



(21) 申請案號：106133098

(22) 申請日：中華民國 106 (2017) 年 09 月 27 日

(51) Int. Cl. :

C07D491/048 (2006.01)

C07D495/04 (2006.01)

H05B33/14 (2006.01)

H05B33/22 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2016/09/30

歐洲專利局

16191703.4

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

德國

(72) 發明人：帕姆 安瑪 PARHAM, AMIR HOSSAIN (DE)；艾伯利 湯馬士 EBERLE, THOMAS

(DE)；傑許 安佳 JATSCH, ANJA (DE)；葛羅斯曼 托拜亞斯 GROSSMANN,

TOBIAS (DE)；克洛伯 喬納斯 KROEBER, JONAS VALENTIN (DE)

(74) 代理人：林志剛

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：20 項 圖式數：0 共 158 頁

(54) 名稱

具有二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩結構的化合物

COMPOUNDS HAVING DIAZADIBENZOFURAN OR DIAZADIBENZOTHIOPHENE
STRUCTURES

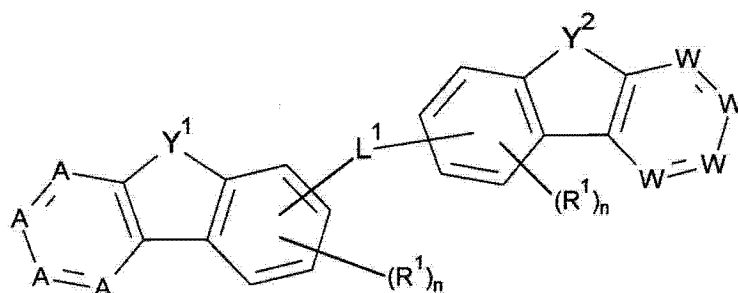
(57) 摘要

本發明記載經呋唑、萸、菲、苯并呋喃及/或苯并噻吩基團取代之二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩衍生物，其尤其用於電子裝置。本發明亦關於製備本發明化合物之方法以及包含該等化合物之電子裝置。

The present invention describes diazadibenzofuran or diazadibenzothiophene derivatives substituted by carbazole, fluorene, phenanthrene, benzofuran and/or benzothiophene groups, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

特徵化學式：

式 (A)



式 (A)

【發明說明書】

【中文發明名稱】

具有二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩結構的化合物

【英文發明名稱】

Compounds having diazadibenzofuran or diazadibenzothiophene structures

【技術領域】

[0001] 本發明記載二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩衍生物，尤其是用於電子裝置。本發明亦關於製備本發明化合物之方法及包含該等化合物之電子裝置。

【先前技術】

[0002] 使用有機半導體作為功能性材料的有機電致發光裝置(OLED)之結構係描述於例如US 4539507、US 5151629、EP 0676461及WO 98/27136。所使用之發光材料經常為展現磷光之有機金屬錯合物。因量子力學因素，使用有機金屬化合物作為磷光發射體可能有多達四倍之能量效率及功率效率。大體而言，仍需要改良OLED，尤其是展現磷光之OLED，例如關於效率、操作電壓及使用壽命方面。

[0003] 有機電致發光裝置之性質不只由所使用之發

射體決定。此處亦特別重要的尤其是所使用之另外的材料，諸如主體及基質材料、電洞阻擋材料、電子傳輸材料、電洞傳輸材料及電子或激子阻擋材料。該等材料之改良會造成電致發光裝置的明顯改善。

[0004] 根據先前技術，雜芳族化合物，例如二氮雜苯并呔喃衍生物，經常用作磷光化合物之基質材料以及用作電子傳輸材料。此外，咪唑衍生物亦用作基質材料。已知有此功能之實例包括經咪唑基取代之二氮雜二苯并呔喃衍生物，如JP 5604848 B2、WO 2015/182872 A1中所揭示。此外，WO 2014/157599 A1及WO 2015/182872 A1描述經萸、菲、聯伸三苯基或二苯并噻吩基取代之二氮雜二苯并呔喃衍生物。然而，二氮雜二苯并呔喃基團不一定在二氮雜二苯并呔喃基團之二氮雜苯基具有芳基或雜芳基之雙重取代(twin substitution)。此外，一些詳細說明之化合物在二氮雜二苯并呔喃基團中具有兩個二氮雜苯基。

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

【發明內容】

[0006] 因此，本發明所針對的課題係提供適用於有機電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，且當用於該裝置時能獲致良好裝置性質之化合物，以及提供對應之電子裝置。

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

[0008] 本發明所針對的另一課題可認為是提供適用於磷光或螢光 OLED，尤其是作為基質材料之化合物。本發明之一具體目的係提供適用於紅色、黃色、及綠色磷光 OLED 且亦可能適用於藍色磷光 OLED 的基質材料。

[0009] 此外，本發明所針對的另一課題可認為是提供適用於磷光或螢光 OLED，尤其是作為電子傳輸材料之化合物。

[0010] 此外，化合物應可以極簡單方式處理，以及尤其是展現良好溶解度及膜形成。例如，化合物應展現提高之氧化安定性及經改良之玻璃轉化溫度。

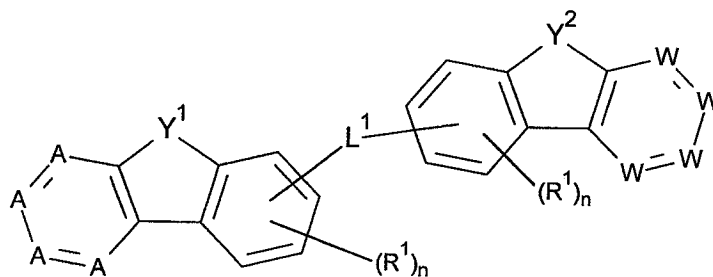
[0011] 另一目的可認為是以非常低廉價格及穩定品質提供具有優異性能之電子裝置。

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

[0013] 已令人驚訝地發現，下文詳細說明之特別化合物解決此等問題並消除先前技術的缺點。使用該等化合物可使有機電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，獲致非常良好性質，尤其是關於使用壽命、效率及操作電壓方面。因此，本發明提供含有此等化合物之電子裝置，尤其

是有機電致發光裝置，以及對應之較佳實施態樣。

[0014] 本發明因此提供包含下式(A)之結構的化合物：



式 (A)

其中，所使用之符號如下：

Y¹ 為 O 或 S ；

Y² 為 N(Ar)、O、S、C(R¹)₂ 或 -R¹C=CR¹- ；

W 在各情況下係相同或不同，且為 N 或 CR¹，較佳為 CR¹，其前提係一個環中不多於二個 W 基團為 N ；

L¹ 為鍵或具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R¹ 基取代之芳族或雜芳族環系統 ；

A 在各情況下係相同或不同，且為 N、CAr^a 或 CAr^b，其中剛好兩個 A 為由至少一個 CAr^a 或 CAr^b 基團隔開的 N，其前提係若兩個 N 與 A 相鄰則此 A 為 CAr^b ；

Ar 在各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R¹ 基取代之芳族或雜芳族環系統 ；

Ar^a 在各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳

族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統；

Ar^b 在各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統；

R^1 在各情況下係相同或不同，且為 H、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar¹)₂、N(R²)₂、C(=O)Ar¹、C(=O)R²、P(=O)(Ar¹)₂、P(Ar¹)₂、B(Ar¹)₂、Si(Ar¹)₃、Si(R²)₃，具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基 (thioalkoxy group) 或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH₂ 基團可經 -R²C=CR²-、-C≡C-、Si(R²)₂、C=O、C=S、C=NR²、-C(=O)O-、-C(=O)NR²-、NR²、P(=O)(R²)、-O-、-S-、SO 或 SO₂ 置換且其中一或多個氫原子可經 D、F、Cl、Br、I、CN 或 NO₂ 置換，或具有 5 至 40 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其各可經一或多個 R^2 基取代，或具有 5 至 40 個芳族環原子且可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基 (heteroaryloxy group)，或具有 5 至 40 個芳族環原子且可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基 (heteroaralkyl group)，或此等系統之組合；同時，二或更多個取代基 R^1 亦可一起形成單環或多環之脂族或芳族環系統；

Ar^1 在各情況下係相同或不同，且為具有5至30個芳族環原子及可經一或多個非芳族 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至同一矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個 Ar^1 基亦可能經由藉單鍵之橋接 (bridge) 或選自下列之橋接而接合在一起： $\text{B}(\text{R}^2)$ 、 $\text{C}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 $\text{C}=\text{C}(\text{R}^2)_2$ 、 O 、 S 、 $\text{S}=\text{O}$ 、 SO_2 、 $\text{N}(\text{R}^2)$ 、 $\text{P}(\text{R}^2)$ 及 $\text{P}(=\text{O})\text{R}^2$ ；

R^2 在各情況下係相同或不同，且為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 $\text{B}(\text{OR}^3)_2$ 、 CHO 、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^3$ 、 $\text{CR}^3=\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{OR}^3$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_3$ 、 $\text{P}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{B}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、 NO_2 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)_2$ 、 OSO_2R^3 、 OR^3 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^3$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^3$ ，具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其各可經一或多個 R^3 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^3$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^3-$ 、 NR^3 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO 或 SO_2 置換且其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換，或具有5至40個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統，或具有5至40個芳族環原子且可經一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基，或此等系統之組

合；同時，二或更多個相鄰 R^2 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族或芳族環系統；

R^3 在各情況下係相同或不同，且為 H、D、F 或具有 1 至 20 個碳原子之脂族、芳族及 / 或雜芳族烴基，其中氫原子亦可經 F 置換；同時，二或更多個相鄰 R^3 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族或芳族環系統；

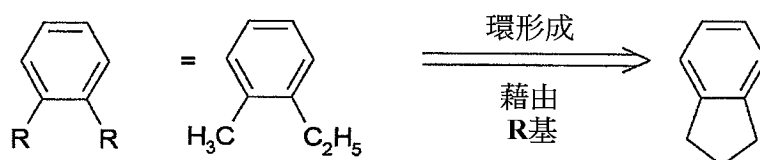
n 為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，更佳為 0 或 1，尤佳為 0；

其前提係

若 Y^2 基團為 $N(Ar)$ 、O 或 S， Ar^a 基不包含任何呋唑基，包括可鍵結至 Ar^a 基之 R^1 、 R^2 及 R^3 取代基。

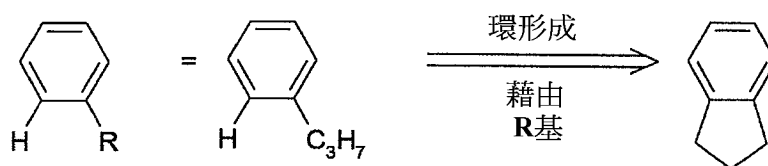
[0015] 本發明內容中之相鄰碳原子為彼此直接鍵結的碳原子。此外，在基之定義中的「相鄰基」意指該等基係鍵結至同一碳原子或鍵結至相鄰的碳原子。該等定義相應地適用於尤其是用語「相鄰基團」及「相鄰取代基」。

[0016] 本說明內容中，二或更多基可一起形成環之措辭應理解為尤其意指兩個基藉由化學鍵彼此接合(正式消除(formal elimination)兩個氫原子)。此係由下圖說明：



[0017] 此外，然上述措辭亦應理解為意指，若這兩個基之一為氫，則第二個基結合至氫原子所鍵結的位置，

而形成環。此應以下圖說明：



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

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

[0020] 本發明內容中之芳族環系統在環系統中含有6至40個碳原子。本發明內容中之雜芳族環系統在環系統中含有1至40個碳原子及至少一個雜原子，其先決條件係碳原子和雜原子之總和總數為至少5。雜原子較佳係選自N、O及/或S。本發明內容中之芳族或雜芳族環系統應理解為

意指如下之系統：其不一定只含芳基或雜芳基，而是其中亦可能二或更多芳基或雜芳基被非芳族單元（較佳係少於10%為H以外之原子）例如碳、氮或氧原子或者羰基所中斷。例如，諸如9,9'-螺雙芴(9,9'-spirobifluorene)、9,9-二芳芴(9,9-diarylfluorene)、三芳胺(triarylamine)、二芳基醚、芪(stilbene)等之系統因此亦應視為本發明內容中之芳族環系統，還有，其中二或更多芳基係被例如直鏈或環狀烷基或被矽基所中斷的系統。此外，其中二或更多芳基或雜芳基彼此直接鍵結之系統，例如聯苯、聯三苯、聯四苯(quaterphenyl)或聯吡啶(bipyridine)，同樣應視為芳族或雜芳族環系統。

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

[0022] 本發明內容中，其中個別氫原子或CH₂基團亦可經上述基團置換的C₁至C₂₀烷基係理解為意指，例如，甲基、乙基、正丙基、異丙基、環丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、環丁基、2-甲基丁基、正戊基、第二戊基、第三戊基、2-戊基、新戊基、環戊基、正己基、第二己基、第三己基、2-己基、3-己基、新己基、環己基、1-甲基環戊基、2-甲基戊基、正庚基、2-庚基、3-庚基、4-庚基、環庚基、1-甲基環己基、正辛基、2-乙基己基、環辛基、1-雙環[2.2.2]辛基、2-雙環[2.2.2]辛基、2-(2,6-二甲基)辛基、3-(3,7-二甲基)辛基、金剛烷

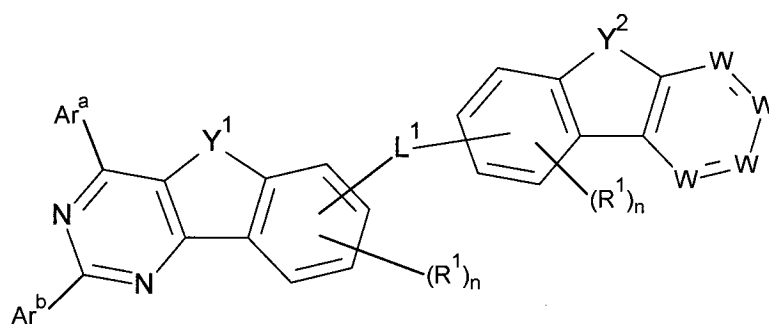
基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、1,1-二甲基-正己-1-基、1,1-二甲基-正庚-1-基、1,1-二甲基-正辛-1-基、1,1-二甲基-正癸-1-基、1,1-二甲基-正十二-1-基、1,1-二甲基-正十四-1-基、1,1-二甲基-正十六-1-基、1,1-二甲基-正十八-1-基、1,1-二乙基-正己-1-基、1,1-二乙基-正庚-1-基、1,1-二乙基-正辛-1-基、1,1-二乙基-正癸-1-基、1,1-二乙基-正十二-1-基、1,1-二乙基-正十四-1-基、1,1-二乙基-正十六-1-基、1,1-二乙基-正十八-1-基、1-(正丙基)環己-1-基、1-(正丁基)環己-1-基、1-(正己基)環己-1-基、1-(正辛基)環己-1-基及1-(正癸基)環己-1-基。烯基係理解為意指，例如，乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、庚烯基、環庚烯基、辛烯基、環辛烯基、或環辛二烯基。炔基係理解為意指，例如，乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基、庚炔基或辛炔基。C₁至C₄₀烷氧基係理解為意指，例如，甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、異丁氧基、第二丁氧基、第三丁氧基或2-甲基丁氧基。

[0023] 具有5至40個芳族環原子以及在各情況下亦可經上述基取代及可經由任何所希望位置接合至芳族或雜芳族系統之芳族或雜芳族環系統係理解為意指，例如，衍生自下列之基團：苯、萘、蔥、苯并蔥、菲、苯并菲、芘、蒽(chrysene)、芘、苝(fluoranthene)、苯并苝(benzofluoranthene)、稠四苯、稠五苯、苯并芘、聯苯、

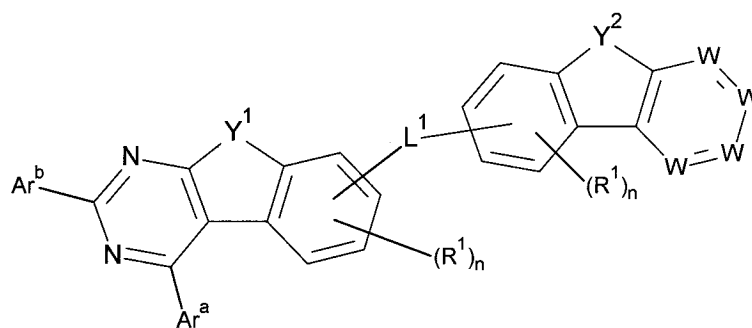
聯伸二苯 (biphenylene)、聯三苯 (terphenyl)、聯伸三苯 (terphenylene)、萸、螺雙萸、二氫萸、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛并萸、順-或反-單苯并茛并萸、順-或反-二苯并茛并萸、參茛并苯 (truxene)、異參茛并苯、螺參茛并苯 (spirotruxene)、螺異參茛并苯 (spiroisotruxene)、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、吡嗪、吡啶并吡嗪、茛并吡嗪、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻吡、啡噻吡、吡嗪、吡啶、咪唑、苯并咪唑、萘并咪唑 (naphthimidazole)、菲并咪唑 (phenanthrimidazole)、吡啶并咪唑 (pyridimidazole)、吡啶并咪唑 (pyrazinimidazole)、喹啉并咪唑 (quinoxalinimidazole)、噻唑、苯并噻唑、萘并噻唑 (naphthoxazole)、蔥并噻唑 (anthroxazole)、菲并噻唑 (phenanthroxazole)、異噻唑、1,2-噻唑、1,3-噻唑、苯并噻唑、嗒吡、苯并嗒吡、嘧啶、苯并嘧啶、喹啉、1,5-二吡蔥 (1,5-diazaanthracene)、2,7-二吡芘 (2,7-diazapyrene)、2,3-二吡芘 (2,3-diazapyrene)、1,6-二吡芘、1,8-二吡芘、4,5-二吡芘、4,5,9,10-四吡芘 (4,5,9,10-tetraazaperylene)、吡啶、啡啶、啡噻吡、啡噻吡、螢紅環 (fluorubine)、噻啶、吡嗪 (azacarbazole)、苯并吡啶、啡啶 (phenanthroline)、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯并三唑、1,2,3-噻二唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二唑、1,2,3-噻二唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二

啞、1,3,5-三吡、1,2,4-三吡、1,2,3-三吡、四啞、1,2,4,5-四吡、1,2,3,4-四吡、1,2,3,5-四吡、嘌呤、嘧啶(pteridine)、吲哚(indolizine)及苯并噻二啞。

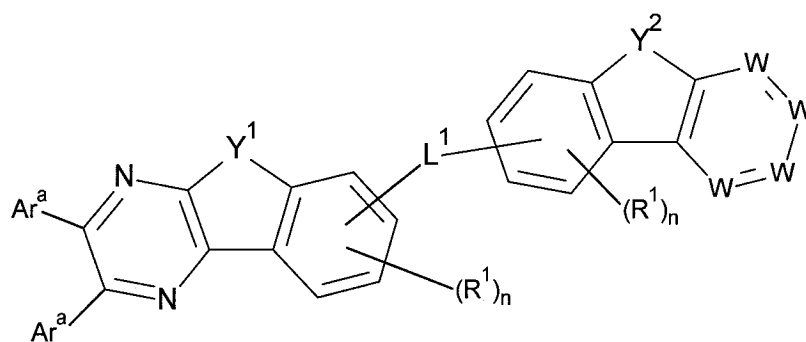
[0024] 在一較佳配置中，本發明化合物可形成式(I)、(II)或(III)之結構



式(I)



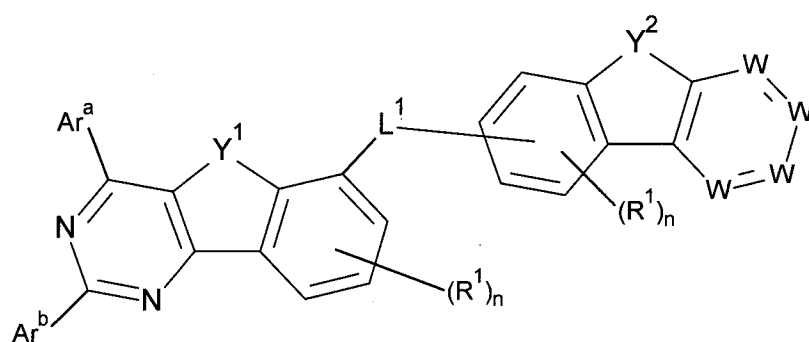
式(II)



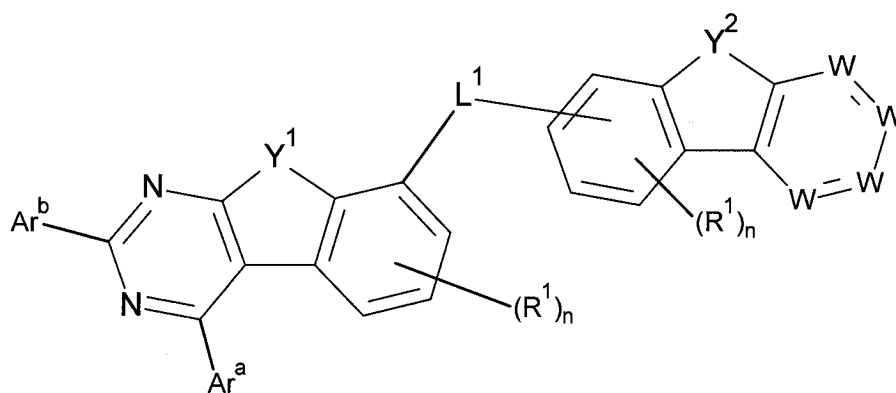
式(III)

其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述式(A)中所給之定義。較佳者係具有式(I)及/或(II)之結構的化合物。

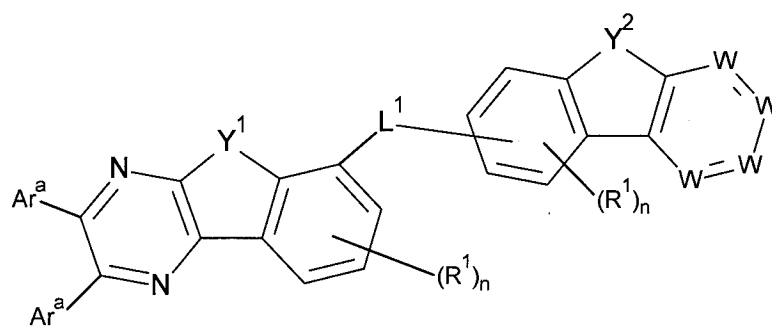
[0025] 較佳的，本發明之化合物可包含式(Ia)、(IIa)及/或(IIIa)之結構



式 (Ia)



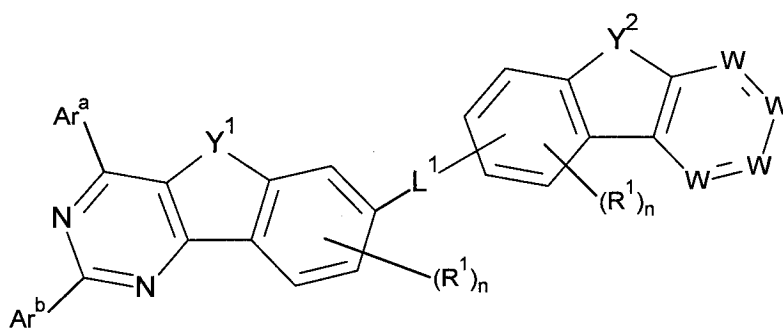
式 (IIa)



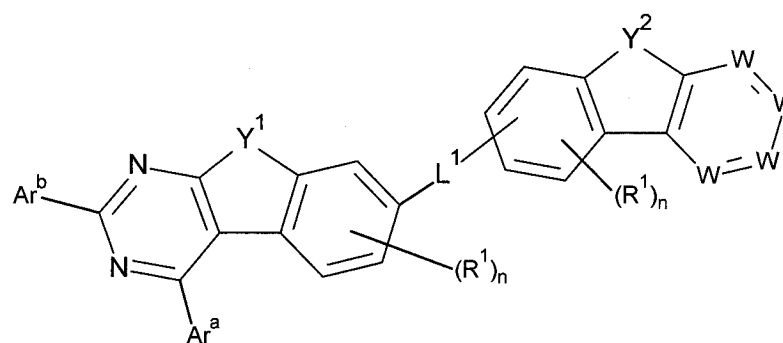
式 (IIIa)

其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述，尤其是式(A)、(I)、(II)或(III)所給之定義，較佳者為式(Ia)及/或(IIa)之結構。

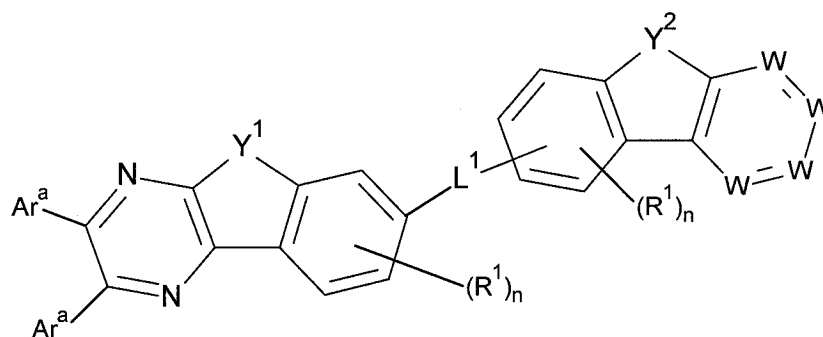
[0026] 較佳的，本發明之化合物可包含式(Ib)、(IIb)及/或(IIIb)中至少一者之結構



式(Ib)



式(IIb)

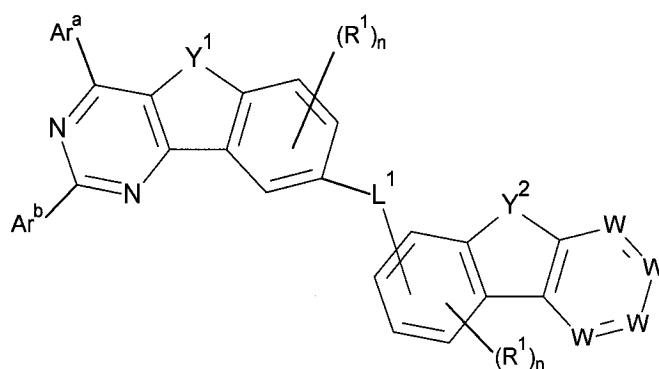


式(IIIb)

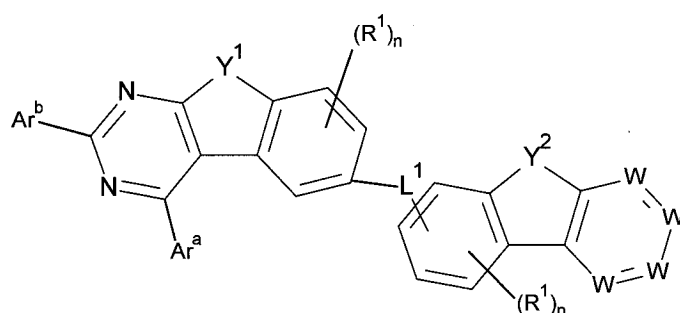
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上

述，尤其是式(A)、(I)、(II)或(III)所給之定義，較佳者為式(Ib)及/或(IIb)之結構。

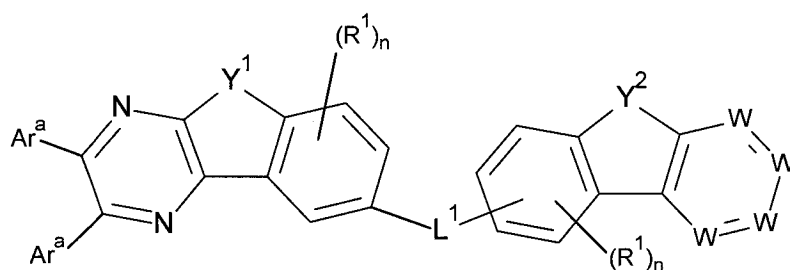
[0027] 較佳的，本發明之化合物可包含式(Ic)、(IIc)及/或(IIIc)中至少一者之結構



式(Ic)



式(IIc)

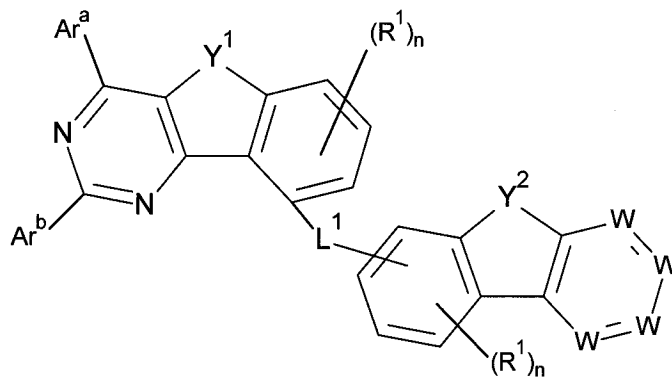


式(IIIc)

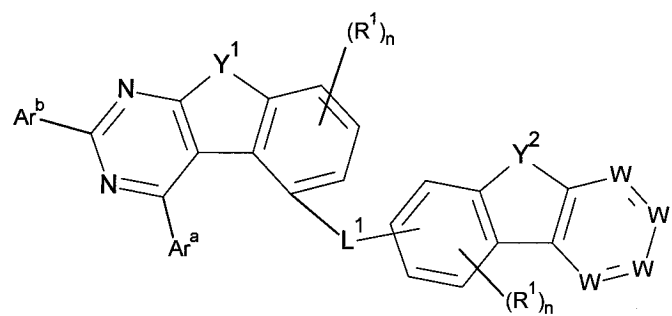
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述，尤其是式(A)、(I)、(II)或(III)所給之定義，較佳者為

式(Ic)及/或(IIc)之結構。

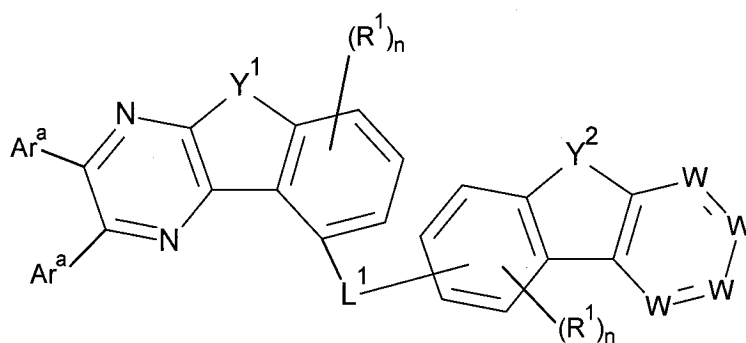
[0028] 亦可為化合物包含式(Id)、(IIId)及/或(IIIId)之結構中的至少一者之情況



式(Id)



式(IIId)



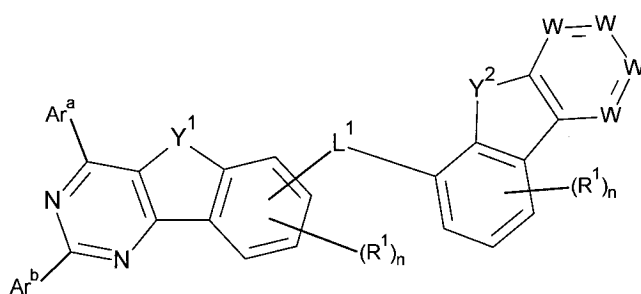
式(IIIId)

其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述，尤其是式(A)、(I)、(II)或(III)所給之定義，較佳者為

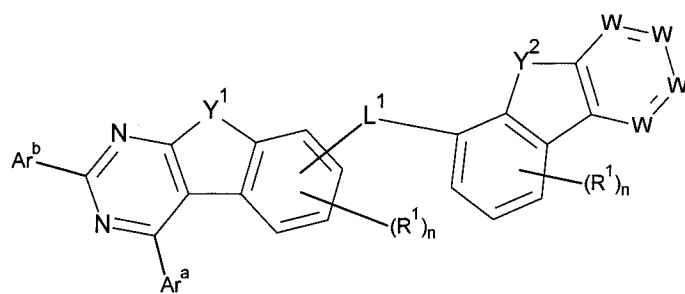
式(IId)及/或(IIId)之結構。

[0029] 在以上詳述之包含式(Ia)至(IIId)之結構的化合物當中，較佳者為含有式(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IIId)及/或(IIId)之結構的化合物，特佳者為具有式(Ic)、(IIc)及/或(IIIc)之結構的化合物。

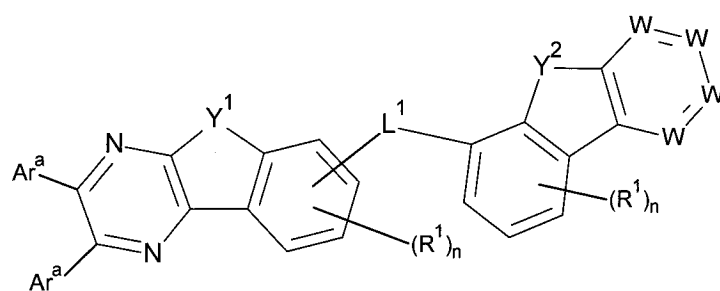
[0030] 另外可為化合物包含式(Ie)、(IIf)及/或(IIIe)之結構中的至少一者之情況



式 (Ie)



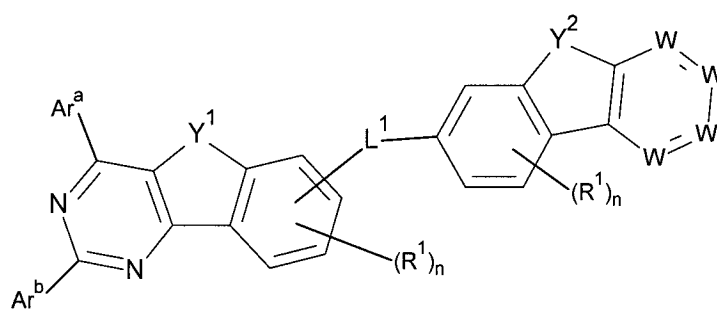
式 (IIf)



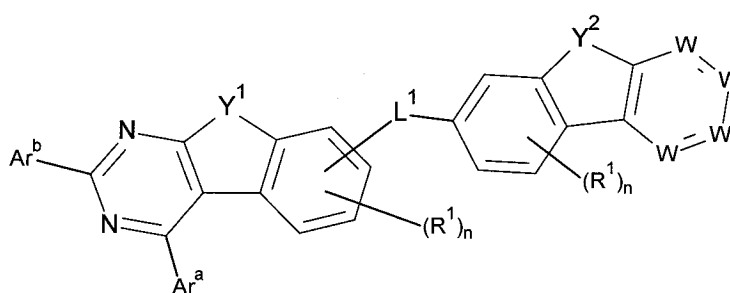
式 (IIIe)

其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述，尤其是式(A)、(I)、(II)或(III)所給之定義，較佳者為式(Ie)及/或(IIf)之結構。

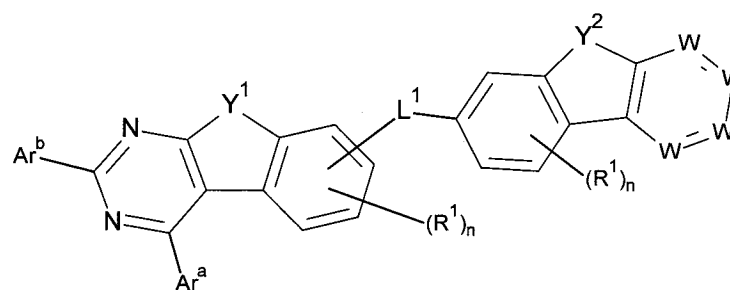
[0031] 另外可為化合物包含式(IIf)、(IIIf)及/或(IIIIf)之結構中的至少一者之情況



式(IIf)



式(IIIf)

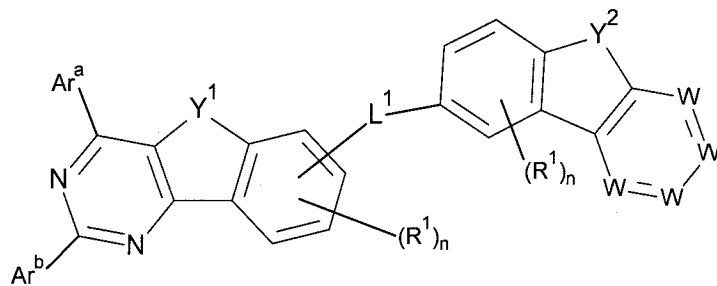


式(IIIIf)

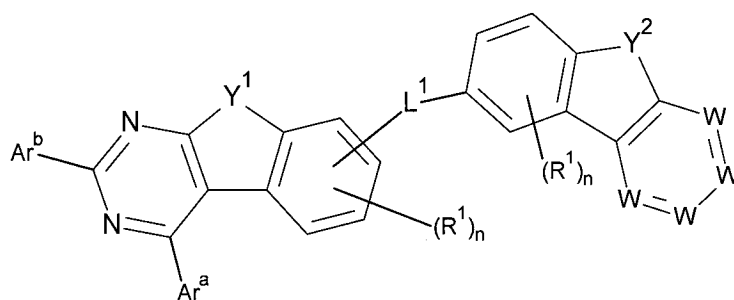
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述，尤其是式(A)、(I)、(II)或(III)所給之定義，較佳者為

式 (If) 及 / 或 (IIf) 之結構。

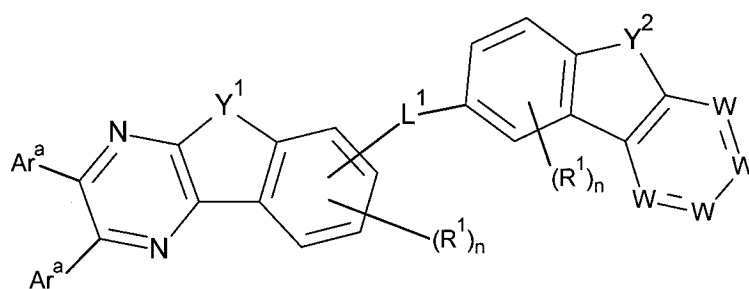
[0032] 較佳的，本發明之化合物可包含式 (Ig)、(IIg) 及 / 或 (IIIg) 中至少一者之結構



式 (Ig)



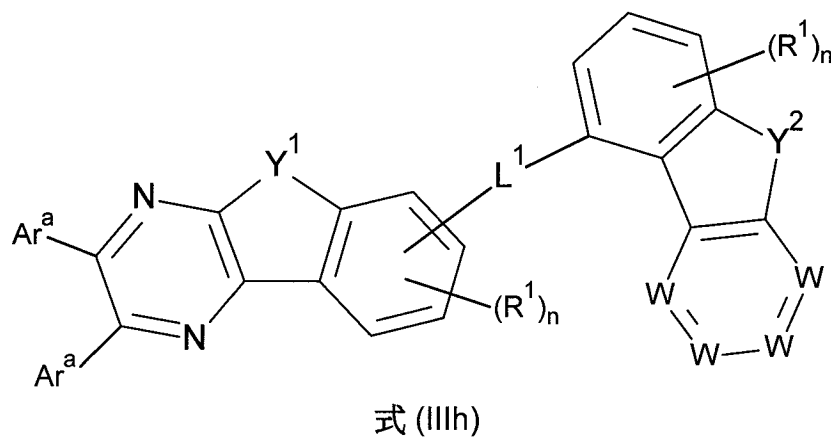
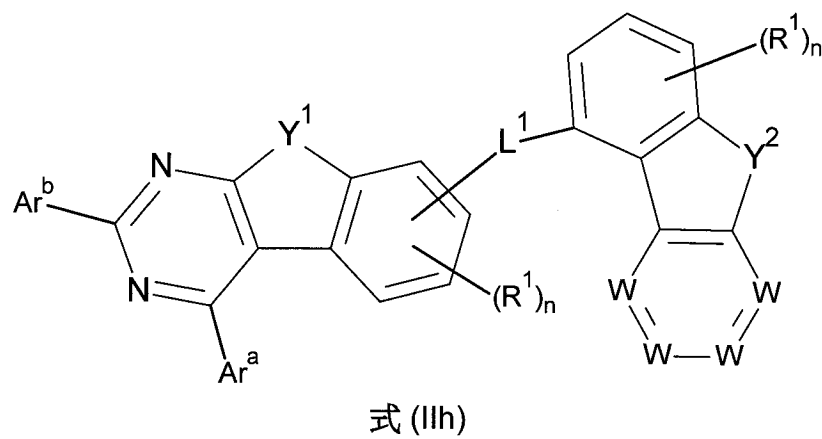
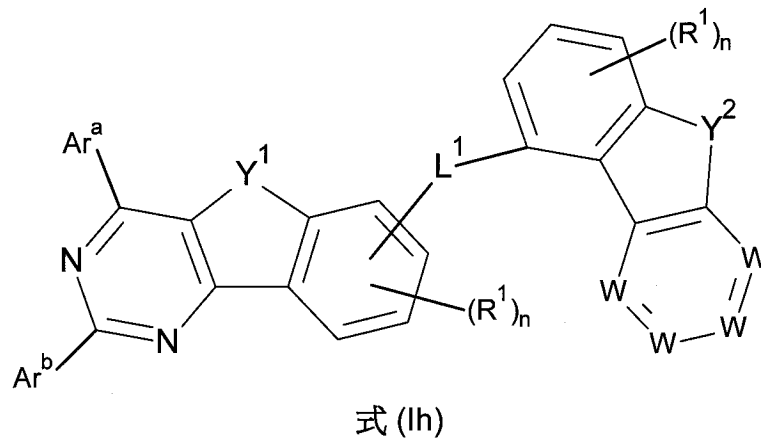
式 (IIg)



式 (IIIg)

其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述，尤其是式 (A)、(I)、(II) 或 (III) 所給之定義，較佳者為式 (Ig) 及 / 或 (IIg) 之結構。

[0033] 亦可為本發明之化合物包含式 (Ih)、(IIh) 及 / 或 (IIIh) 之結構中的至少一者之情況



其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有上述，尤其是式 (A)、(I)、(II) 或 (III) 所給之定義，較佳者為式 (Ih) 及 / 或 (IIh) 之結構。

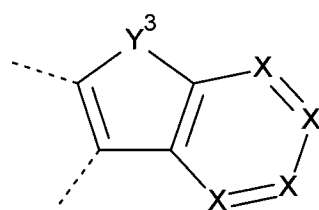
[0034] 在以上詳述之包含式(Ie)至(IIIh)之結構的化合物當中，較佳者為含有式(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構的化合物，特佳者為具有式(Ig)、(IIg)及/或(IIIg)之結構的化合物。

[0035] 另外的情況可為，不是以符號W表示之 CR^1 基團的一部分之式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)中之一者的結構之取代基 R^1 ，不與個別環結構之環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳為不形成任何稠合環系統。此包括與可能的 R^2 、 R^3 取代基(其可鍵結至 R^1 基)形成稠合環系統。較佳的情況可為，不是以符號W表示之 CR^1 基團的一部分之式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)中之一者的結構之取代基 R^1 ，不與個別環結構之環原子形成任何環系統。此包括與可能的 R^2 、 R^3 取代基(其可鍵結至 R^1 基)形成環系統。

[0036] 亦可為各情況下之式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中的下標n之總和總數不多於3、較佳係不多於2、

更佳係不多於1的情況。

[0037] 在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中，可能為兩個相鄰W基團各為 CR^1 且一起形成式(W-1)之基團



式(W-1)

其中

Y^3 為 $N(Ar)$ 、 O 、 S 或 $C(R^2)_2$ ，較佳為 $C(R^2)_2$ ，

X 在各情況下係相同或不同，且為 N 或 CR^2 ，較佳為 CR^2 ，其前提係一個環中不多於二個 X 基團為 N ，其中 Ar 及 R^2 可具有前文(尤其是式(A))所給之定義，

及

虛線表示至相鄰原子之鍵。較佳的，包含式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構的化合物較佳係每個結構具有不多於一個式(W-1)之基團。

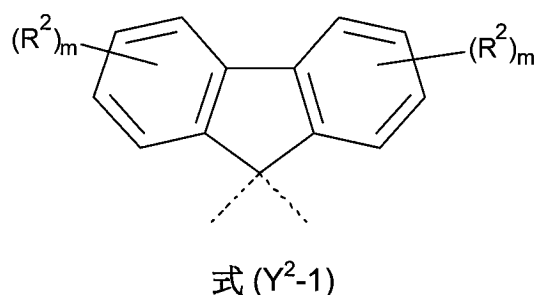
[0038] 另外較佳者為特徵如下之化合物：在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)中不多於兩個W基團為N，較佳係不多於一個W基團為N，較佳係所有W均為CR¹，其中，較佳係W表示的CR¹基團中不多於4者、更佳係不多於3者、尤佳係不多於2者不為CH基團。

[0039] 亦可為以下情況：式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)中之W基團的R¹基不與環結構之環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係不形成任何稠合環系統。此包括與可能的R²、R³取代基(其可鍵結至R¹基)形成稠合環系統。較佳的情況可為式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)中之W基團的R¹基不與環結構之環原子形成任何環系統。此包括與可能的R²、R³取代基(其可鍵結至R¹基)形成環系統。

[0040] 在根據本發明之包含式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、

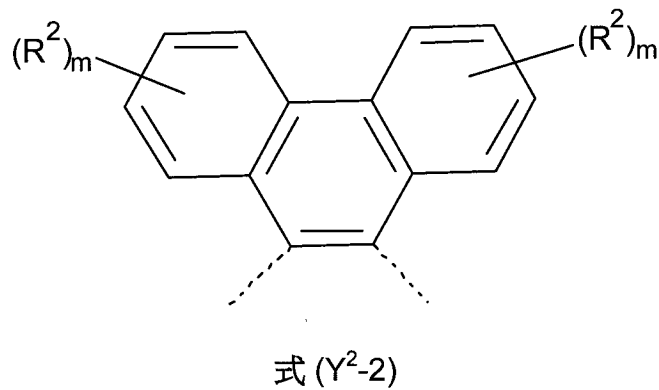
(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構的化合物的一較佳實施態樣中，符號 Y^2 為 $C(R^1)$ ，且 R^1 在各情況下係相同或不同，且為具有5至40個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統。

[0041] 另外可為在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IIId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)中，符號 Y^2 為式(Y^2-1)之基團的情況



其中，虛線表示至相鄰原子之鍵， R^2 具有前文(尤其是式(A))所給之定義，且 m 為0、1、2、3、或4，較佳為0、1或2。

[0042] 亦可為在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IIId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)中，符號 Y^2 為式(Y^2-2)之基團的情況



其中，虛線表示至相鄰原子之鍵， R^2 具有前文(尤其是式(A))所給之定義，且 m 為0、1、2、3、或4，較佳為0、1或2。

[0043] 較佳的情況可為，在各情況下之式(Y²-1)及/或(Y²-2)之結構中的下標 m 之總和總數不多於3，較佳係不多於2，尤佳係不多於1。

[0044] 亦可為以下情況：式(Y²-1)及/或(Y²-2)之結構中的 R^1 基不與環結構之環原子形成任何稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係任何稠合環系統。此包括與可能的 R^2 、 R^3 取代基(其可鍵結至 R^1 基)形成稠合環系統。較佳可為式(Y²-1)及/或(Y²-2)之結構中的 R^1 基不與環結構之環原子形成任何環系統的情況。此包括與可能的 R^2 、 R^3 取代基(其可鍵結至 R^1 基)形成環系統。

[0045] 另一較佳配置中，在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)結構中，符號 Y^1 可為O或S且符號 Y^2 可為N(Ar)。

[0046] 較佳的，在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中，Ar、Ar^a及/或Ar^b基團中之一者具有不多於5個雜原子，較佳係不多於3個雜原子，及更佳係不多於1個雜原子，其中此包括可鍵結至該等基團的R¹、R²及R³取代基。尤佳的，Ar、Ar^a及/或Ar^b基團不具任何雜原子，其中此包括可鍵結至該等基團的R¹、R²及R³取代基。

[0047] 亦可為以下情況：在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中的Ar、Ar^a及/或Ar^b基團具有總數不多於5個雜原子，較佳係不多於3個雜原子，及更佳係不多於1個雜原子，其中此包括可鍵結至該等基團的R¹、R²及R³取代基。

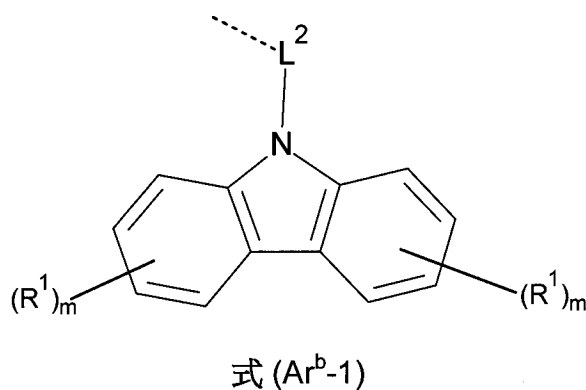
[0048] 另外的情況可為，在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中的Ar、Ar^a及/或Ar^b基團具有總數不多於50個、較佳係不多於40個、更佳係不多於22個芳族環原子，其中此包括可鍵結至該等基團的R¹、R²及R³取代基。

[0049] 另外的情況可為，式(A)、(I)、(II)、(III)、

(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中的Ar基不包含任何咪唑基，其中此包括可鍵結至Ar基之 R^1 、 R^2 及 R^3 取代基。

[0050] 較佳的，式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中的 Ar^a 基不包含任何咪唑基的情況，其中此包括可鍵結至 Ar^a 基之 R^1 、 R^2 及 R^3 取代基。

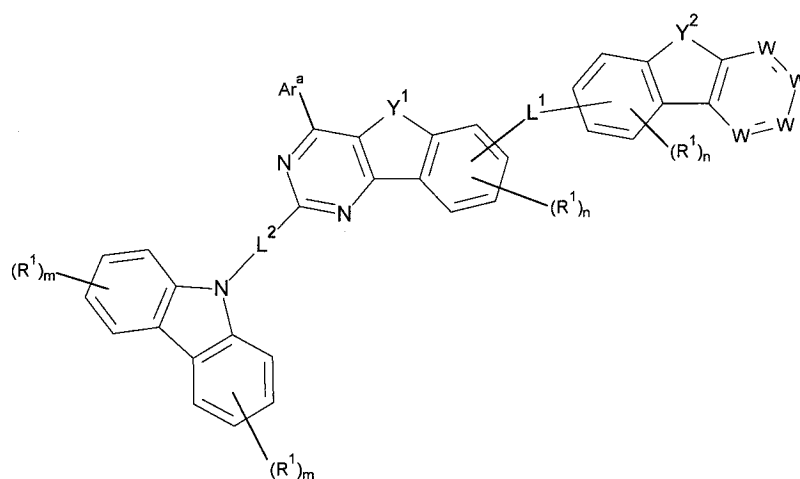
[0051] 另一較佳配置中，在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)結構中之 Ar^b 基團可為式(Ar^b-1)之基團。



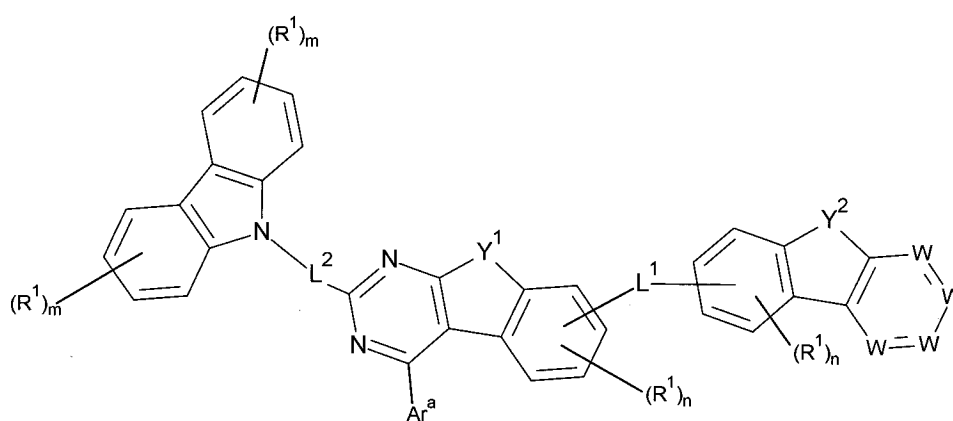
其中， L^2 為鍵或具有5至30個芳族環原子且可經一或

多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統，符號 R^1 具有前文(尤其是式(A))所給之定義， m 為 0、1、2、3 或 4，較佳為 0、1 或 2，且虛線表示至二氮雜二苯并呋喃(diazadibenzofuran)或二氮雜二苯并噻吩(diazadibenzothiophene)基團之鍵。

[0052] 較佳者尤其是包含式(IV)及/或(V)之結構的化合物



式(IV)



式(V)

其中， L^2 為鍵或具有 5 至 30 個芳族環原子且可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統，符號 Ar^a 、 Y^1 、

L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有前文(尤其是式(A))所給之定義， m 為0、1、2、3或4，較佳為0、1或2，且虛線表示鍵。

[0053] 較佳的情況可為，在各情況下之式(Ar^b-1)、(IV)及/或(V)之結構中的下標 m 之總和總數不多於3，較佳係不多於2，更佳係不多於1。

[0054] 亦可為以下情況：式(Ar^b-1)、(IV)及/或(V)之結構中的 R^1 基不與 R^1 基所結合的環結構之環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係不形成任何稠合環系統。此包括與可能的 R^2 、 R^3 取代基(其可鍵結至 R^1 基)形成稠合環系統。較佳可為式(Ar^b-1)、(IV)及/或(V)之結構中的 R^1 基不與環結構之環原子形成環系統的情況。此包括與可能的 R^2 、 R^3 取代基(其可鍵結至 R^1 基)形成環系統。

[0055] 就其中 Y^2 為 $C(R^1)_2$ 或 $-R^1C=CR^1-$ 的式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構而言， Ar^a 基同樣可為式(Ar^b-1)之基團。

[0056] 亦可為 Ar 、 Ar^a 及/或 Ar^b 基係選自由下列所組成之群組的情況：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基(branched terphenyl))，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基(branched quaterphenyl))，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二

苯并噻吩基，及 1-、2-、3-或 4-呋唑基，螺雙萸基，萸基，二苯并呋喃基，二苯并噻吩基 (dibenzothiophenyl)，蔥基，菲基及 / 或聯伸三苯基 (triphenylenyl)，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳為未經取代，特佳者為螺雙萸、萸、二苯并呋喃、二苯并噻吩、蔥、菲、聯伸三苯基。

[0057] 在另一實施態樣中，上述化合物之 Ar^a 及 Ar^b 中無一包含呋唑基、二苯并呋喃基或二苯并噻吩基。特佳者係，上述化合物之 Ar^a 及 Ar^b 中無一包含縮合雜芳族基團 (condensed heteroaromatic group) 的情況。特佳者係，上述化合物之 Ar^a 及 Ar^b 中無一包含雜芳族基團的情況。

[0058] 在一較佳配置中，包含式 (A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV) 及 / 或 (V) 之結構的化合物可由式 (A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV) 及 / 或 (V)、(VII) 及 / 或 (VIII) 之結構的化合物具有分子量為不超過 5000 g/mol，較佳不超過

4000 g/mol，特佳不超過 3000 g/mol，尤佳不超過 2000 g/mol，及最佳不超過 1200 g/mol。

[0059] 此外，本發明較佳化合物之一特徵係其可昇華(sublimable)。該等化合物通常具有低於約 1200 g/mol 之莫耳質量。

[0060] 當 W 為 CR^1 時或當芳族及 / 或雜芳族基團係經 R^1 取代基取代時，此等 R^1 取代基較佳係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 CN 、 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基或烷氧基或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有 2 至 10 個碳原子之烯基，其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 O 置換，且其中一或多個氫原子可經 D 或 F 置換；具有 5 至 24 個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統；或具有 5 至 25 個芳族環原子且可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基(heteroaralkyl group)；同時，隨意地可能兩個 R^1 取代基鍵結至同一碳原子或至相鄰碳原子以形成可經一或多個 R^1 基取代之單環或多環之脂族、芳族或雜芳族環系統，其中， Ar^1 在各情況下係相同或不同的且代表具有 6 至 40 個碳原子以及在各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有 5 至 60 個芳族環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基、或具有 5 至 60 個芳族環原子以及在各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基，其中二或更多個相鄰 R^2 取代基可隨意地形成單環或多環之脂族環系

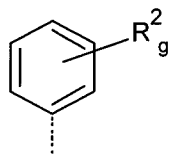
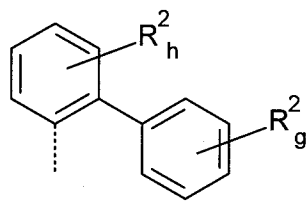
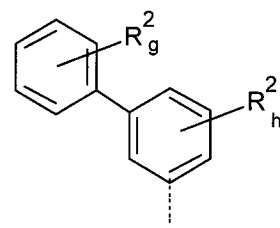
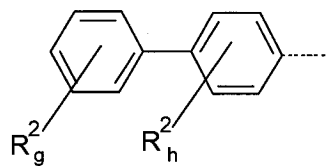
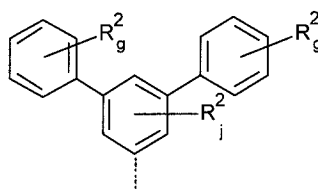
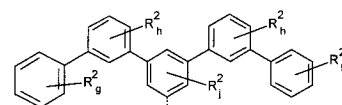
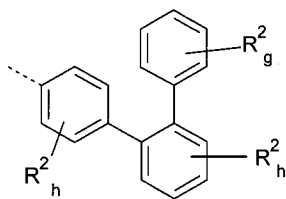
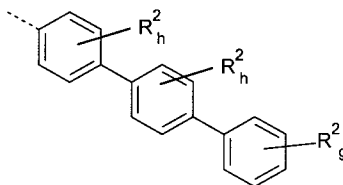
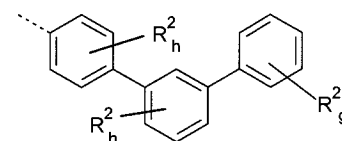
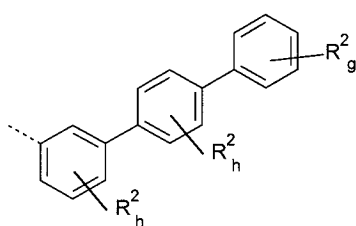
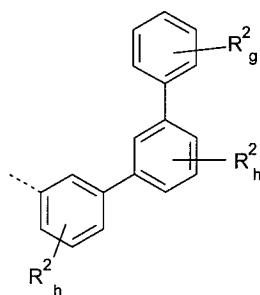
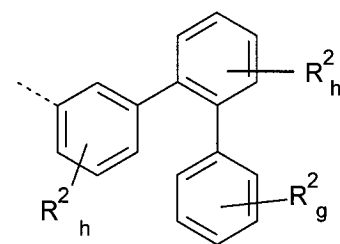
統，其可經一或多個 R^3 基取代，其中符號 R^2 具有前文(尤其是式(A))所給之定義。較佳的， Ar^1 在各情況下係相同或不同且為芳基或雜芳基，其具有5至24個、較佳為5至12個芳族環原子，以及其在各情況下可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

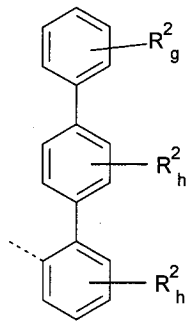
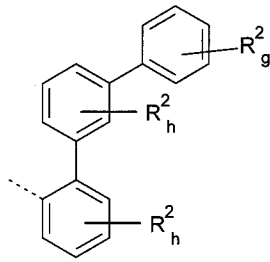
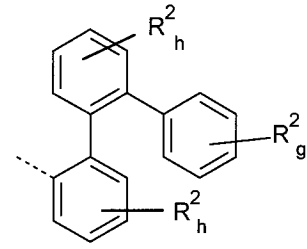
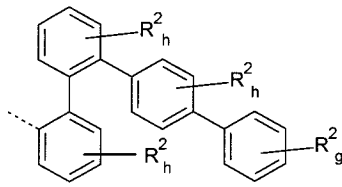
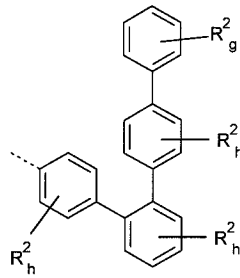
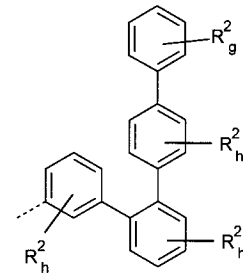
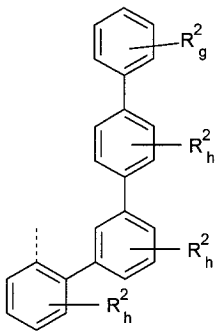
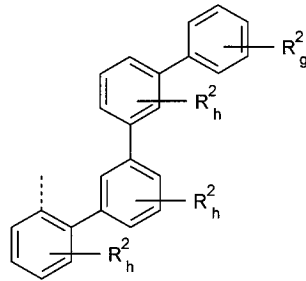
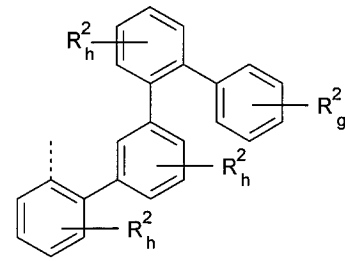
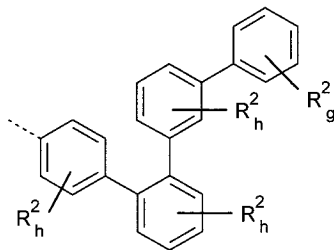
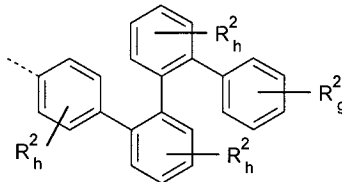
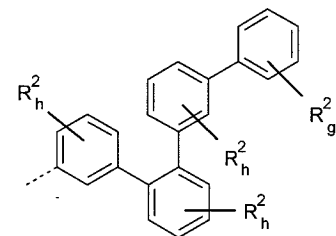
[0061] 適合之 Ar^1 基團的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并咪喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基，及1-、2-、3-或4-呋唑基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

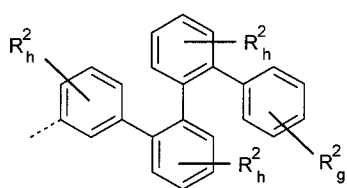
[0062] 更佳的，該等 R^1 取代基係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 CN 、 $N(Ar^1)_2$ ，具有1至8個碳原子、較佳具有1、2、3或4個碳原子之直鏈烷基，或具有3至8個碳原子、較佳具有3或4個碳原子之支鏈或環狀烷基，或具有2至8個碳原子、較佳具有2、3或4個碳原子之烯基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代；或具有6至24個芳族環原子、較佳6至18個芳族環原子、更佳6至13個芳族環原子且各情況下可經一或多個非芳族 R^1 基取代、但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統；同時，隨意地可能兩個 R^1 取代基鍵結至同一碳原子或至相鄰碳原子以形成可經一或多個 R^2 基取代、但較佳係未經取代的單環或多環之脂族環系統，其中 Ar^1 可具有前文所給之定義。

[0063] 最佳的， R^1 取代基係選自由下列所組成之群組： H ，及具有6至18個芳族環原子、較佳6至13個芳族環原子且各情況下可經一或多個非芳族 R^2 基取代、但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統。適合之 R^1 取代基的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萘基，1-、2-、3-或4-螺雙萘基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并咪喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基，及1-、2-、3-或4-呋啶基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

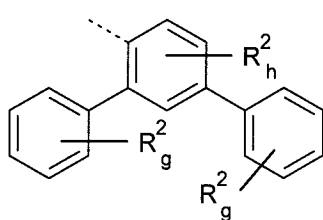
[0064] 另外的情況可為，在式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV)及/或(V)之結構中，至少一 R^1 、 Ar 、 Ar^1 、 Ar^a 或 Ar^b 基係選自式(R^1-1)至(R^1-87)之基團：

式 (R¹-1)式 (R¹-2)式 (R¹-3)式 (R¹-4)式 (R¹-5)式 (R¹-6)式 (R¹-7)式 (R¹-8)式 (R¹-9)式 (R¹-10)式 (R¹-11)式 (R¹-12)

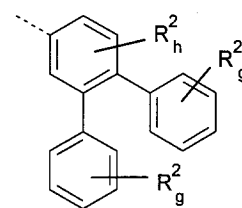
式 (R¹-13)式 (R¹-14)式 (R¹-15)式 (R¹-16)式 (R¹-17)式 (R¹-18)式 (R¹-19)式 (R¹-20)式 (R¹-21)式 (R¹-22)式 (R¹-23)式 (R¹-24)



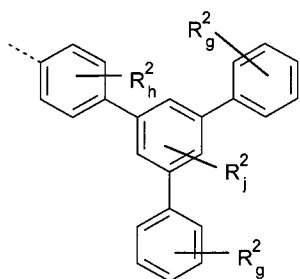
式 (R¹-25)



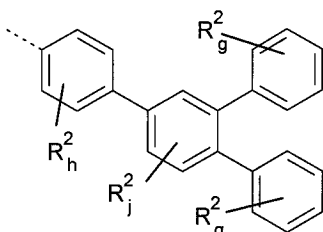
式 (R¹-26)



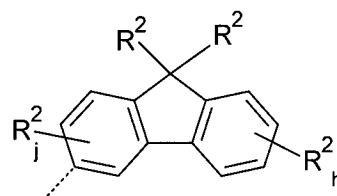
式 (R¹-27)



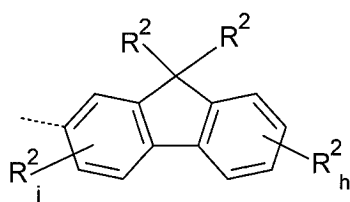
式 (R¹-28)



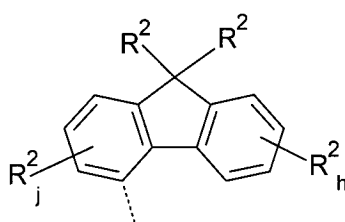
式 (R¹-29)



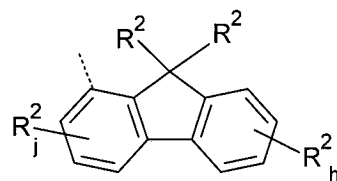
式 (R¹-30)



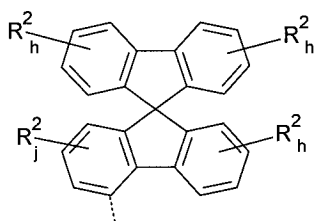
式 (R¹-31)



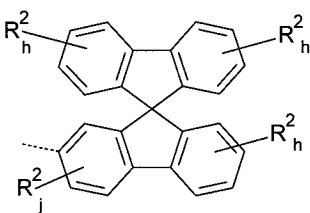
式 (R¹-32)



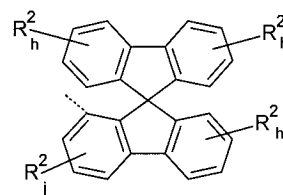
式 (R¹-33)



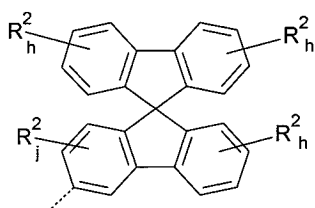
式 (R¹-34)



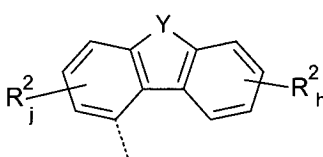
式 (R¹-35)



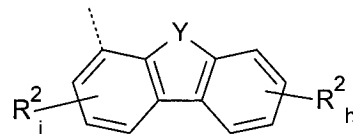
式 (R¹-36)



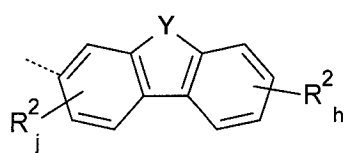
式 (R¹-37)



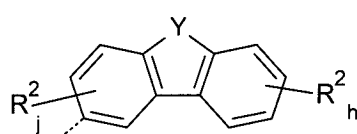
式 (R¹-38)



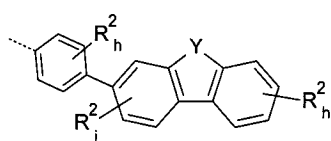
式 (R¹-39)



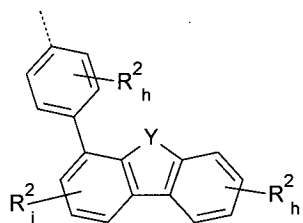
式 (R¹-40)



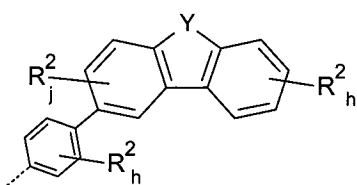
式 (R¹-41)



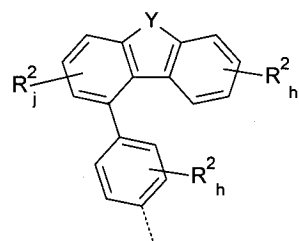
式 (R¹-42)



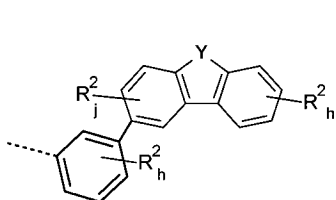
式 (R¹-43)



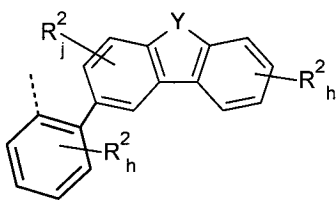
式 (R¹-44)



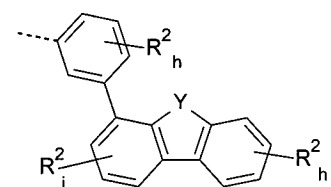
式 (R¹-45)



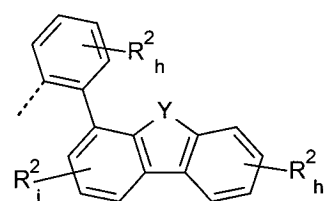
式 (R¹-46)



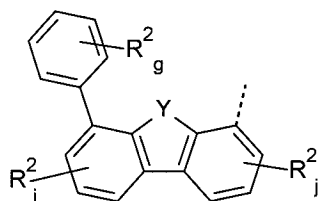
式 (R¹-47)



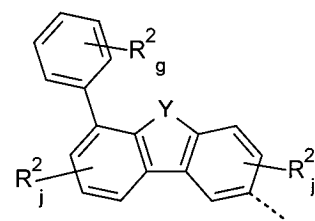
式 (R¹-48)



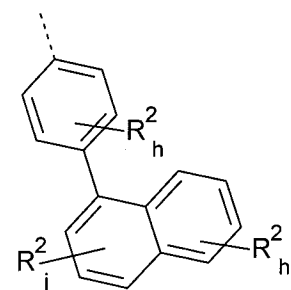
式 (R¹-49)



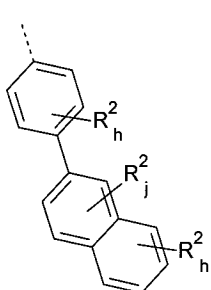
式 (R¹-50)



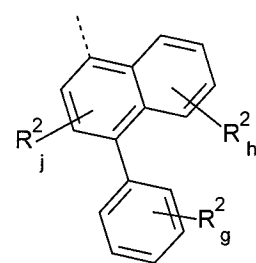
式 (R¹-51)



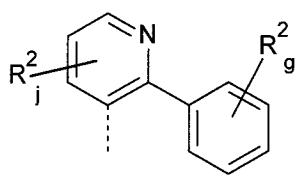
式 (R¹-52)



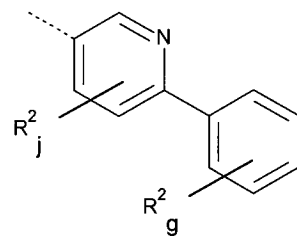
式 (R¹-53)



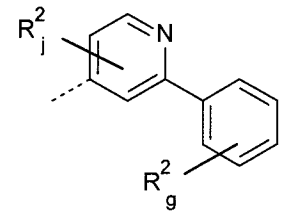
式 (R¹-54)



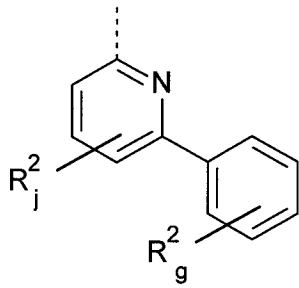
式 (R¹-55)



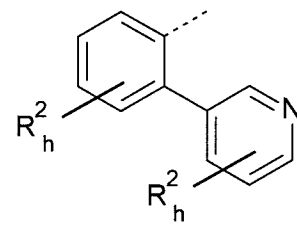
式 (R¹-56)



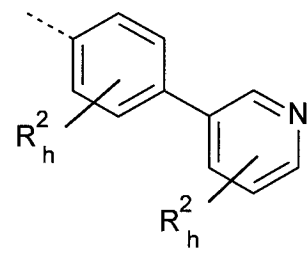
式 (R¹-57)



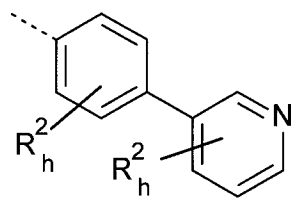
式 (R¹-58)



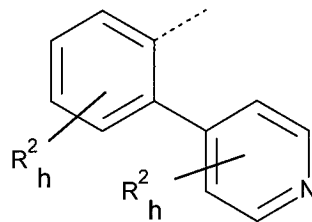
式 (R¹-59)



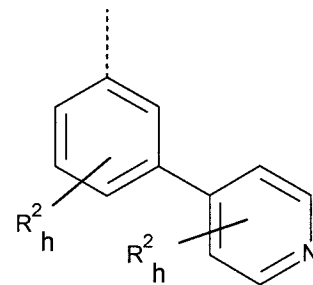
式 (R¹-60)



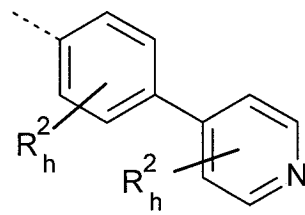
式 (R¹-61)



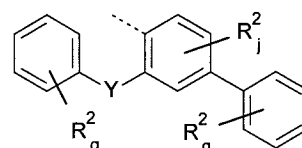
式 (R¹-62)



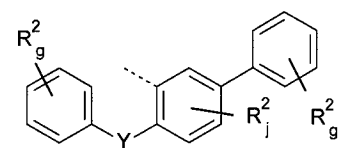
式 (R¹-63)



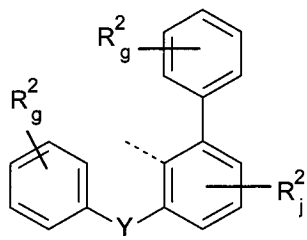
式 (R¹-64)



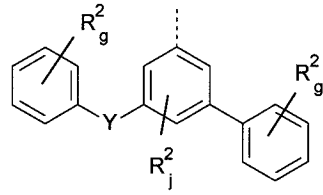
式 (R¹-65)



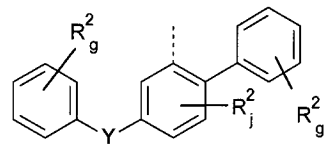
式 (R¹-66)



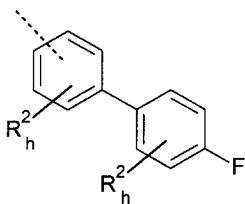
式 (R¹-67)



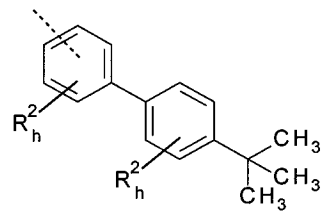
式 (R¹-68)



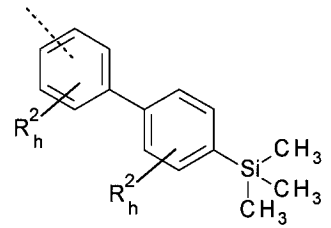
式 (R¹-69)



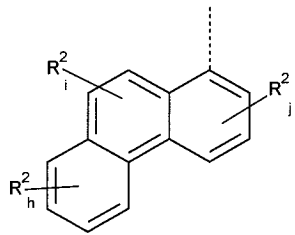
式 (R¹-70)



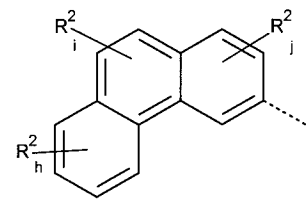
式 (R¹-71)



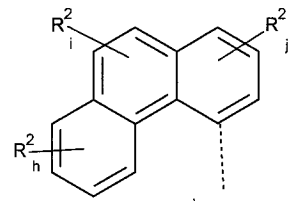
式 (R¹-72)



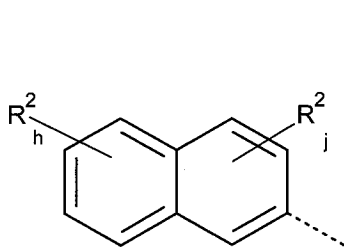
式 (R¹-73)



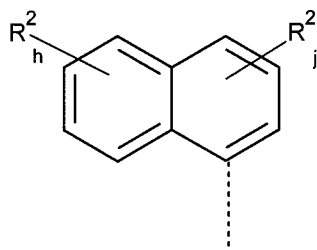
式 (R¹-74)



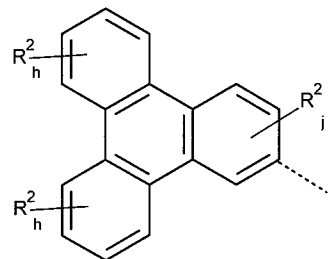
式 (R¹-75)



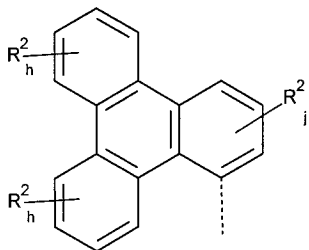
式 (R¹-76)



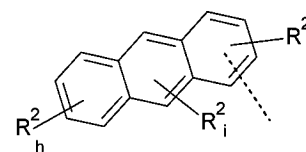
式 (R¹-77)



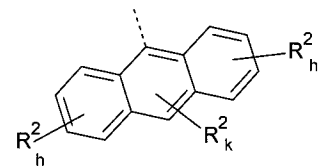
式 (R¹-78)



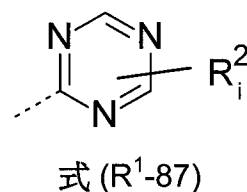
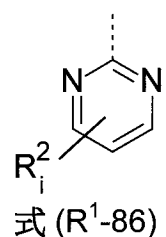
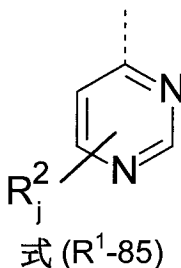
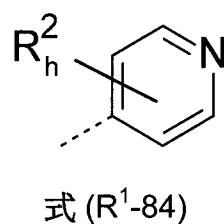
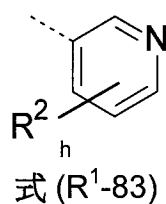
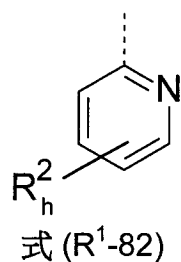
式 (R¹-79)



式 (R¹-80)



式 (R¹-81)



其中，所使用之符號如下：

Y 為 O、S 或 NR²，較佳為 O 或 S；

k 在各情況下獨立地為 0 或 1，

i 在各情況下獨立地為 0、1 或 2，較佳為 0 或 1；

j 在各情況下獨立地為 0、1、2 或 3，較佳為 0、1 或 2，更佳為 0 或 1；

h 在各情況下獨立地為 0、1、2、3、或 4，較佳為 0、1 或 2；

g 在各情況下獨立地為 0、1、2、3、4 或 5，較佳為 0、1 或 2；

R² 可具有前文(尤其是式(A))所給之定義，且虛線鍵標示附接位置。

[0065] 較佳的情況可為，在各情況下之式(R¹-1)至(R¹-87)之結構中的下標 k、i、j、h 及 g 之總和總數不多於 3，較佳係不多於 2，更佳係不多於 1。

[0066] 較佳的，式(R¹-1)至(R¹-87)中之 R² 基不與 R² 基

所鍵結的芳基或雜芳基的環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係不形成任何稠合環系統。此包括與可能的 R^3 取代基(其可鍵結至 R^2 基)形成稠合環系統。

[0067] 更佳的，式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV)及/或(V)中之 Ar^a 及/或 Ar^b 基係選自式(R^1-1)至(R^1-48)及(R^1-73)至(R^1-87)，尤佳是(R^1-1)、(R^1-38)至(R^1-48)及(R^1-73)至(R^1-81)之基團。本文中，有關式(R^1-1)至(R^1-87)之基團的下標之總和總數及鍵結至該等基團之 R^2 基的前文詳細說明之較佳者可適用。

[0068] 更佳的，式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV)及/或(V)中之 Ar 及/或 Ar^1 基係選自式(R^1-1)至(R^1-54)，特佳為(R^1-1)至(R^1-51)，尤佳為(R^1-1)至(R^1-37)之基團，最佳者為(R^1-1)之基。本文中，有關式(R^1-1)至(R^1-87)之基團的下標之總和總數及鍵結至該等基團之 R^2 基的前文詳細說明之較佳者可適用。

[0069] 較佳的， L^1 或 L^2 基團與式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、

(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)、(Ar^b-1)、(IV)及/或(V)之L¹或L²基團所鍵結的兩個芳基或雜芳基一起形成貫穿共軛(through-conjugation)。芳族或雜芳族系統之貫穿共軛係於相鄰芳族或雜芳族環之間形成直接鍵時即形成。上述共軛基團之間的其他鍵結，例如經由硫、氮或氧原子或羰基，對於共軛無害。在萸系統之情況下，兩個芳族環係直接鍵結，其中在位置9之sp³混成(sp³-hybridized)碳原子會防止該等環之稠合，但共軛是可能的，原因係在位置9之sp³混成碳原子不一定位在兩個芳基或雜芳基之間。反之，在第二螺雙萸結構之情況下，若兩個芳基或雜芳基之間的鍵結係經由螺雙萸結構中之同一苯基或經由螺雙萸結構中之複數個苯基(彼此直接鍵結且於一平面)，則可形成貫穿共軛。若兩個芳基或雜芳基之間的鍵結係經由透過在位置9之sp³混成碳原子而鍵結的第二螺雙萸結構中之不同苯基，則共軛被阻礙。

[0070] 在本發明另一較佳實施態樣中，L¹及/或L²為鍵。

[0071] 在本發明另一較佳實施態樣中，L¹及/或L²為具有5至14個芳族或雜芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，較佳為具有6至12個碳原子之芳族環系統，及其可經一或多個R¹基取代，但較佳係未經取代，其中R¹可具有前文(尤其是式(A))所給之定義。更佳的，L¹及/或L²為具有6至10個芳族環原子之芳族環系統或具有6至13個雜芳族環原子之雜芳族環系統，其各可經一或多個R²基取代，但較佳係

未經取代，其中 R^2 可具有前文(尤其是式(A))所給之定義。

[0072] 另外較佳的，式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)、(Ar^{b-1})、(IV)及/或(V)之結構中詳細說明的符號 L^1 及/或 L^2 尤其在各情況下係相同或不同，且為具有5至24個環原子、較佳為6至13個環原子、更佳為6至10個環原子之芳基或雜芳基，使得芳族或雜芳族環系統之芳族或雜芳族基團直接鍵結(即，經由該芳族或雜芳族基團之原子)至另外的基團之個別原子。

[0073] 另外的情況可為，式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)、(Ar^{b-1})、(IV)及/或(V)之結構中詳細說明的 L^1 及/或 L^2 基團尤其包含具有不多於兩個稠合芳族及/或雜芳族環之芳族環系統，較佳係不包含任何稠合芳族或雜芳族系統。因此，萘基結構優於蔥結構。此外，萘基、螺雙萘基、二苯并呋喃基及/或二苯并噻吩基結構優於萘基結構。

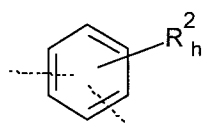
[0074] 特佳者為無稠合之結構，例如苯基、聯苯基、聯三苯基及/或聯四苯基結構。

[0075] 適用之芳族或雜芳族環系統 L^1 及/或 L^2 的實例係選自由下列所組成之群組：鄰伸苯基、間伸苯基、或對

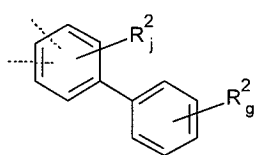
伸苯基，鄰聯伸二苯基、間聯伸二苯基或對聯伸二苯基，聯伸三苯基(尤其是支鏈聯伸三苯基)、聯伸四苯基(尤其是支鏈聯伸四苯基 (branched quaterphenylene))、伸萸基 (fluorenylene)、伸螺雙萸基 (spirobifluorenylene)、伸二苯并呋喃基 (dibenzofuranylene)、伸二苯并噻吩基 (dibenzothiénylene)及伸咔唑基 (carbazolyene)，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

[0076] 亦可為以下情況：式 (A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh) 及 / 或 (IIIh)(Ar^{b-1})、(IV) 及 / 或 (V) 結構中詳細說明之 L^1 及 / 或 L^2 基團尤其具有不多於 1 個氮原子，較佳係不多於 2 個雜原子，尤佳係不多於一個雜原子及更佳係無雜原子。

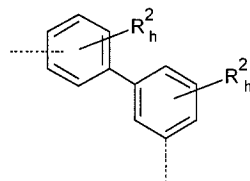
[0077] 較佳者為包含式 (A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV) 及 / 或 (V) 之結構的化合物，其中式 (A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh) 及 / 或 (IIIh)、(Ar^{b-1})、(IV) 及 / 或 (V) 之 L^1 及 / 或 L^2 基團係選自式 (L^1-1) 至 (L^1-108) 之基團



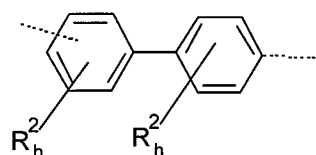
式(L¹-1)



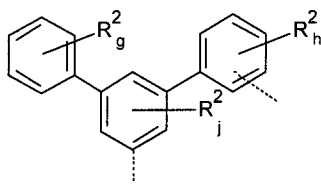
式(L¹-2)



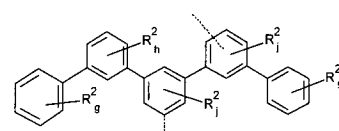
式(L¹-3)



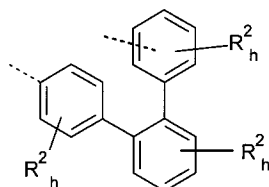
式(L¹-4)



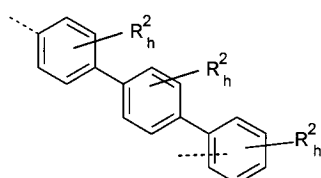
式(L¹-5)



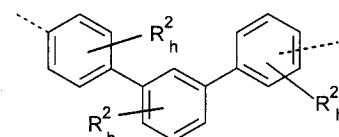
式(L¹-6)



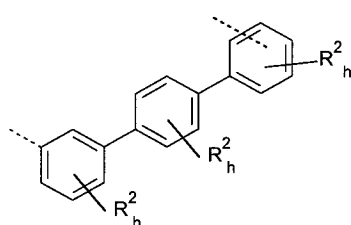
式(L¹-7)



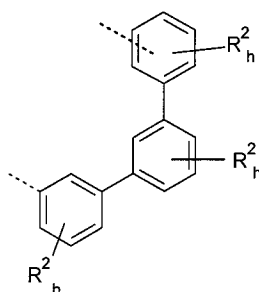
式(L¹-8)



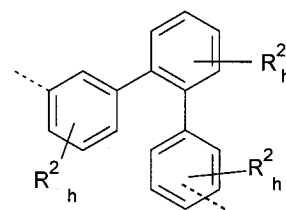
式(L¹-9)



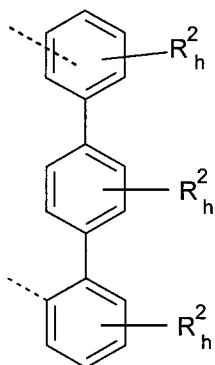
式(L¹-10)



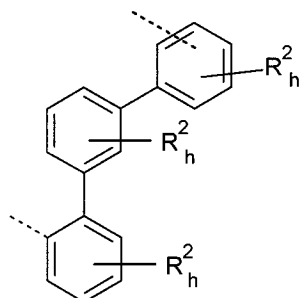
式(L¹-11)



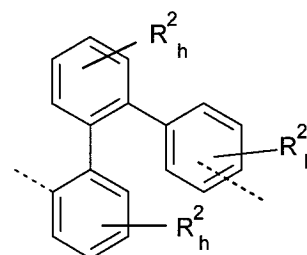
式(L¹-12)



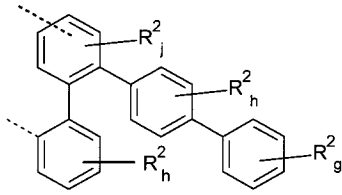
式(L¹-13)



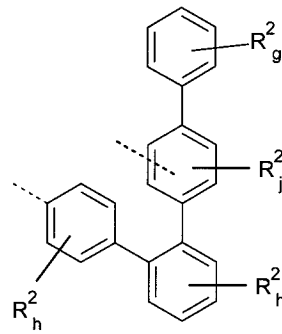
式(L¹-14)



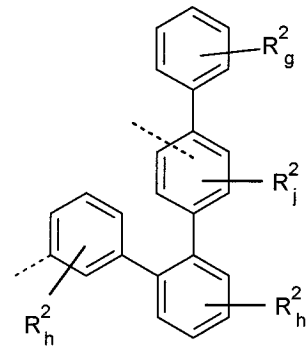
式(L¹-15)



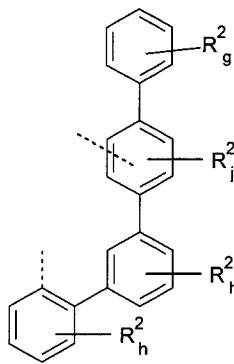
式 (L¹-16)



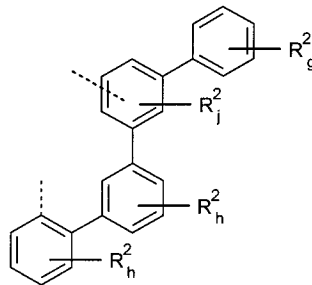
式 (L¹-17)



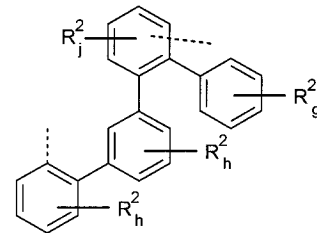
式 (L¹-18)



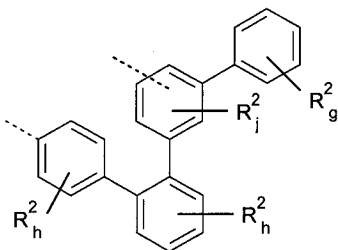
式 (L¹-19)



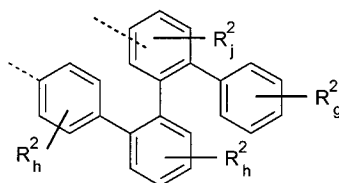
式 (L¹-20)



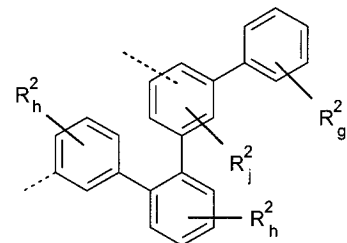
式 (L¹-21)



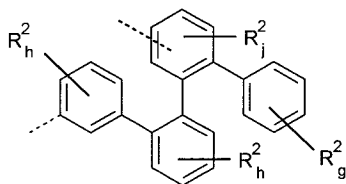
式 (L¹-22)



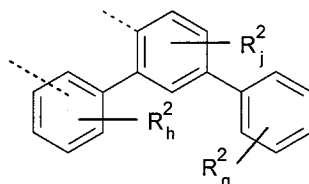
式 (L¹-23)



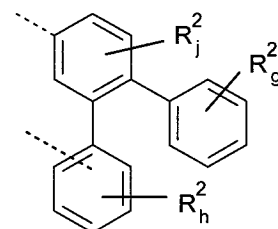
式 (L¹-24)



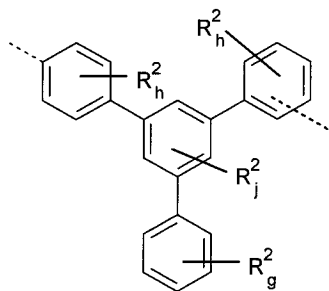
式 (L¹-25)



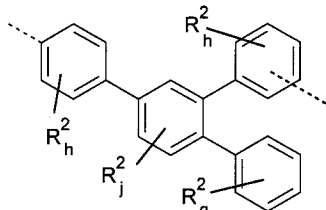
式 (L¹-26)



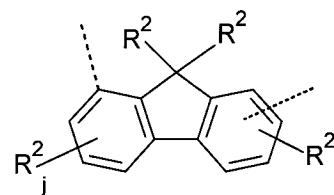
式 (L¹-27)



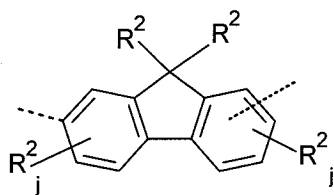
式 (L¹-28)



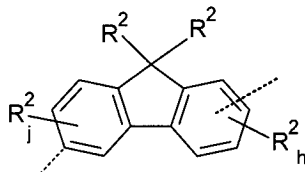
式 (L¹-29)



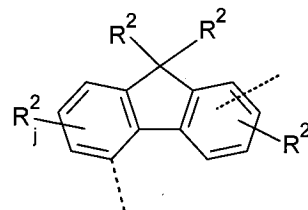
式 (L¹-30)



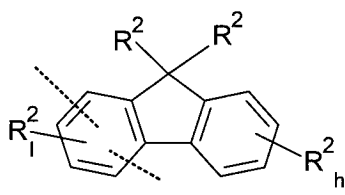
式 (L¹-31)



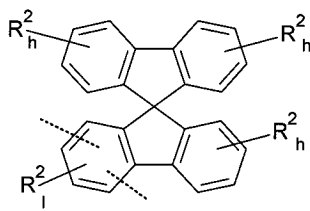
式 (L¹-32)



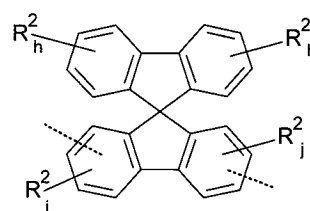
式 (L¹-33)



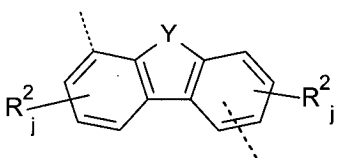
式 (L¹-34)



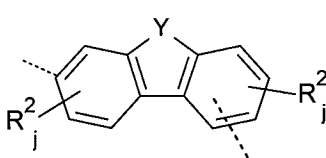
式 (L¹-35)



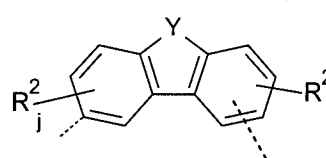
式 (L¹-36)



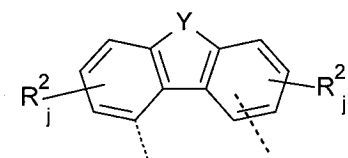
式 (L¹-37)



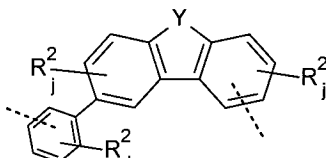
式 (L¹-38)



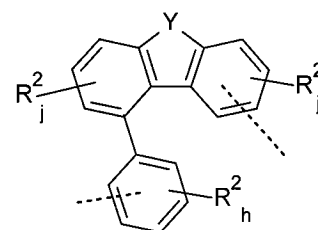
式 (L¹-39)



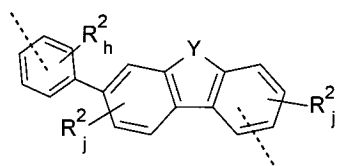
式 (L¹-40)



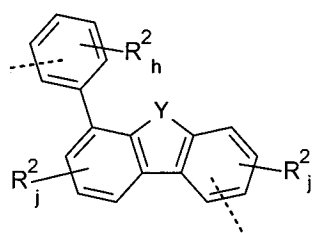
式 (L¹-41)



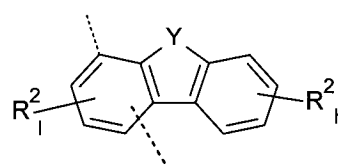
式 (L¹-42)



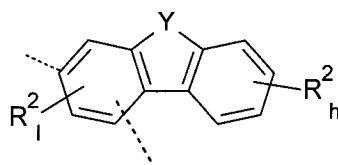
式 (L¹-43)



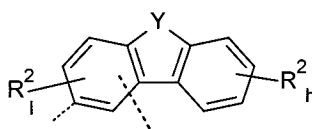
式 (L¹-44)



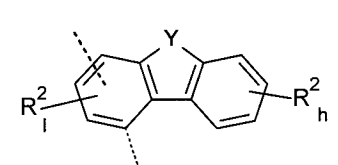
式 (L¹-45)



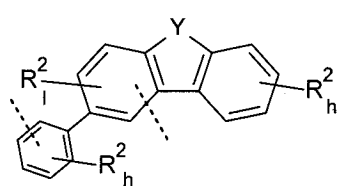
式 (L¹-46)



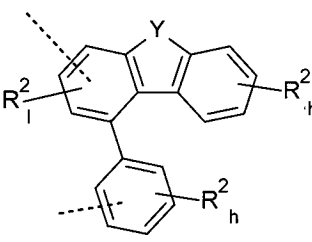
式 (L¹-47)



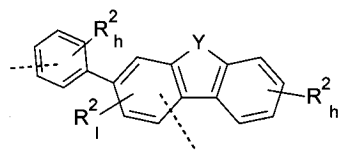
式 (L¹-48)



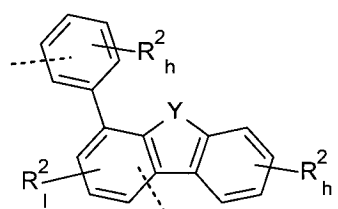
式 (L¹-49)



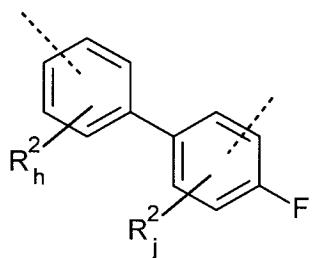
式 (L¹-50)



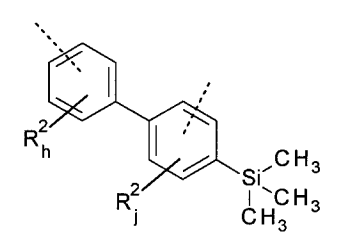
式 (L¹-51)



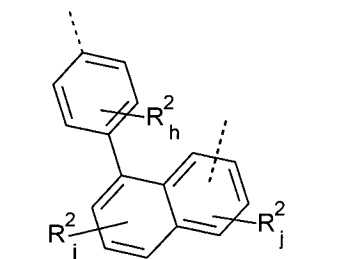
式 (L¹-52)



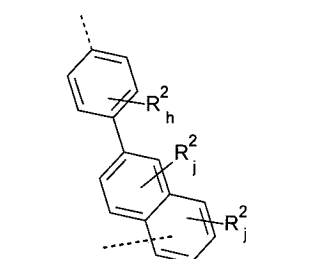
式 (L¹-53)



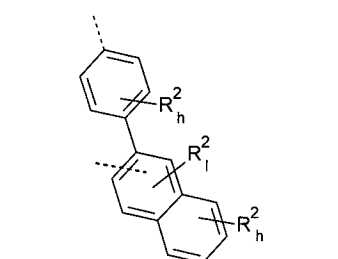
式 (L¹-54)



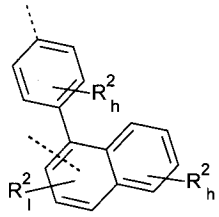
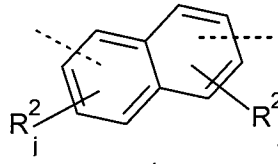
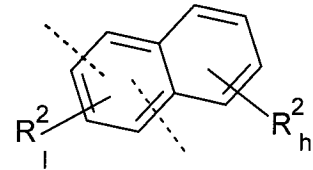
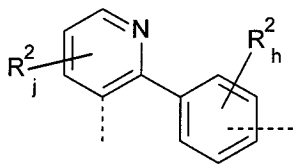
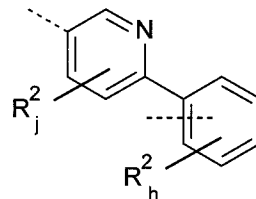
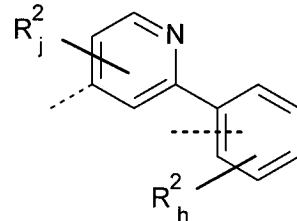
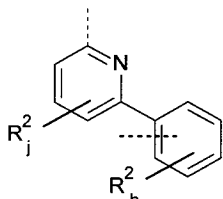
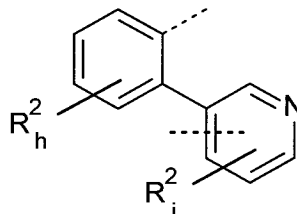
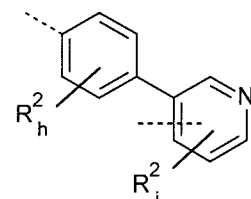
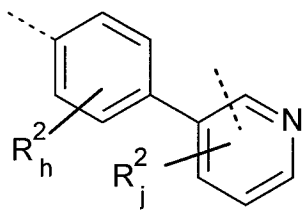
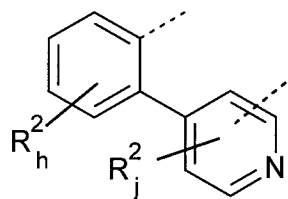
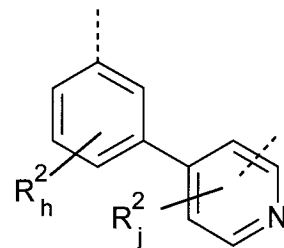
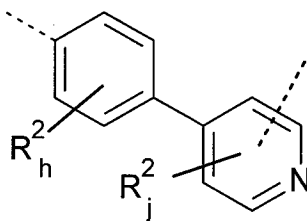
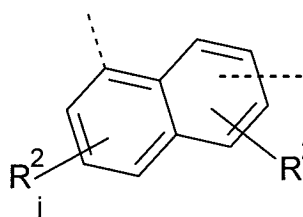
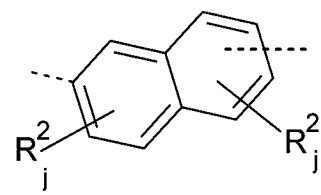
式 (L¹-55)

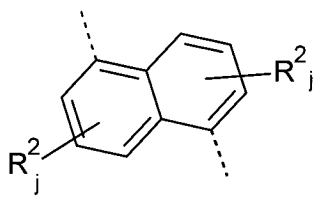


式 (L¹-56)

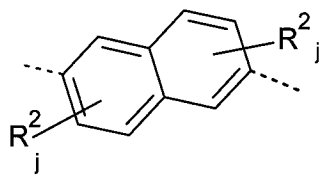


式 (L¹-57)

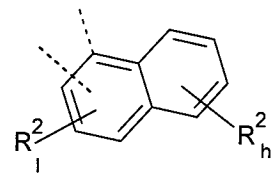
式(L¹-58)式(L¹-59)式(L¹-60)式(L¹-61)式(L¹-62)式(L¹-63)式(L¹-64)式(L¹-65)式(L¹-66)式(L¹-67)式(L¹-68)式(L¹-69)式(L¹-70)式(L¹-71)式(L¹-72)



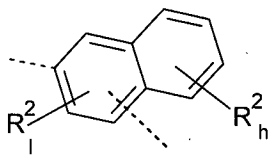
式 (L¹-73)



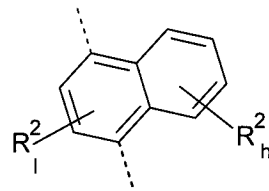
式 (L¹-74)



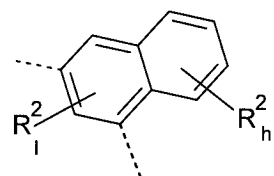
式 (L¹-75)



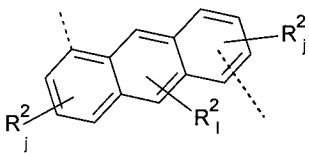
式 (L¹-76)



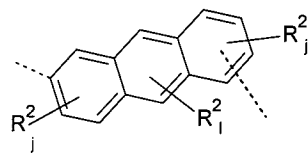
式 (L¹-77)



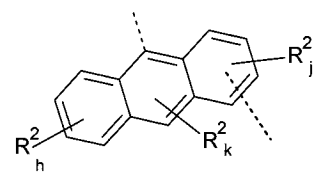
式 (L¹-78)



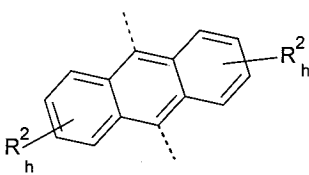
式 (L¹-79)



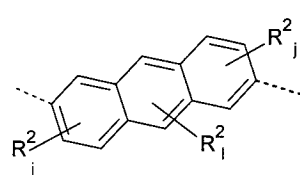
式 (L¹-80)



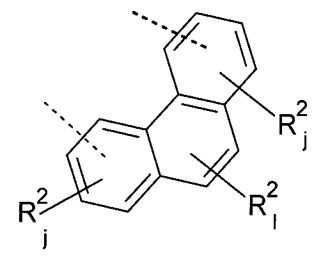
式 (L¹-81)



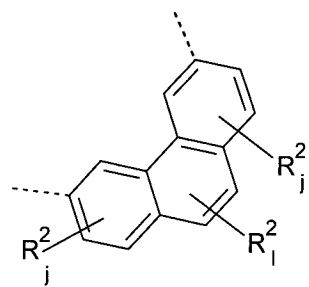
式 (L¹-82)



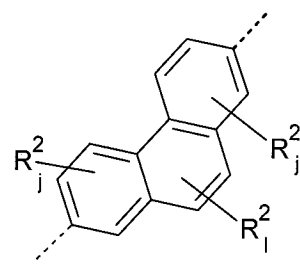
式 (L¹-83)



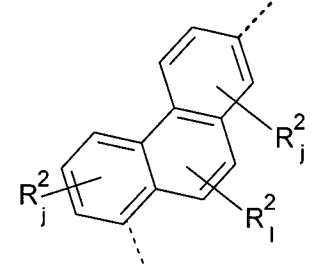
式 (L¹-84)



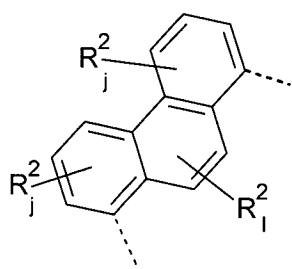
式 (L¹-85)



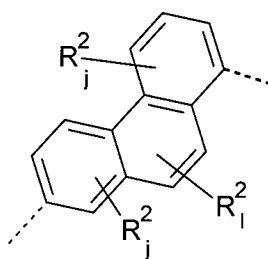
式 (L¹-86)



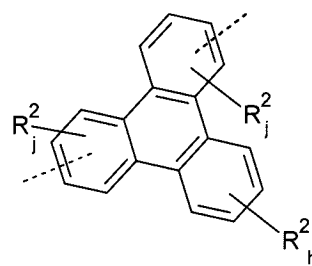
式 (L¹-87)



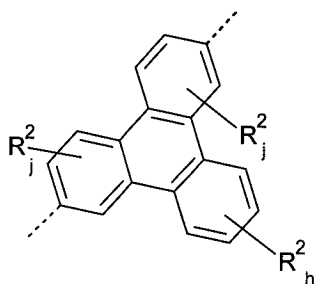
式 (L¹-88)



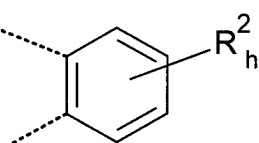
式 (L¹-89)



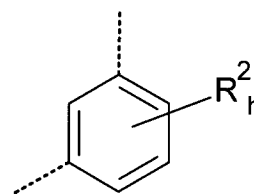
式 (L¹-90)



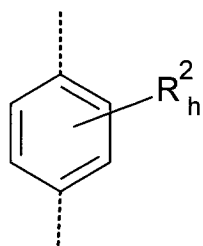
式 (L¹-91)



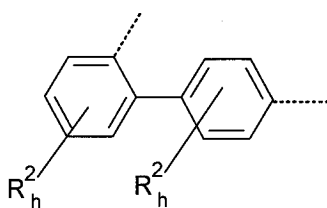
式 (L¹-92)



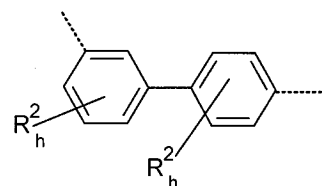
式 (L¹-93)



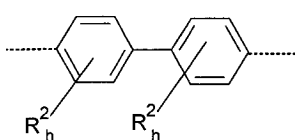
式 (L¹-94)



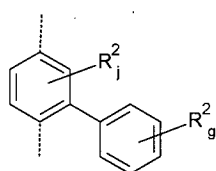
式 (L¹-95)



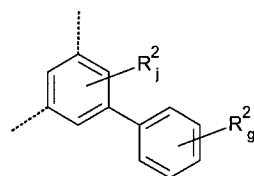
式 (L¹-96)



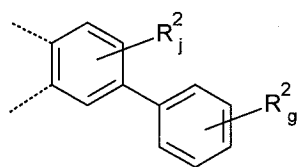
式 (L¹-97)



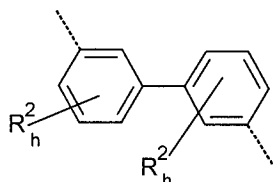
式 (L¹-98)



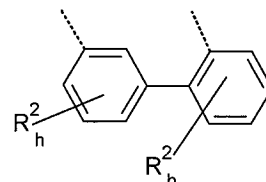
式 (L¹-99)



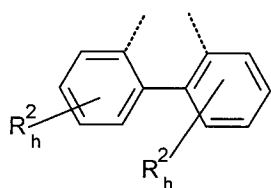
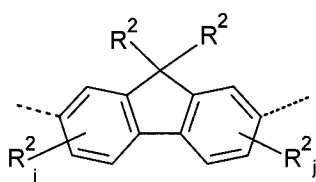
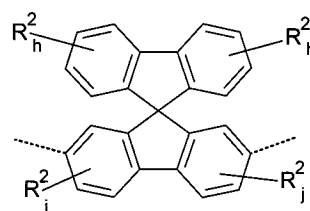
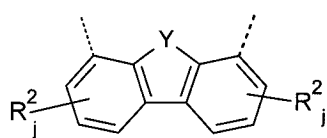
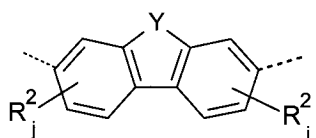
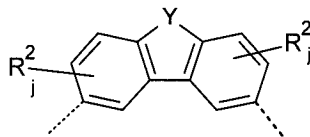
式 (L¹-100)



式 (L¹-101)



式 (L¹-102)

式 (L¹-103)式 (L¹-104)式 (L¹-105)式 (L¹-106)式 (L¹-107)式 (L¹-108)

其中，在各情況下，虛線鍵標示附接位置，下標 k 為0或1，下標 l 為0、1或2，下標 j 在各情況下獨立地為0、1、2或3；下標 h 在各情況下獨立地為0、1、2、3、或4，下標 g 為0、1、2、3、4或5；符號 Y 為 O 、 S 或 NR^2 ，較佳為 O 或 S ；及符號 R^2 具有前文(尤其是式(A))所給之定義。

[0078] 較佳的情況可為，式(L¹-1)至(L¹-108)之結構中的下標 k 、 l 、 g 、 h 及 j 之總和總數在各情況下至多為3，較佳係至多為2，更佳係至多為1。

[0079] 亦可為以下情況：式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIf)、(Ilg)、(IIlg)、(IIIf)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV)及/或(V)之結構中的L¹及/或L²基團中之一者具有不多於5個雜原子，較佳係不多於3個雜原子，更佳係不多於1個雜原子，其中此包括可鍵結至該等基團的 R^1 、 R^2 及 R^3 取代基。

[0080] 另外的情況亦可為，式(A)、(I)、(II)、

(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV)及/或(V)之結構中的 L^1 及/或 L^2 基團整體具有不多於5個雜原子，較佳係不多於3個雜原子，及更佳係不多於1個雜原子，其中此包括可鍵結至該等基團的 R^1 、 R^2 及 R^3 取代基。

[0081] 根據本發明之較佳化合物係包含選自以下中之一者的 L^1 基團：式(L^1-1)至(L^1-78)及/或(L^1-92)至(L^1-108)，較佳為式(L^1-1)至(L^1-54)及/或(L^1-92)至(L^1-108)，尤佳為式(L^1-1)至(L^1-29)及/或(L^1-92)至(L^1-103)。有利的，在式(L^1-1)至(L^1-78)及/或(L^1-92)至(L^1-108)，較佳為式(L^1-1)至(L^1-54)及/或(L^1-92)至(L^1-108)，尤佳為式(L^1-1)至(L^1-29)及/或(L^1-92)至(L^1-103)之結構中的下標 k 、 l 、 g 、 h 及 j 之總和總數在各情況下可為不多於3，較佳係不多於2，更佳係不多於1。

[0082] 較佳的，式(L^1-1)至(L^1-108)中之 R^2 基不與 R^2 基所鍵結的芳基或雜芳基的環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統，較佳係不形成任何稠合環系統。此包括與可能的 R^3 取代基(其可鍵結至 R^2 基)形成稠合環系統。

[0083] 在本發明另一較佳實施態樣中， R^2 ，例如於式(A)之結構及此結構或引用這些式之結構的較佳實施態樣中，係在各情況下為相同或不同且係選自由下列所組成之群組： H ， D ，具有1至10個碳原子、較佳具有1、2、3或4

個碳原子之脂族烴基，或具有5至30個芳族環原子、較佳具有5至24個芳族環原子、更佳具有5至13個芳族環原子且可經各具有1至4個碳原子之一或多個烷基取代、但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統。

[0084] 在本發明另一較佳實施態樣中， R^3 ，例如於式(A)之結構及此結構或引用這些式之結構的較佳實施態樣中，係在各情況下為相同或不同且係選自由下列所組成之群組：H，D，F，CN，具有1至10個碳原子、較佳具有1、2、3或4個碳原子之脂族烴基，或具有5至30個芳族環原子、較佳具有5至24個芳族環原子、更佳具有5至13個芳族環原子且可經各具有1至4個碳原子之一或多個烷基取代、但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統。

[0085] 當本發明化合物經芳族或雜芳族 R^1 或 R^2 基團取代時，較佳係當此等不具有任何具有多於兩個彼此直接稠合之芳族六員環的芳基或雜芳基。更佳的，取代基完全不具任何具有彼此直接稠合之六員環的芳基或雜芳基。此較佳之原因係此等結構的低三重態能量。具有超過兩個彼此直接稠合之芳族六員環但卻亦適用於本發明之稠合芳基為菲及聯伸三苯(triphenylene)，原因係此等亦具有高的三重態能階(triplet level)。

[0086] 特佳者係具有下列性質之本發明化合物：

Ar ^a 及 Ar ^b	L ¹	L ¹ 在具有 Y ¹ 之苯環上的位置	L ¹ 在具有 Y ² 之苯環上的位置	R ¹ 之下標 ⁿ
R ¹ -1 至 R ¹ -87	鍵或 L ¹ -1	(Ic), (IIc), (IIIc), (Id), (IIId), (IIId)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg), (Ih), (IIh), (IIIh)	0, 1, 2
R ¹ -1	L ¹ -94	(Ic), (IIc), (IIIc)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1
R ¹ -1	L ¹ -94	(Id), (IIId), (IIId)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1
R ¹ -1	鍵	(Ic), (IIc), (IIIc)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1
R ¹ -1	鍵	(Id), (IIId), (IIId)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1

[0087] 特佳者係具有式(W-1)之結構的化合物，其中 Y³為式C(R²)₂之基團，且該等化合物具有下列性質：

Ar ^a 及 Ar ^b	L ¹	L ¹ 在具有 Y ¹ 之苯環上的位置	L ¹ 在具有 Y ² 之苯環上的位置	R ¹ 之下標 ⁿ
R ¹ -1 至 R ¹ -87	鍵或 L ¹ -1	(Ic), (IIc), (IIIc), (Id), (IIId), (IIId)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg), (Ih), (IIh), (IIIh)	0, 1, 2
R ¹ -1	L ¹ -94	(Ic), (IIc), (IIIc)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1
R ¹ -1	L ¹ -94	(Id), (IIId), (IIId)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1
R ¹ -1	鍵	(Ic), (IIc), (IIIc)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1
R ¹ -1	鍵	(Id), (IIId), (IIId)	(Ilg), (IIlg), (IIIlg)	0, 1

[0088] 此外，特佳者係其中 Y²為式N(Ar)之基團的化合物，且該等化合物具有下列性質：

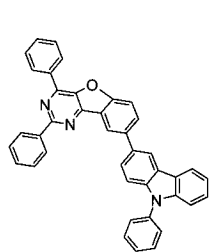
Ar ^a 及 Ar ^b	L ¹	L ¹ 在具有 Y ¹ 之苯環上的位置	L ¹ 在具有 Y ² 之苯環上的位置	R ¹ 之下標 _n
R ¹ -1 至 R ¹ -87	鍵或 L ¹ -1	(Ic), (IIc), (IIIc), (Id), (IId), (IIId),	(Ig), (IIg), (IIIg), (Ih), (IIh), (IIIh),	0, 1 或 2
R ¹ -1	L ¹ -94	(Ic), (IIc), (IIIc),	(Ig), (IIg), (IIIg)	0, 1
R ¹ -1	L ¹ -94	(Id), (IId), (IIId),	(Ig), (IIg), (IIIg)	0, 1
R ¹ -1	鍵	(Ic), (IIc), (IIIc),	(Ig), (IIg), (IIIg)	0, 1
R ¹ -1	鍵	(Id), (IId), (IIId),	(Ig), (IIg), (IIIg)	0, 1

[0089] 上述表中之式 R¹-1 中的下標 g 較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0 或 1，尤佳為 0；上述表中之式 L¹-1 或 L¹-94 中的下標 h 較佳為 0、1、2 或 3，更佳為 0 或 1，尤佳為 0。

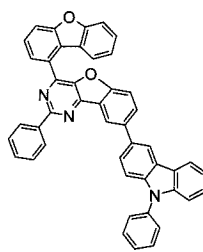
[0090] 在上述表中，所指 Ar^a 及 Ar^b 為 R¹-1 至 R¹-87 係意指 Ar^a 基團及 Ar^b 基團皆係選自前文詳細說明之式 R¹-1 至 R¹-87 的基，較佳為 R¹-1。所指 L¹ 為鍵或 L¹-1 係意指前文詳細說明之式 (A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIIf)、(IIIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV) 及 / 或 (V) 中的 L¹ 基團在各情況下為鍵或前文詳細說明之式 L¹-1 之基，較佳為 L¹-94。所指 L¹ 在具有 Y¹ 之苯環上的位置較佳對應於式 (Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId) 係意指 L¹ 基團較佳係在 Y¹ 基團的對位或間位，如式 (Ic)、(IIc)、(IIIc)、

(Id)、(IId)、(IIId)中所示。所指 L^1 在具有 Y^2 之苯環上的位置較佳對應於式(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)係意指 L^1 基團較佳係在 Y^2 基團的對位或間位，如式(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)中所示。所指 R^1 之下標 n 為0、1、2係意指在前文詳細說明之式(A)、(I)、(II)、(III)、(Ia)、(IIa)、(IIIa)、(Ib)、(IIb)、(IIIb)、(Ic)、(IIc)、(IIIc)、(Id)、(IId)、(IIId)、(Ie)、(IIe)、(IIIe)、(If)、(IIf)、(IIIf)、(Ig)、(IIg)、(IIIg)、(Ih)、(IIh)、(IIIh)、(IV)及/或(V)中，下標 n 在各情況下為0、1或2，較佳為0或1，尤佳為0。

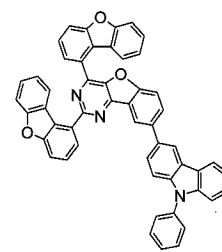
[0091] 本發明之適合的化合物實例為如下所示之下列式1至217的結構：



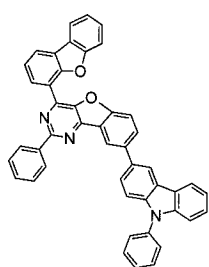
式 1



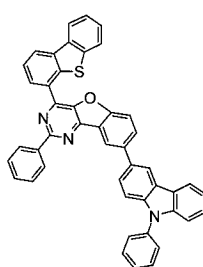
式 2



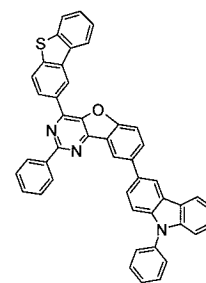
式 3



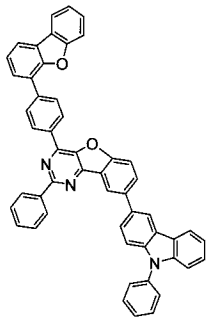
式 4



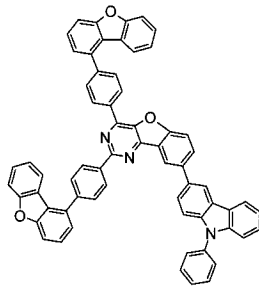
式 5



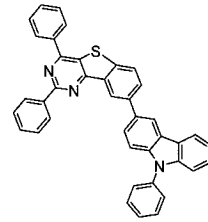
式 6



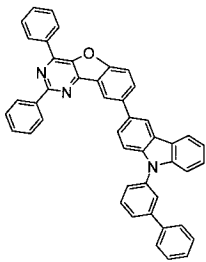
式 7



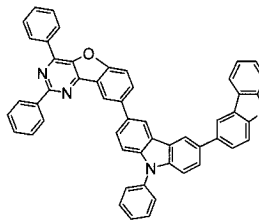
式 8



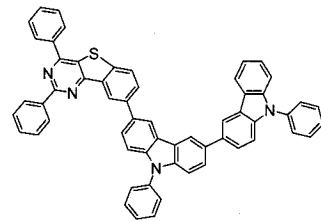
式 9



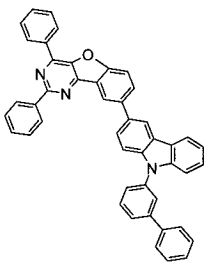
式 10



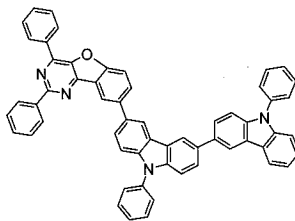
式 11



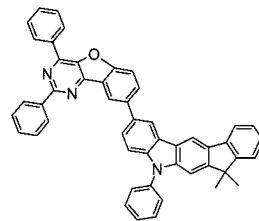
式 12



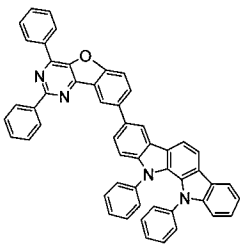
式 13



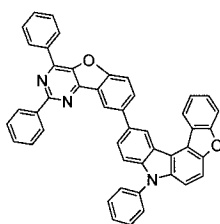
式 14



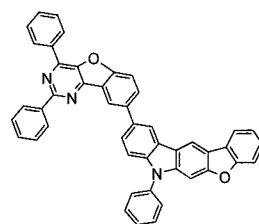
式 15



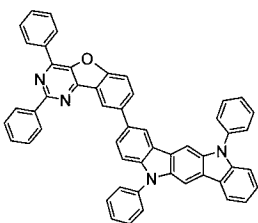
式 16



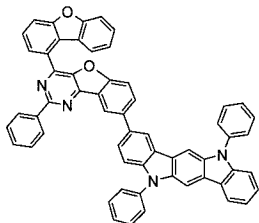
式 17



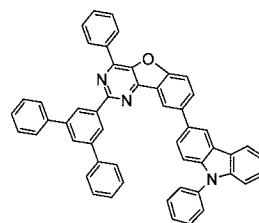
式 18



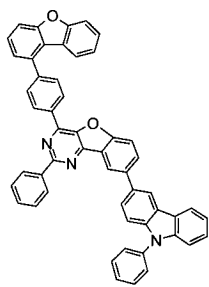
式 19



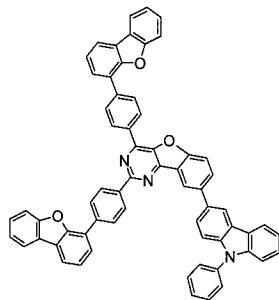
式 20



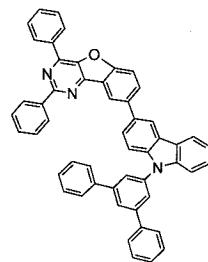
式 21



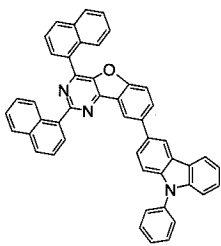
式 22



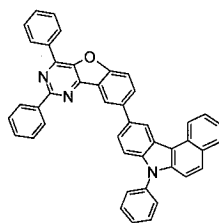
式 23



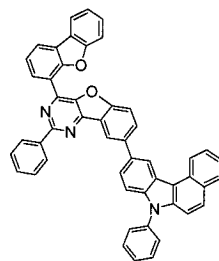
式 24



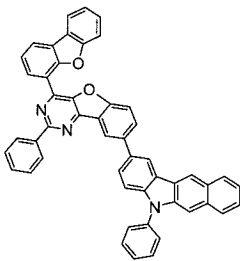
式 25



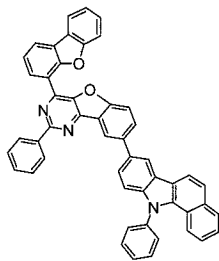
式 26



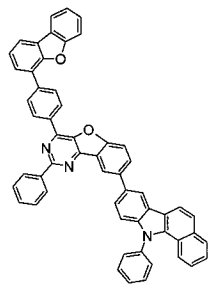
式 27



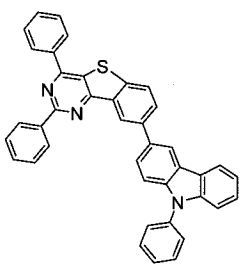
式 28



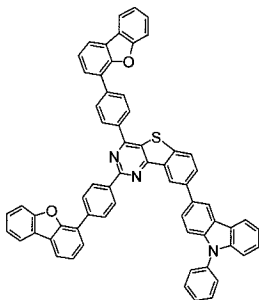
式 29



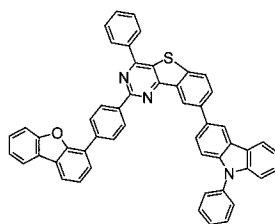
式 30



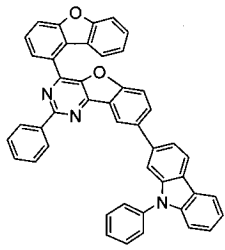
式 31



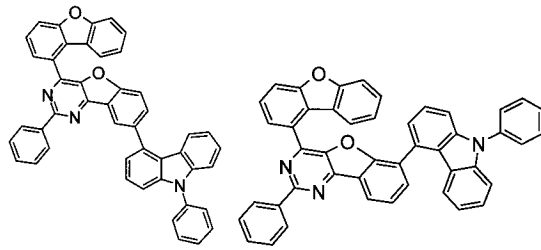
式 32



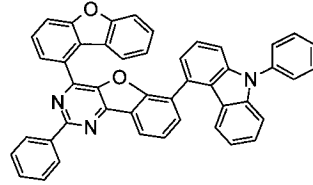
式 33



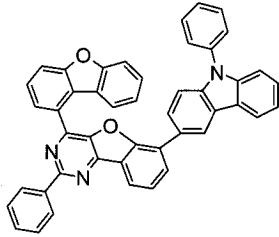
式 34



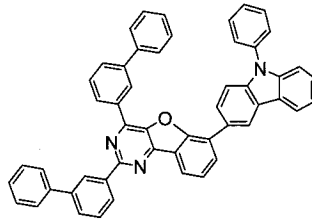
式 35



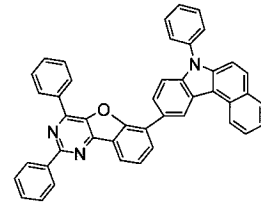
式 36



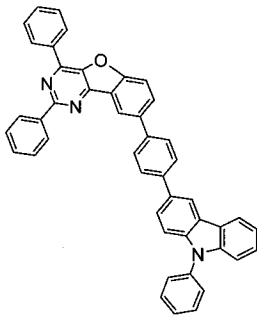
式 37



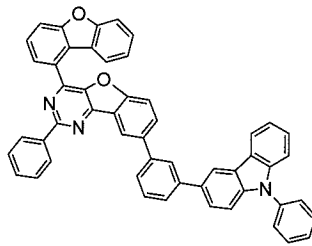
式 38



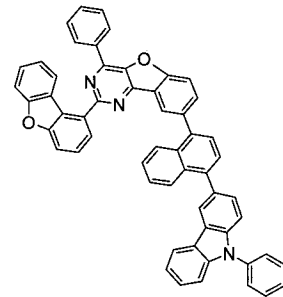
式 39



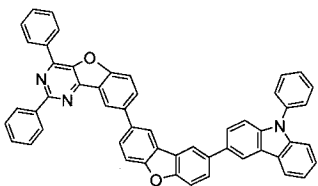
式 40



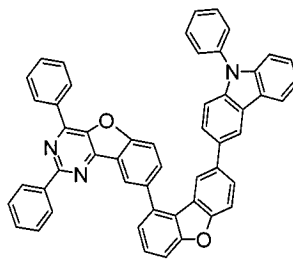
式 41



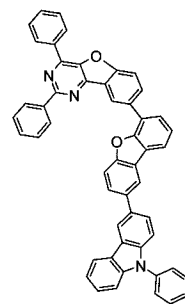
式 42



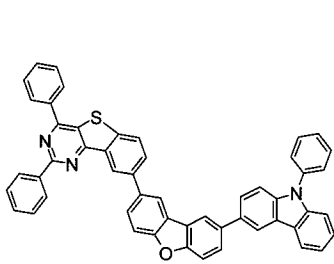
式 43



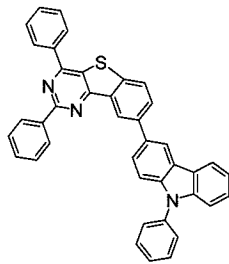
式 44



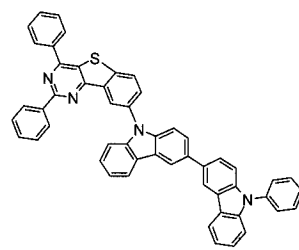
式 45



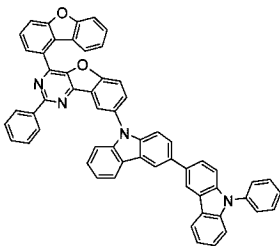
式 46



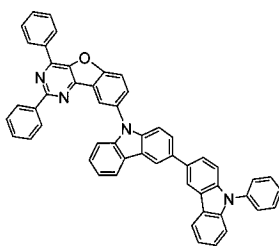
式 47



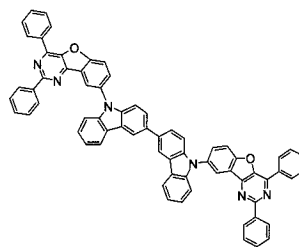
式 48



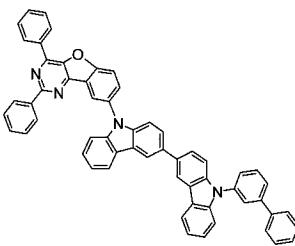
式 49



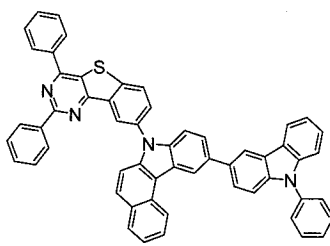
式 50



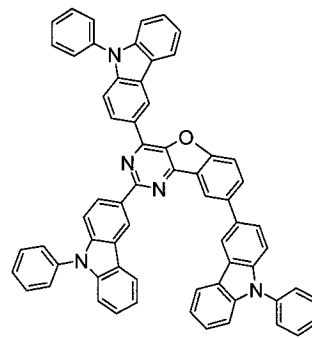
式 51



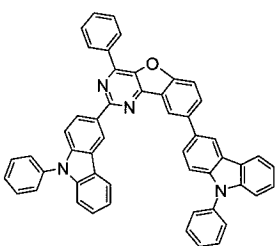
式 52



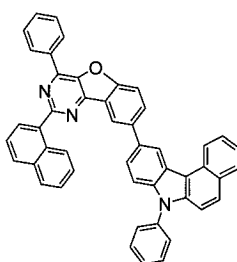
式 53



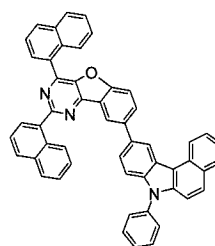
式 54



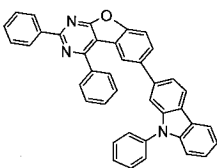
式 55



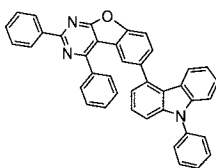
式 56



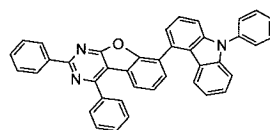
式 57



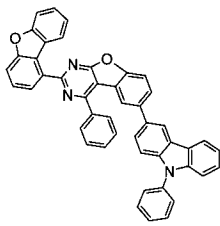
式 58



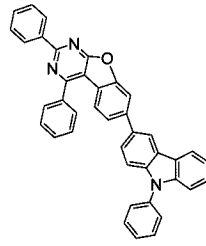
式 59



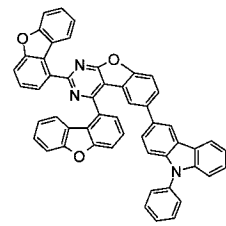
式 60



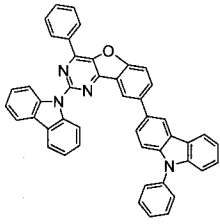
式 61



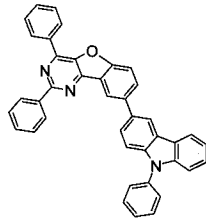
式 62



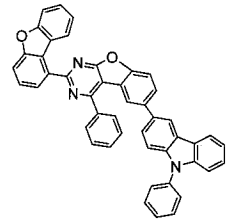
式 63



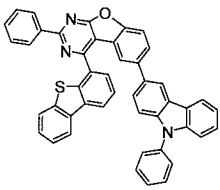
式 64



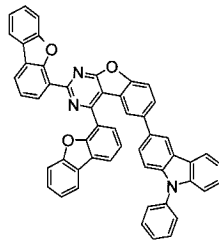
式 65



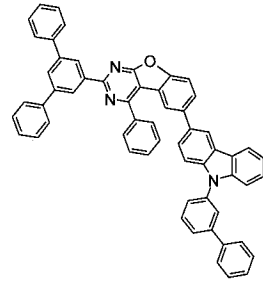
式 66



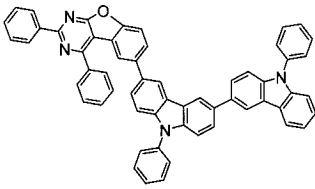
式 67



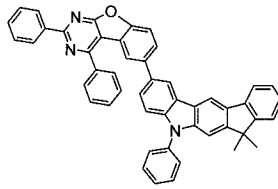
式 68



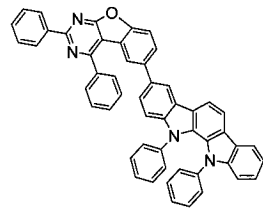
式 69



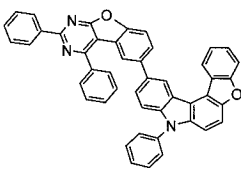
式 70



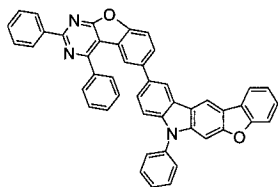
式 71



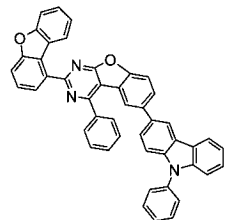
式 72



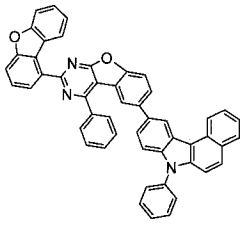
式 73



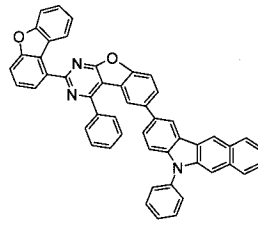
式 74



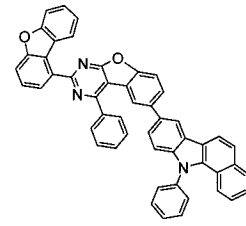
式 75



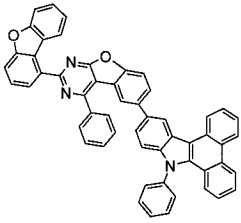
式 76



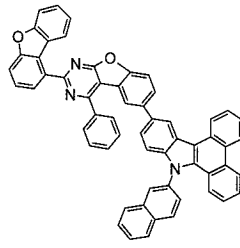
式 77



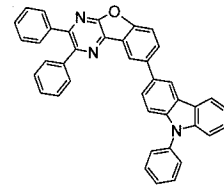
式 78



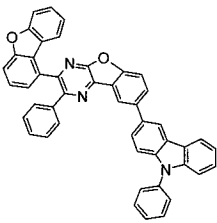
式 79



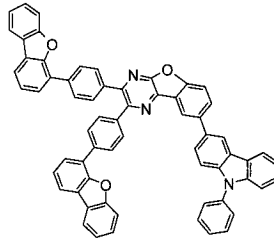
式 80



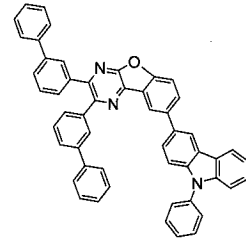
式 81



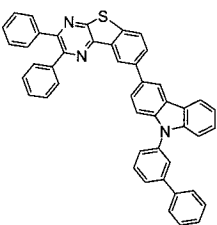
式 82



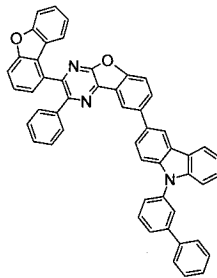
式 83



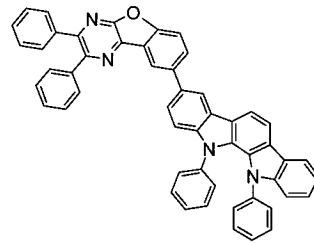
式 84



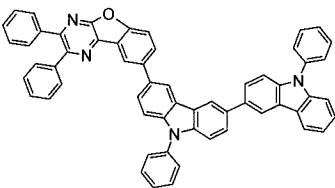
式 85



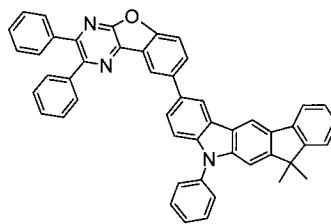
式 86



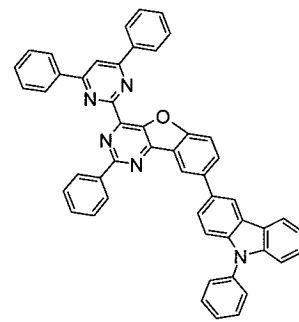
式 87



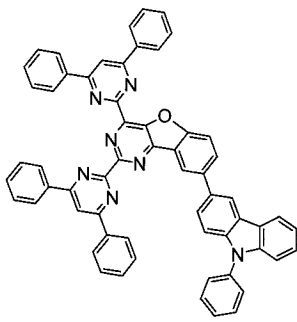
式 88



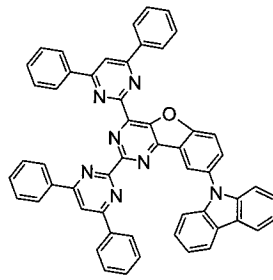
式 89



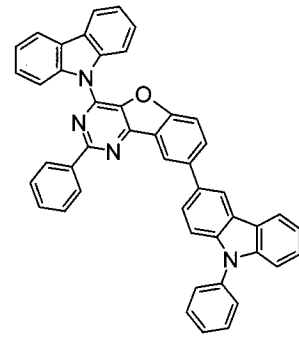
式 90



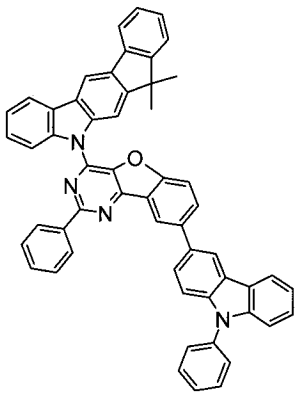
式 91



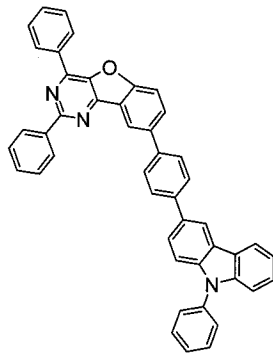
式 92



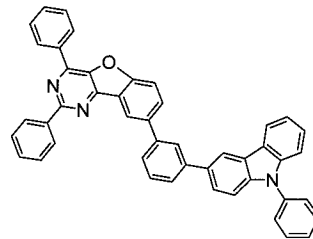
式 93



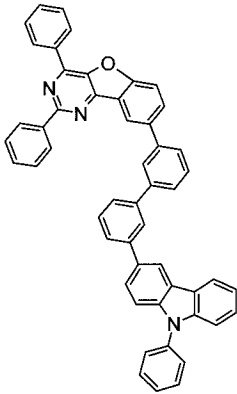
式 94



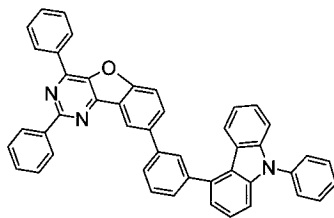
式 95



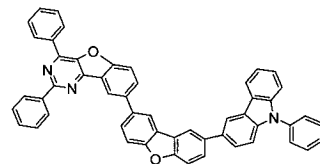
式 96



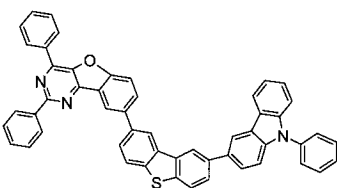
式 97



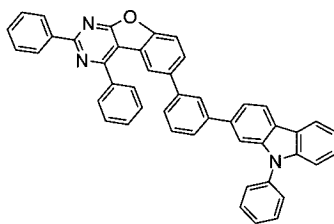
式 98



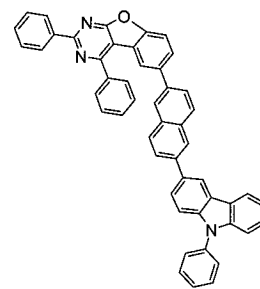
式 99



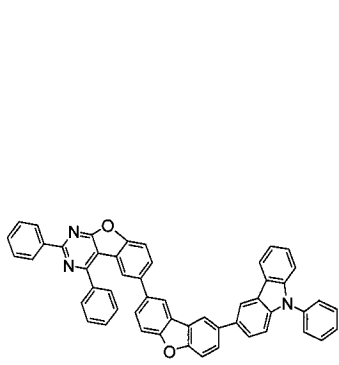
式 100



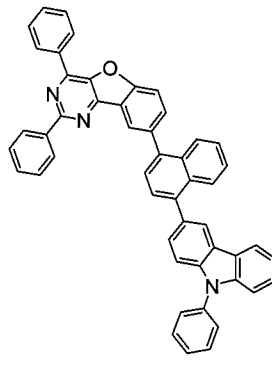
式 101



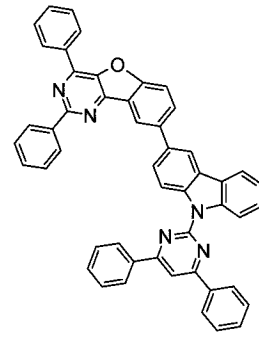
式 102



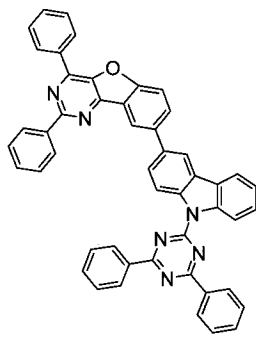
式 103



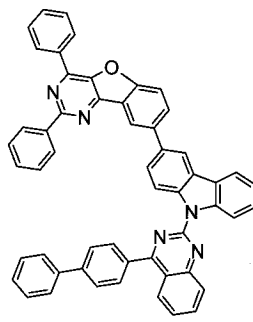
式 104



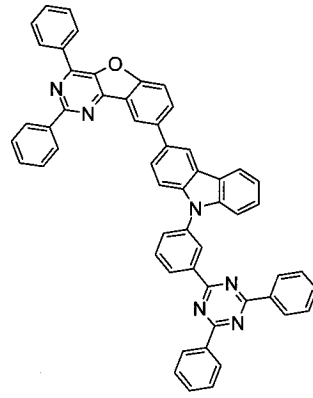
式 105



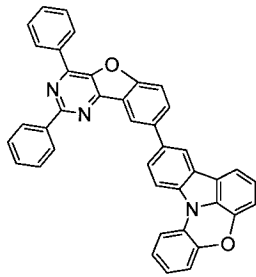
式 106



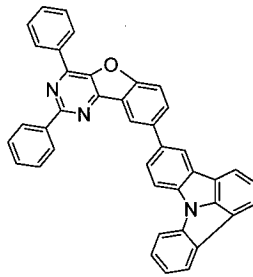
式 107



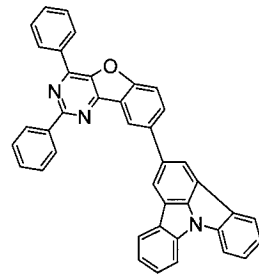
式 108



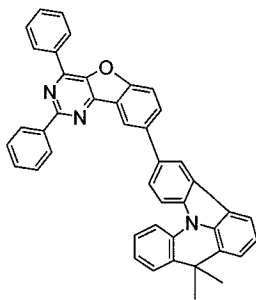
式 109



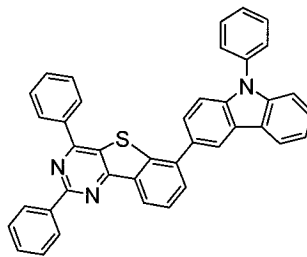
式 110



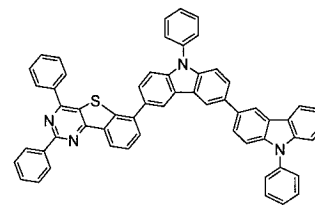
式 111



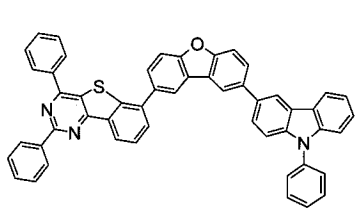
式 112



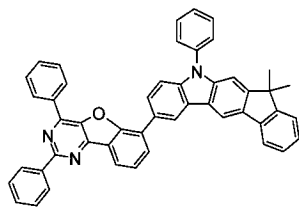
式 113



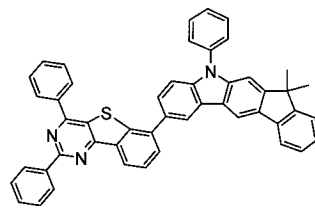
式 114



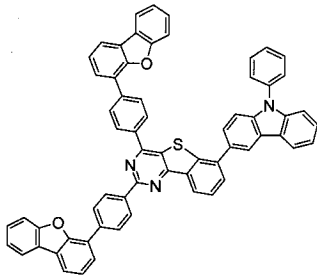
式 115



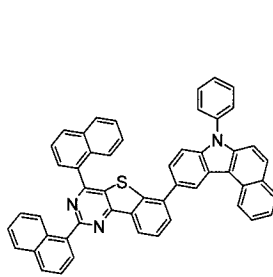
式 116



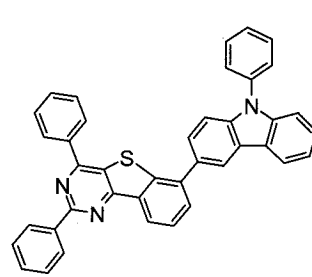
式 117



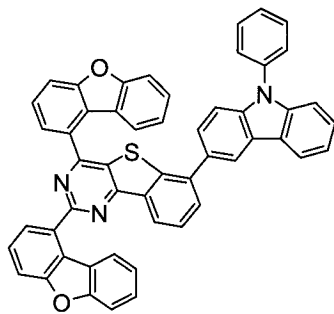
式 118



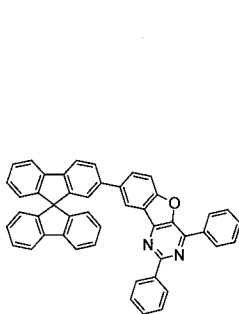
式 119



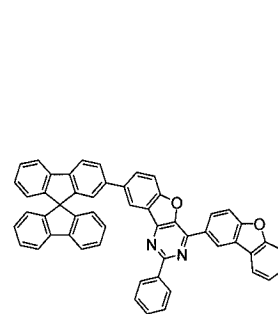
式 120



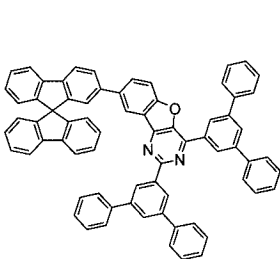
式 121



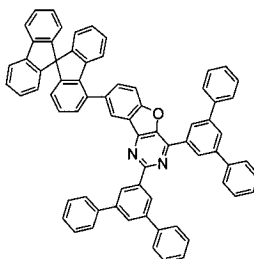
式 122



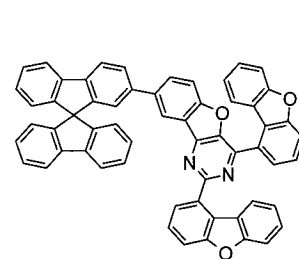
式 123



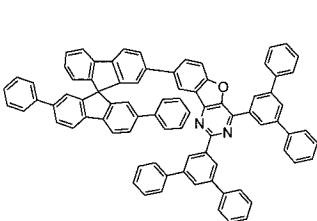
式 124



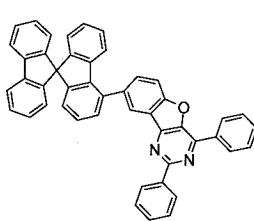
式 125



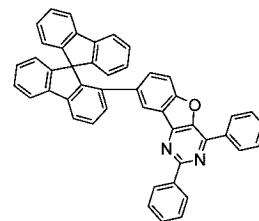
式 126



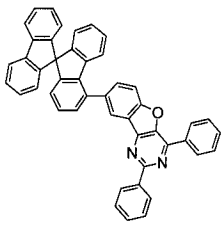
式 127



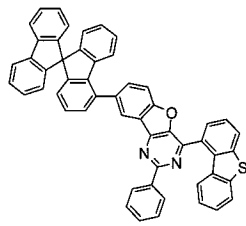
式 128



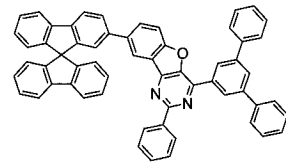
式 129



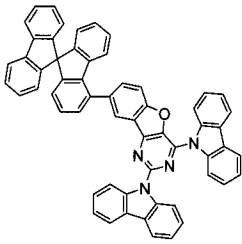
式 130



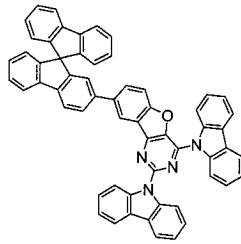
式 131



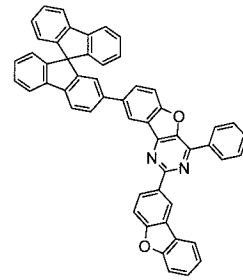
式 132



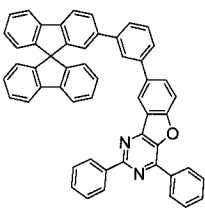
式 133



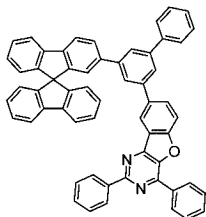
式 134



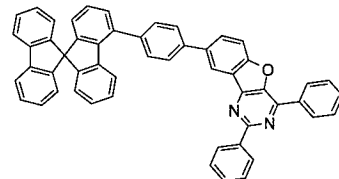
式 135



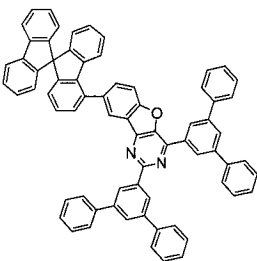
式 136



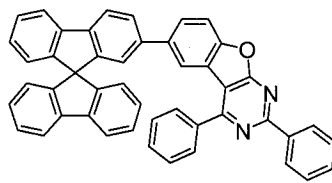
式 137



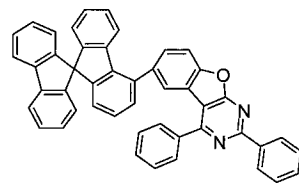
式 138



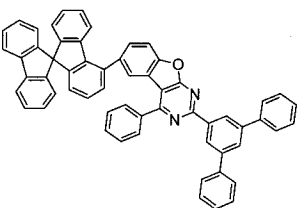
式 139



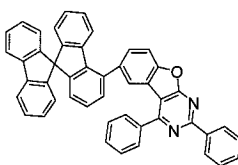
式 140



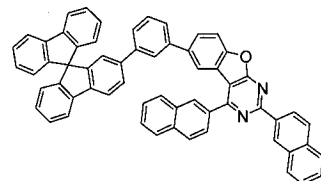
式 141



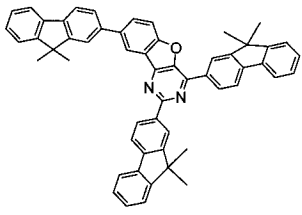
式 142



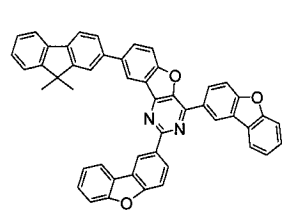
式 143



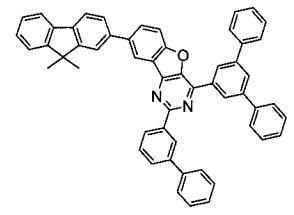
式 144



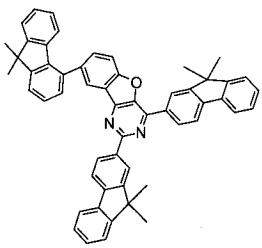
式 145



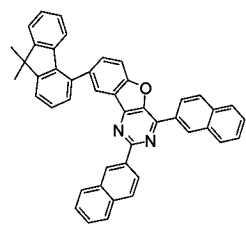
式 146



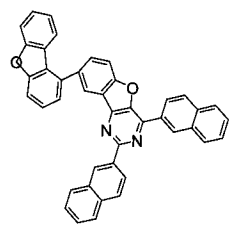
式 147



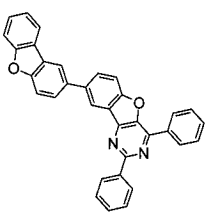
式 148



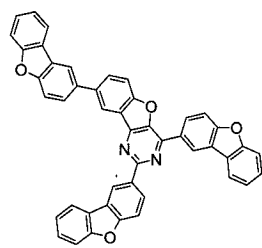
式 149



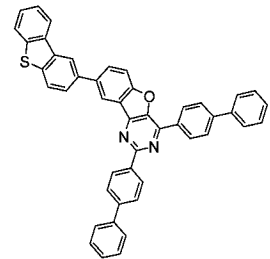
式 150



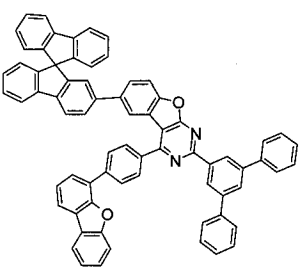
式 151



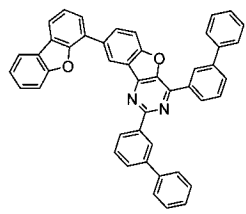
式 152



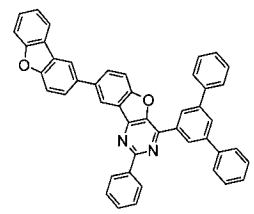
式 153



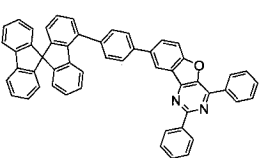
式 154



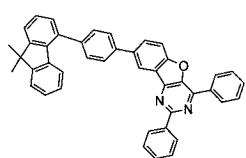
式 155



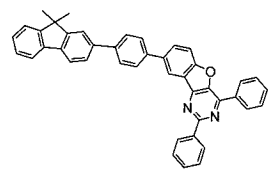
式 156



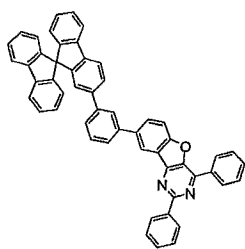
式 157



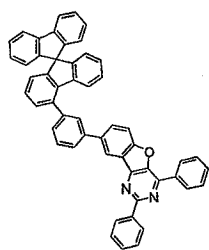
式 158



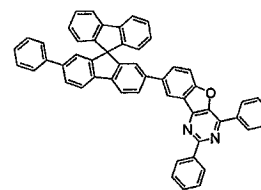
式 159



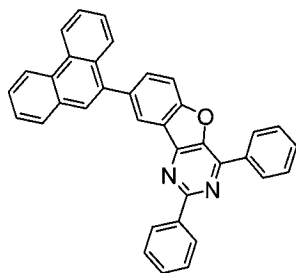
式 160



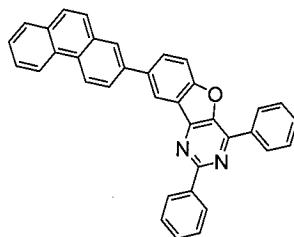
式 161



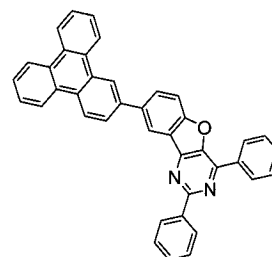
式 162



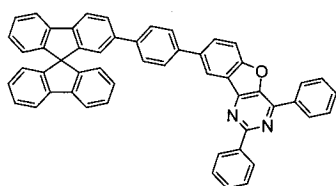
式 163



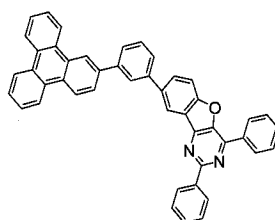
式 164



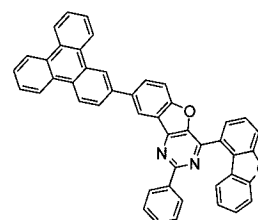
式 165



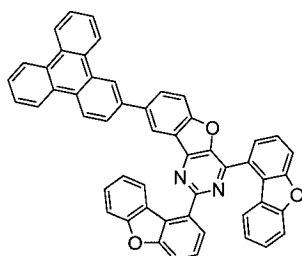
式 166



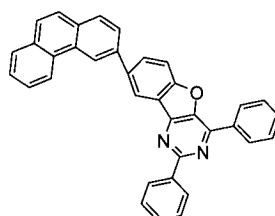
式 167



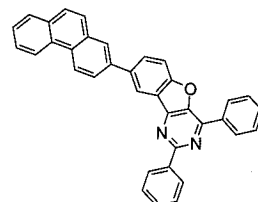
式 168



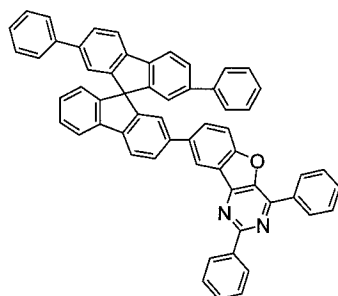
式 169



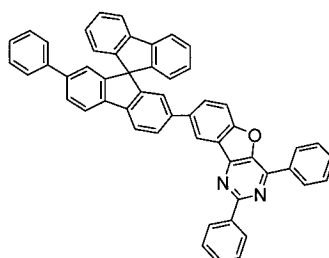
式 170



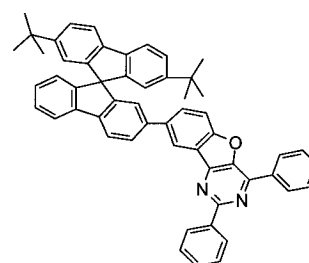
式 171



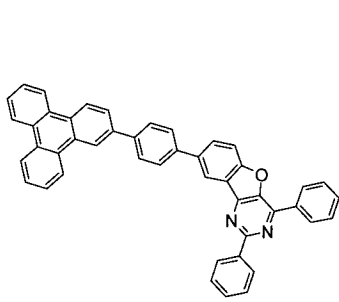
式 172



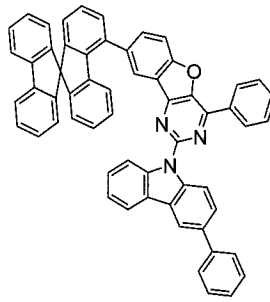
式 173



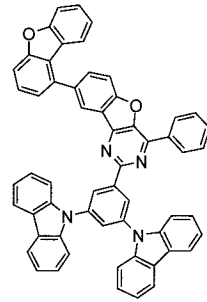
式 174



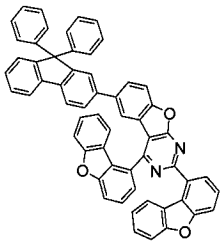
式 175



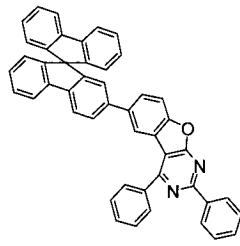
式 176



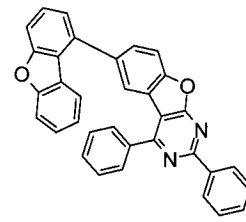
式 177



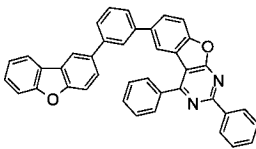
式 178



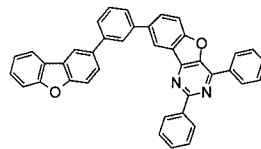
式 179



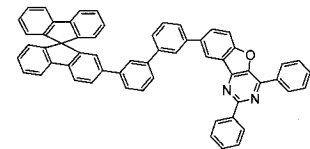
式 180



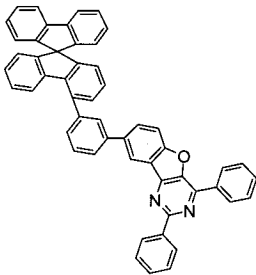
式 181



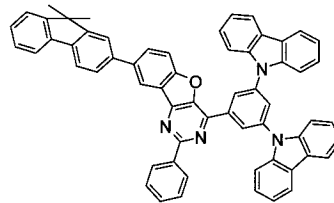
式 182



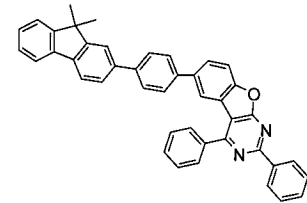
式 183



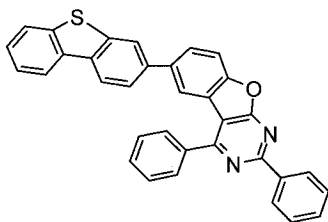
式 184



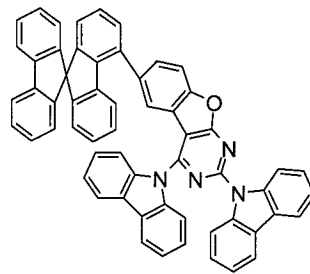
式 185



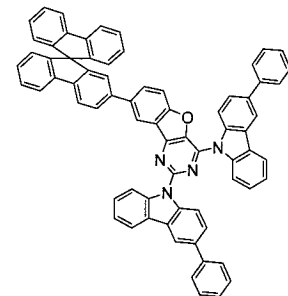
式 186



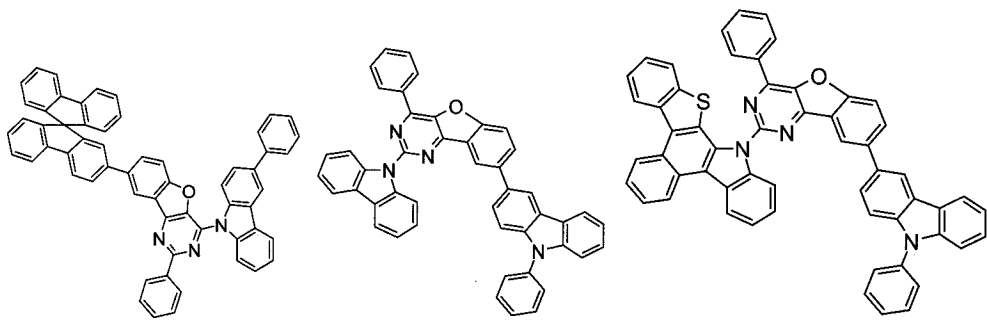
式 187



式 188



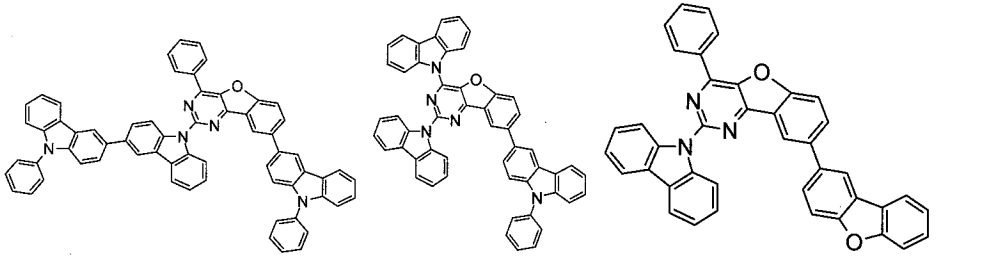
式 189



式 190

式 191

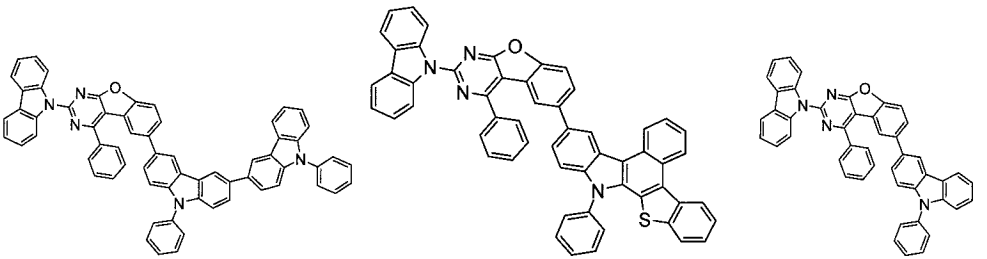
式 192



式 193

式 194

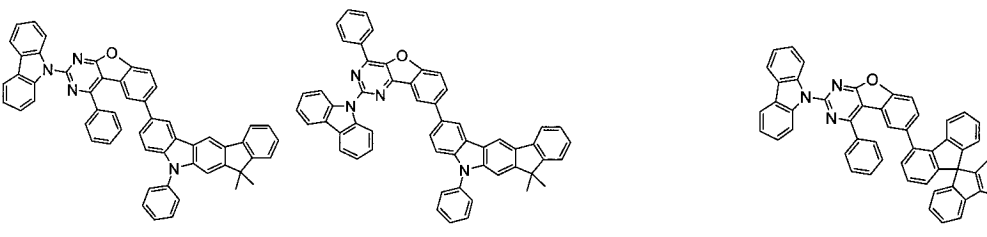
式 195



式 196

式 197

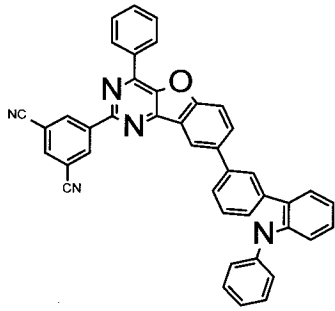
式 198



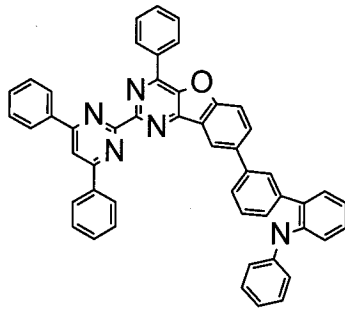
式 199

式 200

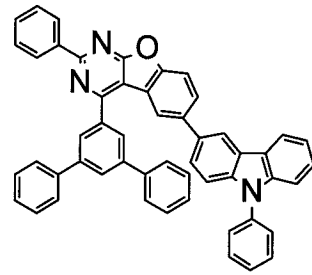
式 201



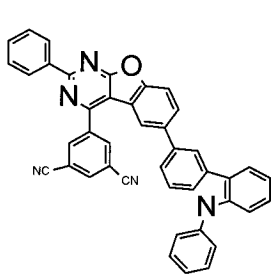
式 202



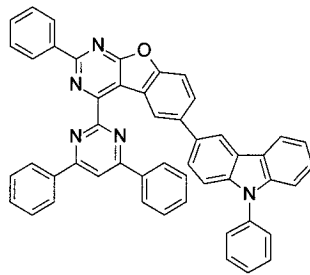
式 203



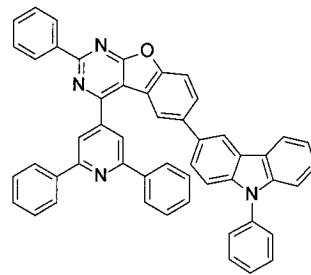
式 204



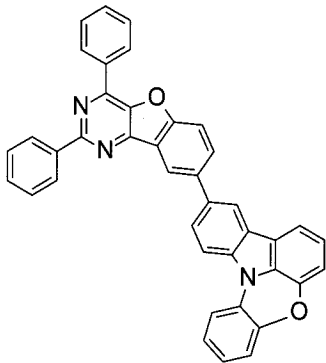
式 205



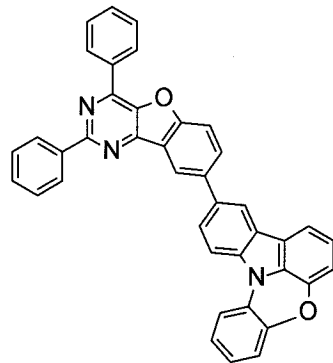
式 206



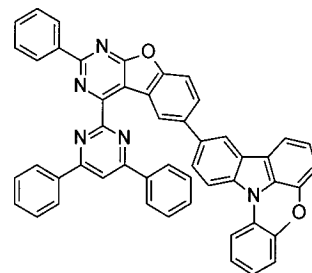
式 207



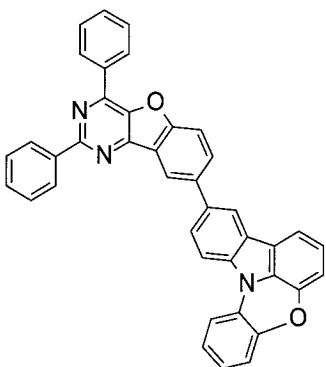
式 208



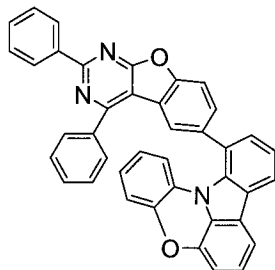
式 209



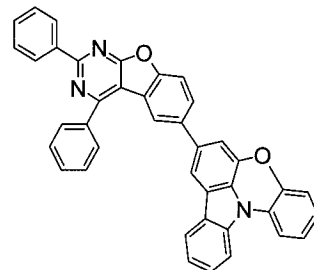
式 210



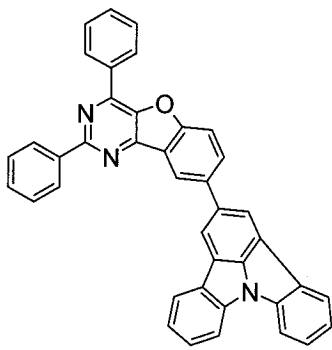
式 211



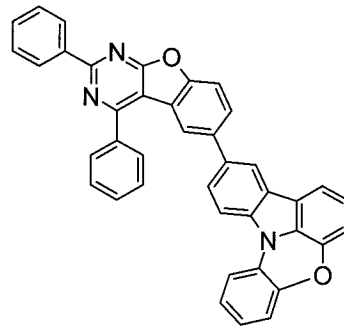
式 212



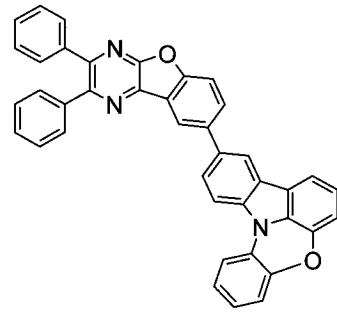
式 213



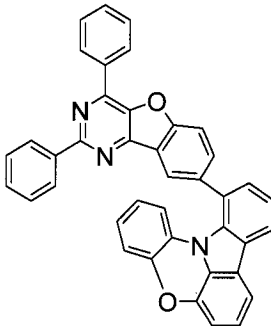
式 214



式 215



式 216



式 217

[0092] 本發明化合物之較佳實施態樣係具體述於實施例中，該等化合物可單獨使用或基於本發明所有目的與另外的化合物併用。

[0093] 先決條件係符合申請專利範圍第1項中所指明的條件，上述較佳實施態樣可視需要彼此組合。在本發明一特佳實施態樣中，上述較佳實施態樣同時適用。

[0094] 本發明之化合物原則上可藉由各種不同方法製備。然而，已發現下文所述之方法尤其適合。

[0095] 因此，本發明進一步提供製備包含式(A)之結構的化合物之方法，其中，在偶合反應(coupling reaction)中，包含至少一個二氫雜二苯并呋喃或二氫雜二苯并噻吩基團之化合物係接合至包含至少一個咪唑、萸、菲、苯并

呋喃及/或苯并噻吩基之基團。

[0096] 具有二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩基團之適合的化合物在許多情況下為市售者，以及在實施例中詳細說明之起始化合物可藉由已知方法獲得，因此以其為參考。

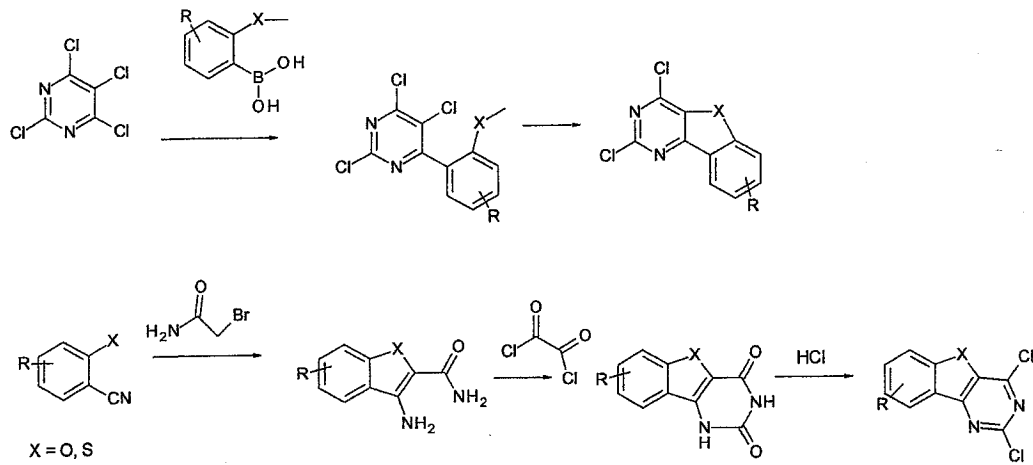
[0097] 此等化合物可藉由已知偶合反應與另外的芳基化合物反應，就此目的之所需條件為熟習本領域之人士已知，以及實施例中之詳述使熟習本領域之人士得以進行該等反應。

[0098] 均導致C-C鍵形成及/或C-N鍵形成之特別適合及較佳的偶合反應為根據BUCHWALD、SUZUKI、YAMAMOTO、STILLE、HECK、NEGISHI、SONOGASHIRA及HIYAMA者。此等反應廣為知悉，以及實施例會提供熟習本領域之人士更多指示。

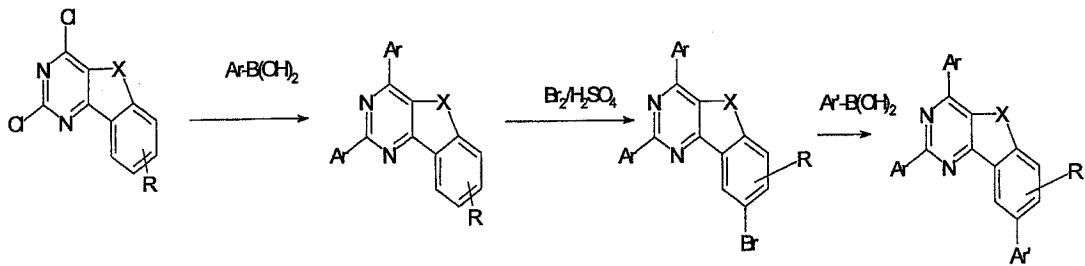
[0099] 在所有如下之合成反應式中，化合物係以具有少量取代基來顯示以簡化結構。但此並非排除該等方法中存在任何所希望之另外的取代基。

[00100] 例示性實施方式係由如下反應式提供，並未意欲以此等加諸限制。個別反應式之組成步驟可視需要彼此組合。

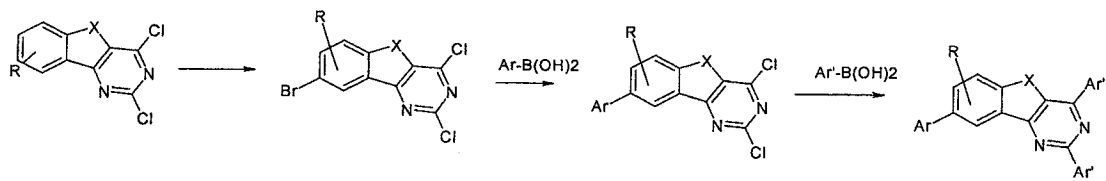
合成反應式 1



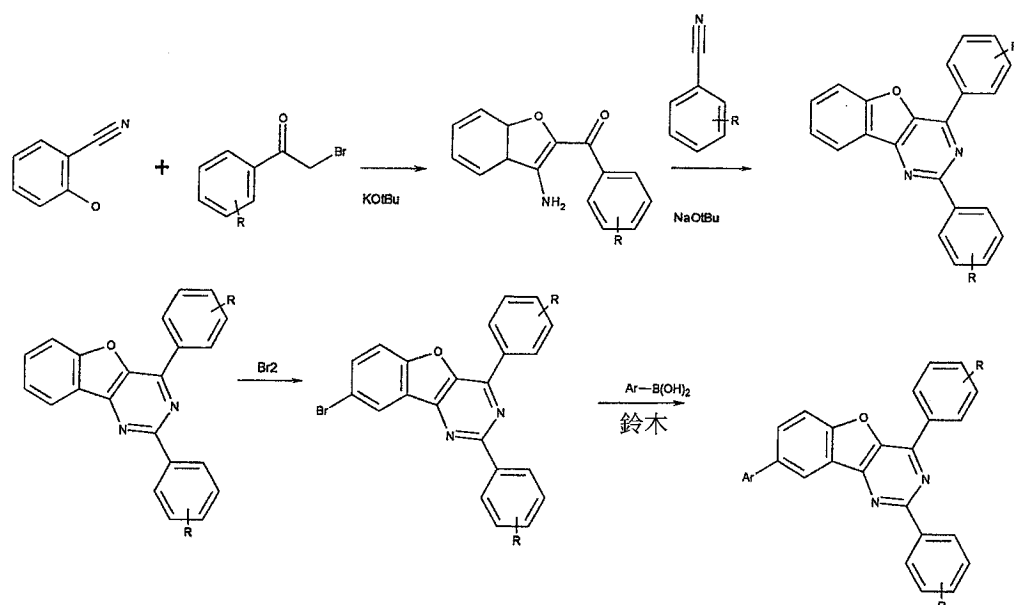
合成反應式 2



合成反應式 3



合成反應式 4



[0101] 應瞭解所示用於合成本發明化合物之方法為舉例。熟習本領域之人士在其關於本領域一般常識的範圍內能發展替代的合成途徑。

[0102] 前文詳細說明之製備方法的原理原則上可從相似化合物之文獻獲知以及可容易由熟習本領域之人士採用以製備本發明化合物。其他資訊可見於實施例。

[0103] 若隨後需進行純化(例如再結晶或昇華)，則藉由該等方法可能以高純度獲得包含式(A)之結構的本發明化合物，較佳超過99%(利用 ^1H NMR及/或HPLC測定)。

[0104] 本發明之化合物亦可具有適合的取代基，例如相對長鏈烷基(約4至20個碳原子)，尤其是支鏈烷基；或隨意地(optionally)經取代之芳基，例如二甲苯基(xylyl)、萊基(mesityl)或支鏈聯三苯基或聯四苯基，其造成在室溫下於標準有機溶劑(例如甲苯或二甲苯)中之足夠

濃度的溶解度，以能由溶液處理該等化合物。此等可溶性化合物特佳適用於由溶液處理，例如藉由印刷方法 (printing method)。此外，應強調包含至少一式(A)之結構的本發明化合物已加強在該等溶劑中之溶解度。

[0105] 本發明化合物亦可與聚合物混合。同樣可能將該等化合物共價併入聚合物。尤其可能的是採用經反應性脫離基 (reactive leaving group) (諸如溴、碘、氯、硼酸或硼酸酯) 取代、或經反應性可聚合基團 (reactive polymerizable group) (諸如烯烴 (olefin) 或氧環丁烷 (oxetane)) 取代之化合物。彼等可用作用以製造對應寡聚物 (oligomer)、樹枝狀聚合物 (dendrimer) 或聚合物之單體。寡聚 (oligomerization) 或聚合較佳係經由鹵素官能基或硼酸官能基、或經由可聚合基團進行。另外可能的是經由此類基團而交聯聚合物。本發明之化合物及聚合物可以交聯或未交聯層之形式使用。

[0106] 因此，本發明進一步提供含有一或更多前文詳細說明之式(A)結構或本發明化合物的寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中，存在從本發明化合物或式(A)結構至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物的一或多個鍵。根據式(A)結構或化合物之鍵聯，彼等因此形成寡聚物或聚合物之側鏈，或係鍵結在主鏈內。聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物可為共軛 (conjugated)、部分共軛 (partly conjugated) 或非共軛 (nonconjugated)。寡聚物或聚合物可為直鏈、支鏈或樹枝狀 (dendritic)。至於寡聚物、樹枝狀

聚合物及聚合物中之本發明化合物的重複單元，適用如上述之相同較佳情況。

[0107] 就寡聚物或聚合物之製備而言，本發明之單體係同元聚合 (homopolymerized) 或與另外的單體共聚 (copolymerized)。較佳者係其中式 (A) 或上文及下文所述之較佳實施態樣的單元之存在達 0.01 至 99.9 mol%、較佳 5 至 90 mol%、更佳 20 至 80 mol% 之範圍的共聚物。形成聚合物基本架構之適合且較佳的共聚單體 (comonomer) 係選自萸 (例如根據 EP 842208 或 WO 2000/022026)、螺雙萸 (例如根據 EP 707020、EP 894107 或 WO 2006/061181)、對苯 (paraphenylene) (例如根據 WO 92/18552)、呋啞 (例如根據 WO 2004/070772 或 WO 2004/113468)、噻吩 (例如根據 EP 1028136)、二氫萸 (例如根據 WO 2005/014689)、順-及反-茛并萸 (例如根據 WO 2004/041901 或 WO 2004/113412)、酮 (例如根據 WO 2005/040302)、萸 (例如根據 WO 2005/104264 或 WO 2007/017066) 或者複數種此等單元。共聚物、寡聚物與樹枝狀聚合物可再含有另外的單元，例如電洞傳輸單元 (尤其是以三芳胺為底質者) 及/或電子傳輸單元。

[0108] 另外特別關注的是特徵為高玻璃轉化溫度 (glass transition temperature) 之本發明化合物。在這方面，較佳者尤其是具有以下玻璃轉化溫度之包含通式 (A) 的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的本發明化合物：至少 70°C，更佳係至少 110°C，又更佳係至少 125°C，

及尤佳係至少150°C (根據DIN 51005(2005-08版)測定)。

[0109] 就由液相處理本發明化合物而言，例如藉由旋塗或藉由印刷法，需要本發明化合物之調配物。此等調配物可為例如溶液、分散液或乳液。基於此目的，較佳可使用二或更多種溶劑之混合物。適合且較佳之溶劑為例如甲苯，苯甲醚，鄰-、間-或對-二甲苯，苯甲酸甲酯，萊(mesitylene)，四氫萘，藜蘆醚(veratrole)，THF，甲基-THF，THP，氯苯，二噁烷，苯氧基甲苯(尤其是3-苯氧基甲苯)，(-)-葑酮，1,2,3,5-四甲苯，1,2,4,5-四甲苯，1-甲萘，2-甲苯并噻唑，2-苯氧乙醇，2-吡咯啉酮，3-甲基苯甲醚，4-甲基苯甲醚，3,4-二甲基苯甲醚，3,5-二甲基苯甲醚，苯乙酮， α -萜品醇，苯并噻唑，苯甲酸丁酯，異丙苯，環己醇，環己酮，環己苯，十氫萘，十二基苯，苯甲酸乙酯，二氫茛(indane)，苯甲酸甲酯，NMP，對-異丙基甲苯(p-cymene)，苯乙醚(phenetole)，1,4-二異丙苯，二苄醚，二乙二醇丁基甲基醚，三乙二醇丁基甲基醚，二乙二醇二丁基醚，三乙二醇二甲基醚，二乙二醇一丁基醚，三丙二醇二甲基醚，四乙二醇二甲基醚，2-異丙基萘，戊苯，己苯，庚苯，辛苯，1,1-雙(3,4-二甲苯基)乙烷，六甲基二氫茛(hexamethylindane)或該等溶劑之混合物。

[0110] 本發明因此進一步提供包含本發明化合物及至少一種另外的化合物之調配物。該另外的化合物可為例如溶劑，尤其是上述溶劑其中一者或該等溶劑之混合物。該另外的化合物或者可為至少一種同樣用於電子裝置之另

外的有機或無機化合物，例如發光化合物，尤其是磷光摻雜劑 (phosphorescent dopant)，及/或另外的基質材料。該另外的化合物亦可為聚合的。

[0111] 本發明因此又進一步提供包含本發明化合物及至少一種另外的有機功能性材料之組成物。功能性材料 (functional material) 通常為引入陽極與陰極之間的有機或無機材料。較佳的，有機功能性材料 (organically functional material) 係選自由下列所組成之群組：螢光發射體 (fluorescent emitter)、磷光發射體 (phosphorescent emitter)、主體材料、基質材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞傳輸材料、電洞注入材料、電子阻擋材料、電洞阻擋材料、寬能帶隙材料 (wide band gap material) 及 n-摻雜劑。

[0112] 本發明因此亦關於包含至少一種包括式(A)的結構之化合物或上文及下文所述之較佳實施態樣以及至少一種另外的基質材料的組成物。根據本發明之一特別態樣，該另外的基質材料具有電洞傳輸性質。

[0113] 本發明進一步提供包含至少一種包括至少一式(A)結構之化合物或上文及下文所述之較佳實施態樣以及至少一種寬能帶隙材料的組成物，寬能帶隙材料係理解為意指在 US 7,294,849 之揭示意義中的材料。該等系統展現在電致發光裝置中特別有利的性能數據。

[0114] 較佳的，額外化合物可具有 2.5 eV 或更高、較佳 3.0 eV 或更高、極佳為 3.5 eV 或更高之能帶隙。計算能

帶隙的方式之一係透過最高佔用分子軌域(HOMO)及最低未佔用分子軌域(LUMO)之能階。

[0115] 材料之分子軌域(molecular orbital)(尤其是最高佔用分子軌域(HOMO)及最低未佔用分子軌域(LUMO))、其能階以及最低三重態 T_1 之能量及最低激發單重態 S_1 之能量係透過量子-化學計算(quantum-chemical calculation)測定。為了計算不含金屬之有機物質，首先藉由「基態/半經驗/原定自旋/AM1/電荷0/自旋單重態(Ground State/Semi-empirical/Default Spin/AM1/Charge 0/Spin Singlet)」法進行幾何之最佳化。隨後，根據該最佳化幾何(optimized geometry)進行能量計算。此處使用具有「6-31G(d)」基組(電荷0，自旋單重態)之「TD-SCF/DFT/原定自旋/B3PW91(TD-SCF/DFT/Default Spin/B3PW91)」法。就含金屬之化合物而言，係藉由「基態/哈崔-佛克/原定自旋/LanL2MB/電荷0/自旋單重態(Ground State/Hartree-Fock/Default Spin/LanL2MB/Charge 0/Spin Singlet)」法進行幾何之最佳化。能量計算之進行係類似於上述之有機物質的方法，差別在於金屬原子係使用「LanL2DZ」基組(basis set)，而配位基(ligand)係使用「6-31G(d)」基組。由能量計算求得以哈崔單位(Hartree unit)計之HOMO能階 HE_h 或LUMO能階 LE_h 。此用以測定以電子伏特計之HOMO及LUMO能階，藉由循環伏安法測量(cyclic voltammetry measurement)校正，其係如下：

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

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

[0116] 在本案之內容中，這些值視為材料的HOMO及LUMO能階。

[0117] 最低三重態 T_1 係界定為具有最低能量的三重態之能量(由所述量子-化學計算顯而可知)。

[0118] 最低激發單重態 S_1 係界定為具有最低能量的激發單重態之能量(由所述量子-化學計算顯而可知)。

[0119] 本文所述之方法無關乎所使用之套裝軟體，且始終獲得相同結果。為此目的之經常使用的程式實例為「Gaussian09W」(Gaussian Inc.)及Q-Chem 4.1(Q-Chem, Inc.)。

[0120] 本發明亦關於包含至少一種包括式(A)結構之化合物或上文及下文所述之較佳實施態樣以及至少一種磷光發射體的組成物，用語「磷光發射體(phosphorescent emitter)」亦理解為意指磷光摻雜劑(phosphorescent dopant)。

[0121] 在包含基質材料及摻雜劑之系統中的摻雜劑係理解為意指在混合物中具有較小比例之組分。相應的，在包含基質材料及摻雜劑之系統中的基質材料係理解為意指在混合物中具有較大比例之組分。

[0122] 用於基質系統(較佳為混合的基質系統)之較佳磷光摻雜劑為下文所指之較佳磷光摻雜劑。

[0123] 用語「磷光摻雜劑」通常包括其中光之發射

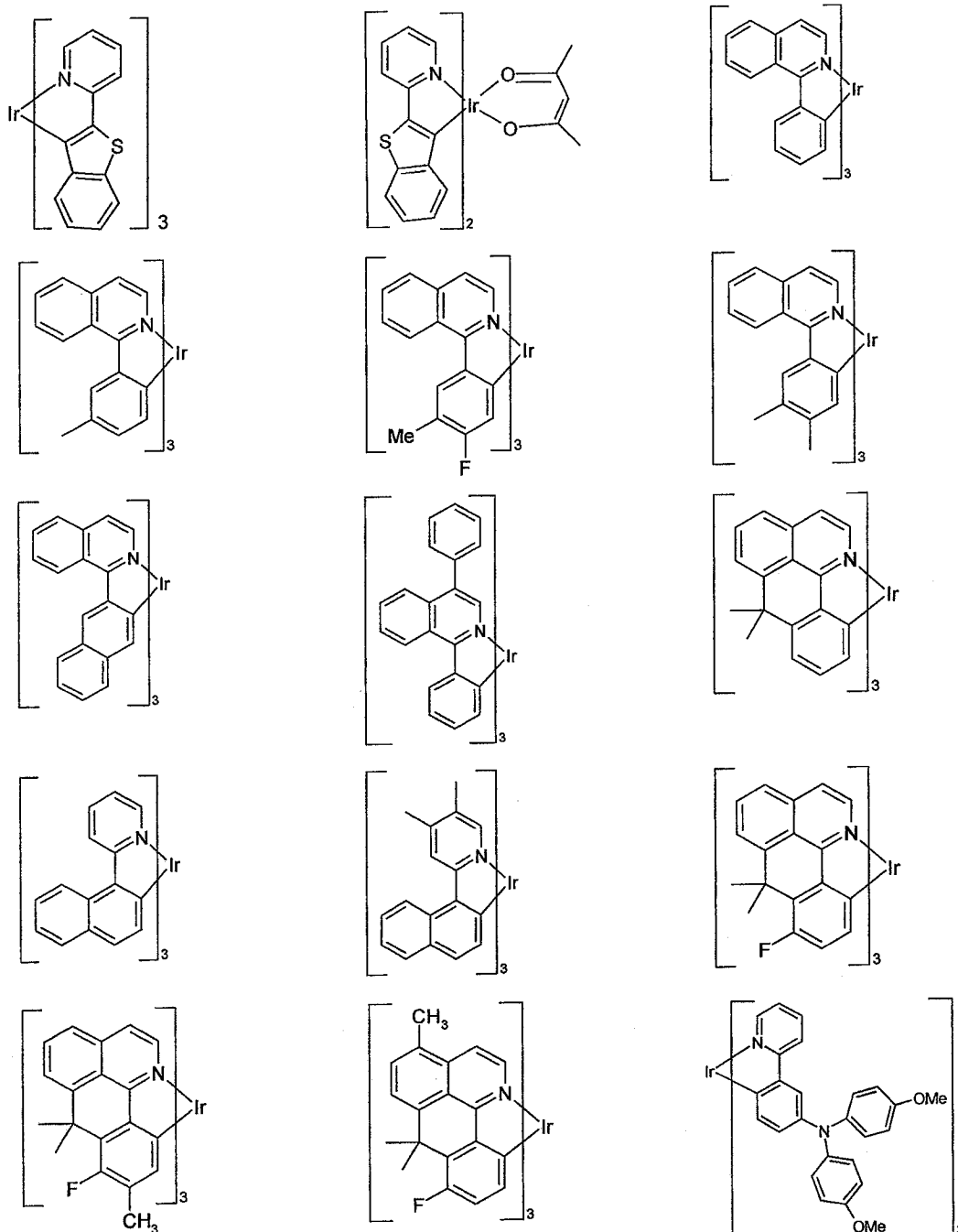
係經由自旋禁止躍遷 (spin-forbidden transition) (例如從激發三重態或具有更高自旋量子數之狀態 (例如五重態 (quintet state)) 躍遷) 進行的化合物。

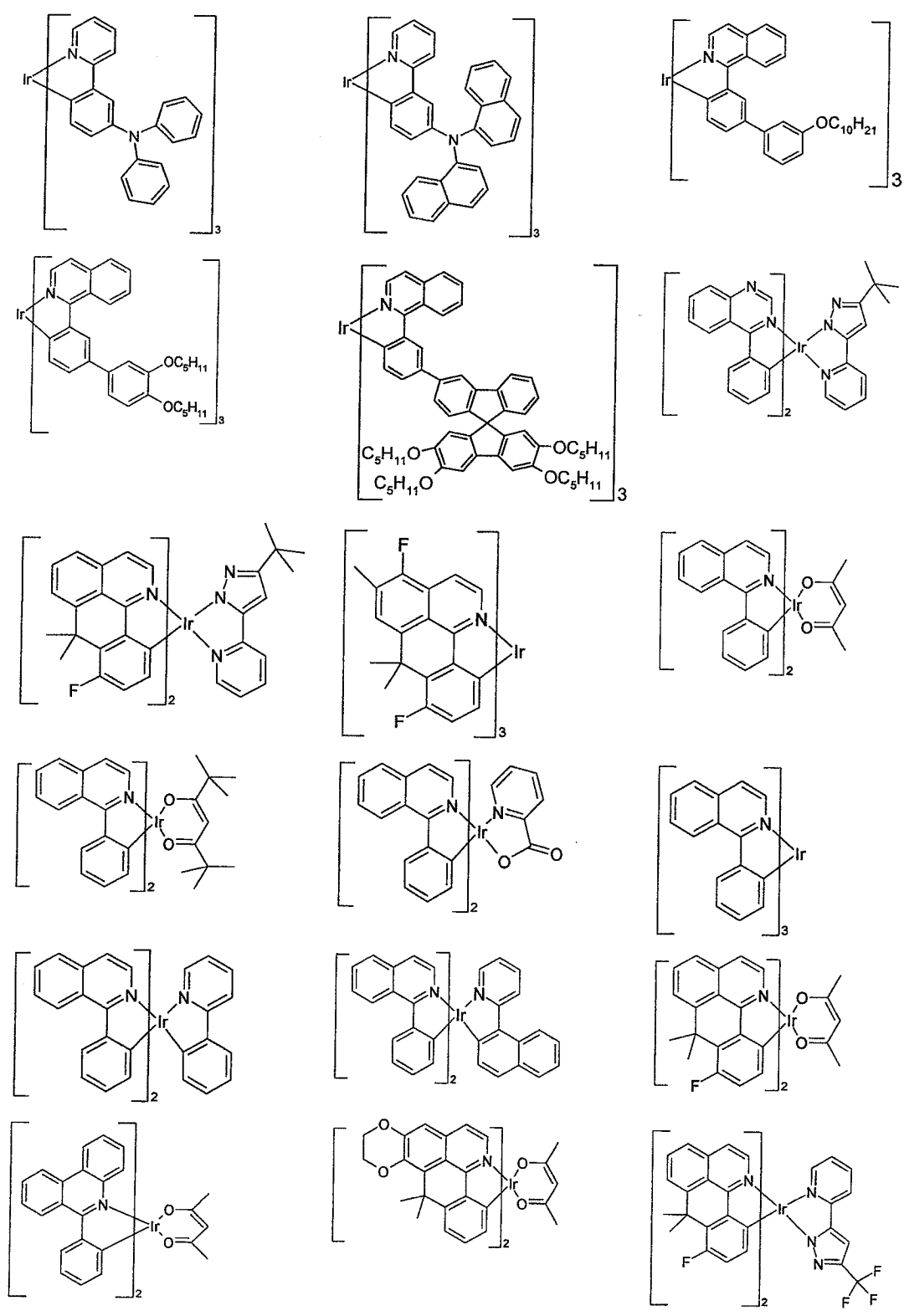
[0124] 適合的磷光化合物 (= 三重態發射體) 尤其為如下之化合物: 於適當激發時發光 (較佳在可見光區) 以及含有至少一個原子序大於 20、較佳大於 38 且小於 84、更佳大於 56 且小於 80 之原子，尤其是具有該原子序之金屬。所使用之較佳磷光發射體為含有銅、鉬、鎢、銻、釷、鐵、銻、銻、鈹、鉑、銀、金或銻的化合物，尤其是含有銻或鉑的化合物。在本發明內容中，含有上述金屬之所有發光化合物被視為磷光化合物。

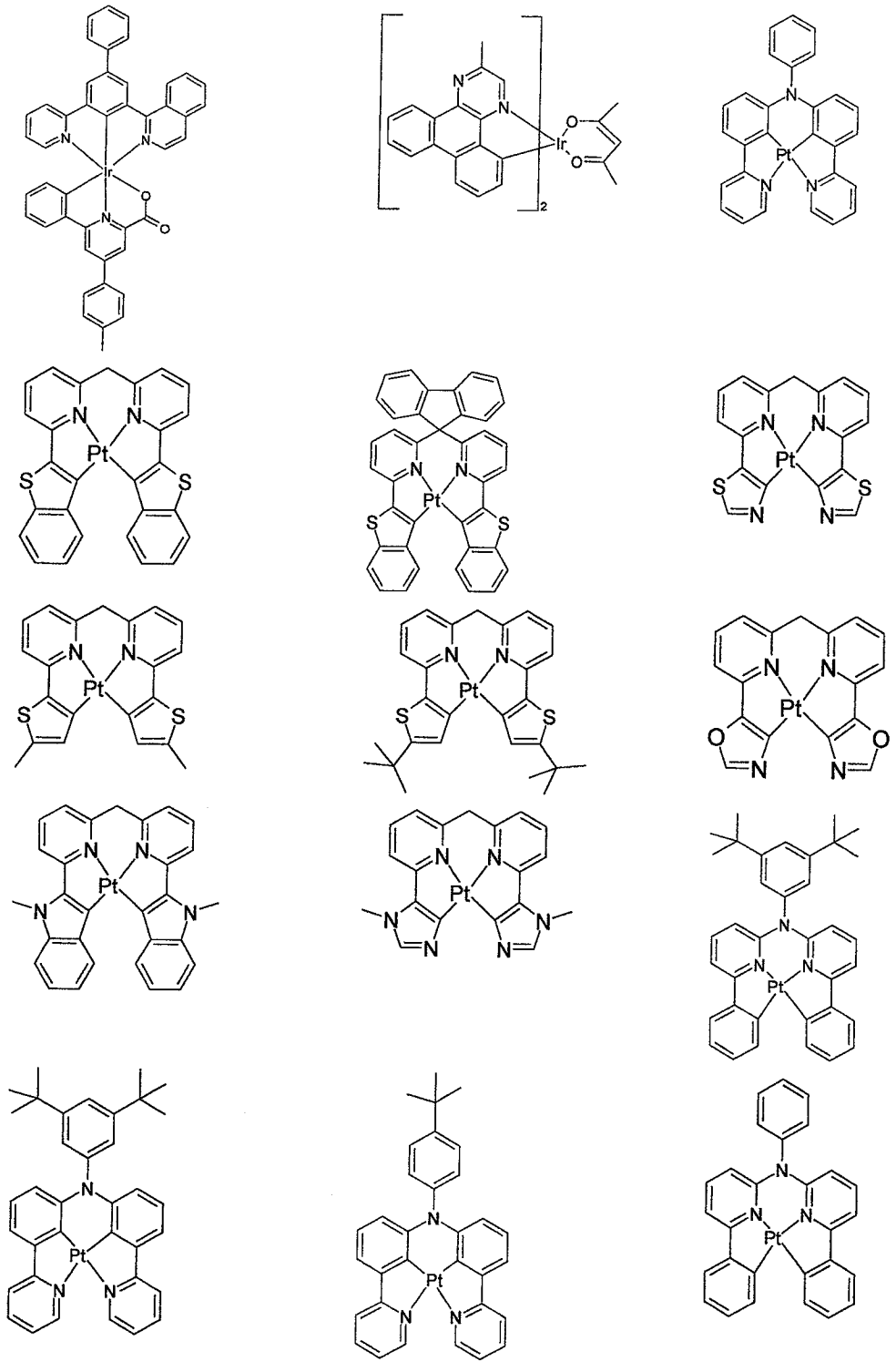
[0125] 上述發射體之實例可見於申請案 WO 00/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373、US 2005/0258742、WO 2009/146770、WO 2010/015307、WO 2010/031485、WO 2010/054731、WO 2010/054728、WO 2010/086089、WO 2010/099852、WO 2010/102709、WO 2011/032626、WO 2011/066898、WO 2011/157339、WO 2012/007086、WO 2014/008982、WO 2014/023377、WO 2014/094961、WO 2014/094960 以及尚未公開之申請案 EP 13004411.8、EP 14000345.0、EP 14000417.7 及 EP 14002623.8。通常，根據先前技術用於磷光 OLED 以及熟習有機電致發光領域之人士已知的所有磷光錯合物均適

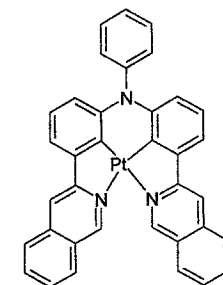
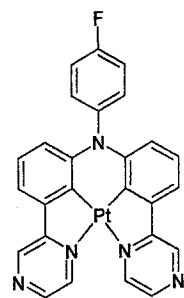
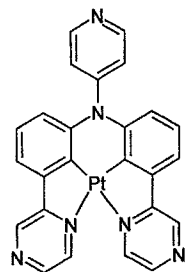
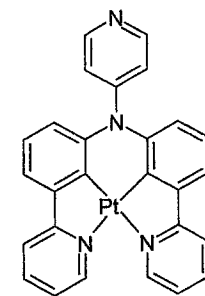
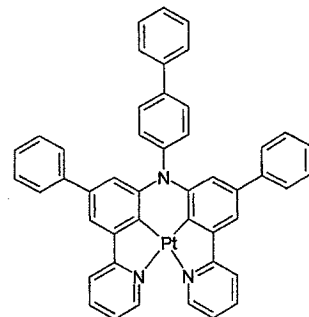
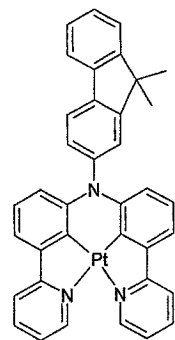
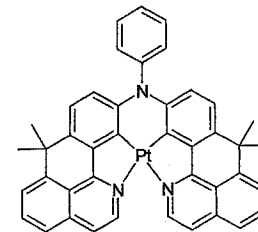
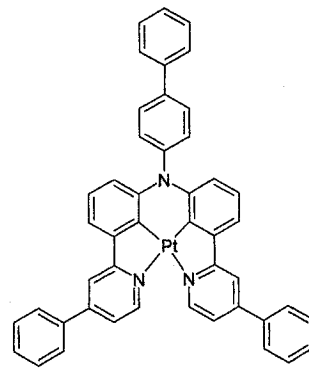
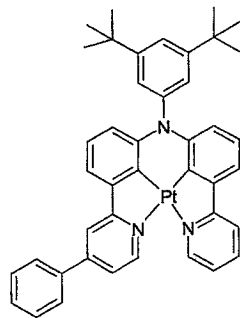
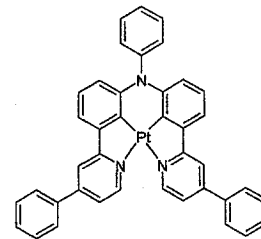
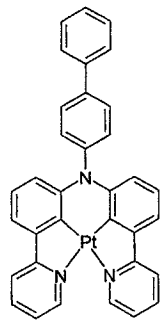
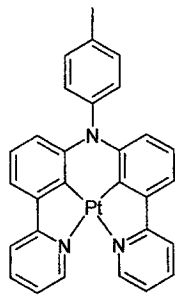
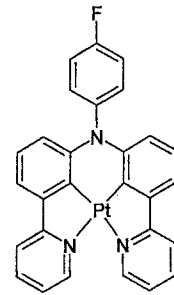
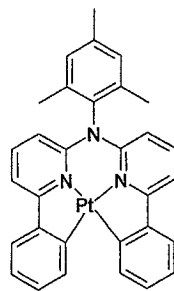
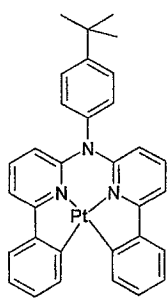
合，且熟習本領域之人士能在不運用創作性技巧下使用另外的磷光錯合物。

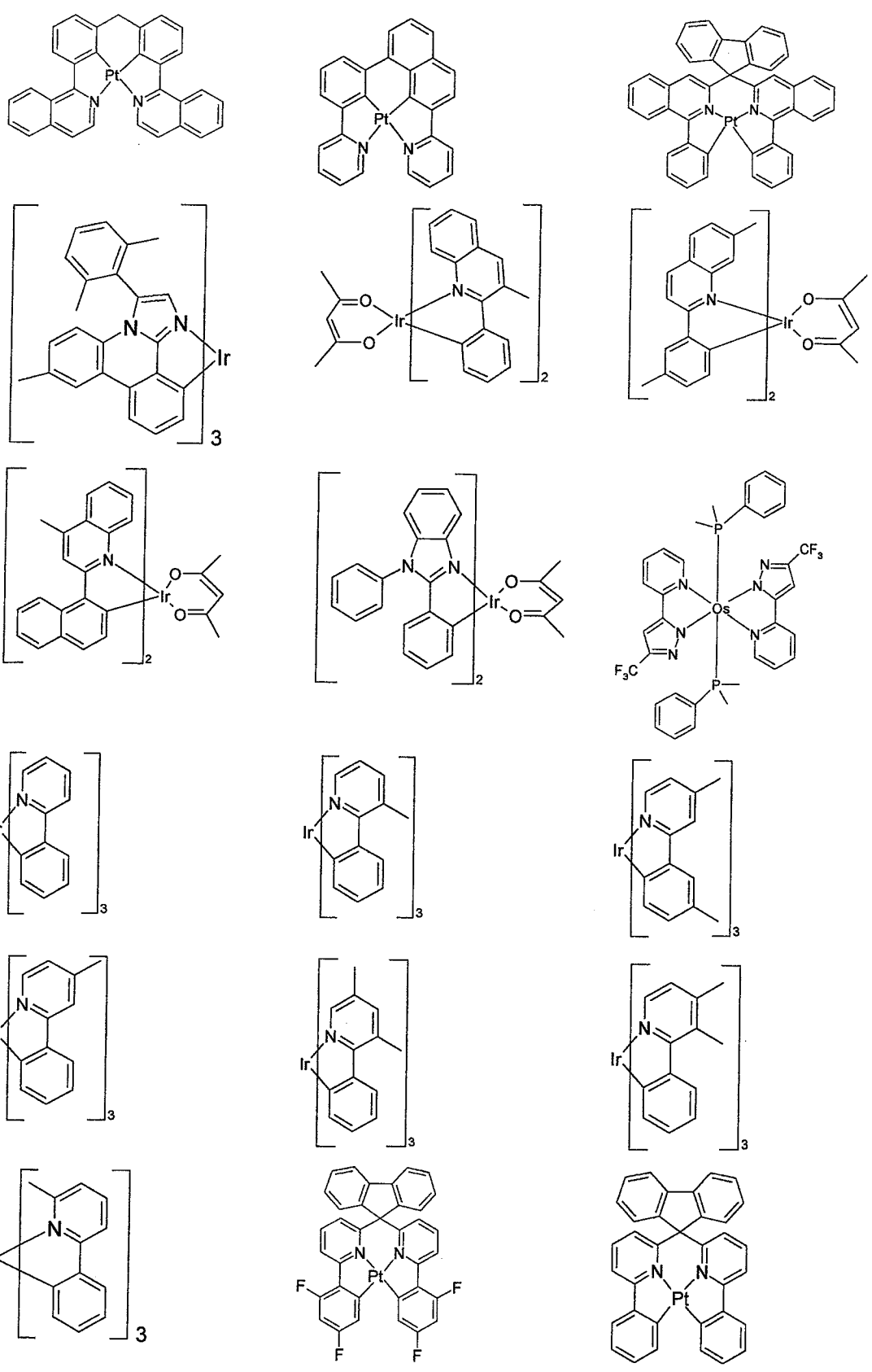
[0126] 磷光摻雜劑之明確實例列舉於下表：

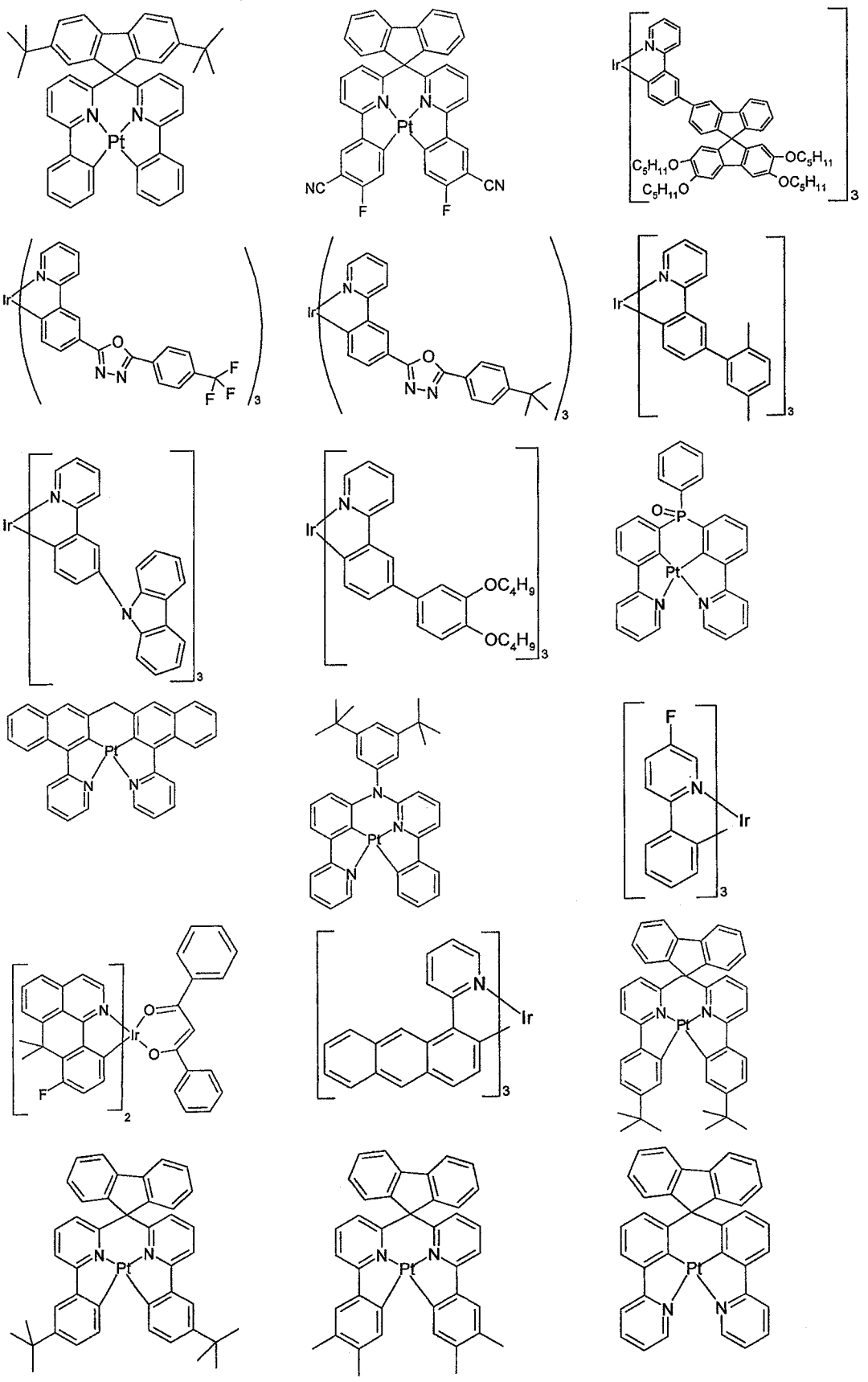


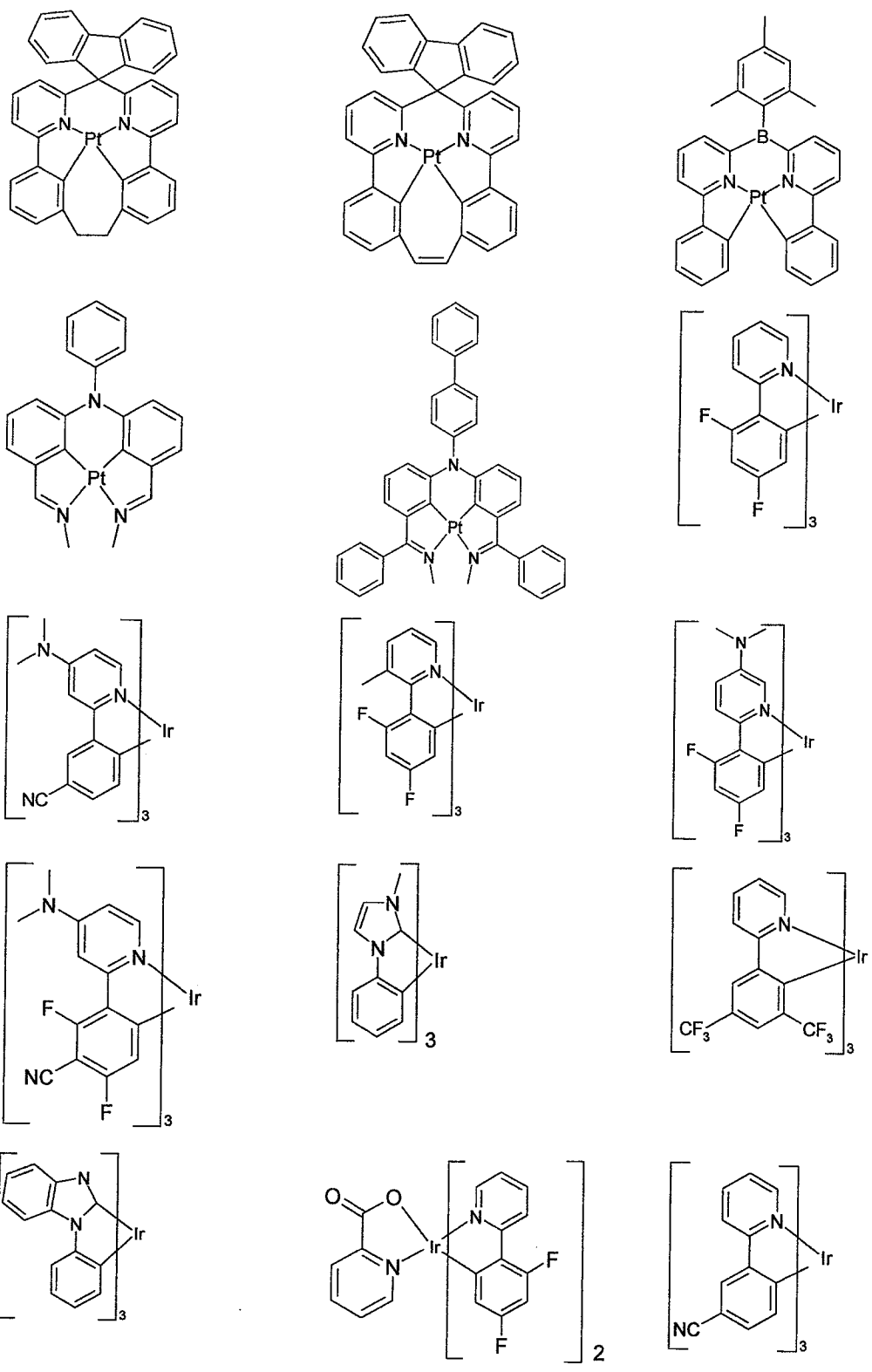


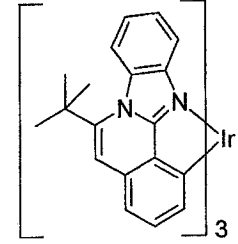
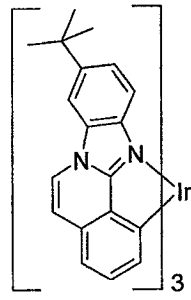
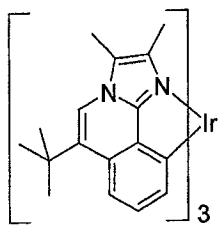
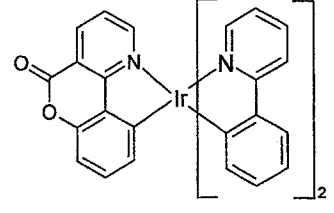
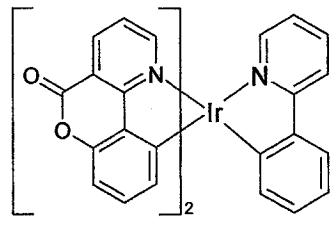
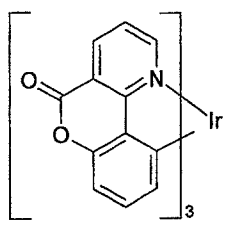
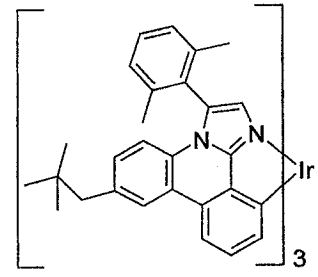
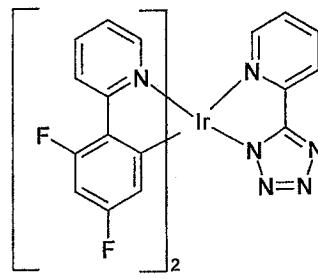
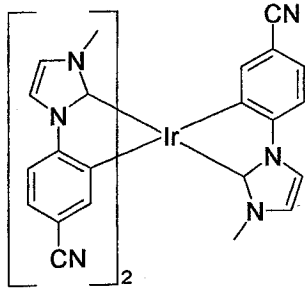
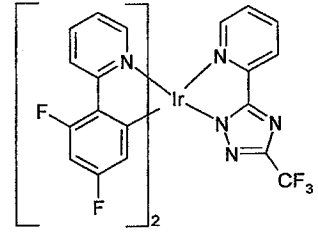
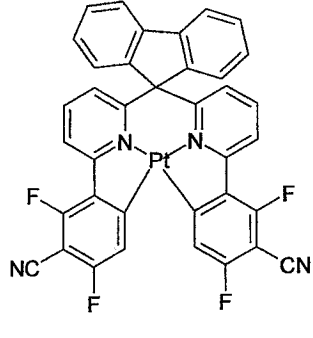
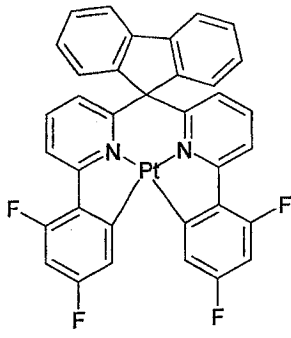
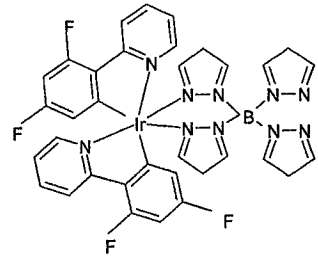
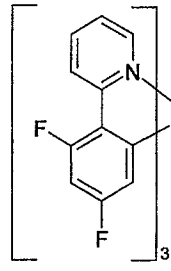
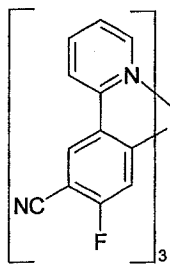


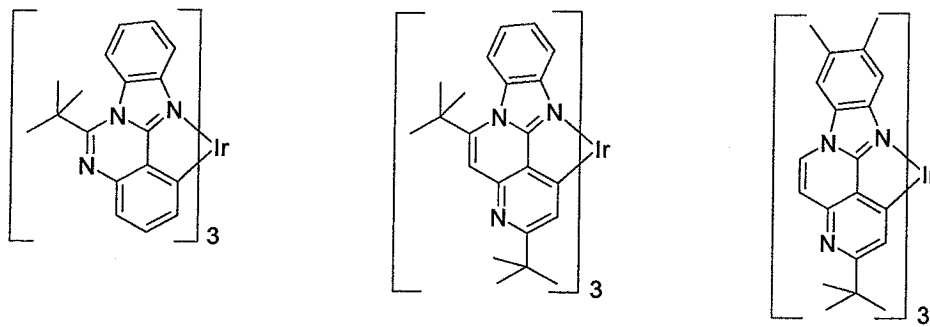












[0127] 上述包含式(A)的結構之化合物或前文詳細說明之較佳實施態樣可較佳用作電子裝置中的活性組分。電子裝置係理解為意指包含陽極、陰極及介於陽極與陰極之間的至少一層之任何裝置，該層包含至少一種有機或有機金屬化合物。本發明之電子裝置因而包含陽極、陰極及至少一個含有至少一種包含式(A)結構的化合物之中間層。此處較佳之電子裝置係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置(OLED、PLED)、有機積體電路(O-IC)、有機場效電晶體(O-FET)、有機薄膜電晶體(O-TFT)、有機發光電晶體(O-LET)、有機太陽能電池(O-SC)、有機光學偵測器、有機感光器(organic photoreceptor)、有機場猝滅裝置(organic field-quench device)(O-FQD)、有機電感測器(organic electrical sensor)、發光電化學電池(LEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機電漿子發光裝置(organic plasmon emitting device)(D. M. Koller et al., Nature Photonics **2008**, 1-4)，較佳為有機電致發光裝置(OLED、PLED)，尤其是在至少一層中含有至少一種包含式(A)結構的化合物之磷光OLED。特佳者係有機電致發光裝置。活

性組份通常為導入陽極與陰極之間的有機或無機材料，例如電荷注入、電荷傳輸或電荷阻擋材料，但尤其是發射材料與基質材料。

[0128] 本發明之一較佳實施態樣為有機電致發光裝置。該有機電致發光裝置包含陰極、陽極與至少一發光層。除了此等層之外，亦可包含其他層，例如在各例中之一或更多電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、電子傳輸層、電子注入層、激子阻擋層、電子阻擋層、電荷產生層及/或有機或無機p/n界面。同時，一或更多電洞傳輸層可為p-摻雜，例如用金屬氧化物(諸如 MoO_3 或 WO_3)，或用(全)氟化缺電子芳族系統；及/或一或更多電子傳輸層可經n-摻雜。也可將中間層導入兩個發射層之間，該等係具有例如激子(exciton)阻擋功能及/或控制電致發光裝置中之電荷平衡。然而，應指出不一定需要存在此等層之每一層。

[0129] 在此情況下，有機電致發光裝置可含有發光層(emitting layer)，或其可含有複數個發光層。若存在複數個發射層，彼等較佳具有整體係介於380 nm與750 nm之間的數個發射最大值(emission maxima)，以使整體結果為白光發光；換言之，可發出螢光或發出磷光之各種不同發光化合物係用於發光層中。尤佳者為三層系統，其中這三層展現藍色、綠色及橙色或紅色發光(其基本構造參見例如WO 2005/011013)，或具有超過三個發光層之系統。該系統亦可為其中一或更多層發出螢光以及一或更多其他層發出磷光之混合系統。

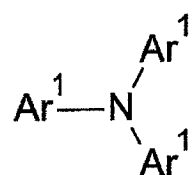
[0130] 在本發明一較佳實施態樣中，有機電致發光裝置在一或更多發光層中含有本發明的包含式(A)結構或前文詳細說明之較佳實施態樣之化合物作為基質材料，較佳作為電子傳導基質材料，較佳係與另外的基質材料(較佳為電洞傳導基質材料)併用。在本發明另一較佳實施態樣中，另外的基質材料為電子傳輸化合物。在又另一較佳實施態樣中，另外的基質材料為不顯著涉入(若有的話)層中之電洞及電子傳輸的具有大的能帶隙之化合物。發光層包含至少一發光化合物。

[0131] 可與式(A)或根據較佳實施態樣之化合物併用的適合之基質材料為芳族酮、芳族磷氧化物或芳族亞砷或砷，例如根據WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或WO 2010/006680；三芳胺(triarylamine)，尤其是單胺(monoamine)，例如根據WO 2014/015935；咔唑衍生物，例如CBP(N,N-雙咔唑基聯苯(N,N-biscarbazolylbiphenyl))或揭示於WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527或WO 2008/086851之咔唑衍生物；吡啶并咔唑衍生物，例如根據WO 2007/063754或WO 2008/056746；茚并咔唑衍生物，例如根據WO 2010/136109及WO 2011/000455；吡嗪衍生物(azacarbazole derivative)，例如根據EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160；雙極性基質材料，例如根據WO 2007/137725；矽烷，例如根據WO 2005/111172；氮雜硼雜環戊二烯(azaborole)或硼酸酯

，例如根據 WO 2006/117052；三吡啶衍生物，例如根據 WO 2010/015306、WO 2007/063754或 WO 2008/056746；鋅錯合物，例如根據 EP 652273或 WO 2009/062578；二氮矽呢(diazasilole)或四氮矽呢(tetraazasilole)衍生物，例如根據 WO 2010/054729；二氮磷呢(diazaphosphole)衍生物，例如根據 WO 2010/054730；橋聯咪唑衍生物(bridged carbazole derivative)，例如根據 US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877或 WO 2012/143080；聯伸三苯衍生物，例如根據 WO 2012/048781；內醯胺，例如根據 WO 2011/116865、WO 2011/137951或 WO 2013/064206；或 4-螺咪唑衍生物(4-spirocarbazole derivative)，例如根據 WO 2014/094963或尚未公開之申請案 EP 14002104.9。同樣可能的是存在有所發射之波長比實質發射體(actual emitter)還短之另外的磷光發射體作為混合物中的共主體(co-host)。

[0132] 較佳之共主體材料為三芳胺衍生物，尤其是單胺、茛苳并咪唑衍生物、4-螺咪唑衍生物、內醯胺及咪唑衍生物。

[0133] 與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳三芳胺衍生物係選自下式(TA-1)之化合物：



式 (TA-1)

其中， Ar^1 在各情況下係相同或不同且為具有5至60個芳族環原子以及在各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有5至60個芳族環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基、或具有5至60個芳族環原子以及在各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基，其中二或更多個相鄰 R^2 取代基可隨意地(optionally)形成單環或多環之脂族環系統，其可經一或多個 R^3 基取代，其中符號 R^2 具有前文(尤其是式(A))所給之定義。較佳的， Ar^1 在各情況下係相同或不同，且為芳基或雜芳基，其具有5至24個、較佳為5至12個芳族環原子，且其在各情況下可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

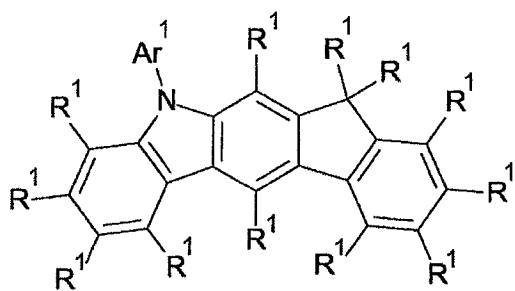
[0134] 適合之 Ar^1 基團的實例係選自由下列所組成之群組：苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萘基，1-、2-、3-或4-螺雙萘基，吡啶基，嘧啶基，1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基，及1-、2-、3-或4-呋唑基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。

[0135] 較佳的， Ar^1 基團在各情況下係相同或不同，且係選自上述基團(R^1-1)至(R^1-87)，較佳係(R^1-1)至(R^1-54)，特佳係(R^1-1)至(R^1-51)，尤佳為(R^1-1)至(R^1-37)，最佳者為根據(R^1-1)之基。本文中，有關式(R^1-1)至(R^1-87)之基團的下標之總和總數及鍵結至該等基團之 R^2 基的前文詳細說明之較佳者可適用。

[0136] 在式(TA-1)之化合物之一較佳實施態樣中，至少一個 Ar^1 基團係選自聯苯基(biphenyl group)(其可為鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基)。在式(TA-1)化合物之另一較佳實施態樣中，至少一個 Ar^1 基團係選自芴基或螺雙芴基(spirobifluorene group)，其中，該等基團各可鍵結至第1、2、3或4位置之氮原子。在式(TA-1)化合物之又另一較佳實施態樣中，至少一個 Ar^1 基團係選自伸苯基或聯苯基(其中該基團為鄰-、間-或對-鍵結之基團)，經二苯并呋喃基、二苯并噻吩基或吡啶基(尤其是二苯并呋喃基)取代，其中該二苯并呋喃或二苯并噻吩基係經由第1、2、3或4位置鍵結至該伸苯基或聯苯基，且其中該吡啶基係經由第1、2、3或4位置或經由氮原子而鍵結至伸苯基或聯苯基。

[0137] 在式(TA-1)之化合物的一特佳實施態樣中，一個 Ar^1 基團係選自芴或螺雙芴基(尤其是4-芴或4-螺雙芴基)，且一個 Ar^1 基係選自聯苯基(尤其是對-聯苯基)、或芴基(尤其是2-芴基)，且第三個 Ar^1 基團係選自對-伸苯基或對-聯苯基，經二苯并呋喃基(尤其是4-二苯并呋喃基)、或吡啶基(尤其是N-吡啶基或3-吡啶基)取代。

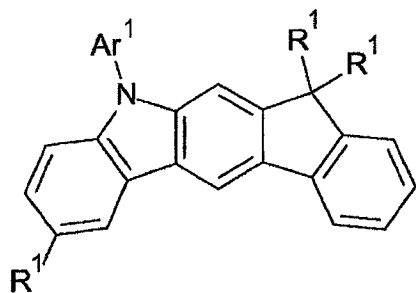
[0138] 與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳茛苳并吡啶衍生物係選自下式(TA-2)之化合物：



式 (TA-2)

其中， Ar^1 及 R^1 具有前文(尤其是式(A)及/或(TA-1))所列之定義。 Ar^1 基團之較佳實施態樣為上列結構 R^1 -1至 R^1 -87，更佳為 R^1 -1至 R^1 -51。

[0139] 式(TA-2)化合物之一較佳實施態樣為下式(TA-2a)之化合物：

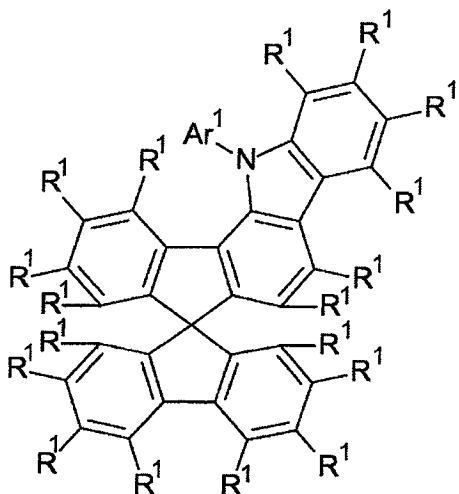


式 (TA-2a)

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

由第3位置)鍵結至該茛苳并咪唑基本架構。

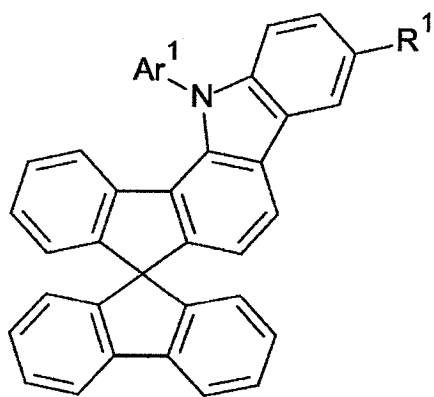
[0140] 與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳的4-螺咪唑衍生物係選自下式(TA-3)之化合物:



式 (TA-3)

其中， Ar^1 及 R^1 具有前文(尤其是式(A)及/或(TA-1))所列之定義。 Ar^1 基團之較佳實施態樣為上列結構 R^1-1 至 R^1-87 ，更佳為 R^1-1 至 R^1-51 。

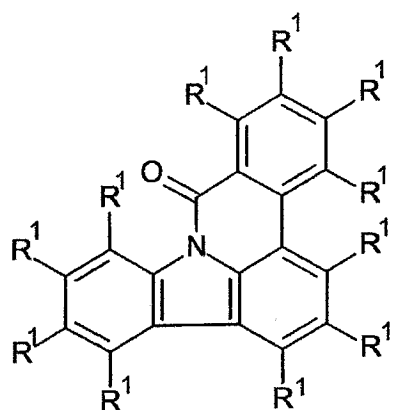
[0141] 式(TA-3)化合物之一較佳實施態樣為下式(TA-3a)之化合物:



式 (TA-3a)

其中， Ar^1 及 R^1 具有前文(尤其是式(A))所列之定義。
 Ar^1 基團之較佳實施態樣為上列結構 R^1-1 至 R^1-87 ，更佳為 R^1-1 至 R^1-51 。

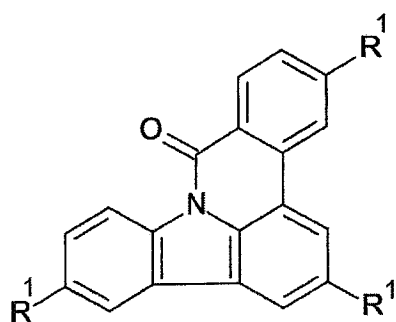
[0142] 與本發明化合物一起使用作為共主體材料之較佳內醯胺(lactam)係選自下式(LAC-1)之化合物：



式 (LAC-1)

其中， R^1 具有前文(尤其是式(A))所列之定義。

[0143] 式(LAC-1)化合物之一較佳實施態樣為下式(LAC-1a)之化合物：



式 (LAC-1a)

其中， R^1 具有前文(尤其是式(A))所述之定義。 R^1 較佳為在各情況下係相同或不同且為H或具有5至40個芳族環原

子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統，其中 R^2 可具有前文(尤其是式(A))提供之定義。最佳的， R^1 取代基係選自由下列所組成之群組:H，以及具有6至18個芳族環原子、較佳6至13個芳族環原子且各情況下可經一或多個非芳族 R^2 基取代、但較佳係未經取代之芳族或雜芳族環系統。適合之 R^1 取代基的實例係選自由下列所組成之群組:苯基，鄰聯苯基、間聯苯基或對聯苯基，聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)，聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)，1-、2-、3-或4-萸基，1-、2-、3-或4-螺雙萸基，吡啶基，噁啶基，1-、2-、3-或4-二苯并咪喃基，1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基，及1-、2-、3-或4-呋唑基，其各可經一或多個 R^2 基取代，但較佳係未經取代。適合的 R^1 結構係如同上述R-1至R-79、更佳為 R^1 -1至 R^1 -51之結構。

[0144] 亦可較佳係使用複數種不同基質材料作為混合物，尤其是至少一種電子傳導基質材料及至少一種電洞傳導基質材料。較佳者同樣為使用電荷傳輸基質材料及不顯著涉入(若有的話)電荷傳輸之電荷性基質材料的混合物，如例如WO 2010/108579中所述。

[0145] 又較佳係使用二或更多三重態發射體之混合物連同基質。在此情況下，具有較短波長之發射光譜的三重態發射體係用作具有較長波長之發射光譜的三重態發射體之共基質。

[0146] 更佳的，在一較佳實施態樣中，可使用包含式(A)之結構的本發明化合物作為有機電子裝置(尤其是有

機電致發光裝置，例如 OLED 或 OLEC) 之發光層中的基質材料。在此情況下，含有包含式 (A) 結構之化合物或上文及下文所述之較佳實施態樣的基質材料係與一或多種摻雜劑 (較佳為磷光摻雜劑) 組合存在於電子裝置中。

[0147] 此情況下，發光層中之基質材料的比例，就螢光發光層而言係介於 50.0 體積 % 與 99.9 體積 % 之間、較佳係介於 80.0 體積 % 與 99.5 體積 % 之間、更佳係介於 92.0 體積 % 與 99.5 體積 % 之間，以及就磷光發光層而言係介於 85.0 體積 % 與 97.0 體積 % 之間。

[0148] 對應的，摻雜劑之比例，就螢光發光層而言係介於 0.1 體積 % 與 50.0 體積 % 之間、較佳係介於 0.5 體積 % 與 20.0 體積 % 之間、更佳係介於 0.5 體積 % 與 8.0 體積 % 之間，以及就磷光發光層而言係介於 3.0 體積 % 與 15.0 體積 % 之間。

[0149] 有機電致發光裝置之發光層亦可包含包括複數種基質材料 (混合基質系統) 及 / 或複數種摻雜劑之系統。在此情況下，摻雜劑亦通常為在該系統中具有較小比例的材料，而基質材料為在該系統中具有較大比例之材料。然而，在個別情況下，系統中之單一基質材料的比例可低於單一摻雜劑的比例。

[0150] 在本發明另一較佳實施態樣中，包含式 (A) 或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之化合物係用作混合基質系統之組分。混合基質系統較佳包含二或三種不同基質材料，更佳為兩種不同基質材料。較佳的，在此情況

下，這兩種材料之一為具有電洞傳輸性質的材料，而另一材料為具有電子傳輸性質的材料。然而，混合基質組分之所希望的電子傳輸及電洞傳輸性質亦可主要或完全地組合於單一混合基質組分，在該情況下，其他混合基質組分實行其他功能。這兩種不同基質材料可以 1:50 至 1:1 之比存在，較佳為 1:20 至 1:1，更佳為 1:10 至 1:1 及最佳為 1:4 至 1:1。較佳者係於磷光有機電致發光裝置中使用混合基質系統。有關混合基質系統之更詳細資訊之一來源為申請案 WO 2010/108579。

[0151] 本發明進一步提供電子裝置，較佳為有機電致發光裝置，其包含一或更多本發明之化合物及/或至少一本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物於一或更多電子傳導層中作為電子傳導化合物。

[0152] 較佳之陰極為具有低功函數(work function)之金屬、金屬合金、或由各種不同金屬(例如鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑰系元素(例如 Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等))所構成之多層結構。其他適合者為由鹼金屬或鹼土金屬及銀所構成的合金，例如由鎂及銀所構成的合金。在多層結構之情況下，除了已提及的金屬之外，亦可能使用具有相對高功函數之其他金屬，例如 Ag，在該情況下，通常使用金屬之組合，諸如例如 Mg/Ag、Ca/Ag 或 Ba/Ag。亦可較佳係在金屬陰極及有機半導體之間引入具有高介電常數之材料的薄中間層。適用於本目的之適合材料的實例為鹼金屬或鹼土金屬氟化物，還有對應之氧化

物或碳酸鹽(例如LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃等)。同樣可用於此目的的是有機鹼金屬錯合物，例如Liq(喹啉酸鋰(lithium quinolate))。該層之層厚度較佳係介於0.5與5 nm之間。

[0153] 較佳之陽極為具有高功函數之材料。較佳的，陽極係具有相對於真空為大於4.5 eV之功函數。首先，具有高氧化還原電位之金屬係適合此目的，例如Ag、Pt或Au。其次，金屬/金屬氧化物電極(例如Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x)亦會較佳。就一些應用而言，電極中之至少一者必須為透明或部分透明以能照射有機材料(O-SC)或發光(OLED/PLED、O-雷射)。此處較佳之陽極材料為傳導性合金屬氧化物。特佳者係銦錫氧化物(ITO)或銦鋅氧化物(IZO)。較佳者另外為傳導性經摻雜有機材料，尤其是傳導性經摻雜聚合物，例如PEDOT、PANI或此等聚合物之衍生物。另外較佳係當p-摻雜之電洞傳輸材料係應用至陽極作為電洞注入層時，在該情況下適合的p-摻雜劑為金屬氧化物，例如MoO₃或WO₃、或(全)氟化缺電子芳族系統。其他適用之p-摻雜劑為HAT-CN(六氰基六氮雜聯伸三苯(hexacyano hexaazatriphenylene))或來自Novaled之化合物NPD9。這樣的層使電洞注入具有低HOMO(即，就數值(magnitude)而言為大HOMO)之材料變簡單。

[0154] 在其他層中，通常可使用根據先前技術用於該層的任何材料，且熟習本領域之人士能在不運用創作性技巧下即能將該等材料任一者與本發明材料組合於電子裝

置中。

[0155] 裝置係對應地(根據應用)結構化(structured)、觸點連接(contact-connected)以及最終密封，因為此等裝置之使用壽命在水及/或空氣存在下會嚴重縮短。

[0156] 另外較佳的是電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其特徵在於一或更多層係藉由昇華方法(sublimation process)塗布。在該情況下，材料係在真空昇華系統中在通常低於 10^{-5} mbar、較佳低於 10^{-6} mbar之初始壓力下藉由蒸鍍(vapour deposition)施加。亦可能的是，初始壓力更低或更高，例如低於 10^{-7} mbar。

[0157] 較佳者還有電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其特徵在於一或更多層係藉由OVPD(有機氣相沉積(organic vapour phase deposition))法或借助於載氣昇華作用(carrier gas sublimation)塗布。在該情況下，等材料係在介於 10^{-5} mbar與1 bar之間的壓力下施加。該方法的一具體實例為OVJP(有機蒸氣噴射印刷(organic vapour jet printing))法，其中材料係藉由噴嘴直接施加，因此結構化(例如M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett. **2008**, 92, 053301)。

[0158] 另較佳者為電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其特徵在於一或更多層係自溶液製造，例如藉由旋塗、或藉由任何印刷法，例如網版印刷、快乾印刷、平版印刷或噴嘴印刷，但更佳為LITI(光引發熱成像(light-induced thermal imaging)、熱轉印印刷(thermal transfer

printing))或噴墨印刷。基於此目的，需要可溶性化合物，其係例如經由適合之取代所獲得。

[0159] 電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，亦可藉由自溶液施加一或多層及藉由蒸鍍施加一或更多其他層而製造成混合系統。例如，可自溶液施加包含包括式(A)結構的本發明化合物以及基質材料的發光層，以及藉由在減壓下蒸鍍施加電洞阻擋層及/或電子傳輸層至彼。

[0160] 此等方法大體上為熟習本領域之人士已知以及可毫無困難地應用至電子裝置，尤其是包含包括式(A)結構之本發明化合物或前文詳述之較佳實施態樣的有機電致發光裝置。

[0161] 本發明之電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，值得注意的是優於先前技術的下列令人意外的一或更多優點：

1. 電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其包含具有式(A)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，尤其是作為電子傳導材料及/或基質材料，具有非常良好的使用壽命(lifetime)。

2. 電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其包含具有式(A)的結構或上文及下文所述之較佳實施態樣的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，作為電子傳導材料、電子注入材料及/或基質材料，具有優異的效率。更具體而言，效率遠高於不含式(A)之結構單元的類似化合

物。

3. 具有式(A)或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之本發明化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物展現非常高安定性且獲致具有非常長使用壽命之化合物。

4. 採用具有式(A)或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，可能避免電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)中形成光損失通道(optical loss channel)。結果，此等裝置表現發射體之高PL效率特徵，因此表現高EL效率，以及基質至摻雜劑之優異的能量傳遞(energy transmission)。

5. 將具有式(A)或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物用於電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)之層中，導致電子導體結構(electron conductor structure)之高移動率(mobility)。

6. 具有式(A)或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物表現優異熱安定性特徵，以及具有低於約1200 g/mol之莫耳質量的化合物具有良好昇華性(sublimability)。

7. 具有式(A)或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物具有優異的玻璃膜形成性(glass film formation)。

8. 具有式(A)或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物由溶液形成非常良好的膜。

9. 包含式(A)或上文及下文所述之較佳實施態樣的結構之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物具有令人驚訝的高三重態能階 T_1 ，此在化合物使用作為電子傳導材料時尤其如此。

[0162] 上述優點並未伴隨其他電子性質的劣化。

[0163] 本發明之化合物及混合物適合用於電子裝置。電子裝置係理解為意指含有至少一個含有至少一種有機化合物之層的裝置。組件亦可包含無機材料或是完全由無機材料形成的層。

[0164] 本發明因此進一步提供本發明化合物或混合物用於電子裝置(尤其是用於有機電致發光裝置)的用途。

[0165] 本發明又進一步提供本發明化合物及/或本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物用於電子裝置中作為主體材料、基質材料、電子傳輸材料、電子注入材料及/或電洞阻擋材料之用途。

[0166] 本發明再進一步提供包含前文詳述之至少一本發明化合物或混合物的電子裝置。在該情況下，前文詳述之較佳化合物亦適用於電子裝置。更佳的，電子裝置係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置(OLED、PLED)、有機積體電路(O-IC)、有機場效電晶體(O-FET)、有機薄膜電晶體(O-TFT)、有機發光電晶體(O-LET)、有機太陽能電池(O-SC)、有機光學偵測器、有機感光器、有機場猝滅裝置(O-FQD)、有機電感測器、發光電化學電池(LEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機電漿子發光裝置

(D. M. Koller et al., Nature Photonics **2008**, 1-4), 較佳為有機電致發光裝置(OLED、PLED), 尤其是磷光OLED。

[0167] 在本發明另一實施態樣中, 本發明之有機電致發光裝置不含有任何獨立的電洞注入層及/或電洞傳輸層及/或電洞阻擋層及/或電子傳輸層, 此意指發光層直接毗鄰電洞注入層或陽極, 及/或發光層直接毗鄰電子傳輸層或電子注入層或陰極, 如例如WO 2005/053051中所述。另外可能使用與發光層中之金屬錯合物相同或相似的金屬錯合物作為直接毗鄰該發光層之電洞傳輸或電洞注入材料, 如例如WO 2009/030981中所述。

[0168] 此外, 可能將本發明化合物用於電洞阻擋或電子傳輸層中。尤其是不具有咪唑結構之本發明化合物。此等亦可較佳係經一或多個其他電子傳輸基團(例如苯并咪唑基)取代。

[0169] 在本發明之有機電致發光裝置的其他層中, 可能使用根據先前技術經常使用的任何材料。熟習本領域之人士因此能在不運用創造性技巧下將已知用於有機電致發光裝置的任何材料與式(A)或根據較佳實施態樣的本發明化合物組合。

[0170] 本發明化合物在用於有機電致發光裝置時通常具有非常良好的性質。尤其是在本發明化合物用於有機電致發光裝置之情況下, 使用壽命明顯優於根據先前技術之相似化合物。同時, 有機電致發光裝置之其他性質, 尤其是效率及電壓, 也為較佳或至少相當。

[0171] 應指出本發明中所述之實施態樣的變化係涵蓋在本發明範圍內。除非明確排除，否則本發明所揭示之任何特徵可與用於相同目的或相等或類似目的之替代性特徵交換。因此，除非另有陳述，否則本發明中所揭示之任何特徵應視為大類之一實例或視為相等或類似特徵。

[0172] 除非特定特徵及/或步驟相互排斥，否則本發明所有特徵可以任何方式彼此組合。本發明之較佳特徵尤其如此。同樣地，可獨立(且非組合)使用非基本組合之特徵。

[0173] 亦應指出許多特徵，尤其是本發明較佳實施態樣之特徵，本身應視為具有進步性而且不僅為本發明實施態樣中的一些特徵。就此等特徵而言，除了任何目前主張之發明之外的或作為其替代的，可尋求獨立保護。

[0174] 本發明揭示之技術性教示可予以摘要及與其他實例組合。

[0175] 本發明係以下列實施例詳細說明，但並未意欲藉此限制本發明。

[0176] 熟習本領域之人士將能在不運用創造性技巧下使用所提供的細節，以製造本發明之其他電子裝置且因而實現在所主張的整個範圍內的發明。

【實施方式】

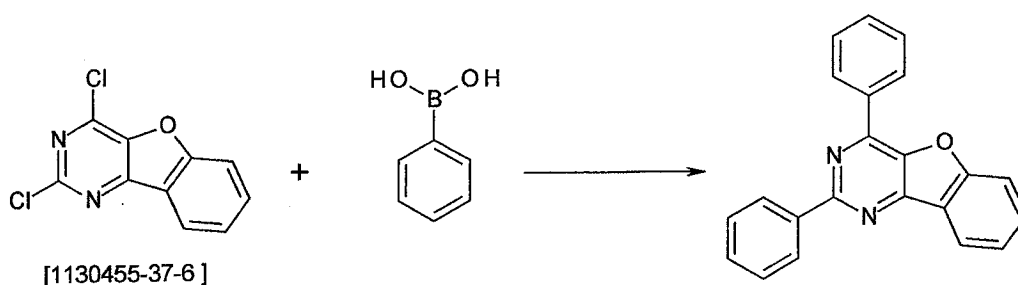
實施例

[0177] 除非另有陳述，否則以下之合成係在保護性

氣體氣氛下於經乾燥溶劑中進行。本發明之化合物可利用熟習本領域之人士已知的合成方法製備。

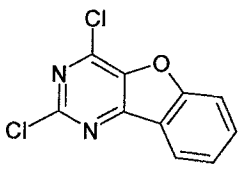
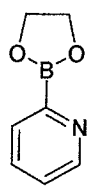
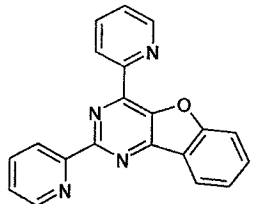
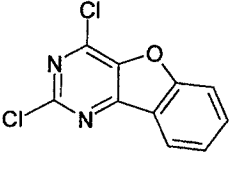
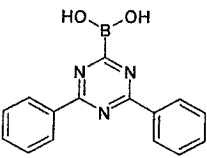
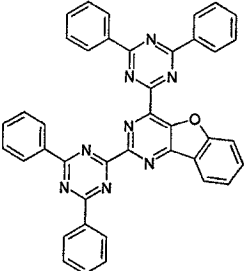
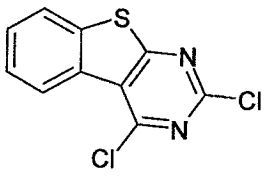
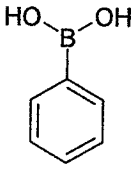
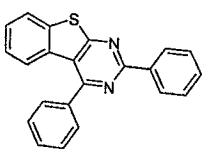
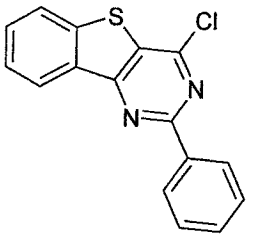
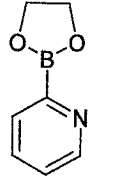
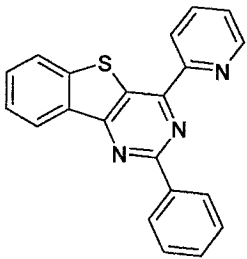
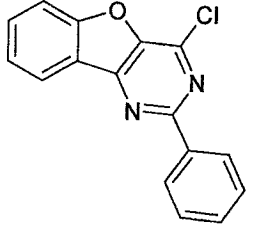
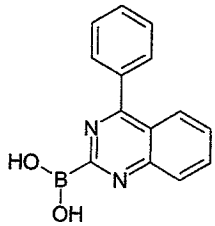
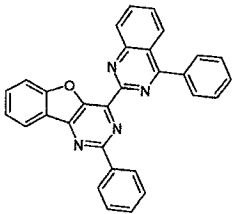
合成實例

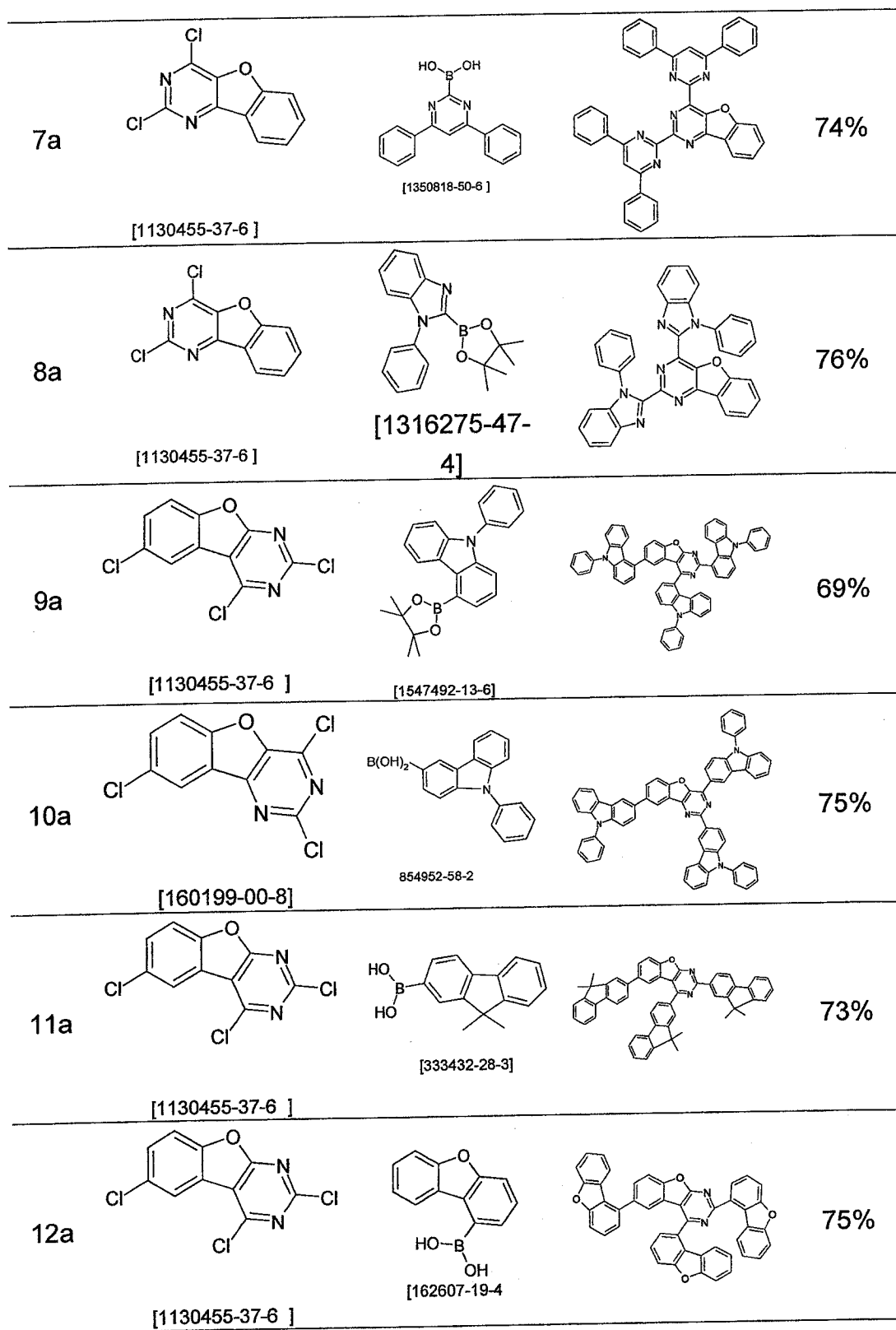
a) 2,4-二苯基苯并[4,5]呋喃并[3,2-d]嘓啶 (2,4-Diphenylbenzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine)

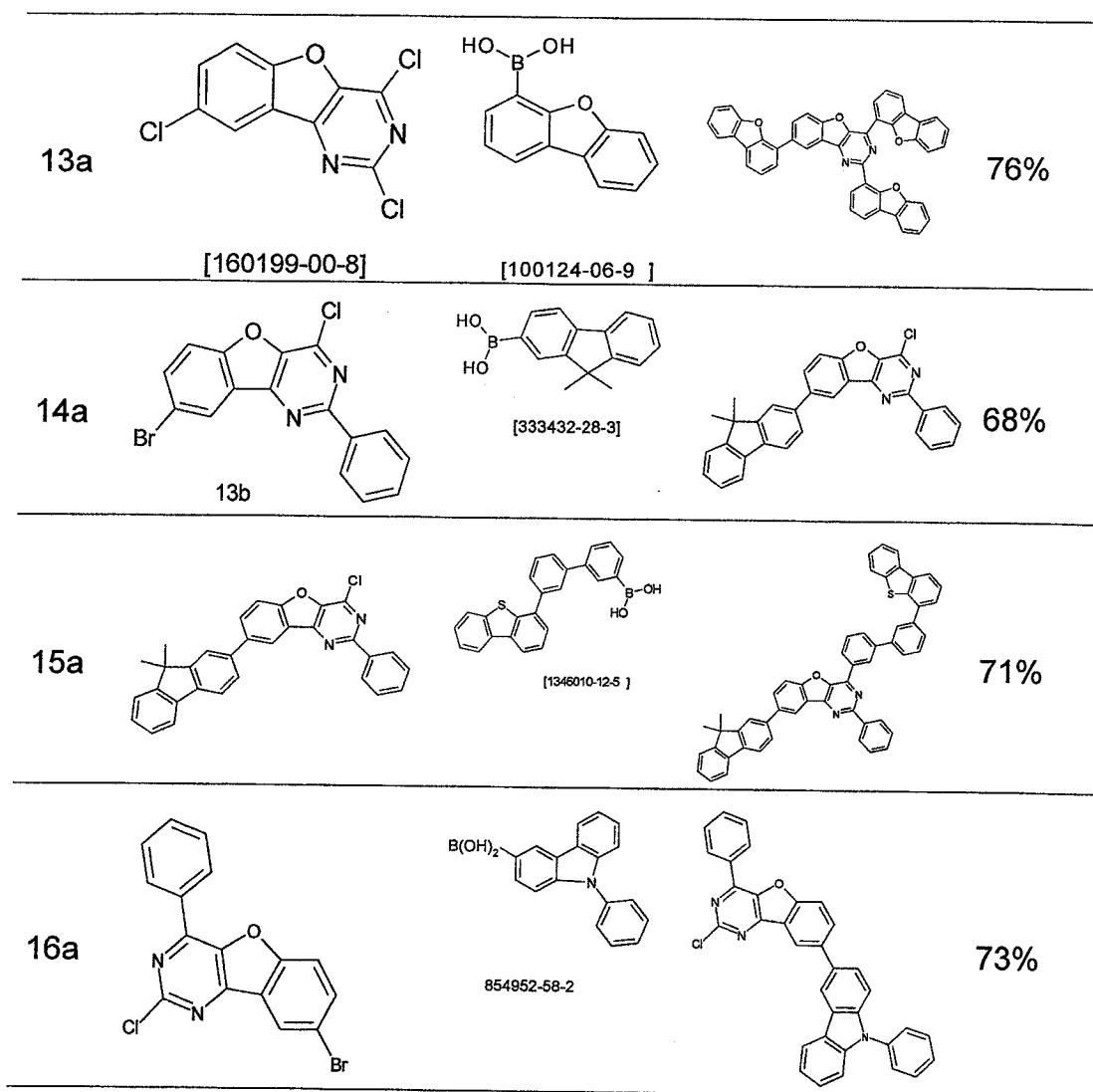


[0178] 將 13 g(110.0 mmol)之苯基硼酸(phenylboronic acid)、13 g(55 mmol)之 2,4-二氯苯并[4,5] 呋喃并[3,2-d]嘓啶 (2,4-dichlorobenzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine) 及 21 g(210.0 mmol)之碳酸鈉懸浮於 500 ml 的乙二醇二胺醚(ethylene glycol diamine ether)及 500 ml 的水中。將 913 mg(3.0 mmol)之三-鄰-甲苯基膦(tri-*o*-tolylphosphine)、然後是 112 mg(0.5 mmol)之乙酸鈰(II)(palladium(II)acetate)添加至該懸浮液，且反應混合物係在回流下加熱 16 小時。冷卻之後，將有機相(organic phase)移出，經由矽膠過濾然後濃縮至乾燥。殘留物係自甲苯以及自二氯甲烷/庚烷再結晶(recrystallize)。產量:15 g(47 mmol)，理論值之 87%。

[0179] 下列化合物係以類似方式製備：

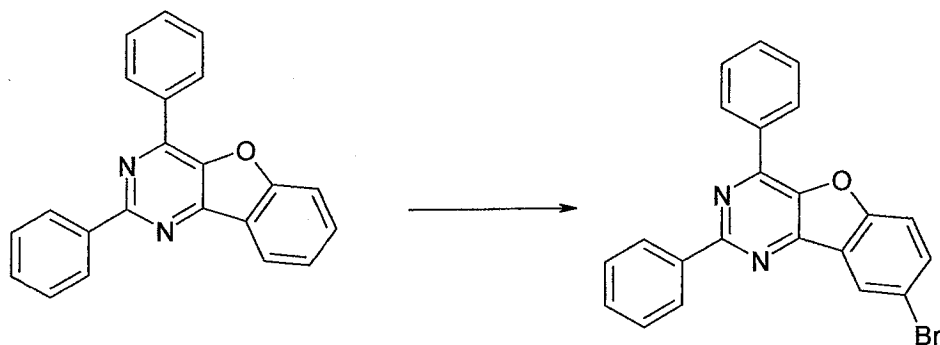
	反應物 1	反應物 2	產物	產率
2a	 [1130455-37-6]	 [317810-27-8]		89%
3a	 [1130455-37-6]	 [1251825-65-6]		70%
4a	 [76872-40-7]			77%
5a	 [900463-54-9]	 [317810-27-8]		76%
6a	 [134221-88-8]	 [1629973-75-6]		77%





[0180] 產物 **9a** 及 **13a** 係經由管柱層析術在矽膠上用甲苯/庚烷 (1:2) 純化，及最終在高度真空下 ($p=5 \times 10^{-7}$ mbar) 昇華 (99.9% 純度)。

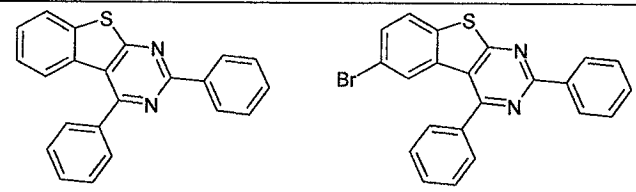
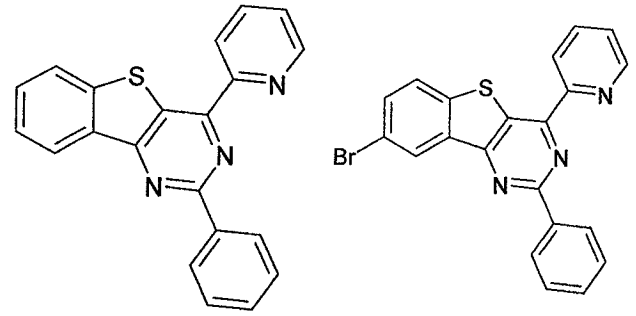
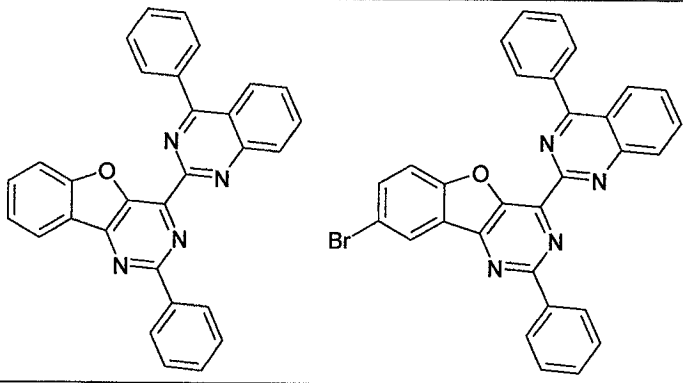
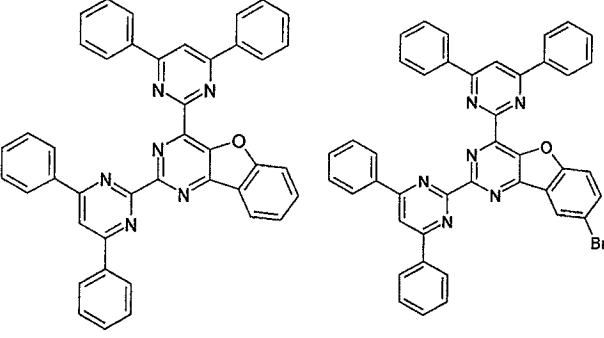
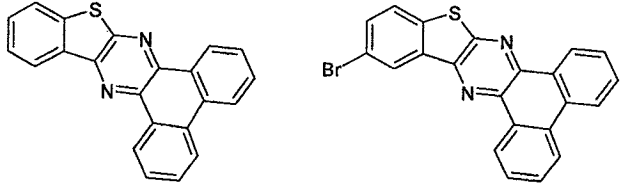
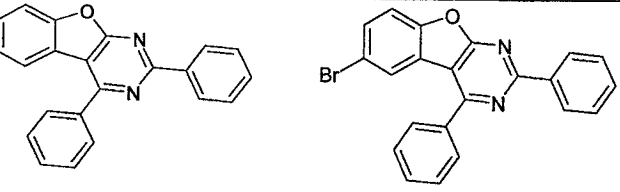
b) 8-溴-2,4-二苯基苯并[4,5]呋喃并[3,2-d]嘧啶 (8-Bromo-2,4-diphenylbenzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine)

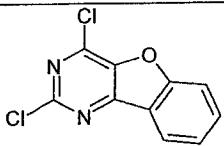
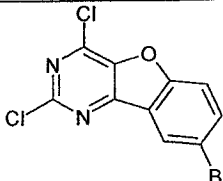
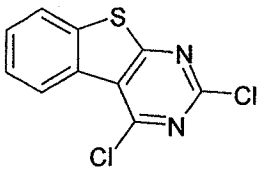
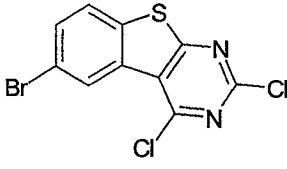
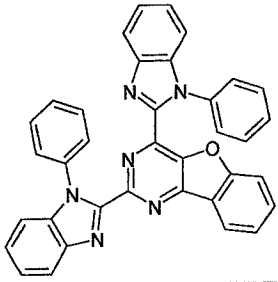
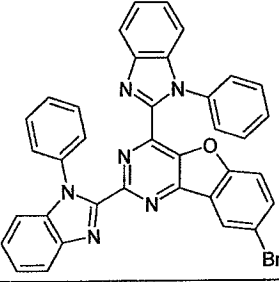
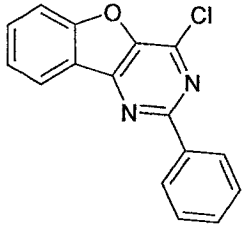
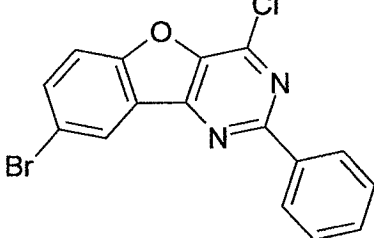
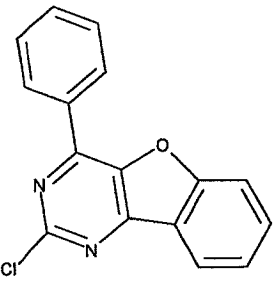
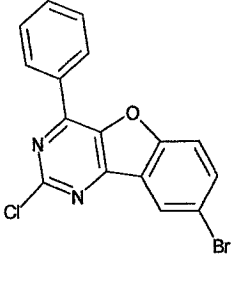


[0181] 將 61 g (190.0 mmol) 之 2,4-二苯基苯并[4,5] 呋喃并[3,2-d]嘧啶 (2,4-diphenylbenzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine) 懸浮於 2000 ml 的乙酸 (100%) 及 2000 ml 的硫酸 (95-98%) 中。將 34 g (190 mmol) 之 NBS 分數部分添加至該懸浮液且該混合物係在黑暗中攪拌 2 小時。然後，添加水/冰，並將固體移出以及以乙醇清洗。殘留物係於甲苯中再結晶。產量為 65 g (163 mmol)，對應於理論值之 86%。

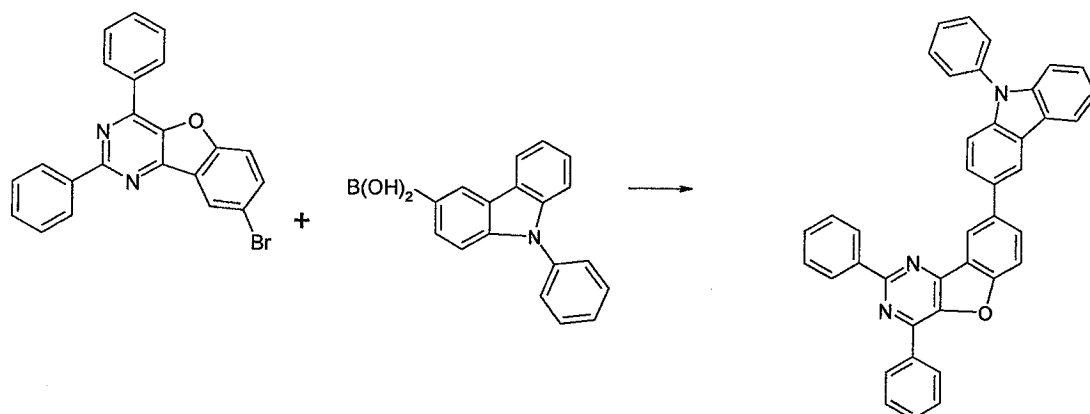
[0182] 下列化合物係以類似方式製備：

	反應物 1	產物	產率
2b			85%
3b			84%

4b		85%
5b		79%
6b		70%
7b		73%
8b		80%
[101537-71-7]		
9b		85%
[129190-79-0]		

10b			69%
[1130455-37-6]			
11b			71%
[76872-40-7]			
12b			74%
13b			67%
[134221-88-8]			
14b			65%
[1801233-17-9]			

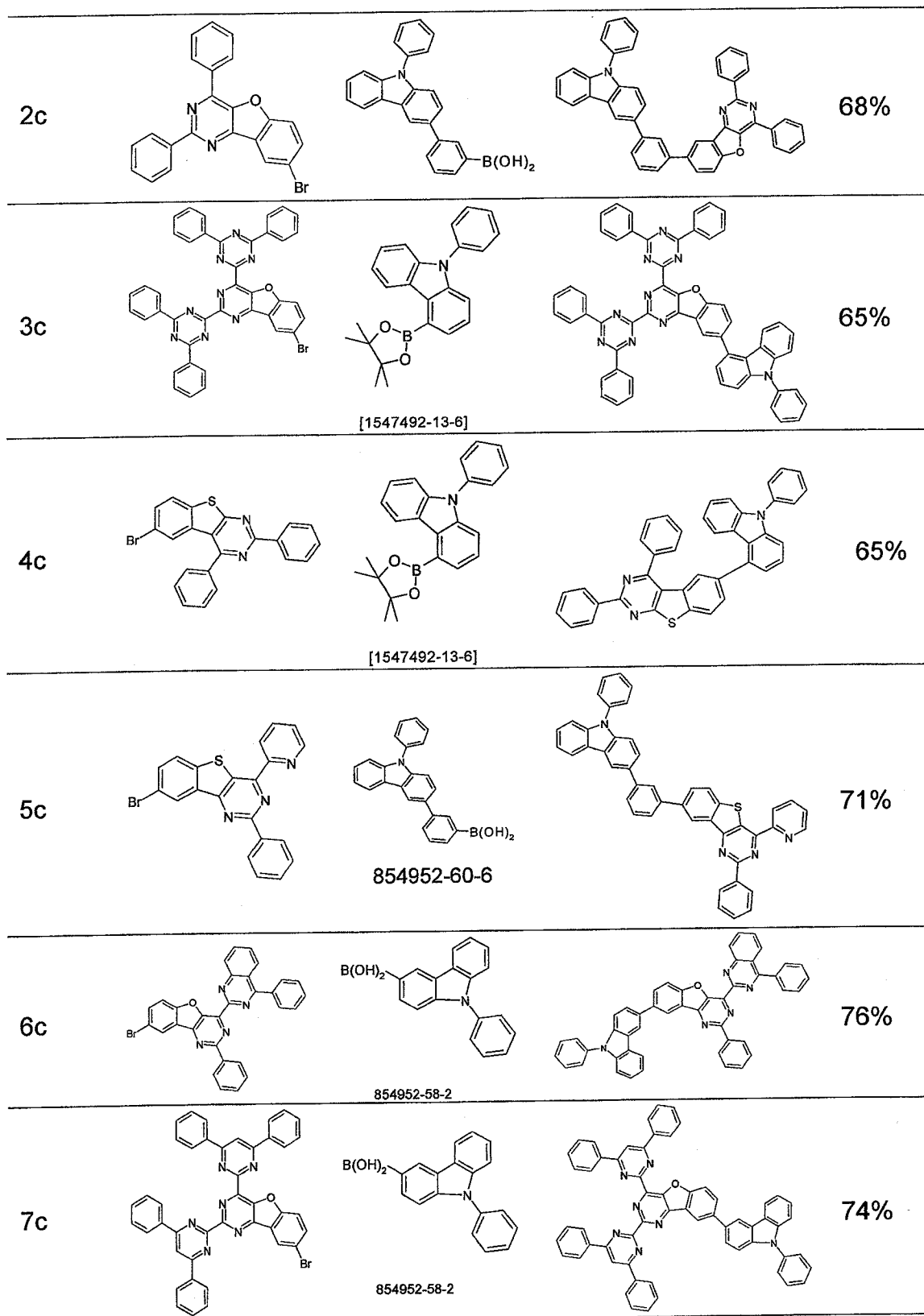
c) 2,4-二苯基-8-(9-苯基-9H-咪唑-3-基)-苯并[4,5]呋喃并[3,2-d]嘧啶 (2,4-Diphenyl-8-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-benzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine)

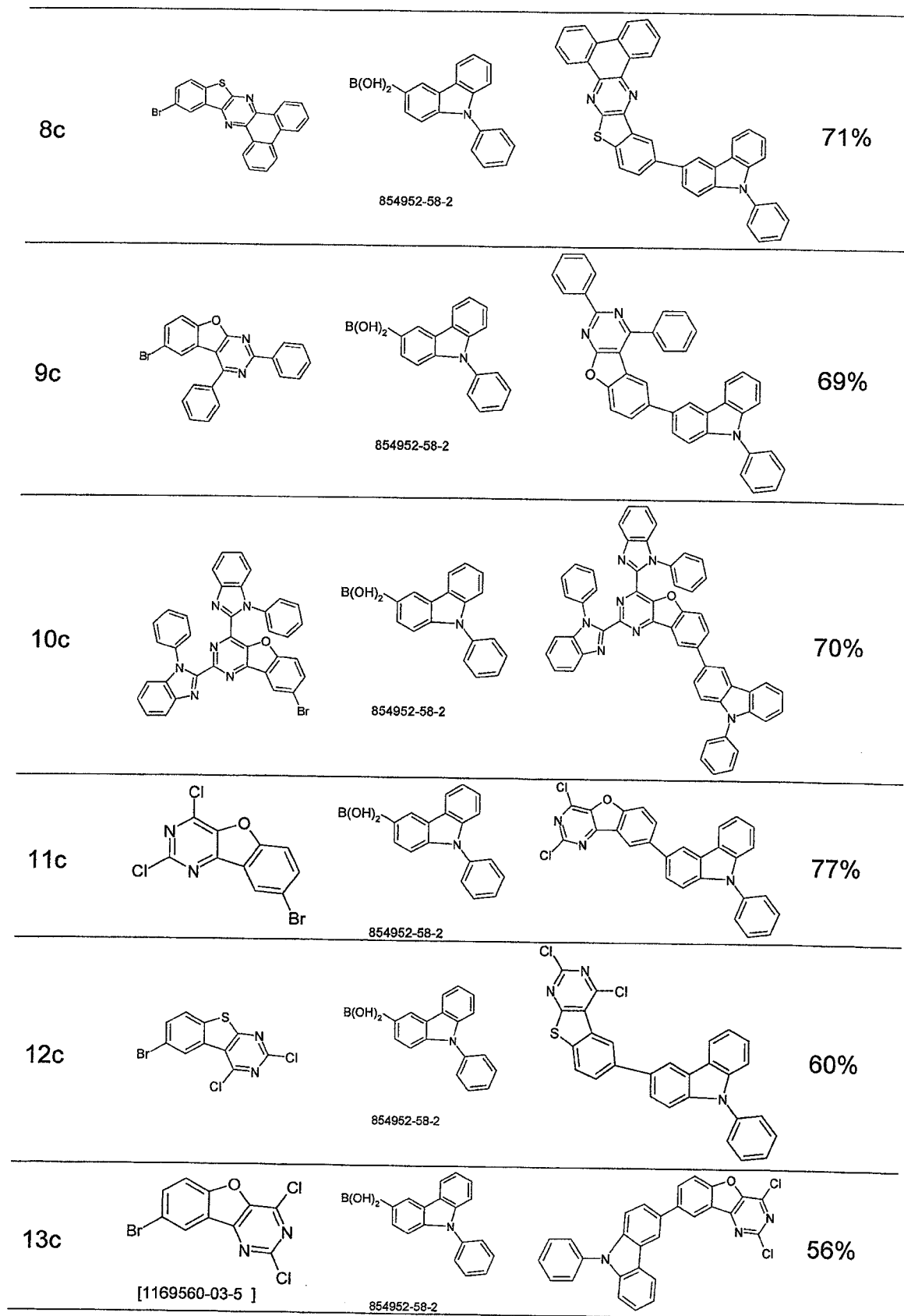


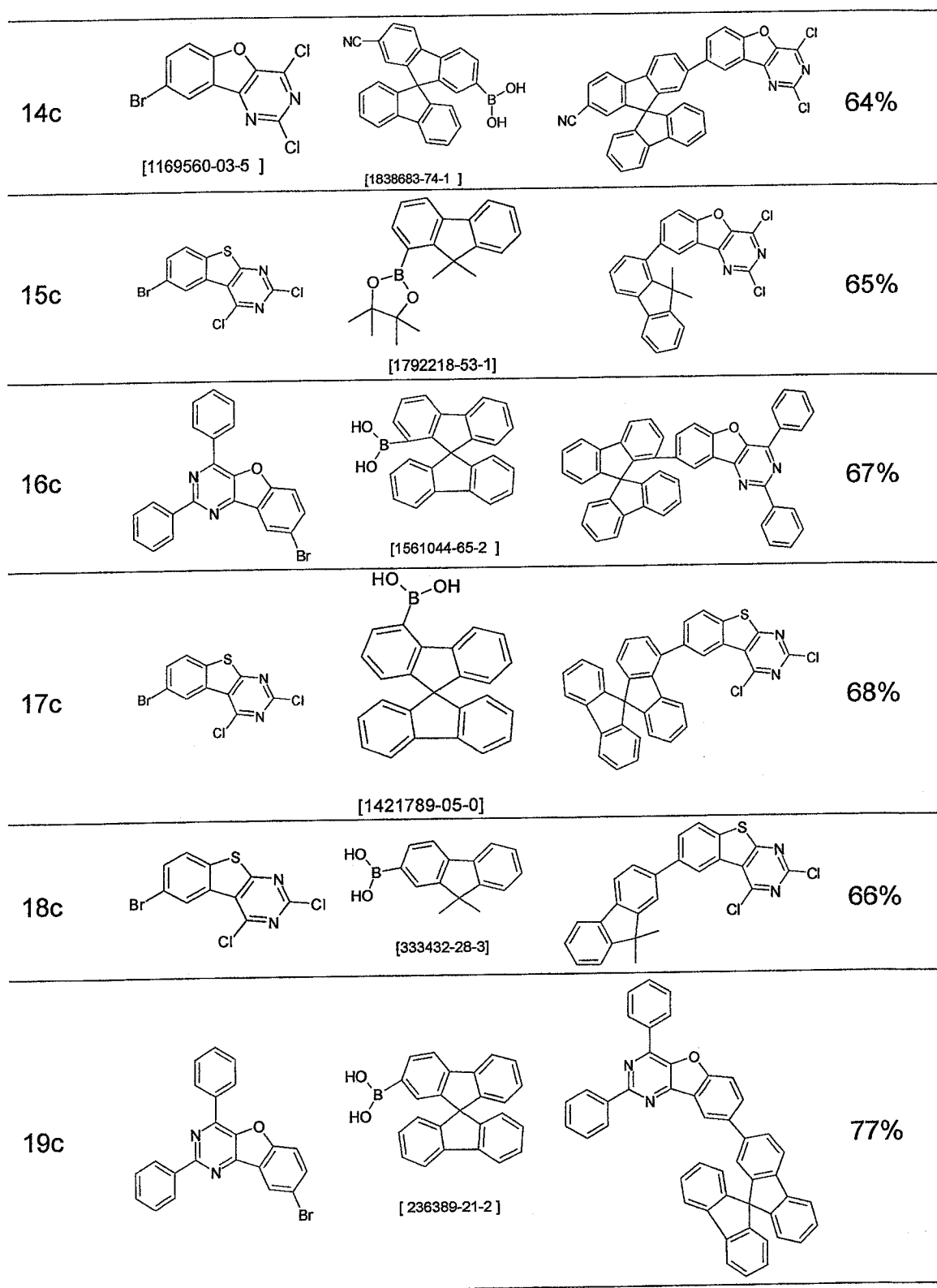
[0183] 將 62 g (156 mmol) 之 8-溴-2,4-二苯基苯并[4,5]呋喃并[3,2-d]嘧啶 (8-bromo-2,4-diphenylbenzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine)、50 g (172 mmol) 之 N-苯基呋唑-3-硼酸 (N-phenylcarbazole-3-boronic acid) 及 36 g (340 mmol) 之碳酸鈉懸浮於 1000 ml 的乙二醇二胺醚及 280 ml 的水中。於該懸浮液中添加 1.8 g (1.5 mmol) 之肆(三苯基膦)鈀(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))，並在回流下加熱反應混合物 16 小時。冷卻之後，將有機相移出，經由矽膠過濾然後濃縮至乾燥。產物係經由管柱層析術在矽膠上用甲苯/庚烷 (1:2) 純化，及最終在高度真空下 ($p=5 \times 10^{-7}$ mbar) 昇華 (純度 99.9%)。產量為 60 g (106 mmol)，對應於理論值之 69%。

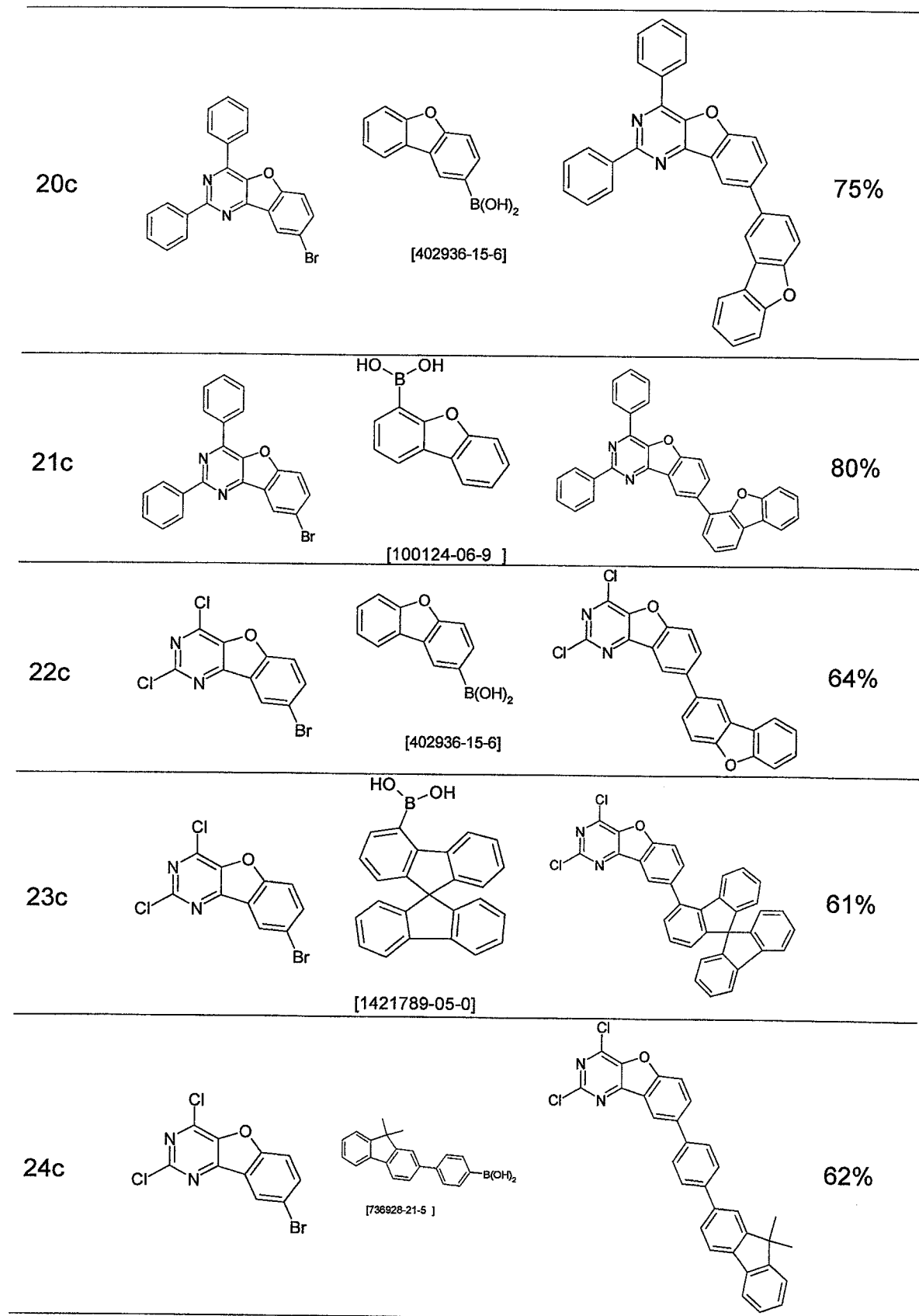
[0184] 以類似方式製備下列化合物：

	反應物 1	反應物 2	產物	產率
1c				65%



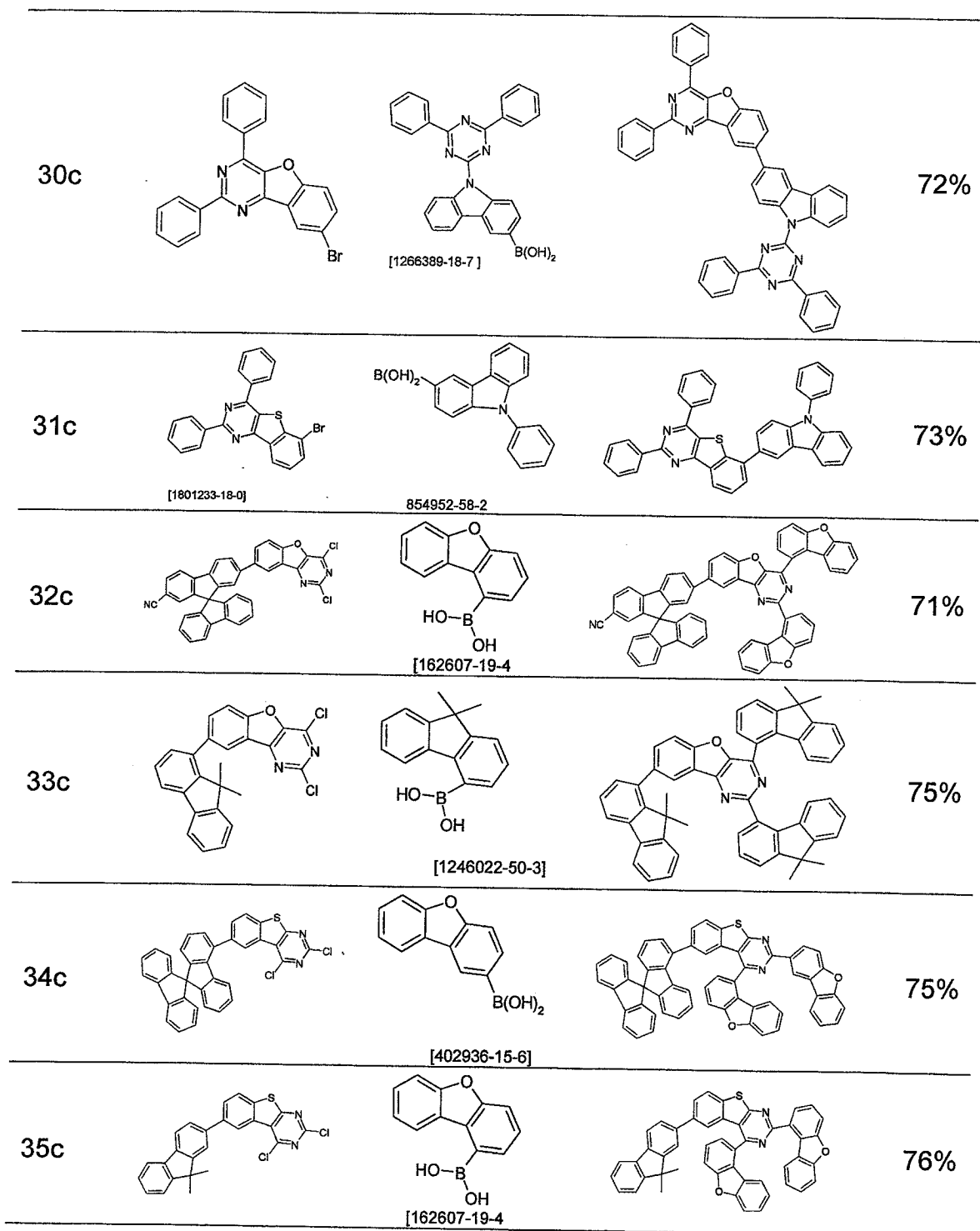


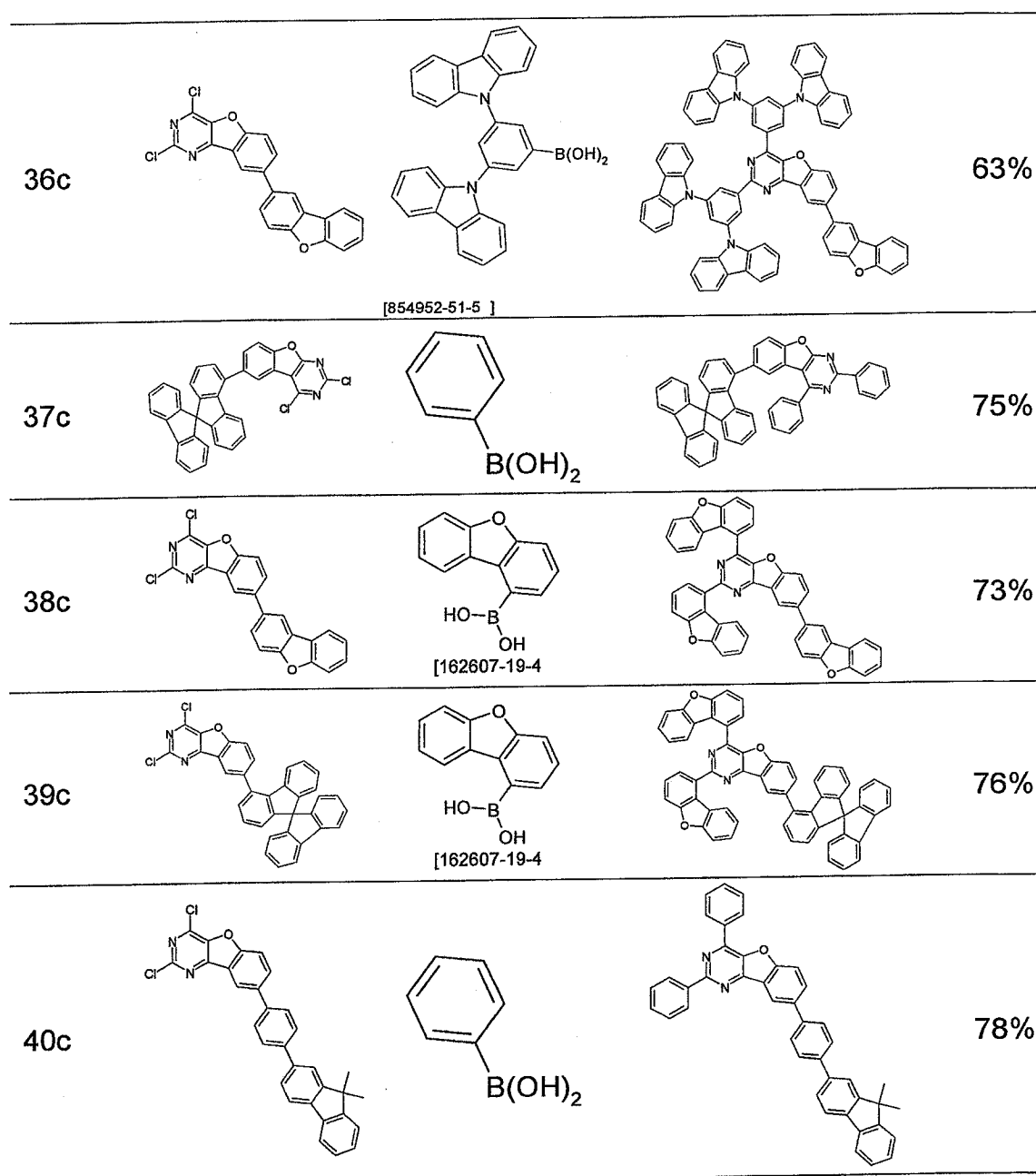




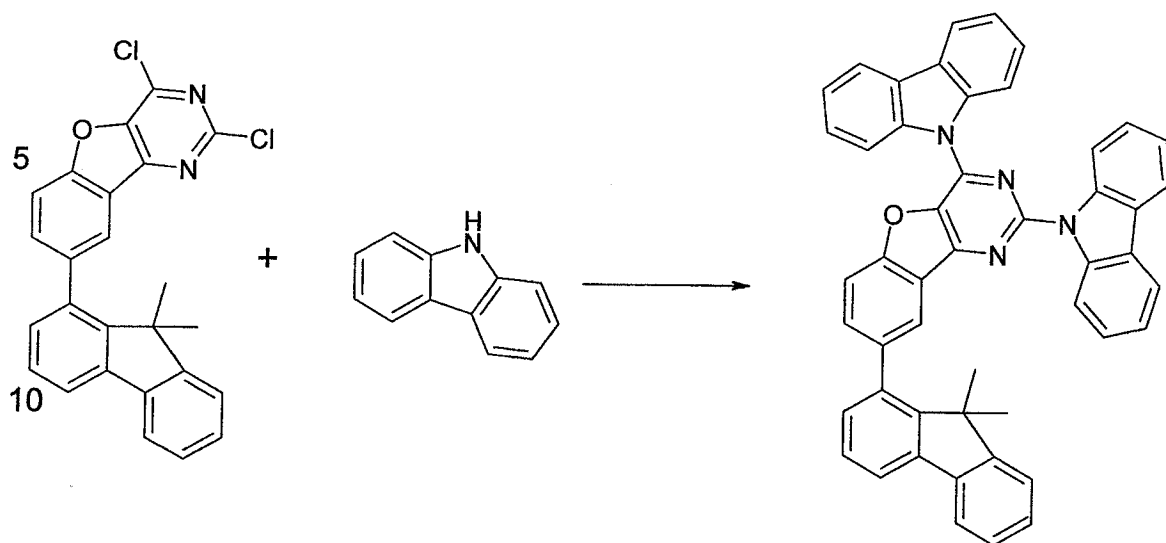
[0185] 以類似方式，使用**11c**至**17c**以及**12c**至**18c**以及**22c**至**24c**來製備下列化合物：

	反應物 1	反應物 2	產物	產率
25c				72%
26c				74%
27c				68%
28c				66%
29c				64%





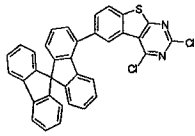
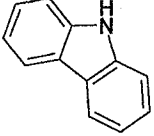
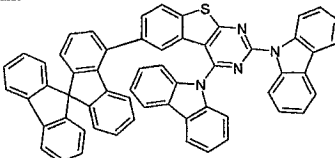
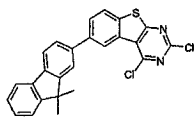
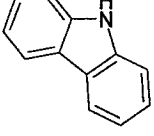
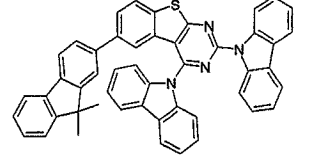
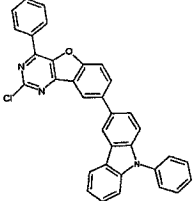
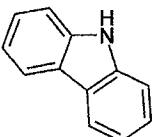
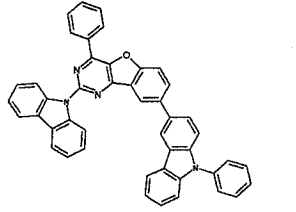
d) 2,4-雙(咪唑-9-基)-8-[2-亞乙-(Z)-基-3,3-二甲基-1-亞丙-2-烯-(Z)-基二氫茛-4-基]苯并[4,5]呋喃并[3,2-d]嘧啶
 (2,4-Bis(carbazol-9-yl)-8-[2-eth-(Z)-ylidene-3,3-dimethyl-1-prop-2-en-(Z)-ylideneindan-4-yl]benzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine)



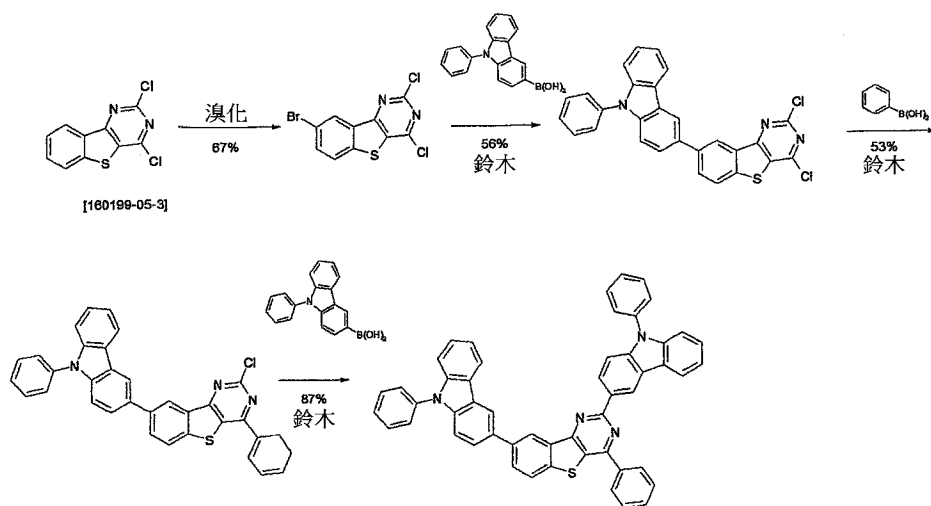
[0186] 將 53 g (147 mmol) 之 2,4-二氯-8-(9,9-二甲基-9H-芴-1-基) 苯并 [4,5] 呋喃并 [3,2-d] 嘧啶 (2,4-dichloro-8-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-1-yl)benzo[4,5]furo[3,2-d]pyrimidine) 及 24 g (147 mmol) 之 9H-吲哚於 600 ml 之甲苯中的經除氣溶液 (degassed solution) 用 N_2 飽和 1 小時。之後先於該溶液中添加 2.09 ml (8.6 mmol) 之 $P(tBu)_3$ ，然後 1.38 g (6.1 mmol) 之乙酸鈣 (II)，然後是 17.7 g (185 mmol) 之 $NaOtBu$ (呈固態添加)。反應混合物係在回流下加熱 1 小時。冷卻至室溫後，小心添加 500 ml 之水。水相 (aqueous phase) 係以 3×50 ml 之甲苯清洗，於 $MgSO_4$ 乾燥，並在減壓下移除溶劑。之後，粗製產物 (crude product) 係藉由層析術使用矽膠並用庚烷/乙酸乙酯 (20/1) 純化。殘留物係自甲苯再結晶，及最終在高度真空 ($p=5 \times 10^{-6}$ mbar) 下昇華。

[0187] 產量為 67 g (95 mmol)，對應於理論值之 78%。

[0188] 以類似方式，可獲得下列化合物：

	反應物 1	反應物 2	產物	產率
1d				75%
2d				70%
3d				73%

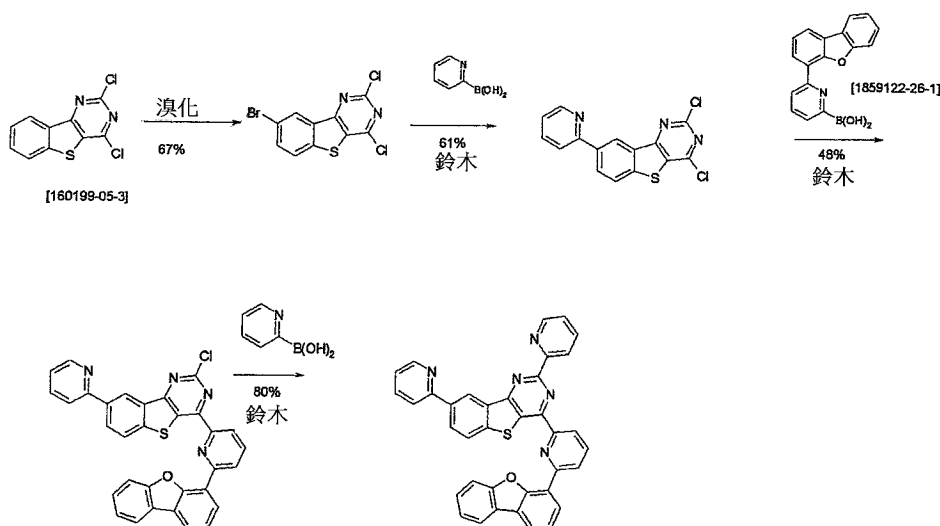
e) 4-苯基-2,8-雙-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)苯并[4,5]噻吩并[3,2-d]-嘧啶 (4-Phenyl-2,8-bis-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)benzo[4,5]thieno[3,2-d]-pyrimidine)(**1e**):



[0189] 以與方法b類似方式將2,4-二氯苯并[4,5]噻吩并[3,2-d]嘧啶(2,4-Dichlorobenzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidine)溴化(brominate)，然後與方法c類似經由鈴木(Suzuki)作用與苯基咔唑硼酸(phenylcarbazoleboronic

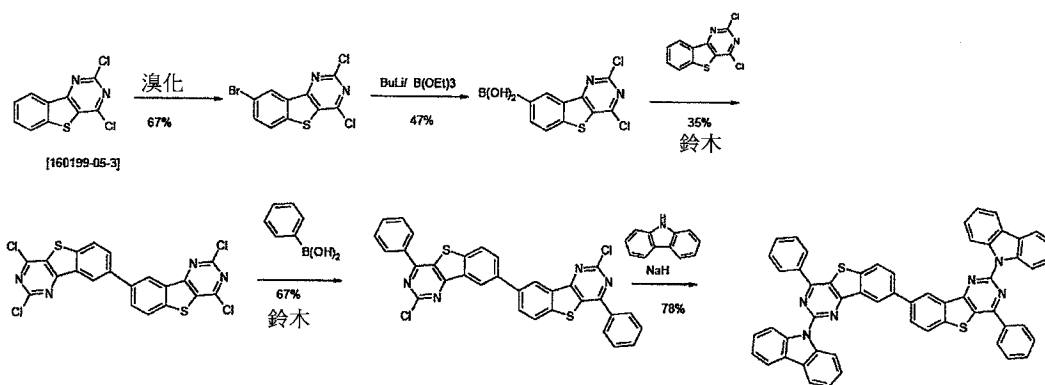
acid)反應，然後再次以與方法c類似之方式，先與苯基硼酸(phenylboronic acid)及最終與苯基咪唑硼酸反應。

f)4-(6-二苯并呋喃-4-基-吡啶-2-基)-2,8-二(吡啶-2-基)-苯并[4,5]噻吩并[3,2-d]嘧啶(4-(6-Dibenzofuran-4-yl-pyridin-2-yl)-2,8-di(pyridin-2-yl)-benzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidine)(1f)



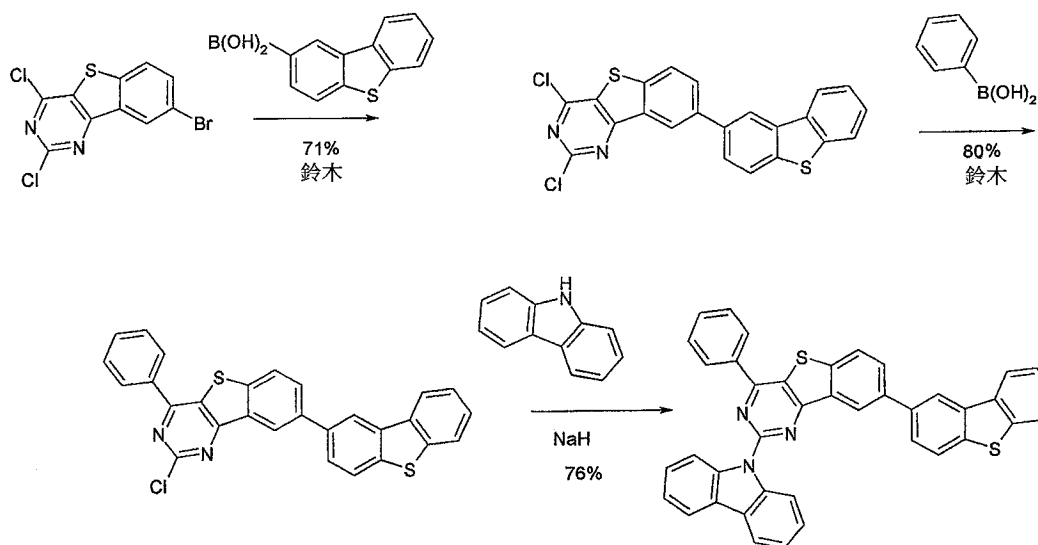
[0190] 係根據上述e)所詳細說明之方法進行製備。

g)2,2'-雙(咪唑-9-基-4,4'-二苯基-[8,8']雙[苯并[4,5]噻吩并[3,2-d]嘧啶基])(2,2'-Bis(carbazol-9-yl-4,4'-diphenyl-[8,8']bi[benzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidinyl))



[0191] 以與方法 **b** 類似方式將 2,4-二氯苯并[4,5]噻吩并[3,2-d]嘧啶 (2,4-Dichlorobenzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidine) 溴化，然後用 **BuLi** 及硼酸三乙酯轉化成對應的硼酸。然後以與方法 **c** 類似方式進行偶合，以產生對應之二聚物，然後又以與方法 **c** 類似方式先與苯基硼酸反應及最終經由親核取代 (nucleophilic substitution) 藉由與 **NaH** 及咪唑反應而轉化成目標分子。

j) 2-咪唑-9-基-8-二苯并噻吩-2-基-4-苯基苯并[4,5]噻吩并[3,2-d]嘧啶 (2-Carbazol-9-yl-8-dibenzothiophen-2-yl-4-phenylbenzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidine)



[0192] 根據前文 g) 中所述之程序進行製備。

OLED之製造

[0193] 在如下實施例 C1 至 I13 (見表 1 及 2) 中，呈現各種不同 OLED 之資料。

[0194] **實例 C1 至 I13 之前置處理:** 塗有厚度為 50 nm 之結構化 ITO (銻錫氧化物) 的玻璃板係在塗布之前使用氧電漿 (oxygen plasma)、然後藉由氬電漿 (argon plasma) 處理。此等經電漿處理之玻璃板形成其上施加 OLED 之基板。

[0195] 該等 OLED 基本上具有以下之層結構: 基板 / 電洞注入層 (HIL) / 電洞傳輸層 (HTL) / 電子阻擋層 (EBL) / 發射層 (EML) / 隨意的 (optional) 電洞阻擋層 (HBL) / 電子傳輸層 (ETL) / 隨意的電子注入層 (EIL) 及最後為陰極。陰極係由厚度為 100 nm 之鋁層形成。OLED 之確切結構可見於表 1。OLED 製造所需之材料係示於表 3。

[0196] 所有材料係於真空槽 (vacuum chamber) 中藉熱

蒸鍍(thermal vapour deposition)施加。在該情況下，發射層(emission layer)始終由至少一基質材料(主體材料)及藉由共蒸發(co-evaporation)以特定體積比例添加至基質材料的發射摻雜劑(emitting dopant)(發射體(emitter))組成。以如IC5:IC3:TEG2(55%:35%:10%)形式提供的細節於此處意指材料IC5於該層中之存在比例(體積計)為55%，IC3之存在比例為35%及TEG2之存在比例為10%。類似的，電子傳輸層亦可由兩種材料之混合物組成。

[0197] OLED係以標準方式定性(characterize)。基於此目的，測定電致發光光譜(electroluminescence spectra)、電流效率(current efficiency)(測量為cd/A)、功率效率(power efficiency)(測量為lm/W)及外部量子效率(external quantum efficiency)(EQE，測量為百分比)(為耀度(luminance)之函數)(由電流-電壓-耀度特徵(IUL特徵)計算，採藍伯特發光特性(Lambertian emission characteristics))，以及使用壽命。電致發光光譜係於1000 cd/m²之耀度測定，以及自其計算CIE 1931 x及y色坐標(colour coordinate)。在表2中之參數U1000係指耀度為1000 cd/m²所需之電壓。最後，EQE1000係指於操作耀度為1000 cd/m²之外部量子效率。使用壽命LT所界定之時間為在那之後以固定電流操作的過程中之耀度便從起始耀度降至某比例L1。表2中L0；j0=4000 cd/m²及L1=70%之數值意指LT欄中所給之使用壽命所對應的時間為在那之後起始耀度(starting luminance)便從4000 cd/m²降至2800 cd/m²。

類似地， $L0$ ； $j0=20 \text{ mA/cm}^2$ 且 $L1=80\%$ 意指在以 20 mA/cm^2 操作過程中，在時間 LT 之後，耀度便降至其起始值的80%。

[0198] 各種OLED之數據係收集於表2中。實施例C1至C4為根據先前技術之比較例；實施例I1至I13顯示本發明之OLED的數據。

[0199] 下文係詳細闡明一些實施例，以說明本發明之OLED的優點。

在磷光OLED中使用本發明之材料

[0200] 本發明之材料當用於OLED之發射層(EML)時提供優於先前技術之顯著改良，特別是在使用壽命方面。

[0201] 透過使用本發明之化合物3d、1e、1f及15a，可達到令使用壽命比先前技術提高約20%至30%(實施例I1與C1之比較；實施例I2與C2之比較；實施例I3與C3之比較；實施例I4與C4之比較)。

表1：OLED之結構

實施例	HIL 厚度	HTL 厚度	EBL 厚度	EML 厚度	HBL 厚度	ETL 厚度	EIL 厚度
C1	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	PA1:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
C2	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	PA2:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
C3	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	PA3:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
C4	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	PA4:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I1	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	3d:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I2	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	1e:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I3	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	1f:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I4	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	15a:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I5	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	11a:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--

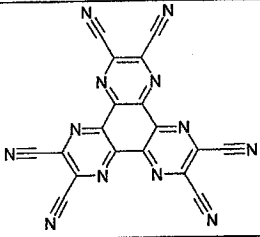
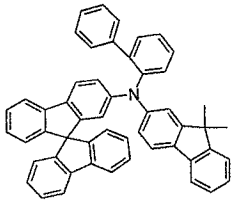
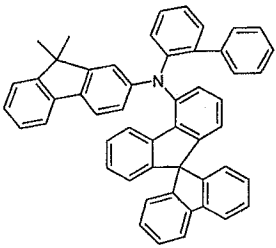
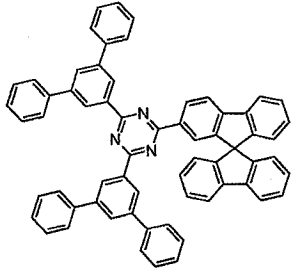
I6	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	12a:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I7	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	9c:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I8	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	1c:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I9	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	39c:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I10	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	19c:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I11	HATC N 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	27c:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I12	HATC N 5nm	SpMA 1 125nm	SpMA 3 10nm	30c:TER5 (95%:5%) 40nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	--
I13	HATC N 5nm	SpMA1 235nm	SpMA3 20nm	9c:IC3:TE G2 (45%:45%: 10%) 30nm	--	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	--

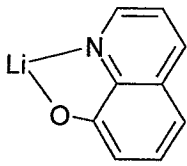
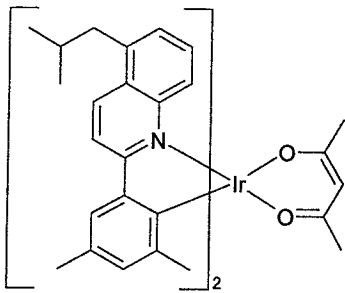
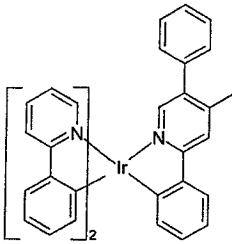
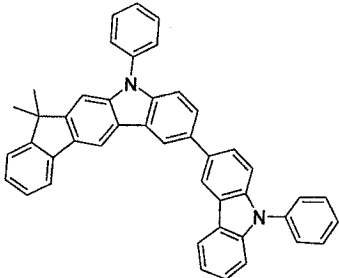
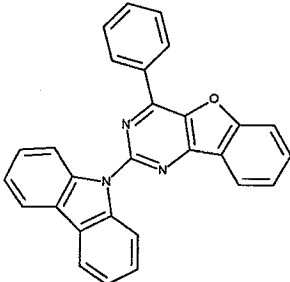
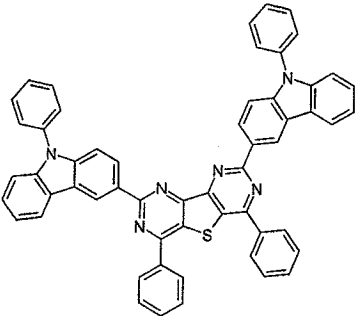
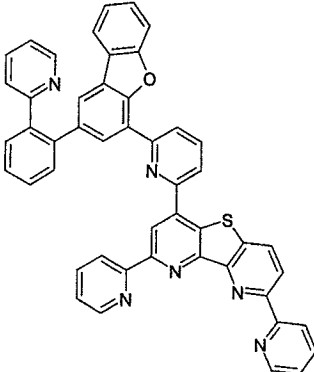
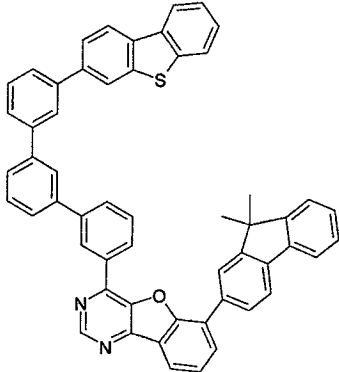
表2：OLED之數據

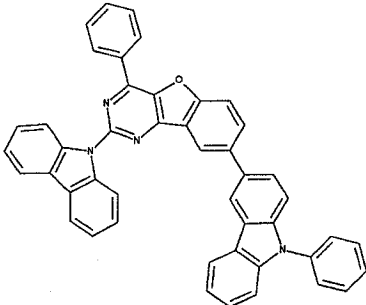
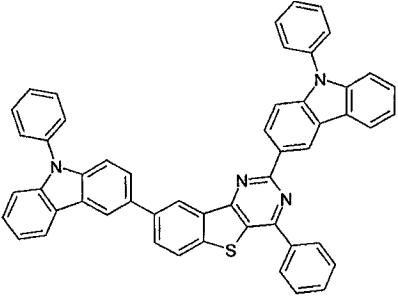
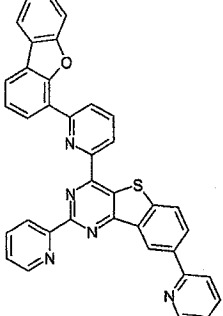
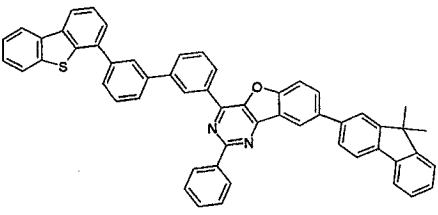
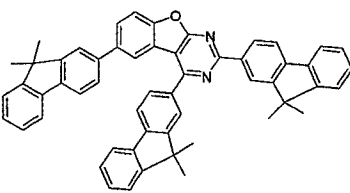
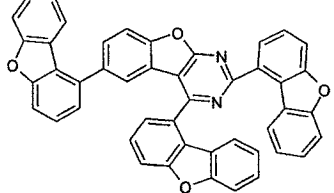
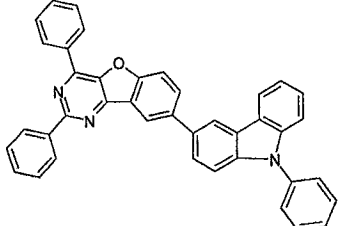
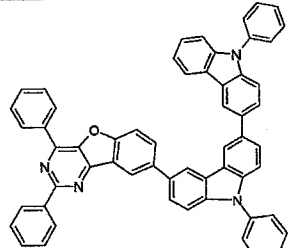
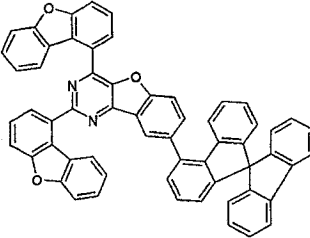
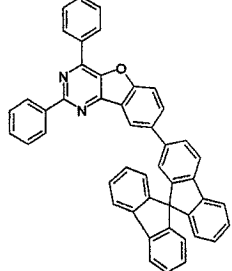
實施例	U1000 (V)	EQE 1000	CIE x/y, 於 1000 cd/m ²	Lo; jo	L1 %	LD (h)
C1	3.5	22.2 %	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	45
C2	3.6	21.6%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	40
C3	3.7	22.2%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	5
C4	3.7	22.4%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	45
I1	3.6	21.8%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	60
I2	3.7	22.4%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	50
I3	3.6	22.1%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	10

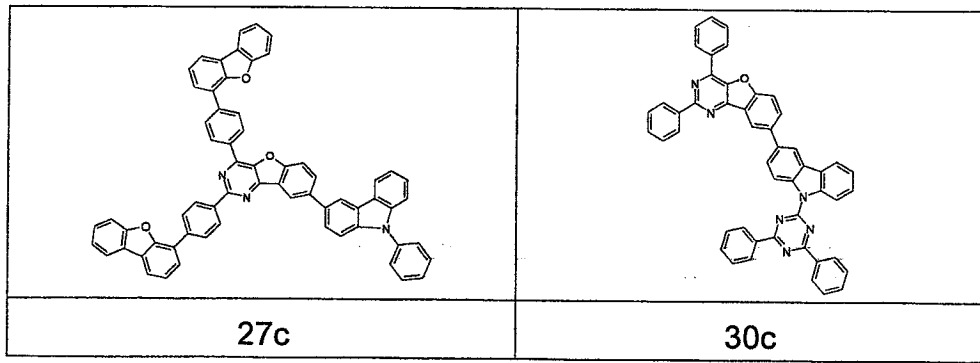
14	3.7	22.3%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	55
15	3.7	22.2%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	50
16	3.8	22.4%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	45
17	3.7	22.5%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	50
18	3.6	22.2%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	60
19	3.8	22.0%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	50
I10	3.8	22.2%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	55
I11	3.8	22.4%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	60
I12	3.4	21.8%	0.67/0.33	50 mA/cm ²	95	45
I13	3.4	20.2%	0.33/0.63	40mA/cm ² ₂	80	120

表3：OLED之材料的結構式

	
HATCN	SpMA1
	
SpMA3	ST2

	
<p>LIQ</p>	<p>TER5</p>
	
<p>TEG2</p>	<p>IC3</p>
	
<p>SdT1</p>	<p>SdT2</p>
	
<p>SdT3</p>	<p>SdT4</p>

	
<p>3d</p>	<p>1e</p>
	
<p>1f</p>	<p>15a</p>
	
<p>11a</p>	<p>12a</p>
	
<p>9c</p>	<p>1c</p>
	
<p>39c</p>	<p>19c</p>





201829414

【發明摘要】

【中文發明名稱】

具有二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩結構的化合物

【英文發明名稱】

Compounds having diazadibenzofuran or diazadibenzothiophene structures

【中文】

本發明記載經咔唑、萸、菲、苯并呋喃及/或苯并噻吩基團取代之二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩衍生物，其尤其用於電子裝置。本發明亦關於製備本發明化合物之方法以及包含該等化合物之電子裝置。

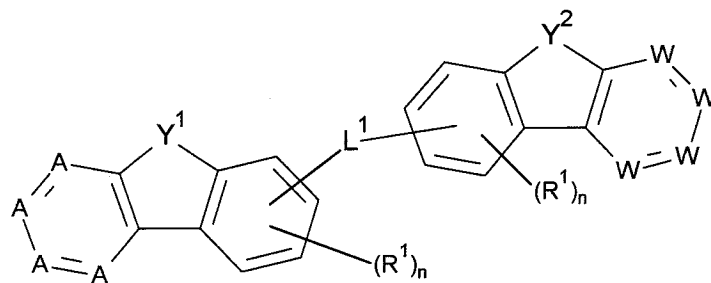
【英文】

The present invention describes diazadibenzofuran or diazadibenzothiophene derivatives substituted by carbazole, fluorene, phenanthrene, benzofuran and/or benzothiophene groups, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

【指定代表圖】無

【代表圖之符號簡單說明】無

【特徵化學式】式(A)

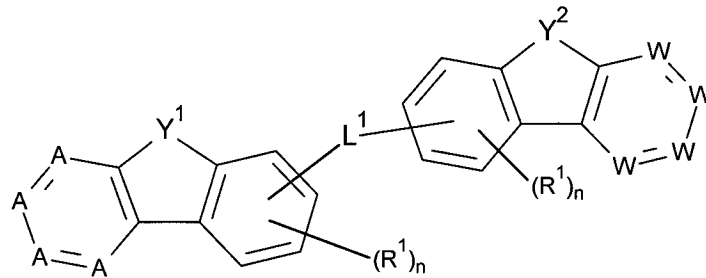


式 (A)

【發明申請專利範圍】

【第1項】

一種包含式(A)之結構的化合物



式(A)

其中，所使用之符號如下：

Y^1 為 O 或 S ；

Y^2 為 $N(Ar)$ 、O、S、 $C(R^1)_2$ 或 $-R^1C=CR^1-$ ；

W 在各情況下係相同或不同，且為 N 或 CR^1 ，較佳為 CR^1 ，其前提係一個環中不多於二個 W 基團為 N ；

L^1 為鍵或具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統 ；

A 在各情況下係相同或不同，且為 N、 CAr^a 或 CAr^b ，其中剛好兩個 A 為由至少一個 CAr^a 或 CAr^b 基團隔開的 N，其前提係若兩個 N 與 A 相鄰則此 A 為 CAr^b ；

Ar 在各情況下係相同或不同，且為具有 5 至 30 個芳族環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統 ；

- Ar^a** 在各情況下係相同或不同，且為具有5至30個芳族環原子及可經一或多個R¹基取代之芳族或雜芳族環系統；
- Ar^b** 在各情況下係相同或不同，且為具有5至30個芳族環原子及可經一或多個R¹基取代之芳族或雜芳族環系統；
- R¹** 在各情況下係相同或不同，且為H、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar¹)₂、N(R²)₂、C(=O)Ar¹、C(=O)R²、P(=O)(Ar¹)₂、P(Ar¹)₂、B(Ar¹)₂、Si(Ar¹)₃、Si(R²)₃，具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其各可經一或多個R²基取代，其中一或多個非相鄰CH₂基團可經-R²C=CR²-、-C≡C-、Si(R²)₂、C=O、C=S、C=NR²、-C(=O)O-、-C(=O)NR²-、NR²、P(=O)(R²)、-O-、-S-、SO或SO₂置換且其中一或多個氫原子可經D、F、Cl、Br、I、CN或NO₂置換，或具有5至40個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其各可經一或多個R²基取代，或具有5至40個芳族環原子且可經一或多個R²基取代之芳氧基或雜芳氧基，或具有5至40個芳族環原子且可經一或多個R²基取代之芳烷基或雜芳烷基，或此等系統之組合；同時，二或更多個取代基R¹亦可一起形成單環或多環之脂族或芳族環系統；

Ar^1 在各情況下係相同或不同，且為具有5至30個芳族環原子及可經一或多個非芳族 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結至同一矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的兩個 Ar^1 基亦可能經由藉單鍵之橋接 (bridge) 或選自下列之橋接而接合在一起： $\text{B}(\text{R}^2)$ 、 $\text{C}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 $\text{C}=\text{C}(\text{R}^2)_2$ 、 O 、 S 、 $\text{S}=\text{O}$ 、 SO_2 、 $\text{N}(\text{R}^2)$ 、 $\text{P}(\text{R}^2)$ 及 $\text{P}(=\text{O})\text{R}^2$ ；

R^2 在各情況下係相同或不同，且為 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 $\text{B}(\text{OR}^3)_2$ 、 CHO 、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^3$ 、 $\text{CR}^3=\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{OR}^3$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_3$ 、 $\text{P}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{B}(\text{R}^{13})_2$ 、 $\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、 NO_2 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)_2$ 、 OSO_2R^3 、 OR^3 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^3$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^3$ ，具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其各可經一或多個 R^3 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基團可經 $-\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3-$ 、 $-\text{C}=\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^3$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^3-$ 、 NR^3 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO 或 SO_2 置換且其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換，或具有5至40個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統，或具有5至40個芳族環原子且可經一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基，或此等系統之組

合；同時，二或更多個相鄰 R^2 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族或芳族環系統；

R^3 在各情況下係相同或不同，且為 H、D、F 或具有 1 至 20 個碳原子之脂族、芳族及 / 或雜芳族烴基，其中氫原子亦可經 F 置換；同時，二或更多個相鄰 R^3 取代基亦可一起形成單環或多環之脂族或芳族環系統；

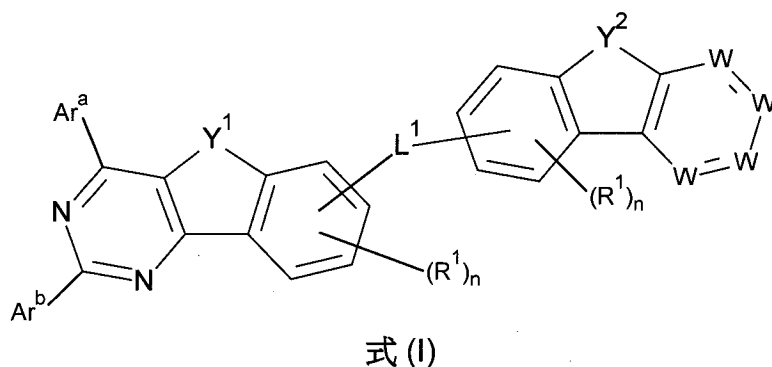
n 為 0、1、2 或 3；

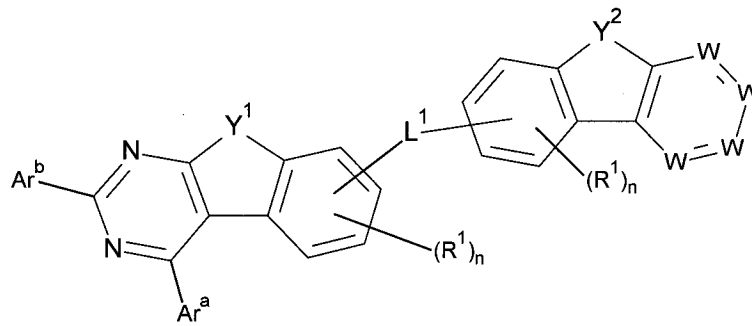
其前提係

若 Y^2 基團為 N(Ar)、O 或 S， Ar^a 基不包含任何呋唑基，包括可鍵結至 Ar^a 基之 R^1 、 R^2 及 R^3 取代基。

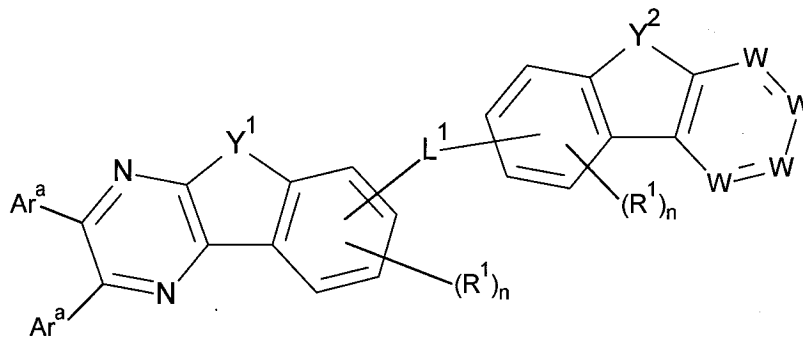
【第 2 項】

如申請專利範圍第 1 項之化合物，其包含式 (I)、(II) 或 (III) 之結構





式 (II)

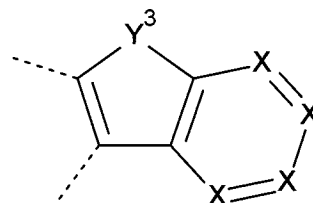


式 (III)

其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 Y^2 、 L^1 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第 1 項中所給之定義，較佳者為式 (I) 及 / 或 (II) 之結構。

【第 3 項】

如申請專利範圍第 1 或 2 項之化合物，其中，兩個相鄰 W 基團各為 CR^1 且一起形成式 (W-1) 之基團



式 (W-1)

其中

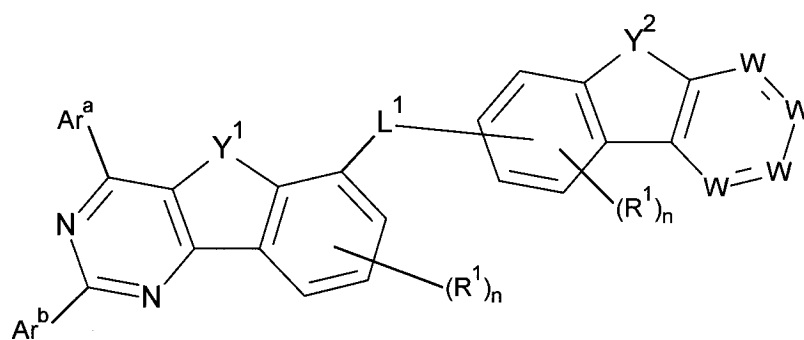
Y^3 為 $N(Ar)$ 、 O 、 S 或 $C(R^2)_2$ ，較佳為 $C(R^2)_2$ ，

X 在各情況下係相同或不同，且為 N 或 CR^2 ，較佳為 CR^2 ，其前提係一個環中不多於二個 X 基團為 N ，其中 R^2 具有如申請專利範圍第 1 項中所給之定義，以及

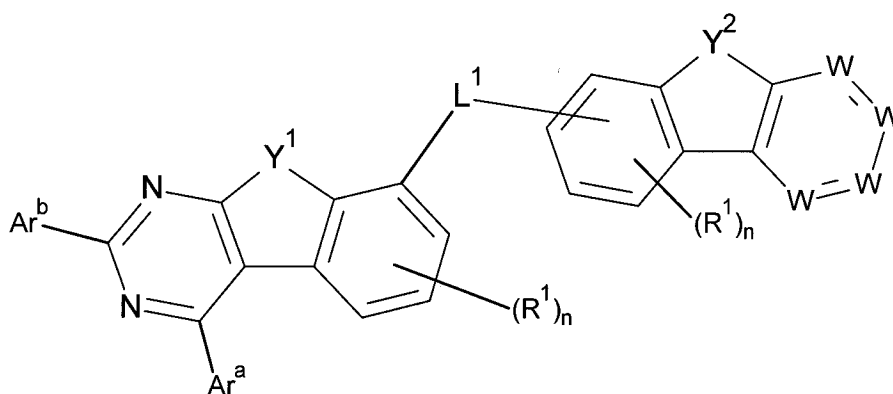
虛線表示至相鄰原子之鍵，其中包含式 (I)、(II) 或式 (III) 之結構的化合物較佳係每個結構具有不多於一個式 (W-1) 之基團。

【第 4 項】

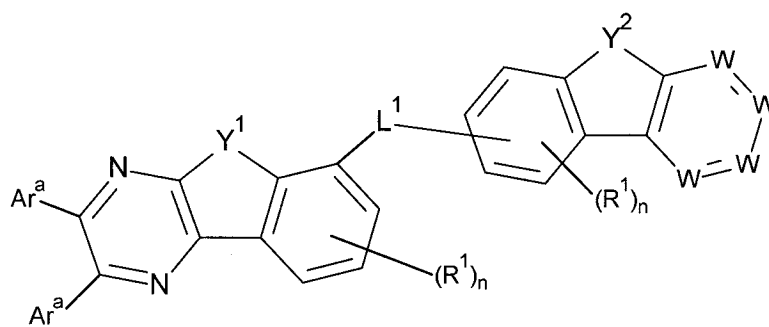
如申請專利範圍第 1 或 2 項之化合物，其中，該化合物包含式 (Ia)、(IIa) 及 / 或 (IIIa) 之結構中的至少一者



式 (Ia)



式 (IIa)

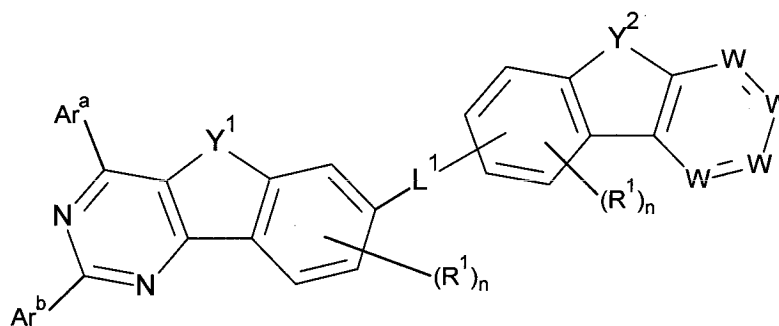


式 (IIIa)

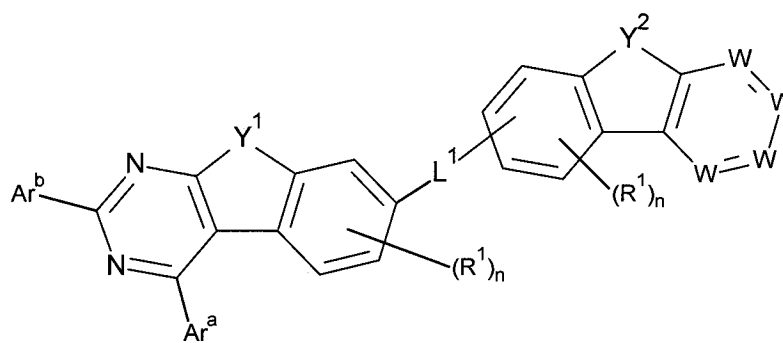
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第 1 或 2 項中所給之定義，較佳者為式 (Ia) 及 / 或 (IIa) 之結構。

【第 5 項】

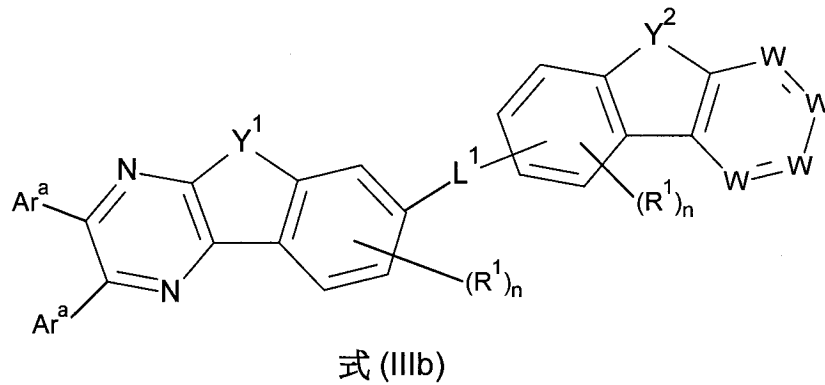
如申請專利範圍第 1 或 2 項之化合物，其中，該化合物包含式 (Ib)、(IIb) 及 / 或 (IIIb) 之結構中的至少一者



式 (Ib)



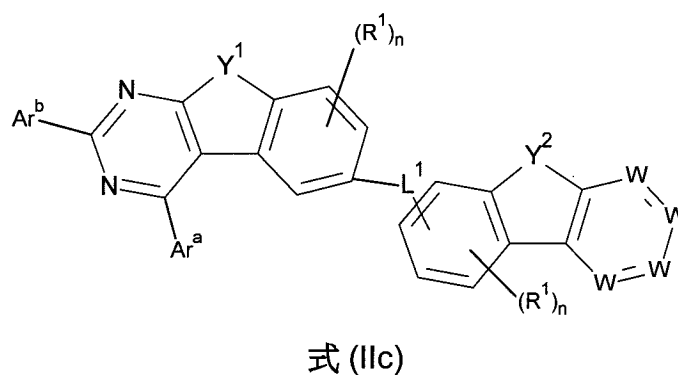
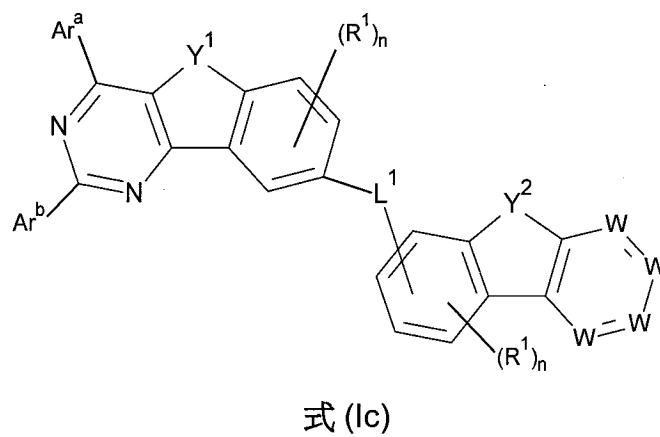
式 (IIb)

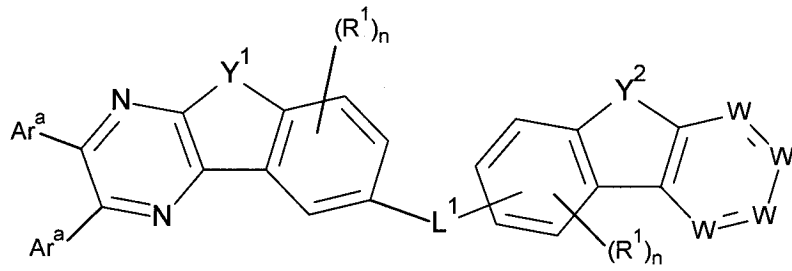


其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第 1 或 2 項中所給之定義，較佳者為式 (Ib) 及 / 或 (IIb) 之結構。

【第 6 項】

如申請專利範圍第 1 或 2 項之化合物，其中，該化合物包含式 (Ic)、(IIc) 及 / 或 (IIIc) 之結構中的至少一者



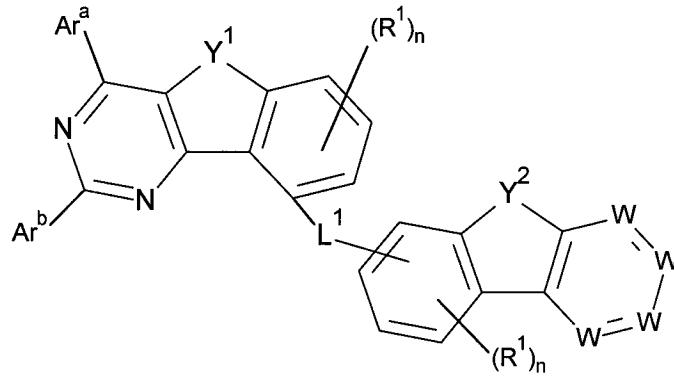


式 (IIIc)

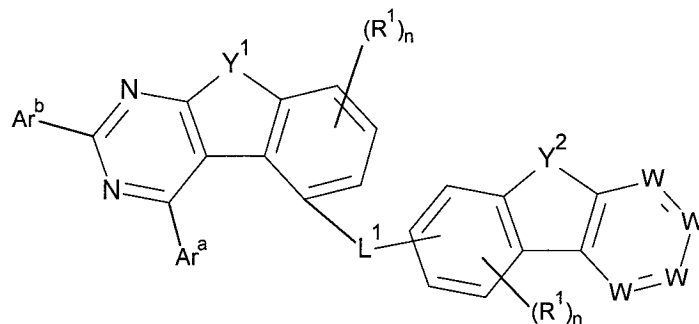
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第1或2項中所給之定義，較佳者為式(Ic)及/或(IIc)之結構。

【第7項】

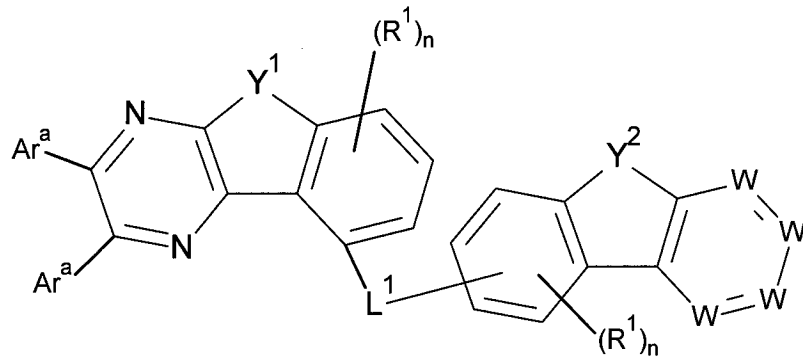
如申請專利範圍第1或2項之化合物，其中，該化合物包含式(Id)、(IIId)及/或(IIIId)之結構中的至少一者



式 (Id)



式 (IIId)

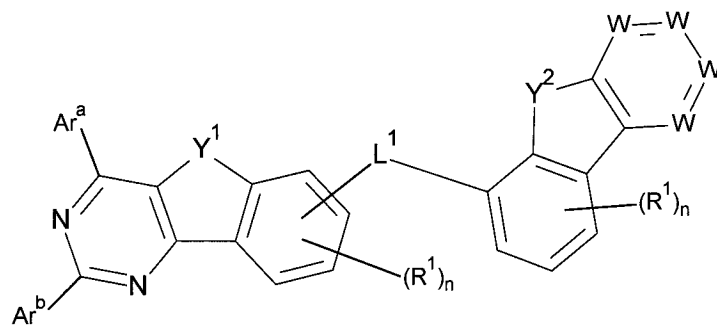


式 (IIIId)

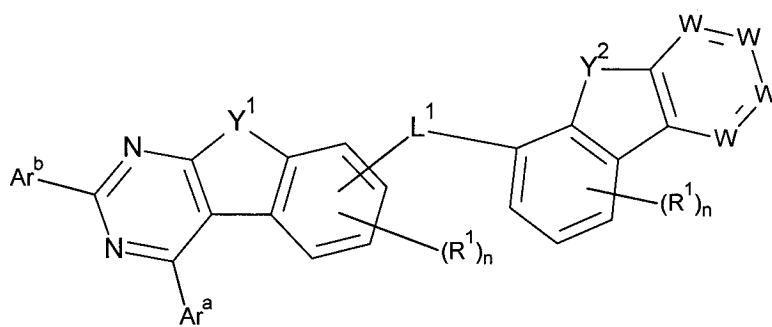
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第 1 或 2 項中所給之定義，較佳者為式 (Id) 及 / 或 (IIId) 之結構。

【第 8 項】

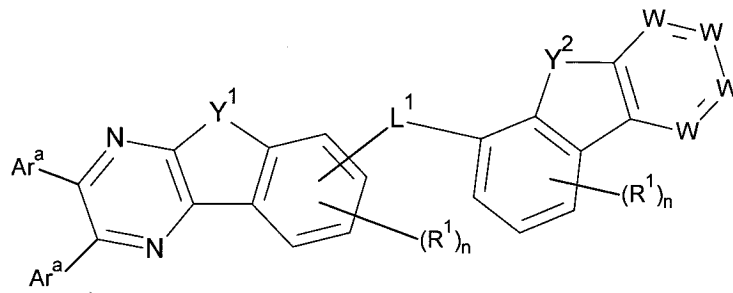
如申請專利範圍第 1 或 2 項之化合物，其中，該化合物包含式 (Ie)、(IIe) 及 / 或 (IIIe) 之結構中的至少一者



式 (Ie)



式 (IIe)

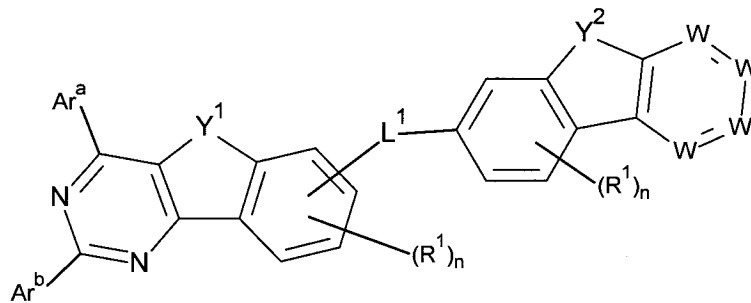


式 (IIIe)

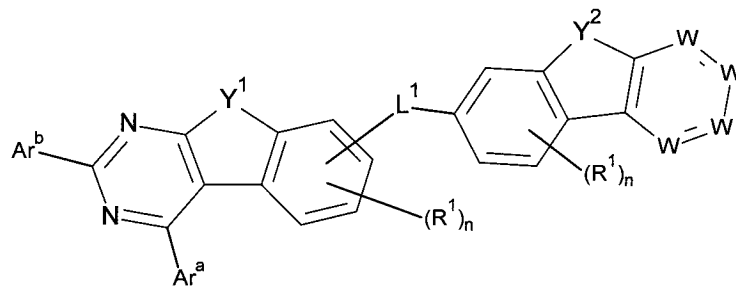
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第 1 或 2 項中所給之定義，較佳者為式 (Ie) 及 / 或 (IIe) 之結構。

【第 9 項】

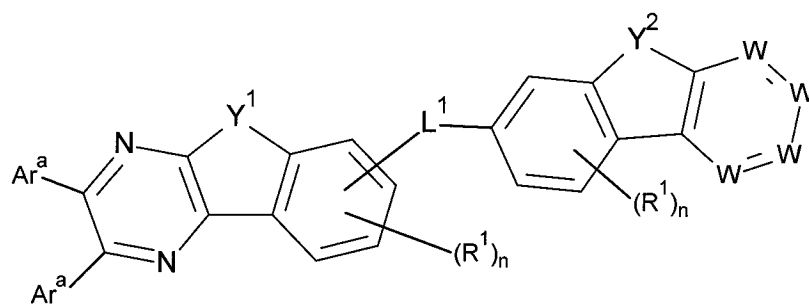
如申請專利範圍第 1 或 2 項之化合物，其中，該化合物包含式 (If)、(IIIf) 及 / 或 (IIIIf) 之結構中的至少一者



式 (If)



式 (IIIf)

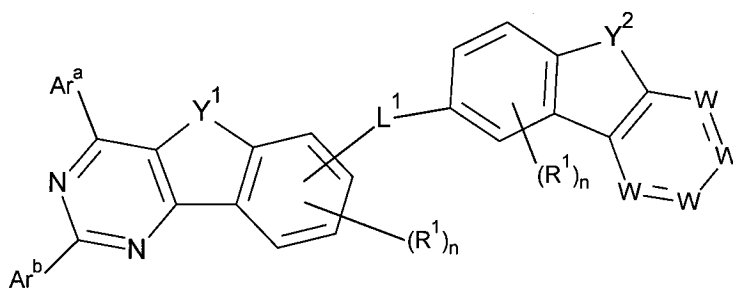


式 (III f)

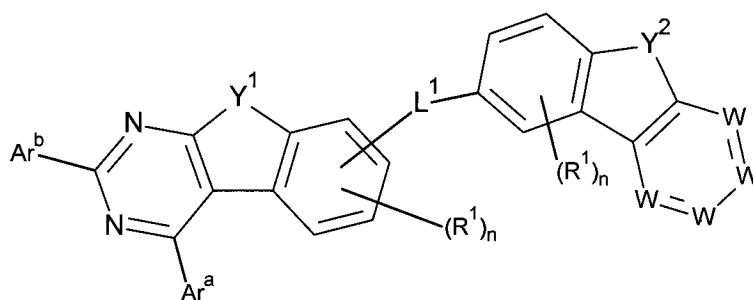
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第1或2項中所給之定義，較佳者為式 (If)及/或 (II f)之結構。

【第10項】

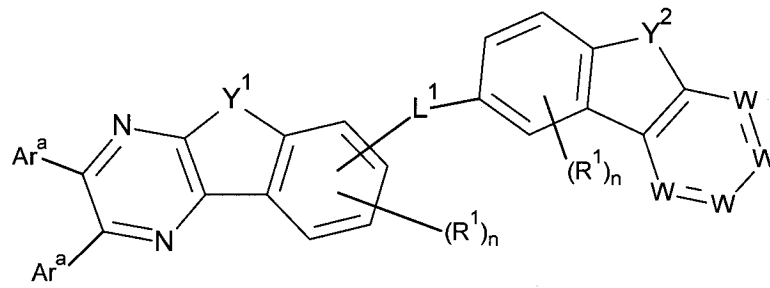
如申請專利範圍第1或2項之化合物，其中，該化合物包含式 (Ig)、(II g)及/或 (III g)之結構中的至少一者



式 (I g)



式 (II g)

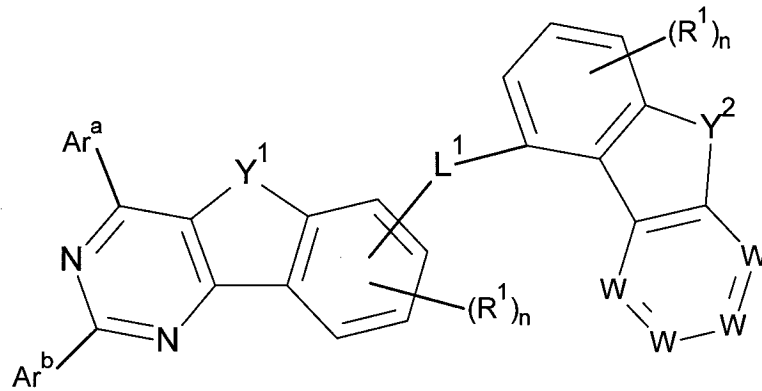


式 (IIIg)

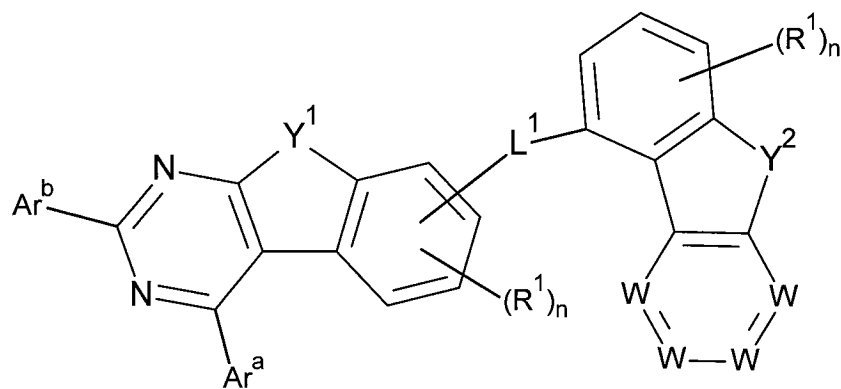
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第1或2項中所給之定義，較佳者為式(Ig)及/或(IIg)之結構。

【第11項】

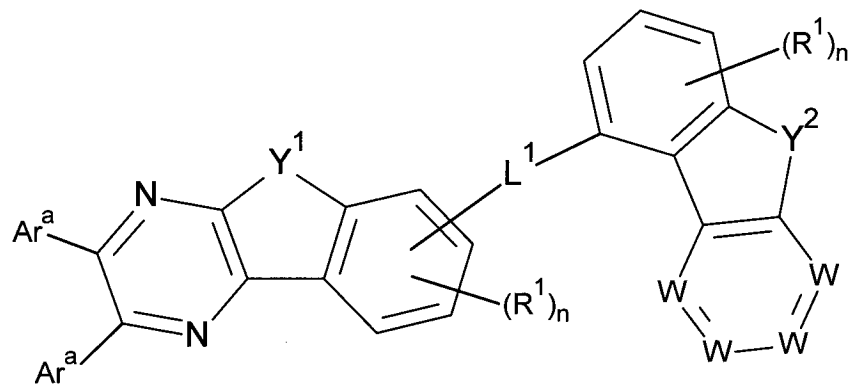
如申請專利範圍第1或2項之化合物，其中，該化合物包含式(Ih)、(IIh)及/或(IIIh)之結構中的至少一者



式 (Ih)



式 (IIh)



式(IIIh)

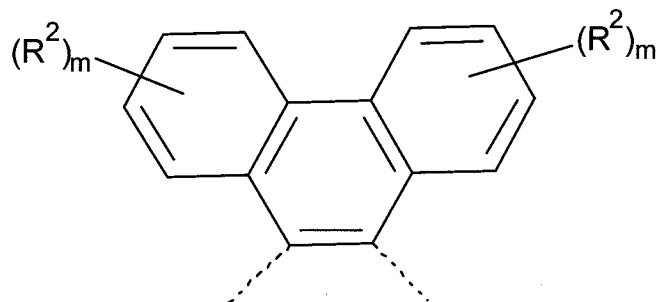
其中，符號 Ar^a 、 Ar^b 、 Y^1 、 L^1 、 Y^2 、 R^1 、 n 及 W 具有如申請專利範圍第1或2項中所給之定義，較佳者為式(Ih)及/或(IIh)之結構。

【第12項】

如申請專利範圍第1或2項之化合物，其中，符號 Y^2 為 $C(R^1)$ ，且 R^1 在各情況下係相同或不同，且為具有5至40個芳族環原子及在各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統。

【第13項】

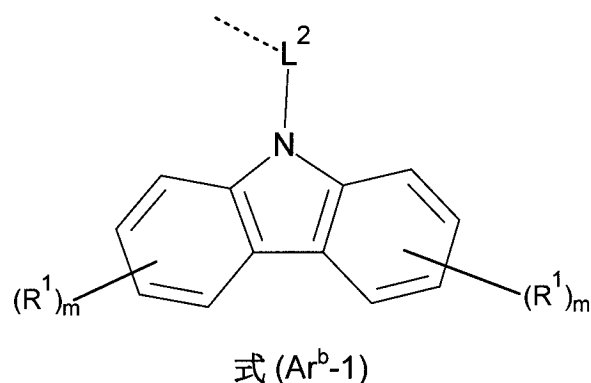
如申請專利範圍第1或2項之化合物，其中，符號 Y^2 為式(Y^2-2)之基團

式(Y^2-2)

其中，虛線表示至相鄰原子之鍵， R^2 具有如申請專利範圍第1項所給之定義，且 m 為0、1、2、3或4。

【第14項】

如申請專利範圍第1或2項之化合物，其中， Ar^b 基團表示式(Ar^b-1)之基團



其中， L^2 為鍵或具有5至30個芳族環原子且可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統，符號 R^1 具有如申請專利範圍第1項所給之定義， m 為0、1、2、3或4，且虛線表示鍵。

【第15項】

一種寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其含有一或更多如申請專利範圍第1至14項中之一或多項的化合物，其中，存在該化合物至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物的一或更多鍵。

【第16項】

一種組成物，其包含至少一如申請專利範圍第1至14項中之一或多項的化合物及/或如申請專利範圍第15項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物以及至少一選自由下列所

組成之群組的另外的化合物：螢光發射體、磷光發射體、主體材料、基質材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞傳導材料、電洞注入材料、電子阻擋材料以及電洞阻擋材料。

【第17項】

一種調配物，其包含至少一如申請專利範圍第1至14項中之一或多項的化合物、如申請專利範圍第15項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物及/或至少一如申請專利範圍第16項之組成物以及至少一溶劑。

【第18項】

一種製備如申請專利範圍第1至14項中之一或多項的化合物或如申請專利範圍第15項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物的方法，其特徵在於，在偶合反應中，包含至少一個二氮雜二苯并呋喃或二氮雜二苯并噻吩基團之化合物係接合至包含至少一個呋啉、萸、菲、苯并呋喃及/或苯并噻吩基之基團。

【第19項】

一種如申請專利範圍第1至14項中之一或多項的化合物、或如申請專利範圍第15項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或如申請專利範圍第16項之組成物的用途，係用於電子裝置中作為主體材料、基質材料、電子傳輸材料、電子注入材料及/或電洞阻擋材料。

【第20項】

一種電子裝置，其包含至少一如申請專利範圍第1至

14項中之一或多項的化合物、或如申請專利範圍第15項之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或如申請專利範圍第18項之組成物，其中，該電子裝置較佳係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置、有機積體電路、有機場效電晶體、有機薄膜電晶體、有機發光電晶體、有機太陽能電池、有機光學偵測器、有機感光器、有機場淬滅裝置 (organic field quench device)、發光電化學電池 (light-emitting electrochemical cell) 以及有機雷射二極體。