)通常係含有如本文所述化合物之薄層，該層可形成為以下量級：約0.1 nm至約1000 nm厚，較佳為約1 nm至約500 nm厚，更佳為約5 nm至約250 nm厚，且最佳為約5 nm至約100 nm厚。

薄膜可含有其他組份。舉例而言，薄膜可包含主體材料，例如導電有機化學品及如本文所述化合物。主體材料可為(例如)聚(9-乙基基咪唑)(PVK)、4,4'-N,N'-二咪唑-聯苯(CBP)、4,4',4''-三(N-咪唑)三苯基胺(TCTA)、N,N'-二苯基-N,N'-雙(3-甲基苯基)(1,1'-聯苯)-4,4'-二胺(TPD)、N,N'-雙(1-萘基)-N,N'-二苯基-1,1''-聯苯-4,4'-二胺(NPB)、



4,4',4''-參(N,N-二苯基-胺基)三苯基胺(TDATA)、1,3,5-參(二苯基胺基)苯(TDAB)、1,3,5-參(4-(二-2-吡啶基胺基)苯基)苯(TDAPB)、TTBND、PPD、PTDATA、BFA-1T、p-dmDPS、p-DPA-TDAB、MTBDAB、螺-mTTB、DBC、聚(1,4-伸苯基伸乙烯基)、聚萘、聚(苯乙烯磺酸)、聚(3,4-伸乙基二氧基噻吩)、聚乙炔、聚吡咯、聚苯胺、3-苯基-4-(1'-萘基)-5-苯基-1,2,4-三唑(TAZ)、2-(4-聯苯)-5-(4-第三丁基-苯基)-1,3,4-噁二唑(PBD)、1,3,4-噁二唑、2,2'-(1,3-伸苯基)雙[5-[4-(1,1-二甲基乙基)苯基]](OXD-7)或聚[2-(6-氰基-6-甲基)庚基氧基-1,4-伸苯基(CNPP)、AlOq、Alq(CIq)₂、Al(Saph-q)、Al(ODZ)₃、Ph₂Bq、Zn(BIZ)₂、Bepp₂、Bebq₂、Zn(ODZ)₂、螺-PBD及BMB-3T。

主體材料與如本文所述化合物之比率可為約100:0.01至約100:30。

另一選擇為，該薄膜可包含如本文所述化合物作為主體材料並可進一步包含有機染料或磷光發射體，舉例而言，染料(例如)10-(2-苯并噻唑基)-1,1,7,7-四甲基-2,3,6,7-四氫-1H,5H,11H-[1]苯并-吡喃并[6,7,8-ij]喹啉-11-酮、3-(2-苯并噻唑基)-7-(二乙基胺基)-2H-1-苯并吡喃-2-酮、4-(二氰基亞甲基)-2-第三丁基-6-(1,1,7,7-四甲基久洛尼定基(julolidyl)-9-烯基)-4H-吡喃(DCJTb)、紅螢烯、4-(二氰基亞甲基)-2-第三丁基-6-(對-二苯基胺基苯乙烯基)-4H-吡喃(DCTP)、3-(二氰基亞甲基)-5,5-二甲基-1-[(4-二甲基胺基)苯乙烯基]環己烯(DCDDC)、6-甲基-3-[3-(1,1,6,6-四甲基-

10-側氧基-2,3,5,6-四氫-1H,4H,10H-11-氧雜-3a-氮雜苯并[de]-蒽-9-基)丙烯醯基]哌喃-2,4-二酮(AAAP)、6,13-二苯基稠五苯(DPP)及3-(N-苯基-N-對甲苯基胺基)-9-(N-對-苯乙基苯基-N-對甲苯基胺基)芘[(PPA)(PSA)Pe-1]、經1,1'-二氧基取代之雙-苯乙基萘衍生物(BSN)，或磷光發射體，例如PtOEP、Ir(ppy)₃或其衍生物。

如本文所述化合物與染料或磷光發射體之比率為約100:0.01至約1:1。

薄膜可在適宜之基板上形成，該基板可為任一固體基板，包括石英、玻璃、雲母、塑膠基板(例如聚對苯二甲酸乙二酯或聚碳酸酯)、紙、金屬或矽。薄膜亦可層疊於另一層上(當形成多層裝置時)，或可層疊於電極上。

為形成薄膜，可將如本文所述化合物及任何額外膜組份溶於適宜有機溶劑中。適宜之溶劑包括氯仿、甲苯、二甲苯、苯甲酸乙酯、1,1,2,2-四氯乙烷、THF、二氯苯、均三甲苯及上述溶劑之混合物。

可使用標準沈積或塗佈方法(包括溶液塗佈)在適宜表面上形成薄膜。溶液塗佈包括旋塗、澆注、微凹版塗佈、凹版塗佈、棒塗、輥塗、線棒塗佈、浸塗、噴塗、絲網印刷、柔版印刷、平版印刷及噴墨印刷。

如本文所述化合物及含有該等化合物之薄膜可用於構造電致發光裝置(包括單層及多層裝置)。如本文所述化合物及含有該等化合物之薄膜可形成有機發光二極體中之發射層、有機薄膜電晶體中之作用層或有機光電伏打電池中之



作用層。該等裝置及層以及其構造已為業內所知。

在又一態樣中，提供一種包含陽極、陰極及如本文所述薄膜之裝置，該薄膜係佈置於該陽極與該陰極之間。

在又一態樣中，提供裝置，其包含：陽極；佈置於該陽極上之發射層，該發射層包含如本文所述化合物或薄膜；及佈置於該發射層上之陰極。

在另一態樣中，提供裝置，其包含：陽極；佈置於該陽極上之電洞傳輸層；佈置於該電洞傳輸層上之發射層；佈置於該發射層上之電子傳輸層；及佈置於該電子傳輸層上之陰極；其中該電洞傳輸層、該發射層及該電子傳輸層中之至少一者包含如本文所述化合物或薄膜。

在再一態樣中，提供裝置，其包含：陽極；佈置於該陽極上之電洞注入層；佈置於該電洞注入層上之電洞傳輸層；佈置於該電洞傳輸層上之發射層；佈置於該發射層上之電子傳輸層；及佈置於該電子傳輸層上之電洞阻擋層；佈置於該發射層上之電子注入層；佈置於該電子注入層上之陰極；其中該電洞傳輸層、該發射層或該電子傳輸層中之至少一者包含如本文所述化合物或薄膜。

在各實施例中，本文所述化合物可用作光電伏打電池之作用層。

在又一態樣中，本發明提供包含作用層之光電伏打電池，其中該作用層包含如本文所述化合物或薄膜。

在各實施例中，本文所述化合物可用作化學感測器或生物感測器之感測層。

在又一態樣中，本發明提供包含感測層之化學或生物感測器，其中該感測層包含如本文所述化合物或薄膜。

適宜地，本文所提及之裝置係顯示器裝置，例如顯示器面板。

因此，本發明之又一態樣提供包含如本文所述化合物或薄膜之顯示器裝置。

在又一態樣中，本發明提供製備如本文所述化合物之方法。

在又一態樣中，本發明提供製備如本文所述裝置(例如 OLED 或顯示器裝置)之方法。

在又一態樣中，本發明提供如本文所述化合物在如本文所述裝置(例如 OLED 或顯示器裝置)中之用途。

定義

本文所用術語「三芳基胺」係指三級胺基團 NR_3 ，其中每一 R 皆獨立地為芳基或伸芳基、或以共軛方式連接至 N 之芳基或伸芳基，舉例而言，每一 R 可獨立地為芳基、芳基伸烯基或芳基伸炔基。共軛連接體基團之較佳實例係伸乙烯基及伸炔基：使得 R 為芳基/伸芳基伸乙烯基或芳基/伸芳基伸乙炔基。在三芳基胺位於如本文所述化合物之核心部分中之背景下，胺取代基 R 中之至少一者係二齒的(例如伸芳基)以允許連接至臂部分。因此，上文對芳基之論述適用於相應之伸芳基。

本文所用術語「芳基」係指自芳香族化合物藉由去除一個氫原子所得到之單價芳香族基團。芳香族化合物係具有



$4n+2$ 個 π 電子之環狀化合物，其中 n 係等於或大於0之整數。在各實施例中，芳基可具有5個至100個環原子，較佳5個至80個、更佳5個至50個、更佳5個至30個且最佳5個至20個環原子。處於取代基背景下之芳基之實例將在下文中予以陳述。

本文所用術語「伸芳基」係指自芳香族化合物藉由去除兩個氫原子所得到之二價芳香族基團。芳香族化合物係具有 $4n+2$ 個 π 電子之環狀化合物，其中 n 係等於或大於0之整數。在各實施例中，伸芳基可具有5個至100個環原子，較佳5個至80個、更佳5個至50個、更佳5個至30個且最佳5個至20個環原子。處於取代基背景下之伸芳基之實例將在下文中予以陳述。

本文所用術語「雜芳基」係指其中一個或多個骨架碳原子已由雜原子(例如N、O、S、Si或P中之一者或多者)代替之芳基。

本文所用術語「雜伸芳基」係指其中一個或多個骨架碳原子已由雜原子(例如N、O、S、Si或P中之一者或多者)代替之伸芳基。

本文所用符號「Ar」通常係指芳基、伸芳基、雜芳基、雜伸芳基、芳基及毗鄰伸乙烯基(「芳基伸乙烯基」)、伸芳基及毗鄰伸乙烯基(「伸芳基伸乙烯基」)、雜芳基及毗鄰伸乙烯基(「雜芳基伸乙烯基」)、雜伸芳基及毗鄰伸乙烯基(「雜伸芳基伸乙烯基」)、芳基及毗鄰伸乙炔基(「芳基伸乙炔基」)、伸芳基及毗鄰伸乙炔基(「伸芳基伸乙炔

基」)、雜芳基及毗鄰伸乙炔基(「雜芳基伸乙炔基」)、或雜伸芳基及毗鄰伸乙炔基(「雜伸芳基伸乙炔基」)、或芳基或伸芳基及毗鄰氮或胺基團(「胺基芳基」或「胺基伸芳基」)。如上文所說明，術語「芳基」包括雜芳基，而為完整起見雜芳基已在上文列表中列舉出。其同樣適用於相應之雜伸芳基、雜伸芳基伸乙烯基及雜伸芳基伸乙炔基。

應瞭解，若特定Ar基團闡述為包括伸芳基或雜伸芳基，但若此一伸芳基或雜伸芳基出現在分子末端且為單價，則該特定基團將為芳基或雜芳基。同樣，應瞭解，若特定Ar基團闡述為包括芳基或雜芳基，但若此一芳基或雜芳基出現在分子內且為二價，則該特定基團將為伸芳基或雜伸芳基。

本文所用術語「伸乙烯基」係指由式 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 代表之二價基團。

本文所用術語「伸乙炔基」係指由式 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 代表之二價基團。

本文所用術語「胺基芳基」及「胺基伸芳基」通常係指連接至芳基或伸芳基之胺基團。例如， $-\text{Ar}-\text{N}(\text{R})_2$ 或 $-\text{Ar}-\text{N}(\text{R})-\text{Ar}-$ ，其中R係胺取代基。

本文所用術語「聚(芳基胺)」係指至少兩個毗鄰之芳基胺基團。適宜地，該等芳基中之一者或多者係共享於兩個胺氮之間。例如， $-\text{Ar}-(\text{Ar})\text{N}-\text{Ar}-\text{N}(\text{Ar})-\text{Ar}-$ 。若適宜，在其中出現聚(芳基胺)之背景下，其將適宜地為單齒或二齒。



本文所用術語「烷基」係指具有1個至20個碳原子之具支鏈或不具支鏈單價烴基團。同樣，本文所用「伸烷基」基團係指具有1個至20個碳原子之具支鏈或不具支鏈二價烴基團。應理解，烯基及伸烯基係含有一個或多個雙鍵之單價及二價烴基團之相應術語且炔基及伸炔基係含有一個或多個三鍵之單價及二價烴基團之相應術語。

本文所用術語「碳」、「碳基」、「烴」及「烴基」係指僅具有碳及氫原子之化合物及/或基團(但下文參見「碳環」)。

本文所用術語「雜」係指具有至少一個雜原子之化合物及/或基團，例如，諸如硼、矽、氮、磷、氧、硫及硒(更通常為氮、氧及硫)等多價雜原子(其亦適宜作為環雜原子)及諸如氟、氯、溴及碘等單價雜原子。

本文所用術語「飽和」係指不具有任何碳-碳雙鍵或碳-碳三鍵之化合物及/或基團。

本文所用術語「不飽和」係指具有至少一個碳-碳雙鍵或碳-碳三鍵之化合物及/或基團。化合物及/或基團可部分不飽和或完全不飽和。

本文所用術語「單齒取代基」係指具有一個共價連接點之取代基。

本文所用術語「單價單齒取代基」係指具有一個共價連接點且經由單鍵連接之取代基。該等取代基之實例包括鹵基、羥基及烷基。

本文所用術語「二齒取代基」係指具有兩個共價連接點

且在兩個其他部分之間充當連接基團之取代基。該等取代基之實例包括伸烷基及伸芳基。

本文所用術語「缺電子」係指價電子缺乏而使得 π 系統(例如芳基)對其所連接之基團適宜地展示拉電子作用之 π 系統。即，其具有將電子自其所連接之基團拉離之傾向。

缺電子芳基之實例包括吡啶基、噻唑基、噁二唑基及三唑基及其相應之伸芳基結構。

拉電子芳基可自相鄰芳基拉電子之能力往往使拉電子芳基比不拉電子之相鄰芳基更加電子緻密(類似於Si半導體中所用之n型材料)，且因此傳輸電子能力更強。通常，拉電子基團係可產生毗鄰骨架之正或 δ -正區域以將電子從骨架拉向取代基的基團。

較佳地，缺電子 π 系統具有一個或多個與其連接之拉電子取代基。實際上，該基團之電子缺失可能係因存在拉電子取代基而引起。因此，在Ar₆之情形下，芳基或伸芳基 π 系統(例如)因所連接之拉電子基團而係缺電子的。

拉電子基團之實例包括-CN、-COOH、鹵基(尤其-F及-Cl)、-NO₂、-CO、全氟烷基、銨基、亞硫醯基、磺醯基、經由氧連接之醯胺基、吡啶鎗、磷、吡啶基、噻唑基、噁二唑基及三唑基。

官能基團相對於氫可方便地分為「拉電子」(- δ)或「供電子」(+ δ)基團。供電子基團之實例包括(但不限於)(按強度增加之大致順序)-O⁻、-COO⁻、-CR₃、-CHR₂、-CH₂R、-CH₃及-D。拉電子基團之實例包括(但不限於)(按強度減小

之大致順序)-NR₃⁺、-SR₂⁺、-NH₃⁺、-NO₂、-SO₂R、-CN、-SO₂Ar、-COOH、-F、-Cl、-Br、-I、-OAr、-COOR、-OR、-COR、-SH、-SR、-OH、-Ar及-CH=CR₂ (其中 Ar 表示芳基)。參見(例如)Ceppi 等人, 1973, **Tetrahedron Letters**, 第3627頁。

取代基

本文所用片語「視情況經取代」係指可未經取代或可經取代之母體基團。

除非另有說明, 否則本文所用術語「經取代」係指具有一個或多個取代基之母體基團。術語「取代基」在本文中係以習用含義使用且係指以共價方式連接至或(若適當)稠合至母體基團之化學部分。多種取代基已為業內所熟知, 且其形成及引入各種母體基團中之方法亦已為業內所熟知。

取代基之實例將在下文中予以更詳細闡述。

烷基: 如上文所說明, 本文所用術語「烷基」係指藉由自具有1個至20個碳原子(除非另有說明)之烴化合物的碳原子去除一個氫原子而獲得的單價部分, 其可為脂肪族或脂環族, 且其可為飽和或不飽和(例如, 部分不飽和、完全不飽和)。因此, 術語「烷基」包括下文所論述之子類烯基、炔基、環烷基、環烯基、環炔基等。

在烷基之背景下, 下標(例如, C₁₋₄、C₁₋₇、C₁₋₂₀、C₂₋₇、C₃₋₇等)表示碳原子之數量或碳原子之數量範圍。舉例而言, 本文所用術語「C₁₋₄烷基」係指具有1個至4個碳原子

之烷基。烷基之群之實例包括 C_{1-4} 烷基（「低碳數烷基」）、 C_{1-7} 烷基及 C_{1-20} 烷基。注意：第一下標可隨其他限制條件有所變化；舉例而言，對於不飽和烷基而言，第一下標必須至少為 2；對於環狀及具支鏈烷基而言，第一下標必須至少為 3；等。

（未經取代）飽和烷基之實例包括（但不限於）甲基（ C_1 ）、乙基（ C_2 ）、丙基（ C_3 ）、丁基（ C_4 ）、戊基（ C_5 ）、己基（ C_6 ）、庚基（ C_7 ）、辛基（ C_8 ）、壬基（ C_9 ）、癸基（ C_{10} ）、十一烷基（ C_{11} ）、十二烷基（ C_{12} ）、十三烷基（ C_{13} ）、十四烷基（ C_{14} ）、十五烷基（ C_{15} ）、十六烷基（ C_{16} ）、十八烷基（ C_{18} ）及二十烷基（ C_{20} ）。

（未經取代）飽和直鏈烷基之實例包括（但不限於）甲基（ C_1 ）、乙基（ C_2 ）、正丙基（ C_3 ）、正丁基（ C_4 ）、正戊基（n-pentyl, n-amyl）（ C_5 ）、正己基（ C_6 ）、及正庚基（ C_7 ）、正辛基（ C_8 ）、正癸基（ C_{10} ）、正十二烷基（ C_{12} ）、正十四烷基（ C_{14} ）、正十六烷基（ C_{16} ）、正十八烷基（ C_{18} ）、及正二十烷基（ C_{20} ）。

（未經取代）飽和具支鏈烷基之實例包括異丙基（ C_3 ）、異丁基（ C_4 ）、第二丁基（ C_4 ）、第三丁基（ C_4 ）、3-戊基、異戊基（ C_5 ）、3-甲基丁基、及新戊基（ C_5 ）、3,3-二甲基丁基、2-乙基丁基、4-甲基戊基、2-己基、2-庚基、2-辛基、2-乙基己基、3,7-二甲基辛基、2-丁基辛基、2-己基癸基、2-辛基十二烷基。

烯基：如上文所說明，本文所用術語「烯基」係指具有一個或多個碳-碳雙鍵之烷基。烯基之群之實例包括 C_{2-4} 烯基、 C_{2-7} 烯基、 C_{2-20} 烯基。

(未經取代)不飽和烯基之實例包括(但不限於)乙烯基(ethenyl, vinyl)($-\text{CH}=\text{CH}_2$)、1-丙烯基($-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$)、2-丙烯基(烯丙基, $-\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$)、異丙烯基(1-甲基乙烯基, $-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}_2$)、丁烯基(C_4)、戊烯基(C_5)及己烯基(C_6)。

炔基：如上文所說明，本文所用術語「炔基」係指具有一個或多個碳-碳三鍵之烷基。炔基之群之實例包括 C_{2-4} 炔基、 C_{2-7} 炔基、 C_{2-20} 炔基。

(未經取代)不飽和炔基之實例包括(但不限於)乙炔基(ethynyl, ethynyl)($-\text{C}\equiv\text{CH}$)及2-丙炔基(炔丙基, $-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{CH}$)。

環烷基：本文所用術語「環烷基」係指亦為環基之烷基；即，藉由自碳環化合物之碳環之脂環族環原子去除一個氫原子而獲得的單價部分，該碳環可為飽和或不飽和(例如，部分不飽和、完全不飽和)，該部分具有3個至20個碳原子(除非另有說明)，包括3個至20個環原子。因此，術語「環烷基」包括子類環烯基及環炔基。較佳地，每一環皆具有3個至7個環原子。環烷基之群之實例包括 C_{3-20} 環烷基、 C_{3-15} 環烷基、 C_{3-10} 環烷基、 C_{3-7} 環烷基。

環烷基之實例包括(但不限於)彼等衍生自下列者：

飽和單環烴化合物：

環丙烷(C_3)、環丁烷(C_4)、環戊烷(C_5)、環己烷(C_6)、環庚烷(C_7)、甲基環丙烷(C_4)、二甲基環丙烷(C_5)、甲基環丁烷(C_5)、二甲基環丁烷(C_6)、甲基環戊烷(C_6)、二甲基環戊烷(C_7)、甲基環己烷(C_7)、二甲基環己烷(C_8)、薄荷烷(C_{10})；

不飽和單環烴化合物：

環丙烯(C₃)、環丁烯(C₄)、環戊烯(C₅)、環己烯(C₆)、甲基環丙烯(C₄)、二甲基環丙烯(C₅)、甲基環丁烯(C₅)、二甲基環丁烯(C₆)、甲基環戊烯(C₆)、二甲基環戊烯(C₇)、甲基環己烯(C₇)、二甲基環己烯(C₈)；

飽和多環烴化合物：

側柏烷(C₁₀)、薷烷(C₁₀)、蒾烷(C₁₀)、蒾烷(C₁₀)、降薷烷(C₇)、降蒾烷(C₇)、降蒾烷(C₇)、金剛烷(C₁₀)、萘烷(十氫化萘)(C₁₀)；

不飽和多環烴化合物：

蒾烯(C₁₀)、檸檬烯(C₁₀)、蒾烯(C₁₀)；

具有芳香族環之多環烴化合物：

節(C₉)、二氫節(例如，2,3-二氫-1H-節)(C₉)、四氫化萘(1,2,3,4-四氫萘)(C₁₀)、二氫萘(C₁₂)、萘(C₁₃)、非那烯(C₁₃)、醋菲(C₁₅)、醋蒽(C₁₆)、膽蒽(C₂₀)。

亞烷基：本文所用術語「亞烷基」係指藉由自具有1個至20個碳原子(除非另有說明)之烴化合物之脂肪族或脂環族碳原子去除兩個氫原子而獲得的二價單齒部分。亞烷基之群之實例包括C₁₋₂₀亞烷基、C₁₋₇亞烷基、C₁₋₄亞烷基。

亞烷基之實例包括(但不限於)亞甲基(=CH₂)、亞乙基(=CH-CH₃)、亞乙烯基(=C=CH₂)、亞異丙基(=C(CH₃)₂)、亞環戊基及亞苺基(=CH-Ph)。

次烷基：本文所用術語「次烷基」係指藉由自具有1個至20個碳原子(除非另有說明)之烴化合物之脂肪族或脂環

族碳原子去除三個氫原子而獲得的三價單齒部分。次烷基之群之實例包括C₁₋₂₀次烷基、C₁₋₇次烷基、C₁₋₄次烷基。

次烷基之實例包括(但不限於)次甲基($\equiv\text{CH}$)、次乙基($\equiv\text{C}-\text{CH}_3$)及次苄基($\equiv\text{C}-\text{Ph}$)。

碳環基：本文所用術語「碳環基」係指藉由自碳環化合物之環原子去除一個氫原子而獲得的單價部分，該部分具有3個至20個環原子(除非另有說明)。較佳地，每一環皆具有3個至7個環原子。

在此背景下，下標(例如，C₃₋₂₀、C₃₋₇、C₅₋₆等)表示環原子之數量或環原子之數量範圍。舉例而言，本文所用術語「C₅₋₆碳環基」係指具有5個或6個環原子之碳環基。碳環基之群之實例包括C₃₋₂₀碳環基、C₃₋₁₀碳環基、C₅₋₁₀碳環基、C₃₋₇碳環基及C₅₋₇碳環基。

碳環基團之實例包括(但不限於)彼等上文作為環烷基闡述者；及彼等下文作為碳芳基闡述者。

雜環基：本文所用術語「雜環基」係指藉由自雜環化合物之環原子去除一個氫原子而獲得的單價部分，該部分具有3個至20個環原子(除非另有說明)，其中1個至10個係環雜原子。較佳地，每一環皆具有3個至7個環原子，其中1個至4個係環雜原子。

在此背景下，下標(例如，C₃₋₂₀、C₃₋₇、C₅₋₆等)表示環原子(碳原子或雜原子)之數量或環原子之數量範圍。舉例而言，本文所用術語「C₅₋₆雜環基」係指具有5個或6個環原子之雜環基。雜環基之群之實例包括C₃₋₂₀雜環基、C₅₋₂₀雜

環基、 C_{3-15} 雜環基、 C_{5-15} 雜環基、 C_{3-12} 雜環基、 C_{5-12} 雜環基、 C_{3-10} 雜環基、 C_{5-10} 雜環基、 C_{3-7} 雜環基、 C_{5-7} 雜環基及 C_{5-6} 雜環基。

亦為雜芳基之雜環基之實例與芳基一起闡述於下文中。

芳基：如上文所說明，本文所用術語「芳基」係指藉由自芳香族化合物之芳香環原子去除一個氫原子而獲得的單價部分，該部分可具有5個至100個環原子(除非另有說明)。較佳地，每一環皆具有5個至7個環原子。

在此背景下，下標(例如， C_{5-20} 、 C_{5-7} 、 C_{5-6} 等)表示環原子(碳原子或雜原子)之數量或環原子之數量範圍。舉例而言，本文所用術語「 C_{5-6} 芳基」係指具有5個或6個環原子之芳基。芳基之群之實例包括 C_{5-20} 芳基、 C_{5-15} 芳基、 C_{5-12} 芳基、 C_{5-10} 芳基、 C_{5-7} 芳基、 C_{5-6} 芳基、 C_5 芳基及 C_6 芳基。

環原子可為如「碳芳基」中之所有碳原子。碳芳基之實例包括 C_{5-100} 碳芳基、 C_{5-20} 碳芳基、 C_{5-15} 碳芳基、 C_{5-12} 碳芳基、 C_{5-10} 碳芳基、 C_{5-7} 碳芳基、 C_{5-6} 碳芳基、 C_5 碳芳基及 C_6 碳芳基。

碳芳基之實例包括(但不限於)彼等衍生自苯(即，苯基)(C_6)、萘(C_{10})、萸(C_{10})、蔥(C_{14})、菲(C_{14})、稠四苯(C_{18})及芘(C_{16})者。

包含稠環(其中至少一者係芳香族環)之芳基之實例包括(但不限於)衍生自二氫節(例如，2,3-二氫-1H-節)(C_9)、節(C_9)、異節(C_9)、四氫化萘(1,2,3,4-四氫萘(C_{10}))、二氫芴(C_{12})、芴(C_{13})、非那烯(C_{13})、醋菲(C_{15})及醋蔥(C_{16})之基

團。

另一選擇為，環原子可包括一個或多個如「雜芳基」中之雜原子。雜芳基之實例包括 C_{5-100} 雜芳基、 C_{5-20} 雜芳基、 C_{5-15} 雜芳基、 C_{5-12} 雜芳基、 C_{5-10} 雜芳基、 C_{5-7} 雜芳基、 C_{5-6} 雜芳基、 C_5 雜芳基及 C_6 雜芳基。

單環雜芳基之實例包括(但不限於)彼等衍生自下列者：

N_1 ：吡咯(唑)(C_5)、吡啶(嗉)(C_6)；

O_1 ：呋喃(氧雜環戊二烯)(C_5)；

S_1 ：噻吩(硫茂)(C_5)；

N_1O_1 ：噁唑(C_5)、異噁唑(C_5)、異噁嗉(C_6)；

N_2O_1 ：噁二唑(呋咕)(C_5)；

N_3O_1 ：噁三唑(C_5)；

N_1S_1 ：噻唑(C_5)、異噻唑(C_5)；

N_2 ：咪唑(1,3-二唑)(C_5)、吡唑(1,2-二唑)(C_5)、嗒嗉(1,2-二嗉)(C_6)、嘧啶(1,3-二嗉)(C_6)(例如，胞嘧啶、胸腺嘧啶、尿嘧啶)、吡嗉(1,4-二嗉)(C_6)；

N_3 ：三唑(C_5)、三嗉(C_6)；及，

N_4 ：四唑(C_5)。

包含稠環之雜環基團(其中一些亦為雜芳基)之實例包括(但不限於)：

衍生自下列之 C_9 雜環基團(具有2個稠環)：苯并呋喃(O_1)、異苯并呋喃(O_1)、吲哚(N_1)、異吲哚(N_1)、吲哚啉(N_1)、二氫吲哚(N_1)、異二氫吲哚(N_1)、嘌呤(N_4)(例如，腺嘌呤、鳥嘌呤)、苯并咪唑(N_2)、吲唑(N_2)、苯并噁

氧化物；吡啶可經取代，得到吡啶N-氧化物；苯并呋咕可經取代，得到苯并呋咕N-氧化物(亦稱為苯并氧化呋喃)。

無論以上基團係單獨或為另一取代基之一部分，其自身均可視情況可經一個或多個選自其自身及下文所列示額外取代基之基團取代。

氫：-H。注意：若在特定位置之取代基係氫，則可方便地將該化合物或基團看作在彼位置「未經取代」。

鹵基：-F、-Cl、-Br及-I。

羥基：-OH。

醚：-OR，其中R係醚取代基，例如，C₁₋₇烷基(如下文所論述，亦稱為C₁₋₇烷氧基)、C₃₋₂₀雜環基(亦稱為C₃₋₂₀雜環基氧基)、或C₅₋₂₀芳基(亦稱為C₅₋₂₀芳基氧基)，較佳係C₁₋₇烷基。

烷氧基：-OR，其中R係烷基，例如，C₁₋₇烷基。C₁₋₇烷氧基之實例包括(但不限於)-OMe(甲氧基)、-OEt(乙氧基)、-O(nPr)(正丙氧基)、-O(iPr)(異丙氧基)、-O(nBu)(正丁氧基)、-O(sBu)(第二丁氧基)、-O(iBu)(異丁氧基)及-O(tBu)(第三丁氧基)。

縮醛：-CH(OR¹)(OR²)，其中R¹及R²獨立地為縮醛取代基，例如，C₁₋₇烷基、C₃₋₂₀雜環基或C₅₋₂₀芳基，較佳為C₁₋₇烷基，或在「環狀」縮醛基團之情形下，R¹及R²與其所連接之兩個氧原子及其所連接之碳原子一起形成具有4個至8個環原子之雜環。縮醛基團之實例包括(但不限於)-CH(OMe)₂、-CH(OEt)₂及-CH(OMe)(OEt)。

側氧基(酮基, -酮): $=O$ 。

硫酮(Thione, thioketone): $=S$ 。

亞胺基(亞胺): $=NR$, 其中R係亞胺基取代基, 例如, 氫、 C_{1-7} 烷基、 C_{3-20} 雜環基或 C_{5-20} 芳基, 較佳係氫或 C_{1-7} 烷基。酯基團之實例包括(但不限於) $=NH$ 、 $=NMe$ 、 $=NEt$ 及 $=NPh$ 。

甲醯基(甲醛(carbaldehyde, carboxaldehyde)): $-C(=O)H$ 。

醯基(酮基): $-C(=O)R$, 其中R係醯基取代基, 例如, C_{1-7} 烷基(亦稱為 C_{1-7} 烷基醯基或 C_{1-7} 烷醯基)、 C_{3-20} 雜環基(亦稱為 C_{3-20} 雜環基醯基)或 C_{5-20} 芳基(亦稱為 C_{5-20} 芳基醯基), 較佳係 C_{1-7} 烷基。醯基之實例包括(但不限於) $-C(=O)CH_3$ (乙醯基)、 $-C(=O)CH_2CH_3$ (丙醯基)、 $-C(=O)C(CH_3)_3$ (第三丁醯基)及 $-C(=O)Ph$ (苯甲醯基、苯酮)。

羧基(羧酸): $-C(=O)OH$ 。

硫代羧基(硫代羧酸): $-C(=S)SH$ 。

硫羧基(硫羧酸): $-C(=O)SH$ 。

硫羧基(硫羧酸): $-C(=S)OH$ 。

酯(羧酸酯(carboxylate, carboxylic acid ester)、羧基): $-C(=O)OR$, 其中R係酯取代基, 例如, C_{1-7} 烷基、 C_{3-20} 雜環基或 C_{5-20} 芳基, 較佳係 C_{1-7} 烷基。酯基團之實例包括(但不限於) $-C(=O)OCH_3$ 、 $-C(=O)OCH_2CH_3$ 、 $-C(=O)OC(CH_3)_3$ 及 $-C(=O)OPh$ 。

醯氧基(與酯相反): $-OC(=O)R$, 其中R係醯氧基取代基, 例如, C_{1-7} 烷基、 C_{3-20} 雜環基或 C_{5-20} 芳基, 較佳為 C_{1-7}

烷基。醯氧基之實例包括(但不限於)-OC(=O)CH₃(乙醯氧基)、-OC(=O)CH₂CH₃、-OC(=O)C(CH₃)₃、-OC(=O)Ph及-OC(=O)CH₂Ph。

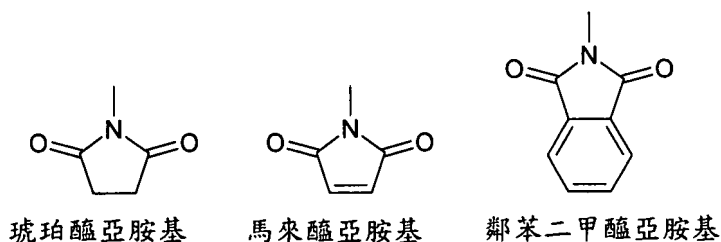
氧基羰基氧基：-OC(=O)OR，其中R係酯取代基，例如，C₁₋₇烷基、C₃₋₂₀雜環基或C₅₋₂₀芳基，較佳係C₁₋₇烷基。酯基團之實例包括(但不限於)-OC(=O)OCH₃、-OC(=O)OCH₂CH₃、-OC(=O)OC(CH₃)₃及-OC(=O)OPh。

胺基：-NR¹R²，其中R¹及R²獨立地為胺基取代基，例如，氫、C₁₋₇烷基(亦稱為C₁₋₇烷基胺基或二-C₁₋₇烷基胺基)、C₃₋₂₀雜環基或C₅₋₂₀芳基，較佳為H或C₁₋₇烷基，或在「環狀」胺基之情形下，R¹及R²與其所連接之氮原子一起形成具有4個至8個環原子之雜環。胺基可為一級(-NH₂)、二級(-NHR¹)或三級(-NHR¹R²)，在呈陽離子形式時，可為四級(-⁺NR¹R²R³)。胺基之實例包括(但不限於)-NH₂、-NHCH₃、-NHC(CH₃)₂、-N(CH₃)₂、-N(CH₂CH₃)₂及-NHPh。環狀胺基之實例包括(但不限於)氮丙啶基、氮雜環丁基、吡咯啶基、六氫吡啶基、六氫吡嗪基、嗎啉基及硫代嗎啉基。

醯胺基(胺基甲醯基(carbamoyl, carbamyl)、胺基羰基、甲醯胺)：-C(=O)NR¹R²，其中R¹及R²獨立地為胺基取代基，如針對胺基所定義。醯胺基之實例包括(但不限於)-C(=O)NH₂、-C(=O)NHCH₃、-C(=O)N(CH₃)₂、-C(=O)NHCH₂CH₃及-C(=O)N(CH₂CH₃)₂、以及其中R¹及R²與其所連接之氮原子一起形成雜環結構之醯胺基，如在(例如)六氫吡啶基羰基、嗎啉基羰基、硫代嗎啉基羰基及六氫吡嗪基羰基中。

硫代醯胺基(硫代胺基甲醯基)： $-\text{C}(=\text{S})\text{NR}^1\text{R}^2$ ，其中 R^1 及 R^2 獨立地為胺基取代基，如針對胺基所定義。醯胺基之實例包括(但不限於) $-\text{C}(=\text{S})\text{NH}_2$ 、 $-\text{C}(=\text{S})\text{NHCH}_3$ 、 $-\text{C}(=\text{S})\text{N}(\text{CH}_3)_2$ 及 $-\text{C}(=\text{S})\text{NHCH}_2\text{CH}_3$ 。

醯基醯胺基(醯基胺基)： $-\text{NR}^1\text{C}(=\text{O})\text{R}^2$ ，其中 R^1 係醯胺取代基，例如，氫、 C_{1-7} 烷基、 C_{3-20} 雜環基或 C_{5-20} 芳基，較佳係H或 C_{1-7} 烷基，且 R^2 係醯基取代基，例如， C_{1-7} 烷基、 C_{3-20} 雜環基或 C_{5-20} 芳基，較佳係H或 C_{1-7} 烷基。醯胺基團之實例包括(但不限於) $-\text{NHC}(=\text{O})\text{CH}_3$ 、 $-\text{NHC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_3$ 及 $-\text{NHC}(=\text{O})\text{Ph}$ 。 R^1 及 R^2 可一起形成環狀結構，如在(例如)琥珀醯亞胺基、馬來醯亞胺基及鄰苯二甲醯亞胺基中：

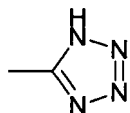


胺基羰基氧基： $-\text{OC}(=\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ ，其中 R^1 及 R^2 獨立地為胺基取代基，如針對胺基所定義。胺基羰基氧基之實例包括(但不限於) $-\text{OC}(=\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{NHMe}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{NMe}_2$ 及 $-\text{OC}(=\text{O})\text{NEt}_2$ 。

脲基： $-\text{N}(\text{R}^1)\text{CONR}^2\text{R}^3$ ，其中 R^2 及 R^3 獨立地為胺基取代基，如針對胺基所定義，且 R^1 係脲基取代基，例如，氫、 C_{1-7} 烷基、 C_{3-20} 雜環基或 C_{5-20} 芳基，較佳係氫或 C_{1-7} 烷基。脲基之實例包括(但不限於) $-\text{NHCONH}_2$ 、 $-\text{NHCONHMe}$ 、 $-\text{NHCONHEt}$ 、 $-\text{NHCONMe}_2$ 、 $-\text{NHCONEt}_2$ 、 $-\text{NMeCONH}_2$

、-NMeCONHMe、-NMeCONHEt、-NMeCONMe₂及-NMeCONEt₂。

四唑基：具有四個氮原子及一個碳原子之五員芳香族環，



亞胺基： $=NR$ ，其中R係亞胺基取代基，例如，氫、C₁₋₇烷基、C₃₋₂₀雜環基或C₅₋₂₀芳基，較佳係H或C₁₋₇烷基。亞胺基之實例包括(但不限於) $=NH$ 、 $=NMe$ 及 $=NEt$ 。

脒(脒基)： $-C(=NR)NR_2$ ，其中每一R皆為脒取代基，例如，氫、C₁₋₇烷基、C₃₋₂₀雜環基或C₅₋₂₀芳基，較佳為H或C₁₋₇烷基。脒基團之實例包括(但不限於) $-C(=NH)NH_2$ 、 $-C(=NH)NMe_2$ 及 $-C(=NMe)NMe_2$ 。

硝基： $-NO_2$ 。

亞硝基： $-NO$ 。

氰基(腈(nitrile, carbonitrile))： $-CN$ 。

異氰基： $-NC$ 。

氰氧基： $-OCN$ 。

異氰氧基： $-NCO$ 。

硫代氰基(硫代氰氧基)： $-SCN$ 。

異硫代氰基(異硫代氰氧基)： $-NCS$ 。

在大多數情形下，取代基自身係經取代的。

舉例而言，C₁₋₇烷基可經(例如)以下基團取代：

羥基(亦稱為羥基-C₁₋₇烷基)；

鹵基(亦稱為鹵基-C₁₋₇烷基)；

胺基(亦稱為胺基-C₁₋₇烷基)；

羧基(亦稱為羧基-C₁₋₇烷基)；

C₁₋₇烷氧基(亦稱為C₁₋₇烷氧基-C₁₋₇烷基)；

C₅₋₂₀芳基(亦稱為C₅₋₂₀芳基-C₁₋₇烷基)。

同樣，C₅₋₂₀芳基可經(例如)以下基團取代：

羥基(亦稱為羥基-C₅₋₂₀芳基)；

鹵基(亦稱為鹵基-C₅₋₂₀芳基)；

胺基(亦稱為胺基-C₅₋₂₀芳基，例如，如在苯胺中)；

羧基(亦稱為羧基-C₅₋₂₀芳基，例如，如在苯甲酸中)；

C₁₋₇烷基(亦稱為C₁₋₇烷基-C₅₋₂₀芳基，例如，如在甲苯中)；

C₁₋₇烷氧基(亦稱為C₁₋₇烷氧基-C₅₋₂₀芳基，例如，如在苯甲醚中)；

C₅₋₂₀芳基(亦稱為C₅₋₂₀芳基-C₅₋₂₀芳基，例如，如在聯苯中)。

該等經取代之取代基之此等及其他具體實例將在下文中予以闡述。

羥基-C₁₋₇烷基：本文所用術語「羥基-C₁₋₇烷基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已由羥基代替之C₁₋₇烷基。該等基團之實例包括(但不限於)-CH₂OH、-CH₂CH₂OH及-CH(OH)CH₂OH。

鹵基-C₁₋₇烷基：本文所用術語「鹵基-C₁₋₇烷基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已由鹵素原子

(例如，F、Cl、Br、I)代替之 C_{1-7} 烷基。若不止一個氫原子已由鹵素原子代替，則該等鹵素原子可獨立地相同或不同。每個氫原子皆可由鹵素原子代替，在該情形下，該基團可方便地稱為「 C_{1-7} 全鹵代烷基」。該等基團之實例包括(但不限於)- CF_3 、- CHF_2 、- CH_2F 、- CCl_3 、- CBr_3 、- CH_2CH_2F 、- CH_2CHF_2 及- CH_2CF_3 。

胺基- C_{1-7} 烷基：本文所用術語「胺基- C_{1-7} 烷基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已由胺基代替之 C_{1-7} 烷基。該等基團之實例包括(但不限於)- CH_2NH_2 、- $CH_2CH_2NH_2$ 及- $CH_2CH_2N(CH_3)_2$ 。

羧基- C_{1-7} 烷基：本文所用術語「羧基- C_{1-7} 烷基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已由羧基代替之 C_{1-7} 烷基。該等基團之實例包括(但不限於)- CH_2COOH 及- CH_2CH_2COOH 。

C_{1-7} 烷氧基- C_{1-7} 烷基：本文所用術語「 C_{1-7} 烷氧基- C_{1-7} 烷基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已由 C_{1-7} 烷氧基代替之 C_{1-7} 烷基。該等基團之實例包括(但不限於)- CH_2OCH_3 、- $CH_2CH_2OCH_3$ 及- $CH_2CH_2OCH_2CH_3$ 。

C_{5-20} 芳基- C_{1-7} 烷基：本文所用術語「 C_{5-20} 芳基- C_{1-7} 烷基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已由 C_{5-20} 芳基代替之 C_{1-7} 烷基。該等基團之實例包括(但不限於)苄基(苯基甲基、 $PhCH_2-$)、二苯甲基(Ph_2CH-)、三苯甲基(三苯基甲基、 Ph_3C-)、苯乙基(苯基乙基、 $Ph-CH_2CH_2-$)、苯乙烯基($Ph-CH=CH-$)、肉桂基($Ph-CH=CH-CH_2-$)。

羥基-C₅₋₂₀芳基：本文所用術語「羥基-C₅₋₂₀芳基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已由羥基取代之C₅₋₂₀芳基。該等基團之實例包括(但不限於)彼等衍生自下列者：苯酚、萘酚、鄰苯二酚、間苯二酚、對苯二酚、連苯三酚、間苯三酚。

鹵基-C₅₋₂₀芳基：本文所用術語「鹵基-C₅₋₂₀芳基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已經鹵基(例如，F、Cl、Br、I)取代之C₅₋₂₀芳基。該等基團之實例包括(但不限於)鹵代苯基(例如，鄰-、間-或對-取代之氟苯基、氯苯基、溴苯基或碘苯基)、二鹵代苯基、三鹵代苯基、四鹵代苯基及五鹵代苯基。

C₁₋₇烷基-C₅₋₂₀芳基：本文所用術語「C₁₋₇烷基-C₅₋₂₀芳基」係指其中至少一個氫原子(例如，1個、2個、3個)已經C₁₋₇烷基取代之C₅₋₂₀芳基。該等基團之實例包括(但不限於)甲苯基(來自甲苯)、二甲苯基(來自二甲苯)、均三甲苯基(來自均三甲苯)及異丙苯基(cumenyl, cumyl)(來自異丙苯)、及均四甲苯基(來自均四甲苯)。

羥基-C₁₋₇烷氧基：-OR，其中R係羥基-C₁₋₇烷基。羥基-C₁₋₇烷氧基之實例包括(但不限於)-OCH₂OH、-OCH₂CH₂OH及-OCH₂CH₂CH₂OH。

鹵基-C₁₋₇烷氧基：-OR，其中R係鹵基-C₁₋₇烷基。鹵基-C₁₋₇烷氧基之實例包括(但不限於)-OCF₃、-OCHF₂、-OCH₂F、-OCCl₃、-OCBr₃、-OCH₂CH₂F、-OCH₂CHF₂及-OCH₂CF₃。

羧基-C₁₋₇烷氧基：-OR，其中R係羧基-C₁₋₇烷基。羧基-C₁₋₇烷氧基之實例包括(但不限於)-OCH₂COOH、-OCH₂CH₂COOH及-OCH₂CH₂CH₂COOH。

C₁₋₇烷氧基-C₁₋₇烷氧基：-OR，其中R係C₁₋₇烷氧基-C₁₋₇烷基。C₁₋₇烷氧基-C₁₋₇烷氧基之實例包括(但不限於)-OCH₂OCH₃、-OCH₂CH₂OCH₃及-OCH₂CH₂OCH₂CH₃。

C₅₋₂₀芳基-C₁₋₇烷氧基：-OR，其中R係C₅₋₂₀芳基-C₁₋₇烷基。該等基團之實例包括(但不限於)苄基氧基、二苯甲基氧基、三苯甲基氧基、苯乙氧基、苯乙烯基氧基及肉桂基氧基。

C₁₋₇烷基-C₅₋₂₀芳基氧基：-OR，其中R係C₁₋₇烷基-C₅₋₂₀芳基。該等基團之實例包括(但不限於)甲苯基氧基、二甲苯基氧基、三甲苯基氧基、異丙苯基氧基及均四甲苯基氧基。

胺基-C₁₋₇烷基-胺基：本文所用術語「胺基-C₁₋₇烷基-胺基」係指其中取代基R¹或R²中之一者自身係胺基-C₁₋₇烷基(-C₁₋₇烷基-NR³R⁴)之胺基-NR¹R²。胺基-C₁₋₇烷基胺基可由(例如)式-NR¹-C₁₋₇烷基-NR³R⁴代表。該等基團之實例包括(但不限於)式-NR¹(CH₂)_nNR¹R²之基團，其中n係1至6(例如-NHCH₂NH₂、-NH(CH₂)₂NH₂、-NH(CH₂)₃NH₂、-NH(CH₂)₄NH₂、-NH(CH₂)₅NH₂、-NH(CH₂)₆NH₂)、-NHCH₂NH(Me)、-NH(CH₂)₂NH(Me)、-NH(CH₂)₃NH(Me)、-NH(CH₂)₄NH(Me)、-NH(CH₂)₅NH(Me)、-NH(CH₂)₆NH(Me)、-NHCH₂NH(Et)、-NH(CH₂)₂NH(Et)、-NH(CH₂)₃NH(Et)

、 $-\text{NH}(\text{CH}_2)_4\text{NH}(\text{Et})$ 、 $-\text{NH}(\text{CH}_2)_5\text{NH}(\text{Et})$ 及 $-\text{NH}(\text{CH}_2)_6\text{NH}(\text{Et})$ 。

一些較佳之取代基

在一個較佳實施例中，各取代基(在本文中通常稱為R)獨立地選自：鹵基；羥基；醚(例如， C_{1-7} 烷基氧基)；甲醯基；醯基(例如， C_{1-7} 烷基醯基、 C_{5-20} 芳基醯基)；醯基鹵；羧基；酯；醯氧基；醯胺基；醯基醯胺基；硫代醯胺基；四唑基；胺基；硝基；亞硝基；疊氮基；氰基；異氰基；氰氧基；異氰氧基；硫代氰基；異硫代氰基；巰基；硫醚(例如， C_{1-7} 烷基硫基)；磺酸；磺酸酯；磺；磺醯基氧基；亞磺醯基氧基；磺胺基；磺醯胺基；亞磺醯胺基；胺磺醯基；亞磺醯胺基； C_{1-7} 烷基(包括(例如)未經取代之 C_{1-7} 烷基、 C_{1-7} 鹵基烷基、 C_{1-7} 羥基烷基、 C_{1-7} 羧基烷基、 C_{1-7} 胺基烷基、 C_{5-20} 芳基- C_{1-7} 烷基)； C_{3-20} 雜環基；或 C_{5-20} 芳基(包括(例如) C_{5-20} 碳芳基、 C_{5-20} 雜芳基、 C_{1-7} 烷基- C_{5-20} 芳基及 C_{5-20} 鹵基芳基))。

在一個較佳實施例中，各取代基(在本文中通常稱為R)獨立地選自： $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、 $-\text{I}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{OMe}$ 、 $-\text{OEt}$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SMe}$ 、 $-\text{SEt}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{Me}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OMe}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CONHMe}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{NMe}_2$ 、 $-\text{NEt}_2$ 、 $-\text{N}(\text{nPr})_2$ 、 $-\text{N}(\text{iPr})_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{Me}$ 、 $-\text{Et}$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{OH}$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ 、 $-\text{CH}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ 及 $-\text{Ph}$ 。

在一個較佳實施例中，各取代基(在本文中通常稱為R)獨立地選自：羥基；醚(例如， C_{1-7} 烷基氧基)；酯；醯胺基；胺基；及 C_{1-7} 烷基(包括(例如)未經取代之 C_{1-7} 烷基、

C₁₋₇鹵基烷基、C₁₋₇羥基烷基、C₁₋₇羧基烷基、C₁₋₇胺基烷基、C₅₋₂₀芳基-C₁₋₇烷基)。

現將參照附圖闡述本發明之實施例，其中：

參照以下實例(其為本發明之實施例)進一步闡述本發明。

儘管許多特徵已在實例中在特徵之具體組合之內容中提及，且若適當，在彼等特徵具有特定值之情形下，但應理解彼等特徵中之任一者皆可與或不與其他特徵一起存在於本發明之其他實施例中。同樣，任一與特徵有關之特定值皆可根據本文所給出之一般揭示內容加以調節。

儀器及表徵方法

核磁共振(NMR)光譜係使用氯仿-d或二氯甲烷-d₂作為溶劑並使用四甲基矽烷(TMS)作為內標在Bruker DPX 400 MHz光譜儀上收集。

基質輔助雷射解吸/電離飛行時間(MALDI-TOF)質譜係在Bruker Autoflex TOF/TOF儀器上獲得。

差示掃描量熱(DSC)係在氮下在TA儀器DSC 2920模組上(掃描速率為20°C/min)實施。

熱重分析(TGA)係使用TA儀器TGA 2050模組(加熱速率為20°C/min)來實施。

循環伏安(CV)實驗係在恒電位分析儀(PGSTAT30型)上實施。所有CV量測均係在二氯甲烷中利用0.1 M四丁基六氟磷酸銨作為支持電解質(掃描速率為50 mV/s)使用由鉑絲工作電極、金反電極及存於3 M KCl中之Ag/AgCl參考電極

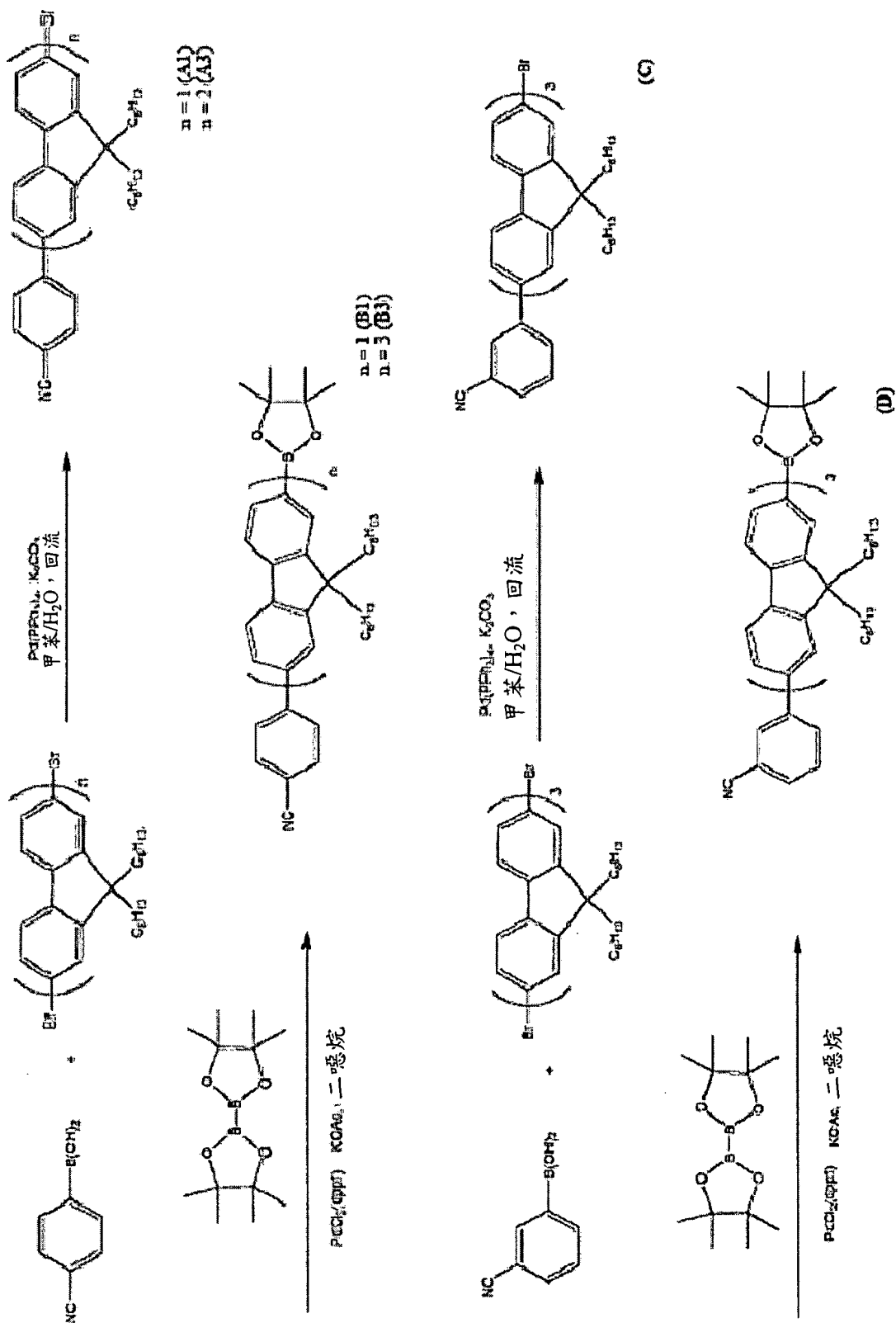
組成之習用三電極組態來記錄。將所量測電位轉化成SCE(飽和甘汞電極)並以-4.4 eV作為相對於真空之SCE能級自起始氧化還原電位得到相應電離電位(IP)及電子親和力(EA)值($EA = E_{\text{還原起始}} + 4.4 \text{ eV}$ ， $IP = E_{\text{氧化起始}} + 4.4 \text{ eV}$)。

吸收光譜係使用濃度介於 1.8×10^{-6} 至 3.1×10^{-6} M之間(除非另有說明)的二氯甲烷溶液在Shimadzu UV-3101 PC UV-vis-NIR分光光度計上記錄。

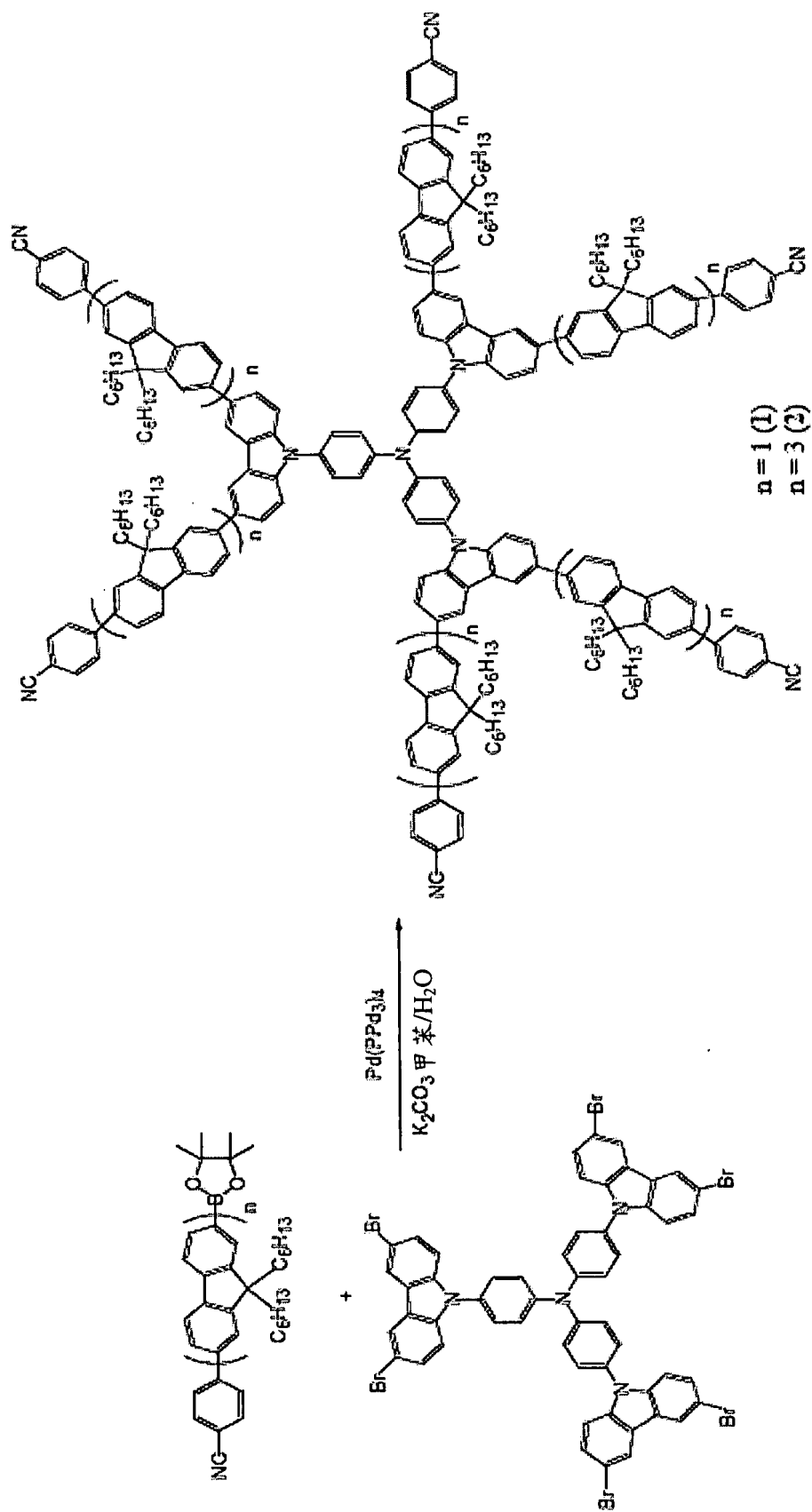
合成

以下反應圖顯示用於製備本發明雙極化合物之方法。

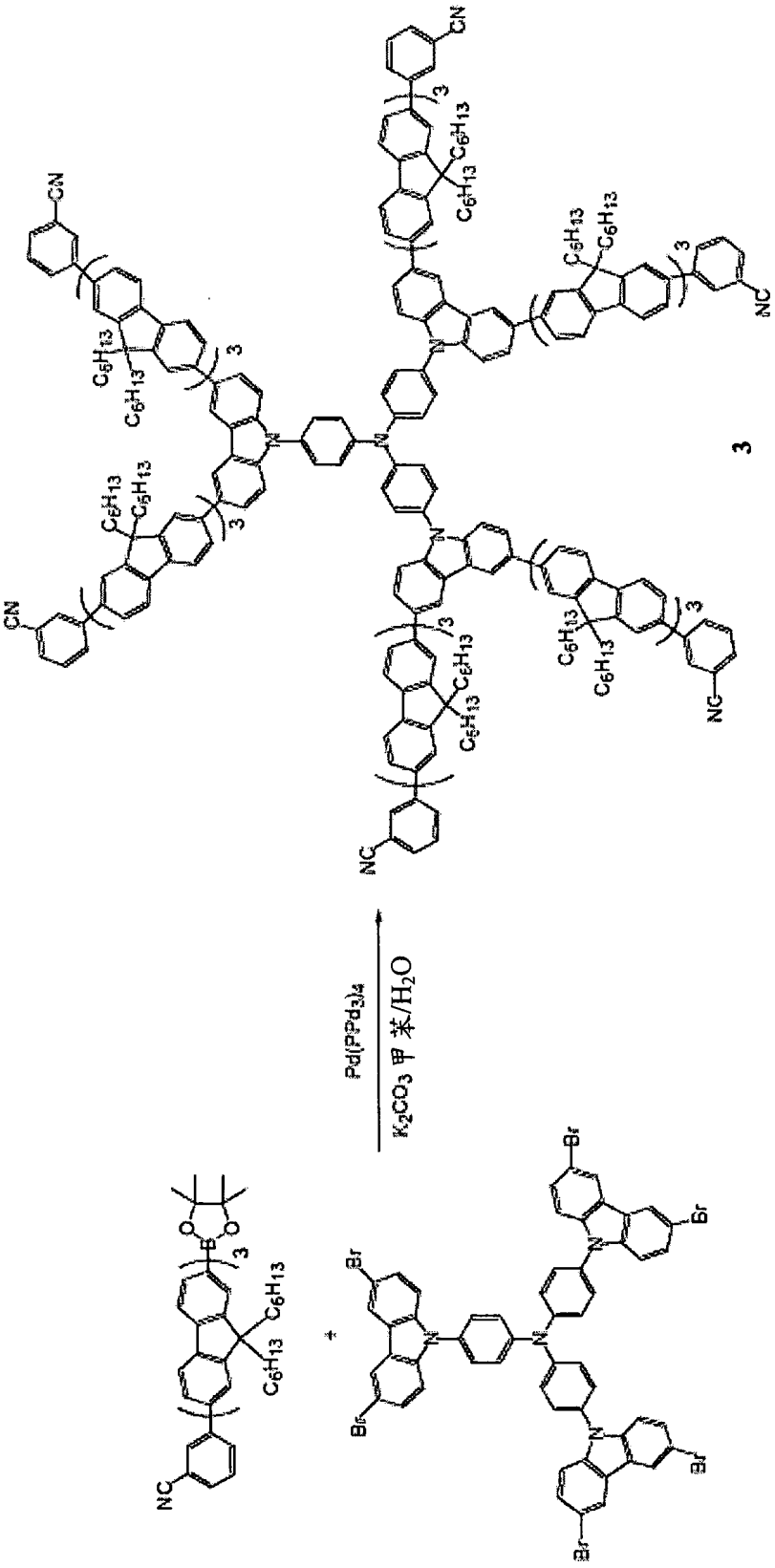




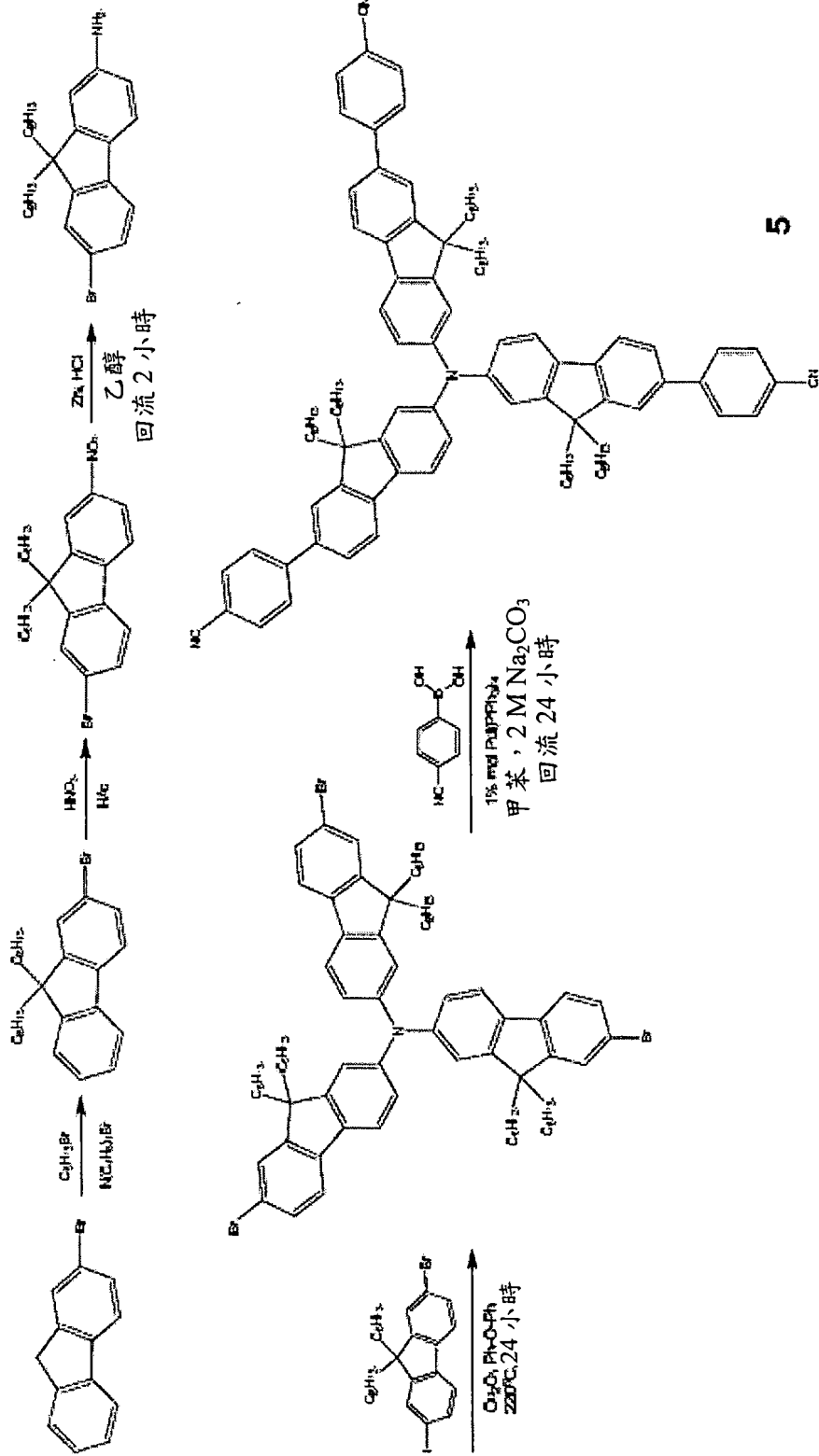
反應圖 1. 中間體 A1、A2、B1、B2、C 及 D 之合成程序



反應圖 2. 化合物 1 及 2 之合成程序



反應圖 3. 化合物 3 之合成程序



反應圖 5. 化合物 5 之合成程序

第I部分-中間體之合成

實例1-化合物A1之合成

向4-氰基苯基硼酸(3.15 g, 21.4 mmol)、9,9-二己基-2,7-二溴萘(21.14 g, 43.0 mmol)及四(三苯基磷)鈾(0.495 g, 0.428 mmol、每個C-Br鍵為2%)之混合物中添加脫氣 K_2CO_3 水溶液(100 mL)及脫氣甲苯(150 mL)。在 N_2 保護下將溶液回流24 h。用 CH_2Cl_2 (100 mL×4)萃取所得褐色溶液。合併的有機層經 $MgSO_4$ 乾燥並在減壓下蒸發以去除溶劑。然後利用矽膠管柱使用 CH_2Cl_2 /己烷(1:2)作為洗脫液來純化殘留物，獲得呈淺黃色固體形式之期望產物(7.40 g，產率為67%)。 1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ (ppm) 7.75-7.77 (m, 5H), 7.56-7.60 (m, 2H), 7.47-7.52 (m, 3H), 1.95-2.04 (m, 4H), 1.06-1.15 (m, 12H), 0.77 (t, 6H, $J=7.6$ Hz), 0.62-0.66 (m, 4H)。

實例2-化合物A3之合成

以與針對化合物A1所述相同之方式，使4-氰基苯基硼酸(0.7 g, 4.76 mmol)與二溴-第三(9,9-二己基)萘(11.0 g, 9.52 mmol)反應，得到呈淺黃色固體形式之化合物A3(4.28 g，產率為76%)。 1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ (ppm) 7.58-7.83 (m, 20H), 7.47-7.49 (m, 2H), 1.98-2.13 (m, 12H), 1.09-1.15 (m, 36 H), 0.77-0.80 (m, 30H)。

實例3-化合物C之合成

以與針對化合物A1所述相同之方式，使3-氰基苯基硼酸(0.8 g, 4.76 mmol)與二溴-第三(9,9-二己基)萘(11.0 g, 9.52

mmol)反應，得到呈淺黃色固體形式之化合物C(4.28 g，產率為56%)。¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ (ppm) 7.96 (s, 1H), 7.91 (d, 1H, J=8.0 Hz), 7.74-7.84 (m, 6H), 7.54-7.70 (m, 12H), 7.47-7.49 (m, 1H), 7.31-7.38 (m, 1H), 1.97-2.11 (m, 12H), 1.09-1.12 (m, 36H), 0.77-0.80 (m, 30H)。

實例4-化合物B1之合成

向化合物A1 (5.0 g, 9.73 mmol)、雙(戊醯)二硼(3.70 g, 14.57 mmol)、二氯[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]鈀(240 mg, 0.29 mmol，每個C-Br鍵為3%)及乙酸鉀(1.72 g, 17.53 mmol)之混合物中添加脫氣1,4-二噁烷(100 mL)。將溶液在80°C下加熱3 h。然後用CH₂Cl₂(50 mL×4)萃取溶液。合併的有機層經MgSO₄乾燥並在減壓下蒸發以去除溶劑。然後利用矽膠管柱使用CH₂Cl₂/己烷(1:2)作為洗脫液來純化殘留物，獲得呈淺黃色固體形式之期望產物(5.16 g，產率為95%)。¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ (ppm) 7.79-7.84 (m, 2H), 7.72-7.77 (m, 6H), 7.57 (d, 1H, J=8.0 Hz), 7.53 (s, 1H), 1.99-2.08 (m, 4H), 1.39 (s, 12H), 1.02-1.11 (m, 12H), 0.74 (t, 6H, J=7.6 Hz), 0.59-0.66 (m, 4H)。

實例5-化合物B3之合成

以與針對化合物B1所述相同之方式，使化合物A3 (1.02 g, 0.865 mmol)與雙(戊醯)二硼(0.263 g, 1.04 mmol)反應，得到呈淺黃色固體形式之化合物B3(0.639 g，產率為60%)。¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ (ppm) 7.57-7.85 (m, 22H), 2.05-2.14 (m, 12H), 1.39 (s, 12H), 1.05-1.12 (m,

36H), 0.72-0.83 (m, 30H)。

實例6-化合物D之合成

以與針對化合物B1所述相同之方式，使化合物C(0.6 g, 0.51 mmol)與雙(戊醯)二硼(0.155 g, 0.61 mmol)反應，得到呈淺黃色固體形式之化合物D(0.39 g, 產率為62%)。¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ (ppm) 7.96 (s, 1H), 7.91 (d, 1H, J=7.6 Hz), 7.78-7.84 (m, 7H), 7.74 (d, 1H, J=7.6 Hz), 7.54-7.70 (m, 12H), 2.04-2.11 (m, 12H), 1.40 (s, 12H), 1.07-1.12 (m, 36H), 0.70-0.82 (m, 30H)。

第II部分-雙極化合物之合成

實例7-化合物1之合成

向化合物B1(4.00 g, 7.13 mmol)、4,4',4''-參(3,6-二溴吡啶基-O-基)-三苯基胺(1.15 g, 0.95 mmol)及四(三苯基膦)鈀(0.197 g, 0.17 mmol, 每個C-Br鍵為3%)之混合物中添加脫氣K₂CO₃水溶液(100 mL)及脫氣甲苯(150 mL)。在N₂保護下將溶液回流24 h。用CH₂Cl₂(100 mL×4)萃取所得褐色溶液。合併的有機層經MgSO₄乾燥並在減壓下蒸發以去除溶劑。然後利用矽膠管柱使用CH₂Cl₂/己烷(8:1)作為洗脫液來純化殘留物，獲得呈淺黃色固體形式之期望產物(1.91 g, 產率為62%)。¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂): δ (ppm) 8.62 (s, 6H), 7.66-7.92 (m, 84H), 2.10-2.21 (m, 24H), 1.06-1.16 (m, 72H), 0.75-0.80 (m, 60H), MS (MALDI): m/z=3341.99 (C₂₄₆H₂₄₆N₁₀之計算值: 3342.65)。HOMO: -5.17 eV, LUMO: -2.02 eV。於甲苯溶液中之量子效率: 0.74。



實例8-化合物2之合成

以與針對化合物1所述相同之方式，使化合物B3(0.632 g, 0.515 mmol)與4,4',4''-參(3,6-二溴吡啶基-O-基)-三苯基胺(0.083 g, 0.069 mmol)反應，得到呈白色固體形式之化合物2(0.305 g，產率為58%)。¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂): δ (ppm) 8.66 (s, 6H), 7.72-7.94 (m, 144H), 7.66 (d, 12H, J=7.6 Hz), 2.13-2.20 (m, 72H), 1.11-1.20 (m, 216H), 0.76-0.83 (m, 180H)，MS (MALDI)：m/z=7733.63(C₅₄₆H₆₃₀N₁₀之計算值：7732.91)。HOMO：-5.17 eV，LUMO：-2.13 eV。於甲苯溶液中之量子效率：0.72。

實例9-化合物3之合成

以與針對化合物1所述相同之方式，使化合物D(0.318 g, 0.259 mmol)與4,4',4''-參(3,6-二溴吡啶基-O-基)-三苯基胺(0.035 g, 0.029 mmol)反應，得到呈白色固體形式之化合物3(0.152 g，產率為72%)。¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂): δ (ppm) 8.66 (s, 6H), 8.02 (s, 6H), 7.86-7.97 (m, 60H), 7.60-7.81 (m, 90H), 2.13-2.20 (m, 72H), 1.11-1.19 (m, 216H), 0.76-0.83 (m, 180H)，MS (MALDI)：m/z=7333.65 (C₅₄₆H₆₃₀N₁₀之計算值：7332.91)。HOMO：-5.16 eV，LUMO：-2.09 eV。於甲苯溶液中之量子效率：0.65。

實例10-化合物4之合成

向化合物A3(0.537 g, 0.455 mmol)、聯苯胺(17 mg, 0.092 mmol)、乙酸鈮(6 mg, 0.027 mmol，每個C-Br鍵為5%)及1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵(27 mg, 0.048 mmol)之混

合物中添加 25 mL 脫氣無水甲苯。將溶液在 95°C 下加熱 2 天。然後用 CH_2Cl_2 (30 mL×4) 萃取溶液。合併的有機層經 MgSO_4 乾燥並在減壓下蒸發以去除溶劑。然後利用矽膠管柱使用 CH_2Cl_2 /己烷 (1.5:1)、然後使用乙酸乙酯/己烷 (1:4) 作為洗脫液來純化殘留物，獲得呈淺黃色固體形式之期望產物 (0.153 g，產率為 36%)。 ^1H NMR (400 MHz, CD_2Cl_2): δ (ppm) 7.57-7.83 (m, 80 H), 7.58 (d, 4H, $J=8.4$ Hz), 7.33 (s, 4H), 7.28 (d, 4H, $J=8.4$ Hz), 7.16 (d, 4H, $J=8.4$ Hz), 1.99-2.14 (m, 48H), 1.11-1.24 (m, 144H), 0.80-0.86 (m, 120H), MS (MALDI): $m/z=4578.92$ ($\text{C}_{340}\text{H}_{408}\text{N}_6$ 之計算值: 4579.08)。HOMO: -4.97 eV, LUMO: -2.15 eV。存於甲苯溶液中之量子效率: 0.41。

實例 11- 2-溴-9,9-二己基萘之合成

將 9.8 g 2-溴萘、39.6 g 1-溴己烷、2.58 g 四丁基溴化銨及 75 ml 50% NaOH 添加至 250 ml 圓底燒瓶中。將混合物攪拌並加熱至 80°C，過夜。分離出有機層並用醚萃取水相。將有機層用鹽水洗滌，並用無水 MgSO_4 乾燥。蒸發溶劑並使殘留物經過短矽膠管柱，得到 15.45 g 產物 (93.8%)。

實例 12- 2-溴-7-硝基-9,9-二己基萘之合成

將 7.0 g 2-溴-9,9-二己基萘、56.6 ml 乙酸及 3.39 ml 100% HNO_3 混合物攪拌 2 小時，然後倒入大量的冰水，用 Na_2CO_3 粉末鹼化，直至 $\text{pH}>7$ 為止，藉由乙酸乙酯萃取。將有機層用鹽水洗滌，並用無水 MgSO_4 乾燥。蒸發溶劑並使殘留物經過矽膠管柱，得到 4.91 g 2-溴-7-硝基-9,9-二己基萘



(63.2%)。

實例13- 2-胺基-7-溴-9,9-二己基萘之合成

在攪拌下將2.6 g Zn粉末小心地逐漸添加至10 ml 2-溴-7-硝基-9,9-二己基萘、20 ml濃HCl及50 ml乙醇之混合物中。將混合物回流半小時。冷卻後，藉由醚萃取混合物。將有機層用鹽水洗滌，並用無水MgSO₄乾燥。蒸發溶劑並使殘留物經過矽膠管柱，得到3.42 g 2-胺基-7-溴-9,9-二己基萘(80.1%)。

實例14- N,N,N-參(7-溴-9,9-二己基萘-7-基)胺之合成

在N₂氣氛下將2.14 g 2-胺基-7-溴-9,9-二己基萘、0.72 g 氧化亞銅(I)及10.78 g 2-溴-9,9-二己基-7-碘-9H-萘於1-苯氧基苯中之混合物在油浴中加熱至220°C，並保持24小時。將反應混合物冷卻至室溫且然後過濾以去除過量的銅錯合物。將濾液蒸發至乾燥並使其經過矽膠管柱，得到3.13 g產物(50%)。

實例15-化合物5之合成

將0.126 g N,N,N-參(7-溴-9,9-二己基萘-7-基)胺、0.088 g 4-氰基苯基硼酸及3.4 mg四(三苯基膦)鈰之混合物添加至甲苯(15 mL)與2 M無水Na₂CO₃溶液(12 mL)之無空氣兩相混合物中。在氫氣氛及110°C下將所得混合物劇烈攪拌24小時。分離出有機層並用醚萃取水相。將有機層用鹽水(2×50 mL)洗滌，並用無水MgSO₄乾燥。蒸發溶劑並使殘留物經過矽膠管柱。藉由在庚烷中重結晶獲得純淨化合物5，得到0.096 g化合物5(71%)。¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃): δ (ppm) 7.756-7.525 (m, 24H), 7.40-7.20(與 CHCl₃ 重疊, 3H), (s, 3H), 2.013-1.865 (m, 12H), 1.227-1.135 (m, 36H), 0.815-0.697 (m, 30H)。MS (MALDI-TOF): $m/z=1318.01$ (C₉₆H₁₀₈N₄之計算值: 1317.86)。分析實驗值: C, 87.52; H, 8.25; N, 4.29(計算值: C, 87.49; H, 8.26; N, 4.25)。HPLC: 99.87%。

第III部分-裝置製作及量測

實例16-具有ITO/PEDOT:PSS/化合物1/TPBI/LiF/Al構型之OLED裝置之製作

將30 mg化合物1溶於4 ml氯仿中並藉助0.2 mm PTFE過濾器過濾以供裝置製作用。發光裝置係在經圖案化氧化銦錫(ITO)塗佈之玻璃基板上製備。清潔基板並用氧電漿處理並經旋塗以具有45 nm摻雜有聚(苯乙烯磺酸)(PSS)之聚(3,4-伸乙基二氧基噻吩)(PEDOT), 隨後在120°C下在空氣中乾燥15 min。將聚合物溶液旋塗以形成厚度為約40 nm之發射層並轉移至處於 1×10^{-5} Pa真空下之室中。在發射層表面上沈積25 nm 1,3,5-參(苯基-2-苯并咪唑基)苯(TPBI)以供電子注入及電洞阻擋用。陰極由依序經熱沈積之0.5 nm LiF及150 nm Al組成。所有量測均係在空氣中在室溫下實施。使用Keithley 2420源表及校準光二極體記錄裝置之電流-電壓、電流-發光特性。利用Ocean Optics USB2000小型光纖光譜儀記錄EL光譜。使用該裝置之電流-電壓-發光數據及EL光譜計算測光度數據。裝置之導通電壓為3.5 V。最大亮度為4627 cd/m²。在3700 cd/m² (9.5 V)下在CIE

坐標為(0.16, 0.14)時最大電流效率為1.44 cd/A。I-V-L特性及電流效率對電壓之曲線圖解說明於圖6及圖7中。

實例17-具有ITO/PEDOT:PSS/化合物1(4%)+CBP/TPBI/LiF/Al構型之OLED裝置之製作

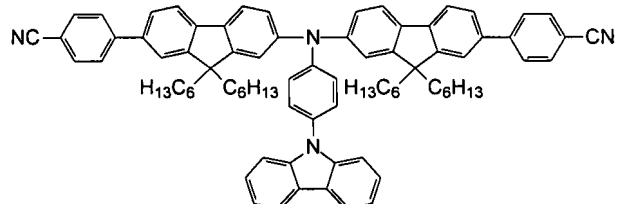
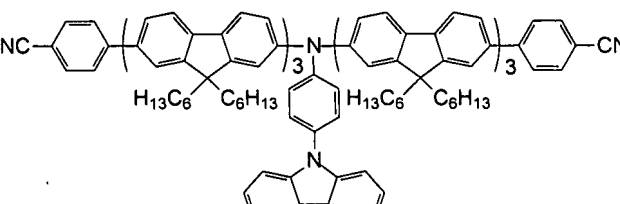
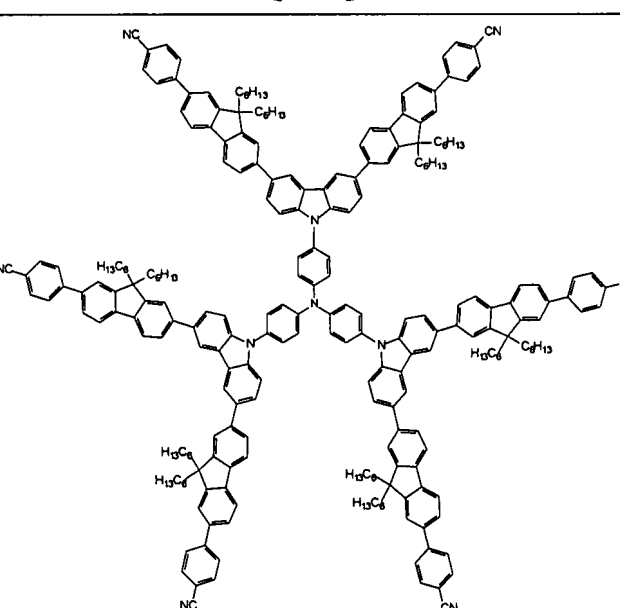
將1.2 mg化合物1及28.8 mg CBP溶於4 ml氯仿中並藉助0.45 μm PTFE過濾器過濾以供裝置製作用。發光裝置係在經圖案化氧化銻錫(ITO)塗佈之玻璃基板上製備。清潔基板並用氧電漿處理並經旋塗以具有45 nm摻雜有聚(苯乙烯磺酸)(PSS)之聚(3,4-伸乙基二氧基噻吩)(PEDOT)，隨後在120°C下在空氣中乾燥15 min。將發光分子溶液旋塗以形成厚度為約40 nm之發射層並轉移至處於 1×10^{-5} Pa真空下之室中。在發射層表面上沈積25 nm 1,3,5-參(苯基-2-苯并咪唑基)苯(TPBI)以供電子注入及電洞阻擋用。陰極由依序經熱沈積之0.5 nm LiF及150 nm Al組成。裝置之導通電壓為5.5 V。最大亮度為5630 cd/m^2 。在534 cd/m^2 (8.5 V)下在CIE坐標為(0.15, 0.08)時最大電流效率為2.83 cd/A。I-V-L特性及電流效率對電壓之曲線圖解說明於圖6及圖7中。

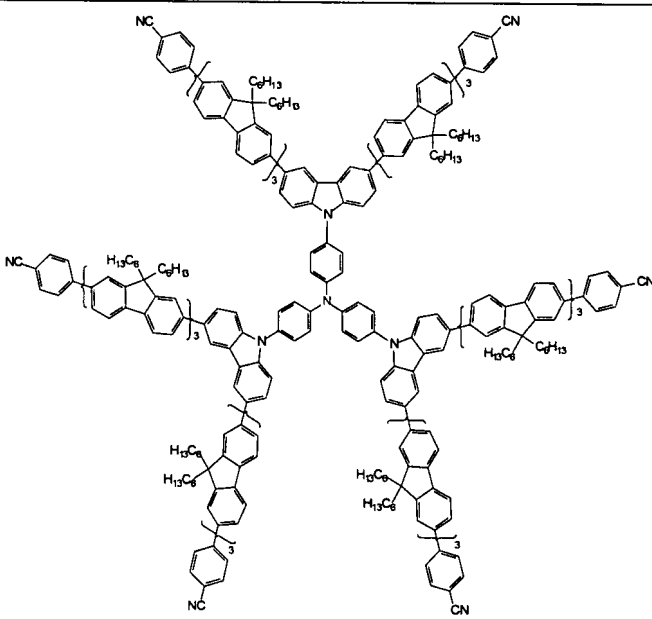
結果及分析

表1顯示自化合物1、化合物2及揭示於WO2008/069756A1中之比較化合物A及B在甲苯中之UV及PL光譜所獲得之值之比較。

包含電洞傳輸核心及3個或更多個周圍臂取代基之實例與其他具有更少臂之雙極化合物相比具有更小之偶極矩

(為進行比較，將 WO2008/069756A1 之化合物 A 及 B 報告於 1 中)。表 1 顯示本發明中所揭示化合物(化合物 1 及 2)與 WO2008/069756A1 之雙極化合物之間計算偶極矩之比較。當化學結構由兩個不對稱臂向六個對稱臂變化時，四種化合物在甲苯溶液中之 UV 及 PL 量測顯示吸收光譜及發射光譜二者均明顯藍移。

化合物	化學結構	偶極矩	UV λ_{\max} (nm) (溶劑)	PL λ_{\max} (nm)
A		4.564	384	442
B		0.838	378	432
1		3.058	355	409

2		-	368	412
---	--	---	-----	-----

化合物 1 至 4 之 UV 及光致發光 (PL) 光譜陳述於圖 2 及 3 中。

在圖 4 中將化合物 1 及化合物 2 之 UV 光譜與化合物 A 及 B 之光譜進行比較。

在圖 5 中將化合物 1 及化合物 2 之 PL 光譜與比較化合物 A 及 B 之光譜進行比較。因提供具有化合物 1 及 2 之多臂結構之化合物致使光譜向較低波長顯著移動。實際上，具支鏈多臂結構允許發射波長具有相當大的撓性：藉由適當調節分佈於多個臂中之發射部分，可達成波長之「調整」。

使用存於 CBP 中之 4% 化合物 1 及純淨化合物 1 作為發射層之 OLED 裝置之 I-V-L 特性示於圖 6 中。

自使用存於 CBP 中之 4% 化合物 1 及純淨化合物 1 作為發射層之 OLED 裝置獲得之電流效率對電壓之曲線示於圖 7 中。最大電流效率為 2.83 尤佳，尤其在與深藍色發射 (對應於顏色坐標 0.15, 0.08) 組合時。

【圖式簡單說明】

圖1顯示本文所述化合物之示意圖；

圖2顯示化合物1至4之UV光譜；

圖3顯示化合物1至4在甲苯中之光致發光(PL)光譜；

圖4顯示化合物1、化合物2及比較化合物A及B在甲苯中之UV光譜；

圖5顯示化合物1、化合物2及比較化合物A及B在甲苯中之PL光譜；

圖6顯示使用存於CBP中之4%化合物1及純淨化合物1作為發射層之OLED裝置之I-V-L特性；及

圖7顯示使用存於CBP中之4%化合物1及純淨化合物1作為發射層之OLED裝置之電流效率與電壓之關係曲線。

【主要元件符號說明】

10	化合物
12	核心部分
14、16、18	臂
20	缺電子部分
22	發射部分

發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：**99 123 183**

(GND) 20%
86 (2006.01)

※申請日：**99.7.14**

※IPC 分類：

(GK) 25%
58 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

有機雙極發光材料

(GK) 1%
66 (2006.01)

ORGANIC AMBIPOLAR LIGHT EMITTING MATERIALS

Holl 5%
50 (2006.01)

二、中文發明摘要：

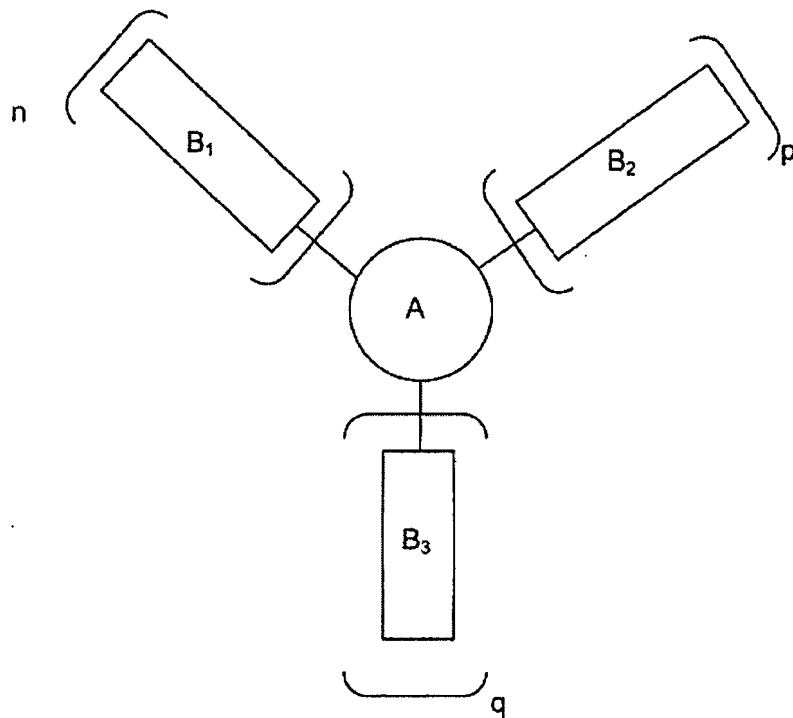
本發明提供藍色發光化合物，其包含：(1)電洞傳輸核心部分，該電洞傳輸核心部分包含三級氮部分；及(2)至少三個電子傳輸臂部分，其自該核心部分延伸，每一電子傳輸臂部分包含電子傳輸部分及發射部分。

三、英文發明摘要：

The present invention provides a blue light emitting compound comprising (1) a hole transporting core portion, which hole transporting core portion comprises a tertiary nitrogen portion; and (2) at least three electron transporting arm portions extending from the core portion, each electron transporting arm portion comprising an electron transporting portion and an emissive portion.

七、申請專利範圍：

1. 一種化合物，其包含：(1)電洞傳輸核心部分，該電洞傳輸核心部分包含三級氮部分；及(2)至少三個電子傳輸臂部分，其自該核心部分延伸，每一電子傳輸臂部分包含電子傳輸部分及發射部分。
2. 如請求項1之化合物，其中該等電子傳輸臂係實質上對稱地圍繞該核心部分排列。
3. 如請求項1或2之化合物，其中該化合物包含(3)至少一個額外臂部分，其中該(等)額外臂包含帶隙大於該(等)電子傳輸臂之該發射部分之帶隙的發射部分。
4. 如請求項1或2之化合物，其中臂部分之總數量為4或更多，較佳為6或更多。
5. 如請求項1或2之化合物，其中該化合物具有式I之結構：



(I)

其中：

核心部分 \textcircled{A} 包含至少一個含有三級氮之部分，其視情況經取代；

臂部分 $\boxed{B_1}$ 、 $\boxed{B_2}$ 及 $\boxed{B_3}$ 中之每一者獨立地包含芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基，且視情況經取代；

且

n、p及q中之每一者獨立地為1至50；

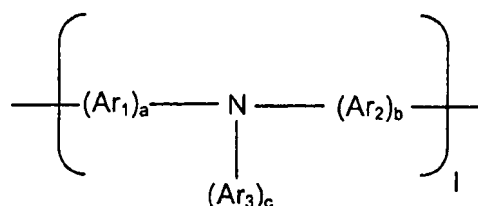
且其中

該等臂部分中之至少三者係發射電子傳輸臂部分，且獨立地包含發射部分及視情況經取代之缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

6. 如請求項5之化合物，其中該化合物具有0至4德拜(debye)之偶極矩。
7. 如請求項5之化合物，其中該等臂部分中之至少一者包含帶隙大於該發射電子傳輸臂部分之帶隙的補充發射部分。
8. 如請求項5之化合物，其中該三級氮部分係選自氮、三芳基胺及聚(芳基胺)。
9. 如請求項5之化合物，其中該核心部分包含一個、兩個、三個或更多個三級氮。
10. 如請求項5之化合物，其中n、p及q中之每一者獨立地為1至20，較佳為1至3。
11. 如請求項5之化合物，其中該核心部分 \textcircled{A} 具有式Ia之結



構：



(Ia)

其中

Ar₁、Ar₂及Ar₃中之每一者獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基、伸芳基伸乙炔基或胺基伸芳基，且視情況經取代；

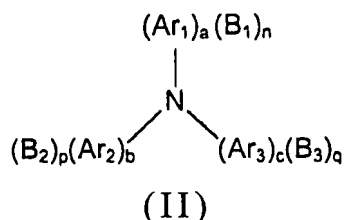
a、b及c中之每一者獨立地為0至20；且

l獨立地為1至20。

12. 如請求項11之化合物，其中，Ar₁、Ar₂及Ar₃中之每一者獨立地為C₅₋₁₀₀伸芳基、C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙烯基、C₅₋₁₀₀伸芳基伸乙炔基或胺基C₅₋₁₀₀伸芳基，較佳為C₅₋₃₀伸芳基、C₅₋₃₀伸芳基伸乙烯基、C₅₋₃₀伸芳基伸乙炔基或胺基C₅₋₃₀伸芳基，且視情況經取代。
13. 如請求項5之化合物，其中Ar₁、Ar₂及Ar₃中之任兩者係藉助單鍵、O、S、Si或視情況經取代之伸烷基彼此相連。
14. 如請求項5之化合物，其中Ar₁、Ar₂及Ar₃中之每一者獨立地為伸苯基、伸萸基、伸吡啶基、二芳基胺基、螺伸聯萸基、螺矽雜伸聯萸基、茛并伸吡啶基、茛并伸萸基或胺基芳基且視情況經取代。

15. 如請求項5之化合物，其中 Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者獨立地為伸苯基或伸萸基且視情況經取代。

16. 如請求項1或2之化合物，其中該化合物包含式II之結構：



其中：

Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 中之每一者係獨立地如請求項11或12中所定義；

B_1 、 B_2 及 B_3 中之每一者係獨立地如請求項5中所定義；

且

a 、 b 及 c 中之每一者係獨立地如請求項11中所定義；且

n 、 p 及 q 中之每一者係獨立地如請求項5或10中所定義；

且其中：

選自 $(B_1)_n$ 、 $(B_2)_p$ 及 $(B_3)_q$ 之至少三個 B_x 各自獨立地包含發射部分及視情況經取代之缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

17. 如請求項16之化合物，其中至少一個另外的 B_1 、 B_2 或 B_3 包含帶隙大於該發射部分之帶隙的補充發射部分。

18. 如請求項16之化合物，其中每一 B_1 獨立地為

$(Ar_4)_d(Ar_5)_e$ ，且其中每一 Ar_4 及每一 Ar_5 獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基且視情況經取代；且其中 d 及 e 中之每一者獨立地為 1 至 20。

19. 如請求項 18 之化合物，其中 d 及 e 中之每一者獨立地為 1 至 10，較佳為 1 至 3。

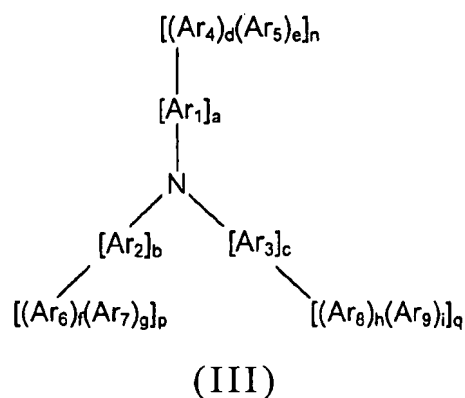
20. 如請求項 16 之化合物，其中每一 B_2 獨立地為 $(Ar_6)_f(Ar_7)_g$ ，且其中每一 Ar_6 及每一 Ar_7 獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基且視情況經取代；且 f 及 g 中之每一者獨立地為 1 至 20。

21. 如請求項 20 之化合物，其中 f 及 g 中之每一者獨立地為 1 至 10，較佳為 1 至 3。

22. 如請求項 16 之化合物，其中每一 B_3 獨立地為 $(Ar_8)_h(Ar_9)_i$ ，且其中每一 Ar_8 及每一 Ar_9 獨立地為伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基且視情況經取代；且 h 及 i 中之每一者獨立地為 1 至 20。

23. 如請求項 22 之化合物，其中 h 及 i 中之每一者獨立地為 1 至 10，較佳為 1 至 3。

24. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中該化合物具有式 III 之結構：



其中

Ar_1 、 Ar_2 及 Ar_3 係如請求項16中所定義；且

a 、 b 、 c 、 n 、 p 及 q 中之每一者係如請求項16中所定義；

且其中

Ar_4 、 Ar_5 、 Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 及 Ar_9 中之每一者係獨立地如請求項18至24中所定義；

d 、 f 及 h 中之每一者係獨立地如請求項18至23中所定義；且

e 、 g 及 i 中之每一者係獨立地如請求項18至23中所定義；

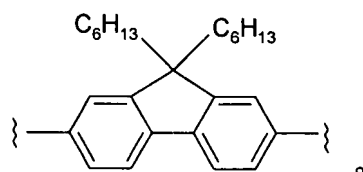
且其中

選自 $[(Ar_4)_d(Ar_5)_e]_n$ 、 $[(Ar_6)_f(Ar_7)_g]_p$ 及 $[(Ar_8)_h(Ar_9)_i]_q$ 之 Ar_5 、 Ar_7 及 Ar_9 中之至少三者各自獨立地包含缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基。

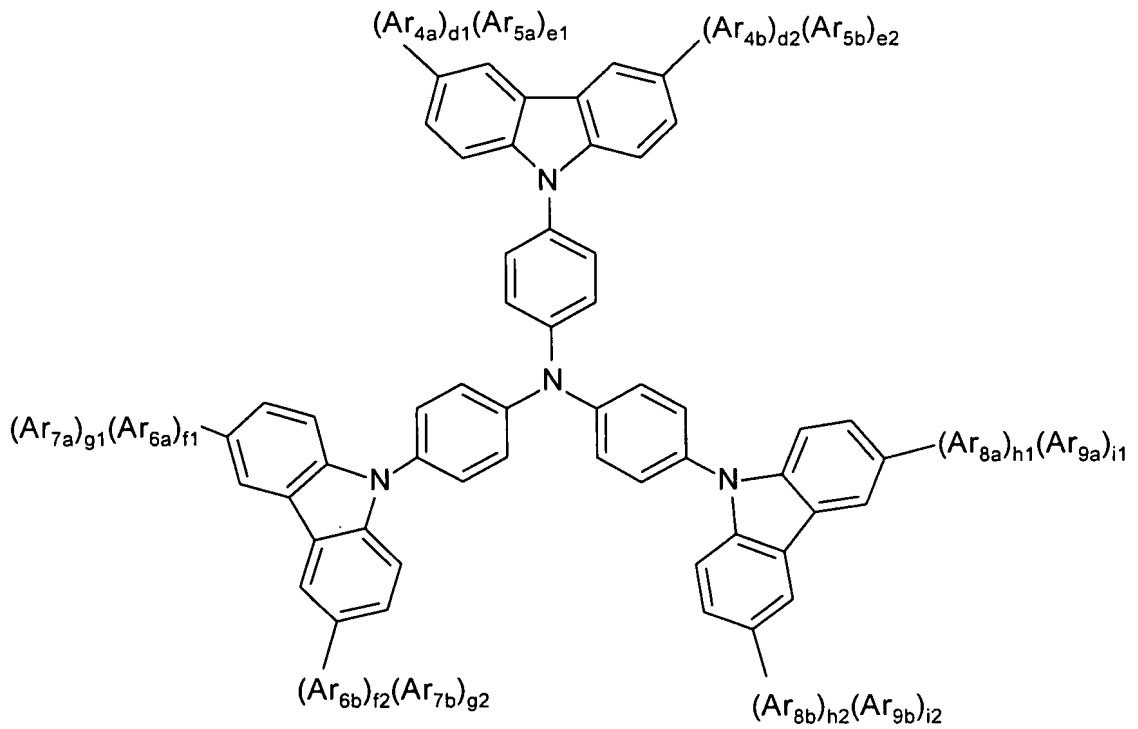
25. 如請求項24之化合物，其中 Ar_4 、 Ar_6 及 Ar_8 中之每一者獨立地為 C_{5-100} 伸芳基、 C_{5-100} 伸芳基伸乙烯基或 C_{5-100} 伸芳基伸乙炔基，較佳為 C_{5-30} 伸芳基、 C_{5-30} 伸芳基伸乙烯基或 C_{5-30} 伸芳基伸乙炔基，且視情況經取代。
26. 如請求項24之化合物，其中各對Ar基團 Ar_4 與 Ar_5 、 Ar_6 與 Ar_7 、及 Ar_8 與 Ar_9 中之任一者或多者係藉助單鍵、O、S、Si或視情況經取代之伸烷基彼此相連。
27. 如請求項24之化合物，其中 Ar_4 、 Ar_6 及 Ar_8 中之每一者獨立地為伸萘基且視情況經取代。



28. 如請求項 27 之化合物，其中 Ar₄、Ar₆ 及 Ar₈ 中之每一者獨立地為



29. 如請求項 24 之化合物，其中 Ar₅、Ar₇ 及 Ar₉ 中之每一者獨立地為 C₅₋₁₀₀ 伸芳基、C₅₋₁₀₀ 伸芳基伸乙烯基或 C₅₋₁₀₀ 伸芳基伸乙炔基，較佳為 C₅₋₃₀ 伸芳基、C₅₋₃₀ 伸芳基伸乙烯基或 C₅₋₃₀ 伸芳基伸乙炔基，且視情況經取代。
30. 如請求項 24 之化合物，其中 Ar₅、Ar₇ 及 Ar₉ 中之每一者獨立地係缺電子的。
31. 如請求項 24 之化合物，其中 Ar₅、Ar₇ 及 Ar₉ 中之每一者獨立地為經至少一個拉電子基團取代之伸芳基、伸芳基伸乙烯基或伸芳基伸乙炔基。
32. 如請求項 31 之化合物，其中每一拉電子基團係獨立地選自：鹵基、氰基、硝基、羰基、亞硫醯基、磺醯基及全氟烷基。
33. 如請求項 24 之化合物，其中 Ar₅、Ar₇ 及 Ar₉ 中之每一者獨立地為伸苯基且視情況經取代。
34. 如請求項 33 之化合物，其中 Ar₅、Ar₇ 及 Ar₉ 中之每一者獨立地為經氰基取代之伸苯基。
35. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中該化合物具有式 (IV) 之結構：



(IV)

其中

Ar_{4a} 及 Ar_{4b} 中之每一者係獨立地如請求項24中針對 Ar_4 所定義；

Ar_{5a} 及 Ar_{5b} 中之每一者係獨立地如請求項24中針對 Ar_5 所定義；

Ar_{6a} 及 Ar_{6b} 中之每一者係獨立地如請求項24中針對 Ar_6 所定義；

Ar_{7a} 及 Ar_{7b} 中之每一者係獨立地如請求項24中針對 Ar_7 所定義；

Ar_{8a} 及 Ar_{8b} 中之每一者係獨立地如請求項24中針對 Ar_8 所定義；且

Ar_{9a} 及 Ar_{9b} 中之每一者係獨立地如請求項24中針對 Ar_9 所定義；

且其中

d_1 及 d_2 中之每一者係獨立地如請求項 24 中針對 d 所定義；

e_1 及 e_2 中之每一者係獨立地如請求項 24 中針對 e 所定義；

f_1 及 f_2 中之每一者係獨立地如請求項 24 中針對 f 所定義；

g_1 及 g_2 中之每一者係獨立地如請求項 24 中針對 g 所定義；

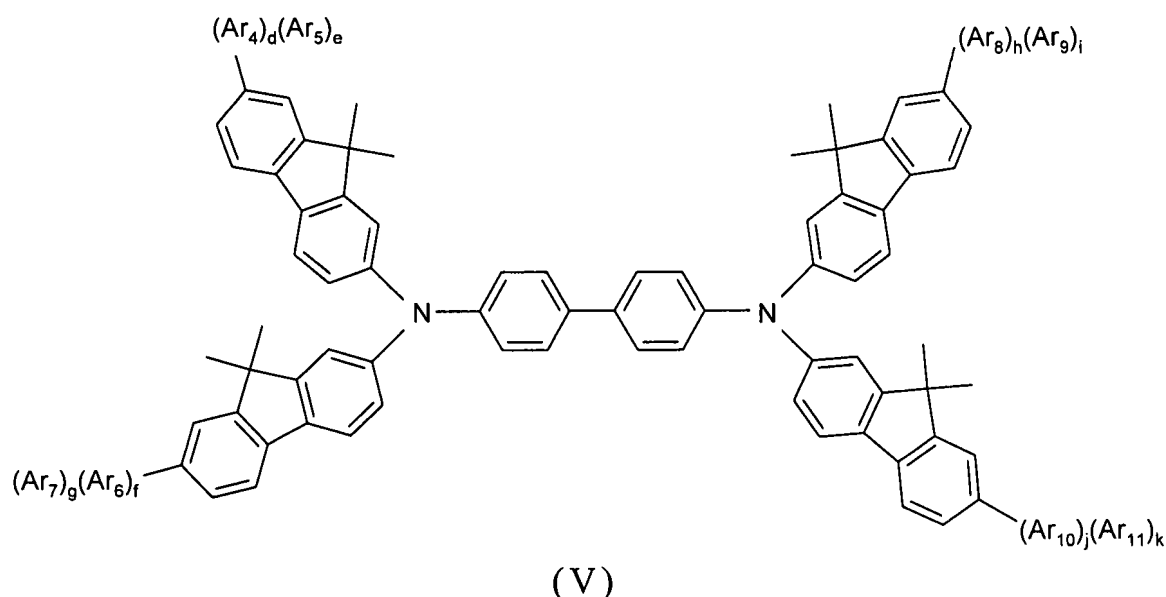
h_1 及 h_2 中之每一者係獨立地如請求項 24 中針對 h 所定義；且

i_1 及 i_2 中之每一者係獨立地如請求項 24 中針對 i 所定義；

且其中

選自 $(Ar_{4a})_{d1}(Ar_{5a})_{e1}$ 、 $(Ar_{4b})_{d2}(Ar_{5b})_{e2}$ 、 $(Ar_{6a})_{f1}(Ar_{7a})_{g1}$ 、 $(Ar_{6b})_{f2}(Ar_{7b})_{g2}$ 、 $(Ar_{8a})_{h1}(Ar_{9a})_{i1}$ 及 $(Ar_{8b})_{h2}(Ar_{9b})_{i2}$ 之 Ar_{5a} 、 Ar_{5b} 、 Ar_{7a} 、 Ar_{7b} 、 Ar_{9a} 及 Ar_{9b} 中之至少三者各自獨立地為缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基且視情況經取代。

36. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中該化合物具有式 (V) 之結構：



其中

Ar_4 、 Ar_5 、 Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 及 Ar_9 中之每一者係獨立地如請求項24中所定義；

Ar_{10} 係獨立地如請求項24中針對 Ar_4 所定義；

Ar_{11} 係獨立地如請求項24中針對 Ar_5 所定義；

d 、 e 、 f 、 g 、 h 及 i 中之每一者係獨立地如請求項24中所定義；

j 係獨立地如請求項24中針對 d 所定義；且

k 係獨立地如請求項24中針對 e 所定義；

且其中

選自 $(Ar_4)_d(Ar_5)_e$ 、 $(Ar_6)_f(Ar_7)_g$ 、 $(Ar_8)_h(Ar_9)_i$ 及 $(Ar_{10})_j(Ar_{11})_k$ 之 Ar_5 、 Ar_7 、 Ar_9 及 Ar_{11} 中之至少三者各自獨立地為缺電子芳基、芳基伸乙烯基或芳基伸乙炔基且視情況經取代。

37. 一種薄膜，其包含如請求項1至36中任一項之化合物。

38. 一種發光裝置，其包含如請求項1至36中任一項之化合物或如請求項37之薄膜。

八、圖式：

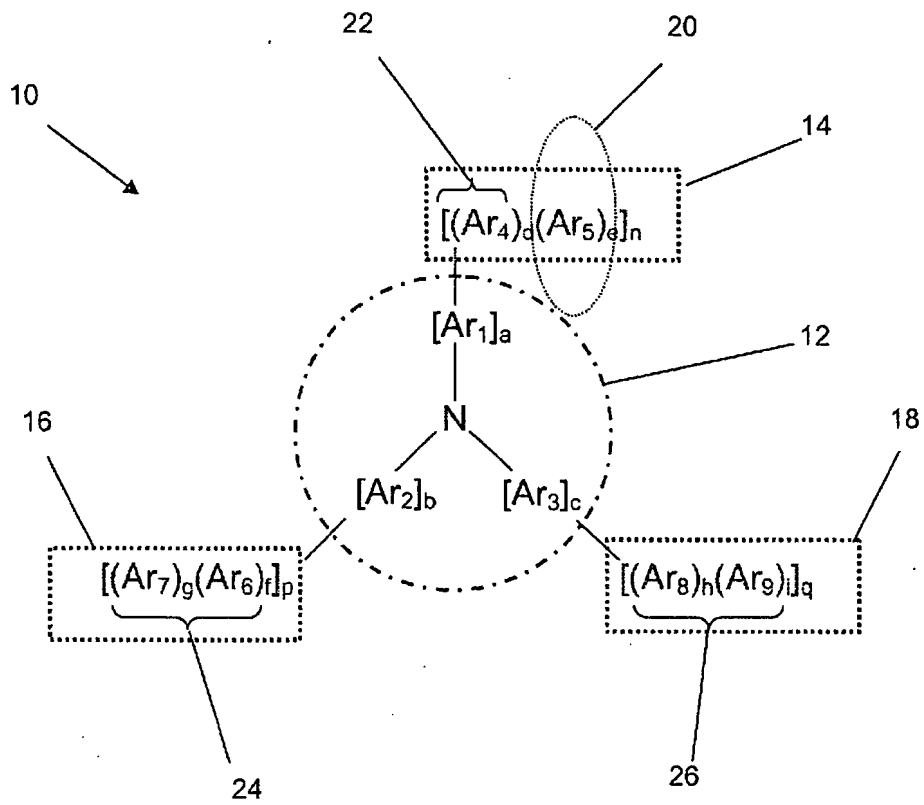


圖 1

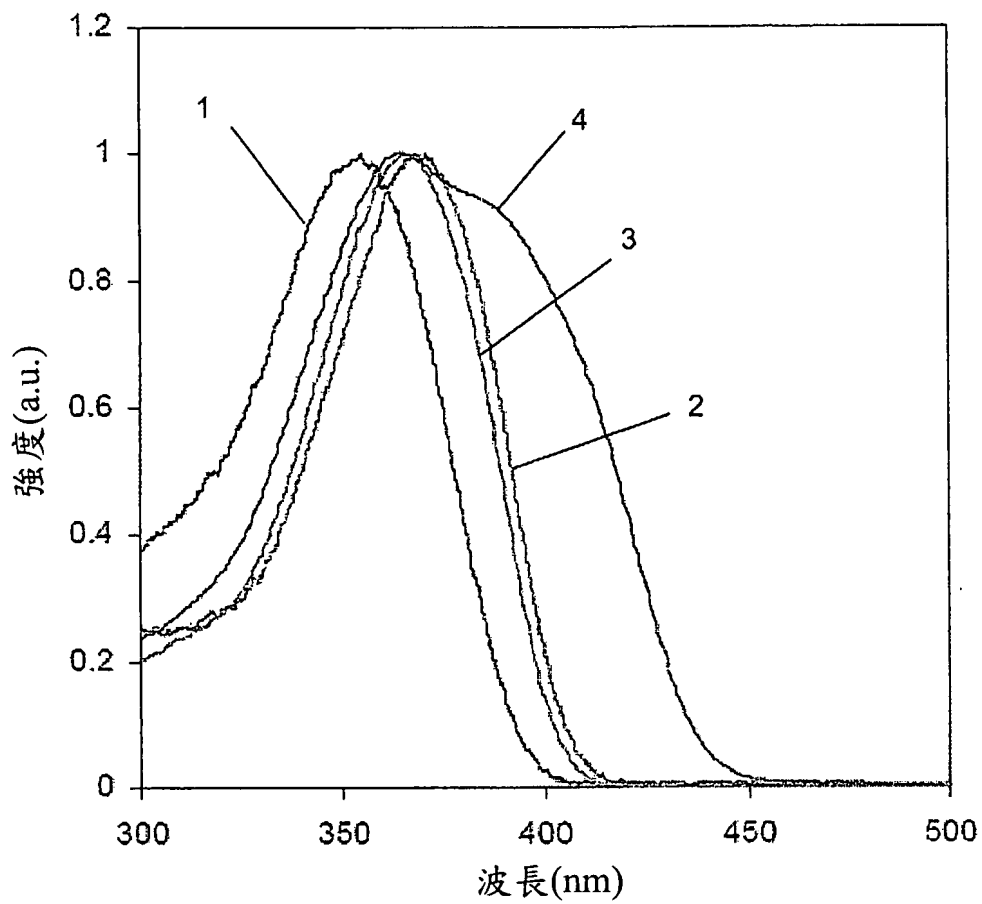


圖 2



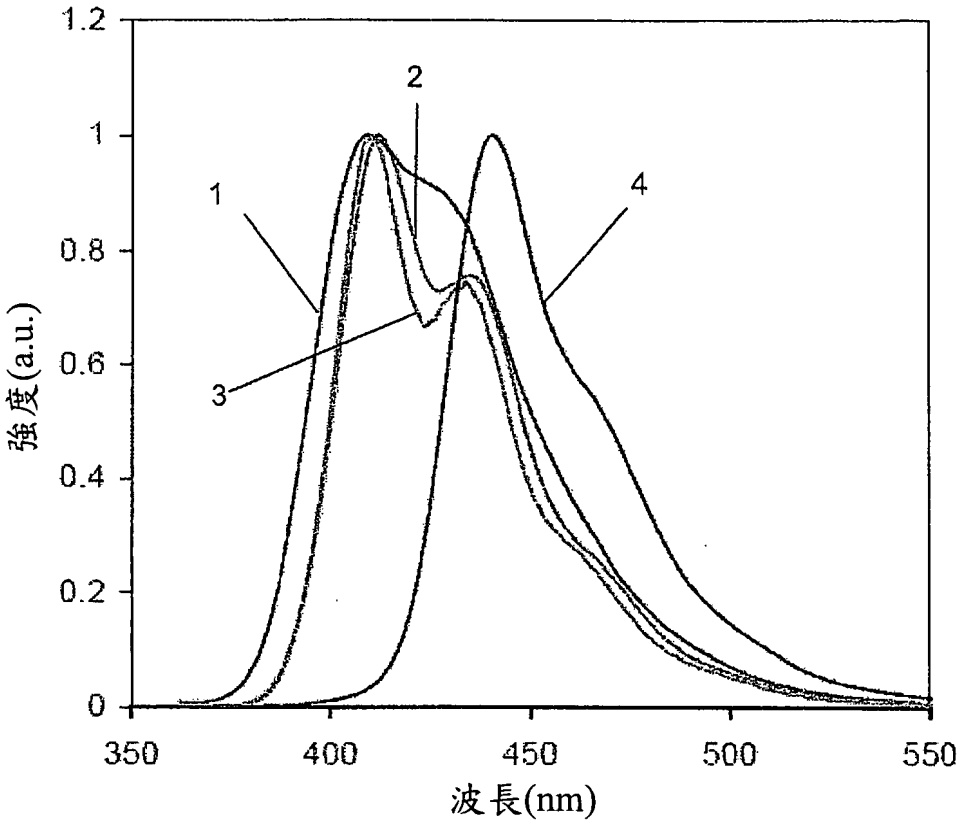


圖 3

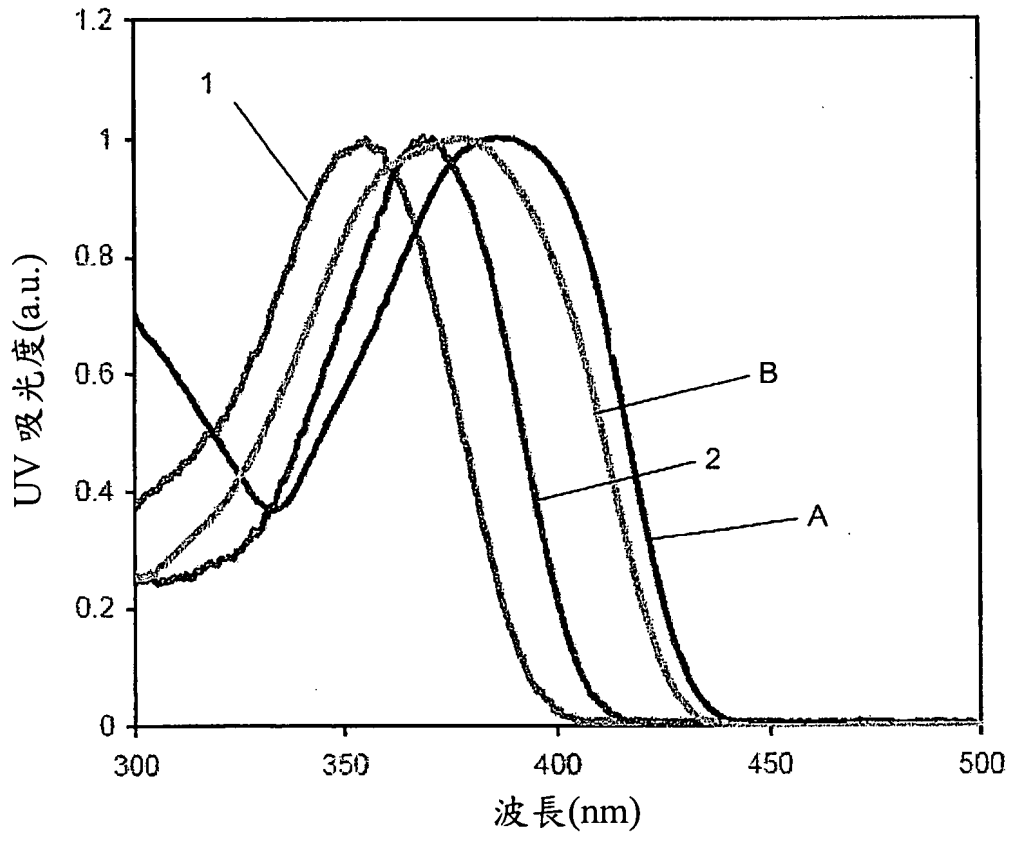


圖 4



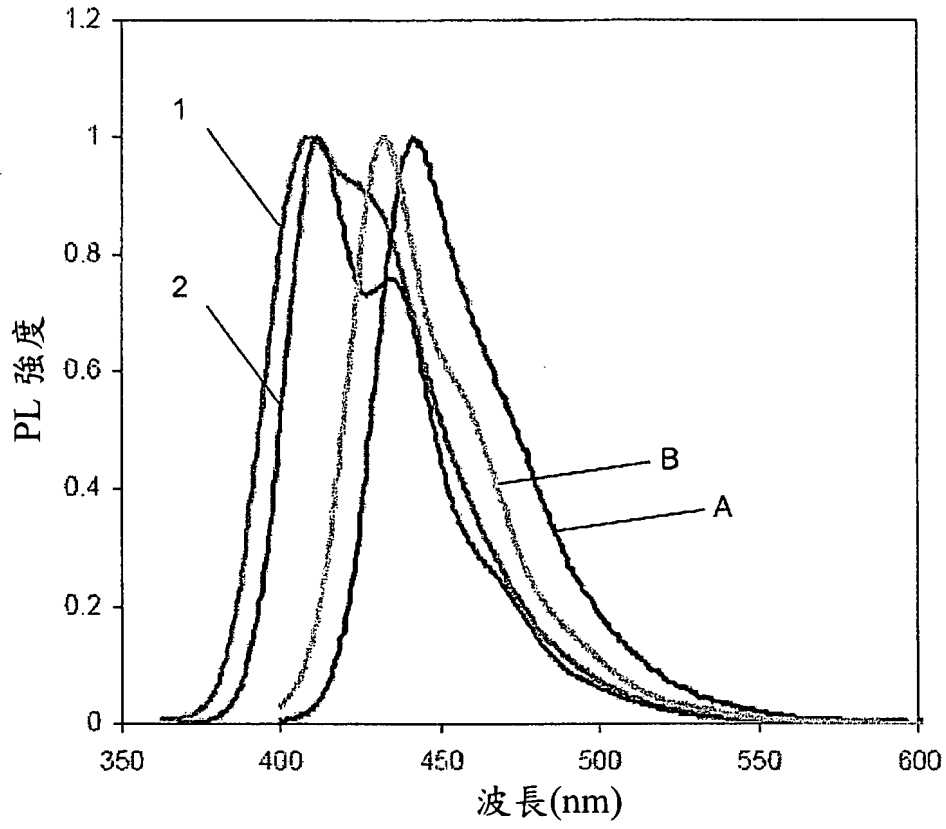


圖 5

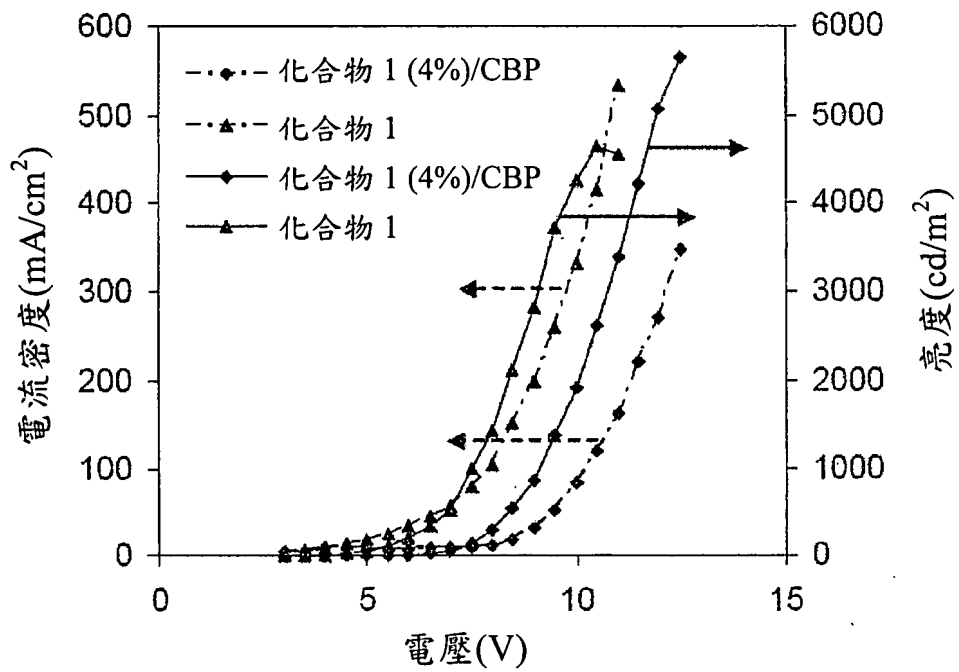


圖 6



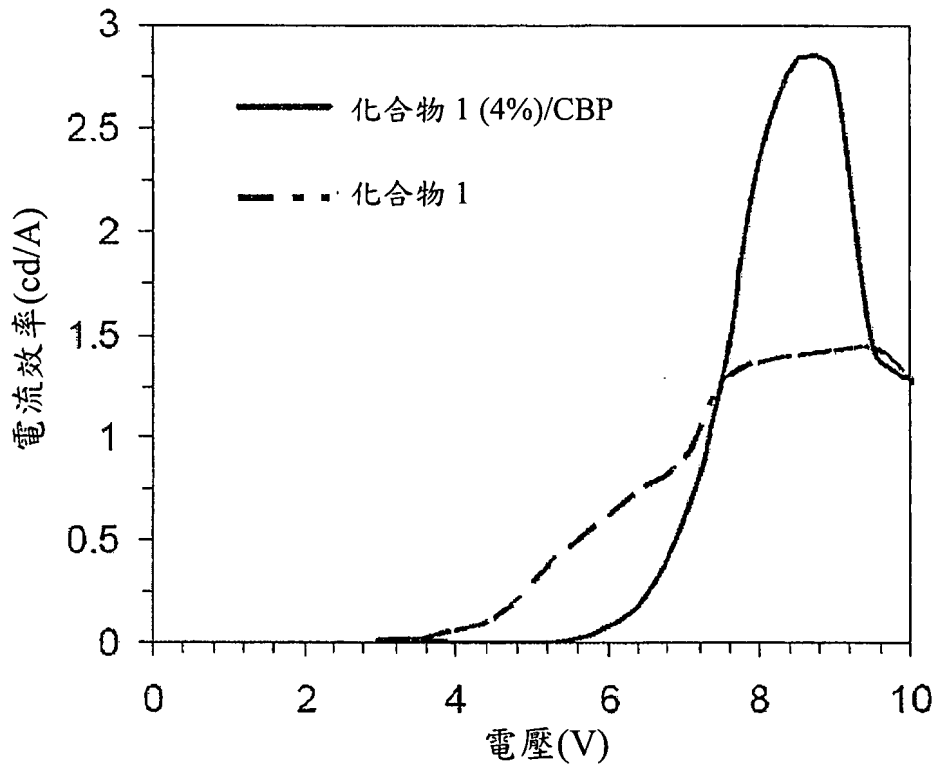


圖 7

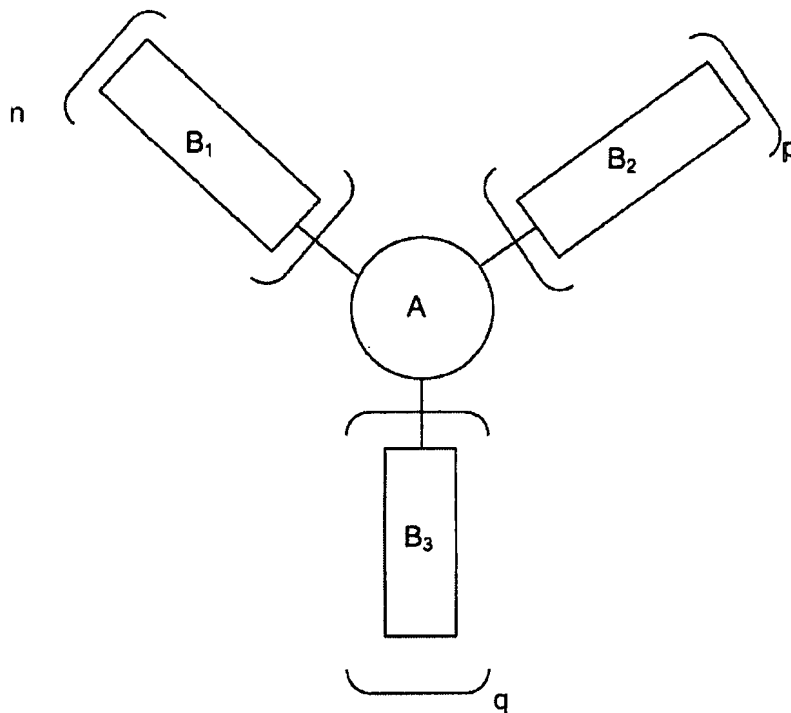
四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第(1)圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

10	化合物
12	核心部分
14、16、18	臂
20	缺電子部分
22	發射部分

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：



(I)