



(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 I607077 B

(45) 公告日：中華民國 106 (2017) 年 12 月 01 日

(21) 申請案號：102145477

(22) 申請日：中華民國 102 (2013) 年 12 月 10 日

(51) Int. Cl. : C09K11/06 (2006.01)

H01L51/54 (2006.01)

(30) 優先權：2012/12/10 美國

61/735,488

(71) 申請人：日東電工股份有限公司 (日本) NITTO DENKO CORPORATION (JP)
日本

(72) 發明人：鄭世君 ZHENG, SHIJUN (CN)

(74) 代理人：楊長峯

(56) 參考文獻：

US 2009/0134783A1

US 2010/0326526A1

US 2012/0223635A1

審查人員：陳建安

申請專利範圍項數：12 項 圖式數：2 共 102 頁

(54) 名稱

有機發光主體材料

ORGANIC LIGHT EMITTING HOST MATERIALS

(57) 摘要

雜芳基-芳基化合物，如由化學式所表示的化合物，可在電子裝置如有機發光裝置中使用。舉例來說，此化合物可被使用作為發光層中的發光材料。

Heteroaryl-aryl compounds such as compounds represented by Formula may be used in electronic devices such as organic light-emitting devices. For example, the compounds may be used as an emissive material in an emissive layer.

指定代表圖：

35
30
20
15
10
5

符號簡單說明：

5 . . . 陽極

10 . . . 電洞注入層

15 . . . 電洞傳輸層

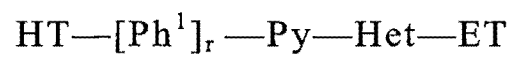
20 . . . 發光層

30 . . . 電子傳輸層

35 . . . 陰極

第 1 圖

特徵化學式：



化學式 1a

【發明說明書】

【中文發明名稱】有機發光主體材料

【英文發明名稱】ORGANIC LIGHT EMITTING HOST MATERIALS

【技術領域】

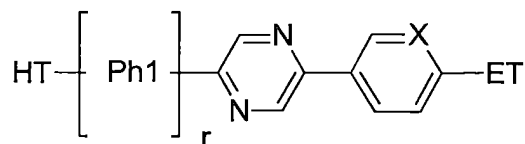
【0001】本實施例係關於一種用於裝置中的發光層的發光化合物。

【先前技術】

【0002】有機發光裝置(Organic light-emitting devices,OLED)在照明以及顯示應用上變得日益重要。OLED 可包含發光(emissive)或發光(light-emitting)層，其含有主體材料以及散佈在主體材料內的發光成分。OLED 的發光材料可能會有低穩定性的問題。發光材料潛在的缺陷可能會導致包含發光材料的裝置之低效率以及短壽命。

【發明內容】

【0003】一些實施例包含下列化學式的發光化合物：



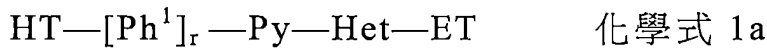
化學式 1

其中，HT 是選擇性地經取代的二苯胺或選擇性地經取代的苯基(萘基)胺(phenyl(naphthyl)amine)，其中 Ph1 是對-伸苯基，其中 ET 是選擇性地經取代的苯並咪唑-2-基、選擇性地經取代的苯並噁唑-2-基、或選擇性地經取代的苯並噻唑-2-基，其中 X 為 CH 或

N，且其中 r 是 1、2、3。

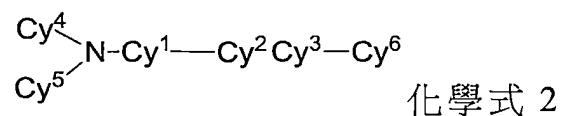
【0004】相對於化學式 1，在一些實施例中，HT 是未經取代的二苯胺(diphenylamine)、經單取代的二苯胺、經二取代的二苯胺、未經取代的苯基(萘基)胺、經單取代的苯基(萘基)胺、及/或未經取代的咪唑基。在一些實施例中，ET 是未經取代的苯並咪唑-2-基。

【0005】一些實施例包含由化學式 1a 表示的化合物：



其中 HT 是選擇性地經取代的二苯胺或選擇性地經取代的苯基(萘基)胺；各 Ph^1 獨立地為選擇性經取代的對-伸苯基，其中直接鍵結於 HT 之對-伸苯基可選擇性地形成鍵結於 HT 的苯基，以形成一個三環系統；Py 是選擇性經取代的伸吡嗪-2,5-基；Het 是選擇性經取代的對-伸苯基或選擇性經取代的伸吡啶-2,5-基；ET 是選擇性經取代的苯並咪唑-2-基、選擇性經取代的苯並噁唑-2-基、或選擇性經取代的苯並噻唑-2-基；且 r 是 1、2、或 3。

【0006】一些實施例包含由化學式 2 表示的化合物：

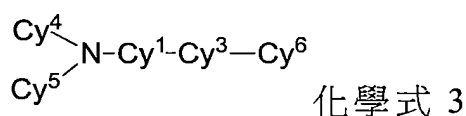


其中 Cy^1 為選擇性地以 1 或 2 個獨立地選自 C_{1-6} 烷基及 F 的取代基所取代之對-伸苯基； Cy^2 獨立地為選擇性地以 1、2、或 3 個獨立地選自 C_{1-6} 烷基及 F 的取代基所取代之 2,5-吡啶基、或選擇性地以 1、2、或 3 個獨立地選自 C_{1-6} 烷基及 F 的取代基所取代之吡嗪； Cy^3 為選擇性地以 1、2、或 3 個獨立地選自 C_{1-6} 烷基及 F 的取代基所取代之伸吡啶-2,5-基、或選擇性地以 1 或 2 個獨立地選

自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基所取代之對-伸苯基；Cy⁴ 以及 Cy⁵ 獨立地為選擇性經取代的苯基或選擇性經取代的萘基，其中 Cy¹ 及 Cy⁵ 以其附接之氮原子可連接以形成咪唑環體系；且 Cy⁶ 是選擇性地以 1、2、3、4、或 5 個獨立地選自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基所取代之 1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基。

【0007】 對於化學式 2，在一些實施例中，Cy¹、及 Cy² 獨立地為選擇性以 1 或 2 個獨立地選自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基所取代之對-伸苯基；Cy⁴ 是選擇性地以 1、2 或 3 個獨立地選自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基所取代之苯基；Cy⁵ 是選擇性地以 1、2 或 3 個獨立地選自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基所取代之苯基、或選擇性地以 1、2、或 3 個獨立地選自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基所取代之萘-1-基或萘-2-基；且 Cy⁶ 是選擇性地以 1、2、3、4、或 5 個獨立地選自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基所取代之 1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基。

【0008】 一些實施例包含由化學式 3 表示的化合物：



其中 Cy¹ 為選擇性經取代的對-伸苯基；Cy³ 選自選擇性經取代的 2,5-吡嗪-3'-吡啶、選擇性經取代的 2,5-吡嗪-2',5'-苯基、選擇性經取代的 2,5-聯吡啶基、選擇性經取代的 3,3'-雙吡啶基、及選擇性經取代的 3,2':5',3''-三聯吡啶基；Cy⁴ 及 Cy⁵ 是選擇性經取代的苯基或選擇性經取代的萘基；且 Cy⁶ 是選擇性經取代的 1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基。

【0009】 相對於化學式 3，在一些實施例中，Cy¹ 為選擇性經取代的間苯基(interphenylene)、獨立地選擇性以 H、F、甲基、乙基、丙基、或異丙基取代；其中 Cy³ 獨立地選擇性以 H、F、甲基、乙

基、丙基、或異丙基所取代，其中 Cy⁴ 獨立地選擇性以 H、F、甲基、乙基、丙基、或異丙基取代；其中 Cy⁵ 獨立地選擇性以 H、F、甲基、乙基、丙基、或異丙基取代；其中 Cy⁶ 獨立地選擇性以 H、F、甲基、乙基、丙基、或異丙基取代。

【0010】 一些實施例包含選擇性經取代的[(對-伸苯基-對-吡咯基)]化合物([(para-phenylenyl-para-azolyl)]compounds)，包含選擇性經取代的 N,N-二苯基-4-(6-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)吡啶-3-基)苯胺 (N,N-diphenyl-4-(6-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyridin-3-yl)aniline)；N-苯基-N-(4'-(6-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)吡啶-3-基)-[1,1'-聯苯]-4-基)萘-1-胺 (N-phenyl-N-(4'-(6-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyridin-3-yl)-[1,1'-biphenyl]-4-yl)naphthalen-1-amine)；4'-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[3,3'-聯吡啶]-6-基)-N,N-二-對甲苯基-[1,1'-聯苯]-4-胺 (4'-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[3,3'-bipyridin]-6-yl)-N,N-di-p-tolyl-[1,1'-biphenyl]-4-amine)；9,9-二甲基-N,N-二苯基-7-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[3,3'-聯吡啶]-6-基)-9H-芴-2-胺 (9,9-dimethyl-N,N-diphenyl-7-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[3,3'-bipyridin]-6-yl)-9H-fluoren-2-amine)；N,N-二苯基-4'-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[3,3'-聯吡啶]-6-基)-[1,1'-聯苯]-4-胺 (N,N-diphenyl-4'-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[3,3'-bipyridin]-6-yl)-[1,1'-biphenyl]-4-amine)；4-甲基-N-(4-(6'-(1-苯基

-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[3,3'-聯吡啶]-6-基)苯基)-N-(對甲苯基)苯胺

(4-methyl-N-(4-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[3,3'-bipyridin]-6-yl)phenyl)-N-(p-tolyl)aniline) ; N-苯基-N-(4-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[3,3'-聯吡啶]-6-基)苯基)萘-1-胺
(N-phenyl-N-(4-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[3,3'-bipyridin]-6-yl)phenyl)naphthalen-1-amine) ; 9,9-二甲基-7-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[3,3'-聯吡啶]-6-基)-N,N-二-對甲苯基-9H-芴 -2- 胺

(9,9-dimethyl-7-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[3,3'-bipyridin]-6-yl)-N,N-di-p-tolyl-9H-fluoren-2-amine) ; N,N-二苯基-4'-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[2,3'-聯吡啶]-5-基)-[1,1'-聯苯]-4- 胺

(N,N-diphenyl-4'-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[2,3'-bipyridin]-5-yl)-[1,1'-biphenyl]-4-amine) ; 4'-(3-甲基-6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[2,3'-聯吡啶]-5-基)-N,N-二苯基-[1,1'-聯苯]-4-胺

(4'-(3-methyl-6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[2,3'-bipyridin]-5-yl)-N,N-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4-amine) 、 N-苯基-N-(4'-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[2,3'-聯吡啶]-5-基)-[1,1'-聯苯]-4-基)萘-2-胺
(N-phenyl-N-(4'-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[2,3'-bipyridin]-5-yl)-[1,1'-biphenyl]-4-yl)naphthalen-2-amine) ; N-苯基-N-(4'-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[2,3'-聯吡啶]-5-基)-[1,1'-聯苯]-4-基)萘-1-胺
(N-phenyl-N-(4'-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[2,3'-bip

yrudin]-5-yl)-[1,1'-biphenyl]-4-yl)naphthalen-1-amine) ; 4- 甲基-N-(4-(6'-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[2,3'-聯吡啶]-5-基)苯基)-N-(對-甲苯基)苯胺(4-methyl-N-(4-(6'-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[2,3'-bipyridin]-5-yl)phenyl)-N-(p-tolyl)aniline) ; N,N-二苯基-4-(6-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)-[3,2':5',3''-三聯吡啶]-6''-基)苯胺(N,N-diphenyl-4-(6-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-[3,2':5',3''-terpyridin]-6''-yl)aniline)等。

【0011】 一些實施例包括含有本文所述的化合物的發光裝置。

【0012】 這些及其它實施例在本文中會更詳細地描述。

【圖式簡單說明】

【0013】 第 1 圖是 OLED 包含本文公開的化合物的一個實施例的示意圖。

【0014】 第 2 圖是範例 2 中所描述的 OLED 的一個實施例的示意圖。

【實施方式】

【0015】 除非另有說明，否則當一個化合物或化學結構特徵，如芳基被稱為是「選擇性經取代的」時，其指該特徵可不具取代基(即是未經取代的)或可具有一或多個取代基。為「經取代的」的特徵具有一或多個取代基。用語「取代基」具有本技術領域具有通常知識者習知的普通含義。在一些實施例中，取代基可以是本

技術領域習知的普通有機基團，其可具有分子量(例如，取代基的原子的原子量的總和)為 15g/mol 至 50g/mol、15 g/mol 至 100 g/mol、15 g/mol 至 200 g/mol、15 g/mol 至 300 g/mol、或 15 g/mol 至 500 g/mol。在一些實施例中，取代基包含：0 至 30、0 至 20、0 至 10、或 0 至 5 個碳原子；以及獨立地選自：N、O、S、Si、F、Cl、Br、或 I 之 0 至 30、0 至 20、0 至 10、或 0 至 5 個雜原子；提供包含至少一原子選自：C、N、O、S、Si、F、Cl、Br、或 I 的取代基。取代基的範例包含但不限於烷基、烯基、炔基、雜烷基、雜烯基、雜炔基、芳基、雜芳基、羥基、烷氧基、芳氧基、醯基、醯氧基、烷基羧酸酯、巰基、烷硫基、氰基、鹵素、硫羰基、O-胺甲醯基(O-carbamyl)、N-胺甲醯基(N-carbamyl)、O-胺硫甲醯基(O-thiocarbamyl)、N-胺硫甲醯基、C-醯胺基、N-醯胺基、S-磺醯胺基、N-磺醯胺基、異氰酸基、氰硫基、異硫氰基、硝基、甲矽烷基、亞氧硫基、亞磺醯基、磺醯基、鹵代烷基、鹵烷氧基、三鹵甲烷磺醯基(trihalomethanesulfonyl)、三鹵甲烷磺醯胺基(trihalomethanesulfonamido)、胺基等。在一些實施例中，兩個取代基可結合以形成一個環。

【0016】 如本文所用的術語「烷基」具有在本技術領域中一般最廣泛理解的含義，並且可包含由不含有雙鍵或三鍵的碳以及氫組成的基團。烷基可以是直鏈烷基、支鏈烷基、環烷基、或其之組合，且在一些實施例中，可含有 1 至 3 至 5 個碳原子。在一些實施例中，烷基可以包含 C₁₋₁₀ 直鏈烷基，例如甲基(-CH₃)、乙基(-CH₂CH₃)、正丙基(-CH₂CH₂CH₃)、正丁基(-CH₂CH₂CH₂CH₃)、正戊基(-CH₂CH₂CH₂CH₂CH₃)、正己基(-CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂CH₃)等；C₃₋₁₀ 支鏈烷基，如 C₃H₇(例如異丙基)、C₄H₉(例如，支鏈丁基異構

體)、 C_5H_{11} (如支鏈戊基異構體)、 C_6H_{13} (如支鏈己基異構體)、 C_7H_{15} (如庚基異構體)等； C_{3-10} 環烷基、如 C_3H_5 (例如環丙基)、 C_4H_7 (例如，環丁基異構體如環丁基、甲基環丙基等)、 C_5H_9 (如環戊基異構體如環戊基、甲基環丁基、二甲基環丙基等)、 C_6H_{11} (例如環己基異構體)、 C_7H_{13} (例如環庚基異構體)等；以及類似物。

【0017】 如本文所用，術語「烷氧基」包含-O-烷基，如-OCH₃、-OC₂H₅、-OC₃H₇(例如，丙氧基異構體如異丙氧基、正丙氧基等)、-OC₄H₉(例如丁氧基(butyoxy)異構體)、-OC₅H₁₁(例如戊氧基異構體)、-OC₆H₁₃(例如己氧基異構體)、-OC₇H₁₅(例如庚氧基異構體)等。

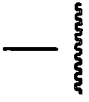
【0018】 對於選擇性經取代的基團，例如選擇性經取代的烷基，詞組如「選擇性經取代的 C_{1-12} 烷基」是指 C_{1-12} 烷基，其可以是未經取代的，或者可以具有一個或多個取代基，且不限制在任何取代基中碳原子的數目。詞組如「 C_{1-12} 選擇性經取代的烷基」指的是未經取代的 C_{1-12} 烷基或經取代的烷基，其中兩個烷基母體(alkyl parent)及所有取代基都具有 1-12 個碳原子。類似的模式可以適用於其它選擇性經取代的基團如芳基以及雜芳基上。

【0019】 烷基上的取代基可以與上述的一般描述相同，不同之處在於烷基可能未必具有烷基取代基。在一些實施例中，烷基上的取代基獨立地選自 F、Cl、Br、I、CN、CO₂H、-O-烷基、酯基、醯基、胺基、以及醯胺基團，且可以具有約 15 至約 100 或約 500 的分子量。

【0020】 為了方便起見，術語「分子量」是用來論及分子的基團或部分來表示分子的基團或部分的原子之原子量之總和，即便其

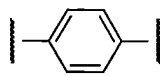
可能不是完整的分子。

【0021】 與本文提及的某些化學名稱相關聯的結構如下所示。這些結構可以是未經取代的，如下圖所示，或取代基可獨立地位於結構未經取代時通常被氫原子佔據的任何位置。除非連接點表示

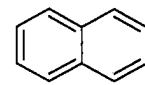
如 ，否則附接可能會發生在通常由氫原子佔據的任何位置。



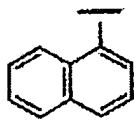
苯基



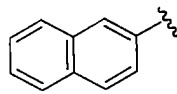
對-伸苯基



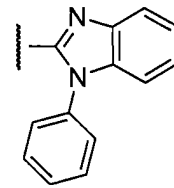
萘



萘-1-基

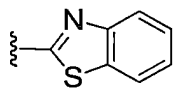


萘-2-基

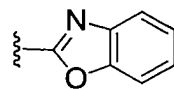


1-苯基-1H-苯並[d]

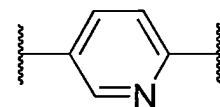
咪唑-2-基



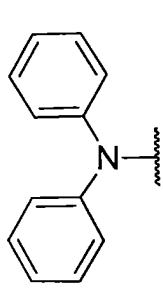
苯並噻唑-2-基



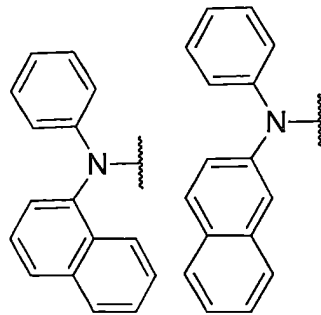
苯並噁唑-2-基



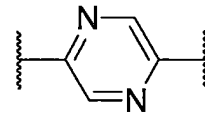
伸吡啶-2,5-基



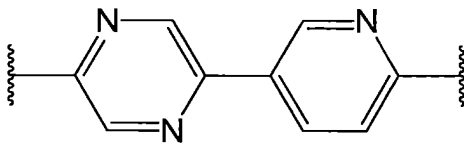
二苯胺



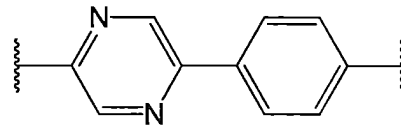
苯基(萘基)胺



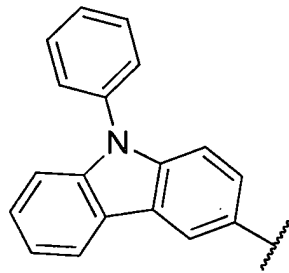
伸吡嗪-2,5-基



2,5-吡嗪基-3'-吡啶

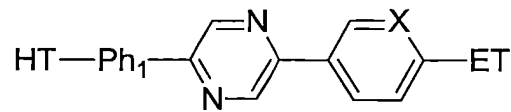


2,5-吡嗪-2',5'-苯基

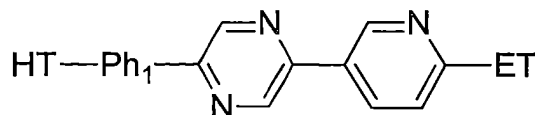


9-苯基咔唑-3-基

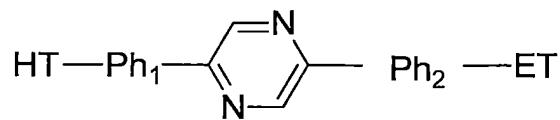
【0022】 在一些實施例中，化合物提供由下列化學式表示：



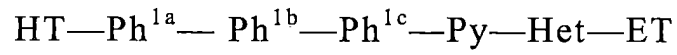
化學式 4



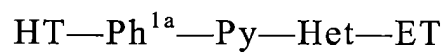
化學式 5



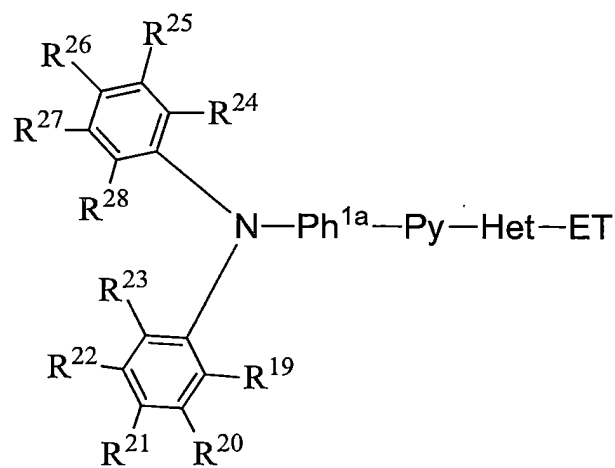
化學式 6



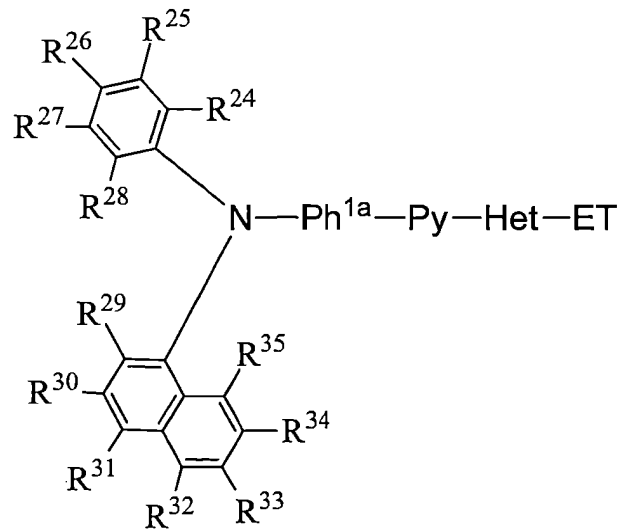
化學式 7



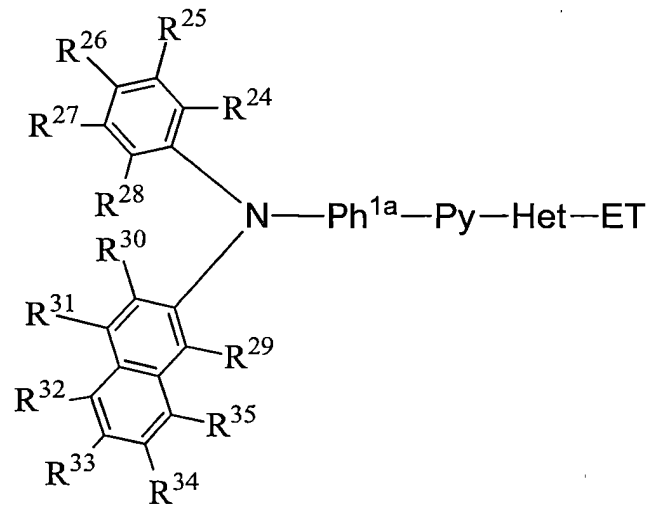
化學式 8



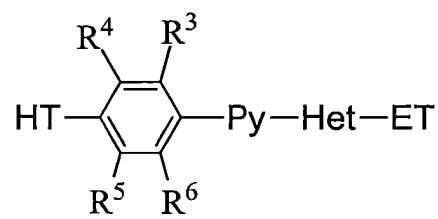
化學式 9



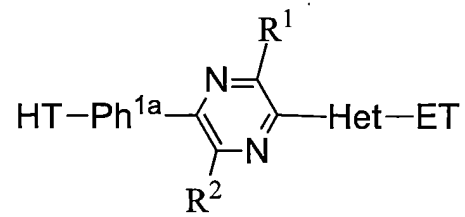
化學式 10



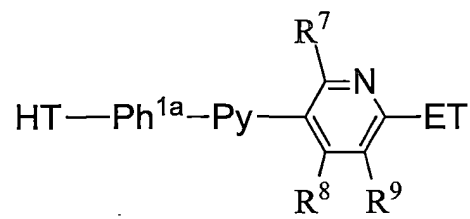
化學式 11



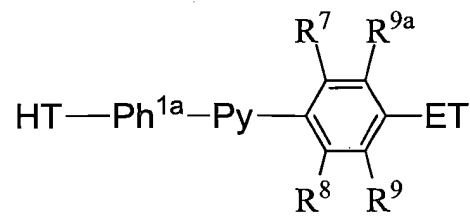
化學式 12



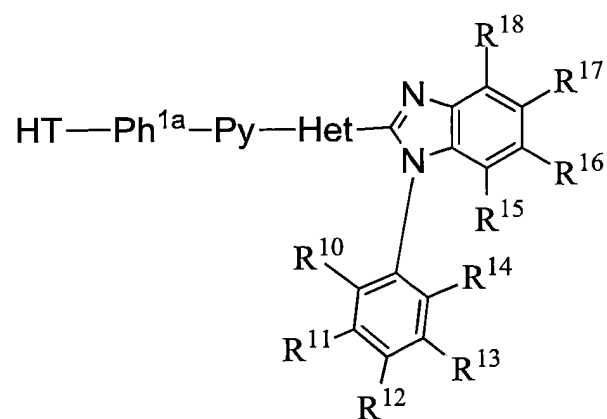
化學式 13



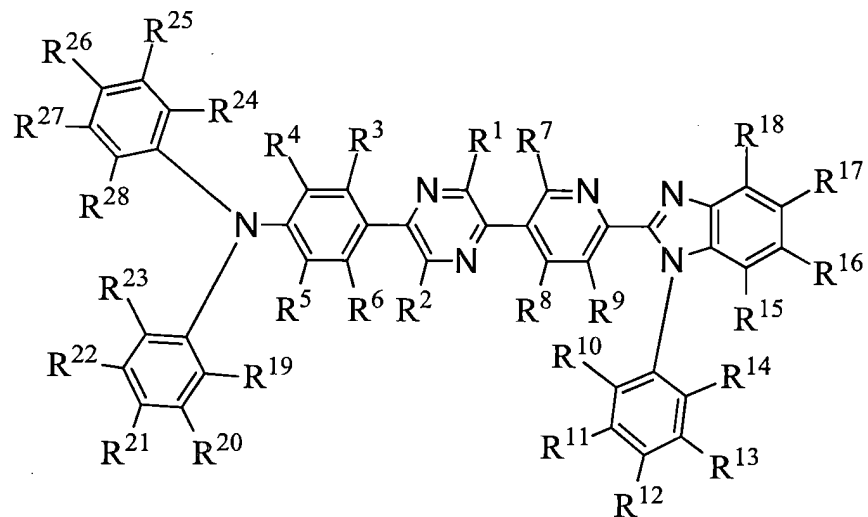
化學式 14



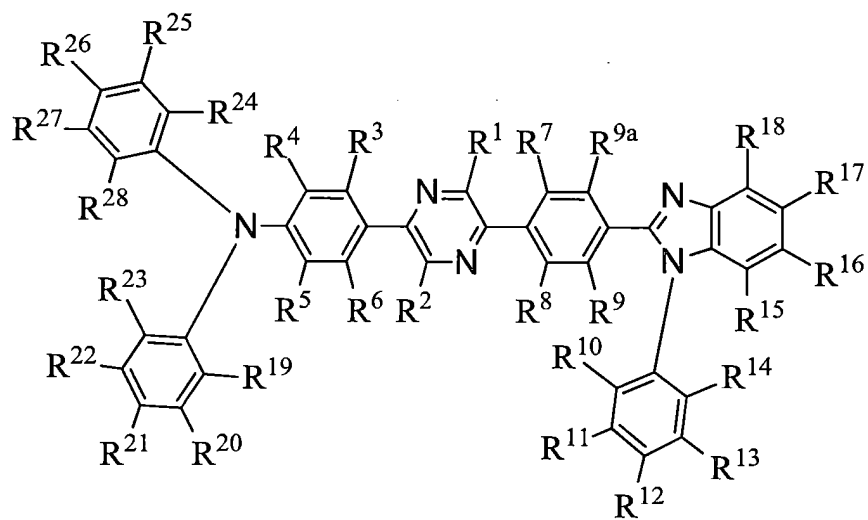
化學式 15



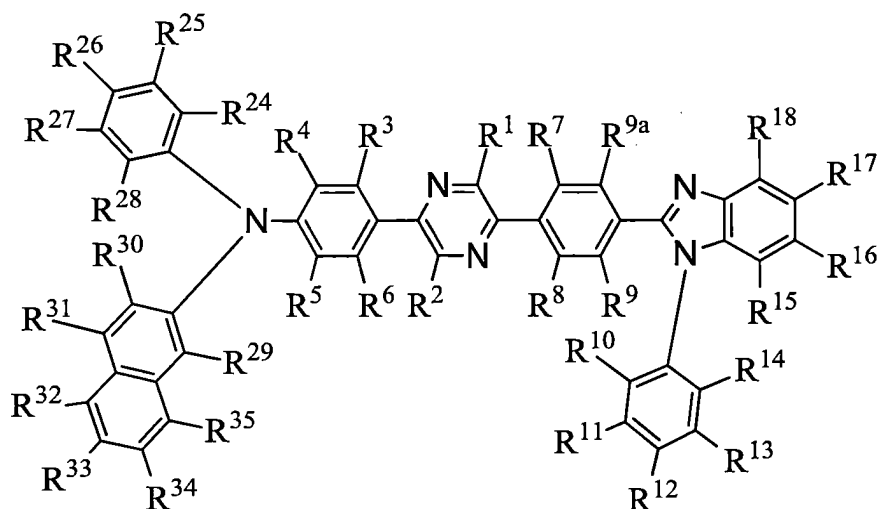
化學式 16



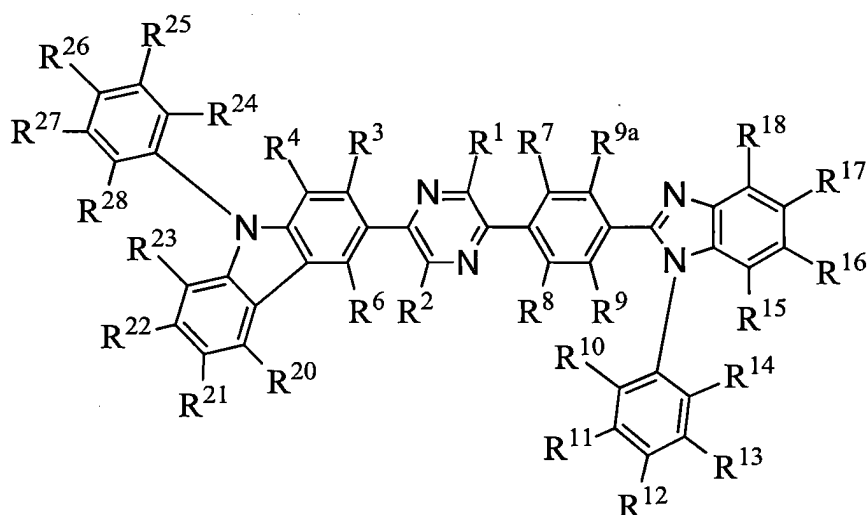
化學式 17



化學式 18



化學式 21

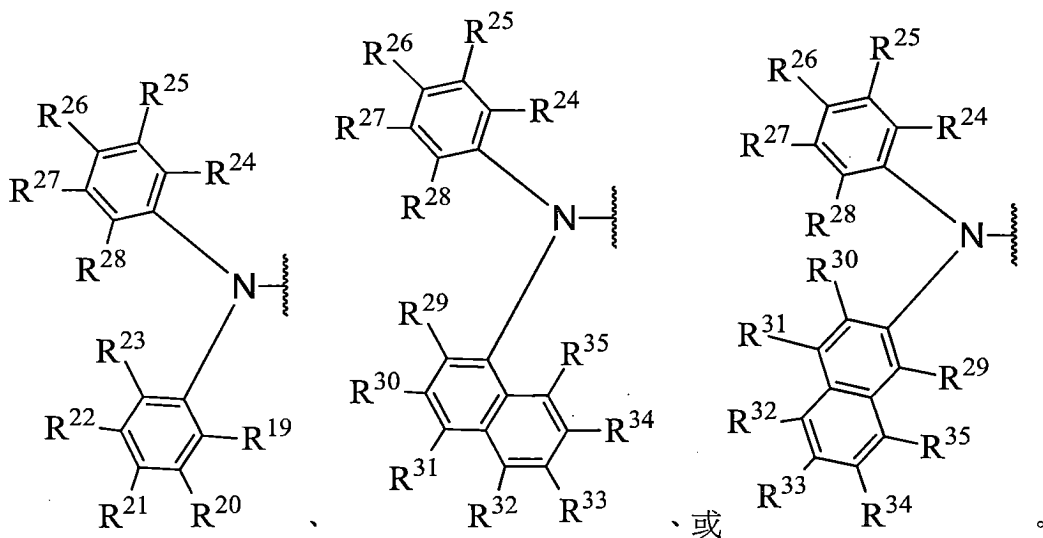


化學式 22

【0023】對於本文的任何相關化學式或結構表現，HT 可以為選擇性經取代的二苯胺或選擇性經取代的苯基(萘基)胺。如果二苯胺為經取代的，其可以具有 1、2、3、4、5、6、7、8、9、或 10 個取代基。在一些實施例中，二苯胺可具有 1、2、3、或 4 個取代基，或 1 或 2 個取代基。如果苯基(萘基)胺為經取代的，其可具有 1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、或 12 個取代基。在一

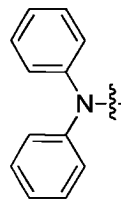
些實施例中，苯基(萘基)胺可具有 1、2、3、或 4 個取代基，或 1 或 2 個取代基。在一些實施例中，在 HT 上一些或全部的取代基可具有：0 到 10 個碳原子以及 0 至 10 個雜原子，其中每個雜原子獨立地為：O、N、S、F、Cl、Br、或 I(提供有至少一個非氫原子)；及/或 15g/mol 至 500g/mol 的分子量。例如，取代基可以是 C₁₋₁₀ 選擇性經取代的烷基，如 CH₃、C₂H₅、C₃H₇、環 C₃H₅、C₄H₉、環 C₄H₇、C₅H₁₁、環 C₅H₉、C₆H₁₃、環 C₆H₁₁ 等，其可為選擇性地經取代的：C₁₋₁₀ 選擇性經取代的烷氧基；鹵素、如 F、Cl、Br、I；OH；CN；NO₂；C₁₋₆ 氟烷基、例如 CF₃、CF₂H、C₂F₅ 等等；C₁₋₁₀ 酯基、例如 -O₂CCH₃、-CO₂CH₃、-O₂CC₂H₅、-CO₂C₂H₅、-O₂C-苯基、-CO₂-苯基等；C₁₋₁₀ 酮基，如 -COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-CO-苯基等；或 C₁₋₁₀ 氨基，如 NH₂、NH(CH₃)、N(CH₃)₂、N(CH₃)C₂H₅ 等。在一些實施例中、HT 上的任何取代基可以是供電子取代基，如 C₁₋₃ 烷基、C₁₋₃-O-烷基、NH₃、或 C₁₋₃ 氨基。在一些實施例中，HT 是未經取代的。

【0024】 在一些實施例中，HT 為：

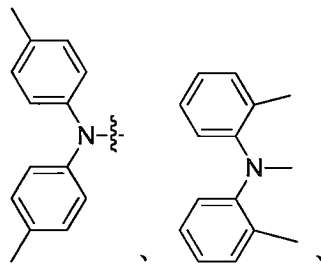


【0025】 在一些實施例中，HT 可選自具有 1、2、3、4、5、6、7、

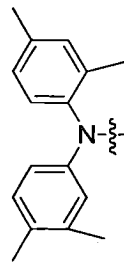
8、9、10、11、或 12 個獨立地選自 C₁₋₆ 烷基及 F 的取代基的選擇性經取代的咪唑基、選擇性經取代的二苯基胺、及/或選擇性經取代的苯基(萘基)胺。在一些實施例中，HT 選自未經取代的二苯基胺、經單取代的二苯基胺、經雙取代的二苯基胺、未經取代的苯基(萘基)胺、經單取代的苯基(萘基)胺、及/或未經取代的咪唑基。所描述的環系的範例可包含下列中的任何一個：



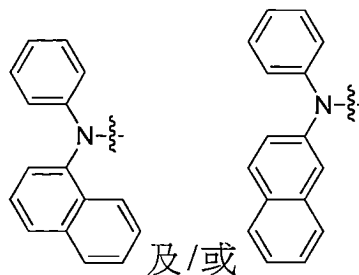
未經取代的二苯基胺、



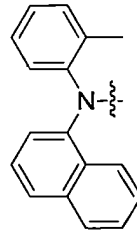
經單取代二苯基胺、



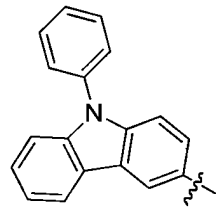
經二取代的二苯基胺、



未經取代的苯基(萘基)胺、

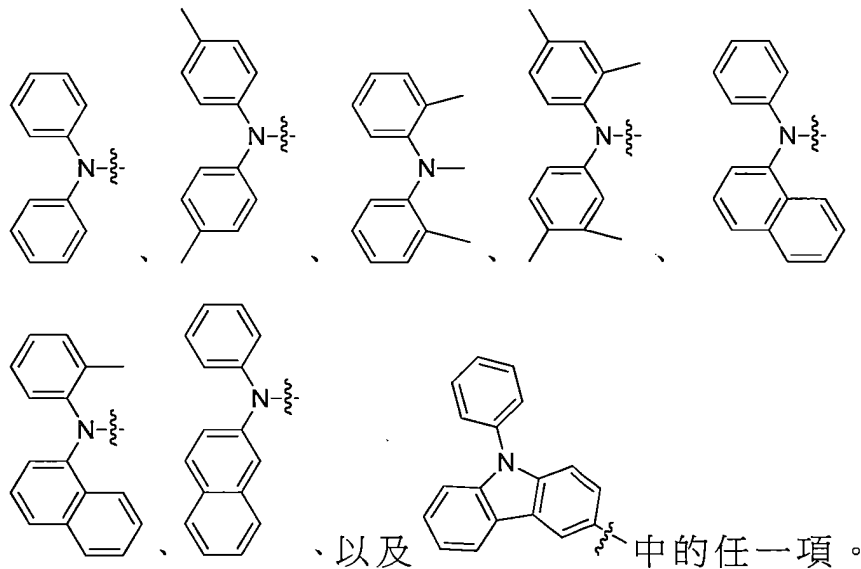


經單取代的苯基(萘基)胺、以及/或



未經取代的咪唑基。

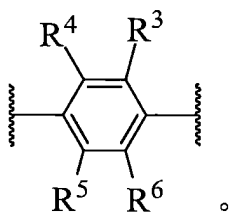
【0026】 在一些實施例中，HT 選自



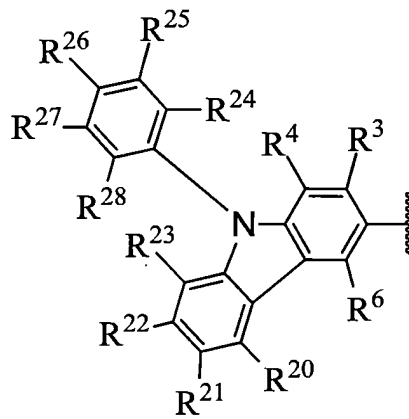
【0027】 對於本文中的任何相關化學式或結構表示， Ph^{1a} 可以是選擇性經取代的對-伸苯基，或 $\text{HT}-\text{Ph}^{1a}$ 可以是 9-苯基咪唑-3-基。如果對-伸苯基經取代時，其可以具有 1、2、3 或 4 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基是未經取代的。在一些實施例中，對-伸苯基具有 1 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 2 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 3 個取代基。在一些實施

例中，對-伸苯基具有 4 個取代基。如果-9-苯基咪唑-3-基為經取代時，其可以具有 1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、或 12 個取代基。在一些實施例中，9-苯基咪唑-3-基可以具有 1、2、3、或 4 個取代基，或 1 或 2 個取代基。在一些實施例中，一些或所有在 Ph^{1a} 或 HT-Ph^{1a} 上的取代基可具有：0 到 10 個碳原子以及 0 至 10 個雜原子，其中每個雜原子獨立地是：O、N、S、F、Cl、Br、或 I(前提是有至少一個非氫原子)，以及/或 15g/mol 至 500g/mol 的分子量。例如，取代基可以是 C_{1-10} 選擇性經取代的烷基，如 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、環 C_3H_5 、 C_4H_9 、環 C_4H_7 、 C_5H_{11} 、環 C_5H_9 、 C_6H_{13} 、環 C_6H_{11} 等，其可為選擇性經取代的； C_{1-10} 選擇性經取代的烷氧基；鹵素，如 F、Cl、Br、I；OH；CN； NO_2 ； C_{1-6} 氟烷基，如 CF_3 、 CF_2H 、 C_2F_5 等； C_{1-10} 酯，如 $-\text{O}_2\text{CCH}_3$ 、 $-\text{CO}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{O}_2\text{CC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{O}_2\text{C-}$ 苯基、 $-\text{CO}_2-$ 苯基等； C_{1-10} 酮基，如 $-\text{COCH}_3$ 、 $-\text{COC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{COC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CO-}$ 苯基等；或 C_{1-10} 氨基，如 NH_2 、 $\text{NH}(\text{CH}_3)$ 、 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{N}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_5$ 等。在一些實施例中，在 Ph^{1a} 或 HT-Ph^{1a} 上的任何取代基可以是 C_{1-3} 烷基、 C_{1-3} -O-烷基、 NH_3 、或 C_1 - C_3 氨基。在一些實施例中， Ph^{1a} 或 HT-Ph^{1a} 是未經取代的。

【0028】 在一些實施例中， Ph^{1a} 是：



【0029】 在一些實施例中， HT-Ph^{1a} 是：



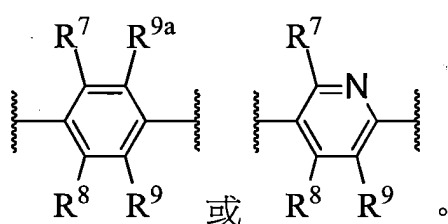
【0030】對於本文中任何相關化學式或結構表示， Ph^{1b} 可以是鏈結或選擇性經取代的對-伸苯基。如果對-伸苯基為經取代的，其可具有 1、2、3、或 4 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基是未經取代的。在一些實施例中，對-伸苯基具有 1 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 2 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 3 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 4 個取代基。在一些實施例中，在 Ph^{1b} 上的一些或所有的取代基可具有：0 到 10 個碳原子以及 0 至 10 個雜原子，其中各雜原子獨立地是：O、N、S、F、Cl、Br、或 I(前提是至少有一個非氫原子)，以及/或 15g/mol 至 500g/mol 的分子量。例如，取代基可以是 C_{1-10} 選擇性經取代的烷基，如 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、環 C_3H_5 、 C_4H_9 、環 C_4H_7 、 C_5H_{11} 、環 C_5H_9 、 C_6H_{13} 、環 C_6H_{11} 等，其可被選擇性取代； C_{1-10} 選擇性經取代的烷氧基；鹵素，如 F、Cl、Br、I；OH；CN； NO_2 ； C_{1-6} 氟烷基，例如 CF_3 、 CF_2H 、 C_2F_5 等； C_{1-10} 酯基，如 $-\text{O}_2\text{CCH}_3$ 、 $-\text{CO}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{O}_2\text{CC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{O}_2\text{C}$ -苯基、 $-\text{CO}_2$ -苯基等； C_{1-10} 酮基，如 $-\text{COCH}_3$ 、 $-\text{COC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{COC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CO}$ -苯基等；或 C_{1-10} 氨基，如 NH_2 、 $\text{NH}(\text{CH}_3)$ 、 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{N}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_5$ 等。在一些實施例中，在 Ph^{1b} 上的任何取代基可以是 C_1 - C_3 烷基、 CF_3 、或 F。在一些實施例中， Ph^{1b} 是鏈結。

【0031】對於任何相關化學式或結構表示， Ph^{1c} 可以是鍵結或選擇性地經取代的對-伸苯基。如果對-伸苯基為經取代的，其可以具有 1、2、3、或 4 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基是未經取代的。在一些實施例中，對-伸苯基具有 1 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 2 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 3 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 4 個取代基。在一些實施例中， Ph^{1c} 上的一些或所有的取代基可具有：0 到 10 個碳原子以及 0 至 10 個雜原子，其中每個雜原子獨立地是：O、N、S、F、Cl、Br、或 I(前提是有至少一個非氫原子)；以及/或 15g/mol 至 500g/mol 的分子量。例如，取代基可以是 C_{1-10} 選擇性經取代的烷基，如 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、環 C_3H_5 、 C_4H_9 、環 C_4H_7 、 C_5H_{11} 、環 C_5H_9 、 C_6H_{13} 、環 C_6H_{11} 等，其可為選擇性經取代的； C_{1-10} 選擇性經取代的烷氧基；鹵素，如 F、Cl、Br、I；OH；CN； NO_2 ； C_{1-6} 氟烷基，例如 CF_3 、 CF_2H 、 C_2F_5 等； C_{1-10} 酯基，例如 $-\text{O}_2\text{CCH}_3$ 、 $-\text{CO}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{O}_2\text{CC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{O}_2\text{C}$ -苯基、 $-\text{CO}_2$ -苯基等； C_{1-10} 酮，例如 $-\text{COCH}_3$ 、 $-\text{COC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{COC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CO}$ -苯基等；或 C_{1-10} 氨基，如 NH_2 、 $\text{NH}(\text{CH}_3)$ 、 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{N}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_5$ 等。在一些實施例中， Ph^{1c} 上的任何取代基可以是 C_{1-3} 烷基、 CF_3 、或 F。在一些實施例中， Ph^{1c} 是鍵結。

【0032】對於本文任何相關化學式或結構表示，Py 可為選擇性地經取代的伸吡嗪-2,5-基。如果伸吡嗪-2,5-基經取代時，其可以具有 1、2、3、或 4 個取代基。在一些實施例中，伸吡嗪-2,5-基是未經取代的。在一些實施例中，伸吡嗪-2,5-基有 1 個取代基。在一些實施例中，伸吡嗪-2,5-基有 2 個取代基。在一些實施例中，一些或所有 Py 上的取代基可具有：0 到 10 個碳原子以及 0 至 10

個雜原子，其中各雜原子獨立地為：O、N、S、F、Cl、Br、或 I(前提是至少有一個非氫原子)；以及/或 15g/mol 至 500g/mol 的分子量。例如，取代基可以是 C₁₋₁₀ 選擇性經取代的烷基，如 CH₃、C₂H₅、C₃H₇、環 C₃H₅、C₄H₉、環 C₄H₇、C₅H₁₁、環 C₅H₉、C₆H₁₃、環 C₆H₁₁ 等，其可選擇性地經取代；C₁₋₁₀ 選擇性經取代的烷氧基、鹵素，如 F、Cl、Br、I；OH；CN；NO₂；C₁₋₆ 氟烷基，如 CF₃、CF₂H、C₂F₅ 等；C₁₋₁₀ 酯基，例如 -O₂CCH₃、-CO₂CH₃、-O₂CC₂H₅、-CO₂C₂H₅、-O₂C-苯基、-CO₂-苯基等；C₁₋₁₀ 酮基，例如 -COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-CO-苯基等；或 C₁₋₁₀ 氨基，如 NH₂、NH(CH₃)、N(CH₃)₂、N(CH₃)C₂H₅ 等。在一些實施例中，Py 上的任何取代基可以是 C₁₋₃ 烷基、CF₃、或 F。在一些實施例中，Py 是未經取代的。

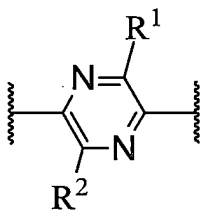
【0033】 在一些實施例中，Py 是：



【0034】 對於任何本文中相關的化學式或結構表示，Het 可為選擇性經取代的對-伸苯基或選擇性經取代的伸吡啶-2,5-基。如果對-伸苯基為經取代的，其可以具有 1、2、3、或 4 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基是未經取代的。在一些實施例中，對-伸苯基具有 1 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 2 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 3 個取代基。在一些實施例中，對-伸苯基具有 4 個取代基。如果伸吡啶-2,5-基為經取代的，其可以具有 1、2、或 3 個取代基。在一些實施例中，伸吡啶-2,5-基是未經取代的。在一些實施例中，伸吡啶-2,5-基有 1 個取代基。

在一些實施例中，伸吡啶-2,5-基有 2 個取代基。在一些實施例中，伸吡啶-2,5-基有 3 個取代基。在一些實施例中，一些或全部 Het 上的取代基可具有：0 至 10 個碳原子以及 0 至 10 個雜原子，其中每個雜原子獨立地是：O、N、S、F、Cl、Br、或 I(前提是至少有一個非氫原子)，及/或 15g/mol 至 500g/mol 的分子量。例如，取代基可以是 C₁₋₁₀ 選擇性經取代的烷基，如 CH₃、C₂H₅、C₃H₇、環 C₃H₅、C₄H₉、環 C₄H₇、C₅H₁₁、環 C₅H₉、C₆H₁₃、環 C₆H₁₁ 等，其可被選擇性地取代；C₁₋₁₀ 選擇性經取代的烷氧基；鹵素、如 F、Cl、Br、I；OH；CN；NO₂；C₁₋₆ 氟烷基，例如 CF₃、CF₂H、C₂F₅ 等；C₁₋₁₀ 酯基，如 -O₂CCH₃、-CO₂CH₃、-O₂CC₂H₅、-CO₂C₂H₅、-O₂C-苯基、-CO₂-苯基等；C₁₋₁₀ 酮基，例如 -COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-CO-苯基等；或 C₁₋₁₀ 氨基，如 NH₂、NH(CH₃)、N(CH₃)₂、N(CH₃)C₂H₅ 等。在一些實施例中，Het 上的任何取代基可以是 C₁-C₃ 烷基、CF₃ 或 F。在一些實施例中，Het 是未經取代的。

【0035】 在一些實施例中，Het 是：

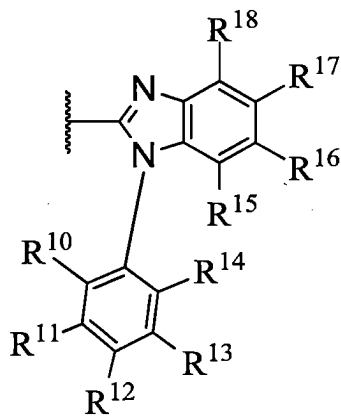


【0036】 對於本文中任何相關化學式或結構表示，ET 可為選擇性地經取代的苯並咪唑-2-基、選擇性經取代的苯並噁唑-2-基、或選擇性經取代的苯並噻唑-2-基。如果苯並咪唑-2-基、苯並噁唑-2-基、或苯並噻唑-2-基為經取代的，其可以具有 1、2、3、或 4 個取代基。在一些實施例中，苯並咪唑-2-基、苯並噁唑-2-基、或苯並噻唑-2-基是未經取代的。在一些實施例中，苯並咪唑-2-基、苯

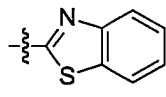
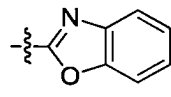
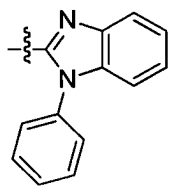
並噁唑-2-基、或苯並噁唑-2-基具有 1 個取代基。在一些實施例中，苯並咪唑-2-基、苯並噁唑-2-基、或苯並噁唑-2-基有 2 個取代基。在一些實施例中，苯並咪唑-2-基、苯並噁唑-2-基、或苯並噁唑-2-基具有 3 個取代基。在一些實施例中，苯並咪唑-2-基、苯並噁唑-2-基、或苯並噁唑-2-基具有 4 個取代基。

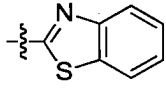
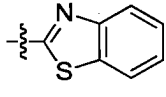
【0037】 在一些實施例中，ET 是選擇性經取代的 1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基。在一些實施例中，1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基是未經取代的。若 1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基為經取代的，其可以有 1、2、3、4、5、6、7、8、或 9 個取代基。在一些實施例中，1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基有 1、2、3 或 4 個取代基。在一些實施例中，1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基具有 1 或 2 個取代基。在一些實施例中，一些或所有 ET 上的取代基可具有：0 到 10 個碳原子以及 0 至 10 個雜原子，其中各雜原子獨立地是：O、N、S、F、Cl、Br、或 I(前提是至少有一個非氫原子)；及/或 15g/mol 至 500g/mol 的分子量。例如，取代基可以是 C₁₋₁₀ 選擇性經取代的烷基，如 CH₃、C₂H₅、C₃H₇、環 C₃H₅、C₄H₉、環 C₄H₇、C₅H₁₁、環 C₅H₉、C₆H₁₃、環 C₆H₁₁ 等，其可為選擇性經取代的；C₁₋₁₀ 選擇性取代的烷氧基；鹵素，如 F、Cl、Br、I；OH；CN；NO₂；C₁₋₆ 氟烷基，如 CF₃、CF₂H、C₂F₅ 等；C₁₋₁₀ 酯基，如 -O₂CCH₃、-CO₂CH₃、-O₂CC₂H₅、-CO₂C₂H₅、-O₂C-苯基、-CO₂-苯基等；C₁₋₁₀ 酮基，如 -COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-CO-苯基等等；或 C₁₋₁₀ 氨基，如 NH₂、NH(CH₃)、N(CH₃)₂、N(CH₃)C₂H₅ 等。在一些實施例中，ET 上的任何取代基可以是 C₁-C₃ 烷基、或拉電子的取代基，如 F、Cl、NO₂、CN、COH、COCH₃ 等。在一些實施例中，ET 是未經取代的。

【0038】 在一些實施方式中，ET 是：



【0039】 在一些實施例中，ET可選自選擇性經取代的苯並咪唑-2-基、選擇性經取代的苯並噁唑-2-基、及/或選擇性經取代的苯並噻唑-2-基。在一些實施例中，ET 是未經取代的苯並咪唑-2-基。在一些實施例中，ET 選自



、以及 。在一些實施例中，ET 是選擇性經取代的苯並咪唑-2-基 。在一些實施例中，ET



【0040】 對於上述的任何相關化學式， Ph^1 及/或 Ph^2 可以是選擇性經取代的對-伸苯基。

【0041】 對於上述的任何相關化學式，X 可選自 C 以及 N，例如，分別為化學式 3 及/或化學式 2。

【0042】 在一些實施例中， ph^1 為有 1、2、3 或 4 個取代基獨立地選自 C_{1-6} 烷基以及 F 之選擇性經取代的對-伸苯基。在一些實施例

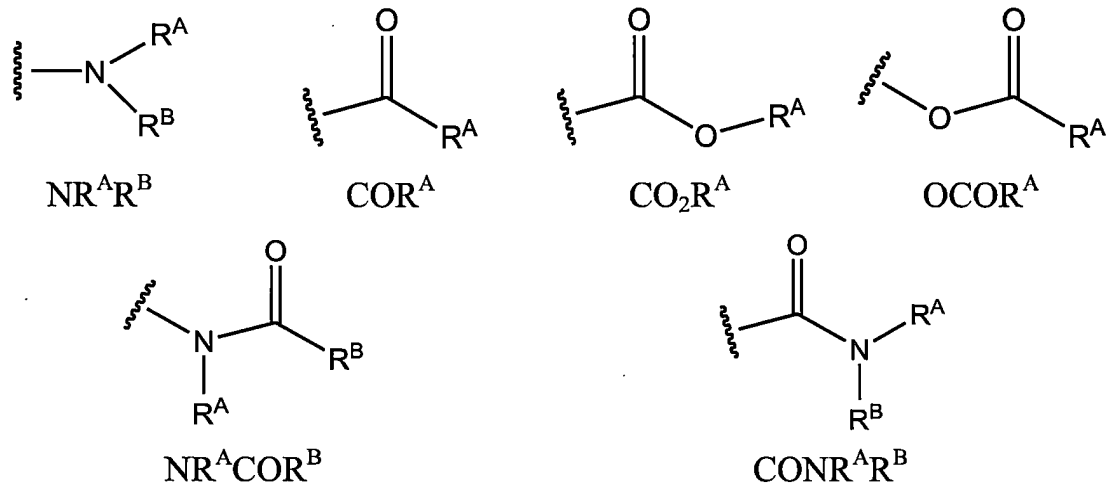
中， ph^1 是未經取代的對-伸苯基。

【0043】 在一些實施例中， Ph^2 為有 1、2、3 或 4 個取代基獨立地選自 C_{1-6} 烷基以及 F 之選擇性經取代的對-伸苯基。在一些實施例中， ph^2 是未經取代的對-伸苯基。

【0044】 R^1 至 R^{35} ，一般可以是 H 或任何取代基，例如具有 0 至 6 個碳原子以及 0 至 5 個雜原子的取代基，其中各雜原子獨立地為：O、N、S、F、Cl、Br、或 I，及/或具有 15g/mol 至 300g/mol 的分子量。任何 R^1 至 R^{35} 可包含：a) 一或多個烷基基團選擇性地經取代，或選擇性地被連接或連接於，b) 一或多個官能基，如 C=C、C≡C、CO、CO₂、CON、NCO₂、OH、SH、O、S、N、N=C、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、CO₂H、NH₂ 等；或可以是不具有烷基部分，例如 F、Cl、Br、I、NO₂、CN、NH₂、OH、COH、CO₂H 等的取代基。

【0045】 對於本文任何相關化學式或結構的描述， R^1 的一些非限制性實施例可包含 R^A 、F、Cl、CN、ORA、CF₃、NO₂、NR^AR^B、COR^A、CO₂R^A、OCOR^A、NR^ACOR^B、CONR^AR^B 等。在一些實施例中， R^1 可以是 H；F；Cl；CN；CF₃；OH；NH₂； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基以及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基以及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 NHCH₃、NH(CH₃)₂、NHCH₂CH₃ 等； C_{1-6} 烷氧基、如-O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如-COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-COC₄H₉、-COC₅H₁₁ 等；CO₂H；

C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^1 可以是 H。



【0046】 各 R^A 可以獨立地是 H、或 C_{1-12} 烷基，其包含：具有化學式 $C_a H_{a+1}$ 的直鏈或支鏈烷基、或具有化學式 $C_a H_{a-1}$ 的環烷基，其中 a 是 1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、或 12，例如化學式： CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、 C_4H_9 、 C_5H_{11} 、 C_6H_{13} 、 C_7H_{15} 、 C_8H_{17} 、 C_9H_{19} 、 $C_{10}H_{21}$ 等的直鏈或支鏈烷基、或化學式： C_3H_5 、 C_4H_7 、 C_5H_9 、 C_6H_{11} 、 C_7H_{13} 、 C_8H_{15} 、 C_9H_{17} 、 $C_{10}H_{19}$ 等的環烷基。在一些實施例中， R^A 可以是 H 或 C_{1-6} 烷基。在一些實施例中， R^A 可以是 H 或 C_{1-3} 烷基。在一些實施例中， R^A 可以是 H 或 CH_3 。在一些實施例中， R^A 可以是 H。

【0047】 各 R^B 可以獨立地是 H 或 C_{1-12} 烷基，其包含：具有化學式 $C_a H_{a+1}$ 的直鏈或支鏈烷基、或具有化學式 $C_a H_a$ 的環烷基，其中 a 是 1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、或 12，例如化學式： CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、 C_4H_9 、 C_5H_{11} 、 C_6H_{13} 、 C_8H_{17} 、 C_7H_{15} 、 C_9H_{19} 、 $C_{10}H_{21}$ 等的直鏈或支鏈烷基、或化學式： C_3H_5 、 C_4H_7 、 C_5H_9 、 C_6H_{11} 、 C_7H_{13} 、 C_8H_{15} 、 C_9H_{17} 、 $C_{10}H_{19}$ 等的環烷基。在一些實施例中， R^B 可以是 H 或 C_{1-3} 烷基。在一些實施例中， R^B 可以是 H 或 CH_3 。

在一些實施例中， R^B 可以是 H。

【0048】對於本文中任何相關化學式或結構描述， R^2 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^2 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 $-NHCH_3$ 、 $-NH(CH_3)_2$ 、 $-NHCH_2CH_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 $-O$ -甲基、 $-O$ -乙基、 $-O$ -丙基的異構體、 $-O$ -環丙基、 $-O$ -丁基的異構體、 $-O$ -環丁基的異構體、 $-O$ -戊基的異構體、 $-O$ -環戊基的異構體、 $-O$ -己基的異構體、 $-O$ -環己基的異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^2 可以是 H。

【0049】對於本文中任何相關化學式或結構描述， R^3 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^3 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 $NHCH_3$ 、 $NH(CH_3)_2$ 、 $NHCH_2CH_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 $-O$ -甲基、 $-O$ -乙基、 $-O$ -丙基的異構體、 $-O$ -環丙基、 $-O$ -丁基的異構體、 $-O$ -環丁基的異構體、 $-O$ -戊基的異構體、 $-O$ -環戊基的異構體、 $-O$ -己基的異構體、

-O-環己基的異構體等；CHO；C₂₋₆-CO-烷基，如-COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-COC₄H₉、-COC₅H₁₁等；CO₂H；C₂₋₆-CO₂-烷基、-CO₂CH₃、-CO₂C₂H₅、-CO₂C₃H₇、CO₂C₄H₉、-COC₅H₁₁等。在一些實施例中，R³可以是H。

【0050】對於本文中任何相關化學式或結構描述，R⁴的一些非限制性範例可包含 R^A、為 F、Cl、CN、OR^A、CF₃、NO₂、NR^AR^B、COR^A、CO₂R^A、OCOR^A、NR^ACOR^B、CONR^AR^B等。在一些實施例中，R⁴可以是 H；F；Cl；CN；CF₃；OH；NH₂；C₁₋₆ 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如、正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；C₁₋₆ 氨基，如 NHCH₃、NH(CH₃)₂、-NHCH₂CH₃等；C₁₋₆ 烷氧基，如-O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等；CHO；C₂₋₆-CO-烷基，如-COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-COC₄H₉、-COC₅H₁₁等；CO₂H；C₂₋₆-CO₂-烷基、-CO₂CH₃、-CO₂C₂H₅、-CO₂C₃H₇、-CO₂C₄H₉、-COC₅H₁₁等。在一些實施例中，R⁴可以是H。

【0051】對於本文中任何相關化學式或結構的描述，R⁵的一些非限制性範例可包含 R^A、F、Cl、CN、OR^A、CF₃、NO₂、NR^AR^B、COR^A、CO₂R^A、OCOR^A、NR^ACOR^B、CONR^AR^B等。在一些實施例中，R⁵可以是 H；F；Cl；CN；CF₃；OH；NH₂；C₁₋₆ 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基以及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；C₁₋₆ 氨基，

如 NHCH_3 、 $\text{NH}(\text{CH}_3)_2$ 、 $-\text{NHCH}_2\text{CH}_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 $-\text{O}$ -甲基、 $-\text{O}$ -乙基、 $-\text{O}$ -丙基的異構體、 $-\text{O}$ -環丙基、 $-\text{O}$ -丁基的異構體、 $-\text{O}$ -環丁基異構體、 $-\text{O}$ -戊基的異構體、 $-\text{O}$ -環戊基的異構體、 $-\text{O}$ -己基的異構體、 $-\text{O}$ -環己基的異構體等； CHO ； C_{2-6} - CO -烷基，如 $-\text{COCH}_3$ 、 $-\text{COC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{COC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{COC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{COC}_5\text{H}_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-\text{CO}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{COC}_5\text{H}_{11}$ 等。在一些實施例中， R^5 可以是 H 。

【0052】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^6 的一些非限制性範例可包含 R^A 、 F 、 Cl 、 CN 、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 NR^AR^B 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 OCOR^A 、 NR^ACOR^B 、 CONR^AR^B 等。在一些實施例中， R^6 可以是 H ； F ； Cl ； CN ； CF_3 ； OH ； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 NHCH_3 、 $\text{NH}(\text{CH}_3)_2$ 、 $-\text{NHCH}_2\text{CH}_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 O -甲基、 $-\text{O}$ -乙基、 $-\text{O}$ -丙基的異構體、 $-\text{O}$ -環丙基、 $-\text{O}$ -丁基的異構體、 $-\text{O}$ -環丁基異構體、 $-\text{O}$ -戊基的異構體、 $-\text{O}$ -環戊基的異構體、 $-\text{O}$ -己基的異構體、 $-\text{O}$ -環己基的異構體等； CHO ； C_{2-6} - CO -烷基，如 $-\text{COCH}_3$ 、 $-\text{COC}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{COC}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{COC}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{COC}_5\text{H}_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-\text{CO}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $-\text{CO}_2\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $-\text{COC}_5\text{H}_{11}$ 等。在一些實施例中， R^6 可為 H 。

【0053】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^7 中的一些非限制性範例可包含 R^A 、 F 、 Cl 、 CN 、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 NR^AR^B 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 OCOR^A 、 NR^ACOR^B 、 CONR^AR^B 等。在一些實施例中， R^7 可以是 H ； F ； Cl ； CN ； CF_3 ； OH ； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如

甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 $NHCH_3$ 、 $NH(CH_3)_2$ 、 $NHCH_2CH_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^7 可以是 H。

【0054】對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^8 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^8 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 $NHCH_3$ 、 $-NH(CH_3)_2$ 、 $-NHCH_2CH_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^8 可以是 H。

【0055】對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^9 的一些非

限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^9 可為 H；F；Cl；CN； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如、正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 $-NHCH_3$ 、 $-NH(CH_3)_2$ 、 $-NHCH_2CH_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 $-O$ -甲基、 $-O$ -乙基、 $-O$ -丙基的異構體、 $-O$ -環丙基、 $-O$ -丁基的異構體、 O 環丁基的異構體、 $-O$ -戊基的異構體、 $-O$ -環戊基的異構體、 $-O$ -己基的異構體、 $-O$ -環己基的異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^9 可為 H。

【0056】對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{9a} 中的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{10} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如、正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等； C_{1-6} 氨基，如 $-NHCH_3$ 、 $-NH(CH_3)_2$ 、 $-NHCH_2CH_3$ 等； C_{1-6} 烷氧基，如 $-O$ -甲基、 $-O$ -乙基、 $-O$ -丙基的異構體、 $-O$ -環丙基、 $-O$ -丁基的異構體、 O 環丁基的異構體、 $-O$ -戊基的異構體、 $-O$ -環戊基的異構體、 $-O$ -己基的異構體、 $-O$ -環己基的異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ；

C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^{10} 可為 H。

【0057】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{10} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{10} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^{10} 可為 H。

【0058】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{11} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{11} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^{11} 可為 H。

【0059】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{12} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施

例中， R^{12} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如，環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如- $COCH_3$ 、- COC_2H_5 、- COC_3H_7 、- COC_4H_9 、- COC_5H_{11} 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、- CO_2CH_3 、- $CO_2C_2H_5$ 、- $CO_2C_3H_7$ 、- $CO_2C_4H_9$ 、- COC_5H_{11} 等。在一些實施例中， R^{12} 可為 H。

【0060】 對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{13} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{13} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如- $COCH_3$ 、- COC_2H_5 、- COC_3H_7 、- COC_4H_9 、- COC_5H_{11} 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、- CO_2CH_3 、- $CO_2C_2H_5$ 、- $CO_2C_3H_7$ 、- $CO_2C_4H_9$ 、- COC_5H_{11} 等。在一些實施例中， R^{13} 可為 H。

【0061】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{14} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{14} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如，環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如- $COCH_3$ 、- COC_2H_5 、- COC_3H_7 、- COC_4H_9 、- COC_5H_{11} 等； CO_2H ；

C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^{14} 可為H。

【0062】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{15} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{15} 可以是H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如，環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 $-CO_2CH_3$ 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $-CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^{15} 可為H。

【0063】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{16} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{16} 可以是H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如，環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如 $-COCH_3$ 、 $-COC_2H_5$ 、 $-COC_3H_7$ 、 $-COC_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等； CO_2H ； C_{2-6} - CO_2 -烷基、 CO_2CH_3 、 $-CO_2C_2H_5$ 、 $-CO_2C_3H_7$ 、 $CO_2C_4H_9$ 、 $-COC_5H_{11}$ 等。在一些實施例中， R^{16} 可為H。

【0064】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{17} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 CO_2R^A 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施

例中， R^{17} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如，環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如-COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-COC₄H₉、-COC₅H₁₁ 等；CO₂H； C_{2-6} -CO₂-烷基、-CO₂CH₃、-CO₂C₂H₅、-CO₂C₃H₇、CO₂C₄H₉、-COC₅H₁₁ 等。在一些實施例中， R^{17} 可為 H。

【0065】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{18} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、OR^A、 CF_3 、NO₂、NR^AR^B、COR^A、CO₂R^A、OCOR^A、NR^ACOR^B、CONR^AR^B 等。在一些實施例中， R^{18} 可以是 H；F；Cl；CN； CF_3 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如，環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；CHO； C_{2-6} -CO-烷基，如-COCH₃、-COC₂H₅、-COC₃H₇、-COC₄H₉、-COC₅H₁₁ 等；CO₂H； C_{2-6} -CO₂-烷基、-CO₂CH₃、-CO₂C₂H₅、-CO₂C₃H₇、CO₂C₄H₉、-COC₅H₁₁ 等。在一些實施例中， R^{18} 可為 H。

【0066】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{19} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、OR^A、 CF_3 、NO₂、NR^AR^B、COR^A、CO₂R^A、OCOR^A、NR^ACOR^B、CONR^AR^B 等。在一些實施例中， R^{19} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH；NH₂； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如，環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如-O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的

異構體、-O-環丁基異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{19} 可為 H。在一些實施例中， R^{19} 是甲基。

【0067】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{20} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{20} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{20} 可為 H。

【0068】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{21} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{21} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{21} 可為 H。在一些實施例中， R^{21} 是甲基。

【0069】對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{22} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{22} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{22} 可為 H。

【0070】對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{23} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{23} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{23} 可為 H。

【0071】對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{24} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施

例中， R^{24} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{24} 可為 H。在一些實施例中， R^{24} 是甲基。

【0072】 在一些實施例中， R^{19} 以及 R^{24} 是甲基。

【0073】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{25} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{25} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{25} 可為 H。

【0074】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{26} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{26} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構

體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{26} 可為 H。在一些實施例中， R^{26} 為甲基。

【0075】 在一些實施例中， R^{19} 、 R^{21} 、 R^{24} 、以及 R^{26} 是甲基。

【0076】 在一些實施例中， R^{21} 以及 R^{26} 是甲基。

【0077】 對於本文中任何相關化學式或結構的描述， R^{27} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{27} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{27} 可為 H。

【0078】 對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{28} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{28} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構

體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{28} 可為 H。

【0079】 對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{29} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{29} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{29} 可為 H。

【0080】 對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{30} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{30} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異

構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{30} 可為 H。

【0081】 對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{31} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{31} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{31} 可為 H。

【0082】 對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{32} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{32} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{32} 可為 H。

【0083】對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{33} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{33} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{33} 可為 H。

【0084】對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{34} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施例中， R^{34} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{34} 可為 H。

【0085】對於本文中任何有關化學式或結構的描述， R^{35} 的一些非限制性範例可包含 R^A 、F、Cl、CN、 OR^A 、 CF_3 、 NO_2 、 $NR^A R^B$ 、 COR^A 、 $CO_2 R^A$ 、 $OCOR^A$ 、 $NR^A COR^B$ 、 $CONR^A R^B$ 等。在一些實施

例中， R^{35} 可以是 H；F；Cl； CF_3 ；OH； NH_2 ； C_{1-6} 烷基，如甲基、乙基、丙基異構體(例如，正丙基及異丙基)、環丙基、丁基異構體、環丁基異構體(例如環丁基及甲基環丙基)、戊基異構體、環戊基異構體、己基異構體、環己基異構體等；或 C_{1-6} 烷氧基，如 -O-甲基、-O-乙基、-O-丙基的異構體、-O-環丙基、-O-丁基的異構體、-O-環丁基的異構體、-O-戊基的異構體、-O-環戊基的異構體、-O-己基的異構體、-O-環己基的異構體等。在一些實施例中， R^{35} 可為 H。

【0086】 一些實施例包含選擇性經取代的 N,N-二苯基-4-(5-(6-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)吡啶-3-基)吡嗪-2-基)苯胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

【0087】 一些實施例包含選擇性經取代的 4-甲基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)-N-(對-甲苯基)苯胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

【0088】 一些實施例包含選擇性經取代的 N-苯基-N-(4-(5-(6-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)吡啶-3-基)吡嗪-2-基)苯基)萘-1-胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

【0089】 一些實施例包含選擇性經取代的 N-苯基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)萘-1-胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

【0090】 一些實施例包含選擇性經取代的 2-甲基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)-N-(鄰-甲苯基)苯胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物未經取代。

【0091】 一些實施例包含選擇性經取代的 N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)苯胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

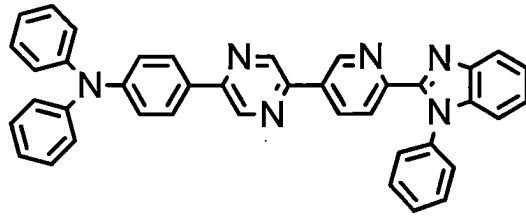
【0092】 一些實施例包含選擇性經取代的 N,N-二苯基-4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

【0093】 一些實施例包含選擇性經取代的 N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)-N-(鄰甲苯基)萘-1-胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

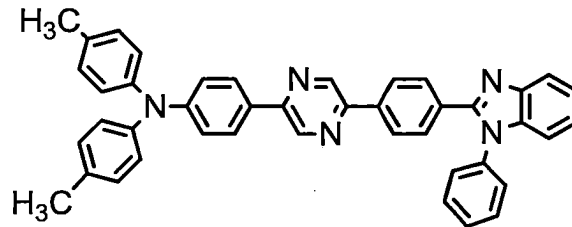
【0094】 一些實施例包含選擇性經取代的 N-苯基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)萘-2-胺。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在一些實施例中，所述化合物是未經取代的。

【0095】 一些實施例包含選擇性經取代的 9-苯基-3-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)-9H-咪唑。在一些實施例中，任何取代基可以獨立地是 CH_3 、 C_2H_5 、 C_3H_7 、F 或 CF_3 。在

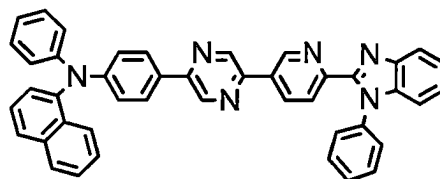
一些實施例中，所述化合物是未經取代的。



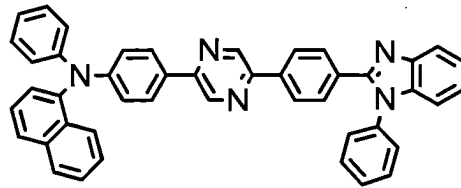
N,N-二苯基-4-(5-(6-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)吡啶-3-基)吡嗪-2-基)苯胺 (BE-1)(N,N-diphenyl-4-(5-(6-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyridin-3-yl)pyrazin-2-yl)aniline (BE-1))、



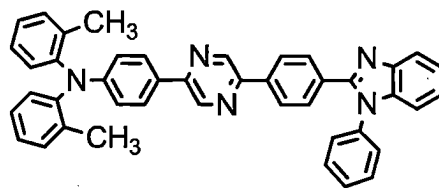
4-甲基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)-N-(對-甲苯基)苯胺 (BE-2)(4-methyl-N-(4-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)phenyl)-N-(p-tolyl)aniline (BE-2))、



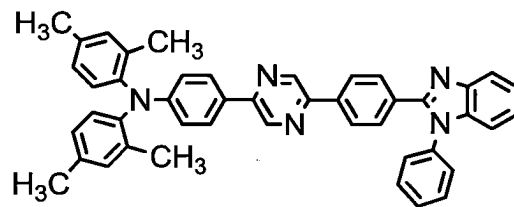
N-苯基-N-(4-(5-(6-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)吡啶-3-基)吡嗪-2-基)苯基)萘-1-胺 (BE-3)(N-phenyl-N-(4-(5-(6-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyridin-3-yl)pyrazin-2-yl)phenyl)naphthalen-1-amine (BE-3))、



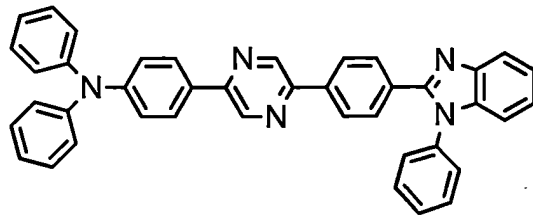
N-苯基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)-N-(1-萘基)苯胺 (BE-4)(N-phenyl-N-(4-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)phenyl)naphthalen-1-amine (BE-4))、



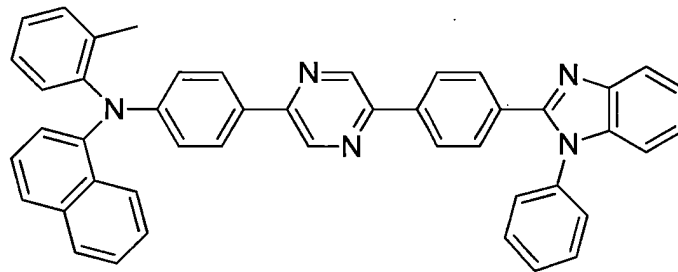
2-甲基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)-N-(鄰-甲苯基)苯胺 (BE-5)(2-methyl-N-(4-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)phenyl)-N-(o-tolyl)aniline (BE-5))、



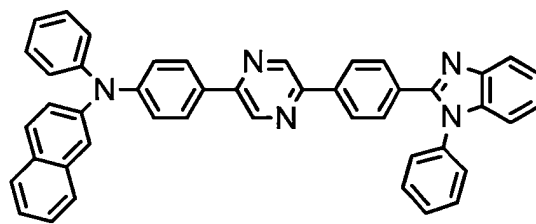
N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)苯胺 (BE-6)(N-(2,4-dimethylphenyl)-2,4-dimethyl-N-(4-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)phenyl)aniline (BE-6))、



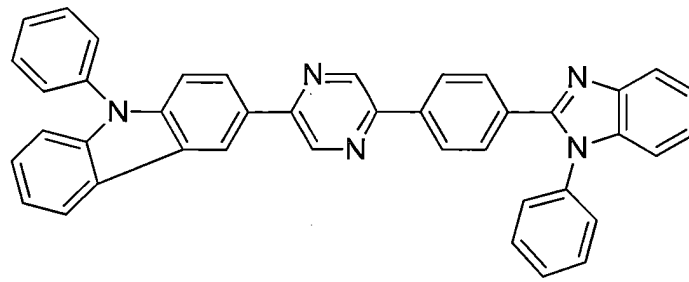
N,N-二苯基-4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯胺
(BE-7)(N,N-diphenyl-4-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)aniline (BE-7))、



N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)-N-(鄰甲苯基)萘-1-胺
(BE-8)(N-(4-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)phenyl)-N-(o-tolyl)naphthalen-1-amine (BE-8))、



N-苯基-N-(4-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)苯基)萘-2-胺
(BE-9)(N-phenyl-N-(4-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)phenyl)naphthalen-2-amine (BE-9))、



9-苯基-3-(5-(4-(1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基)苯基)吡嗪-2-基)-9H-卡唑 (BE-10)
 (9-phenyl-3-(5-(4-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl)pyrazin-2-yl)-9H-carbazole (BE-10))

【0096】 在一些實施例中，任何上述化學式、結構及/或名稱的化合物(以下稱為「本發明化合物」)可為電致發光，或可為螢光或磷光。在一些實施例中，該化合物具有在藍色或紫色可見光範圍內的螢光，或在紅色、橙色、黃色及/或綠色可見光範圍內的磷光。在一些實施例中，此化合物可具有大於約 2.5eV 的能量的最低能量三重態，如約 2.5eV 至約 4eV、約 2.5eV 至約 3.5eV、或約 3eV 至約 3.5eV。

【0097】 在一些實施例中，提供一種發光裝置，其包含如上所述的化合物。

【0098】 在一些實施例中，提供一種發光裝置，其中該化合物是在發光層的發光材料。

【0099】 一些實施例包含含有本發明化合物的組合物。含有本發明化合物的組合物可進一步包含螢光化合物或磷光化合物，且對於裝置中的發光如有機發光裝置可為有用的。

【0100】 在一些實施例中，有機發光裝置包含本發明化合物。例如，包含本發明化合物的有機構件可以被設置在陽極與陰極之間。

有機構件可進一步包含發光層，其中本發明化合物是在發光層中。在一些實施例中，裝置被配置使得電子可從陰極被轉移到有機構件，且電洞可以從陽極轉移到有機構件。

【0101】 本發明化合物在有機發光裝置中可具有高的光穩定性以及熱穩定性。本發明化合物也可有很平衡的電洞以及電子注入率以及遷移率。這可以提供具有高效率及/或長壽命的 OLED。本發明化合物也可形成無定形固體，其可使該化合物易於形成薄膜。

【0102】 一些實施例可具有由第 1 圖表示的結構。電洞注入層 10 被設置在陽極 5 上。電洞傳輸層 15 被設置在電洞注入層 15 上。發光層 20 被設置在電洞傳輸層 15 上。電子傳輸層 30 被設置在發光層 20 上，且陰極 35 被設置在電子傳輸層 30 上。

【0103】 陽極可以是包含傳統材料如金屬、混合金屬、合金、金屬氧化物或混合金屬氧化物、導電聚合物、及/或無機材料如奈米碳管(CNT)的層。合適的金屬的範例包含 1 族金屬，4、5、6 族金屬，以及 8 至 10 族的過渡金屬。如果陽極層是要透光的，在 10 族及 11 族中的金屬，如金、鉑以及銀或其之合金；或 12、13 族的混合金屬氧化物，以及 14 族的金屬，如氧化銦錫(ITO)、氧化銦鋅(IZO)、及其之類似物，都可以使用。在一些實施例中，陽極層可以是有機材料如聚苯胺。聚苯胺的使用在《自然》(Nature)，第 357 冊，第 477-479 頁(1992 年 6 月 11 日)「由可溶性導電聚合物所製成之可撓式發光二極體」中說明。在一些實施例中，陽極層可具有厚度在約 1nm 至約 1000nm 的範圍內。

【0104】 陰極可以是包含具有比陽極層還低的功函數的材料之層。用於陰極層合適的材料的範例包含 1 族的鹼金屬，2 族金屬，包

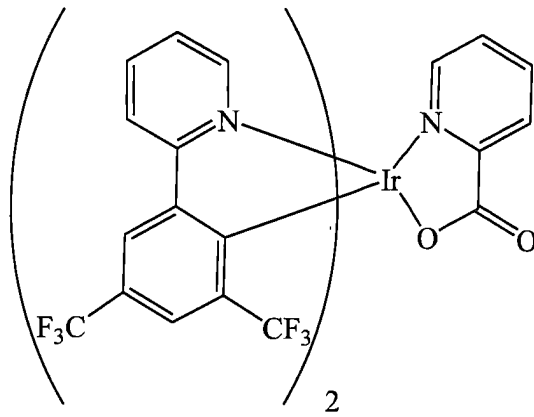
含稀土元素、鑰系元素及鋼系元素的第 12 族金屬，材料如鋁、銦、鈣、鋇、鈟、鎂及其之組合。含鋰的有機金屬化合物、氟化鋰(LiF)、及氧化鋰(Li₂O)也可以沉積在有機層及陰極層之間以降低工作電壓。合適的低功函數的金屬包含但不限於鋁、銀、鎂、鈣、銅、鎂/銀、氟化鋰/鋁、氟化銫、氟化銫/鋁或其之合金。在一些實施例中，陰極層可具有厚度在約 1nm 至約 1000nm 的範圍內。

【0105】 在一些實施例中，有機構件可以包含至少一發光層，其包含發光成份及作為主體的本發明化合物。在發光層中本發明化合物的量可以變化。在一個實施例中，在發光層中的本發明化合物的量占發光層的重量約在 1%至約 99.9%之範圍。在另一個實施例中，在發光層中的本發明化合物的量占發光層的重量在約 90%至約 99%的範圍。在另一個實施例中，在發光層中的本發明化合物的量占發光層的重量約為 97%。在一些實施例中，發光成份的質量為約 0.1%至約 10%、約 1%至約 5%、或約 3%的發光層的質量。發光成份可以是螢光及/或磷光化合物。

【0106】 發光成份可包含銱配位化合物如：雙-{2-[3,5-雙(三氟甲基)苯基]吡啶-N,C2'}銱(III)吡啶甲酸酯(bis-{2-[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]pyridinato-N,C2'}iridium(I II)-picolinate)；雙(2-[4,6-二氟苯基]吡啶-N,C2')銱(III)吡啶甲酸酯(bis(2-[4,6-difluorophenyl]pyridinato-N,C2')iridium(III)picolinate)；雙(2-[4,6-二氟苯基]吡啶-N,C2')銱(乙醯丙酮)(bis(2-[4,6-difluorophenyl]pyridinato-N,C2')iridium(acetylacetonate))；銱(III)雙(4,6-二氟苯基吡啶)-3-(三氟甲基)-5-(吡啶-2-基)-1,2,4-三唑鹽

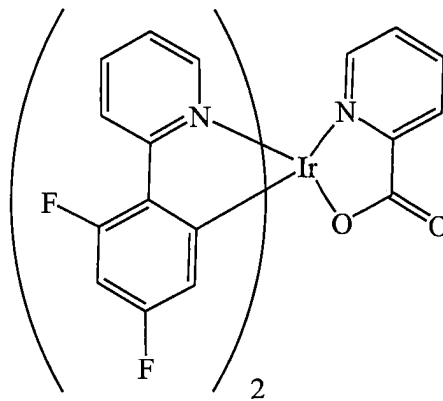
(Iridium(III)bis(4,6-difluorophenylpyridinato)-3-(trifluoromethyl)-5-(pyridin-2-yl)-1,2,4-triazolate) ; 銱 (III) 雙 (4,6- 二 氟 苯 基 吡 啶)-5-(吡 啶 -2 基)-1H- 四 唑 鹽 (Iridium(III)bis(4,6-difluorophenylpyridinato)-5-(pyridin-2-yl)-1H-tetrazolate) ; 雙 [2-(4,6-二氟苯基)吡啶-N,C2']銱 (III)四 (1-吡唑基) 硼 酸 鹽 (bis[2-(4,6-difluorophenyl)pyridinato-N,C2']iridium(III)tetra(1-pyrazolyl)borate) ; 雙 [2-(2'-苯並噻吩基)-吡啶根基-N,C3']銱 (III)(乙醯丙酮)(Bis[2-(2'-benzothienyl)-pyridinato-N,C3']iridium(III)(acetylacetonate)) ; 雙 [(2- 苯 基 喹 啉)-N,C2'] 銱 (III)(乙 醯 丙 酮)(Bis[(2-phenylquinolyl)-N,C2']iridium(III)(acetylacetonate)) ; 雙 [(1- 苯 基 異 喹 啉 -N,C2')] 銱 (III)(乙 醯 丙 酮)(Bis[(1-phenylisoquinolinato-N,C2')]iridium(III)(acetylacetonate)) ; 雙 [(二 苯 並 [f,h] 喹 喔 啉 -N,C2') 銱 (III)(乙 醯 丙 酮)(Bis[(dibenzo[f,h]quinoxalino-N,C2')]iridium(III)(acetylacetonate)) ; 三 (2,5- 雙 -2'-(9',9'- 二 己 基 芴) 吡 啶) 銱 (III)(Tris(2,5-bis-2'-(9',9'-dihexylfluorene)pyridine)iridium(III)) ; 三 [1- 苯 基 異 喹 啉 -N,C2'] 銱 (III)(Tris[1-phenylisoquinolinato-N,C2']iridium(III)) ; 三-[2-(2'-苯並噻吩基)-吡啶-N,C3']銱 (III)(Tris-[2-(2'-benzothienyl)-pyridinato-N,C3']iridium(III)) ; 三 [1- 噻 吩 -2- 基 異 喹 啉 -N,C3'] 銱 (III)(Tris[1-thiophen-2-ylisoquinolinato-N,C3']iridium(III)) ; 三 [1-(9,9- 二 甲 基 -9H- 芴 -2- 基) 異 喹 啉 -(N,C3') 銱 (III)(Tris[1-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)isoquinolinato-(N,C3')i

ridium(III))) ; 雙 (2- 苯 基 吡 啶 -N,C2') 銱 (III)(乙 醯 丙 酮)
(Bis(2-phenylpyridinato-N,C2')iridium(III)(acetylacetonate)[Ir(ppy)
]₂(acac))] ; 雙 (2-(4- 甲 苯 基) 吡 啶 -N,C2') 銱 (III)(乙 醯 丙 酮)
(Bis(2-(4-tolyl)pyridinato-N,C2')iridium(III)(acetylacetonate)[Ir(m
ppy)₂(acac))] ; 雙 (2-(4- 叔 丁 基) 吡 啶 -N,C2') 銱 (III)(乙 醯 丙 酮)
(Bis(2-(4-tert-butyl)pyridinato-N,C2')iridium(III)(acetylacetonate)
[Ir(*t*-Buppy)₂(acac))] ; 三 (2- 苯 基 吡 啶 -N,C2') 銱 (III)
(Tris(2-phenylpyridinato-N,C2')iridium(III)[Ir(ppy)₃]) ; 雙 (2- 苯 基
噁 唑 啉 -N,C2') 銱 (III)(乙 醯 丙 酮)
(Bis(2-phenyloxazolinato-N,C2')iridium(III)(acetylacetonate)[Ir(op
]₂(acac))] ; 三 (2-(4- 甲 苯 基) 吡 啶 -N,C2') 銱 (III)
(Tris(2-(4-tolyl)pyridinato-N,C2')iridium(III)[Ir(mppy)₃]) ; 雙 [2-
苯 基 苯 並 噁 唑 -N,C2'] 銱 (III)(乙 醯 丙
酮)(Bis[2-phenylbenzothiazolato-N,C2']iridium(III)(acetylacetonat
e)) ; 雙 [2-(4- 叔 丁 基 苯 基) 苯 並 噁 唑 -N,C2'] 銱 (III)(乙 醯 丙
酮)(Bis[2-(4-tert-butylphenyl)benzothiazolato-N,C2']iridium(III)(a
cetylacetonate)) ; 雙 [(2-(2'-噁吩基)吡啶-N,C3')]銱(III)(乙醯丙酮)
(Bis[(2-(2'-thienyl)pyridinato-N,C3')]iridium(III)(acetylacetonate)
); 三 [2-(9.9- 二 甲 基 芴 -2- 基) 吡 啶 -(N,C3')] 銱
(III)(Tris[2-(9.9-dimethylfluoren-2-yl)pyridinato-(N,C3')]iridium(I
II)) ; 雙 [5-三 氟 甲 基 -2-[3-(N- 苯 基 咪 唑) 吡 啶 -N,C2'] 銱 (III)(乙 醯 丙
酮)(Bis[5-trifluoromethyl-2-[3-(N-phenylcarbazolyl)pyridinato-N,C
2']iridium(III)(acetylacetonate)) ; (2-PhPyCz)₂Ir(III)(acac) ; 等 。

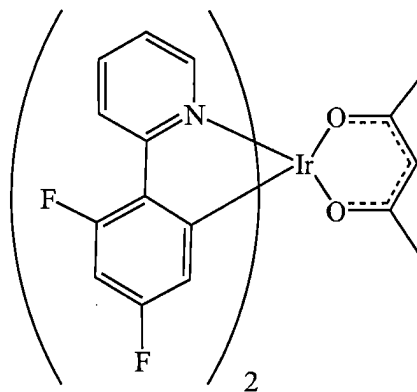


雙-{2-[3,5-雙(三氟甲基)苯基]吡啶-N,C2'}銱(III)吡啶甲酸酯

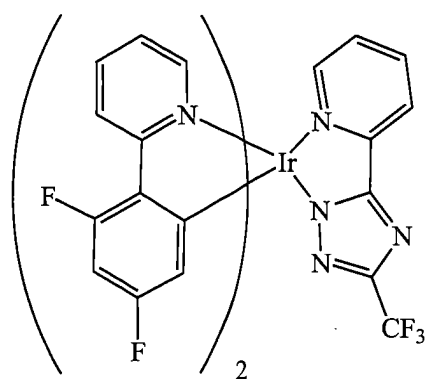
(Ir(CF₃ppy)₂(Pic))



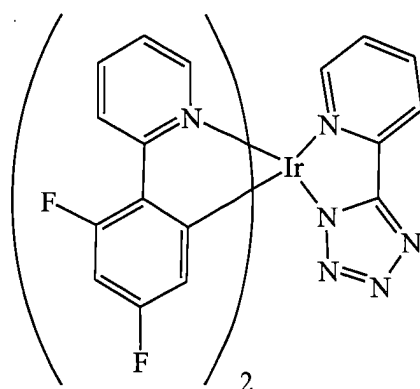
雙(2-[4,6-二氟苯基]吡啶-N,C2')銱(III)吡啶甲酸酯 [FIrPic]



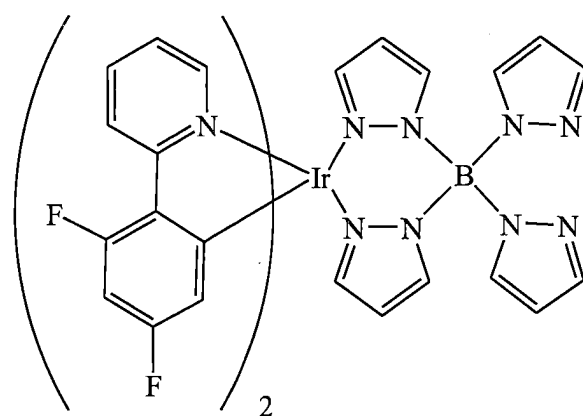
雙(2-[4,6-二氟苯基]吡啶-N,C2')銱(乙醯丙酮) [FIr(acac)]



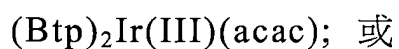
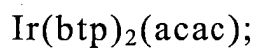
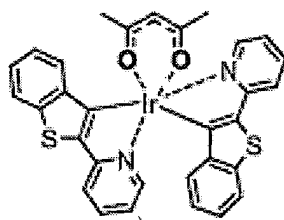
銱(III)雙(4,6-二氟苯基吡啶)-3-(三氟甲基)-5-(吡啶-2-基)-1,2,4-三
唑鹽(Firtaz)



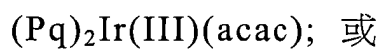
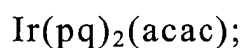
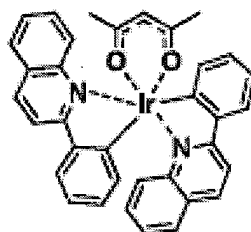
銱(III)雙(4,6-二氟苯基吡啶)-5-(吡啶-2基)-1H-四唑鹽(FirN4)



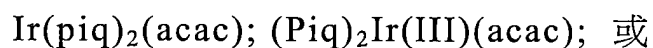
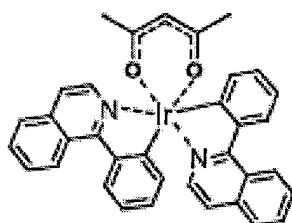
雙[2-(4,6-二氟苯基)吡啶-N,C2']銱(III)四(1-吡唑基)硼酸鹽(Fir6)



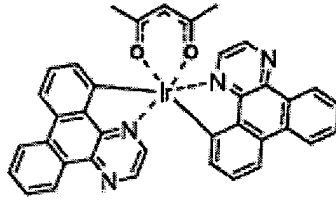
雙[2-(2'-苯並噻吩基)-吡啶根基-N,C3']銱(III)(乙醯丙酮)



雙[(2-苯基喹啉)-N,C2']銱(III)(乙醯丙酮)



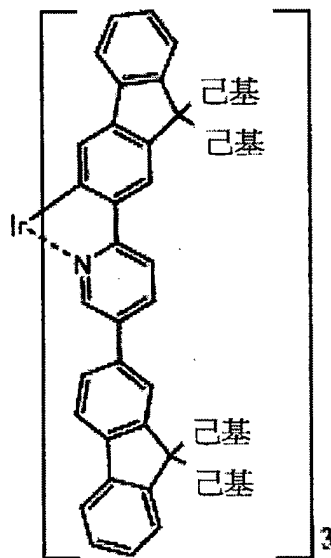
雙[(1-苯基異喹啉-N,C2')]銱(III)(乙醯丙酮)



$\text{Ir}(\text{DBQ})_2(\text{acac});$

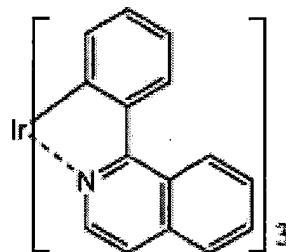
$(\text{DBQ})_2\text{Ir}(\text{acac});$ 或

雙[(二苯並[f,H]喹啉-N,C2')銱(III)(乙醯丙酮)]



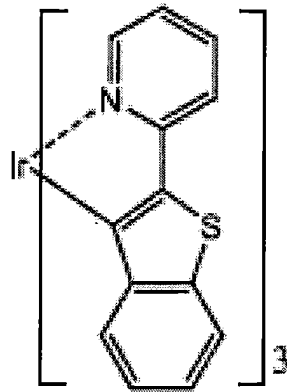
$\text{Ir}(\text{HFP})_3$ 或

三(2,5-雙-2'-(9',9'-二己基芴)吡啶)銱(III)



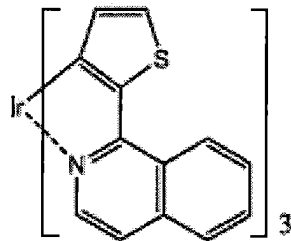
$\text{Ir}(\text{piq})_3;$ 或

三[1-苯基異喹啉-N,C2']銱(III)



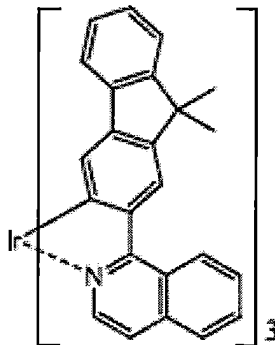
$\text{Ir}(\text{btp})_3$ 或

三-[2-(2'-苯並噻吩基)-吡啶-N,C3']銱(III)



$\text{Ir}(\text{tiq})_3$ 或

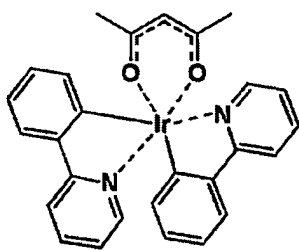
三[1-噻吩-2-基異喹啉-N,C3']銱(III)



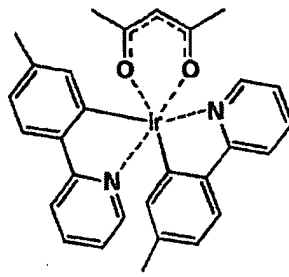
$\text{Ir}(\text{flil})_3$;

$\text{Ir}(\text{fliq})_3$; 或

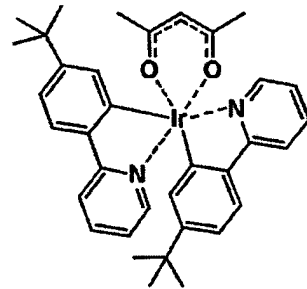
三[1-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)異喹啉-(N,C3')銱(III)]



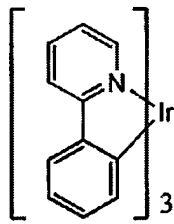
Ir(ppy)₂(acac)



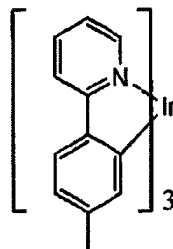
Ir(mppy)₂(acac)



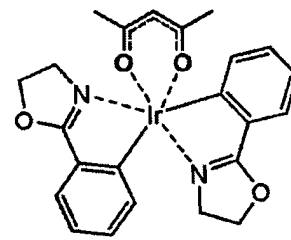
Ir(t-Buppy)₂(acac)



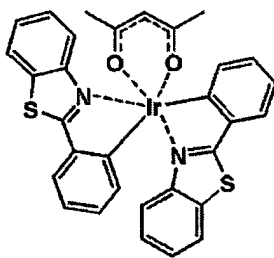
Ir(ppy)₃



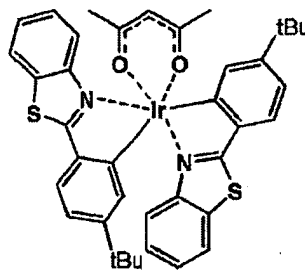
Ir(mppy)₃



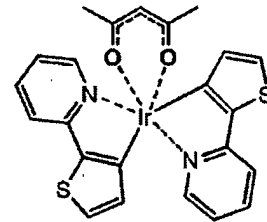
Ir(op)₂(acac)



(bt)₂Ir(III)(aca)



(t-bt)₂Ir(III)(acac)



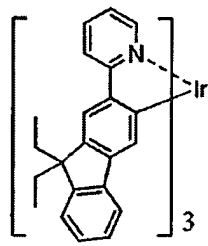
(thp)₂Ir(III)(acac)

c)

雙[2-苯基苯並噻唑-N,C2']銱(III)(乙醯丙酮)

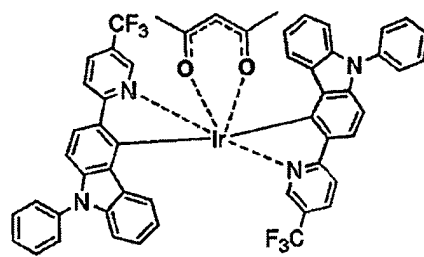
雙[2-(4-叔丁基苯基)苯並噻唑-N,C2']銱(III)(乙醯丙酮)

雙[(2-(2'-噻吩基)吡啶-N,C3')]銱(III)(乙醯丙酮)

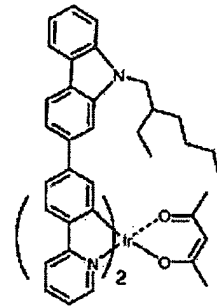
[Ir(Flpy)₃]

三[2-(9,9-二甲
基芴-2-基)吡
啶-(N,C3')]銱

(III)

(Cz-CF₃)Ir(III)(acac)

雙[5-三氟甲基-2-[3-(N-
苯基卡唑)吡啶-N,C2']銱
(III)(乙醯丙酮)

(2-PhPyCz)₂Ir(III)(

acac)

【0107】發光層的厚度可改變。在一個實施例中，發光層具有厚度在約 1nm 至約 150nm 或約 200nm 的範圍內。

【0108】在一些實施例中，有機構件可進一步包含設置在陽極以及發光層之間的電洞傳輸層。電洞傳輸層可包含至少一電洞傳輸材料。電洞傳輸材料可包含但不限於經芳香族取代之胺 (aromatic-substituted amine)、卡唑 (carbazole)、聚乙烯卡唑 (polyvinylcarbazole, PVK)，例如聚(9-乙烯卡唑)(poly(9-vinylcarbazole))；聚芴 (polyfluorene)；聚芴共聚物 (polyfluorene copolymer)；聚(9,9-二-n-辛基芴-alt-苯並噻二唑)(poly(9,9-di-n-octylfluorene-alt-benzothiadiazole))；聚(對伸苯基)(poly(paraphenylene))；聚[2-(5-氰基-5-甲基己氧基)-1,4-伸苯基](poly[2-(5-cyano-5-methylhexyloxy)-1,4-phenylene])；聯苯胺 (benzidine)；苯二胺 (phenylenediamine)；酞菁金屬錯合物 (phthalocyanine metal complex)；聚乙炔 (polyacetylene)；聚噻吩

(polythiophene)；三苯胺(triphenylamine)；噁二唑(oxadiazole)；銅酞菁(copper phthalocyanine)；1,1-雙(4-雙(4-甲基苯基)胺苯基)環己烷(1,1-Bis(4-bis(4-methylphenyl)aminophenyl)cyclohexane)；2,9-二甲基-4,7-聯苯-1,10-啡啉(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)；3,5-雙(4-叔-丁基-苯基)-4-苯基[1,2,4]三唑(3,5-bis(4-tert-butyl-phenyl)-4-phenyl[1,2,4]triazole)；3,4,5-聯三苯-1,2,3-三唑(3,4,5-triphenyl-1,2,3-triazole)；4,4',4'-三(3-甲基苯基胺基)三苯胺(4,4',4'-tris(3-methylphenylphenylamino)triphenylamine，MTDATA)；N,N'-雙(3-甲基苯基)N,N'-聯苯-[1,1'-聯苯]-4,4'-二胺(N,N'-bis(3-methylphenyl)N,N'-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine，TPD)；4,4'-雙[N-(萘基)-N-苯基-胺基]聯苯(4,4'-bis[N-(naphthyl)-N-phenyl-amino]biphenyl， α -NPD)；4,4',4''-參(咔唑-9-基)-三苯胺(4,4',4''-tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine，TCTA)；4,4'-雙[N,N'-(3-甲苯基)胺基]-3,3'-二甲基聯苯(4,4'-bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl，HMTDP)；4,4'-N,N'-二咔唑-聯苯(4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl，CBP)；1,3-N,N-二咔唑-苯(1,3-N,N-dicarbazole-benzene，mCP)；雙[4-(p,p'-二甲苯基-胺基)苯基]聯苯矽烷(Bis[4-(p,p'-ditolyl-amino)phenyl]diphenylsilane，DTASi)；2,2'-雙(4-咔唑苯基)-1,1'-聯苯(2,2'-bis(4-carbazolylphenyl)-1,1'-biphenyl，4CzPBP)；N,N',N''-1,3,5-三咔唑苯(N,N',N''-1,3,5-tricarbazoloylbenzene，tCP)；N,N'-雙(4-丁基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(N,N'-bis(4-butylphenyl)-N,N'-bis(phenyl)benzidine)；或類似物。

【0109】 在一些實施例中，有機構件可以進一步包含設置在陰極以及發光層之間的電子傳輸層。電子傳輸材料的實例可以包含，但不限於 2-(4-聯苯基)-5-(4-叔-丁基苯基)-1,3,4-噁二唑 (2-(4-biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole, PBD)；1,3-雙(N,N-叔-丁基-苯基)-1,3,4-噁二唑 (1,3-bis(N,N-t-butyl-phenyl)-1,3,4-oxadiazole, OXD-7)；1,3-雙[2-(2,2'-二吡啶-6-基)-1,3,4-噁二唑-5-基]苯 (1,3-bis[2-(2,2'-bipyridine-6-yl)-1,3,4-oxadiazole-5-yl]benzene)；3-苯基-4-(1'-萘基)-5-苯基-1,2,4-三唑 (3-phenyl-4-(1'-naphthyl)-5-phenyl-1,2,4-triazole, TAZ)；2,9-二甲基-4,7-聯苯-啡啉 (2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-phenanthroline, 浴銅靈 (bathocuproine) 或 BCP)；三(8-羥基喹啉)鋁 (aluminum tris(8-hydroxyquinolate), Alq₃)；以及 1,3,5-參(2-N-苯基苯并咪唑基)苯 (1,3,5-tris(2-N-phenylbenzimidazolyl)benzene)；1,3-雙[2-(2,2'-二吡啶-6-基)-1,3,4-噁二唑-5-基]苯 (1,3-bis[2-(2,2'-bipyridine-6-yl)-1,3,4-oxadiazole-5-yl]benzene, BPY-OXD)；3-苯基-4-(1'-萘基)-5-苯基-1,2,4-三唑 (3-phenyl-4-(1'-naphthyl)-5-phenyl-1,2,4-triazole, TAZ)；2,9-二甲基-4,7-聯苯-啡啉 (2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-phenanthroline, 浴銅靈 或 BCP)；以及 1,3,5-參[2-N-苯基苯并咪唑-z-基]苯 (1,3,5-tris[2-N-phenylbenzimidazol-z-yl]benzene, TPBI)。在一實施例中，電子傳輸層為喹啉鋁 (aluminum quinolate, Alq₃)、2-(4-聯苯基)-5-(4-叔-丁基苯基)-1,3,4-噁二唑 (2-(4-biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole, PBD)、啡啉、喹啉、1,3,5-參[N-苯基苯并咪唑-z-基]苯 (1,3,5-tris[N-phenylbenzimidazol-z-yl]benzene, TPBI)、或其衍生

物或組合物。

【0110】 若需要，在發光裝置中可包含額外層。這些額外層可包含電子注入層 (EIL)、電洞阻擋層 (HBL)、激子阻擋層 (exciton-blocking layer, EBL)、及/或電洞注入層 (HIL)。除了分離層外，這些材料之一些可結合為單一層。

【0111】 在一些實施例中，發光裝置可包含在陰極層以及發光層之間的電子注入層。其他合適的電子注入材料也可包含在內，並且是本技術領域具有通常知識者所習知的。可包含於電子注入層之適當材料之例子包含但不限於選自於下列之經選擇性取代之化合物：喹啉鋁 (Alq_3)、2-(4-聯苯基)-5-(4-叔-丁基苯基)-1,3,4-噁二唑 (2-(4-biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole, PBD)、啡啉、喹喔啉、1,3,5-參[N-苯基苯并咪唑-z-基]苯 (TPBI)、三氫雜苯、例如三(8-羥基喹啉)鋁之8-羥基喹啉 (8-hydroxyquinoline) 之金屬螯合物 (metal chelate)、以及例如雙(8-喹啉硫醇)鋅 (bis(8-quinolinethiolato)zinc) 之金屬硫氧化物 (metal thioxinoid) 化合物。在一實施例中，電子注入層為喹啉鋁 (Alq_3)、2-(4-聯苯基)-5-(4-叔-丁基苯基)-1,3,4-噁二唑 (PBD)、啡啉、喹喔啉、1,3,5-參[N-苯基苯并咪唑-z-基]苯 (TPBI)、或其衍生物或組合物。

【0112】 在一些實施例中，裝置可以包含電洞阻擋層，例如，在陰極以及發光層之間。可以包含在電洞阻擋層之各種合適的電洞阻擋材料是本技術領域具有通常知識者所習知的。合適的電洞阻擋材料，包含但不限於，選自於下列之經選擇性取代之化合物：浴銅靈 (BCP)、3,4,5-聯三苯-1,2,4-三唑 (3,4,5-triphenyl-1,2,4-triazole)、3,5-雙(4-叔-丁基-苯基)-4-苯基

-[1,2,4]三唑(3,5-bis(4-tert-butyl-phenyl)-4-phenyl-[1,2,4]triazole)、2,9-二甲基-4,7-聯苯-1,10-啡啉(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)、以及1,1-雙(4-雙(4-甲基苯基)胺苯基)-環己烷(1,1-bis(4-bis(4-methylphenyl)aminophenyl)-cyclohexane)。

【0113】 在一些實施例中，發光裝置可包含激子阻擋層，例如位於發光層與陽極之間。在一實施例中，包含激子阻擋層之材料之能隙大到足以實質上避免激子擴散。包含於激子阻擋層之適當激子阻擋材料之數量為本發明所屬技術領域中具有通常知識者已知的。可構成激子阻擋層之材料之例子包含選自於下列之經選擇性取代之化合物：喹啉鋁(Alq_3)、4,4'-雙[N-(萘基)-N-苯基-胺基]聯苯(4,4'-bis[N-(naphthyl)-N-phenyl-amino]biphenyl, α -NPD)、4,4'-N,N'-二咪唑-聯苯(4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl, CBP)、以及浴銅靈(BCP)、以及具有足夠大之能隙以實質上避免激子擴散之任何其他材料。

【0114】 在一些實施例中，發光裝置可以包含電洞注入層，例如，在發光層以及陽極之間。電洞注入層可以包含本發明化合物作為電洞注入材料。合適的電洞注入材料的其他範例包含，但不限於，選自下列經選擇性取代的化合物：例如聚(3,4-乙烯二氧噻吩/聚苯乙烯磺酸(poly(3,4-ethylenedioxythiophene(PEDOT)/polystyrene sulphonic acid(PSS))之聚噻吩衍生物(polythiophene derivative)；例如N,N,N',N'-四苯基聯苯胺(N,N,N',N'-tetraphenylbenzidine)、聚(N,N'-雙(4-丁基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺)(poly(N,N'-bis(4-butylphenyl)-N,N'-bis(phenyl)benzidine)之聯苯胺衍生物(benzidine derivative)；例如N,N'-雙(4-甲基苯

基)-N,N'- 雙 (苯 基)-1,4- 苯 二 胺 (N,N'-bis(4-methylphenyl)-N,N'-bis(phenyl)-1,4-phenylenediamine) 、 4,4',4''- 參 (N-(萘 -2- 基)-N- 苯 胺 基) 三 苯 胺 (4,4',4''-tris(N-(naphthylen-2-yl)-N-phenylamino)triphenylamine) 之 三 苯 胺 (triphenylamine) 或 苯 二 胺 衍 生 物 (phenylenediamine derivative) ; 例 如 1,3-雙 (5-(4-聯 苯 胺 基) 苯 基 -1,3,4-噁 唑 -2-基) 苯 (1,3-bis(5-(4-diphenylamino)phenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)benzene) 之 噁 二 唑 衍 生 物 (oxadiazole derivative) ; 例 如 聚 (1,2-雙 - 苯 甲 硫 基 - 乙 炔)(poly(1,2-bis-benzylthio-acetylene)) 之 聚 乙 炔 衍 生 物 (polyacetylene derivative) ; 以 及 例 如 酞 菁 銅 之 酞 菁 金 屬 錯 合 物 衍 生 物 (phthalocyanine metal complex derivative) 。

【0115】 含有本發明化合物的發光裝置可以使用本發明所述技術領域中習知的技術來製造，如由本文提供的教示所提知。例如，玻璃基板可以高功函數的金屬如 ITO 來塗佈，其可以作為陽極。圖案化陽極層後，電洞注入層及/或電洞傳輸層可依順序沉積在陽極上。包含發光成份之發光層可沉積在陽極、電洞傳輸層或電洞注入層上。發光層可包含本發明化合物。電子傳輸層及/或電子注入層可依順序沉積在發光成份上。包含低功函數金屬(如 Mg:Ag)之陰極層可接著沉積，例如，通過氣相沉積或濺射。該裝置也可包含激子阻擋層、電子阻擋層、電洞阻擋層、第二發光層，或可以使用合適的技術被添加到裝置的其它層。

【0116】 在一些實施例中，包含本發明化合物的裝置與市售化合物相比可提供大幅增加之裝置壽命。在一些實施例中，該裝置可提供 T50(h) @ 10000 nit 至少約 125、150、175、185、及/或 200 小時的壽命。在一些實施例中，對於具有約 13.2 mm² 的主動發光

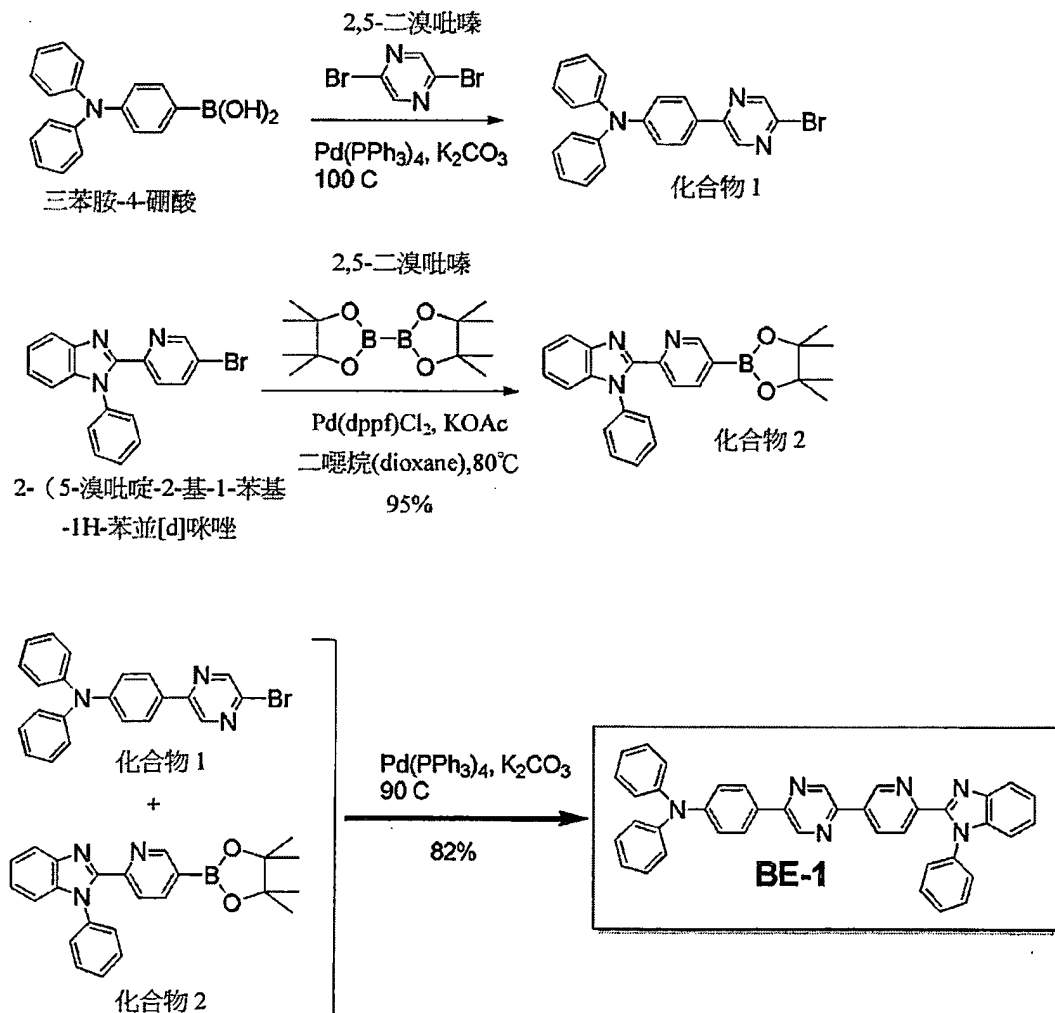
區域的裝置，在施加 16mA 的恆定電流至裝置(對應於大約 10000cd/m^2)後，所期望的壽命可通過由檢查明度(luminescent)，例如， cd/m^2 ，來檢查裝置之明度(luminescent)/發光(emissive)的衰減而測量。

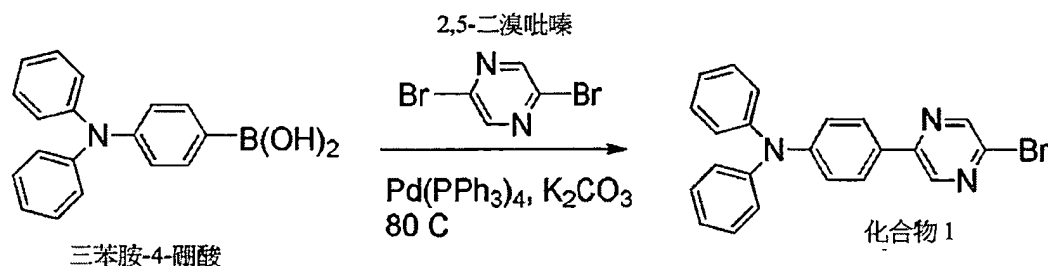
3.合成範例

4.範例 1.1

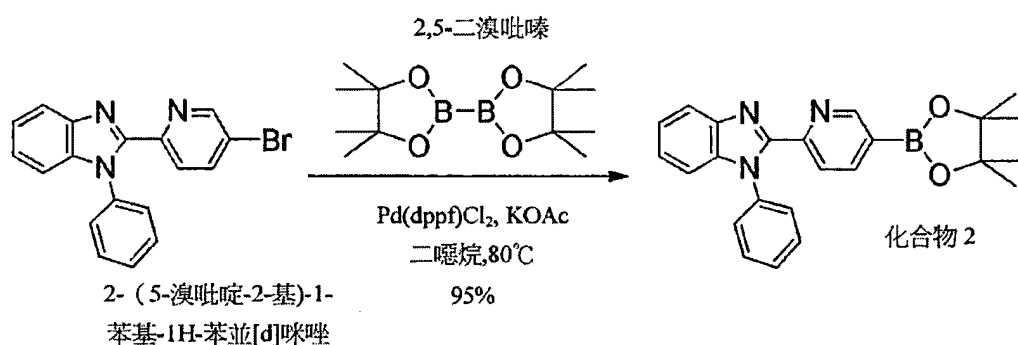
8-1.合成範例

BE-1 的合成



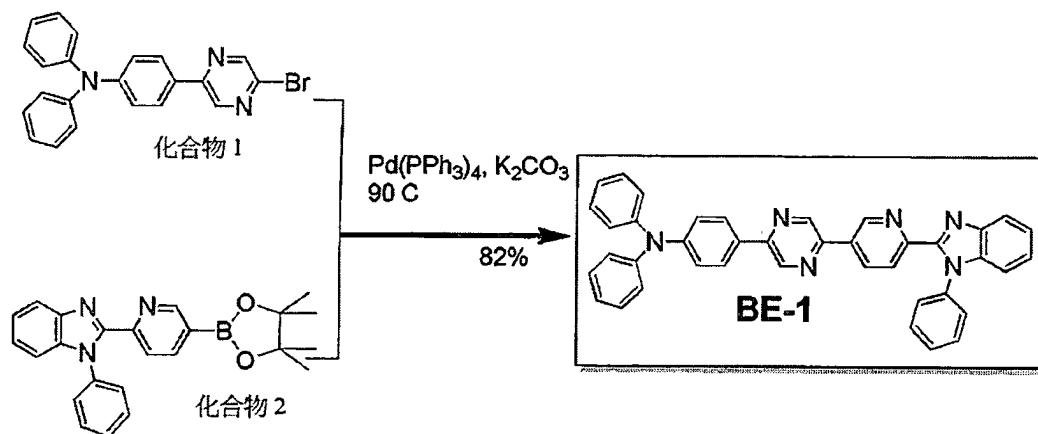


【0117】 4-(5-溴吡嗪-2-基)-N,N-二苯基苯胺(化合物 1)：三苯胺-4-硼酸 (1.0g, 3.46mmol)、2,5-二溴吡嗪 (1.81g, 7.6mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.2g, 0.17mmol)以及 K₂CO₃(1.05g, 7.6mmol)在二噁烷/水(40mL/8mL)中的混合物被除氣，並加熱至約 80°C 維持約 15 小時。將整個反應物用乙酸乙酯(200mL)進行後處理，用鹽水洗滌。將有機相用 Na₂SO₄ 乾燥，裝填(loaded on)在矽膠上，藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷(2:1 至 1:1 至 1:2)的洗提劑以快速柱層析 (flash column)來純化。收集所要的部分，且溶劑之除去會得到黃色固體(化合物 1)(0.99g, 產率 71%)。



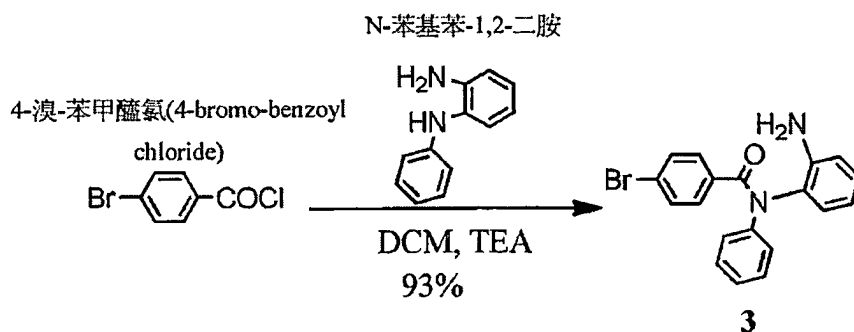
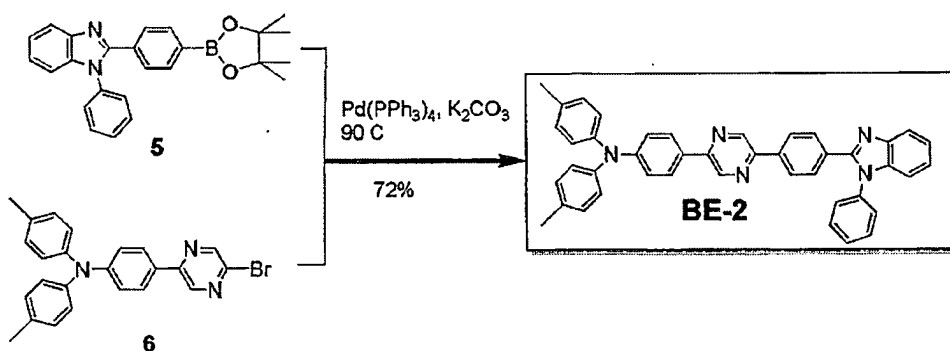
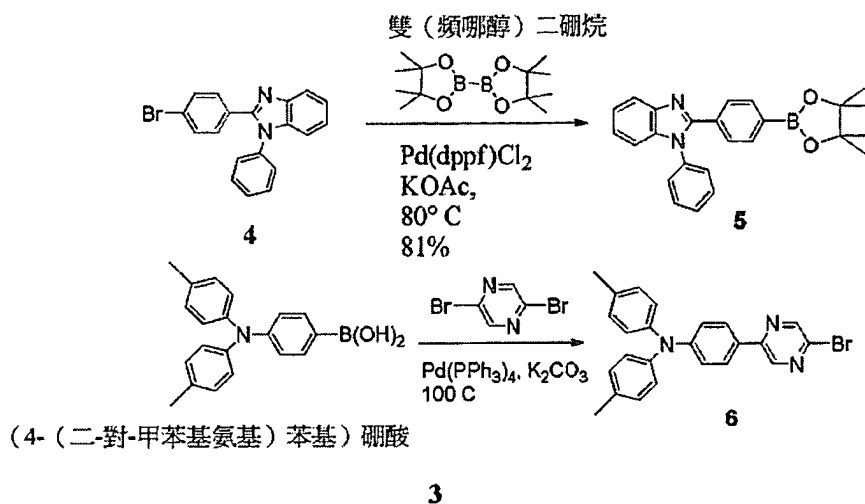
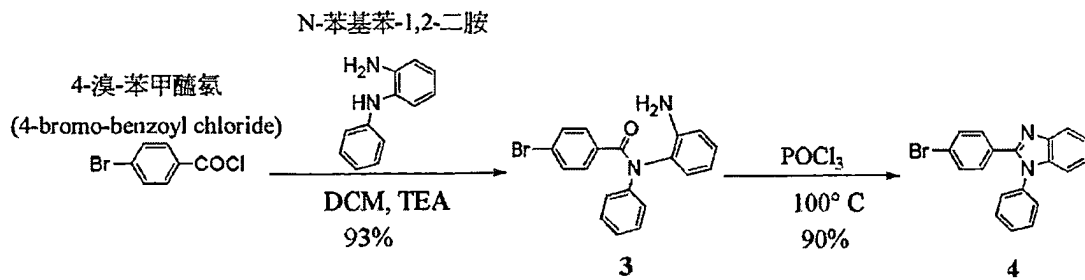
【0118】 1-苯基-2-(5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)吡嗪-2-基)-1H-苯並[d]咪唑 (1-Phenyl-2-(5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2-yl)-1H-benzimidazole)(化合物 2)：2-(5-溴吡嗪-2-基)-1-苯基-1H-苯並[d]咪唑 (2-(5-bromopyridin-2-yl)-1-phenyl-1H-benzimidazole)(1.015g,

2.9mmol)、雙(頻哪醇)二硼(bis(pinacolato)diboron)(0.76g, 3mmol)、KOAc(0.49g, 5mmol)以及 Pd(dppf)Cl₂(0.11g, 0.15mmol)在二噁烷(50mL)中的混合物進行除氣,並加熱至約 80°C 維持約 15 小時。將整個反應物用二氯甲烷/鹽水進行後處理。有機相被收集,且用 Na₂SO₄ 乾燥。在除去溶劑後,所得到的褐色油狀物(化合物 2)不經進一步純化用於下一步驟。

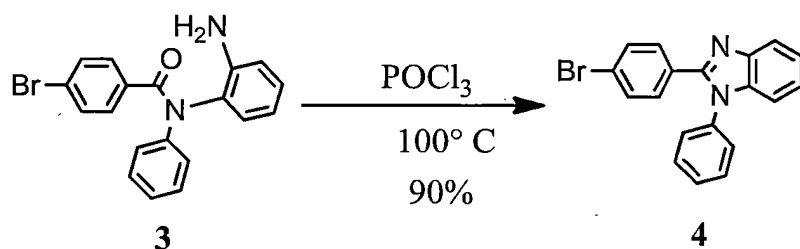


【0119】 化合物 BE-1：將 4-(5-溴吡啶-2-基)-N,N-二苯基苯胺(化合物 1)(0.99g, 2.46mmol)、1-苯基-2-(5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)吡啶-2-基)-1H-苯並[d]咪唑(化合物 2)(1.15g, 2.9mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.22g, 0.19mmol)以及 K₂CO₃ (1.0g, 7.2mmol)在二噁烷/水(60mL/10mL)中的混合物進行脫氣,並加熱至約 85 °C 過夜。黃色沉澱物形成。過濾後,收集固體,並用甲醇洗滌,然後加熱二氯甲烷(500mL)。收集黃色固體(BE-1), 1.20g, 產率 82%。通過 LCMS(APCI+)檢驗:C₄₀H₂₉N₆ (M+H) 的計算值(calcd): 593; 測定值(found): 593。

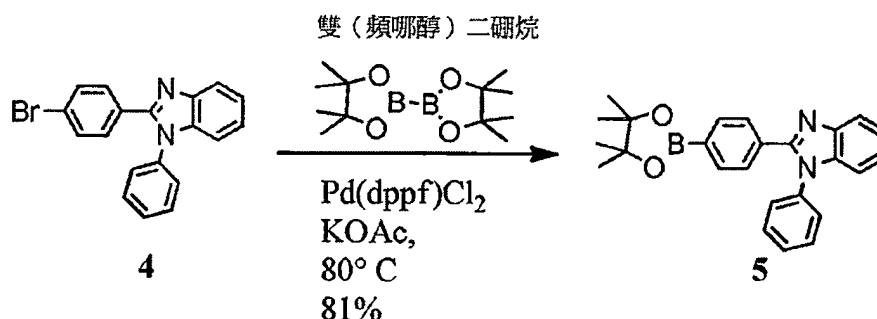
BE-2 的合成



【0120】 4-溴-N-(2-(苯基氨基)苯基)苯甲醯胺(化合物 3)：向 4-溴苯甲醯氯(11g, 50mmol)在無水二氯甲烷(DCM)(100ml)中的溶液加入 N-苯基苯-1,2-二胺(10.2g, 55mmol)，然後慢慢地加入三乙胺(triethylamine)(TEA)(17mL, 122mmol)。將整個混合物在室溫(RT)下攪拌過夜。過濾得到白色固體 3(6.5g)。將濾液用水(300mL)進行後處理，然後用 DCM(300mL)萃取三次。收集有機相並用 $MgSO_4$ 乾燥，在 DCM/己烷濃縮並再結晶以得到白色固體 3(10.6g)的另一部分。白色固體 3 的總量為 17.1g，產率 93%。

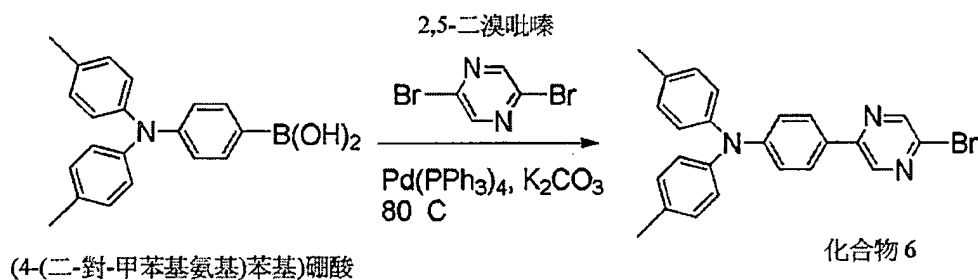


【0121】 2-(4- 溴 苯 基)-1- 苯 基 -1H- 苯 並 [d] 咪 唑 (2-(4-bromophenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole)(4)：向醯胺 3(9.6g, 26 mmol)在無水 1,4-二噁烷(100mL)之懸浮液緩慢加入磷醯氯($POCl_3$)(9.2mL, 100mmol)。然後整個在 $100^\circ C$ 下加熱過夜。在冷卻至室溫後，將混合物倒入冰(200g)攪拌。過濾，接著藉由在 DCM/己烷中再結晶，得到淺灰色固體 4(8.2g, 產率 90%)。

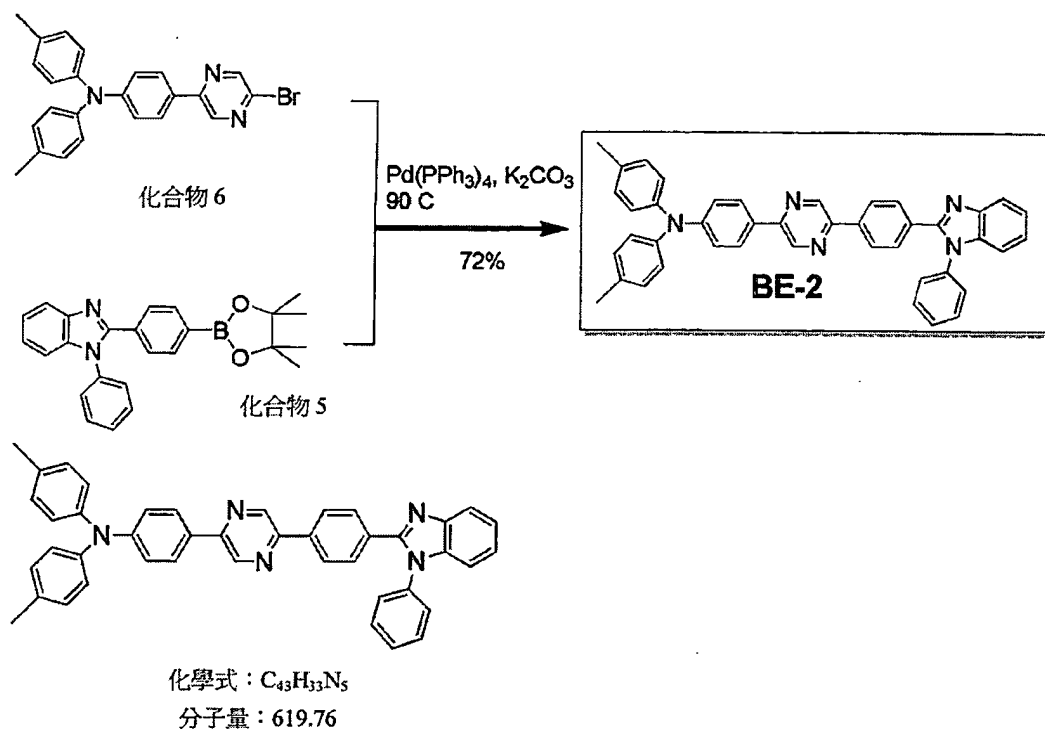


【0122】 1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯

基)-1H- 苯 並 [d] 咪 唑
 (1-phenyl-2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-1H-benzo[d]imidazole)(5)：將化合物 4(0.70g, 2mmol)、雙(頻哪醇)二硼烷(0.533g, 2.1mmol)、雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯化鈀(bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium)(Pd(dppf)Cl₂)(0.060g, 0.08mmol)以及無水乙酸鉀(KOAc)(0.393g, 4mmol)在 1,4-二噁烷(20ml)中的混合物在約 80°C 下在氫氣下加熱過夜。冷卻至室溫後，將整個用乙酸乙酯(80ml)稀釋，然後過濾。溶液在矽膠上吸收，然後藉由柱狀層析法(column chromatography)(己烷/乙酸乙酯 5:1 至 3:1)純化，以得到白色固體 5(0.64g, 產率 81%)。

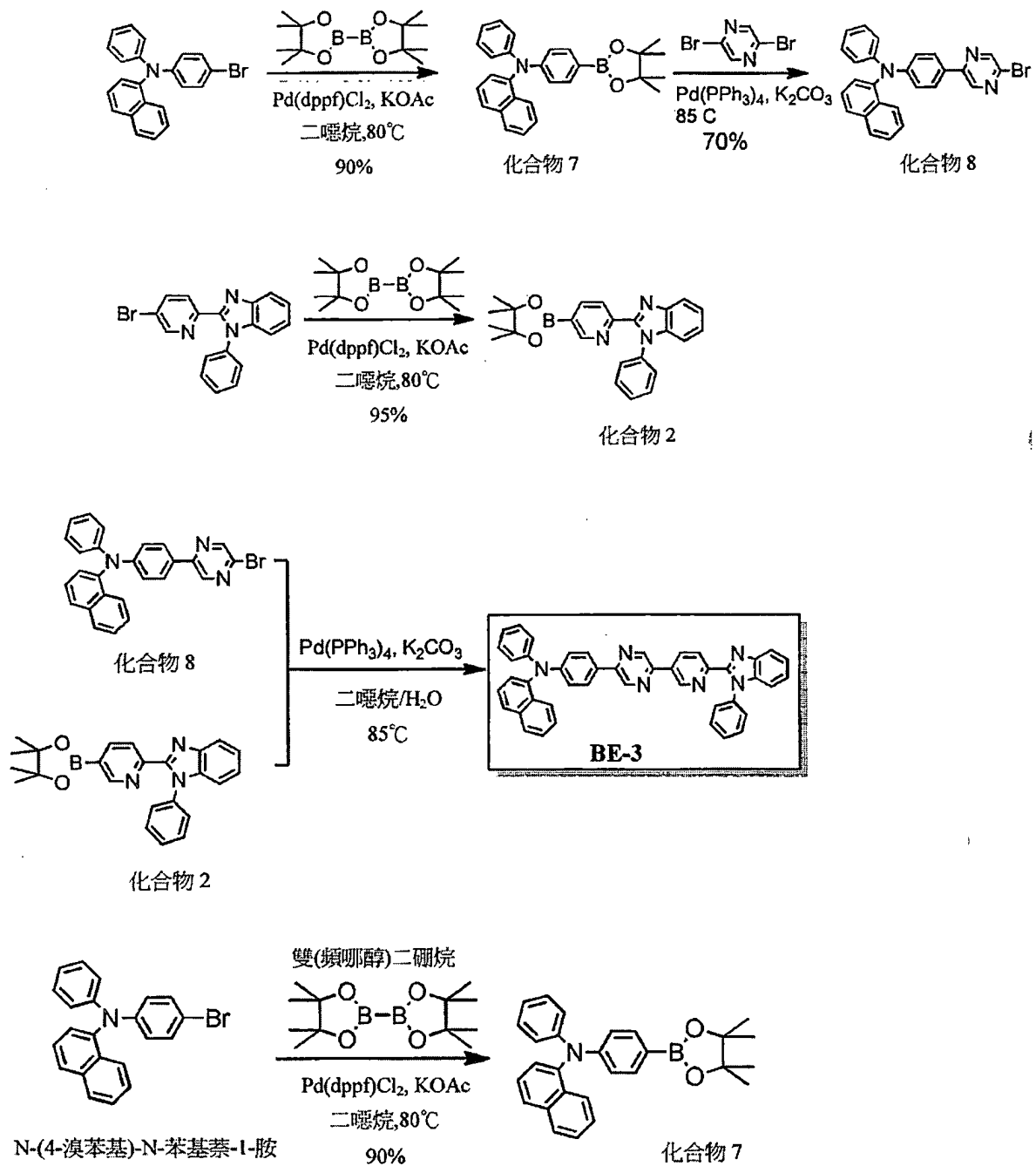


【0123】 4-(5- 溴 吡 嗪 -2- 基)-N,N- 二 - 對 - 甲 苯 基 苯 胺
 (4-(5-bromopyrazin-2-yl)-N,N-di-p-tolylaniline)(化 合 物 6)：將
 (4-(二 - 對 - 甲 苯 基 氨 基) 苯 基) 硼 酸
 ((4-(di-p-tolylamino)phenyl)boronic acid)(0.74g, 2.33mmol)、2,5-
 二溴吡嗪(1.19g, 5mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.14g, 0.12mmol)以及 K₂CO₃
 (0.69g, 5mmol)在二噁烷/水(80mL/10mL)中的混合物除氣，並加
 熱至約 80°C 過夜。將整個用乙酸乙酯(250mL)稀釋，用鹽水洗滌，
 經 Na₂SO₄ 乾燥，置於矽膠柱上，並藉由使用己烷洗提劑至己烷/
 二氯甲烷(3:1)以快速柱層析來純化。將所要的部分收集起來，在
 去除溶劑後得到黃色固體(6)，0.63g, 產率 63%。



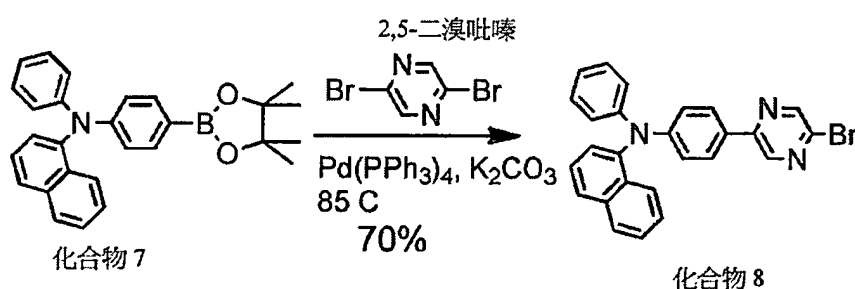
【0124】 化合物 BE-2：將 4-(5-溴吡嗪-2-基)-N,N-二-對-甲苯基苯胺(4-(5-bromopyrazin-2-yl)-N,N-di-p-tolylaniline)(化合物 6)(0.63g, 1.46mmol)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑(0.58g, 1.46mmol)(化合物 5)、Pd(PPh₃)₄(0.115g, 0.1mmol)以及 K₂CO₃(0.414g, 3mmol)在二噁烷/水(50mL/10mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 90°C 過夜。將所得溶液用乙酸乙酯(250mL)稀釋，用鹽水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至二氯甲烷至二氯甲烷/乙酸乙酯 4:1 之洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需黃色的部分，濃縮、在二氯甲烷/己烷中再結晶，以得到黃色結晶固體(化合物 6)(0.74g, 產率 82%)。通過 LCMS(APCI+)驗證：C₄₃H₃₄N₅(M+H)的計算值：620；測定值：620。

BE-3 的合成

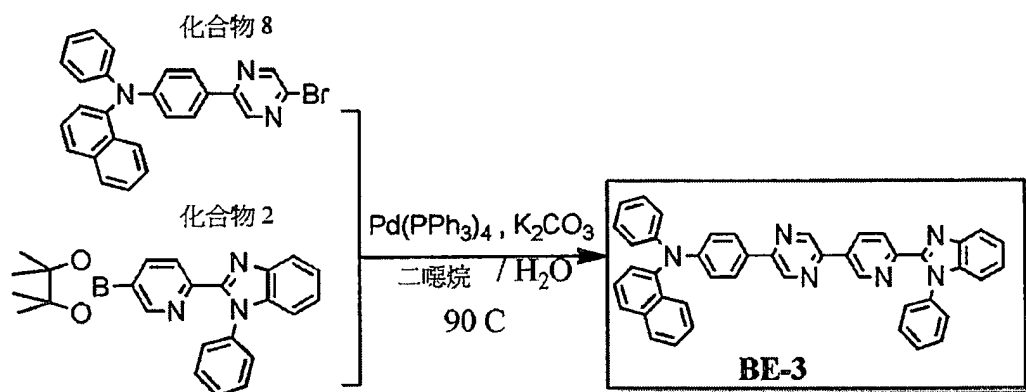


【0125】 N-苯基-N-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)萘-1-胺
 (N-phenyl-N-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)naphthalen-1-amine)(化合物 7)：將 N-(4-溴苯基)-N-苯基萘-1-胺
 (N-(4-bromophenyl)-N-phenylnaphthalen-1-amine)(7.14g, 19.1mmol)、雙(頻哪醇)二硼(5.08g, 20mmol)、Pd(dppf)Cl₂(0.73g,

1.0mmol)以及 KOAc(4.9mmol, 50mmol)在二噁烷(100mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 85°C 維持 15 小時。將所得混合物倒入乙酸乙酯(250mL)中，濾出沉澱物，裝填至矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷(8:1 至 6:1 至 2:1)的洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的部份，在除去溶劑後，得到白色固體(化合物 7)(6.0g, 產率 75%)。

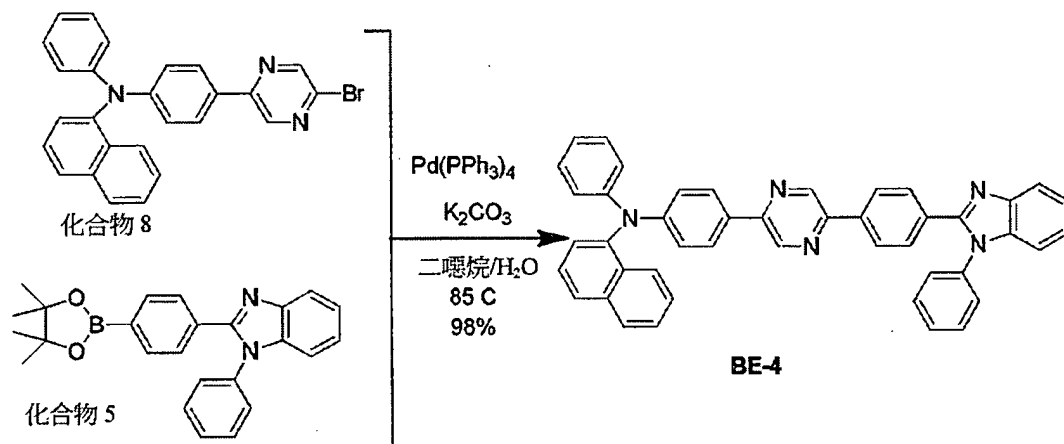


【0126】 N-(4-(5- 溴 吡 嗪 -2- 基) 苯 基)-N- 苯 基 萘 -1- 胺 (N-(4-(5-bromopyrazin-2-yl)phenyl)-N-phenyl-naphthalen-1-amine)(化合物 8)：將 N-苯基-N-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)萘-1-胺(化合物 7)(2.91g, 6.91mmol)、2,5-二溴吡嗪(3.56g, 13.8mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.346g, 0.3mmol)、K₂CO₃ (1.93g, 14mmol)在二噁烷/水(80mL/15mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 85 °C 過夜。將所得混合物用乙酸乙酯(250mL)稀釋，用鹽水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填至矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷(4:1 至 2:1 至 3:2)之洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的部份，除去溶劑後，得到黃色固體(化合物 8)(2.2g, 產率 70.4%)。



【0127】 化合物 BE-3: 將 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-N-苯基萘-1-胺(化合物 8)(1.17g, 2.6mmol)、1-苯基-2-(5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)吡啶-2-基)-1H-苯並[d]咪唑(化合物 2)(2.9mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.138g, 0.12mmol)以及 K_2CO_3 (0.69g, 5mmol)在二噁烷/水(70mL/16mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 90°C 過夜。將所得混合物用乙酸乙酯(200mL)稀釋，用鹽水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填至矽膠上並藉由使用己烷/二氯甲烷 1:1 至 1:2 至二氯甲烷至二氯甲烷/乙酸乙酯 10:1 至 4:1 之洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需部分並濃縮，以得到黃色固體(1.39g, 產率 83%)。藉由 LCMS(APCI+)驗證： $\text{C}_{44}\text{H}_{31}\text{N}_6$ (M+H)的計算值：643；測定值：643。

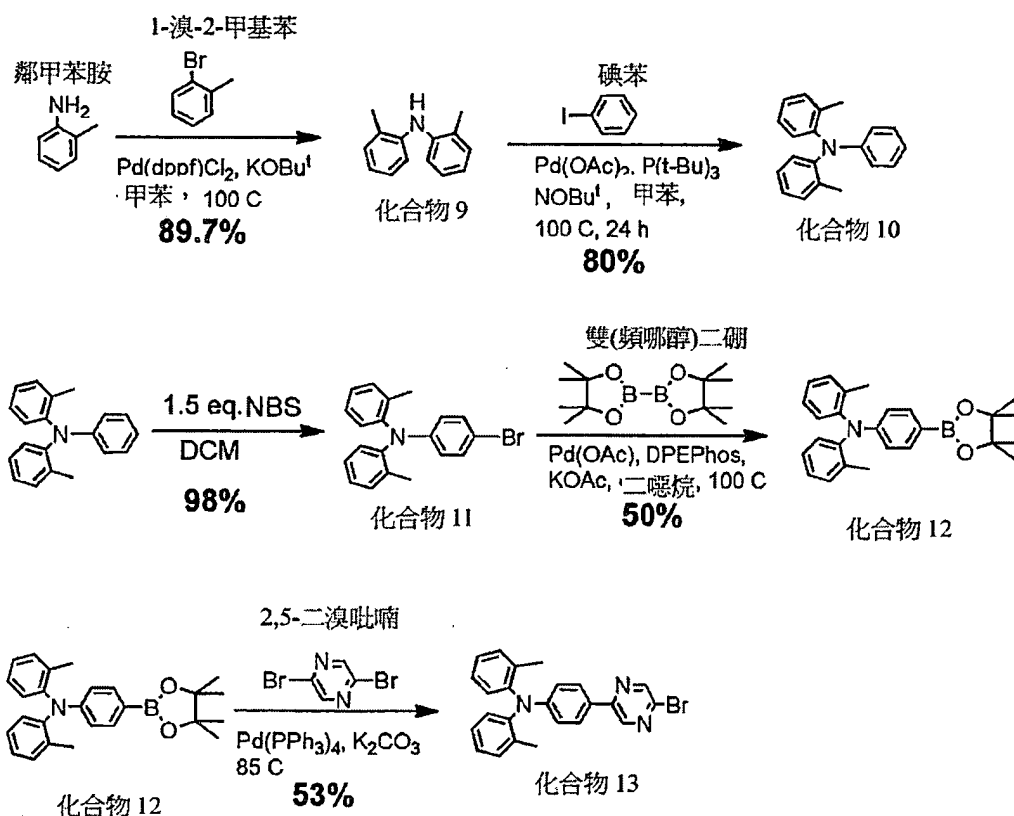
BE-4 的合成

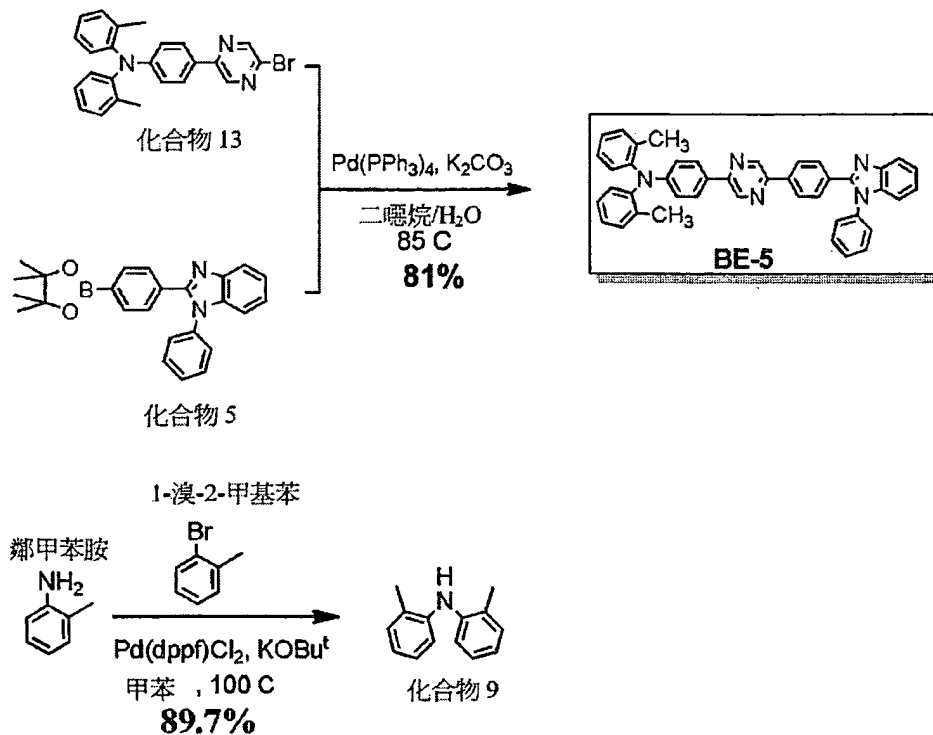


【0128】 化合物 BE-4: 將 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-N-苯基萘-1-

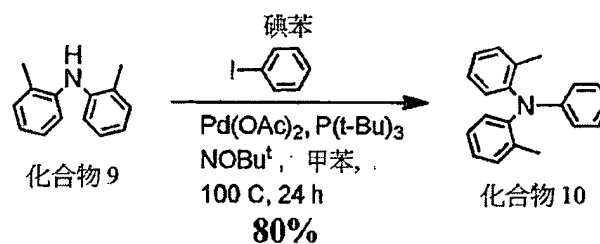
胺(化合物 8)(1.11g, 2.46mmol)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑(化合物 5)(0.95g, 2.4mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.14g, 0.12mmol)以及 K₂CO₃(0.69g, 5mmol)在二噁烷/水(70mL/15mL)中的混合物進行除氣，並加熱至 85°C 過夜。將混合物用乙酸乙酯(200mL)稀釋，用鹽水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填至矽膠上並藉由使用己烷/二氯甲烷 1:1 至二氯甲烷至二氯甲烷/乙酸乙酯 9:1 的洗提液以快速柱層析法純化。收集所需的部分，濃縮，在二氯甲烷/己烷再結晶，得到黃色固體 (BE-4)(1.50g, 產率 98%)。通過 LCMS(APCI+)驗證：C₄₅H₃₂N₅(M+H) 的計算值：642；測定值：642。

BE-5 的合成



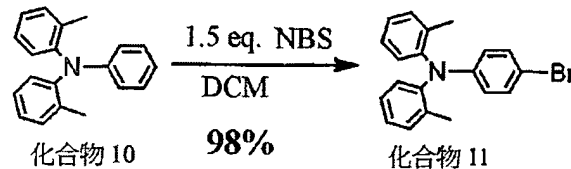


【0129】二鄰甲苯胺(di-o-tolylamine)(化合物 9)：將鄰甲苯胺(6.05g, 56.5mmol)、1-溴-2-甲基苯(8.5g, 50mmol)、Pd(dppf)Cl₂與叔丁醇鈉(9.6g, 0.1mmol)在甲苯(120mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 100℃ 過夜。將混合物藉由使用己烷/二氯甲烷 2：1 之洗提劑以快速柱層析法純化，以得到白色固體(化合物 9)(8.84g, 產率 89.7%)。

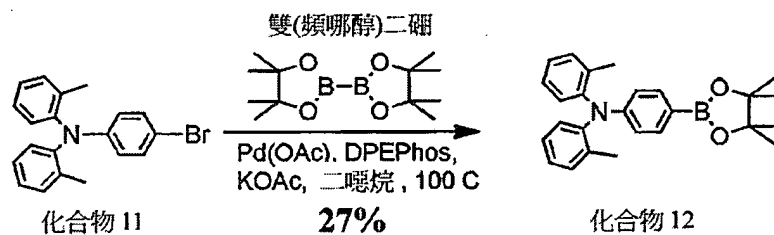


【0130】2-甲基-N-苯基-N-(鄰甲苯基)苯胺(2-methyl-N-phenyl-N-(o-tolyl)aniline)(化合物 10)：將二鄰甲苯胺(化合物 9)(6.00g, 30.4mmol)、碘苯(12.2g, 60mmol)、Pd(OAc)₂(0.34g, 1.5mmol)、P(t-Bu)₃(0.6g, 3mmol)、叔丁醇鈉(5.76g, 60mmol)

在甲苯(120mL)中的混合物進行除氣並加熱至約 120°C 維持 40 小時。將所得混合物用乙酸乙酯(200mL)稀釋，用鹽水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填至矽膠上並藉由使用己烷的洗提劑以快速柱層析法純化，以得到白色固體(化合物 10)(8.2g，產率 98%)。

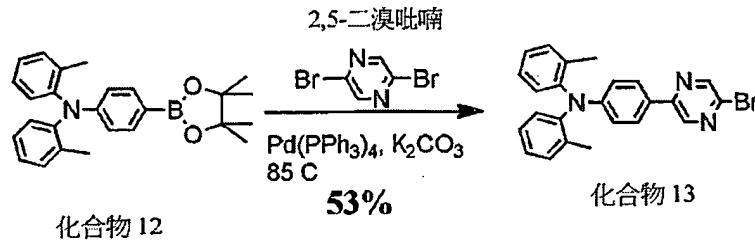


【0131】 N-(4-溴苯基)-2-甲基-N-(鄰-甲苯基)苯胺(化合物 11)：向在二氯甲烷(DCM)(100mL)的 2-甲基-N-苯基-N-(鄰-甲苯基)苯胺(化合物 10)(8.2g，30mmol)溶液中在約 0°C 加入 N-溴琥珀醯亞胺(NBS)(5.34g，30mmol)，並攪拌約 4 小時。將所得混合物用二氯甲烷/鹽水進行後處理，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填至矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 9:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的部分，並除去溶劑，得到白色固體(化合物 11)(10.7g，產率 100%)。

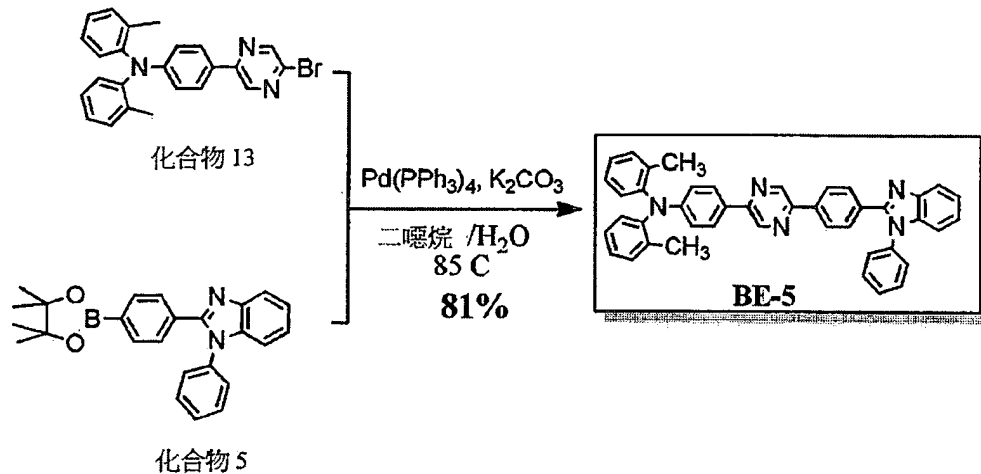


【0132】 2-甲基-N-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-N-(鄰-甲苯基)苯胺(化合物 12)：將 N-(4-溴苯基)-2-甲基-N-(鄰-甲苯基)苯胺(化合物 11)(10.7g，30.4mmol)、雙(頻哪醇)二硼(10.16g，40mmol)、KOAc (6.0g，0.1 mmol)、 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.336g，1.5mmol)、雙(2-二苯基膦苯基)醚(1.614g，3mmol)在二噁烷(100mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 100°C 過夜。將所得混合物用

乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 4:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的部分，並除去溶劑，以得到無色油狀物(化合物 12)(3.3g，產率 27%)。

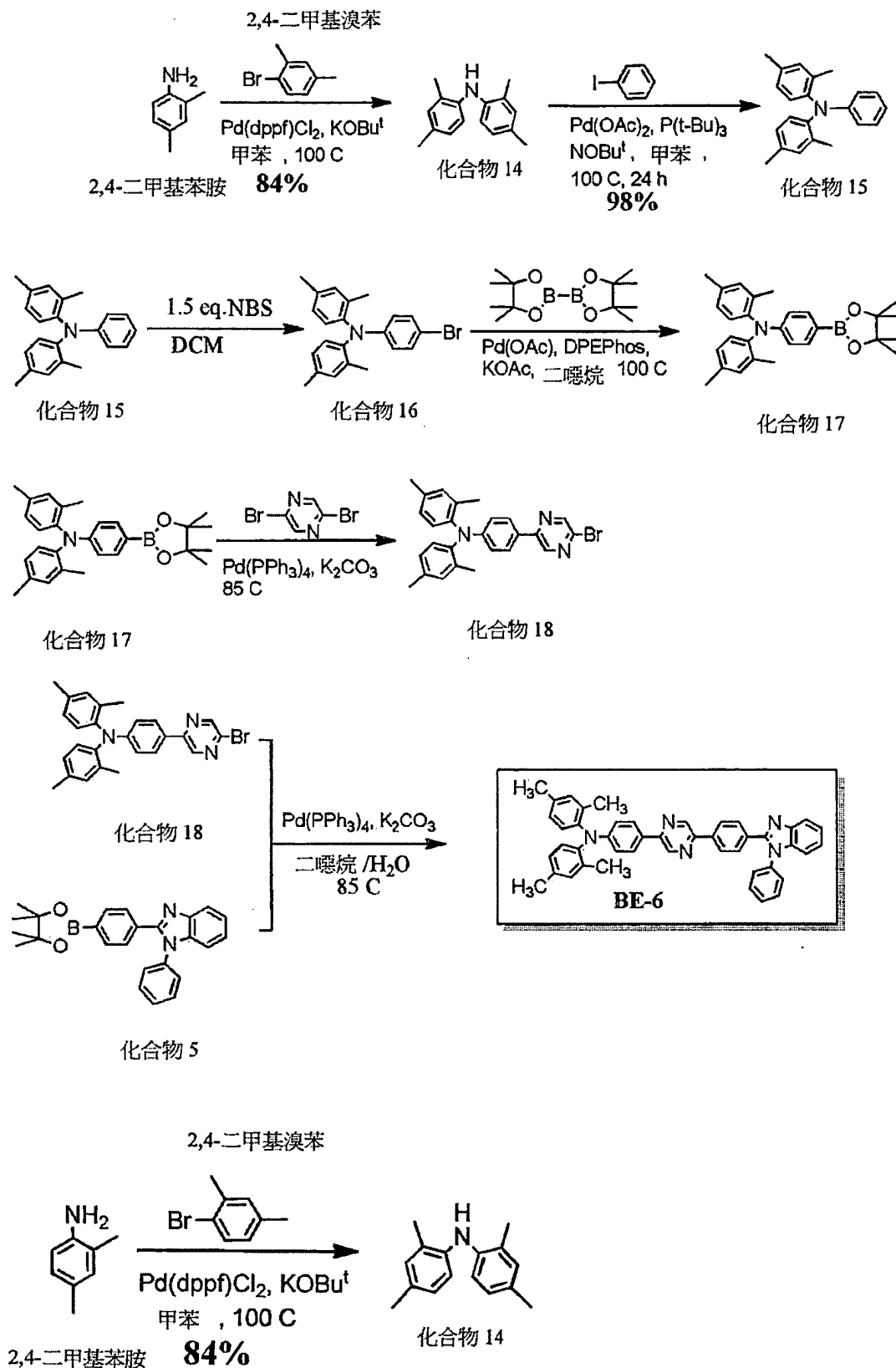


【0133】 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-2-甲基-N-(鄰-甲苯基)苯胺(化合物 13)：將 2-甲基-N-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-N-(鄰-甲苯基)苯胺(化合物 12)(3.3g，8.3mmol)、2,5-二溴吡嗪(4.27g，16mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.46g，0.4mmol)、K₂CO₃ (2.21g，16mmol)在二噁烷/水(100mL/16mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 80°C 過夜。將所得混合物用乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填至矽膠上，藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 9:1 至 6:1 至 4:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的部分，並在除去溶劑後得到黃色固體(化合物 13)(1.9g，產率 53%)。



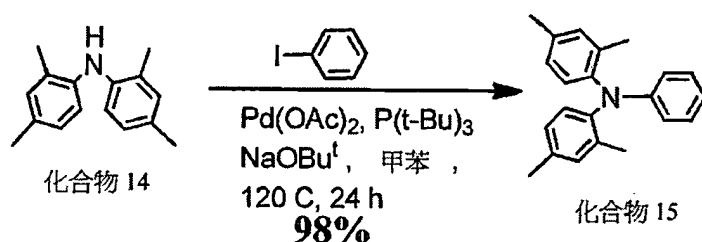
【0134】 化合物 BE-5：將 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-2-甲基-N-(鄰-甲苯基)苯胺(化合物 13)(1.9g, 4.4mmol)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑(化合物 5)(1.75g, 4.4mmol)、 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.25g, 0.22mmol)、 K_2CO_3 (1.38g, 10mmol)在二噁烷/水(100mL/16mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 90°C 過夜。將所得混合物用乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填至矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 8:1 至 4:1 至二氯甲烷/乙酸乙酯 9:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的部分，並在除去溶劑以及再結晶後，得到黃色固體(化合物 BE-5)(2.2g, 產率 80.6%)。通過 LCMS (APCI+) 驗證： $\text{C}_{43}\text{H}_{34}\text{N}_5$ (M+H)的計算值：620；測定值：620。

BE-6 的合成

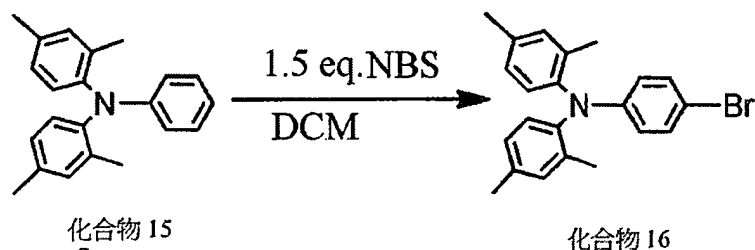


【0135】 雙(2,4-二甲基苯基)胺(Bis(2,4-dimethylphenyl)amine)(化合物 14)：將 2,4-二甲基苯胺(6.05g, 50mmol)、2,4-二甲基溴苯

(9.25g, 50mmol)、Pd(dppf)Cl₂(0.88g, 1.2mmol)、叔丁醇鈉 (KOBut)(9.6g, 0.1mmol)在甲苯(120mL)中的混合物進行除氣，並加熱至 100°C 過夜。將所得混合物用二氯甲烷/鹽水進行後處理，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 9:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。除去溶劑後，得到液體(9.45g, 產率 84%)。

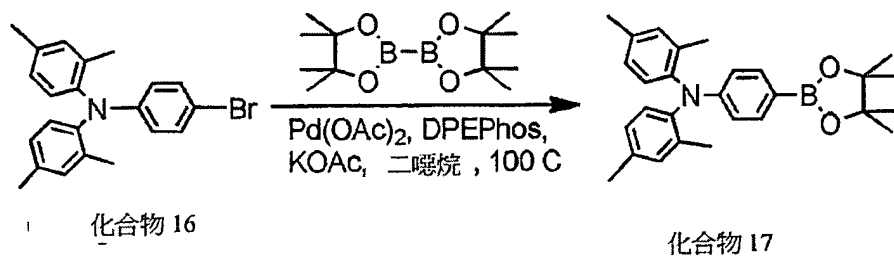


【0136】 N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲基-N-苯基苯胺 (N-(2,4-dimethylphenyl)-2,4-dimethyl-N-phenylaniline)(化合物 15)：將雙(2,4-二甲基苯基)胺(化合物 14)(9.4g, 41.8mmol)、碘苯(17.14g, 84mmol)、Pd(OAc)₂(0.47g, 2.1mmol)、P(t-Bu)₃(0.848g, 4.2mmol)、叔丁醇鈉(7.68g, 80mmol)在甲苯(120mL)中的混合物除氣，並在 120°C 加熱 16 小時。將所得混合物倒入乙酸乙酯(250mL)中，用鹽水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷的洗提劑以快速柱層析法純化。在除去溶劑後，得到油狀物(化合物 15) (12.4g, 產率 98.6%)。

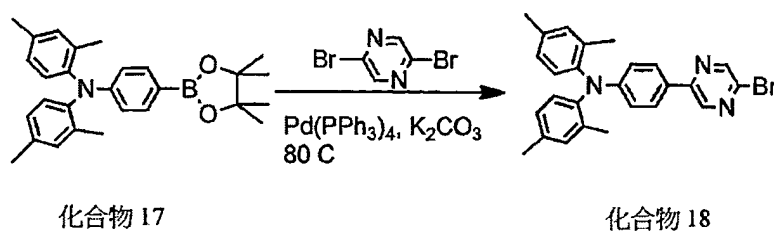


【0137】 N-(4-溴苯基)-N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲基苯胺 (N-(4-bromophenyl)-N-(2,4-dimethylphenyl)-2,4-dimethylaniline)(

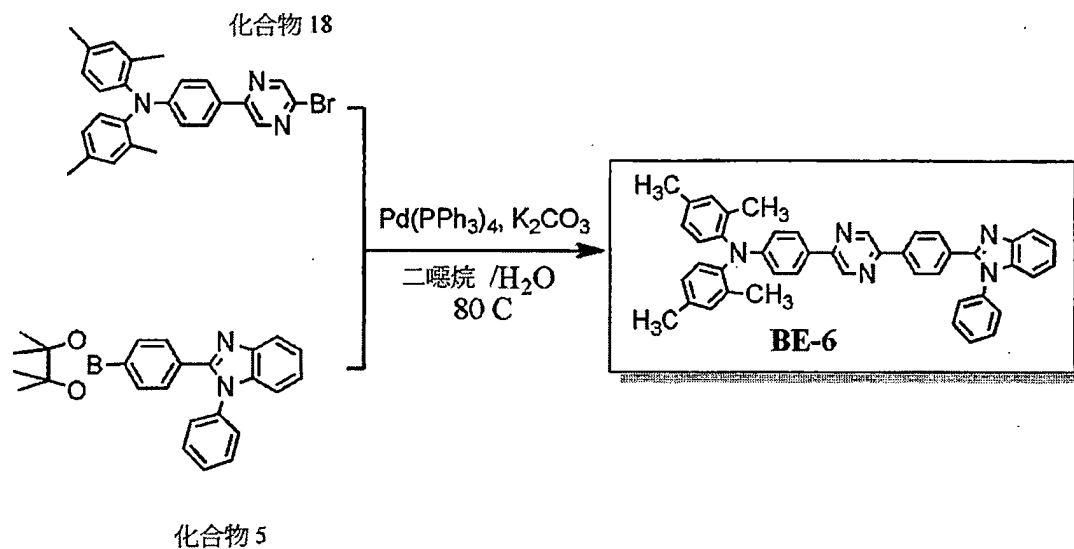
化合物 16)：向 N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲基-N-苯基苯胺(化合物 15)(12.4g, 41mmol)在二氯甲烷(200mL)中的溶液在 0°C 下加入 NBS(8.01g, 45mmol)。整個攪拌約 3 小時並用鹽水進行後處理。將有機相用 Na_2SO_4 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷的洗提劑以快速柱層析法純化。除去溶劑後，得到無色油狀物(化合物 16)(15g, 產率 96%)。



【0138】 N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲基-N-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)苯胺 (N-(2,4-dimethylphenyl)-2,4-dimethyl-N-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)aniline)(化合物 17)：將 N-(4-溴苯基)-N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲基苯胺(化合物 16)(15g, 39.5mmol)、雙(頻哪醇)二硼(10.41g, 41mmol)、KOAc(7.84g, 80mmol)、雙(2-二苯基膦苯基)醚(3.23g, 6mmol)以及 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.44g, 2mmol)在二噁烷(100mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 100°C 過夜。將所得混合物倒入乙酸乙酯(200mL)中，用鹽水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/乙酸乙酯 18：1 的洗提劑以快速柱層析法純化。除去溶劑後，得到白色固體(化合物 17)(14g, 產率 83%)。



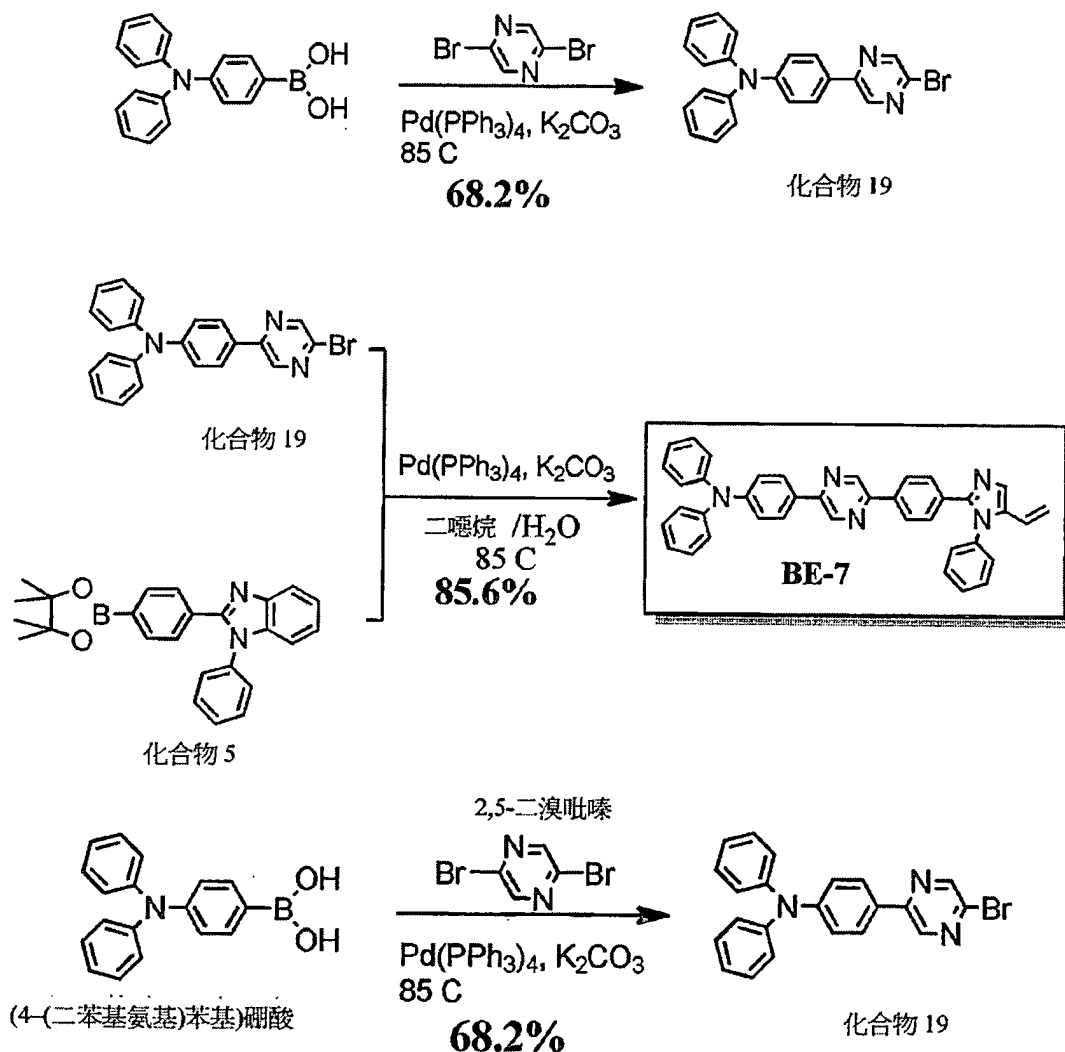
【0139】 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二
 甲 基 苯 胺
 (N-(4-(5-bromopyrazin-2-yl)phenyl)-N-(2,4-dimethylphenyl)-2,4-di
 methylaniline)(化合物 18)：將 N-(2,4-二甲基苯基)-2,4-二甲
 基-N-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)苯胺(化合物
 17)(6.0g, 14mmol)、2,5-二溴吡嗪(7.74g, 30mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.5g ,
 0.43mmol)、K₂CO₃ (4.14g, 30mmol)在二噁烷/水(80mL/17mL)中
 的混合物進行除氣，並在大約 80°C 加熱過夜。將所得混合物倒入
 乙酸乙酯(200mL)中，用鹽水洗滌，用 Na₂SO₄ 乾燥，然後裝填在
 矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 9:1 至 6:1 至 7:3 的洗提
 劑以快速柱層析法純化。收集所需的黃色部分，且在除去溶劑後
 得到黃色固體(化合物 18)(3.83g, 產率 60%)。



【0140】 化合物 BE-6：將 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-N-(2,4-二甲
 基苯基)-2,4-二甲基苯胺(化合物 18)(1.67g, 3.65mmol)、1-苯基
 -2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪
 唑(化合物 5)(1.445g, 3.65mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.21g, 0.18mmol)、
 K₂CO₃(0.966g, 7mmol)在二噁烷/水(50mL/10mL)中的混合物進行

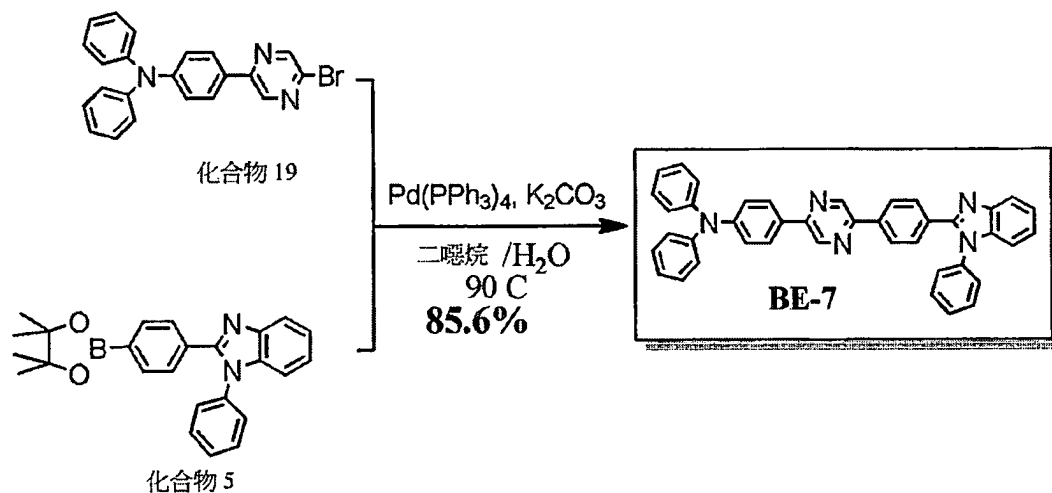
除氣，並加熱至約 100°C 過夜。將所得混合物倒入乙酸乙酯(200mL)中，用鹽水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上，並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 1:1 至二氯甲烷至二氯甲烷/乙酸乙酯 90:5 的洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的黃色部分。除去溶劑後，得到黃色固體(BE-6)(2.2g，產率 93%)。通過 LCMS(APCI+) 驗證：C₄₅H₃₈N₅(M+H)的計算值：648；測定值：648。

BE-7 的合成



【0141】 4-(5- 溴 吡 嗪 -2- 基)-N,N- 二 苯 基 苯 胺 (4-(5-bromopyrazin-2-yl)-N,N-diphenylaniline)(化合物 19)：(4-(二 苯 基 氨 基) 苯 基) 硼 酸 (3.26g，11.3mmol)、2,5-二 溴 吡 嗪 (5.82g，

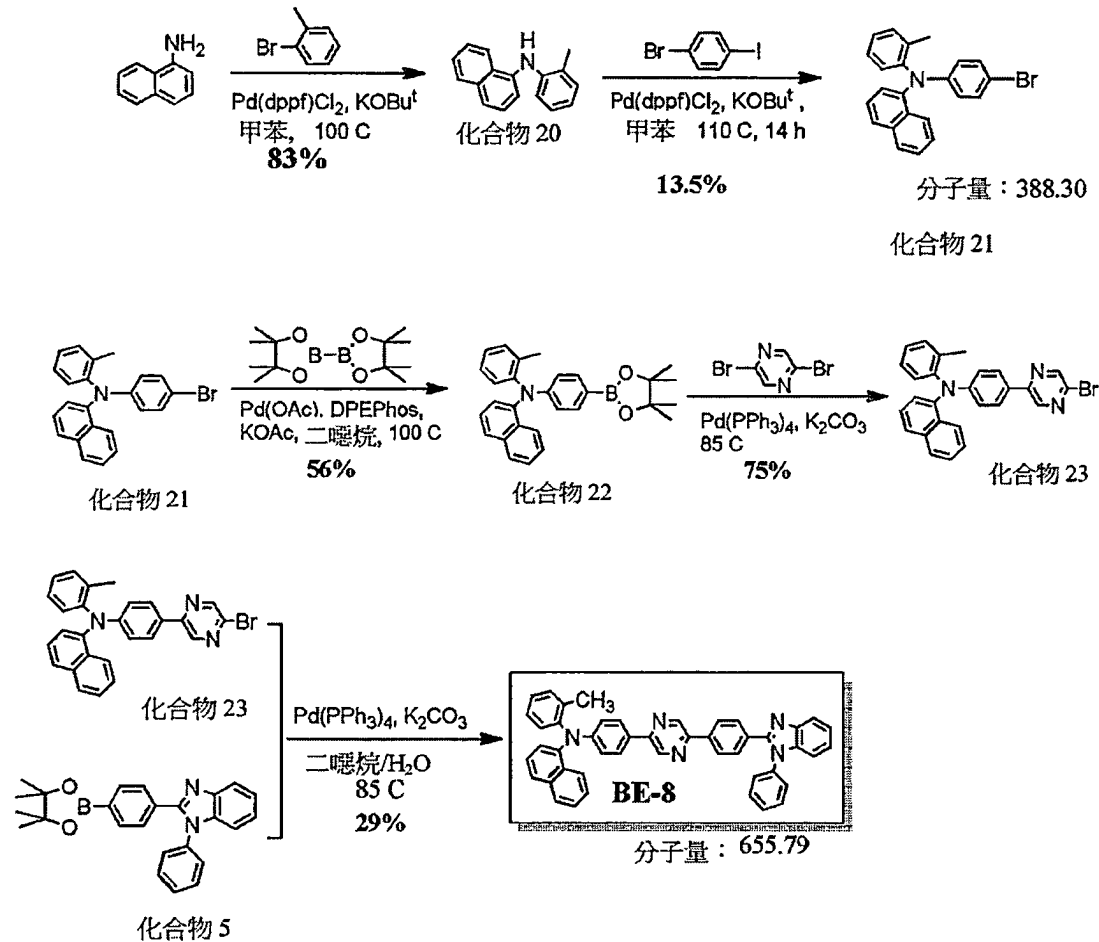
22.6mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.635g, 0.55mmol)、 K_2CO_3 (3.45g, 25mmol) 在二噁烷/水(100mL/16mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 85 °C 約 20 小時。將所得混合物倒入乙酸乙酯(250mL)中，用鹽水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 4:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。除去溶劑後，得到黃色固體(化合物 19)(3.1g, 68.2%產率)。



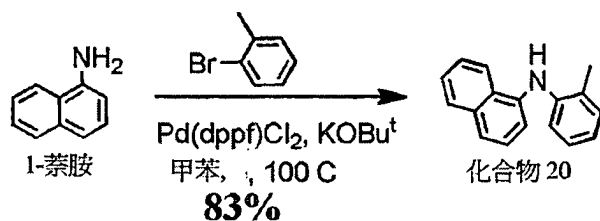
【0142】 化合物 BE-7：將 4-(5-溴吡嗪-2-基)-N,N-二苯基苯胺(化合物 19)(4-(5-bromopyrazin-2-yl)-N,N-diphenylaniline)(1.54g, 3.83mmol)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑(化合物 5)(1.52g, 3.83mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.22g, 0.19mmol)、 K_2CO_3 (1.104g, 8mmol) 在二噁烷/水(100mL/15mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 90°C 維持約 16 小時。將所得混合物倒入乙酸乙酯(250mL)中，用鹽水洗滌，濃縮且生成黃色沉澱。過濾並用乙酸乙酯洗滌，得到固體以及濾液。將濾液裝載於矽膠上，並藉由用己烷至二氯甲烷至二氯甲烷/乙酸乙酯(9:1 至 4:1)的洗提劑以快速柱層析法純化。收集需要的部分。自過濾的固體溶解在二氯甲烷中，使用己烷至二氯甲烷至二氯甲烷/乙酸乙酯 9:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。收集需要的部分。

從層析法得到的所需部分合併，在除去溶劑後，將固體在二氯甲烷/乙酸乙酯中再結晶，得到黃色固體(BE-7)，1.94g，產率 85.6%。
通過 LCMS(APCI+)驗證： $C_{41}H_{30}N_5(M+H)$ 的計算值：592；測定值：592。

BE-8 的合成

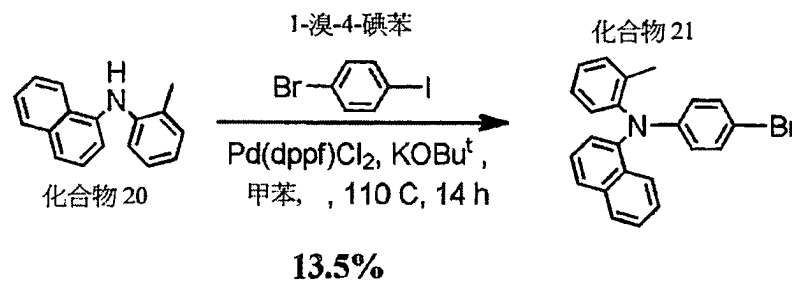


1-溴-2-甲基苯

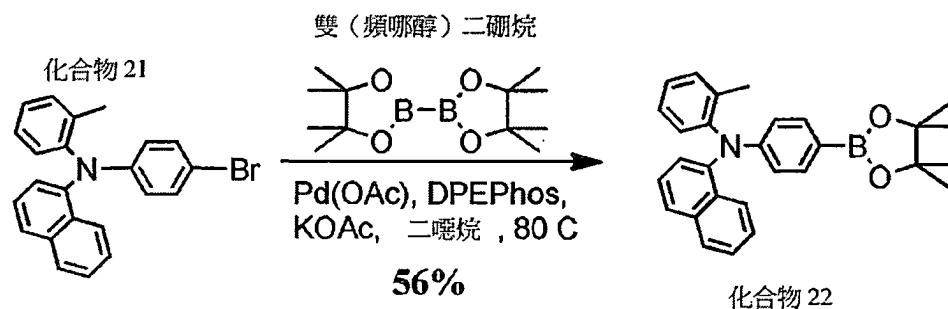


【0143】 N-(鄰 - 甲 苯 基) 萘 -1- 胺
(N-(o-tolyl)naphthalen-1-amine)(化合物 20)：1-氨基萘(7.15g，

50mmol)、1-溴-2-甲基苯(8.5g, 50mmol)、Pd(dppf)Cl₂(1.0g, 1.36mmol)、叔丁醇鈉(9.6g, 0.1 mmol)在甲苯(120mL)中的混合物進行除氣，並加熱至約 100°C 過夜。將所得混合物用乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 9:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。除去溶劑後，得到油狀物(化合物 20)，10.2g, 91.5%的產率。

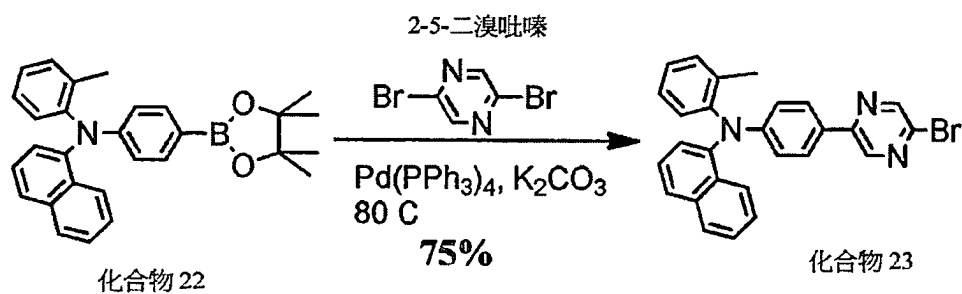


【0144】 N-(4- 溴 苯 基)-N-(鄰 甲 苯 基) 萘 -1- 胺 (N-(4-bromophenyl)-N-(o-tolyl)naphthalen-1-amine)(化合物 21)：將 N-(鄰甲苯基)萘-1-胺(化合物 20)(2.0g, 8.6mmol)、1-溴-4-碘苯(8.67g, 30mmol)、Pd(dppf)Cl₂(0.365g, 0.5mmol)、叔丁醇鉀(1.96g, 20mmol)在甲苯中的混合物進行除氣，並加熱至 110°C 過夜。將所得混合物用乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 9:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。除去溶劑後，得到黃色固體(化合物 21)，0.45g, 產率 13.5%。

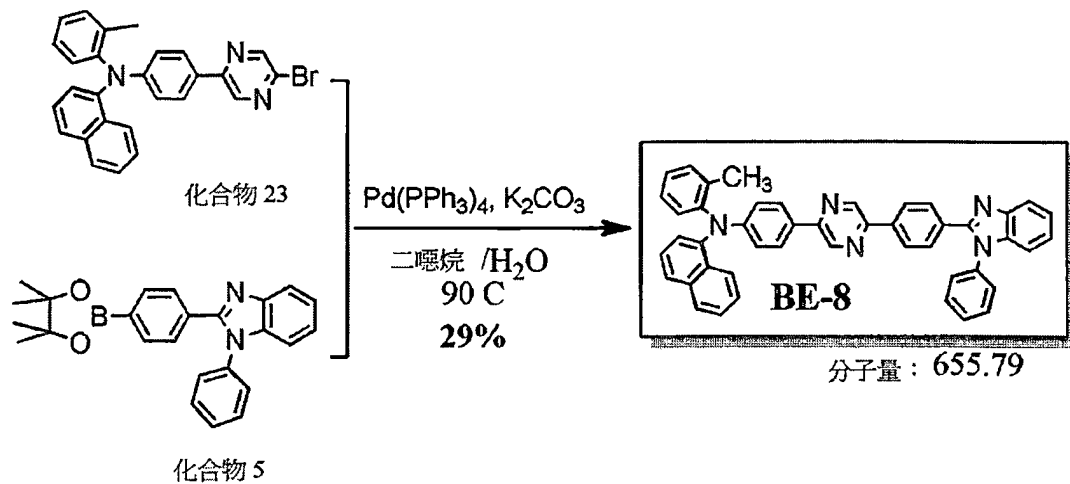


【0145】 N-(4-(4,4,5,5- 四 甲 基 -1,3,2- 二 氧 硼 戊 環 -2- 基) 苯

基)-N-(鄰甲苯基)萘-1-胺
(N-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-N-(o-tolyl)naphthalen-1-amine)(化合物 22)：將 N-(4-溴苯基)-N-(鄰甲苯基)萘-1-胺(化合物 21)(0.87g, 2.24mmol)、雙(頻哪醇)二硼烷(0.635g, 2.5mmol)、Pd(dppf)Cl₂(81.8 毫克, 0.11mmol)、KOAc(0.49g, 5mmol)在二噁烷(50mL)中的混合物進行除氣，並加熱至 80°C 過夜。將所得混合物用乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/乙酸乙酯 18:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。在除去溶劑後，得到黃色固體(化合物 22)，0.55g，產率 56%。



【0146】 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-N-(鄰甲苯基)萘-1-胺
(N-(4-(5-bromopyrazin-2-yl)phenyl)-N-(o-tolyl)naphthalen-1-amine)(化合物 23)：將 N-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-N-(鄰甲苯基)萘-1-胺(化合物 22)(0.55g, 1.26mmol)、2,5-二溴吡嗪(0.77g, 3.0mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.1g, 0.09mmol)、K₂CO₃ (0.414g, 3mmol)在二噁烷/水(40mL/8mL)中的混合物除氣，並加熱至 80°C 過夜。將得到的混合物用乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na₂SO₄ 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷/二氯甲烷 9:1 至 3:2 的洗提劑以快速柱層析法純化。在除去溶劑後，得到黃色固體(化合物 23)0.44g，產率 75%。



【0147】 化合物 BE-8：將 N-(4-(5-溴吡嗪-2-基)苯基)-N-(鄰甲苯基)萘-1-胺(化合物 23)(0.44g, 0.94mmol)、1-苯基-2-(4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊環-2-基)苯基)-1H-苯並[d]咪唑(化合物 5)(0.374g, 0.94mmol)、 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.058g, 0.05mmol)、 K_2CO_3 (0.276g, 2mmol)在二噁烷/水(40mL/8mL)中的混合物除氣，並加熱至約 90°C 維持 5 小時。將所得混合物用乙酸乙酯/鹽水進行後處理，經 Na_2SO_4 乾燥，裝填在矽膠上並藉由使用己烷至己烷/二氯甲烷 4:1 至 1:1 至二氯甲烷/乙酸乙酯 10:1 的洗提劑以快速柱層析法純化。收集所需的部分，在除去溶劑後，將固體在二氯甲烷/己烷中再結晶，以得到黃色固體(BE-8)，0.18g，產率 29%。通過 LCMS(APCI+)驗證： $\text{C}_{46}\text{H}_{34}\text{N}_5(\text{M}+\text{H})$ 的計算值：656；測定值：656。

OLED 的配置以及性能的範例

範例 2

【0148】 塗佈 ITO 的玻璃基板將藉由超音波連續地在水、丙酮、異丙醇(2-propanol)中清洗，於 110°C 下烘烤 3 小時，隨後以氧氣電漿處理 5 分鐘。PEDOT:PSS(由 H.C Starck 公司購入之 Baytron P)的層將以 3000 rpm 旋塗在預清洗以及氧氣電漿處理之 ITO 基板

並在約 180°C 退火 30 分鐘以生成厚度約 55nm。在手套箱中承載的真空沉積裝置在 10^{-7} torr 壓力下(1torr=133.322 Pa)，DTASi 將首先以 0.06nm/s 的沉積速率沉積在 PEDOT/PSS 層的頂部，產生 30nm 厚的膜。然後 BE-2 將被加熱並沉積在 DTASi 的頂部，產生約 5nm 厚的膜，隨後在約 0.06nm/s 的沉積速率下共沉積 BE-2 以及 Ir(PIQ)₂(acac)以形成 5nm 厚的層，而另一個 BE-2 層的沉積具有厚度為約 5nm。然後，以約 0.06nm/s 之沉積速率之 1,3,5-三(N-苯基苯並咪唑-2-基)苯(TPBI)將沉積在 BE-2 層上以形成 40nm 厚的薄膜。LiF(1.0nm)及 Al(100nm)將接著以 0.005 以及 0.2nm/s 的沉積速率分別依序沉積。各獨立裝置將具有 0.14cm² 的面積。

範例 3

【0149】 所有光譜將以海洋光學(Ocean Optics)HR 4000 光譜儀進行測量，且 I-V-L 特性由 Keithley 2400 SourceMeter 以及 Newport 2832-C 功率計及 818 紫外檢測器取得。所有裝置操作將在充滿氬氣的手套箱中進行。所述裝置(裝置 A)的配置的範例示於第 4 圖。

【0150】 預期中，一旦確定了作為裝置-A 亮度的函數之發光效率及功率效率、裝置-A 的電致發光光譜之圖表、以及裝置-A 的演色指數(CRI)，BE-2 將適合作為混合 OLED 中的主體材料。

【0151】 除非以其他方式指示，否則使用於說明書及申請專利範圍中以文字「約」表達分量、例如分子量之特性、反應條件等之所有數字在所有情況下可被修改。因此，除非相反地指示，說明書及所附申請專利範圍中所述之數字參數為可依據尋求獲得之所需特性而改變之近似值。至少，並不作為嘗試限制等效原則之應用於申請專利範圍之範疇，每一數字參數應至少被理解為鑑

於所示明顯位數之數值且藉以應用一般基本知識。

【0152】 用於描述本發明(特別是在下列申請專利範圍中之內文)之內容中之詞彙「一(a)」、「一(an)」、「該(the)」及相似之參考符號用以詮釋為單一及複數個，除非在此另行指示或清楚地於文中相互矛盾。在此描述之所有方法可以任一適當順序執行，除非在此另行指示或另外清楚地於文中相互矛盾。任一及全部例子之使用，或在此提供之例示性語言(如「例如」)僅旨在用以較佳地顯明本發明且非用以設下限制於任一申請專利範圍之範疇。說明書中無用語應被理解為指示必要於本發明之施行之任一非申請專利範圍元件。

【0153】 在此揭露之另外元件或實施例之組別不被理解為限制性。每一組構件可參閱並單獨地主張或與其他組構件或本文可見之其他元件之任一組合。預期的是組中一或多個構件可因方便及/或專利性之理由而包含於一組或由一組刪除。當發生任一此類包含或刪除，說明書視作包含修改之組，因而實現於所附申請專利範圍中使用之所有馬庫西(Markush)組之文字描述。

【0154】 特定實施例已在此描述，包含發明者已知之最佳模式以實現本發明。當然，這些已描述實施例之變化對本發明所屬技術領域中具有通常知識者來說將藉由閱讀前述描述而變得顯而易知。發明者預期技術人員適當地使用此類變化，且發明者意在本發明除了在此所特別描述者能另外實施。因此，申請專利範圍包含由適用法律所允許之所有變更及於申請專利範圍中列舉之標的之等效物。此外，在所有可能之變化中，除非於本文中另行指示或清楚地於文中相互矛盾，否則上述元件之任一組合為預期的。

【0155】 最後，將被理解的是，在此揭露之實施例為申請專利範圍之原則之描述。可使用之其他修改落於申請專利範圍之範疇內。因此，藉由舉例之方式，但不用以限制，另外實施例可聯同在此之教示而使用。因此，申請專利範圍不限制於明確顯示及描述之實施例。

【符號說明】

5：陽極

10：電洞注入層

15：電洞傳輸層

20：發光層

30：電子傳輸層

35：陰極

**公告本**

106年 06月 20日 修正替換頁

申請日: 102.12.10

IPC分類: C09K 11/06 (2006.01)

H01L 81/54 (2006.01)

【發明摘要】**【中文發明名稱】** 有機發光主體材料**【英文發明名稱】** ORGANIC LIGHT EMITTING HOST MATERIALS**【中文】**

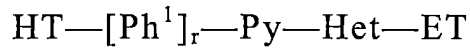
雜芳基-芳基化合物，如由化學式所表示的化合物，可在電子裝置如有機發光裝置中使用。舉例來說，此化合物可被使用作為發光層中的發光材料。

【英文】

Heteroaryl-aryl compounds such as compounds represented by Formula may be used in electronic devices such as organic light-emitting devices. For example, the compounds may be used as an emissive material in an emissive layer.

【發明申請專利範圍】

【第1項】 一種以一化學式表示之化合物：



其中 HT 是選擇性經取代的二苯胺或選擇性經取代的
苯基(萘基)胺，

各 Ph^1 係獨立地為選擇性經取代的對-伸苯基，其中
直接鍵結於 HT 之對-伸苯基選擇性地形成一鍵結
到 HT 之苯基以形成一三環系統；

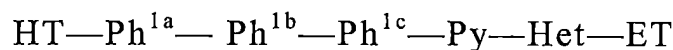
Py 係為選擇性經取代之伸吡嗪-2,5-基；

Het 係為選擇性經取代之對-伸苯基或選擇性經取代
之伸吡啶-2,5-基；

ET 係為選擇性經取代之苯並咪唑-2-基、選擇性經取
代之苯並噁唑-2-基、或選擇性經取代之苯並噻唑
-2-基；及

r 係為 1、2、3。

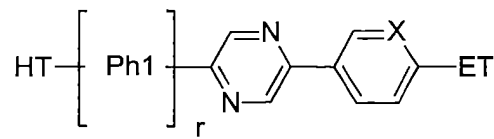
【第2項】 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其進一步由一
化學式表示：



其中 Ph^{1a} 係為選擇性經取代之對-伸苯基，或
HT— Ph^{1a} 係為 9-苯基呋唑-3-基；且 Ph^{1b} 及 Ph^{1c} 獨
立地為一鍵結或選擇性經取代的對-伸苯基。

【第3項】 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其進一步由一

化學式表示：

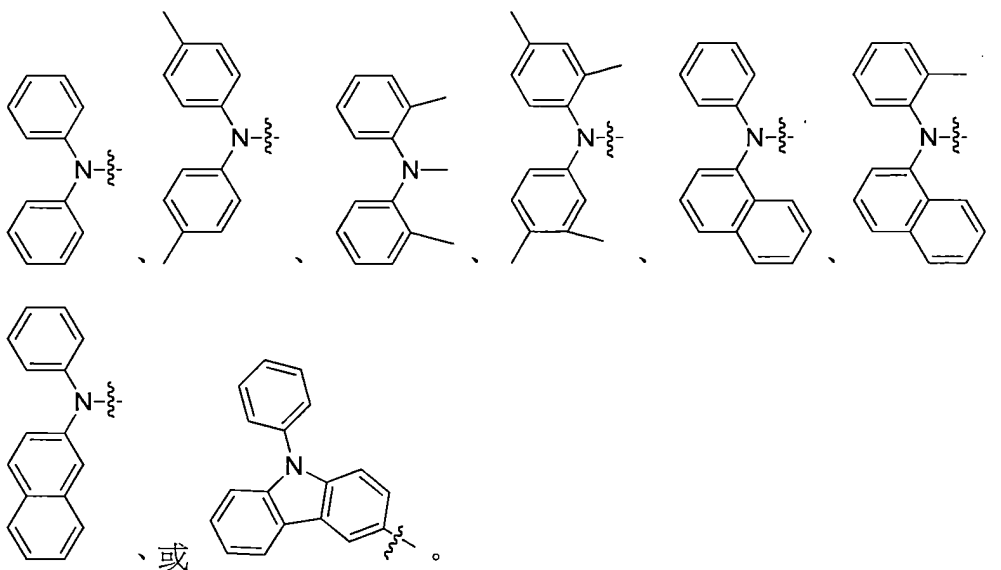


其中 X 係為 C 或 N。

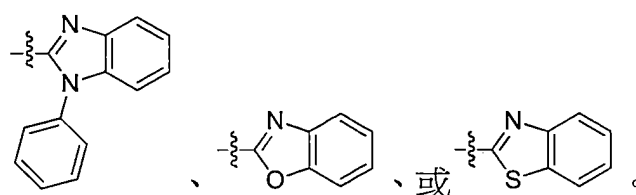
【第4項】 如申請專利範圍第 1 項或第 3 項所述之化合物，其中 r 是 1。

【第5項】 如申請專利範圍第 1、2、或 3 項所述之化合物，其中 ET 是選擇性經取代之 1-苯基-1H-苯並[d]咪唑-2-基。

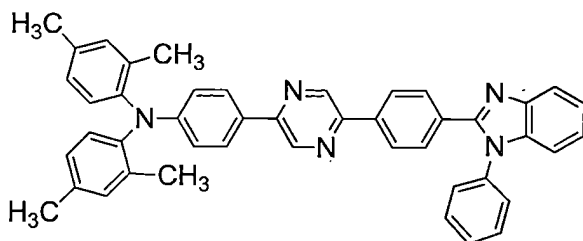
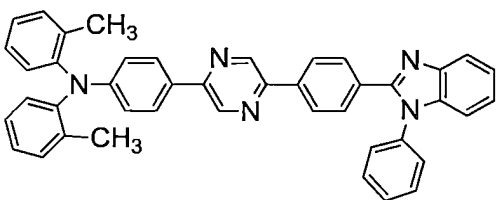
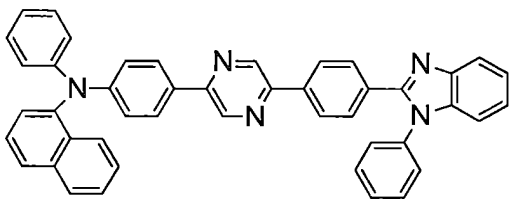
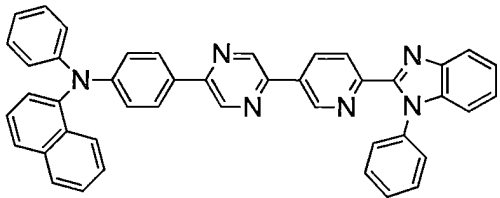
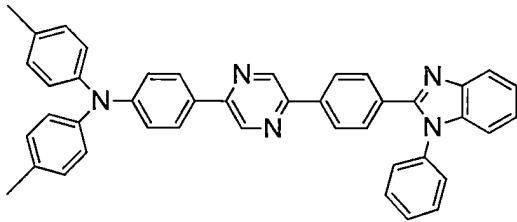
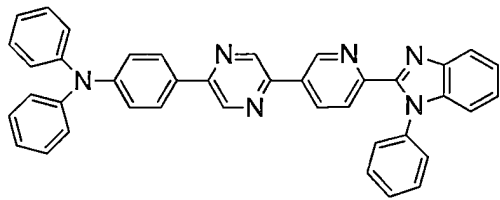
【第6項】 如申請專利範圍第 1、2 或 3 項所述之化合物，其中 HT 是

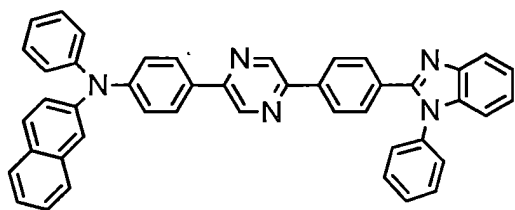
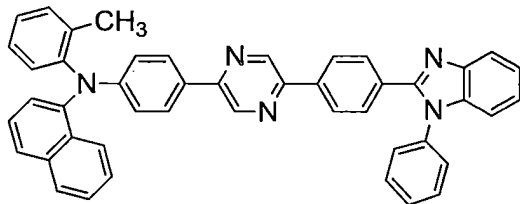
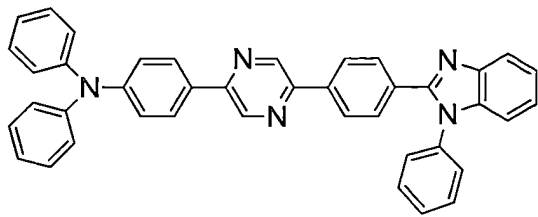


【第7項】 如申請專利範圍第 1、2 或 3 項所述之化合物，其中 ET 是

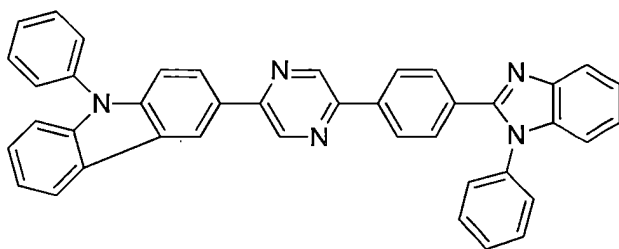


【第8項】 如申請專利範圍第 1 項所述之化合物，其中該化合物
為：





、或



【第9項】 如申請專利範圍第 1、2、3 或 8 項所述之化合物，其中該化合物係為電致發光的。

【第10項】 如申請專利範圍第 9 項所述之化合物，其中該化合物具有一最低能量三重態，其具有約 2.5eV 至約 4eV 之能量。

【第11項】 一種發光層，其包含如申請專利範圍第 1 項至第 5 項任一項所述之化合物。

【第12項】 一種發光裝置，其包含：

一陽極層，係包含一高功函數金屬；

- 一陰極層，係包含一低功函數金屬；以及
- 一發光層，係包含如申請專利範圍第 1 項至第 5 項任
- 一項所述之化合物。

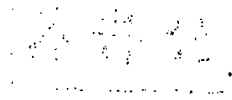
【發明圖式】

35
30
20
15
10
5

第 1 圖

LiF(1 nm)/Al (100nm)
TPBI (40nm)
BE-2 (5 nm)
BE- 2:Ir(piq)2acac
BE-2 (5nm)
DTASI (30 nm)
PEDOT (30 nm)
ITO (55 nm)

第 2 圖



【指定代表圖】：第（ 1 ）圖。

【代表圖之符號簡單說明】：

5：陽極

10：電洞注入層

15：電洞傳輸層

20：發光層

30：電子傳輸層

35：陰極

【特徵化學式】：

HT—[Ph¹]_r—Py—Het—ET

化學式 1a