



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I735186 B

(45) 公告日：中華民國 110 (2021) 年 08 月 01 日

- (21) 申請案號：109109035 (22) 申請日：中華民國 104 (2015) 年 04 月 29 日
- (51) Int. Cl. :            *C07D405/14 (2006.01)*            *C07D409/14 (2006.01)*  
                               *C07D471/04 (2006.01)*            *C07D487/04 (2006.01)*  
                               *C07D491/048(2006.01)*            *C09K11/06 (2006.01)*  
                               *H01L51/00 (2006.01)*            *A61N5/06 (2006.01)*
- (30) 優先權：2014/04/30      歐洲專利局            14001525.6
- (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)；葛羅斯曼 托拜亞斯 GROSSMANN,  
                               TOBIAS (DE)；傑許 安佳 JATSCH, ANJA (DE)；艾伯利 湯馬士 EBERLE,  
                               THOMAS (DE)；克洛伯 喬納斯 KROEBER, JONAS VALENTIN (DE)；普夫路  
                               姆 克里斯多夫 PFLUMM, CHRISTOF (DE)；多貝曼瑪拉 拉斯 DOBELMANN-  
                               MARA, LARS (DE)
- (74) 代理人：林志剛
- (56) 參考文獻：  
                               CN    103517906A
- 審查人員：王嘉薇
- 申請專利範圍項數：17 項      圖式數：0      共 101 頁

(54) 名稱

電子裝置用材料

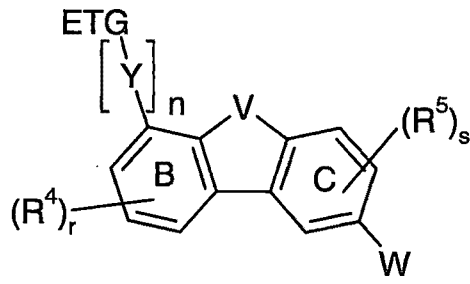
(57) 摘要

本申請案係關於具有呈特定空間排列的官能取代基之化合物、包含彼之裝置、及其製備和用途。

The application relates to compounds having functional substituents in a specific spatial arrangement, to devices comprising same, and to the pre-paration and use thereof.

特徵化學式：

式(1)



式(1)

## 發明摘要

【發明名稱】(中文/英文)

電子裝置用材料

MATERIALS FOR ELECTRONIC DEVICES

【中文】

本申請案係關於具有呈特定空間排列的官能取代基之化合物、包含彼之裝置、及其製備和用途。

【英文】

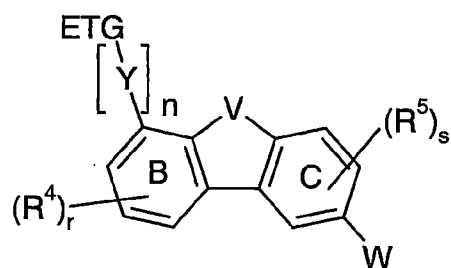
The application relates to compounds having functional substituents in a specific spatial arrangement, to devices comprising same, and to the preparation and use thereof.

【代表圖】

【本案指定代表圖】：無

【本代表圖之符號簡單說明】：無

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：式(1)



式(1)

# 發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

## 【發明名稱】(中文/英文)

電子裝置用材料

MATERIALS FOR ELECTRONIC DEVICES

## 【技術領域】

本發明關於具有電子傳導和電洞傳導基團之特定排列的環狀化合物、其在電子裝置之用途、其製備及電子裝置。

## 【先前技術】

其中使用有機半導體作為功能材料的有機電致發光裝置(例如 OLED-有機發光二極體、或 OLEC - 有機發光電化學電池)之結構係說明於例如 US 4539507、US 5151629、EP 0676461 和 WO 98/27136 中。除了螢光發光體，在此所使用的發光材料越來越多為呈現磷光的有機金屬錯合物(M. A. Baldo 等人，Appl. Phys. Lett. 1999，75，4-6)。為了量子力學的原因，使用有機金屬化合物作為磷光發光體，有可能使能量及功率效率增加多達四倍。通常，在呈現單重態發光之 OLED 的情況以及在呈現三重態發光之 OLED 的情況皆仍需要改良，特別是關於效率、操作電壓及壽命。這對於在相對短波範圍內發光(即綠色且特別是藍色)之 OLED 尤其如此。

有機電致發光裝置的性質不只受所使用的發光體決定。特別地，所使用的其他材料，諸如主體和基質材料、電洞阻擋材料、電子傳輸材料、電洞傳輸材料和電子-或激子阻擋材料，在此也特別重要。此等材料的改良可導致電致發光裝置的顯著改良。

根據先前技術，尤其使用酮類(例如 根據 WO 2004/093207 或 WO 2010/006680)或氧化膦類(例如 根據 WO 2005/003253)作為磷光發光體之基質材料。根據先前技術之其他基質材料為三吡啶類(例如 WO 2008/056746、EP 0906947、EP 0908787、EP 0906948)。

關於螢光 OLED，根據先前技術使用特別是縮合芳族化合物(特別是蔥衍生物)作為主體材料，特別是用於藍色發光之電致發光裝置，例如 9,10-雙(2-萘基)蔥(US 5935721)。WO 03/095445 和 CN 1362464 揭示用於 OLED 之 9,10-雙(1-萘基)蔥衍生物。其他蔥衍生物係揭示於 WO 01/076323、WO 01/021729、WO 2004/013073、WO 2004/018588、WO 2003/087023 或 WO 2004/018587 中。以經芳基取代之芘類和萘類為主之主體材料係揭示於 WO 2004/016575 中。以苯並蔥衍生物為主之主體材料係揭示於 WO 2008/145239 中。關於高品質應用，理想的是具有可用之改良主體材料。

先前技術揭示含有一或多個吡啶基團之化合物於電子裝置的用途，例如在 WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527 或 WO 2008/086851。

先前技術此外揭示含有一或多個茛並呔唑基團之化合物於電子裝置的用途，例如在 WO 2010/136109 和 WO 2011/000455 中。

先前技術此外揭示含有一或多個缺電子雜芳族六員環之化合物於電子裝置的用途，例如在 WO 2010/015306、WO 2007/063754 和 WO 2008/056746 中。

WO 2009/069442 揭示經缺電子雜芳族基(例如吡啶、嘧啶或三吡)高取代之三環化合物(諸如呔唑、二苯並呔喃或二苯並噻吩)。該三環化合物不經電洞傳導基團(即富電子基團)取代。

JP 2009-21336 揭示經取代之二苯並呔喃類，其係在位置 2 經呔唑取代及在位置 8 經三吡取代。

WO 2011/057706 揭示作為基質材料的二苯並噻吩類和二苯並呔喃類，其中一些係經取代，其中該等化合物係以特定方式經電子傳導基團及經電洞傳導基團取代。

然而，使用這些材料時和其他材料一樣仍然需要改良，特別是關於裝置的效率和壽命。

### 【發明內容】

本發明之目的因此為提供適合使用於螢光或磷光 OLED 的化合物，例如作為主體材料及/或基質材料或作為電洞傳輸/電子阻擋材料或激子阻擋材料或作為電子傳輸或電洞阻擋材料，且當其使用於 OLED 中時，產生良好的裝置性質並提供對應電子裝置。

令人驚訝地，已發現：更詳細地描述於下的某些化合物達成這些目的且導致有機電致發光裝置的良好性質，特別是有關壽命、效率和操作電壓。本發明因此關於電子裝置，特別是有機電致發光裝置，其包含此類型的化合物，以及關於對應較佳化合物。藉由下式子之化合物中的電子傳導基和電洞傳導基之特定排列來達成令人驚訝的效果。

根據本發明之化合物此外以使彼等能夠在高真空中蒸發而不分解之高溫穩定性為特徵。此性質為有機電子裝置(諸如有機電致發光裝置)之再現性造製的基本先決條件，且特別是對工作壽命有正影響。

根據本發明之化合物也具有高玻璃轉移溫度( $T_g$ )，其關於在製造電子裝置中處理化合物是有利的。化合物的高玻璃轉移溫度也允許化合物使用於薄非晶有機層。

此外，根據本發明之化合物允許在激發態的電荷載體之穩定，並具有足夠高的三重態能量，其代表磷光裝置之重要必備條件。此外，與來自先前技術的化合物相較，本發明之化合物在 OLED 中呈現改良的性能數據。

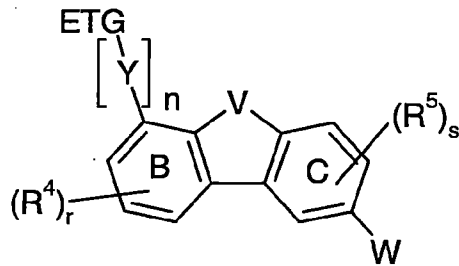
根據本發明之化合物的特色也在於：相較於從先前技術已知的化合物，其經改良之在溶液中的氧化還原穩定性。此簡化了化合物的純化，簡化彼等的處理和改良彼等在用於製備從溶液輔以印刷方法製造有機電子裝置之溶液中的儲存穩定性。

最後，根據本發明之化合物都是以使化合物也能夠從



溶液處理之非常良好的溶解性為其特色。因此實現有機電子裝置之廉價製造。根據本發明之化合物因此也適合於有機電子裝置的大量生產。

本發明因此關於通式(1)之化合物，



式(1)

其中下列適用於所使用的符號及標號：

ETG 為來自缺電子雜芳族基之群組的有機電子傳輸基團，其中該 ETG 較佳為具有 5 至 60 個芳族環原子之雜芳基，其中非常佳的雜原子為 N-原子且非常特佳的 ETG 係選自下列群組：三吡啶類、嘧啶類、吡啶類、吡啶類、喹啉類、苯並咪唑類、喹啉類、異喹啉類和吡啶類且尤佳的 ETG 係選自下列群組：三吡啶類、嘧啶類、吡啶類和吡啶類；ETG 可經一或多個 R<sup>1</sup> 基團取代，該 R<sup>1</sup> 基團在每次出現時可為相同或不同；

W 為傳導電洞之富電子有機基團，其中 W 較佳選自下列之群組：芳基胺類、三芳基胺類、橋聯胺類，其中較佳之橋聯胺類在此為二氫吡啶類、二氫吡啶類、吡啶類和吡啶類、吡啶類、橋聯吡啶類、雙吡啶類、苯並吡啶類、茚並吡啶類和吡啶並吡啶類；W 可經一或多個 R<sup>1</sup>

基團取代，該  $R^1$  基團在每次出現時可為相同或不同；

V 為 O 或 S，較佳為 O；

Y 為二價橋；Y 較佳表示具有 5 至 60 個環原子之芳族或雜芳族環系統；該二價橋 Y 非常佳地具有 5 至 30 個環原子，特佳地具有 5 至 18 個環原子，非常佳地具有 5 至 12 個環原子，尤其地具有 5 至 10 個芳族環原子，更佳地該橋具有精確 6 個環原子及最佳地該橋為伸苯基橋；

n 為 0 或 1，較佳為 0，其中 n 等於 0 意指 ETG 和環 B 彼此以單鍵直接連接；

r 為來自 0、1、2 或 3 的整數，較佳為 0 或 1 及非常佳為 0；

s 為來自 0、1、2 或 3 的整數，較佳為 0 或 1 及非常佳為 0；

$R^1$  在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^2)_2$ 、CN、 $NO_2$ 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(R^2)_2$ 、 $S(=O)R^2$ 、 $S(=O)_2R^2$ 、 $OSO_2R^2$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烯基或炔基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烯基、炔基、烷氧基、烷基烷氧基或烷硫基(彼等各自可經一或多個  $R^2$  基團取代，其中一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $R^2C=CR^2$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $NR^2$ 、O、S 或  $CONR^2$  置換及其中一或多個 H 原子可經 D、F、Cl、Br、I、CN 或  $NO_2$  置換)、或具有 5 至 60

個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下可經一或多個  $R^2$  基團取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基、芳基烷氧基或雜芳氧基(其可經一或多個  $R^2$  基團取代)、或具有 10 至 40 個芳族環原子之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基(其可經一或多個  $R^2$  基團取代)、或此等基團之二或多者的組合或可交聯基 Q; 二或多個相鄰的  $R^1$  基團在此彼此可形成單或多環的脂族或芳族環系統;

$R^2$  在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^3)_2$ 、CN、 $NO_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 $OSO_2R^3$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烯基或炔基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烯基、炔基、烷氧基、烷基烷氧基或烷硫基(彼等各自可經一或多個  $R^3$  基團取代, 其中一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $R^3C=CR^3$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $NR^3$ 、O、S 或  $CONR^3$  置換及其中一或多個 H 原子可經 D、F、Cl、Br、I、CN 或  $NO_2$  置換)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下可經一或多個  $R^3$  基團取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基、芳基烷氧基或雜芳氧基(其可經一或多個  $R^3$  基團取代)、或具有 10 至 40 個芳族環原子之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基(其可經一或多個  $R^3$  基團取代)、或

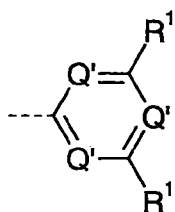
此等基團之二或多者的組合；二或多個相鄰的基團  $R^2$  在此可彼此形成單或多環的脂族或芳族環系統；

$R^3$  在每次出現時相同或不同地為 H、D、F 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂族、芳族及/或雜芳族烴基，其中一或多個 H 原子可經 F 置換；二或多個  $R^3$  取代基在此也可彼此形成單或多環的脂族或芳族環系統；

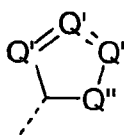
$R^4$ 、 $R^5$  在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^2)_2$ 、CN、 $NO_2$ 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(R^2)_2$ 、 $S(=O)R^2$ 、 $S(=O)_2R^2$ 、 $OSO_2R^2$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烯基或炔基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烯基、炔基、烷氧基、烷基烷氧基或烷硫基。

在本發明之另一較佳實施態樣中，式(1)化合物中之 V 等於 S。

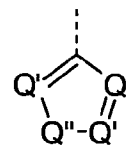
作為 ETG 之較佳缺電子雜芳族基在此係選自下列基團：



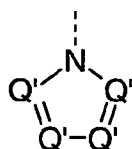
式 (E-1)



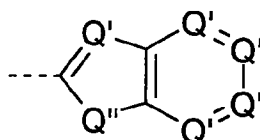
式 (E-2)



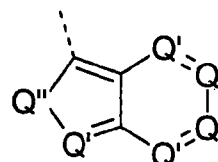
式 (E-3)



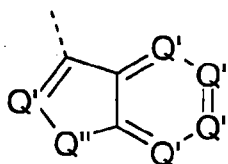
式 (E-4)



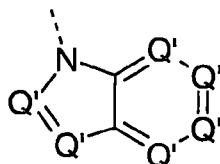
式 (E-5)



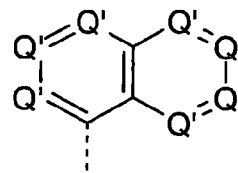
式 (E-6)



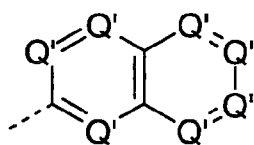
式 (E-7)



式 (E-8)



式 (E-9)



式 (E-10),

其中虛線鍵標記鍵結位置， $R^1$  如上述所定義，及  
 $Q'$  在每次出現時相同或不同地表示  $CR^1$  或  $N$ ，及  
 $Q''$  表示  $NR^1$ 、 $O$  或  $S$ ；

其中至少一個  $Q'$  等於  $N$  及 / 或至少一個  $Q''$  等於  $NR^1$ 。

作為 ETG 之較佳缺電子雜芳族基為：吡啶類、吡啶類、嘧啶類、嗒吡類、1,2,4-三吡類、1,3,5-三吡類、喹啉類、異喹啉類、喹啉、吡啶類、咪啶類、苯並咪啶類、噻啶類、苯並噻啶類、噻啶類或苯並噻啶類，彼等各自可

經  $R^1$  取代。電子傳輸基甚至更佳為吡啶、吡啶、嘧啶、  
 嗒啶或 1,3,5-三吡啶，其經一或多個  $R^1$  基團取代。

含有電子傳輸基之式(1)化合物較佳具有低於  $-1.3 \text{ eV}$   
 ，非常佳地低於  $-2.5 \text{ eV}$  及非常特佳地低於  $-2.7 \text{ eV}$  之  
 LUMO(最低未佔用分子軌域)能量。

該等材料之 HOMO(最高佔用分子軌域)和 LUMO(最低  
 未佔用分子軌域)能階及最低三重態  $T_1$  或最低激發單重態  
 $S_1$  的能量係經由量子化學計算測定。為此目的，在此使用  
 "Gaussian09W" (Gaussian Inc.)套裝軟體。為了計算有機物  
 質，首先使用"基態/半經驗/預設自旋/AM1/電荷 0/自旋單  
 重態"方法進行幾何形狀最佳化。接著根據最佳化幾何形  
 狀進行能量計算。在此使用"TD-SCF/DFT/預設自旋  
 /B3PW91"方法與"6-31G(d)"基組(電荷 0，自旋單重態)。  
 能量計算產生以哈崔單位(hartree units)表示之 HOMO 能  
 階 HEh 或 LUMO 能階 LEh。由此測定參考循環伏安法測  
 量校準之 HOMO 和 LUMO 能階(以電子伏特表示)如下：

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

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

就本申請案的目的而言，該等值係分別視為材料之  
 HOMO 或 LUMO 能階。

最低三重態  $T_1$  係定義為具有最低能量之三重態的能  
 量，其由所述之量子化學計算產生。

最低激發單重態  $S_1$  係定義為具有最低能量之激發單

重態的能量，其由所述之量子化學計算產生。

式(1)化合物此外較佳地具有  $10^{-6} \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ 或更高，非常佳地為  $10^{-5} \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ 或更高及非常特佳地為  $10^{-4} \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ 或更高之電子遷移率  $\mu$ 。

在式(1)化合物中，LUMO 較佳係定位於電子傳輸基，其中 0.9 之滯留機率係假定用於軌域。LUMO 非常佳地為大於 80%定位於電子傳輸基，更佳地 LUMO 完全不定位於 W(例如吡啶基)。若根據本發明化合物之 HOMO 和 LUMO 的絕對值完全不重疊，則為尤佳的。熟習該項技術者將沒有困難測定軌域之重疊。

參與某些電子躍遷(電荷轉移態)之分子軌域的重疊係藉助於參數  $\Lambda$  描述。參數  $\Lambda$  之意義在此為熟習該項技術者所熟知的。熟習該項技術者利用先前技術中所描述的方法測定該參數是絕對沒有困難的。就本發明之目的而言，參數  $\Lambda$  係使用由 D. J. Tozer 等人所述之 PBHT 法測定(J. Chem. Phys. 128, 044118 (2008))，該方法以(例如)來自 Q-Chem, Inc 之 Q-Chem 4.1 套裝軟體實施。分子軌域在此係以上述方法計算。隨後從下列方程式測定佔用分子軌域( $\varphi_i$ )和未佔用(虛擬)分子軌域( $\varphi_a$ )之所有可能對的空間重疊：

$$O_{ia} = \langle \varphi_i | \varphi_a \rangle$$

其中該軌域的模數係使用於計算。

然後根據下列從佔用和未佔用分子軌域之所有對  $ia$

的加權總和產生參數  $\Lambda$ ，

$$\Lambda = \frac{\sum_{ia} \kappa_{ia}^2 O_{ia}}{\sum_{ia} \kappa_{ia}^2}$$

其中  $\kappa_{ia}$  的值藉由 Tozer 等人的方法從解析 TD(時間相依)特徵值方程式的激發向量之軌域係數測定及其中  $0 \leq \Lambda \leq 1$ 。

在一較佳實施態樣中，本發明關於具有參與某些電子躍遷(電荷轉移態)之分子軌域的小空間重疊  $\Lambda$  之通式(1)化合物。

在本申請案中，分子軌域的小重疊意指參數  $\Lambda$  之值為 0.3 或更小，較佳為 0.2 或更小，非常佳為 0.15 或更小，非常特佳地為 0.1 或更小且尤佳為 0.05 或更小。

含有電洞傳輸基 W 的式(1)化合物較佳具有在所使用之陽極的電子功函數 ( $\phi_{\text{陽極}}$ ) 加 +1.5 eV 或更小的區域之 HOMO 能量 ( $\text{HOMO}_W$ )，即：

$$\text{HOMO}_W \leq (\phi_{\text{陽極}} + 1.5 \text{ eV})$$

若所使用之陽極具有 -5 eV 之電子功函數，則式(1)化合物之 HOMO 能量為 -3.5 eV 或更低(即大於 -3.5 eV 之負數)。式(1)化合物非常佳地具有等於或低於(非常特佳地低於)陽極之電子功函數的 HOMO 能量。

式(1)化合物此外較佳其特徵為電洞移動率  $\mu_+$  為

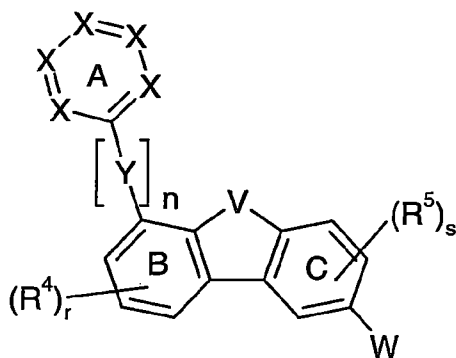


$10^{-6} \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ 或更大，非常佳為  $10^{-5} \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ 或更大且非常特佳地具有  $10^{-4} \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ 或更大。

電子和電洞遷移率的測量係由熟習該項技術者利用標準方法例行性進行。

在式(1)化合物中，HOMO 將實質上定位於電洞傳輸基 W 上。實質上在此意指 HOMO 為 80%或更大定位於電洞傳輸基或不定位於缺電子傳輸基，其中軌域假定為 0.9 的滯留概率。

就本發明之目的而言，較佳者為一種通式(2)之化合物，

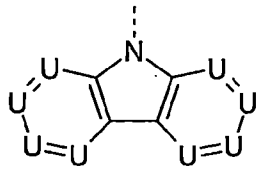


式 (2)

其中上述定義適用於所使用的符號及標號且此外：

X 為 N 或 CR<sup>1</sup>，其中環 A 中的五個 X 基團中之至少一者表示 N 原子，較佳地環 A 中的五個 X 基團中之二者等於 N 及非常佳地環 A 中的五個 X 基團中之三者等於 N，和環 A 非常特佳地為三吡，尤佳為 1,3,5-三吡；

W 式(W-1)之基團



式 (W-1)

U 為 N 或  $CR^1$ ，較佳為  $CR^1$ ，其中虛線表示從 W 基團至式(2)中的環 C 之鍵。

在一較佳實施態樣中，二或多個  $U = CR^1$  基團之相鄰  $R^1$  基團可彼此形成單或多環的脂族或芳族環系統。

在另一較佳實施態樣中，二或多個  $U = CR^1$  基團之相鄰  $R^1$  基團不可彼此形成單或多環的脂族或芳族環系統。

此外若來自  $U = CR^1$  基團的  $R^1$  基團中之至少一者不等於 H，則其為較佳的。

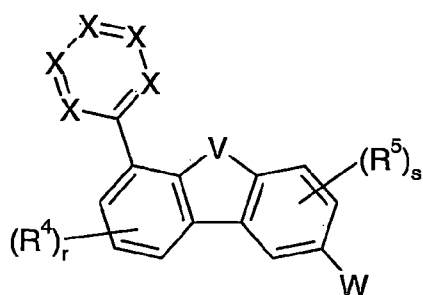
若  $R^1$  作為  $U = CR^1$  基團表示 H 或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下可經一或多個  $R^2$  基團取代)，則就本發明之目的而言是非常佳的，而若來自  $U = CR^1$  之  $R^1$  基團中之至少一者不等於 H，則其為特佳的。

若  $R^1$  在各情況下表示 H 或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下可經一或多個  $R^2$  基團取代)，則為其特佳的，而若基團  $R^1$  中之至少一者不等於 H，則其為特佳的。

若該化合物具有通式(1)和 r 為 0 或 1 和 s 為 0 或 1，則其為較佳的。較佳地只有 r 或只有 s 等於 1 且各個其他參數等於 0，非常佳為 r 和 s 皆等於 0。

在本發明之另一較佳實施態樣中， $n$  總是等於 1，所以二價橋總是存在於環 A 和環 B 之間。

此外若該化合物具有通式(4)(其中上述定義適用於所使用的標號及符號)，則其為較佳的，且本發明中別處所述之其較佳實施態樣亦表示式(4)化合物之較佳實施態樣，

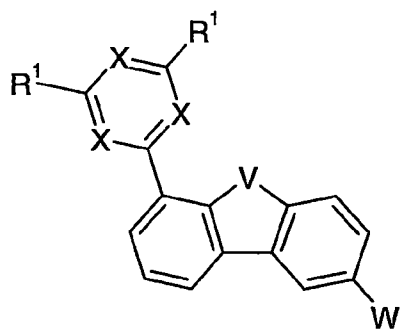


式 (4)

其中上述定義適用於所使用的符號及標號及其中  $r$  為 0 或 1 及其中  $s$  為 0 或 1。

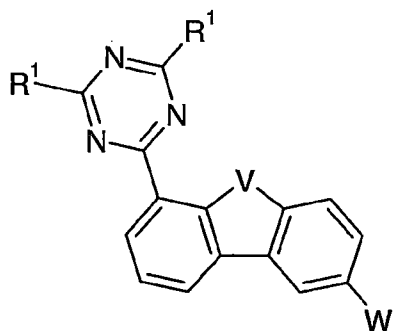
此外若  $r+s=1$ ，則其為較佳的。

此外若該化合物具有通式(6)(其中上述定義適用於所使用的標號及符號)，則其也為較佳的，且本發明中別處所述之其較佳實施態樣亦表示式(6)化合物之較佳實施態樣，



式 (6)

若該化合物具有通式(7)(其中上述定義適用於所使用的標號及符號)且本發明中別處所述之其較佳實施態樣亦表示式(7)化合物之較佳實施態樣，則其為更佳的，



式(7)

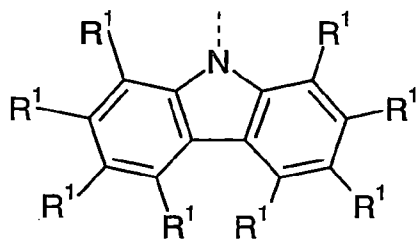
若 W 基團為咪唑、茛並咪唑或吡啶並咪唑(其中如本文中所示該等基團可經取代)，則其為較佳的。

在本發明之一較佳實施態樣中，W 基團為咪唑(其可經一或多個 R<sup>1</sup> 基團取代，該 R<sup>1</sup> 基團在每次出現時可為相同或不同)，其中相鄰的 R<sup>1</sup> 基團彼此不可形成環閉合。

若 W 基團為經一或多個 R<sup>1</sup> 或 R<sup>2</sup> 基團(其在每次出現時可相同或不同)取代之茛並咪唑，則其為非常佳的。

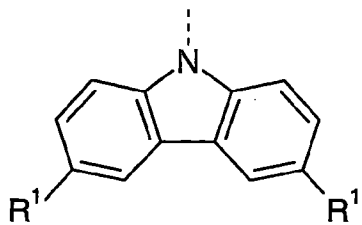
此外若 W 基團為經一或多個 R<sup>1</sup> 或 R<sup>2</sup> 基團(其在每次出現時可相同或不同)取代之吡啶並咪唑，則是非常佳的。

下式(W-2)之 W 基團為特佳：



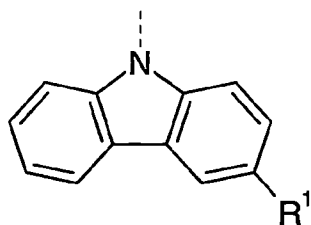
式 (W-2)

非常特佳者為式(W-3)之 W 基團，



式 (W-3)

尤佳者為式(W-4)之 W 基團，



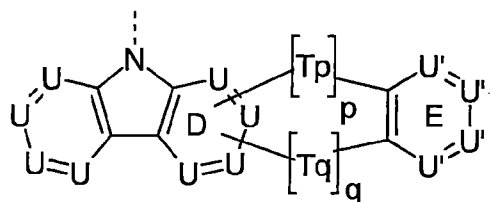
式 (W-4)

若 W 基團具有式(W-4)且其中所出現之  $R^1$  基團不等於氫，則其為更佳的，而若式(W-4)中之  $R^1$  為具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下可經一或多個  $R^2$  基團取代)，則其為更佳的。

在本發明之另一非常佳的實施態樣中，W 基團具有式

(W-4)，其中  $R^1$  亦等於 H。

若 W 基團為式 (W-5) 之基團，則其為特佳的，



式 (W-5)

其中上述定義適用於所使用的標號及符號且其中此外：

$T_p$ 、 $T_q$  相同或不同地為二價橋； $T_p$  和  $T_q$  較佳係選自  $N(R^2)$ 、 $B(R^2)$ 、 $O$ 、 $C(R^2)_2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^2$ 、 $C=C(R^2)_2$ 、 $S$ 、 $S=O$ 、 $SO_2$ 、 $P(R^2)$  和  $P(=O)R^2$ ； $N(R^2)$ 、 $O$ 、 $C(R^2)_2$  和  $S$  在此為非常佳及  $N(R^2)$  和  $C(R^2)_2$  為特佳；

$U'$  在每次出現時相同或不同地為  $CR^2$  或  $N$ ，較佳為  $CR^2$ ；

$p$  為 0 或 1；其中  $p$  等於 0 意指環 E 和環 D 係以單鍵連接；

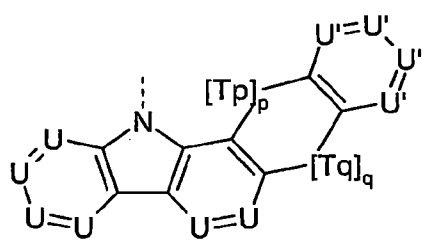
$q$  為 0 或 1；其中  $q$  等於 0 意指環 E 和環 D 係以單鍵連接；

及其中  $p + q = 1$  或  $2$ ，較佳為等於 1；

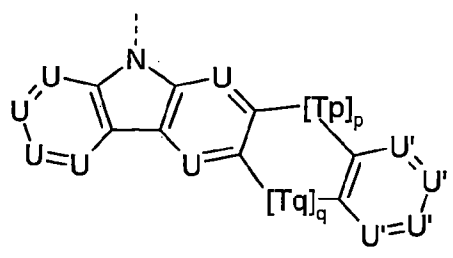
及其中  $T_p$  和  $T_q$  各自以任何可能的位向鍵結至環 D 的相鄰基團 U；及其中鍵結至  $T_p$  或  $T_q$  之各 U 基團表示碳原子。

非常特佳的基團 W 係選自由式 (W-6) 至 (W-8) 所組成

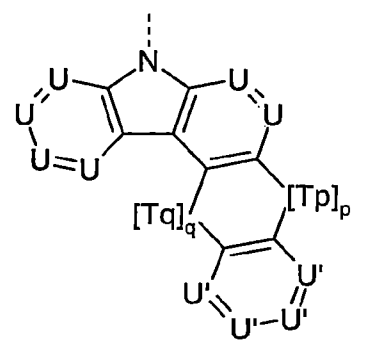
之以下群組，其中式(W-7)為尤佳：



式 (W-6)

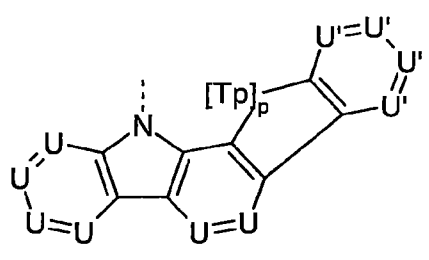


式 (W-7)

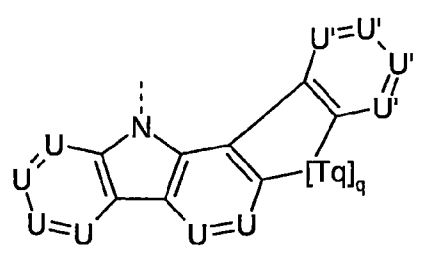


式 (W-8)

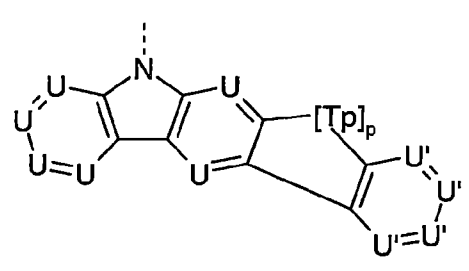
尤佳基團 W 為式 (W-9)至 (W-14)之基團，



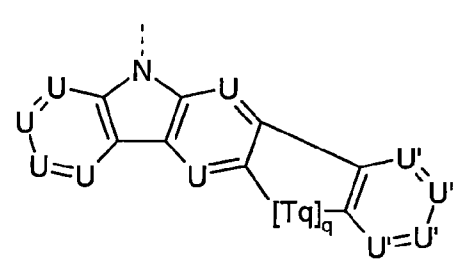
式 (W-9)



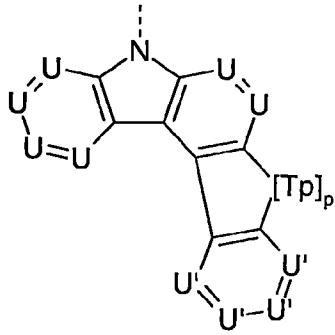
式 (W-10)



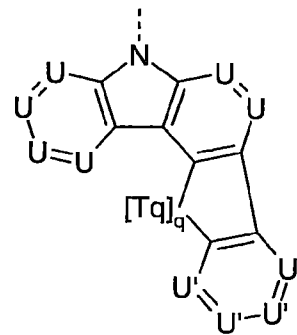
式 (W-11)



式 (W-12)

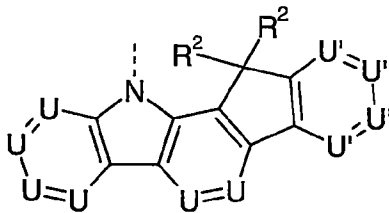


式 (W-13)

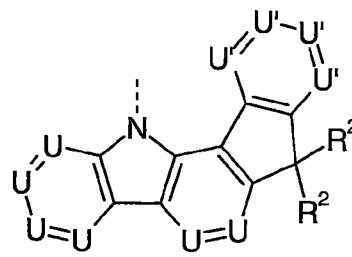


式 (W-14)

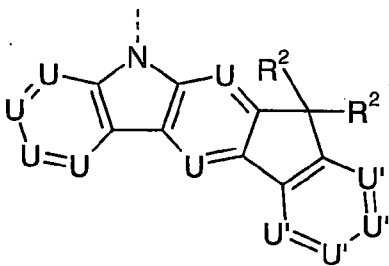
在本發明之一較佳實施態樣中，W 基團為茚並吡啶，其非常佳地具有下式 (W-15) 至 (W-20) 中之一者：



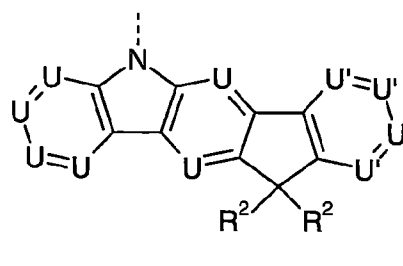
式 (W-15)



式 (W-16)

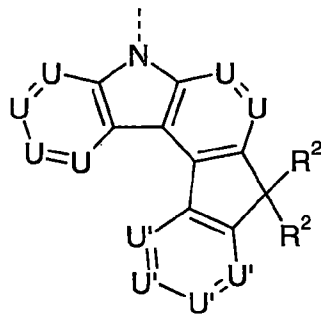


式 (W-17)

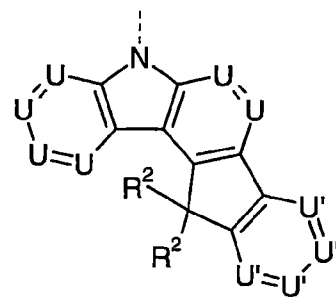


式 (W-18)





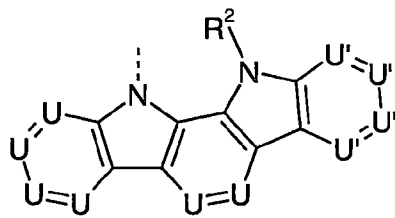
式(W-19)



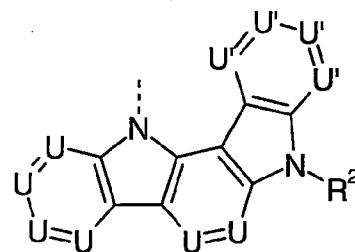
式(W-20)

其中式(W-17)、(W-18)、(W-19)、(W-15)和(W-16)之茛並呋啶類為非常特佳。尤佳者為式(W-17)、(W-18)和(W-19)之茛並呋啶類，更佳地為式(W-17)和(W-18)之茛並呋啶類和最佳地式(W-17)之茛並呋啶類。

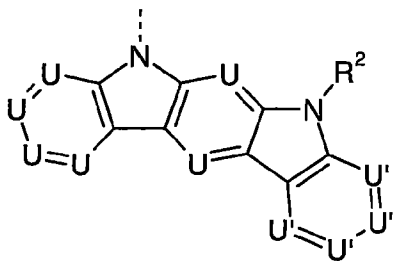
在本發明之另一較佳實施態樣中，W 基團為吡啶並呋啶，其非常佳地具有下式(W-21)至(W-25)中之一者：



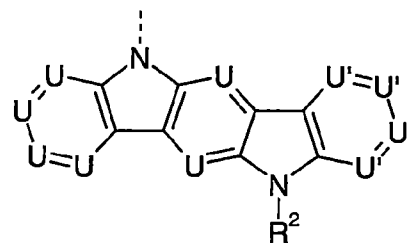
式(W-21)



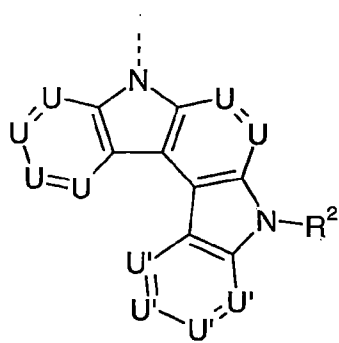
式(W-22)



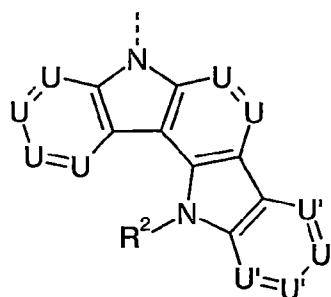
式(W-23)



式(W-24)



式 (W-25)



式 (W-26)

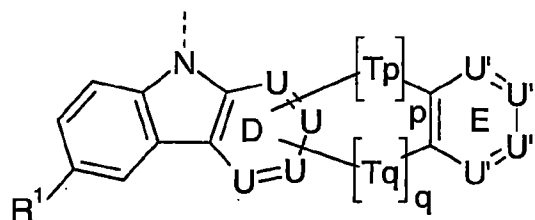
其中式(W-21)、(W-23)和(W-24)之吡啶並咪唑類為非常特佳。尤佳吡啶並咪唑類為式(W-21)和(W-23)之吡啶並咪唑類，其中式(W-21)之吡啶並咪唑類為最佳。

就本發明之目的而言，若式(W-1)和(W-5)至(W-26)之基團中的 U 總是等於  $CR^1$ ，則其為非常較佳的，若屬於  $U = CR^1$  基團之  $R^1$  基團在此總是為 H，則其為特佳的。

就本發明之目的而言，若式(W-5)至(W-26)之基團中的  $U'$  總是等於  $CR^2$ ，則其也是非常較佳的，若屬於  $U' = CR^2$  基團之  $R^2$  基團在此總是為 H，則其為特佳的。

若，在式(W-5)至(W-26)之基團中，U 等於  $CR^1$  且  $U'$  等於  $CR^2$ ，則其為特佳的，及  $R^1$  基團屬於 U 基團 =  $CR^1$  且  $R^2$  基團屬於  $U'$  基團 =  $CR^2$ ，則非常特佳地等於 H。

在另一較佳實施態樣中，本發明關於一種式(1)之化合物，其中 W 如式(W-27)中所示定義，



式 (W-27)

其中上述定義適用於所使用的標號及符號，且本發明中別處所述之其較佳實施態樣亦表示式 (W-27) 之基團的較佳實施態樣。

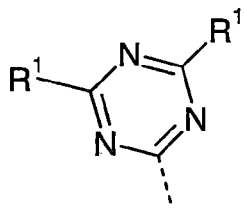
如已經說明的，式 (2) 化合物的環 A 之 X 基團可為 N 或 CR<sup>1</sup>，其中環 A 中的五個 X 基團中之至少一者表示 N 原子，較佳為環 A 中的五個 X 基團中之二者等於 N 及非常佳為環 A 中的五個 X 基團中之三者等於 N。

式 (A-1) 之式 (2) 中的環 A 之較佳基團，

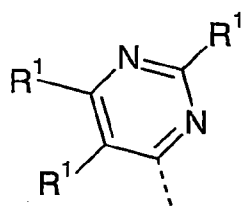


式 (A-1)

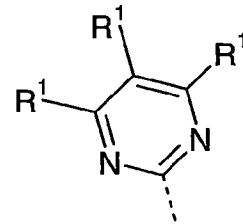
為彼等下式 (A-2) 至 (A-13) 者，其中虛線表示在式 (2) 中的環 A 和 Y 之間的鍵，或若 n 等於 0，表示在式 (2) 中的環 A 和環 B 之間的鍵：



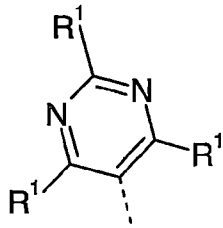
式 (A-2)



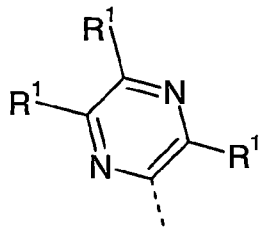
式 (A-3)



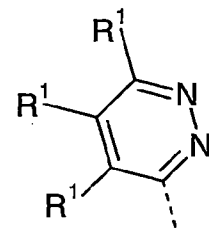
式 (A-4)



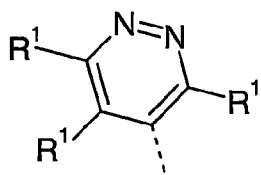
式 (A-5)



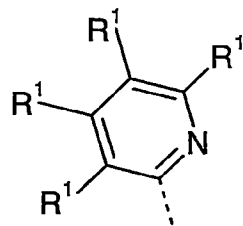
式 (A-6)



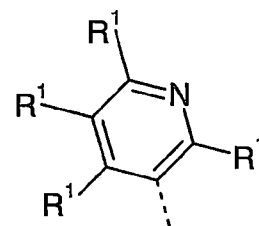
式 (A-7)



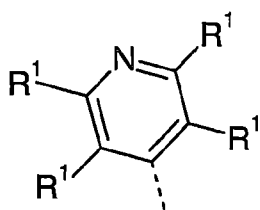
式 (A-8)



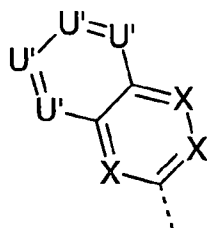
式 (A-9)



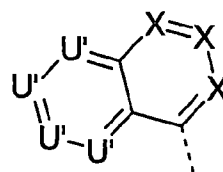
式 (A-10)



式 (A-11)



式 (A-12)



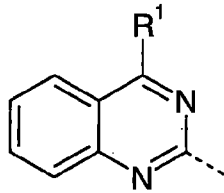
式 (A-13)

其中以上定義和較佳實施態樣適用於所使用的符號及標號。

在此特佳者為式(A-2)之基團。

式(2)中的環 A 之另一較佳基團為下列式(A-14)之基

團：



式 (A-14)

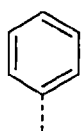
式 (A-1) 之式 (2) 中的環 A 之非常佳的基團為彼等式 (A-2) 至 (A-11) 之基團，其中  $R^1$  等於  $Ar^1$ ，其中  $Ar^1$  在每次出現時相同或不同地為具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統 (其在各情況下可經一或多個  $R^2$  基團取代)； $Ar^1$  較佳在每次出現時相同或不同地為苯基、聯苯基、聯三苯基、聯四苯基、二苯並呋喃基、二苯並噻吩基、萸基、螺聯萸基、吡啶基或嘧啶基，彼等各自可經一或多個  $R^2$  基團取代； $Ar^1$  非常佳地在每次出現時可為相同或不同為苯基、聯苯基、聯三苯基或聯四苯基，彼等各自可經一或多個  $R^2$  基團取代；特佳者為苯基 (其在各情況下可經一或多個  $R^2$  基團取代)，而若苯基為經未取代形式，則其為尤佳的。

非常特佳者在此為式 (A-2) 之基團，其中  $R^1$  等於  $Ar^1$ 。

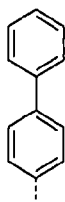
式 (2) 中之式 (A-14) 的環 A 之另一非常佳的基團為式 (A-14) 之基團，其中  $R^1$  等於  $Ar^1$ 。

特佳基團  $Ar^1$  亦為下列具有式 (Ar-1) 至 (Ar-24) 之基團，其中該等基團可經一或多個  $R^2$  基團 (其在每次出現時

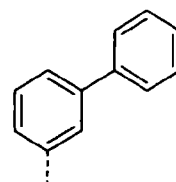
可為相同或不同)取代。非常特佳的基團  $Ar^1$  為彼等式 (Ar-1)至 (Ar-9)之基團，



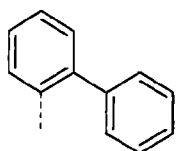
式 (Ar-1)



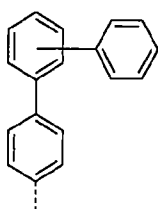
式 (Ar-2)



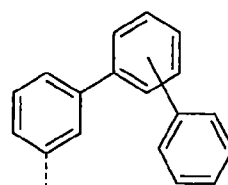
式 (Ar-3)



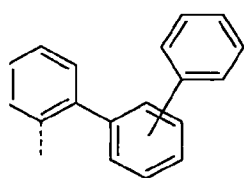
式 (Ar-4)



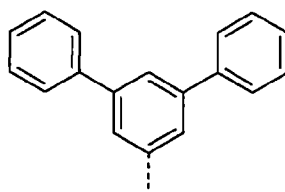
式 (Ar-6)



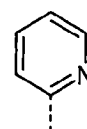
式 (Ar-7)



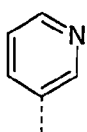
式 (Ar-8)



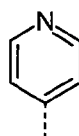
式 (Ar-9)



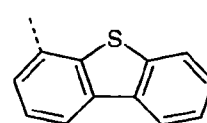
式 (Ar-10)



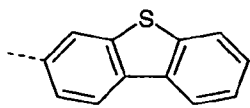
式 (Ar-11)



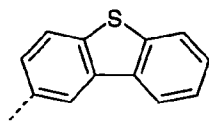
式 (Ar-12)



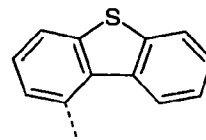
式 (Ar-13)



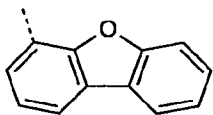
式 (Ar-14)



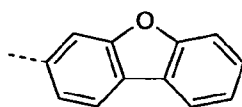
式 (Ar-15)



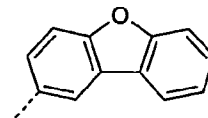
式 (Ar-16)



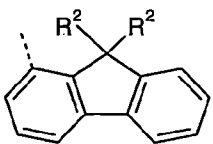
式 (Ar-17)



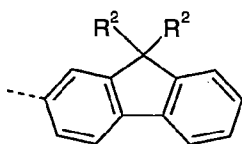
式 (Ar-18)



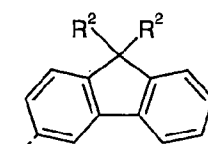
式 (Ar-19)



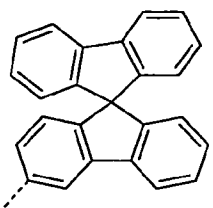
式 (Ar-20)



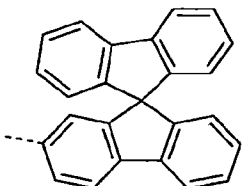
式 (Ar-21)



式 (Ar-22)

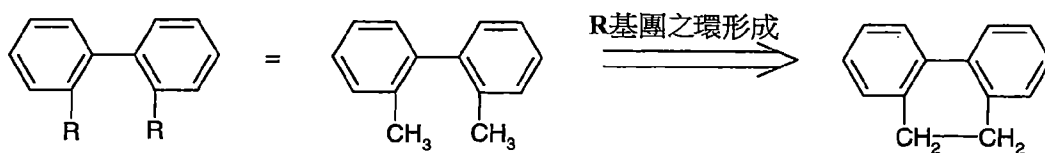


式 (Ar-23)



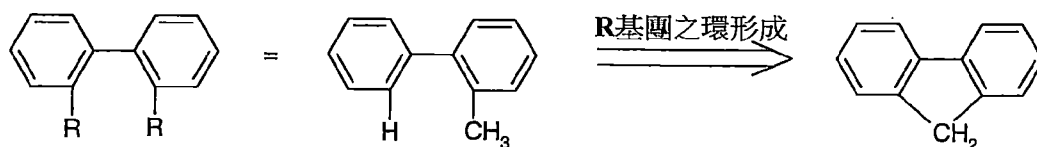
式 (Ar-24)

就本申請案之目的而言，二或多個基團彼此可形成環之規劃特別意指：二個基團彼此以一化學鍵連接。此以下列流程說明：



然而，此外，上述規劃也意指：在其中二個基團之一

表示氫的情況下，第二基團係鍵結於氫原子所鍵結之位置，且形成一環。此意欲以下列流程說明：



下列為就本申請之意義而言的化學基之一般定義：

芳基就本發明之意義而言含有 6 至 60 個芳族環原子；雜芳基就本發明之意義而言含有 5 至 60 個芳族環原子，其中至少一者為雜原子。雜原子較佳地選自 N、O 及 S。此表示基本定義。如果在本發明說明中指示其他較佳選擇，例如有關所存在之芳族環原子或雜原子的數目，則這些適用。

芳基或雜芳基在此意指簡單芳族環，即苯，或簡單雜芳族環，例如吡啶、嘧啶或噁吩，或縮合(稠合(annellated))芳族或雜芳族多環，例如萘、菲、喹啉或咪唑。縮合(稠合)芳族或雜芳族多環就本申請案的意義而言由二或多個簡單芳族或雜芳族環彼此縮合而組成。

缺電子雜芳族基就本發明之意義而言係定義為具有至少二個雜原子之 5-員雜芳基環基，例如咪唑、噁唑、噁二唑、等等，或定義為具有至少一個雜原子之 6-員雜芳基環基，例如吡啶、嘧啶、吡嗪、三嗪、等等。另外 6-員芳基或 6-員雜芳基環基團也可縮合至此等基團上，當為此情況時，例如，苯並咪唑、喹啉或啡啉。





佳地選自 N、O 及/或 S。芳族或雜芳族環系統就本發明之意義而言意指不一定只含有芳基或雜芳基，而是其中另外多個芳基或雜芳基可以非芳族單元(較佳為少於 10%非 H 之原子)(諸如，例如  $sp^3$ -混成之 C、Si、N 或 O 原子、 $sp^2$ -混成之 C 或 N 原子或  $sp$ -混成之 C 原子)連接的系統。因此，例如系統諸如 9,9'-螺雙萸、9,9'-二芳基萸、三芳基胺、二芳基醚、二苯乙烯、等等就本發明之意義而言亦意欲為芳族環系統，如為其中二或多個芳基例如以直鏈或環狀烷基、烯基或炔基或以矽基連接之系統。此外，其中二或多個芳基或雜芳基係經由單鍵彼此連結之系統就本發明之意義而言亦為芳族或雜芳族環系統，諸如，例如聯苯、聯三苯或二苯基三吡之系統。

在各情況下亦可經如上述定義之基團取代且可經由任何所要位置連接至芳族或雜芳族基團之具有 5-60 個芳族環原子的芳族或雜芳族環系統特別意指衍生自下列之基團：苯、萘、蒽、苯並蒽、菲、苯並菲、芘、蒽(chrysene)、芘、1,2-苯並芘(fluoranthene)、稠四苯、稠五苯、苯並芘、聯苯、伸聯苯(biphenylene)、聯三苯(terphenyl)、伸聯三苯(terphenylene)、聯四苯(quaterphenyl)、萸、螺聯萸、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛並萸、三聚茛(truxene)、異三聚茛(isotruxene)、螺三聚茛、螺異三聚茛、呋喃、苯並呋喃、異苯並呋喃、二苯並呋喃、噻吩、苯並噻吩、異苯並噻吩、二苯並噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、咪唑、吡啶並咪

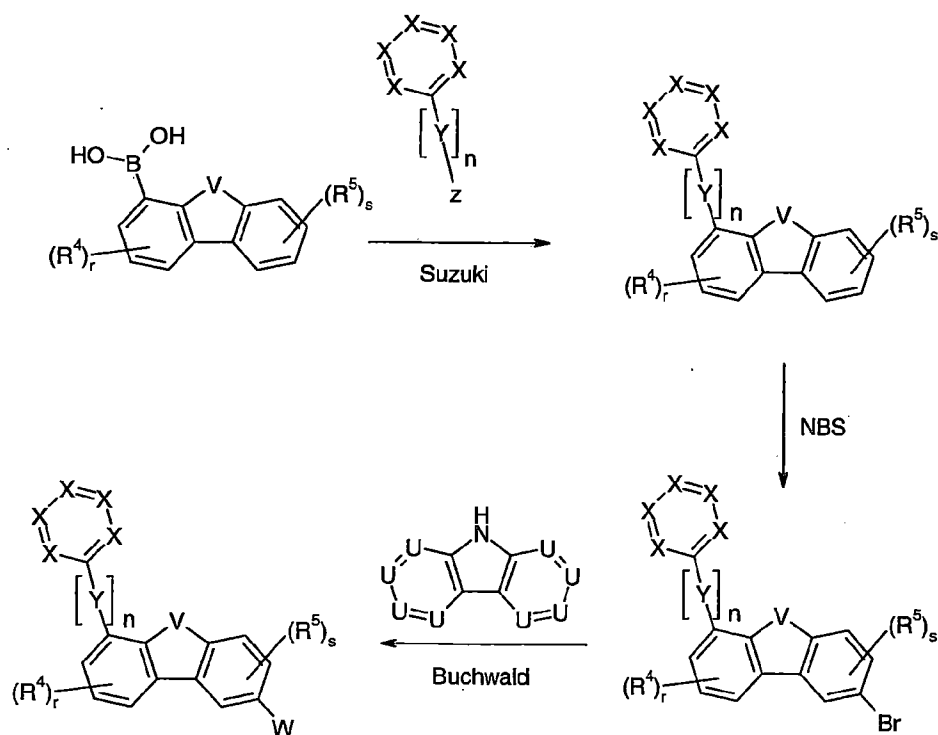
啞、茛並呋啞、吡啞、喹啞、異喹啞、吡啞、啡啞、苯並-5,6-喹啞、苯並-6,7-喹啞、苯並-7,8-喹啞、啡噁吡、啡噁吡、吡啞、吡啞、咪啞、苯並咪啞、萘並咪啞(naphthimidazole)、菲並咪啞(phenanthrimidazole)、吡啞並咪啞(pyridimidazole)、吡啞並咪啞(pyrazinimidazole)、喹噁啞並咪啞(quinoxalinimidazole)、噁啞、苯並噁啞、萘並噁啞(naphthoxazole)、蔥並噁啞(anthroxazole)、菲並噁啞(phenanthroxazole)、異噁啞、1,2-噁啞、1,3-噁啞、苯並噁啞、嗒吡、苯並嗒吡、嘧啞、苯並嘧啞、喹噁啞、1,5-二氮雜蔥、2,7-二氮雜芘、2,3-二氮雜芘、1,6-二氮雜芘、1,8-二氮雜芘、4,5-二氮雜芘、4,5,9,10-四氮雜芘、吡吡、啡吡、啡噁吡、啡噁吡、茛紅環(fluorubin)、啞啞、氮雜呋啞、苯並呋啞、啡啞、1,2,3-三啞、1,2,4-三啞、苯並三啞、1,2,3-噁二啞、1,2,4-噁二啞、1,2,5-噁二啞、1,3,4-噁二啞、1,2,3-噁二啞、1,2,4-噁二啞、1,2,5-噁二啞、1,3,4-噁二啞、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、噁啞、噁啞和苯並噁二啞或這些基團的組合。

就本發明的目的而言，具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基或具有 2 至 40 個 C 原子之烯基或炔基，其中個別 H 原子或 CH<sub>2</sub> 基團可經在上述該等基團定義下之基團取代，較佳意指甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、2-甲基丁基、正戊基、第二戊基、環戊

基、新戊基、正己基、環己基、新己基、正庚基、環庚基、正辛基、環辛基、2-乙基己基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、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、乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基或辛炔基。具有 1 至 40 個 C 原子之烷氧基或烷硫基(thioalkyl)較佳意指甲氧基、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、正戊氧基、第二戊氧基、2-甲基丁氧基、正己氧基、環己氧基、正庚氧基、環庚氧基、正辛氧基、環辛氧基、2-乙基己氧基、五氟乙氧基、2,2,2-三氟乙氧基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、異丙硫基、正丁硫基、異丁硫基、第二丁硫基、第三丁硫基、正戊硫基、第二戊硫基、正己硫基、環己硫基、正庚硫基、環庚硫基、正辛硫基、環辛硫基、2-乙基己硫基、三氟甲硫基、五氟乙硫基、2,2,2-三氟乙硫基、乙烯硫基、丙烯硫基、丁烯硫基、戊烯硫基、環戊烯硫基、己烯硫基、環己烯硫基、庚烯硫基、環庚烯硫基、辛烯硫基、環辛烯硫基、乙炔硫基、丙炔硫基、丁炔硫基、戊炔硫基、己炔硫基、庚炔硫基或辛炔硫基。

可根據流程 1 製備根據本發明之化合物。對應單硼酸類為市售且可藉由 Suzuki 偶合和後續溴化及藉由 Buchwald 偶合的進一步反應而轉化成對應目標分子。

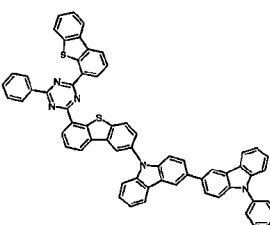
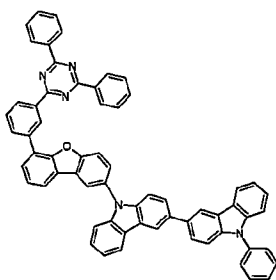
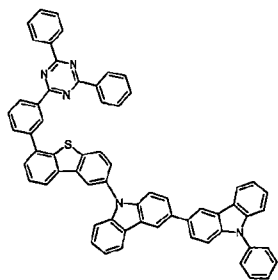
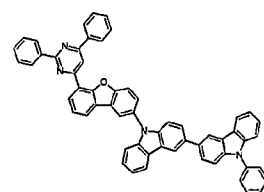
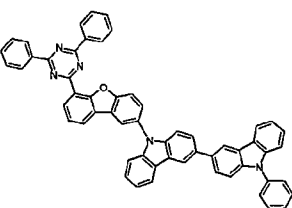
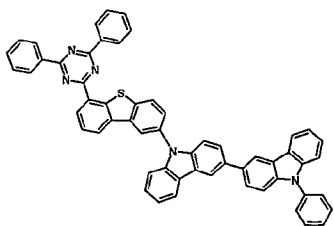
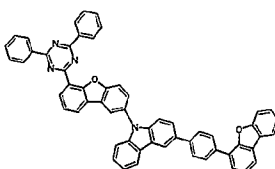
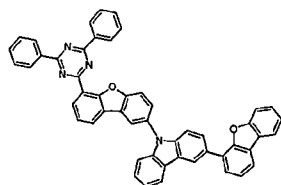
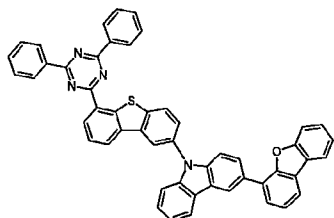
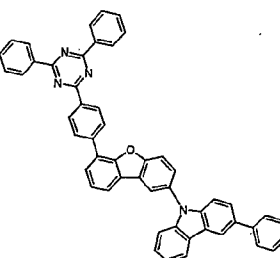
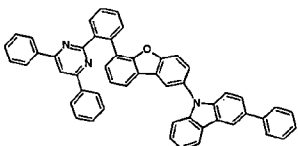
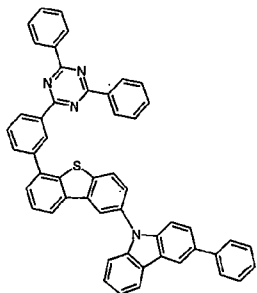
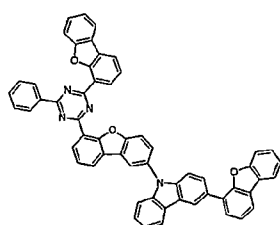
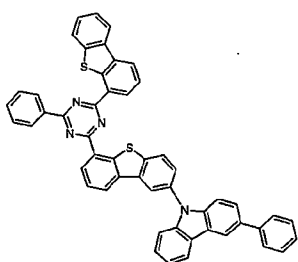
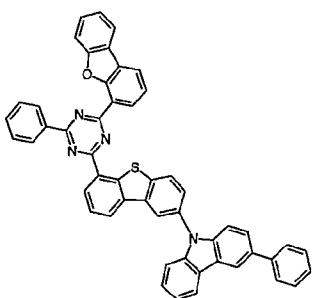
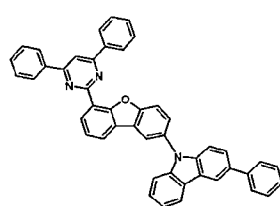
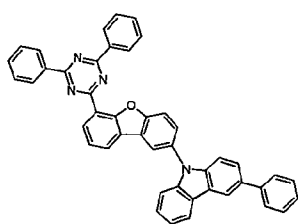
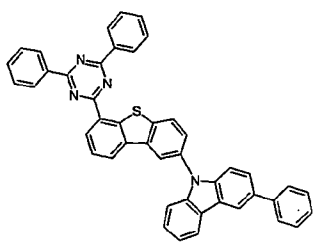
## 流程 1

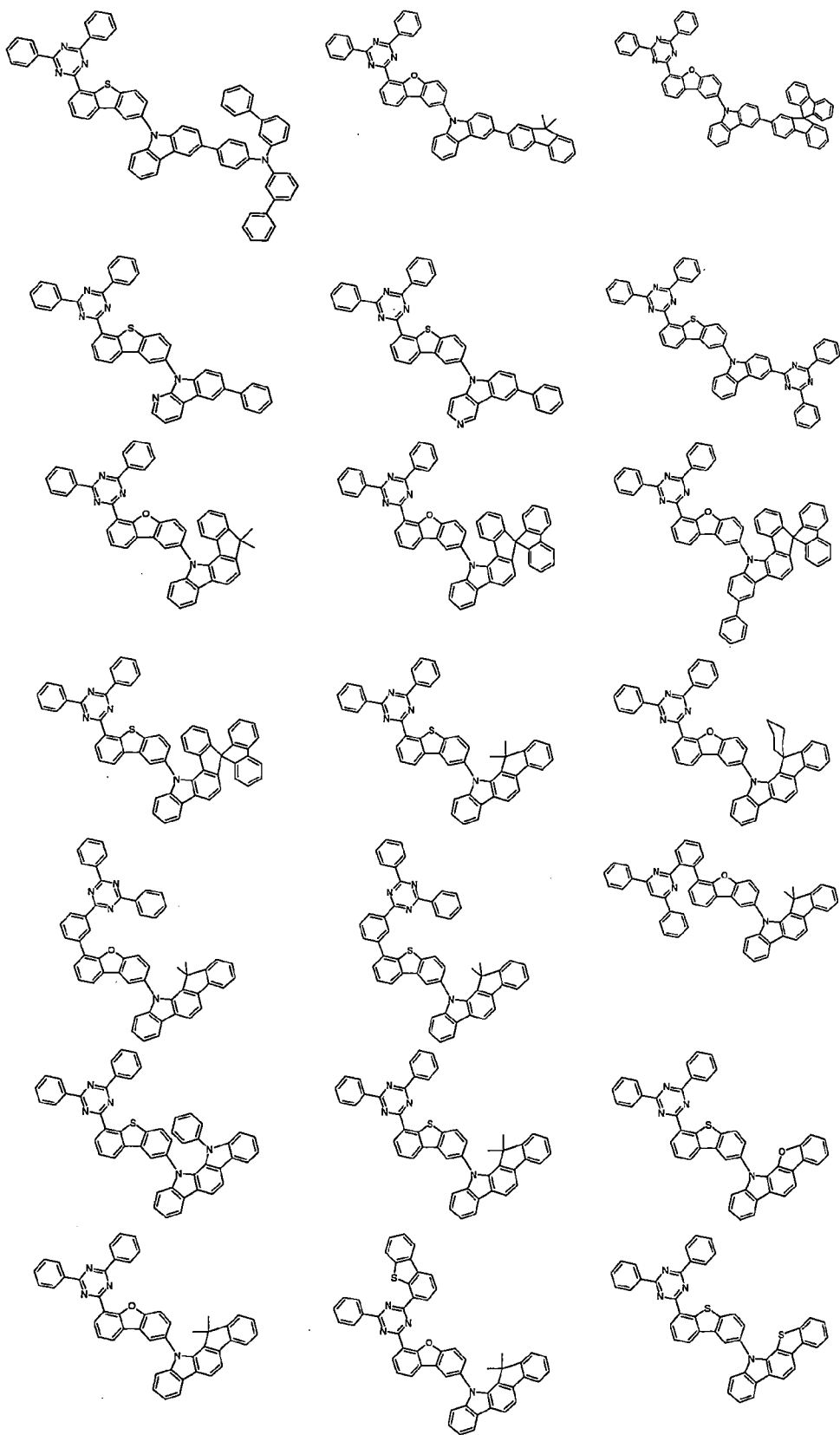


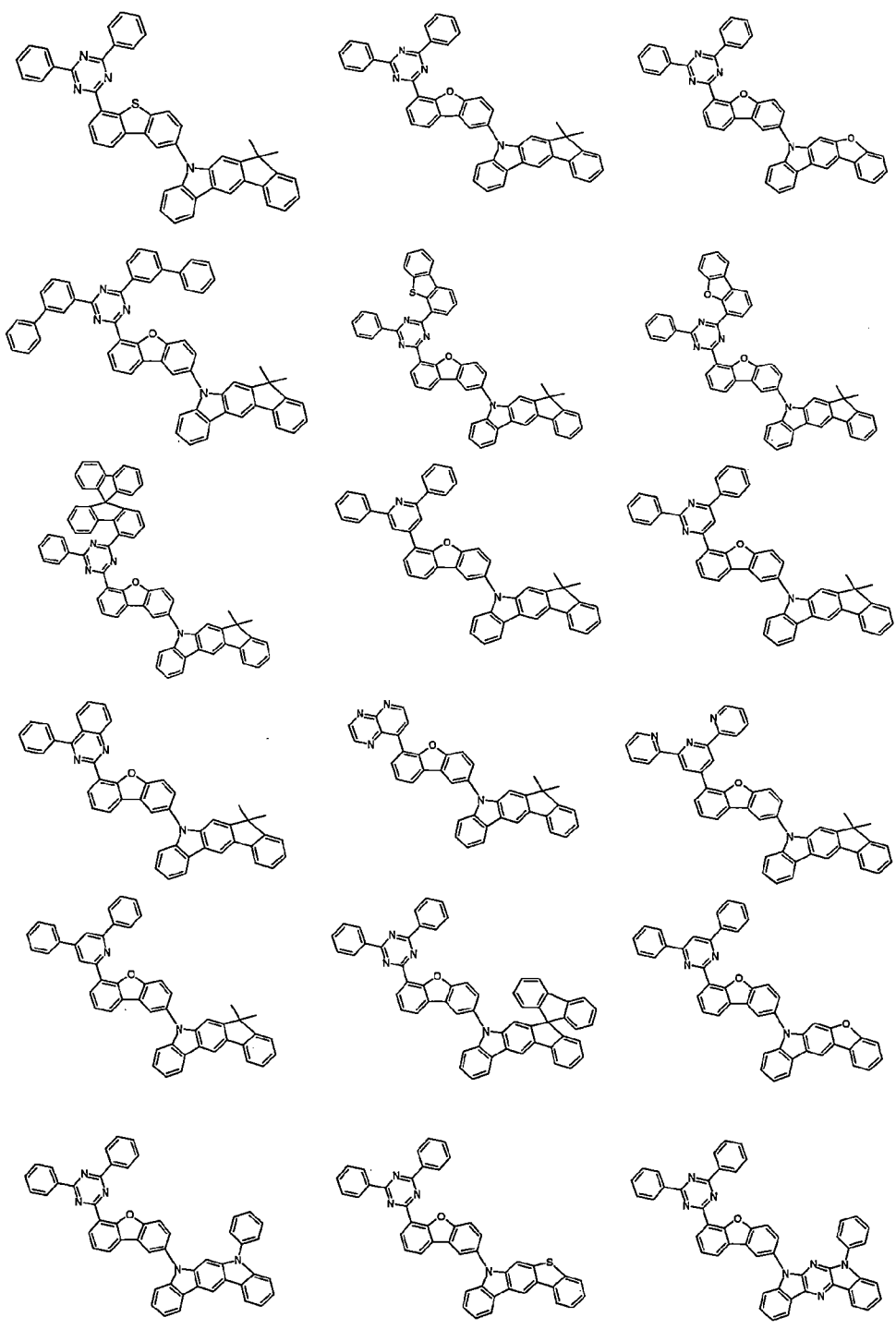
其中  $Z$  等於  $Cl$ 、 $Br$  或  $I$  及其他符號和標號具有上示之意義。該反應流程也可完全類似地使用於製備式(1)化合物。

顯示用於合成根據本發明之化合物之一般方法為舉例說明。熟習該項技術者將能夠在其一般專業知識範圍內開發替代的合成路徑。

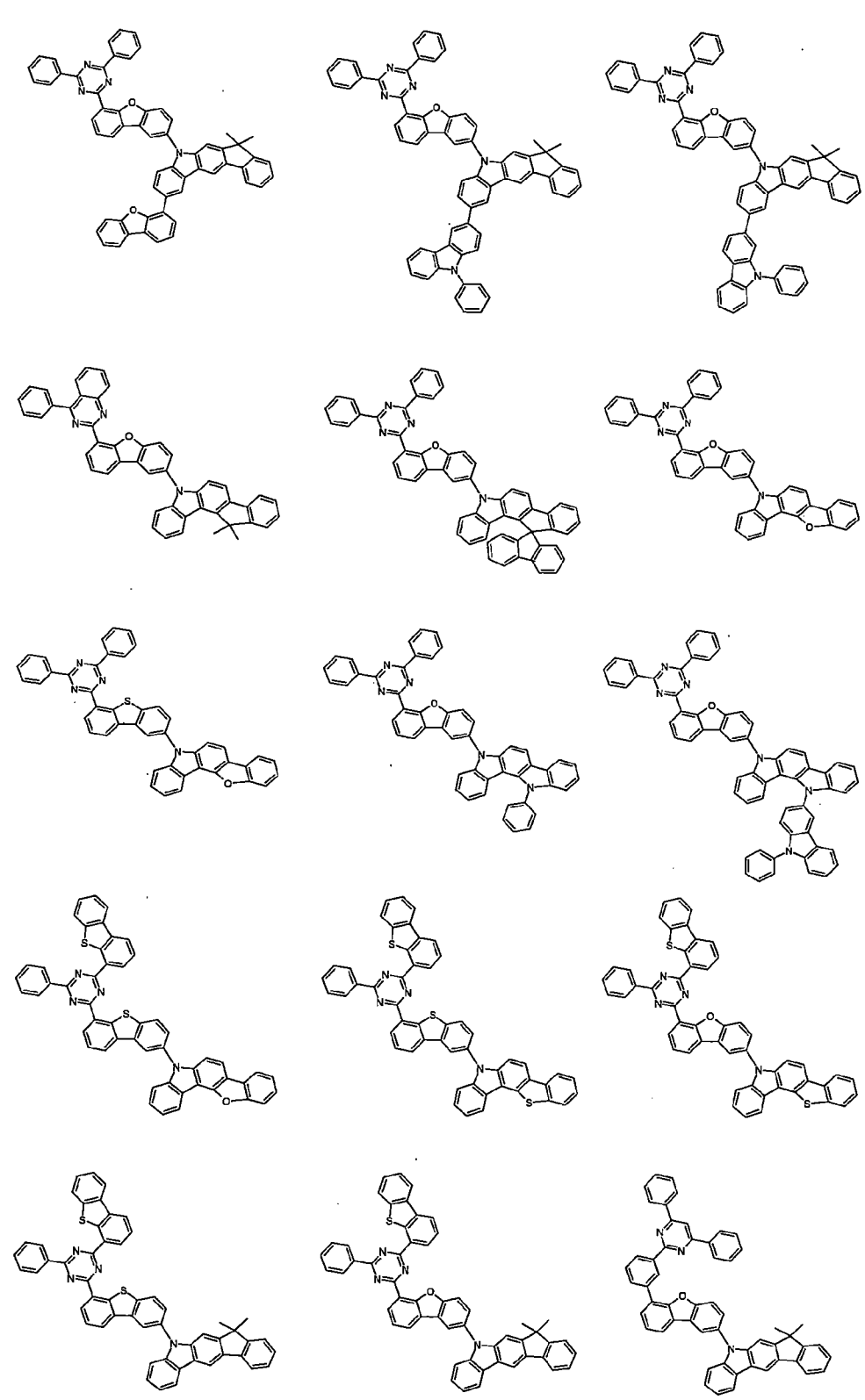
下列概述含有可藉由本文所述方法之一者製備的根據本發明化合物之說明性描述。

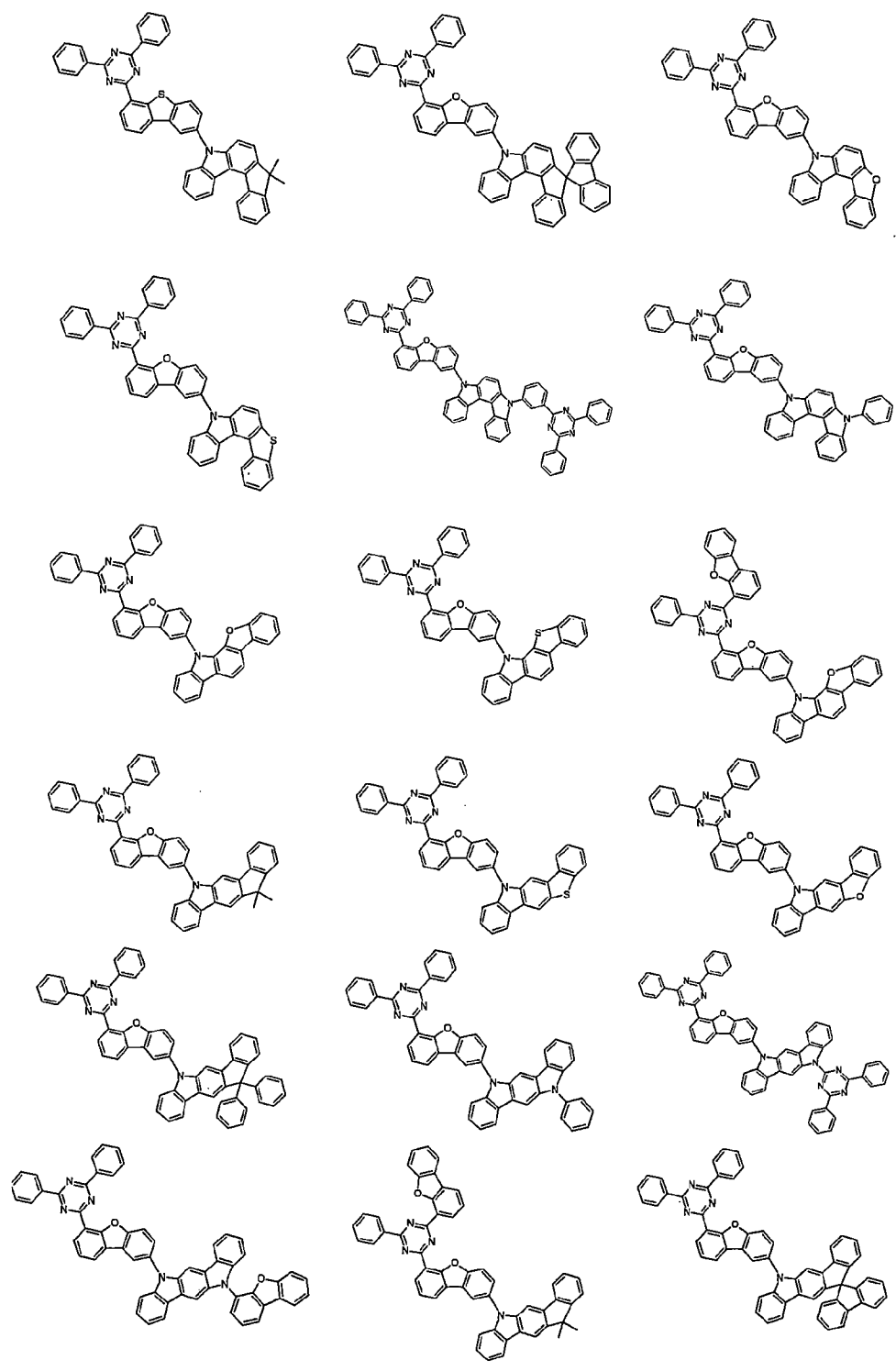


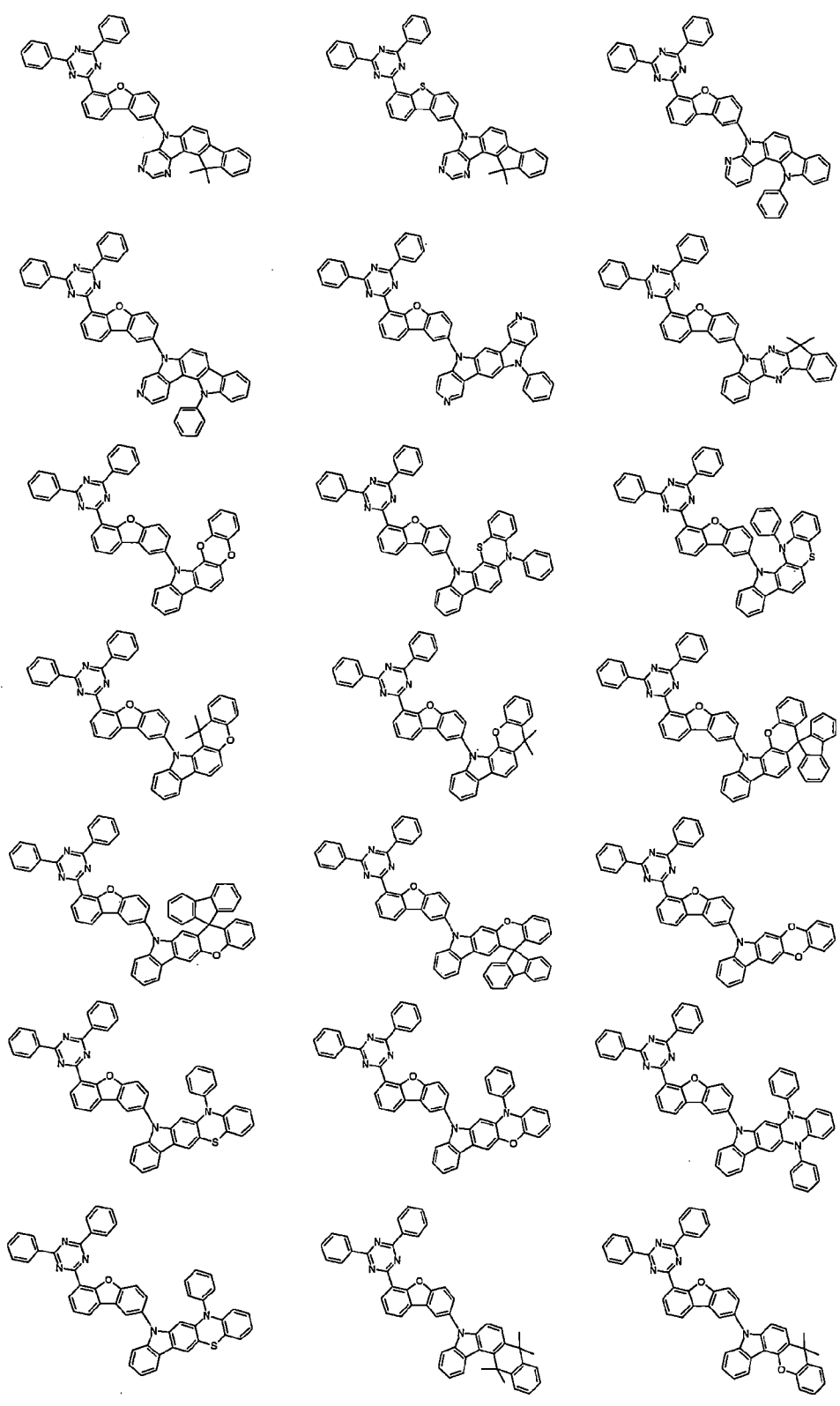


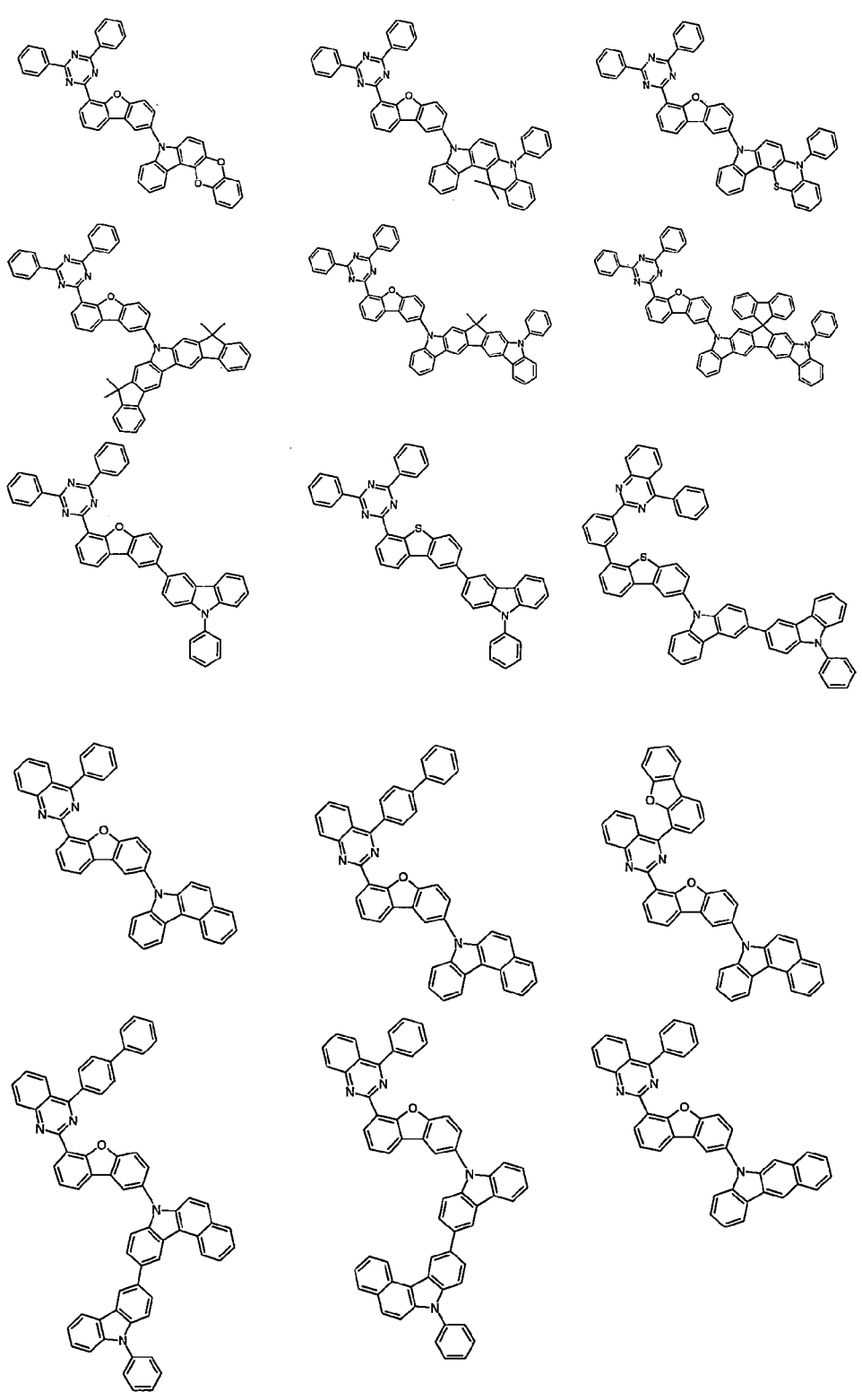


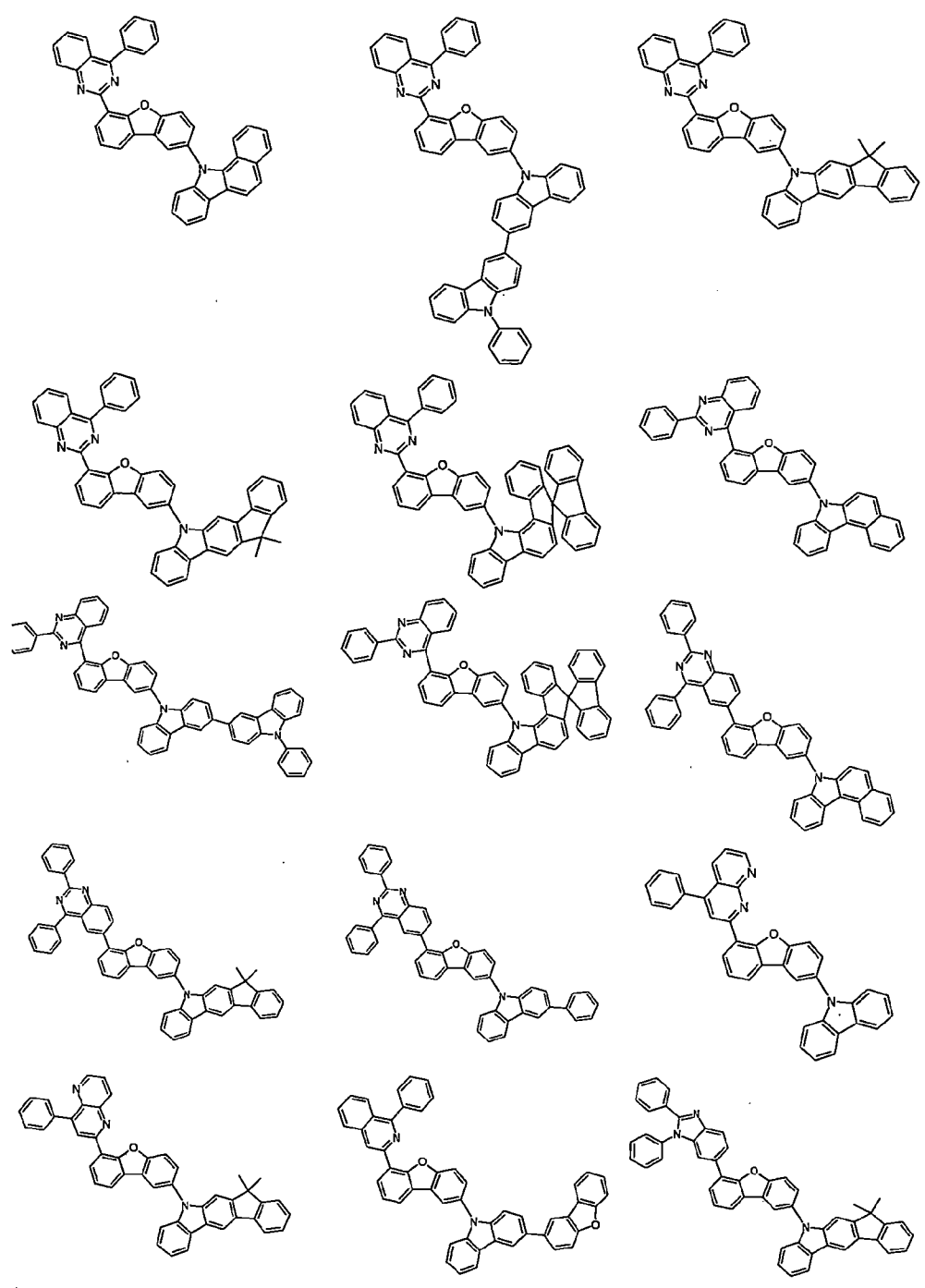


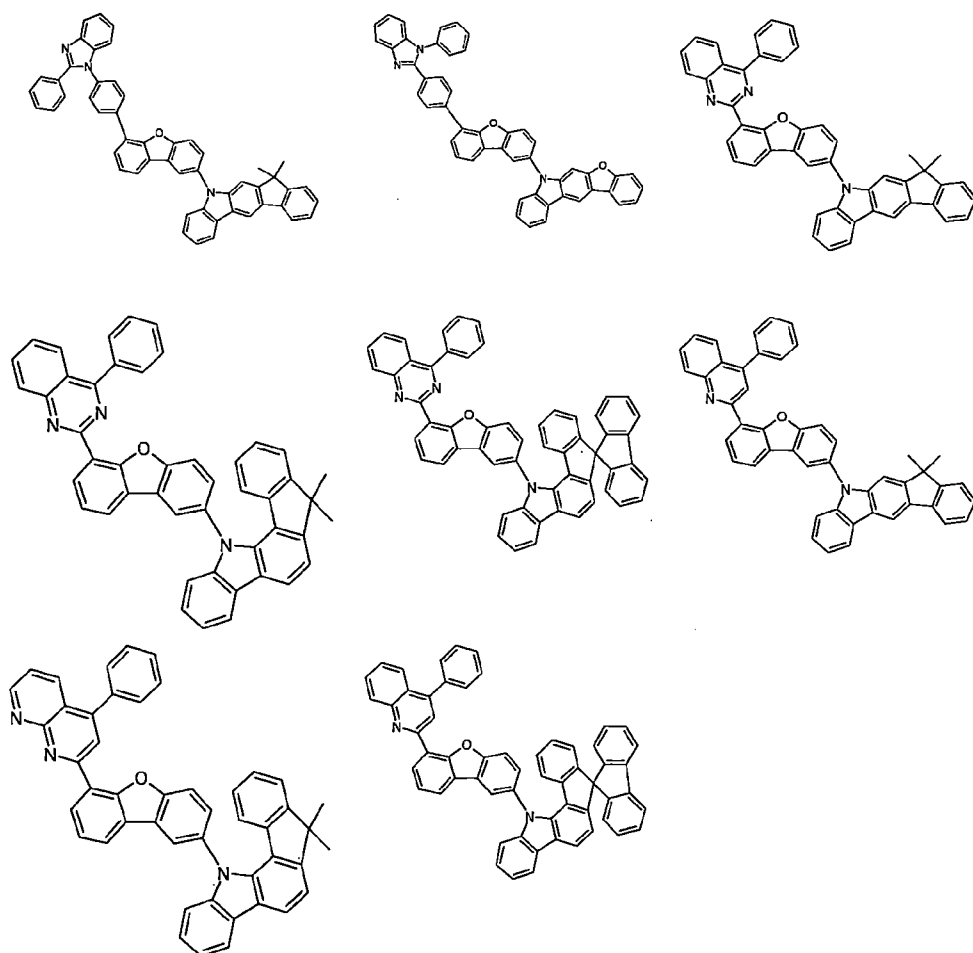












本發明此外關於式(1)之化合物於電子裝置(較佳地於電子傳輸層及/或於發光層)之用途。

根據本發明之化合物亦可使用於電洞傳輸層。

根據本發明之電子裝置較佳係選自由下列所組成之群組：有機積體電路(OIC)、有機場效電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機發光電晶體(OLET)、有機太陽能電池(OSC)、有機光學檢測器、有機感光器(photoreceptor)、有機場淬滅裝置(OFQD)、有機發光電化學電池(OLEC、LEC 或 LEEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機發光二極體(OLED)。特佳者為有機電致發光裝

置，非常特佳地 OLEC 和 OLED 且尤佳為 OLED。

OLED 就本發明之意義而言意指包含小有機分子 (SMOLED) 之有機發光二極體以及聚合物發光二極體 (PLED) 二者，其中 SMOLED 表示較佳 OLED。

包含式(1)化合物之有機層較佳為具有電子傳輸功能之層。特佳的是電子注入層(EIL)、電子傳輸層(ETL)、電洞阻擋層(HBL)或發光層(EML)，其中若此化合物存在於發光層中，則為更佳。

根據本申請案之電洞傳輸層為具有電洞傳輸功能之層，其位在陽極和發光層之間。

根據本申請案之電子傳輸層為具有電子傳輸功能之層，其位在陰極和發光層之間。

電洞注入層和電子阻擋層就本發明之意義而言意指電洞傳輸層之特定實施態樣。在陽極和發光層之間的多個電洞傳輸層之情況下，電洞注入層為直接相鄰於陽極或僅以陽極的單一塗層分離之電洞傳輸層。在陽極和發光層之間的多個電洞傳輸層之情況下，電子阻擋層為直接相鄰於陽極側上的發光層之電洞傳輸層。

如上面已經提到者，在一較佳具體實例中，式(1)化合物係用作有機電子裝置(特別是有機電致發光裝置，例如 OLED 或 OLEC)中的發光層中之基質材料。式(1)之基質材料在此與一種或多種摻雜劑(較佳地磷光摻雜劑)組合存在於電子裝置中。

術語磷光摻雜劑通常包括其中發光經由自旋禁止躍遷

(spin-forbidden transition)進行(例如從激發三重態或具有較高自旋量子數之狀態(例如五重態))躍遷之化合物。

適當磷光摻雜劑特別為在適當激發時發光(較佳在可見光區域內)且另外含有至少一種具有原子序大於 20，較佳為大於 38 且少於 84，特佳為大於 56 且少於 80 的原子之化合物。所使用之磷光發光體較佳為含有銅、鋁、鎢、銻、釷、鐵、銻、鉍、鈮、鉑、銀、金或鎘的化合物，特別是含有銻、鉑或銅的化合物。

所有發光的銻、鉑或銅錯合物就本申請案之意義而言被視為磷光化合物。磷光摻雜劑的例子給予於下段。

在包含基質材料及摻雜劑的系統中之摻雜劑意指在混合物中比例較小的成分。對應地，在包含基質材料及摻雜劑之系統中的基質材料意指在混合物中比例較大的成分。

在發光層中之基質材料的比例在此情況下就螢光發光層而言介於 50.0 和 99.9 體積%之間，較佳地介於 80.0 和 99.5 體積%之間和特佳介於 92.0 和 99.5 體積%之間，並就磷光發光層而言介於 85.0 與 97.0 體積%之間。

對應地，摻雜劑的比例就螢光發光層而言介於 0.1 和 50.0 體積%之間，較佳地介於 0.5 和 20.0 體積%之間和特佳介於 0.5 和 8.0 體積%之間，並就磷光發光層而言介於 3.0 與 15.0 體積%之間。

有機電致發光裝置之發光層亦可包含含有多種基質材料(混合基質系統)及/或多種摻雜劑之系統。亦在此情況下，摻雜劑通常為系統中比例較小的材料及基質材料為系



統中比例較大的材料。然而，在個別的情況下，系統中的個別基質材料之比例可小於個別摻雜劑比例。

在本發明之另一較佳實施態樣中，式(1)之化合物係用作混合-基質系統之成分。混合-基質系統較佳包含二或三種不同基質材料，特佳二種不同基質材料。二種材料之一者在此較佳為具有電洞傳輸性質之材料且其他材料為具有電子傳輸性質之材料。然而，混合-基質成分之所要電子傳輸和電洞傳輸性質也可主要或完全組合於單一混合-基質成分中，其中另外混合-基質成分滿足其他功能。二種不同基質材料在此可以 1:50 至 1:1，較佳地 1:20 至 1:1，特佳 1:10 至 1:1 及非常特佳地 1:4 至 1:1 的比率存在。混合-基質系統較佳地使用於磷光有機電致發光裝置中。對於混合-基質系統之更準確的資訊特別是給予於申請案 WO 2010/108579 中。

可與根據本發明之化合物組合用作混合-基質系統的基質成分之特別適合的基質材料係選自下示磷光摻雜劑之較佳基質材料或螢光摻雜劑之較佳基質材料，取決於混合-基質系統中使用什麼類型之摻雜劑。

本發明因此也關於一種組成物，其包含至少一種式(1)之化合物和至少一種其他基質材料。較佳之其他基質材料為下述基質材料。

本發明也關於一種組成物，其包含至少一種式(1)之化合物和至少一種寬能帶間隙材料，其中寬能帶間隙材料意指一種就 US 7,294,849 之揭示的意義之材料。此等系統

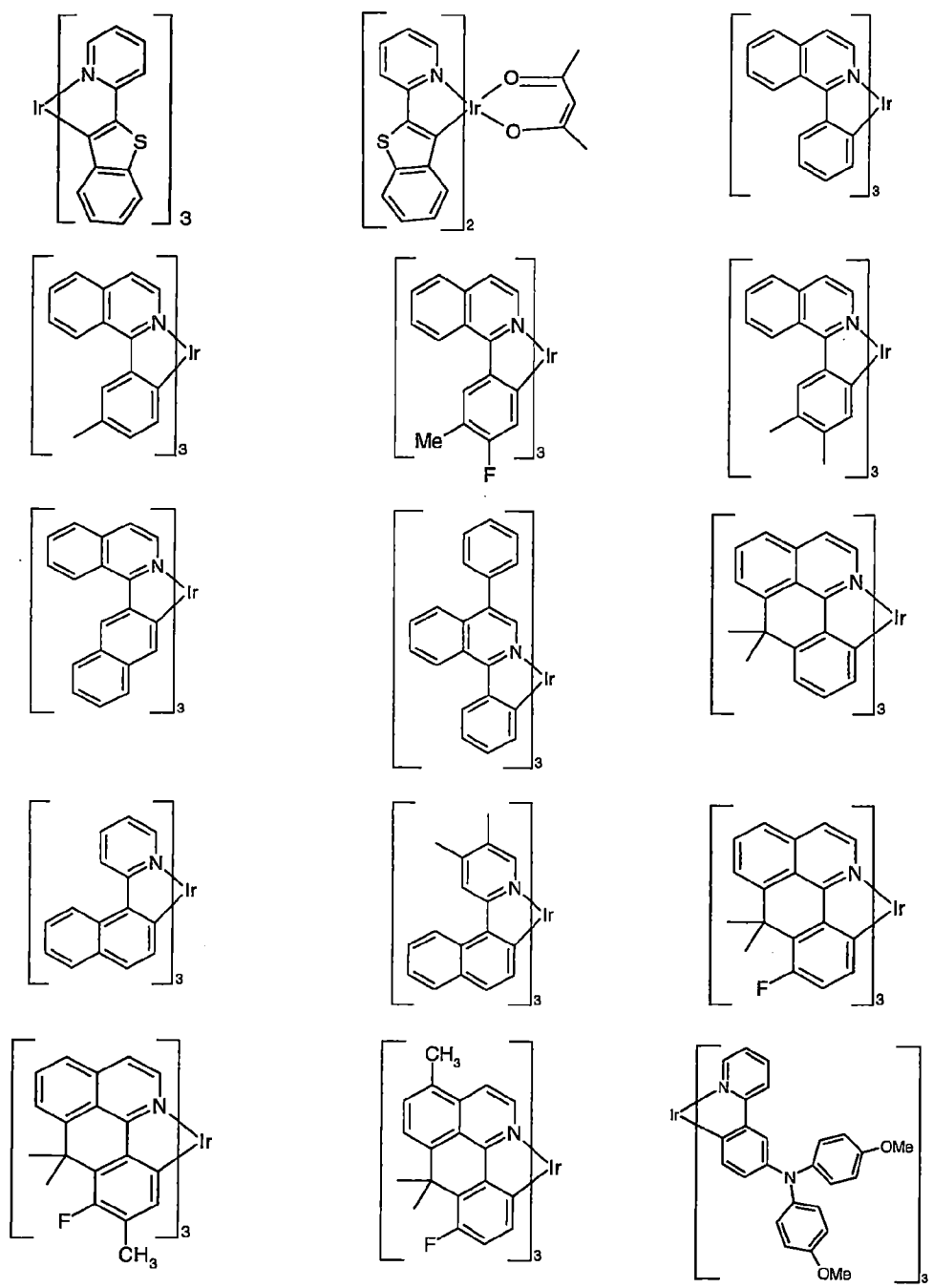
在電致發光裝置中呈現特別有利的性能數據。若寬能帶間隙材料之能帶間隙為 3,5 eV 或更大，則其為特佳的，其中能帶間隙意指 HOMO 和 LUMO 之間的能量差。軌域能量係藉由上述方法測定。

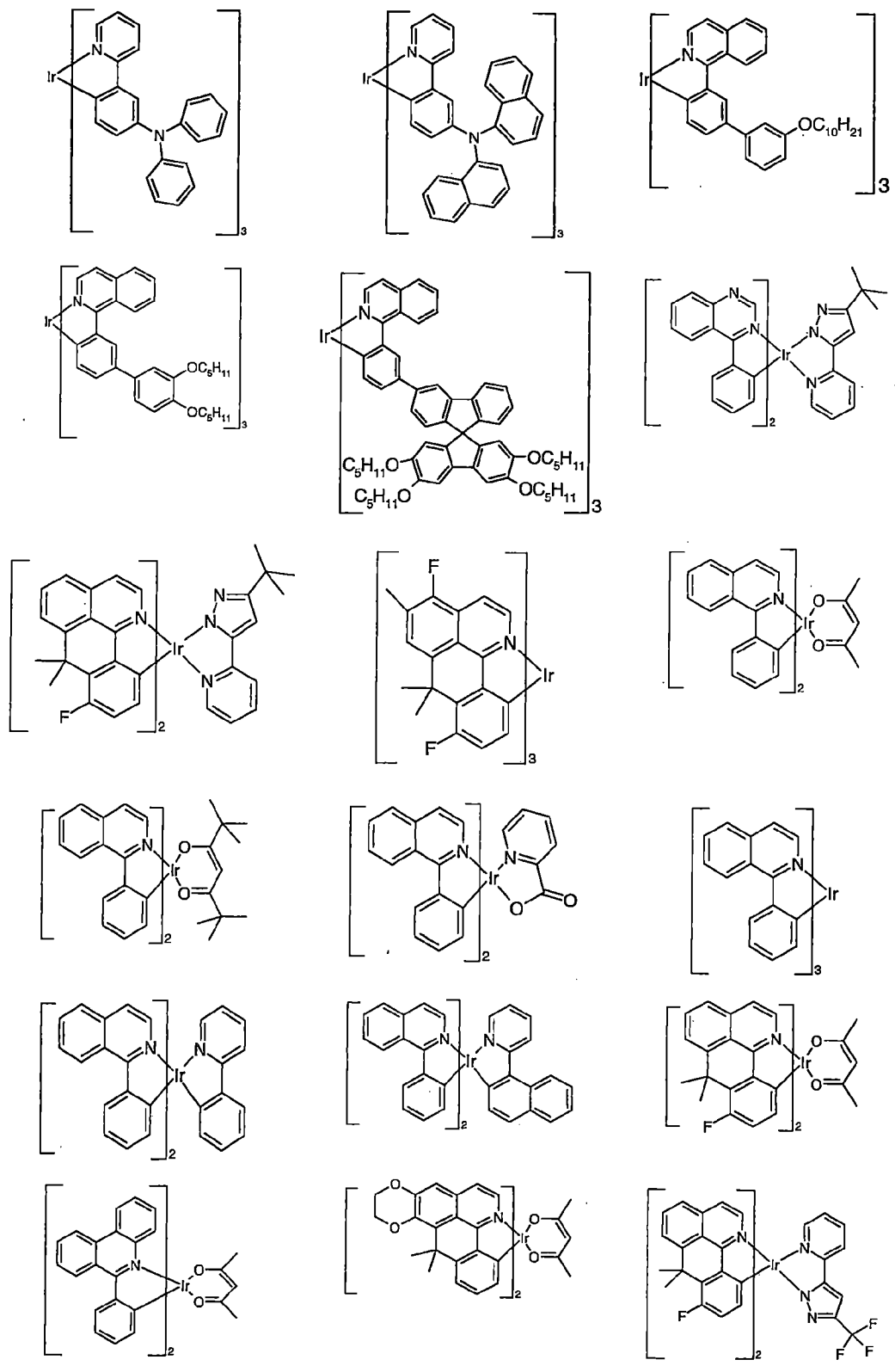
本發明此外關於一種組成物，其包含至少一種式(1)之化合物和至少一種選自由下列所組成之群組的其他有機半導體材料：螢光發光體、磷光發光體、主體材料、基質材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞導體材料、電洞注入材料、電子阻擋材料和電洞阻擋材料。

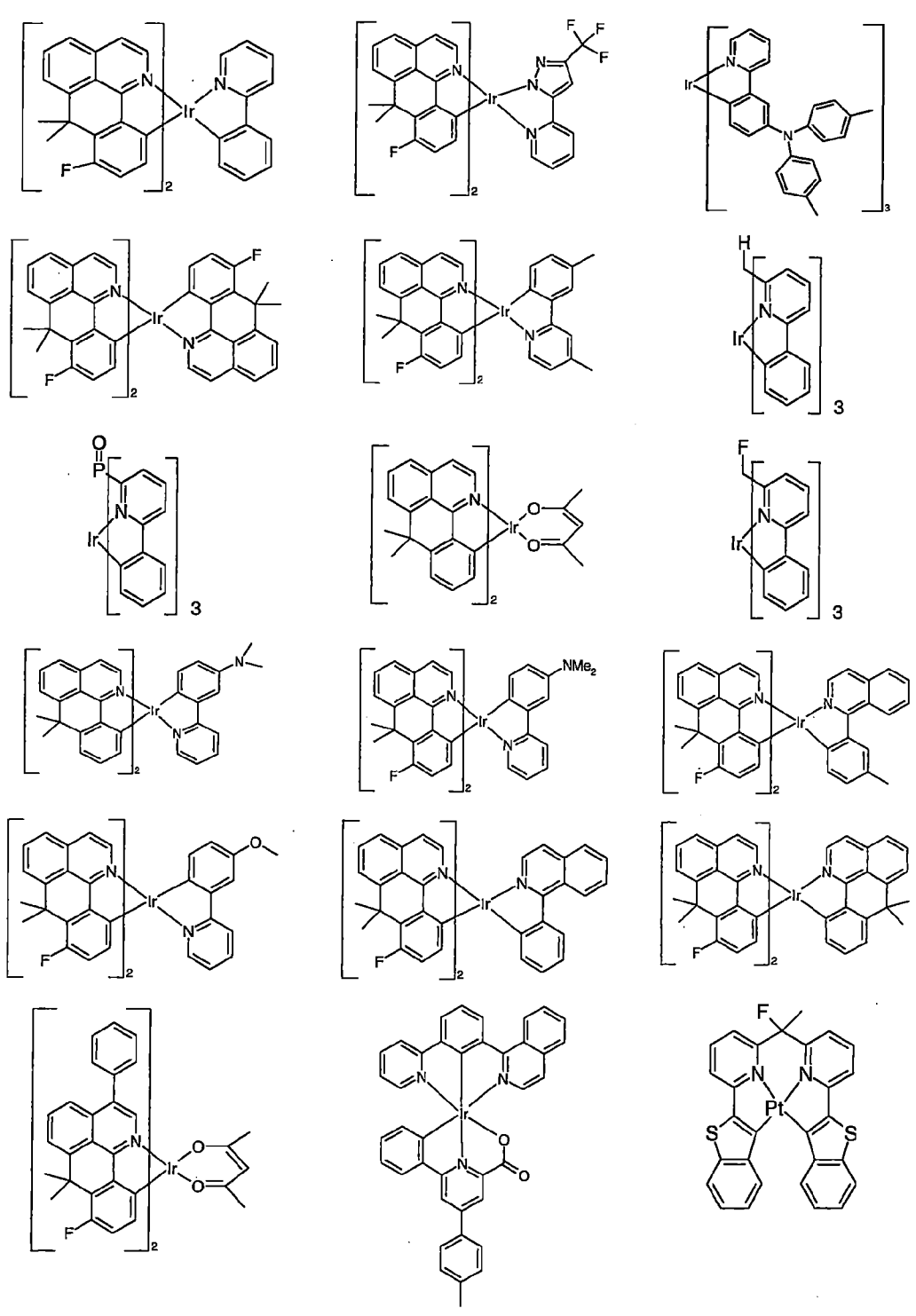
用於混合基質系統之較佳磷光摻雜劑為上示較佳磷光摻雜劑。

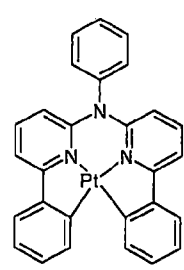
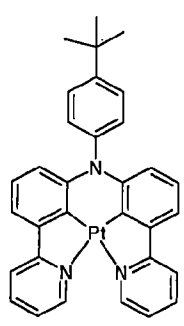
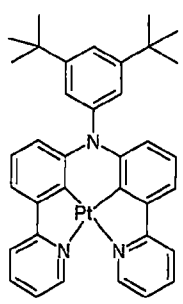
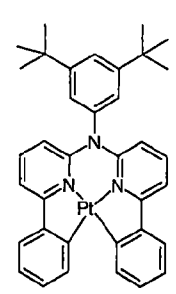
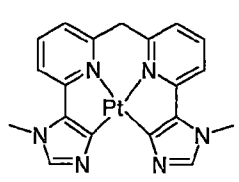
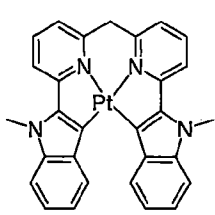
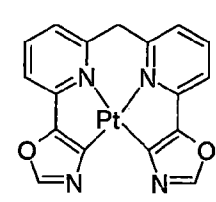
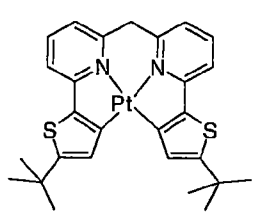
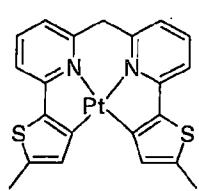
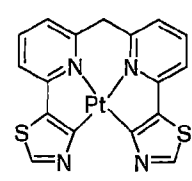
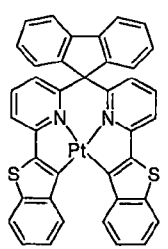
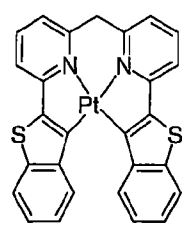
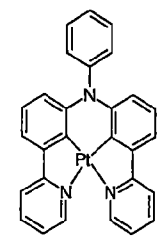
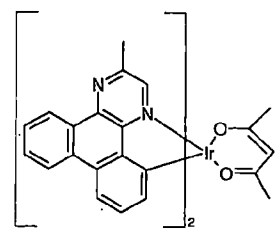
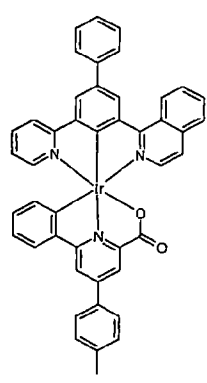
磷光摻雜劑的實例係由申請案 WO 2000/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 2005/033244、WO 2005/019373 和 US 2005/0258742 揭露。一般而言，如根據先前技術用於磷光 OLED 及如熟習有機電致發光裝置領域之技術者已知的所有磷光錯合物均適合使用於根據本發明之裝置。

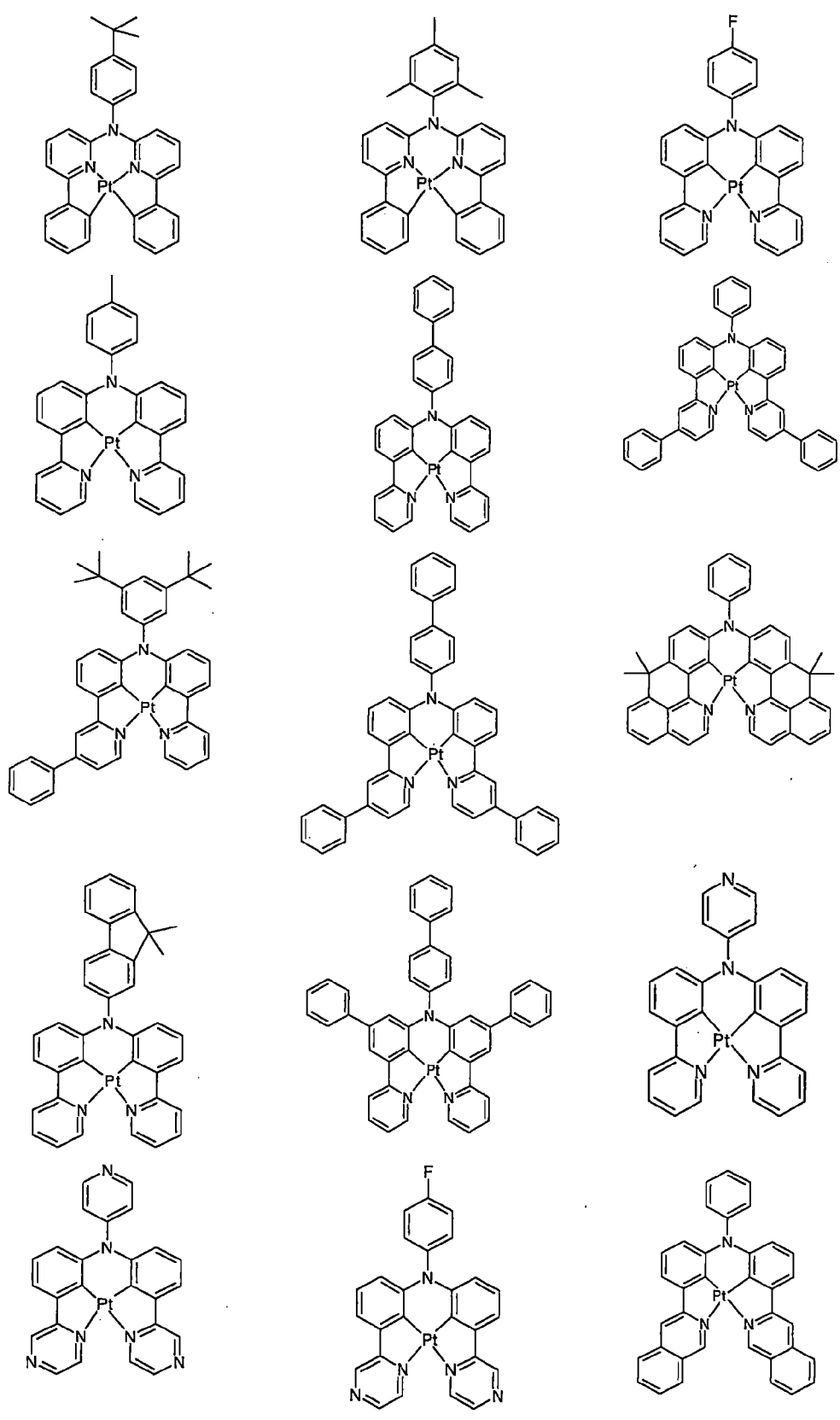
磷光摻雜劑之明確例子顯示於下表中。

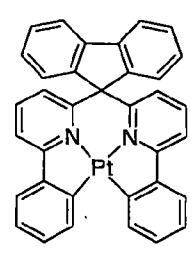
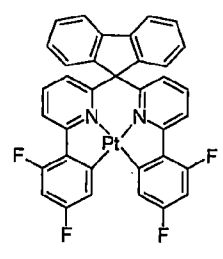
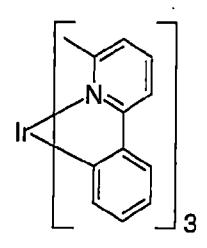
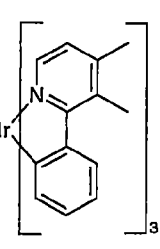
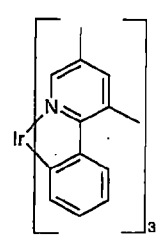
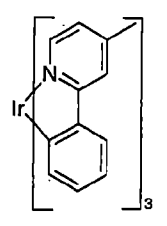
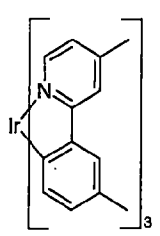
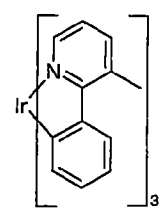
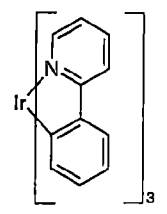
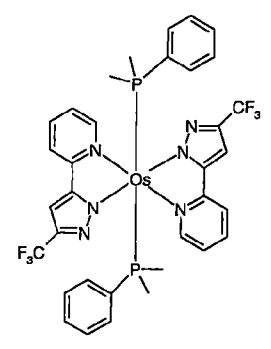
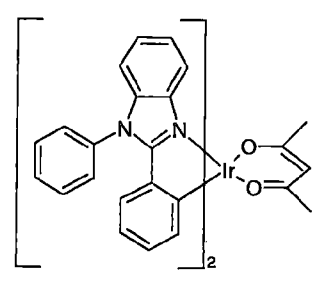
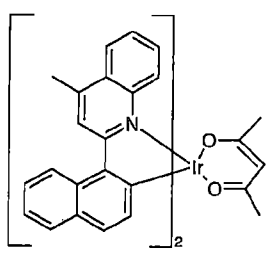
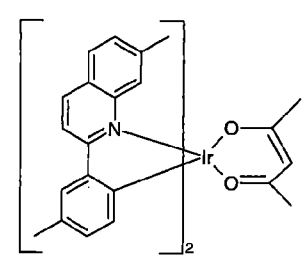
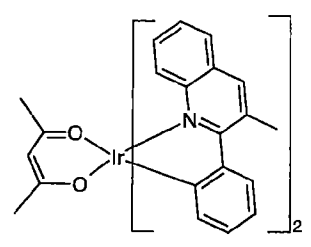
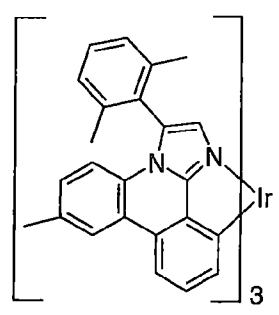
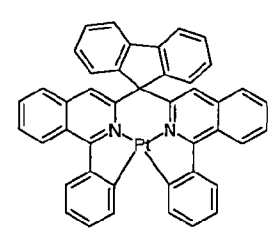
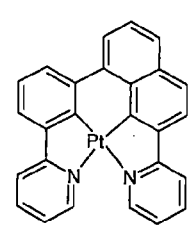
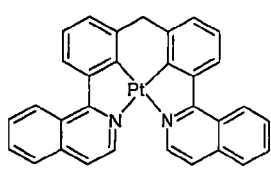




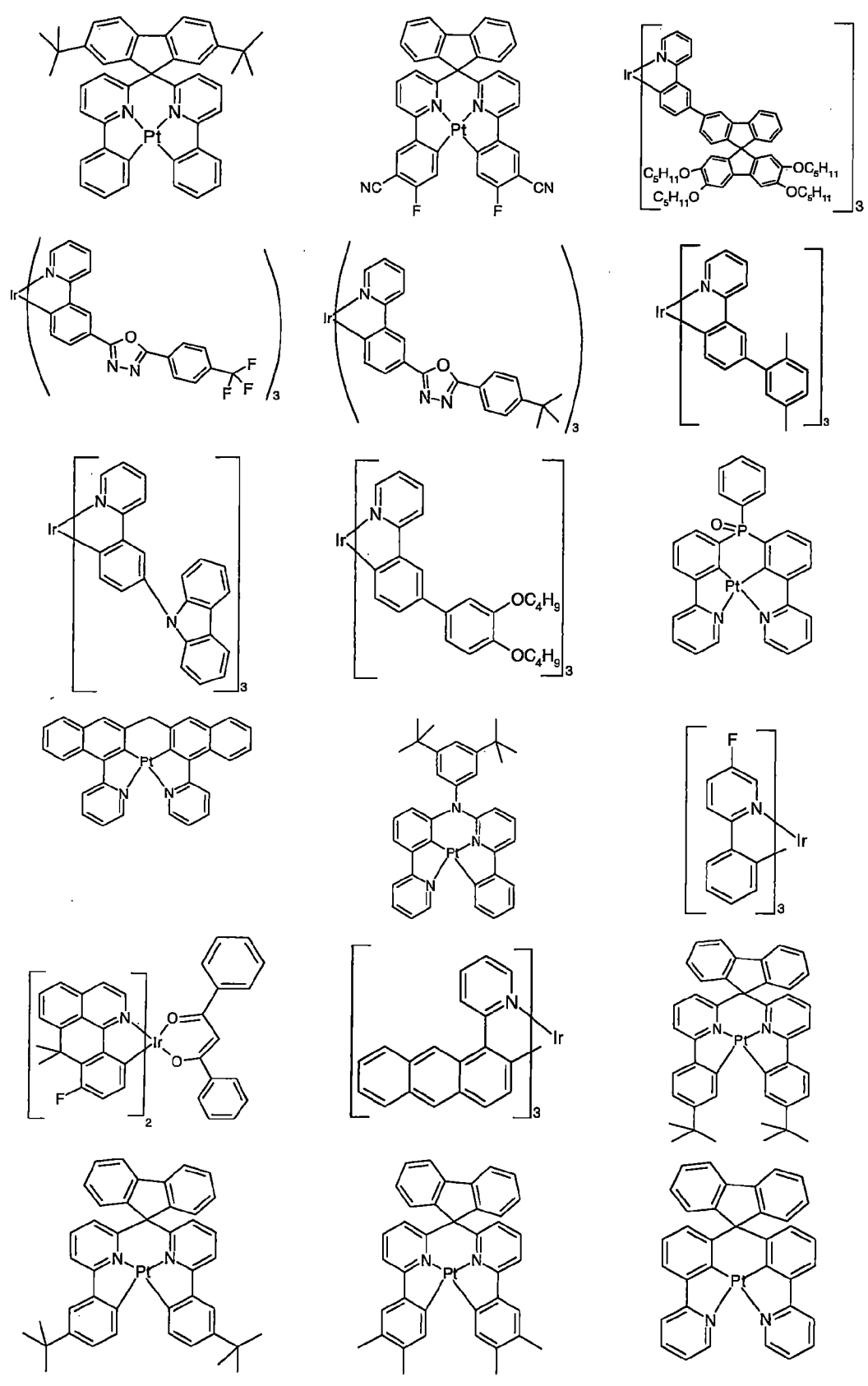


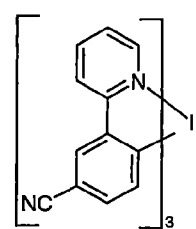
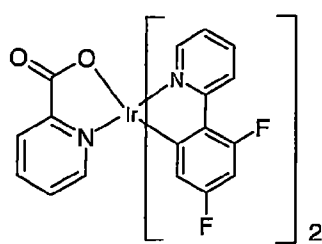
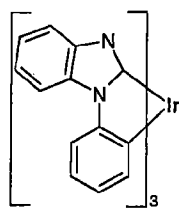
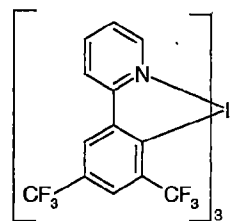
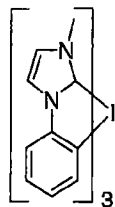
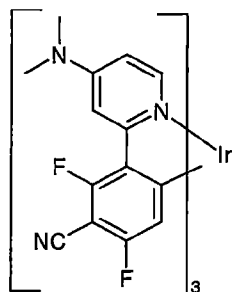
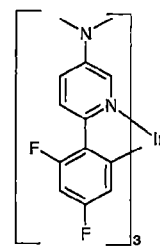
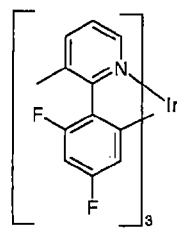
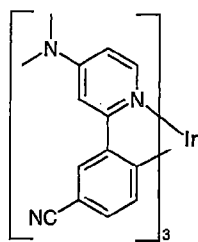
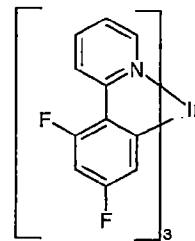
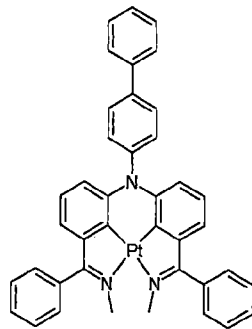
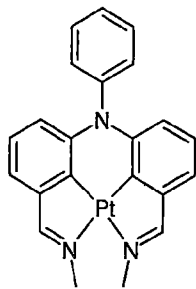
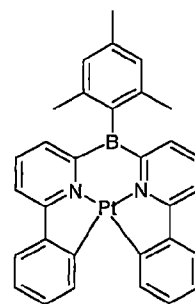
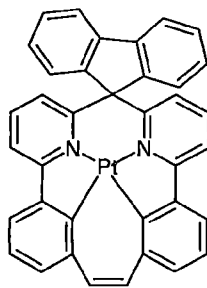
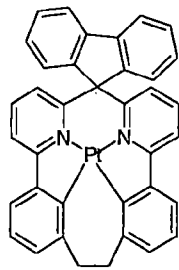


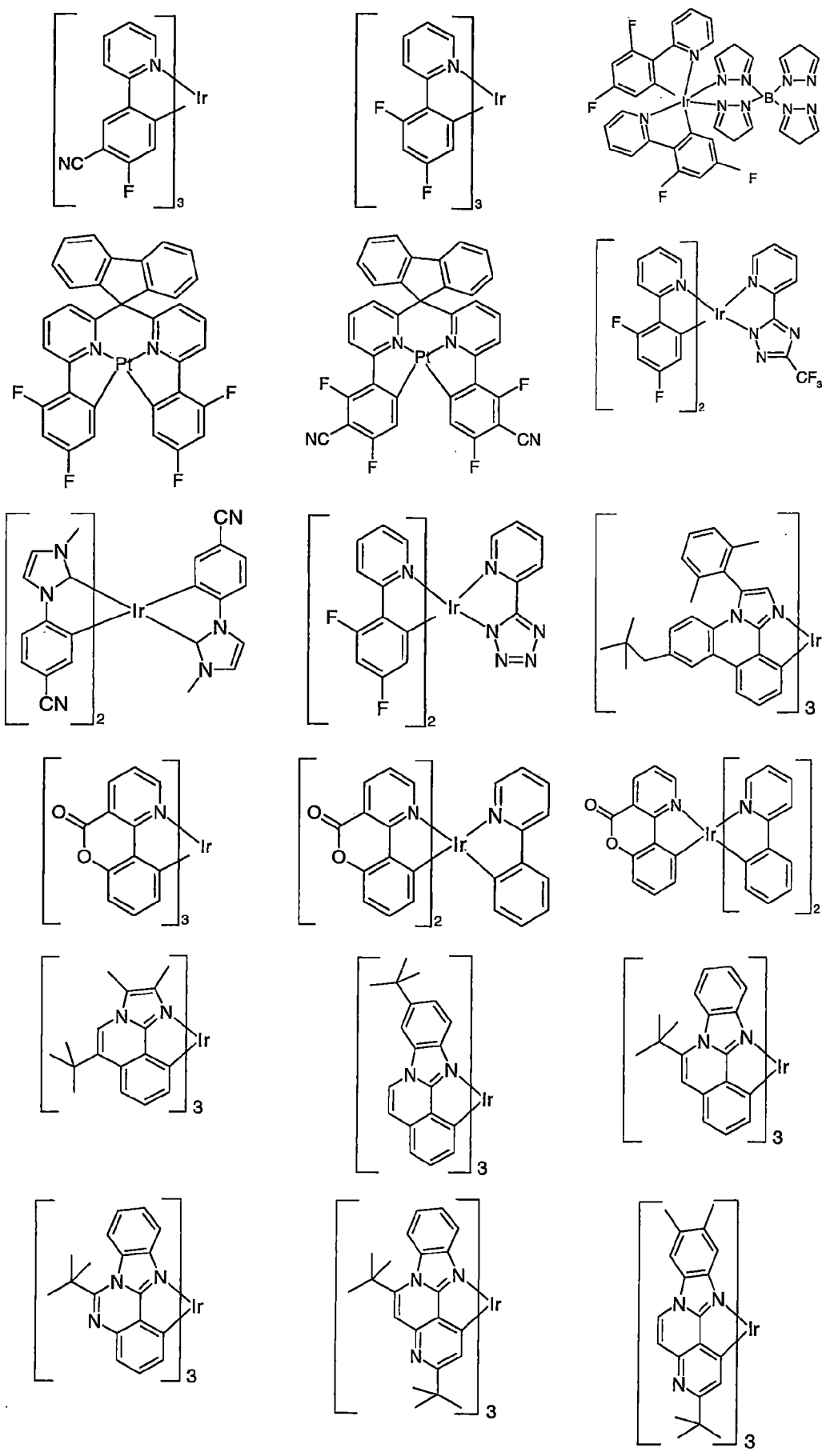












較佳螢光摻雜劑係選自芳基胺之類別。芳基胺或芳族胺就本發明之意義而言意指含有三個經取代或未經取代之芳族或雜芳族環系統直接鍵結於氮之化合物。此等芳族或雜芳族環系統中之至少一者較佳為縮合環系統，特佳具有至少 14 個芳族環原子。其較佳例子為芳族蔥胺、芳族蔥二胺、芳族芘胺、芳族芘二胺、芳族萘胺類或芳族萘二胺。芳族蔥胺意指其中一個二芳胺基與蔥基直接鍵結之化合物，較佳地在 9-位置上。芳族蔥二胺意指其中二個二芳胺基與蔥基直接鍵結之化合物，較佳地在 9,10-位置上。芳族芘胺、芘二胺、萘胺及萘二胺係與其類似地定義，其中二芳胺基較佳地在 1-位置或 1,6-位置上與芘鍵結。另外的較佳摻雜劑為蒽並萘胺和蒽並萘二胺(例如根據 WO 2006/108497 或 WO 2006/122630)、苯並蒽並萘胺和苯並蒽並萘二胺(例如根據 WO 2008/006449)、和二苯並蒽並萘胺和二苯並蒽並萘二胺(例如根據 WO 2007/140847)、和 WO 2010/012328 中所揭示的含有縮合芳基之蒽並萘衍生物。

除了式(1)化合物之外，較佳用於螢光摻雜劑之適當基質材料為選自各種類之物質的材料。較佳基質材料係選自寡聚伸芳基(oligoarylene)(例如根據 EP 676461 之 2,2',7,7'-肆苯基螺聯萘或二萘基蔥)，特別是含有縮合芳族基團之寡聚伸芳基、寡聚伸芳基伸乙烯基(oligoarylenevinylene)(例如根據 EP 676461 之 DPVBi 或螺-DPVBi)、多牙(polypodal)金屬錯合物(例如根據

WO 2004/081017)、電洞傳導化合物(例如根據 WO 2004/058911)、電子傳導化合物,特別是酮、氧化磷、亞砷、等等(例如根據 WO 2005/084081 和 WO 2005/084082)、阻轉異構物(例如根據 WO 2006/048268)、硼酸衍生物(例如根據 WO 2006/117052)或苯並蔥類(例如根據 WO 2008/145239)之種類。特佳基質材料係選自包含萘、蔥、苯並蔥及/或芘之寡聚伸芳基(oligoarylene)或這些化合物的阻轉異構物、寡聚伸芳基伸乙烯基(oligoarylenevinylene)、酮類、氧化磷類和亞砷類之種類。非常特佳的基質材料係選自包含蔥、苯並蔥、苯並菲及/或芘之寡聚伸芳基(oligoarylene)或這些化合物的阻轉異構物之種類。寡聚伸芳基(oligoarylene)就本發明之意義而言意欲表示一種其中至少三個芳基或伸芳基彼此鍵結之化合物。

除式(1)化合物之外,用於磷光摻雜劑之較佳基質材料為芳族胺(特別是三芳基胺,例如根據 US 2005/0069729)、咪唑衍生物(例如 CBP, N,N-雙咪唑基聯苯)或根據 WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527 或 WO 2008/086851 之化合物、橋聯咪唑衍生物(例如根據 WO 2011/088877 和 WO 2011/128017)、茚並咪唑衍生物(例如根據 WO 2010/136109 和 WO 2011/000455)、氮雜咪唑衍生物(例如,根據 EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160)、吡啶並咪唑衍生物(例如根據

WO 2007/063754 或 WO 2008/056746)、酮(例如根據 WO 2004/093207 或 WO 2010/006680)、氧化磷、亞碲和碲(例如根據 WO 2005/003253)、寡聚伸苯基、雙極性基質材料(例如根據 WO 2007/137725)、矽烷(例如根據 WO 2005/111172)、氮硼雜環戊烯(azaborole)或硼酸酯(例如根據 WO 2006/117052)、三吡啉衍生物(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)、鋁錯合物(例如 BA1q)、二氮雜矽雜環戊二烯(diazasilole)和四氮雜矽雜環戊二烯衍生物(例如根據 WO 2010/054729)、二氮磷雜環戊二烯(diazaphosphole)衍生物(例如根據 WO 2010/054730)和鋁錯合物(例如 BA1Q)。

除了陰極、陽極及包含式(1)化合物之層以外，電子裝置亦可包含另外的層。此等另外的層例如在各情況下係選自一或多個電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、發光層、電子傳輸層、電子注入層、電子阻擋層、激子阻擋層、間層、電荷產生層(IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, *Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer*)及/或有機或無機 p/n 界面。然而，應指出的是該等層中之各者不一定必須存在。

有機電致發光裝置的層之順序較佳為下列：

陽極 / 電洞注入層 / 電洞傳輸層 / 發光層 / 電

子傳輸層 / 電子注入層/陰極。在此應再指出不是所有的該等層都必須存在，及/或可有更多另外的層存在。

根據本發明之有機電致發光裝置可包含多個發光層。此等發光層在此情況下特佳具有總計多個在 380 nm 與 750 nm 之間的發光最大值，導致整體為白色發光，即將能夠發螢光或磷光及發藍光或黃光或橘光或紅光的各種發光化合物使用於發光層中。特佳者為三層系統，亦即具有三個發光層之系統，其中該三層呈現藍色、綠色和橘色或紅色發光(基本結構參見例如 WO 2005/011013)。應注意的是：為了產生白光，單獨使用之發射寬波長範圍的發光體化合物亦適合於代替多個發色之發光體化合物。

適當電荷傳輸材料當可用於根據本發明之有機電致發光裝置的電洞注入或電洞傳輸層或電子阻擋層或電子傳輸層中，為(例如) Y. Shirota 等人，Chem. Rev. 2007，107(4)，953-1010 中所揭示之化合物或根據先前技術用於該等層中之其他材料。

可用於電子傳輸層之材料為根據先前技術用作電子傳輸層中之電子傳輸材料的所有材料。特別適合者為鋁錯合物(例如  $Alq_3$ )、鋯錯合物(例如  $Zrq_4$ )、苯並咪唑衍生物、三吡啶衍生物、嘧啶衍生物、吡啶衍生物、吡嗪衍生物、喹啉衍生物、喹啉衍生物、嗎二唑衍生物、芳族酮類、內醯胺類、硼烷類、二氮磷雜環戊二烯(diazaphosphole)衍生物及氧化磷衍生物。此外適合的材料為上述化合物之衍生物，如 JP 2000/053957、WO 2003/060956、WO

2004/028217、WO 2004/080975 及 WO 2010/072300 中所揭示者。

電洞傳輸材料特佳為可用於電洞傳輸層、電洞注入層或電子阻擋層中之材料，茛苳並萘胺衍生物(例如根據 WO 06/122630 或 WO 06/100896)、EP 1661888 中所揭示之胺衍生物、六氫雜三伸苯基衍生物(例如根據 WO 01/049806)、含有縮合之芳族環的胺衍生物(例如根據 US 5,061,569)、WO 95/09147 中所揭示之胺衍生物、單苯並茛苳並萘胺類(例如根據 WO 08/006449)、二苯並茛苳並萘胺類(例如，根據 WO 07/140847)、螺雙萘胺類(例如根據 WO 2012/034627 或尚未公開之 EP 12000929.5)、萘胺類(例如，根據尚未公開之申請案 EP 12005369.9、EP 12005370.7 和 EP 12005371.5)、螺二苯並哌喃胺類(例如根據尚未公開之申請案 EP 11009127.9)和二氫吡啶衍生物(例如根據尚未公開之 EP 11007067.9)。

電子裝置之陰極較佳包含具有低功函數之金屬、金屬合金或包含各種金屬(諸如，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、等等))之多層結構。亦適合的是包含鹼金屬或鹼土金屬和銀之合金，例如包含鎂和銀之合金。在多層結構之情況中，除該等金屬外，也可使用具有較高功函數之其他金屬，諸如，例如 Ag 或 Al，在該情況中通常使用金屬之組合，諸如，例如 Ca/Ag、Mg/Ag 或 Ag/Ag。較佳亦可於金屬陰極與有機半導體之間引入具有高介電常數之材料



的薄間層。適合於此目的者為(例如)鹼金屬氟化物或鹼土金屬氟化物，但對應氧化物或碳酸鹽(例如  $\text{LiF}$ 、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{BaF}_2$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{NaF}$ 、 $\text{CsF}$ 、 $\text{Cs}_2\text{CO}_3$ 、等等)亦適合。此外，喹啉酸鋰(LiQ)可使用此目的。此層之厚度較佳係介於 0.5 和 5 nm 之間。

陽極較佳包含具有高功函數之材料。陽極較佳具有相對於真空為大於 4.5 eV 之功函數。適合此目的者一方面為具有高氧化還原電位之金屬，諸如(例如)Ag、Pt 或 Au。另一方面，金屬/金屬氧化物電極(例如  $\text{Al/Ni/NiO}_x$ 、 $\text{Al/PtO}_x$ )亦可為較佳的。就一些應用而言，至少一個電極必須為透明或部分透明，以便促進有機材料之照射(有機太陽能電池)或光之耦合輸出(OLED、O-雷射)。較佳陽極材料在此為導電性混合金屬氧化物。特佳者為氧化銦錫(ITO)或氧化銦鋅(IZO)。此外較佳者為導電性摻雜型有機材料，特別為導電性摻雜型聚合物。此外，陽極也可由多層(例如 ITO 的內層和金屬氧化物(較佳氧化鎢、氧化鉬或氧化釩)的外層)組成。

製造期間，將電子裝置適當地(視應用而定)結構化，配備接點且最後密封，因為在水及/或空氣存在下根據本發明之裝置的壽命縮短。

在一較佳實施態樣中，根據本發明之電子裝置其特徵在於利用昇華方法施加一或多層，其中該等材料係於真空昇華單元中在低於  $10^{-5}$  毫巴，較佳低於  $10^{-6}$  毫巴之初壓力下藉由氣相沈積施加。然而，初壓力在此也可能甚至更

低，例如低於  $10^{-7}$  毫巴。

同樣較佳者為一種有機電致發光裝置，其特徵在於利用 OVPD(有機蒸氣相沈積)法或輔以載體-氣體昇華法施加一或多層，其中該等材料係在介於  $10^{-5}$  毫巴與 1 巴之間的壓力下施加。此方法的一特殊例子為 OVJP(有機蒸氣噴墨印刷)法，其中該等材料係經由噴嘴直接施加且因此結構化(例如，M. S. Arnold 等人之 Appl. Phys. Lett. 2008，92，053301)。

此外較佳者為一種有機電致發光裝置，其特徵在於諸如(例如)以旋轉塗佈或利用任何所要印刷法(諸如，例如網版印刷、快乾印刷、噴嘴印刷或平版印刷，但是特佳為 LITI(光誘導熱成像、熱轉移印刷)或噴墨印刷)從溶液製造一或多層。為此目的需要可溶性之式(1)化合物。高溶解度可經由化合物的適當取代來達成。

為了製備根據本發明之有機電致發光裝置，此外較佳的是從溶液施加一或多層並藉由昇華方法施加一或多層。

本發明因此此外關於一種製造根據本發明電子裝置之方法，其特徵在於藉由氣相沈積或從溶液施加至少一層有機層。

根據本發明，包含一或多種式(1)化合物之電子裝置可用於顯示器中、作為照明應用中之光源及作為醫學及/或美容應用(例如光療法)中之光源。

本發明也關於一種調配物，其包含至少一種式(1)之化合物或至少一種上述組成物和至少一種溶劑。

適當且較佳的溶劑為(例如)甲苯、苯甲醚、鄰-、間-或對-二甲苯、苯甲酸甲酯、對稱三甲苯、四氫萘、藜蘆醚、THF、甲基-THF、THP、氯苯、二噁烷、苯氧基甲苯(特別是 3-苯氧基甲苯)、(-)-葑酮、1,2,3,5-四甲基苯、1,2,4,5-四甲基苯、1-甲基萘、2-甲基苯並噻唑、2-苯氧基乙醇、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、 $\alpha$ -萸品醇、苯並噻唑、苯甲酸丁酯、異丙苯、環己醇、環己酮、環己基苯、十氫萘、十二烷基苯、苯甲酸乙酯、茚烷、苯甲酸甲酯、NMP、對-異丙基甲苯、苯基乙基醚、1,4-二異丙基苯、二苄基醚、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、二乙二醇單丁基醚、三丙二醇二甲基醚、四乙二醇二甲基醚、2-異丙基萘、戊基苯、己基苯、庚基苯、辛基苯、1,1-雙(3,4-二甲基苯基)乙烷或此等溶劑之混合物。

包含通式(1)化合物之裝置可以非常靈活的方式使用。因此(例如)包含一或多種通式(1)化合物之電致發光裝置可使用於電視、行動電話、電腦和相機之顯示器中。然而，該裝置也可使用於照明應用。此外，包含至少一種式(1)化合物之電致發光裝置(例如在 OLED 或 OLEC 中)可使用於醫學或美容中之光療法。因此，可治療許多疾病(牛皮癬、異位性皮炎、發炎、青春痘、皮膚癌、等等)或可防止或減少皮膚皺紋、皮膚變紅和皮膚老化。此外，可利用該發光裝置以便保持飲料、膳食或食物的新鮮或以便消

毒設備(例如醫療設備)。

本發明因此有關一種用於光療法之醫學中的電子裝置(較佳為有機電致發光裝置，非常佳地為 OLED 或 OLEC 及非常特佳地為 OLED)，其包含至少一種式(1)之化合物。

本發明此外較佳地有關一種用於皮膚疾病的光療法治療之電子裝置(較佳為有機電致發光裝置，非常佳地為 OLED 或 OLEC 及非常特佳地為 OLED)，其包含至少一種式(1)之化合物。

本發明此外非常佳地有關一種用於牛皮癬、異位性皮炎、炎症、白斑症、創傷癒合和皮膚癌之光療治療的電子裝置(較佳為有機電致發光裝置，非常佳地為 OLED 或 OLEC 及非常特佳地為 OLED)，其包含至少一種式(1)之化合物。

本發明此外有關包含至少一種式(1)之化合物的電子裝置(較佳為有機電致發光裝置，非常佳地為 OLED 或 OLEC 及非常特佳地為 OLED)之用途，其係用於美容，較佳地用於青春痘、皮膚老化、和皮下脂肪團之治療。

根據本發明之化合物或根據本發明之有機電致發光裝置區別在於下列超越先前技術之令人驚訝的優點：

1. 根據本發明之化合物非常適合使用於發光層，且相較於來自先前技術之化合物，呈現改良的性能數據。
2. 根據本發明之化合物具有較低昇華溫度、高溫度穩定性且因此可在不分解及無殘餘物下昇華。此外，彼等

具有高氧化穩定性和高玻璃轉移溫度，其二者對於加工性(例如從溶液或從氣相)皆是有利的，且對於化合物用於電子裝置中的也有利的。

3. 根據本發明之化合物使用於電子裝置(特別是用作電子傳輸或電子注入材料，但也作為基質材料)，導致高效率、低操作電壓和長壽命。

應指出的是：本發明中所述實施態樣的變化落在本發明的範圍內。本發明中所揭示之各個特徵，除非明確排除在外，否則可以用作相同、同等或類似目的之替代特徵置換。因此，本發明中所揭示之各個特徵，除非另有說明，否則應視為通用系列之一個實例或作為等效或類似的特徵。

所有本發明之特徵可以任何方式彼此組合，除非某些特徵及/或步驟是互斥的。此特別適用於本發明的較佳特徵。同樣地，非必要組合的特徵可單獨使用(而不是組合)。

此外應指出：許多特徵且特別是本發明之較佳實施態樣的特徵為發明本身且不應僅被視為本發明之實施態樣的一部分。對於此等特徵，除了或替代目前主張的各項發明之外，可尋求獨立保護。

對於以本發明揭示之技術作用的教示可予以提取和結合其他的實例。

本發明係藉由下列實施例更詳細地說明，不希望因而限制本發明。

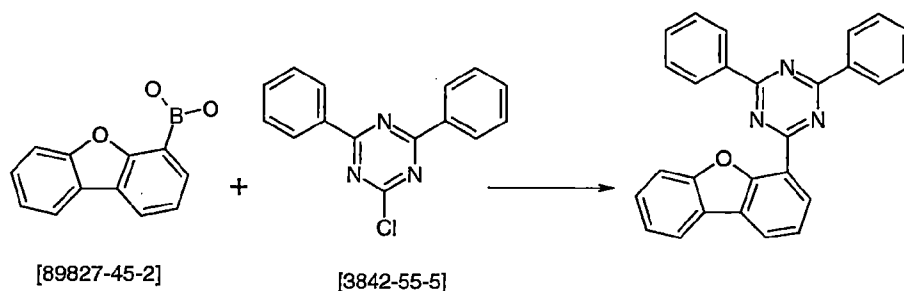
## 【實施方式】

## 實施例

除非另外指出，否則在保護性氣體氛圍下於乾燥溶劑中進行下列合成。溶劑和試劑可購買自例如 Sigma-ALDRICH 或 ABCR。在從文獻已知的化合物之方括號中的號碼係關於 CAS 號碼。

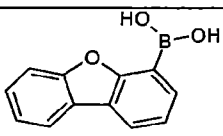
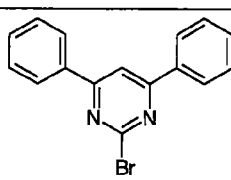
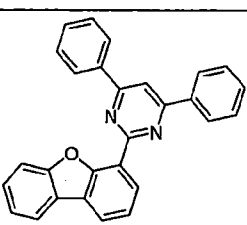
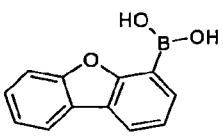
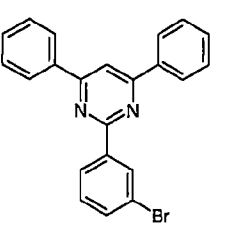
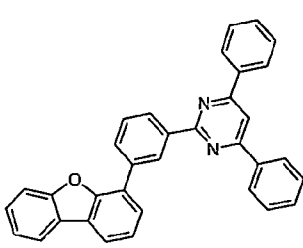
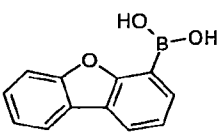
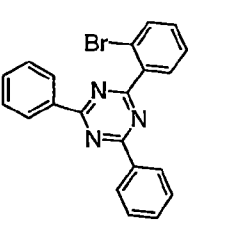
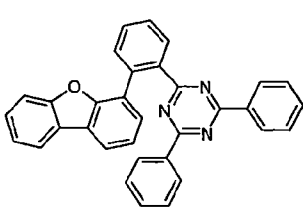
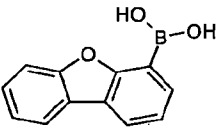
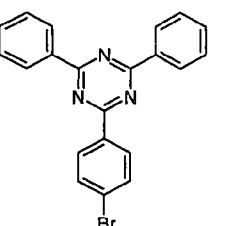
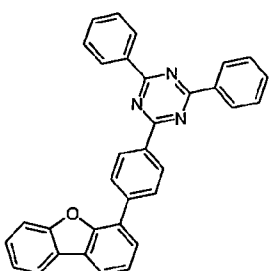
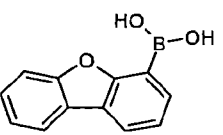
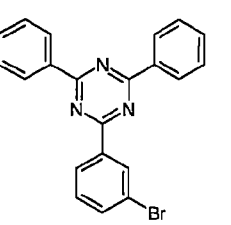
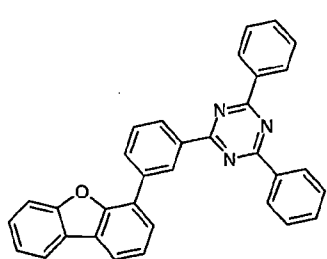
## 實施例 1

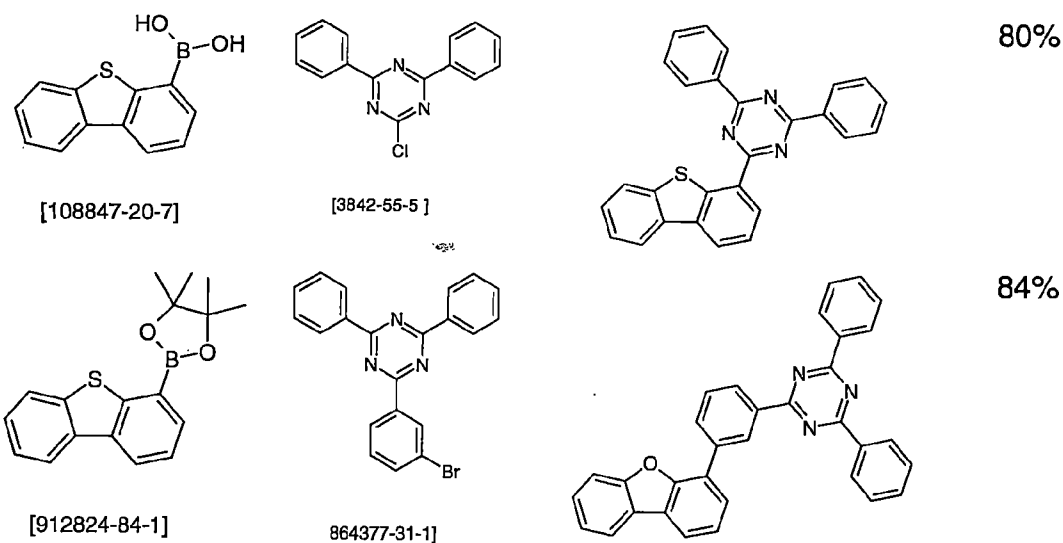
## 2-二苯並呋喃-4-基-4,6-二苯基-1,3,5-三吡的合成



將 28.9 g (136 mmol) 的二苯並呋喃-4-硼酸、33 g (124.1 mmol) 的 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡和 78.9 ml (158 mmol) 的  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (2 M 溶液) 懸浮在 120 ml 的甲苯、120 ml 的乙醇和 100 ml 的水中。將 2.6 g (2.2 mmol) 的  $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$  加到此懸浮液，並將反應混合物在回流下加熱 16 h。冷卻之後，將有機相分離，通過矽膠過濾，用 200 ml 的水洗滌三次並隨後蒸發至乾燥。將殘餘物從甲苯再結晶。產量為 45 g (112 mmol)，相當於理論的 91%。

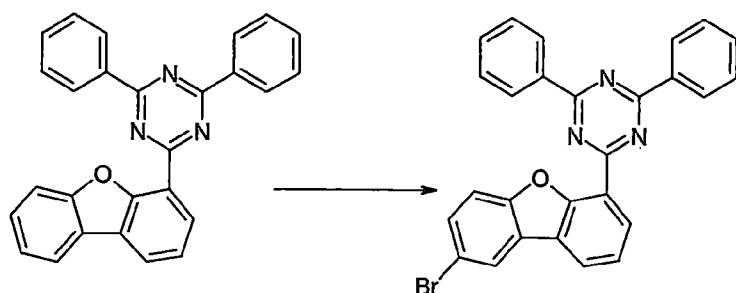
可類似地獲得下列化合物：

起始材料 <b>1</b>	起始材料 <b>2</b>	產物	產率
 [89827-45-2]	 [56181-49-8]		82%
 [89827-45-2]	 [864377-22-0]		79%
 [89827-45-2]	 77989-15-2		70%
 [89827-45-2]	 [23449-08-3]		78%
 [89827-45-2]	 864377-31-1]		82%



## 實施例 2

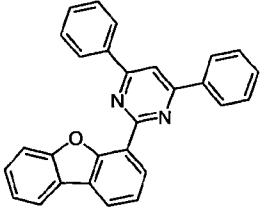
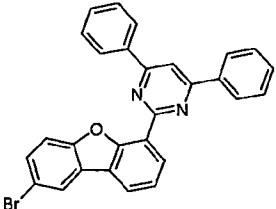
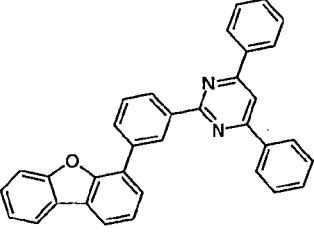
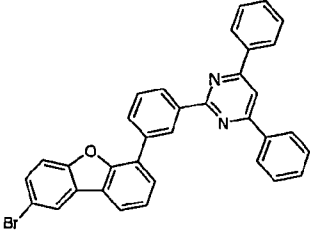
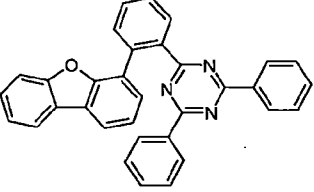
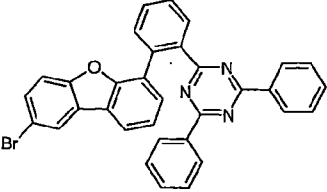
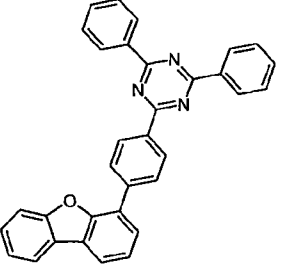
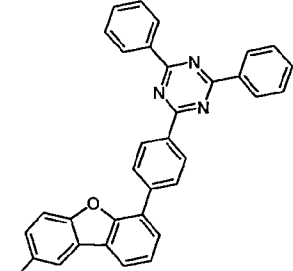
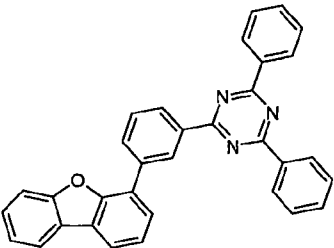
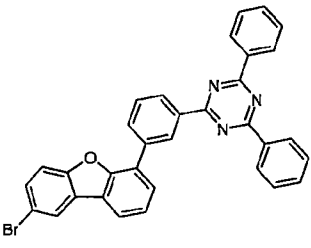
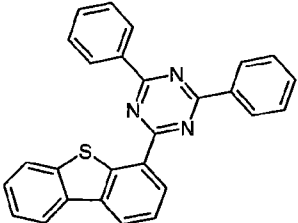
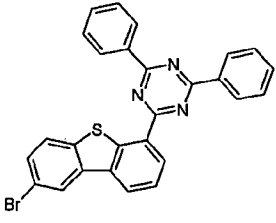
### 2-(8-溴二苯並呋喃-4-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三吡的合成

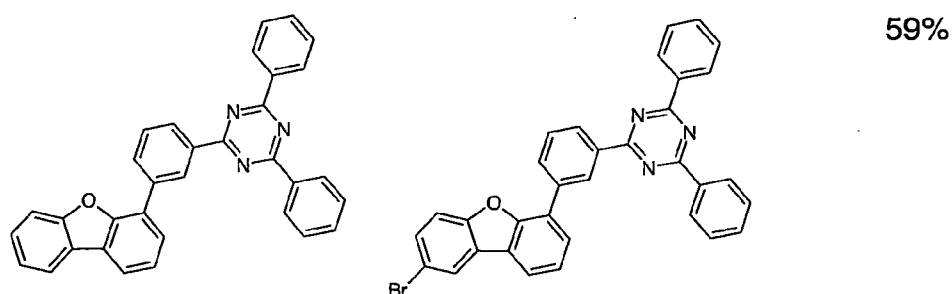


將 16 g (41 mmol) 的 2-二苯並呋喃-4-基-4,6-二苯基-1,3,5-三吡最初與 8 mg 的 N-溴琥珀醯亞胺 (NBS) (45 mmol, 1.1 mol%) 一起引入 100 ml 的乾燥二甲基甲醯胺 (DMF)。將反應混合物在 120°C 下加熱 24 h，並接著在真空中移除溶劑。藉由急驟層析法在矽膠上用庚烷/DCM (2/1) 作為溶析液純化殘餘物。產量為 14.6 g (30 mmol)，相當於理論的 75%。



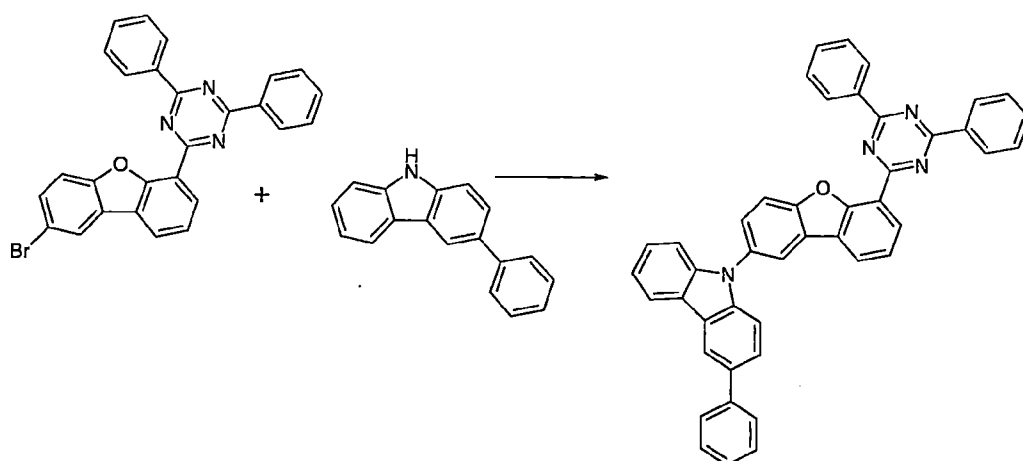
可類似地獲得下列化合物：

起始材料 1	產物	產率
		73%
		58%
		61%
		62%
		63%
		74%



### 實施例 3

9-[6-(4,6-二苯基-1,3,5-三吡-2-基)二苯並呋喃-2-基]-3-苯基-9H-吡啶的合成

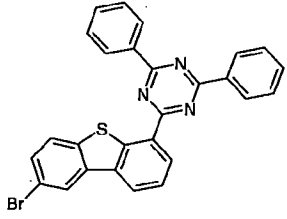
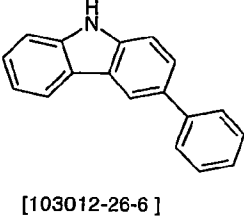
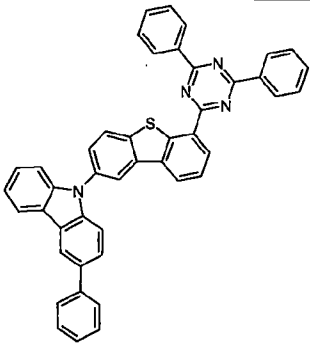
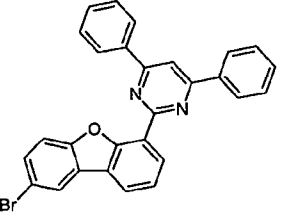
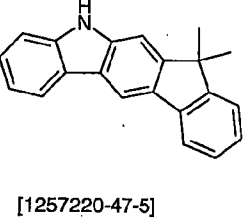
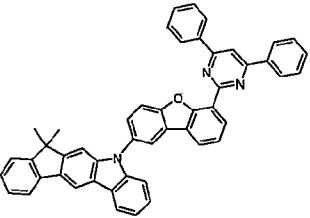
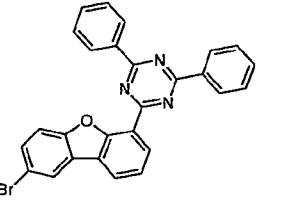
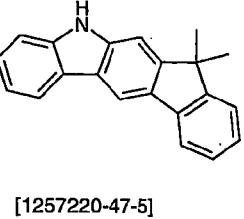
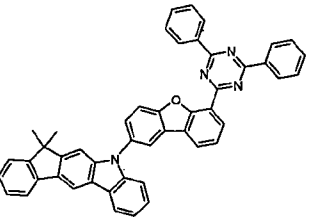
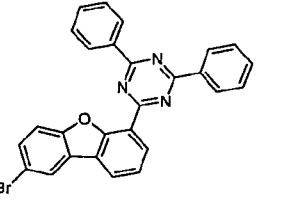
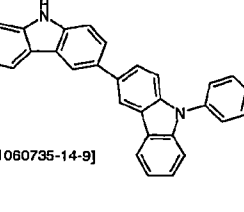
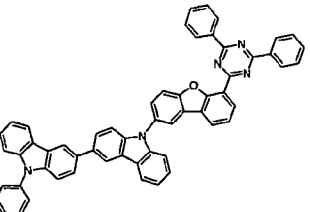


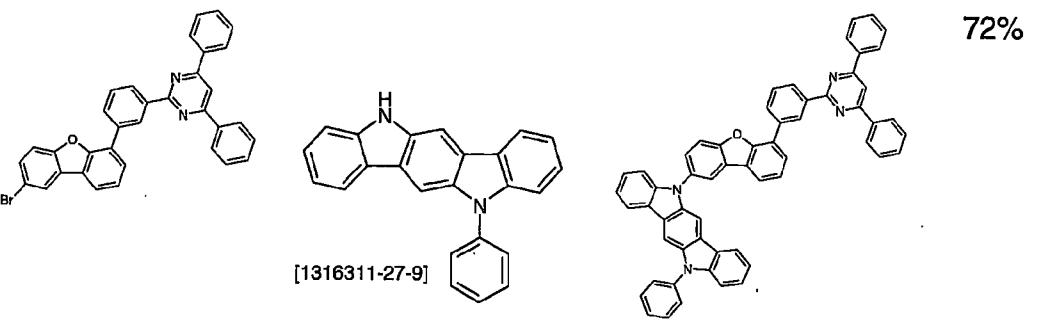
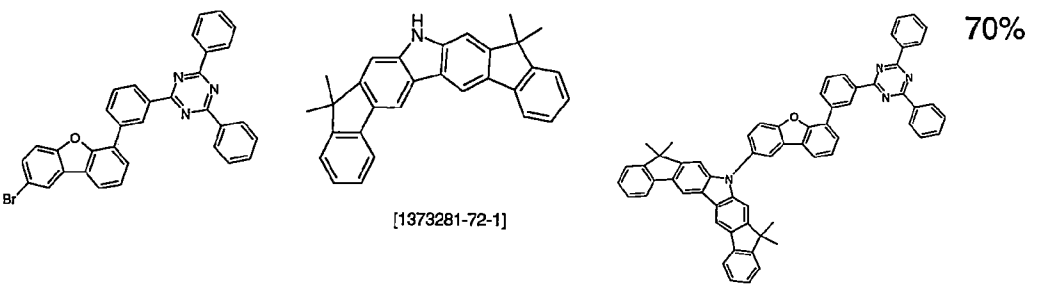
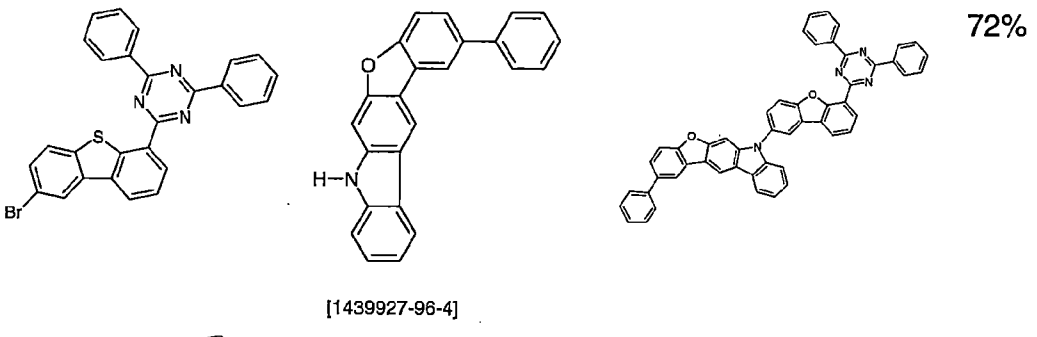
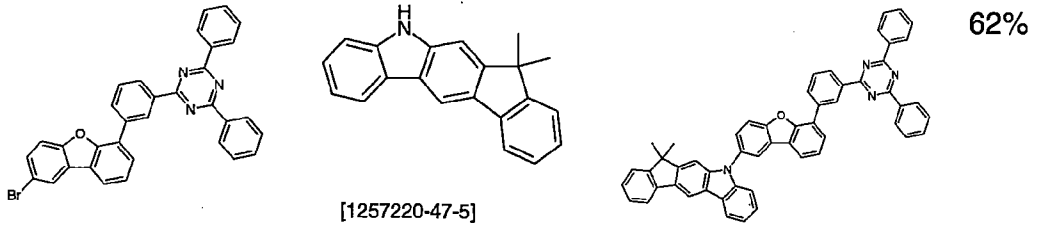
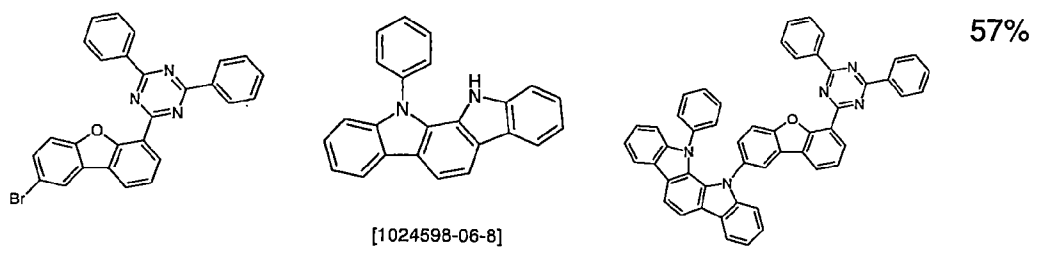
將 70 g (147 mmol) 的 2-(8-溴二苯並呋喃-4-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三吡和 35.7 g (147 mmol) 的 3-苯基-9H-吡啶在 600 ml 的甲苯中之除氣溶液用  $N_2$  飽和 1 h。然後，將首先 2.09 ml (8.6 mmol) 的  $P(tBu)_3$ ，接著 1.38 g (6.1 mmol) 的乙酸鈣(II) 加至溶液，並隨後將 17.7 g (185 mmol) 的  $NaOtBu$  以固態加至溶液。將反應混合物在回流下加熱 1 h。冷卻至室溫之後，小心地加入 500 ml 的水。將水相用

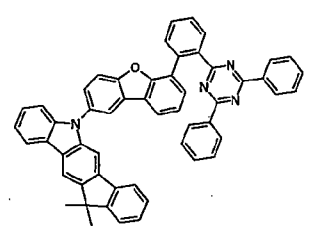
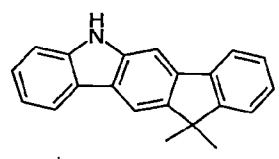
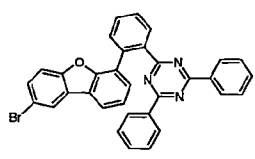
3 × 50 ml 的甲苯洗滌，經 MgSO<sub>4</sub> 乾燥，並在真空中移除溶劑。接著藉由管柱層析法在矽凝膠上用庚烷/乙酸乙酯 (20/1) 將粗製產物純化。將殘餘物從甲苯再結晶且最後在高真空 ( $p = 5 \times 10^{-6}$  毫巴) 中昇華。

產量為 77.7 g (121 mmol)，相當於理論的 83%。

可類似地獲得下列化合物：

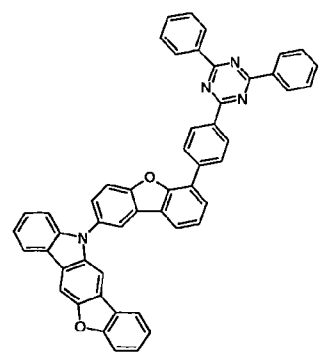
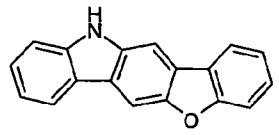
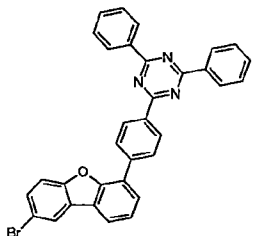
起始材料 1	起始材料 2	產物	產率
	 [103012-26-6]		92%
	 [1257220-47-5]		87%
	 [1257220-47-5]		87%
	 [1060735-14-9]		83%





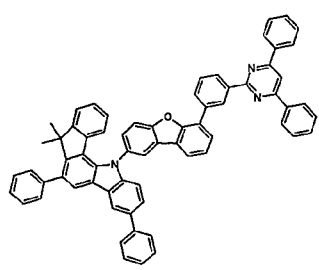
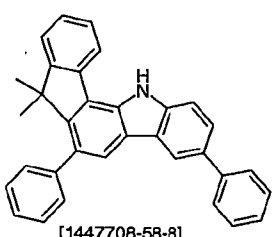
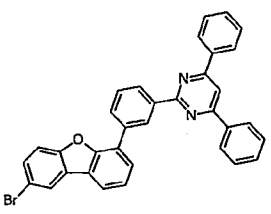
65%

[1260228-95-2]



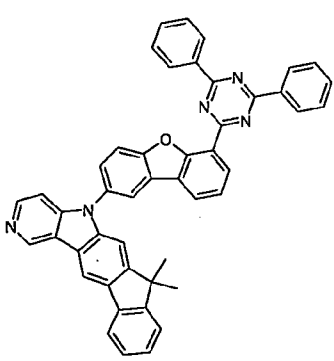
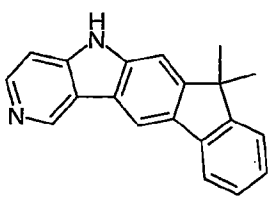
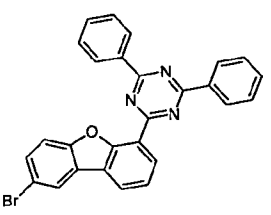
68%

[1199350-22-5]



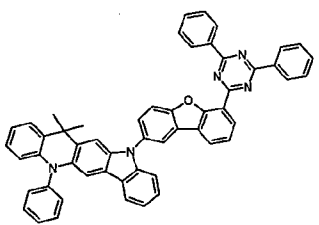
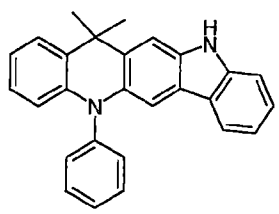
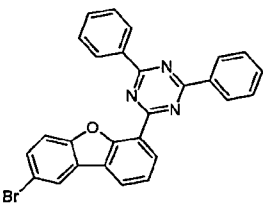
61%

[1447708-58-8]



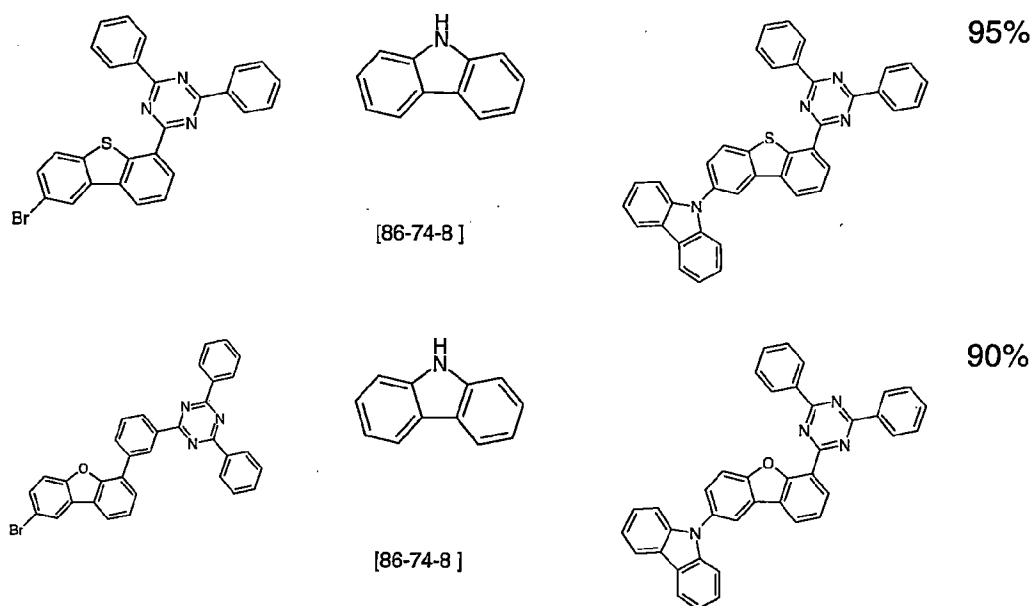
72%

[1257248-14-8]



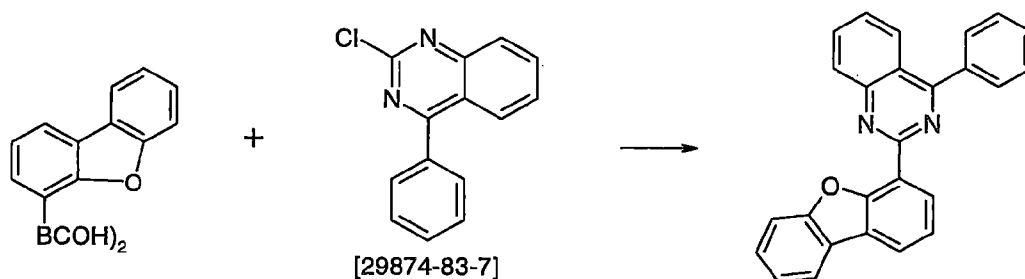
80%

[1361126-04-6]



#### 實施例 4

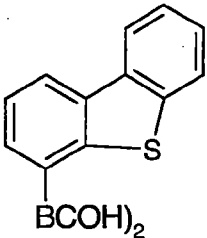
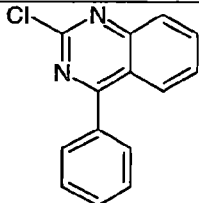
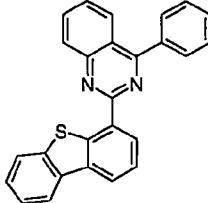
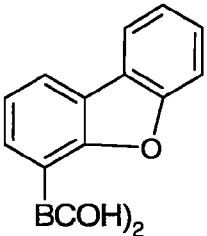
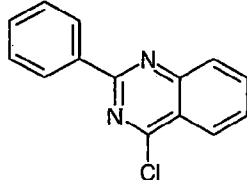
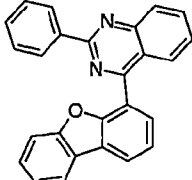
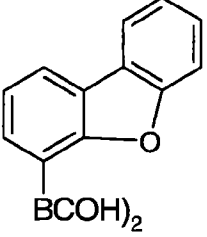
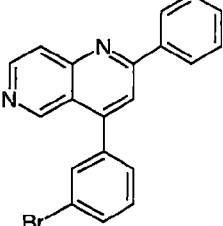
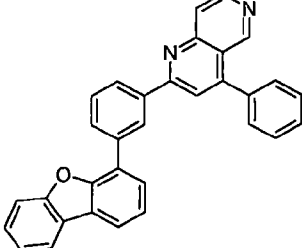
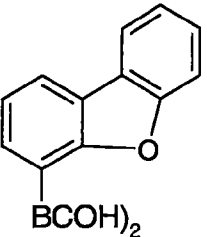
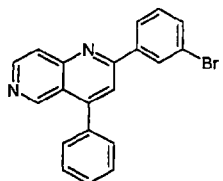
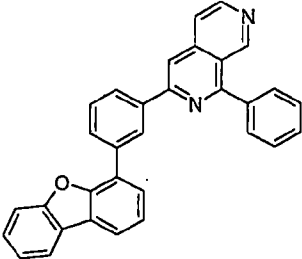
##### 2-二苯並呋喃-4-基-4-苯基喹啉的合成

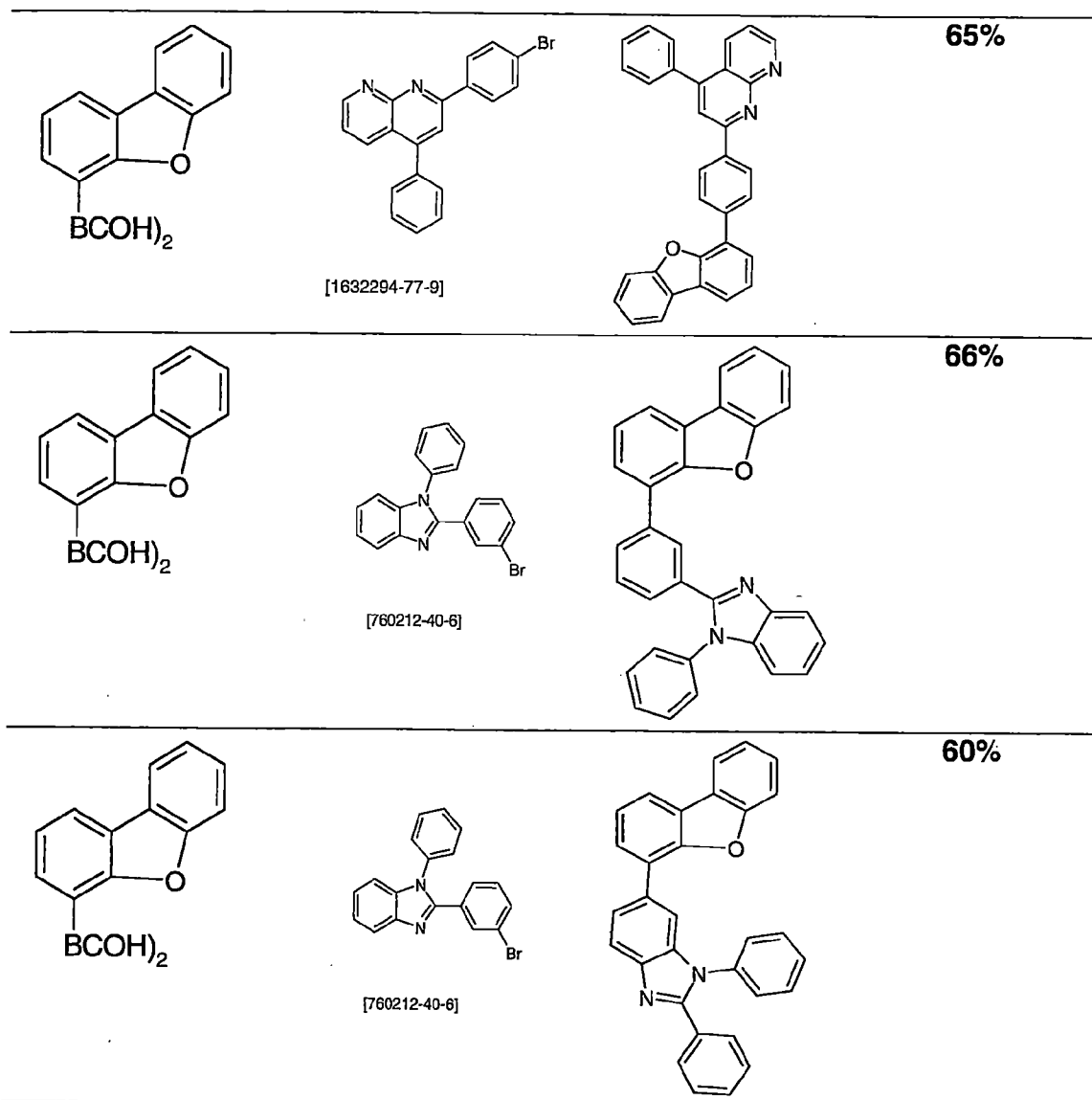


將 23 g (110.0 mmol) 的二苯並呋喃-4-硼酸、29.5 g (110.0 mmol) 的 2-氯-4-苯基喹啉和 26 g (210.0 mmol) 的碳酸鈉懸浮在 500 ml 的乙二醇二胺醚和 500 ml 的水中。將 913 mg (3.0 mmol) 的三-鄰甲苯基膦及接著 112 mg (0.5 mmol) 的乙酸鈣(II)加至此懸浮液。將反應混合物在回流下加熱 16 h。冷卻之後，將有機相分離出來，通過矽膠過濾，用 200 ml 的水洗滌三次和隨後蒸發至乾。將殘餘

物從甲苯和從二氯甲烷/庚烷再結晶。產量為 31 g (85 mmol)，相當於理論的 79%。

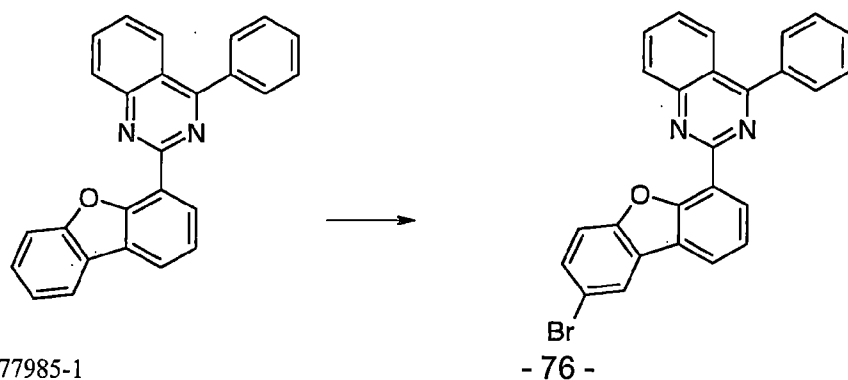
可類似地獲得下列化合物：

起始材料 <b>1</b>	起始材料 <b>2</b>	產物	產率
 BCOH) <sub>2</sub>	 [29874-83-7]		<b>73%</b>
 BCOH) <sub>2</sub>	 [6484-25-9]		<b>69%</b>
 BCOH) <sub>2</sub>	 [1632307-99-3]		<b>67%</b>
 BCOH) <sub>2</sub>	 [1632307-97-1]		<b>63%</b>



實施例 5

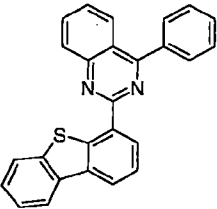
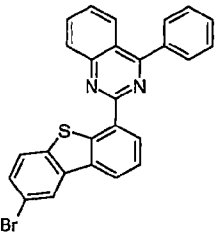
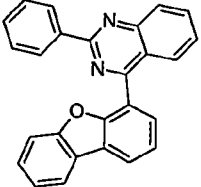
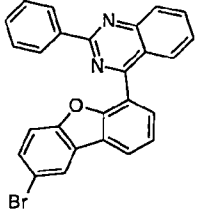
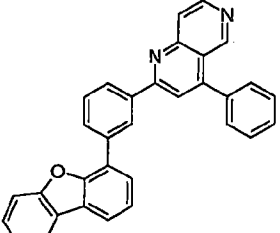
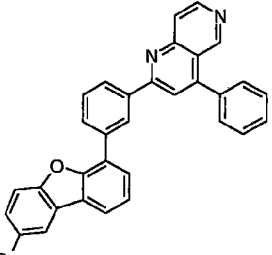
2-(8-溴二苯並呋喃-4-基)-4-苯基喹啉的合成

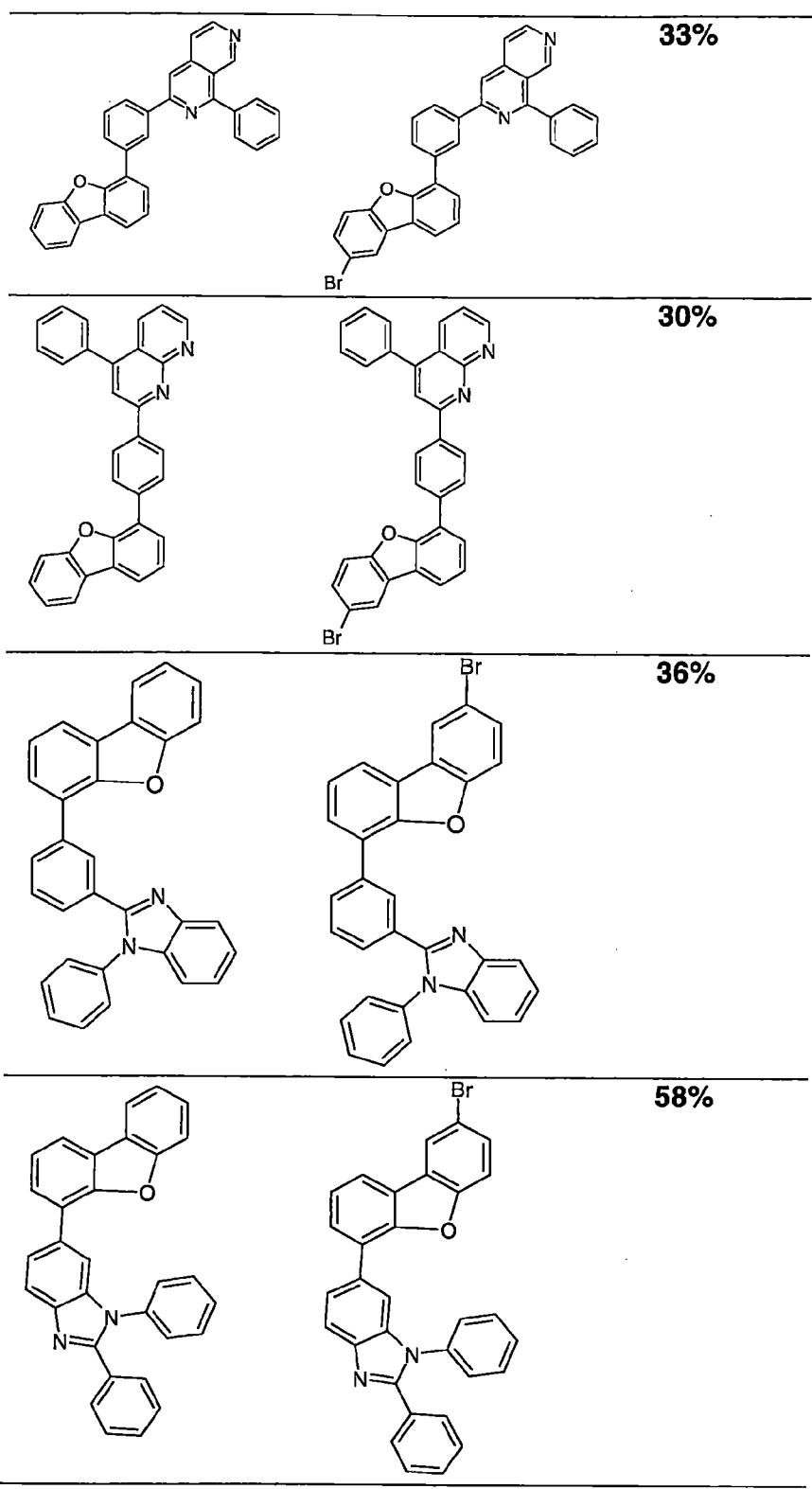




將 70.6 g (190.0 mmol) 的 2-二苯並呋喃-4-基-4-苯基噻啉懸浮於 2000 ml 的乙酸(100%)和 2000 ml 的硫酸(95-98%)中。將 34 g (190 mmol) 的 NBS 分批加至此懸浮液，並將混合物在黑暗中攪拌 2 小時。然後加入水/冰，及將固體分離出並用乙醇沖洗。將殘餘物從甲苯再結晶。產量為 59 g (130 mmol)，相當於理論的 69%。在噻吩的情況下衍生物，採用硝基苯代替硫酸和採用元素溴代替 NBS。

可類似地獲得下列化合物：

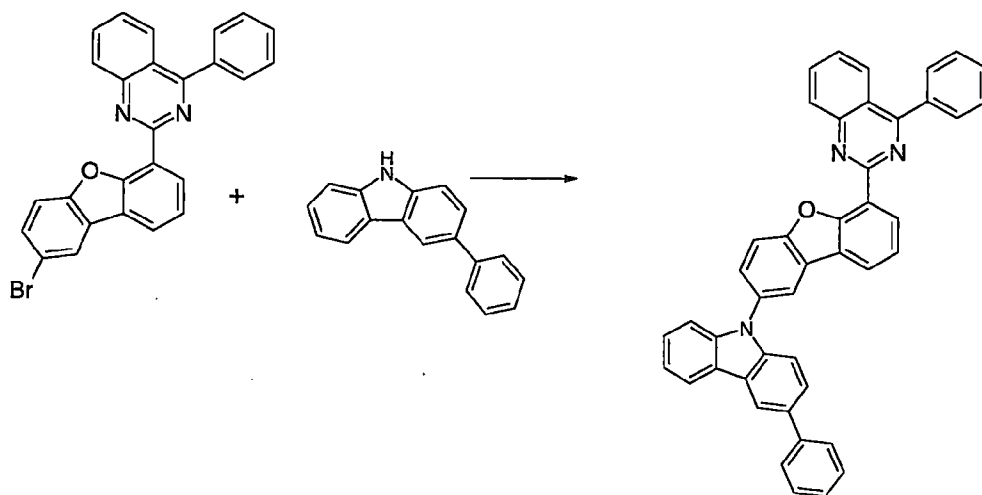
起始材料	產物	產率
		<b>61%</b>
		<b>55%</b>
		<b>31%</b>



實施例 6

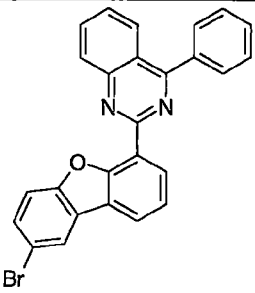
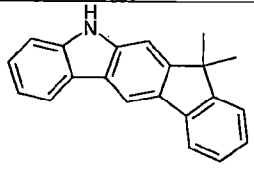
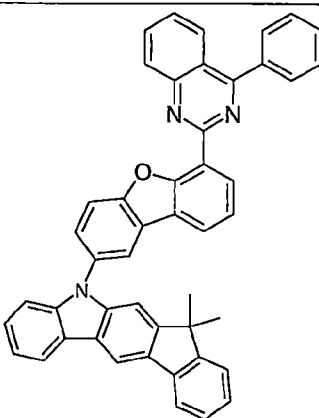
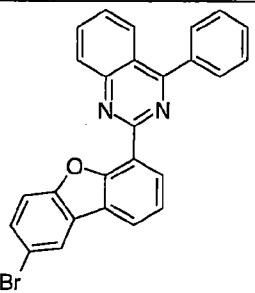
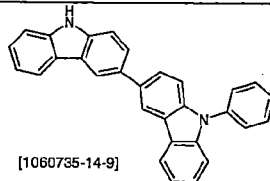
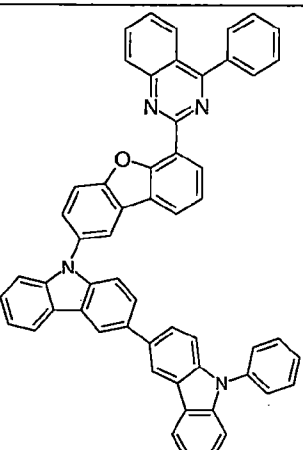
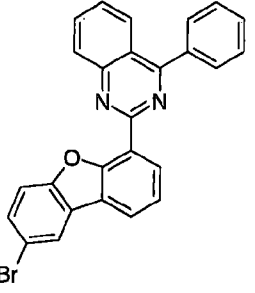
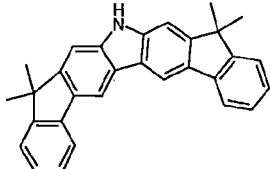
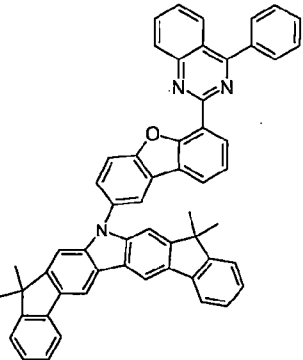
3-苯基-9-[6-(4-苯基喹啉-2-基)二苯並呔喃-2-基]-9H-咪唑

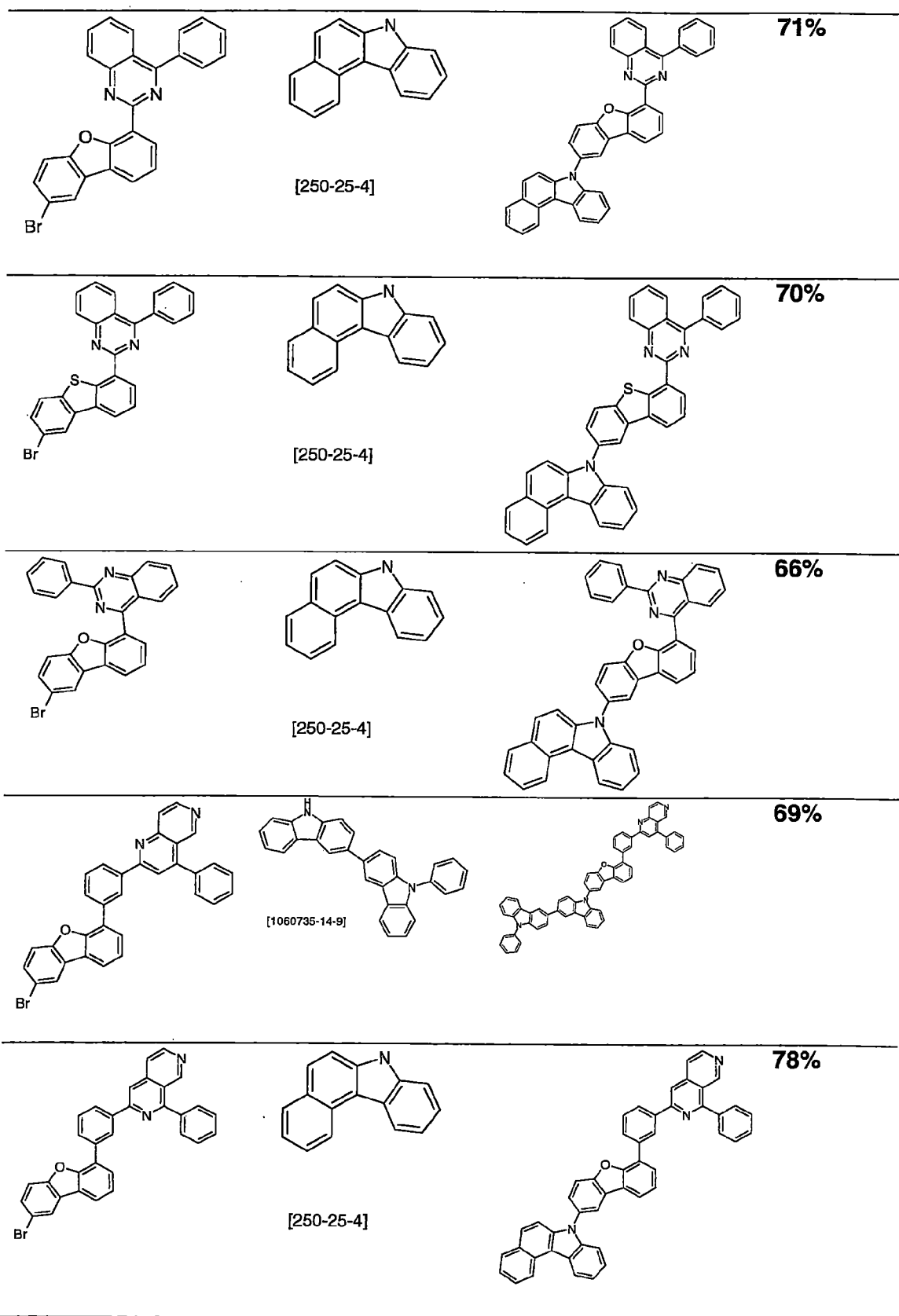
的合成

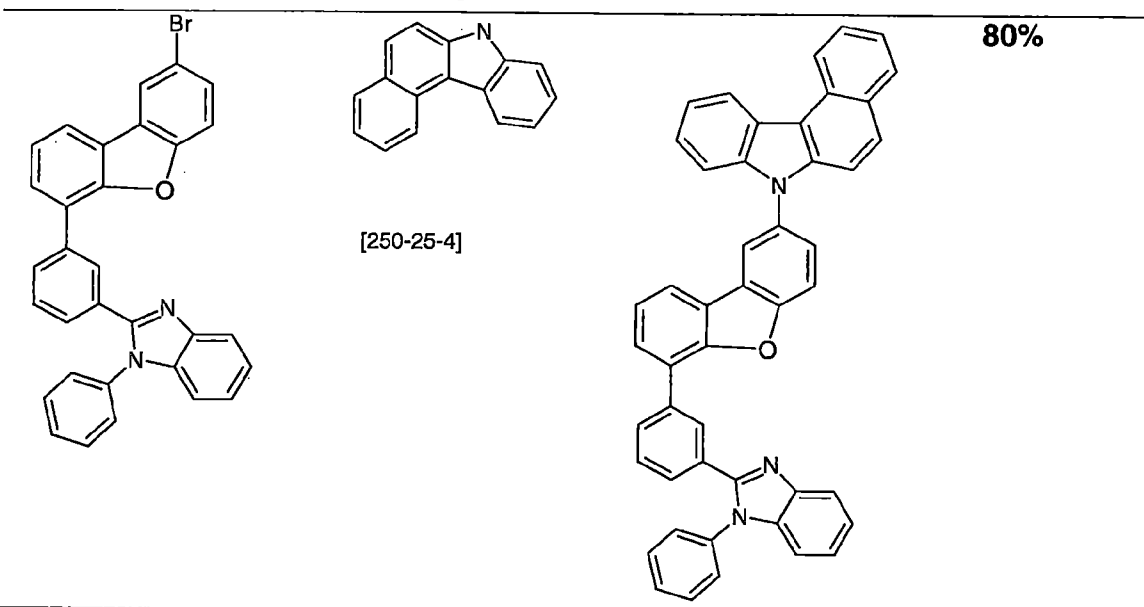
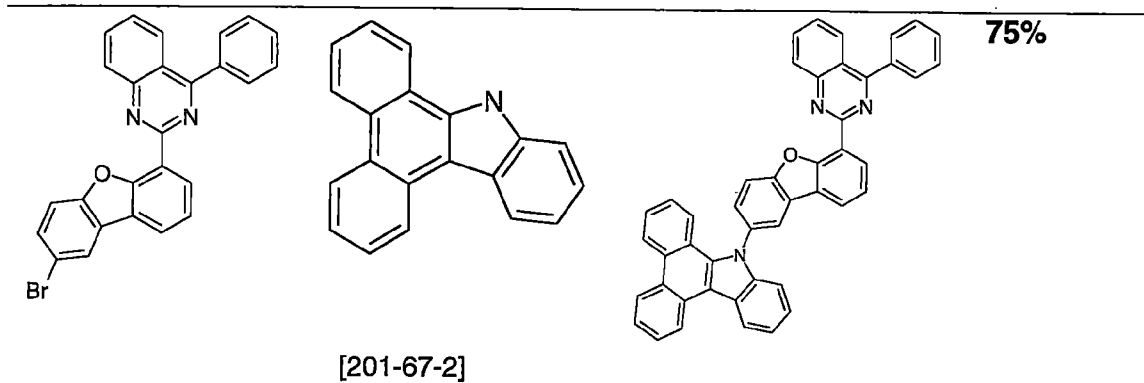
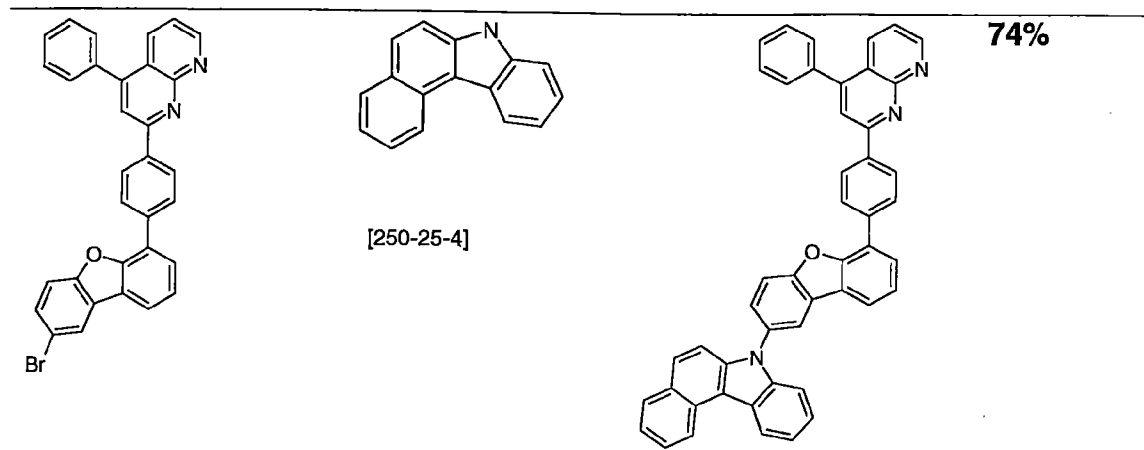


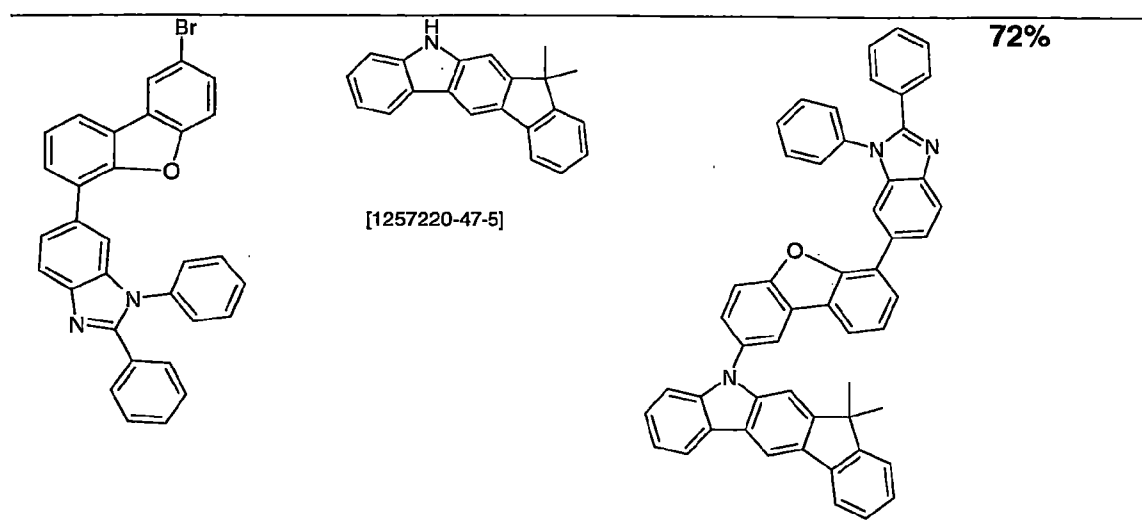
將 70 g (147 mmol) 的 2-(8-溴二苯並呔喃-4-基)-4-苯基喹啉和 35.7 g (147 mmol) 的 3-苯基-9H-吡唑在 600 ml 的甲苯中之除氣溶液用  $N_2$  飽和 1 h。接著，先將 2.09 ml (8.6 mmol) 的  $P(tBu)_3$ ，接著將 1.38 g (6.1 mmol) 的乙酸鈮(II)加至該溶液，及隨後以固態添加 17.7 g (185 mmol) 的  $NaOtBu$ 。將反應混合物在回流下加熱 1 h。冷卻至室溫之後，小心地加入 500 ml 的水。將水相用 50 ml 的甲苯洗滌 3 次，經  $MgSO_4$  乾燥，並在真空中移除溶劑。接著藉由管柱層析法在矽凝膠上用庚烷/乙酸乙酯(20/1)純化該粗製產物。將殘餘物從甲苯再結晶且最後在高真空( $p = 5 \times 10^{-6}$  毫巴)中昇華。產量為 76 g (119 mmol)，相當於理論的 81%。

可類似地獲得下列化合物：

起始材料 <b>1</b>	起始材料 <b>2</b>	産物	産率
	 [1257220-47-5]		<b>73%</b>
	 [1060735-14-9]		<b>71%</b>
	 [1373281-72-1]		<b>69%</b>







### 實施例 16

#### OLED 之製造和示性

在下列實施例 V1 至 E12 中呈現各種 OLED 之數據 (參見表 1 和 2)。

實施例 V1-E12 之預處理：將已塗有厚度為 50 nm 之結構化 ITO(氧化銦錫)的玻璃板塗佈 20 nm 之 PEDOT:PSS(聚(3,4-伸乙基二氧基噻吩)聚(苯乙烯磺酸酯)，以 CLEVIOS™ P VP AI 4083 自德國 Heraeus Precious Metals GmbH 購得，藉由旋轉塗佈自水溶液施加)以改良處理。此等經塗覆玻璃板形成施加 OLED 之基板。

OLED 原則上具有下列的層結構：基板/電洞傳輸層 (HTL) / 隨意間層 (IL) / 電子阻擋層 (EBL) / 發光層 (EML) / 隨意電洞阻擋層 (HBL) / 電子傳輸層 (ETL) / 隨意電子注入層 (EIL) 及最後陰極。陰極係由厚度為 100 nm 之鋁層形成。OLED 的精確結構顯示於表 1 中。製造 OLED 所需的材料顯示於表 3 中。

所有材料係在真空室內藉由熱氣相沈積施加。發光層在此總是由至少一種基質材料(主體材料)和發光摻雜劑(發光體)組成，該發光摻雜劑藉由共蒸發而與基質材料或基質材料等以某體積比例摻混。詞句諸如 IC1 : IC3 : TEG1 (55% : 35% : 10%)在此意指材料 IC1 係以 55%之體積比例存在於層中，IC3 係以 35%之比例存在於層中，和 TEG1 係以 10%之比例存在於層中。類似地，電子傳輸層亦可由二種材料之混合物所組成。

OLED 係以標準方法示性。為此目的，測定電致發光光譜、電流效率(以  $\text{cd/A}$  測量)、功率效率(以  $\text{lm/W}$  測量)及假設 Lambert 發光特性，從電流/電壓/發光密度特徵線 (IUL 特徵線)計算以發光密度為函數之外部量子效率 (EQE，以百分比測量)。電致發光光譜係在  $1000 \text{ cd/m}^2$  之發光密度下測定，且由此計算 CIE 1931 x 與 y 色座標。表 2 中術語 U1000 表示  $1000 \text{ cd/m}^2$  之發光密度所需之電壓。CE1000 及 PE1000 分別表示在  $1000 \text{ cd/m}^2$  下所達到之電流及功率效率。最後，EQE1000 表示在  $1000 \text{ cd/m}^2$  之操作發光密度下之外部量子效率。壽命 LT 係定義為發光密度在恆定電流下操作時自初始發光密度下降至某一比例 L1 之後的時間。L0 ;  $j_0 = 4000 \text{ cd/m}^2$  和 L1 = 70%之詞句意指所指示之壽命對應於在初始發光密度自  $4000 \text{ cd/m}^2$  降至  $2800 \text{ cd/m}^2$  後的時間。類似地，L0 ;  $j_0 = 20 \text{ mA/cm}^2$ ，L1=80%意指在於  $20 \text{ mA/cm}^2$  操作時，在時間 LT 之後，發光密度降至其初始值之 80%。



各種 OLED 之數據係總結於表 2 中。實施例 V1-V5 為根據先前技術之比較例，實施例 E1 至 E12 顯示根據本發明之 OLED 的數據。

在下文中更詳細地闡釋一些實施例以說明根據本發明之 OLED 的優點。

根據本發明之混合物於磷光 OLED 的發光層之用途

當用作磷光 OLED 中之基質材料，相較於先前技術，根據本發明之材料導致功率效率的顯著改良。能觀察到：相較於先前技術，根據本發明之化合物 EG1 和 EG2 與綠色-發光摻雜劑 TEG1 組合使用使功率效率能夠增加高達 20% (實施例 E1 與 V1 之比較和 E2 與 V2、V3、V4 和 V5 之比較)。此外，本發明之化合物導致組件壽命的顯著改良。因此，相較於包含 SdT4 之先前技術 V4，包含根據本發明之基質 EG2 的 E2 組件之壽命從 125 h 改良至 210 h。(L0;j0=20mA/cm<sup>2</sup>，L1=80%)。

表 1: OLED 之結構

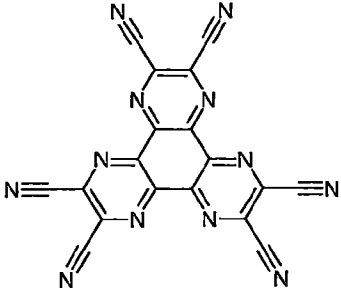
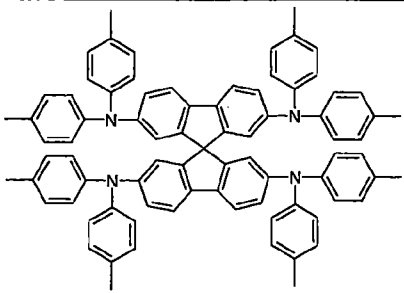
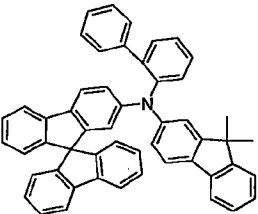
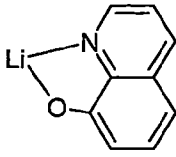
HTL/IL (HATCN; 5 nm)/EBL/EML/HBL/ETL/EIL

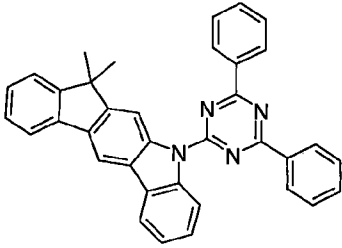
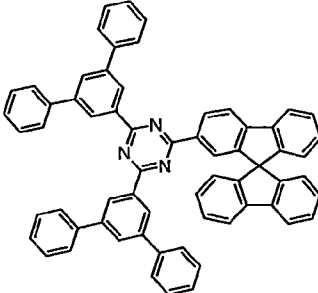
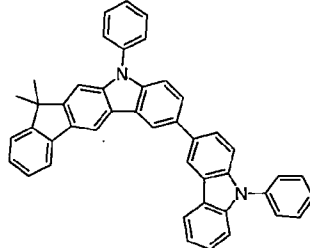
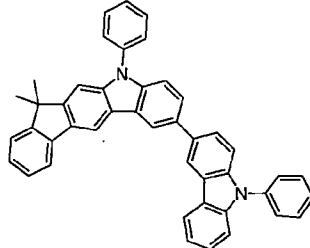
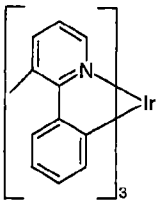
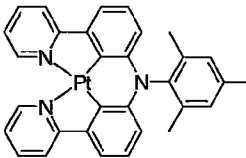
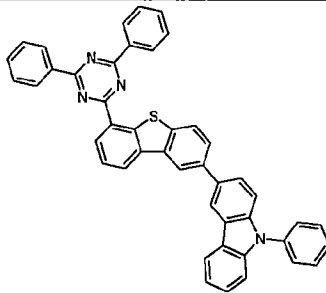
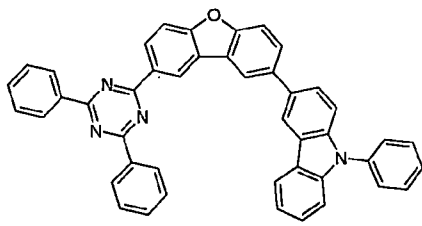
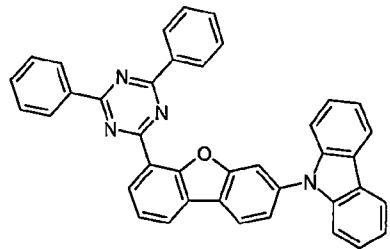
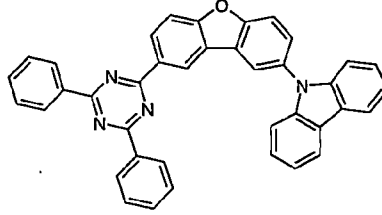
實施例	HTL 厚度	EBL 厚度	EML 厚度	HBL 厚度	ETL 厚度	EIL 厚度
V1	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	SdT1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V2	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	SdT2:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V3	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	SdT3:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V4	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	SdT4:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V5	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	SdT5:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E1	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E2	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG2:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E3	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG3:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E4	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG4:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E5	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG5:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E6	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG6:TEG1 (95%:5%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E7	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	EG7 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E8	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG8:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E9	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	EG9:IC3:TE G1 (60%:35%:5 %) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E10	SpA1 90nm	SpMA1 130nm	E10:TER1 (92%:8%) 40nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E11	SpA1 90nm	SpMA1 130nm	E11:TER1 (92%:8%) 40nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E12	SpA1 70nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	EG12:ST2 (50%:50%) 40nm	LiQ 3nm

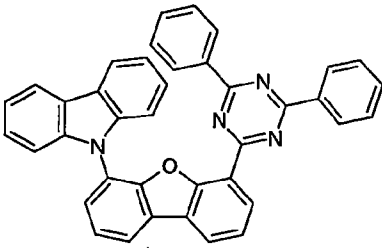
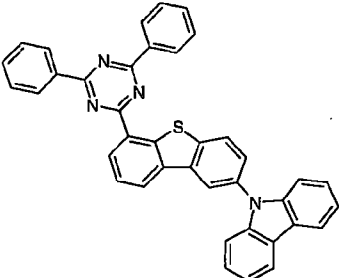
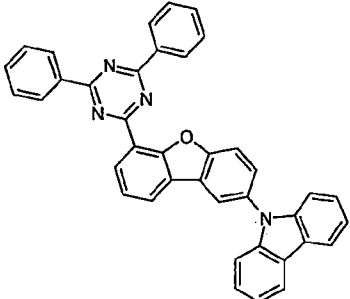
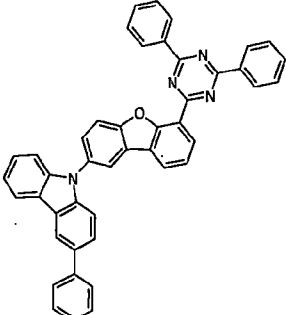
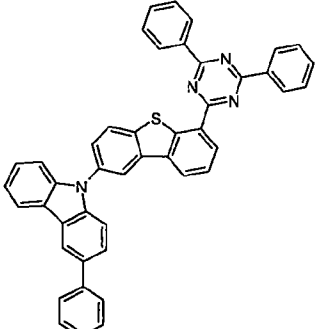
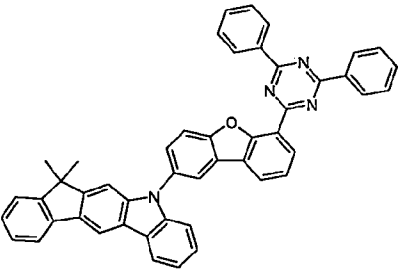
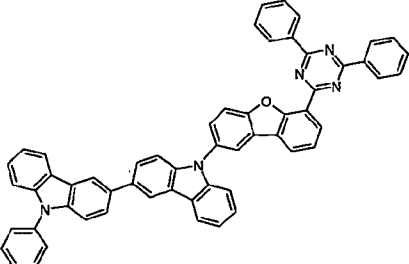
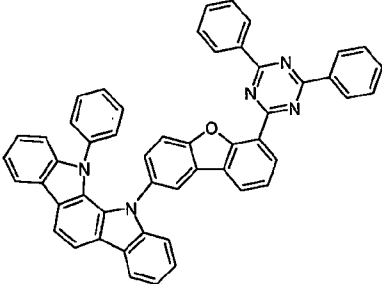
表2：OLED之數據

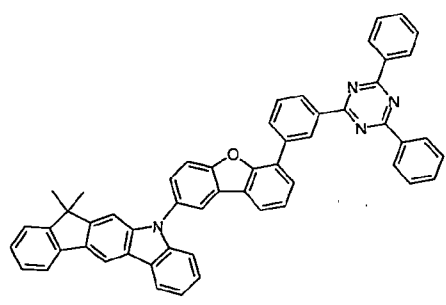
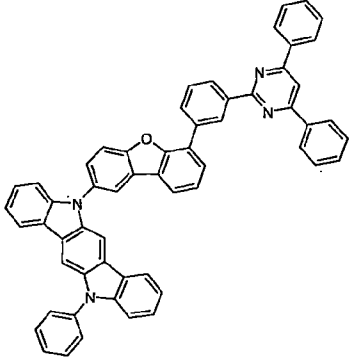
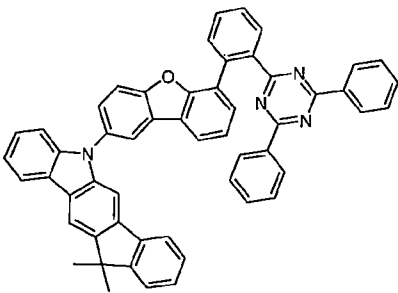
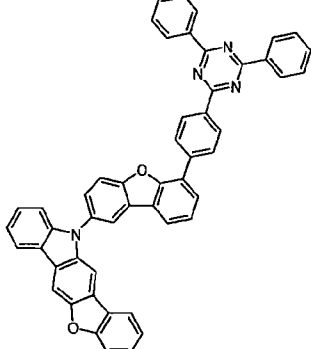
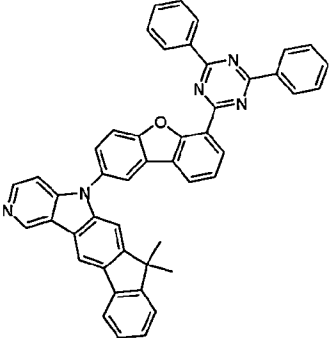
實施例	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	PE1000 (lm/W)	EQE 1000	於1000 cd/m <sup>2</sup> 之CIE x/y
V1	3.5	48	43	12.8%	0.32/0.64
V2	3.6	51	44	13.7%	0.33/0.63
V3	4.1	50	38	13.3%	0.33/0.63
V4	3.4	52	49	14.1%	0.33/0.62
V5	4.4	48	34	12.9%	0.33/0.62
E1	3.3	53	51	14.2%	0.33/0.63
E2	3.2	54	53	13.9%	0.32/0.65
E3	3.4	53	49	14.5%	0.32/0.63
E4	3.6	58	51	15.4%	0.32/0.64
E5	3.4	46	43	13.1%	0.33/0.62
E6	3.5	51	46	13.8%	0.32/0.63
E7	3.3	61	58	16.7%	0.33/0.63
E8	3.6	51	45	14.0%	0.33/0.63
E9	3.4	56	49	15.7%	0.33/0.62
E10	4.1	13	10	12.3%	0.67/0.33
E11	4.3	12	9	12.4%	0.66/0.34
E12	3.4	62	57	16.9%	0.33/0.63

表3：用於OLED之材料的結構式

	
HATCN	SpA1
	
SpMA1	LiQ

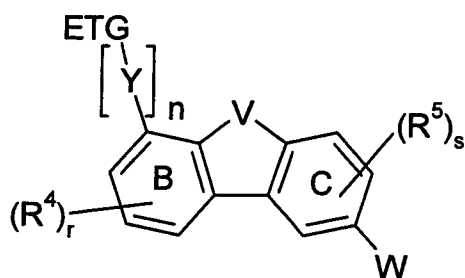
	
<p>IC1</p>	<p>ST2</p>
	
<p>IC3</p>	<p>IC3</p>
	
<p>TEG1</p>	<p>TER1</p>
	
<p>SdT1</p>	<p>SdT2</p>
	
<p>SdT3</p>	<p>SdT4</p>

	
<p><b>SdT5</b></p>	<p><b>EG1</b></p>
	
<p><b>EG2</b></p>	<p><b>EG3</b></p>
	
<p><b>EG4</b></p>	<p><b>EG5</b></p>
	
<p><b>EG6</b></p>	<p><b>EG7</b></p>

	
<p><b>EG8</b></p>	<p><b>EG9</b></p>
	
<p><b>EG10</b></p>	<p><b>EG11</b></p>
	
<p><b>EG12</b></p>	

## 申請專利範圍

【請求項 1】一種通式(1)之化合物，



式 (1)

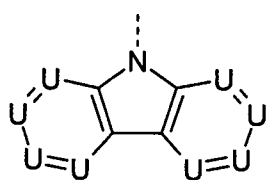
其中下列適用於所使用的符號及標號：

ETG

係選自下列群組：喹啉類、苯並咪唑類、喹啶類、異喹啶類和嘧啶類；該 ETG 可經一或多個  $R^1$  基團取代，該  $R^1$  基團在各情況下可為相同或不同；

W

係以式(W-1)定義



式 (W-1)

其中：

U 為 N 或  $CR^1$ ，其中虛線表示從 W 基團連接至環 C 之鍵；

V

為 O 或 S；

Y

為具有 5 至 12 個環原子之芳族或雜芳族環系統；

$n$

為 0 或 1，其中  $n$  等於 0 意指該 ETG 和環 B 彼此以單鍵直接連接；

$r$

為來自 0、1、2 或 3 的整數；

$s$

為來自 0、1、2 或 3 的整數；

$R^1$

在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^2)_2$ 、CN、 $NO_2$ 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(R^2)_2$ 、 $S(=O)R^2$ 、 $S(=O)_2R^2$ 、 $OSO_2R^2$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烯基或炔基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烯基、炔基、烷氧基、烷基烷氧基或烷硫基(彼等各自可經一或多個  $R^2$  基團取代，其中一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $R^2C=CR^2$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $NR^2$ 、O、S 或  $CONR^2$  置換及其中一或多個 H 原子可經 D、F、Cl、Br、I、CN 或  $NO_2$  置換)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下可經一或多個  $R^2$  基團取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基、芳基烷氧基或雜芳氧基(其可經一或多個  $R^2$  基團



取代)、或具有 10 至 40 個芳族環原子之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基(其可經一或多個  $R^2$  基團取代)、或此等基團之二或多者的組合或可交聯基 Q; 二或多個相鄰的  $R^1$  基團在此彼此可形成單或多環的脂族或芳族環系統;

$R^2$

在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^3)_2$ 、CN、 $NO_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 $OSO_2R^3$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烯基或炔基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烯基、炔基、烷氧基、烷基烷氧基或烷硫基(彼等各自可經一或多個  $R^3$  基團取代, 其中一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $R^3C=CR^3$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $NR^3$ 、O、S 或  $CONR^3$  置換及其中一或多個 H 原子可經 D、F、Cl、Br、I、CN 或  $NO_2$  置換)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下可經一或多個  $R^3$  基團取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基、芳基烷氧基或雜芳氧基(其可經一或多個  $R^3$  基團取代)、或具有 10 至 40 個芳族環原子之二芳胺基、二雜芳胺基或芳基雜芳胺基(其可經一或多個  $R^3$  基團取代)、或此等基團之二或多者的組合; 二或多個相鄰的基團  $R^2$  在此可彼此形成單或多環的脂族或芳族環系統;

$R^3$ 

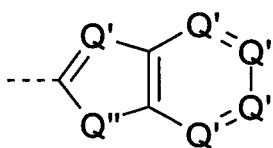
在每次出現時相同或不同地為 H、D、F 或具有 1 至 20 個 C 原子之脂族、芳族及/或雜芳族烴基，其中一或多個 H 原子可經 F 置換；二或多個  $R^3$  取代基在此也可彼此形成單或多環的脂族或芳族環系統；

 $R^4$ 、 $R^5$ 

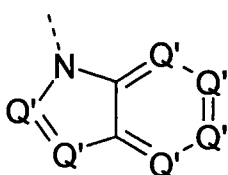
在每次出現時相同或不同地為 H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^2)_2$ 、CN、 $NO_2$ 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(R^2)_2$ 、 $S(=O)R^2$ 、 $S(=O)_2R^2$ 、 $OSO_2R^2$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個 C 原子之直鏈烯基或炔基或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烯基、炔基、烷氧基、烷基烷氧基或烷硫基。

【請求項 2】根據請求項 1 之化合物，其中 Y 為伸苯基橋。

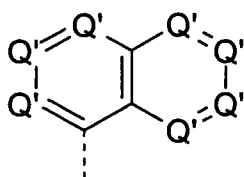
【請求項 3】根據請求項 1 之化合物，其中 ETG 係選自下列基團：



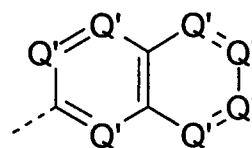
式 (E-5)



式 (E-8)



式 (E-9)



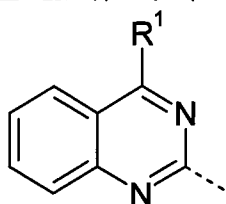
式 (E-10)

Q' 在每次出現時相同或不同地表示  $CR^1$  或 N，及

Q'' 表示  $NR^1$ 、O 或 S；

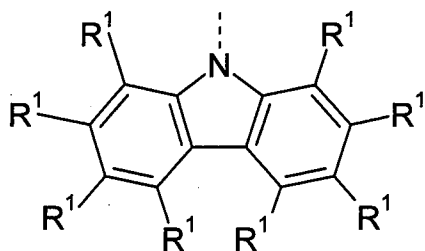
其中至少一個 Q' 等於 N 及/或至少一個 Q'' 等於  $NR^1$ 。

【請求項 4】根據請求項 1 之化合物，其中 ETG 係為喹啉的下列式(A-14)之基團：



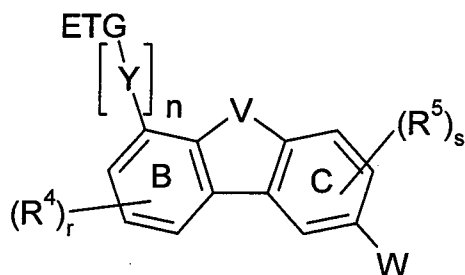
式 (A-14)。

【請求項 5】根據請求項 1 或 2 之化合物，其中 W 基團為式(W-2)之基團



式 (W-2)。

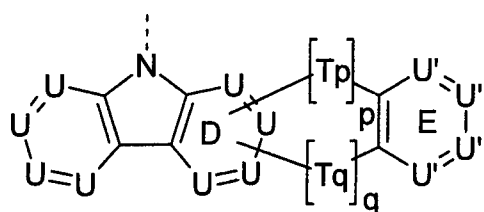
【請求項 6】一種通式(1)之化合物，



式 (1)

其中下列適用於所使用的符號及標號：

W 為式(W-5)之基團



式 (W-5)

其中：

$T_p$ 、 $T_q$

相同或不同地為二價橋；

$U$

為  $N$  或  $CR^1$ ，其中虛線表示從  $W$  基團連接至環  $C$  之鍵；

$U'$

在每次出現時相同或不同地為  $CR^2$  或  $N$ ；

$p$

為 0 或 1；其中  $p$  等於 0 意指環  $E$  和環  $D$  係以單鍵連接；

$q$

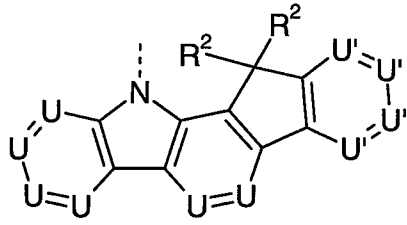
為 0 或 1；其中  $q$  等於 0 意指環  $E$  和環  $D$  係以單鍵連接；

及其中  $p+q=1$  或 2；

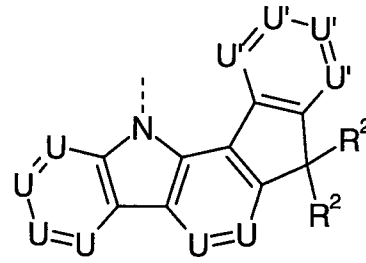
及其中  $T_p$  和  $T_q$  各自以任何可能的位向鍵結至環  $D$  的相鄰基團  $U$ ；及其中鍵結至  $T_p$  或  $T_q$  之各  $U$  基團表示碳原子；且其中  $ETG$ 、 $V$ 、 $Y$ 、 $n$ 、 $r$ 、 $s$ 、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$  和  $R^5$  具有如請求項 1 之相同的定義。

【請求項 7】根據請求項 6 之化合物，其中基團(W-5)

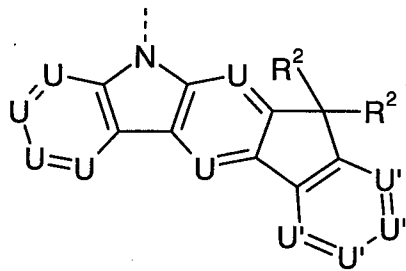
為下列式(W-15)至(W-26)中之一者：



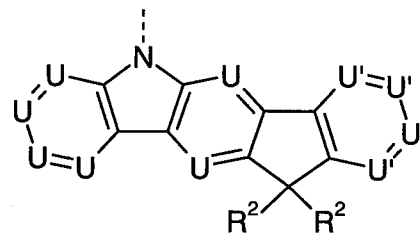
式 (W-15)



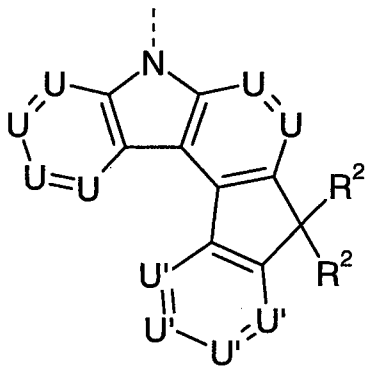
式 (W-16)



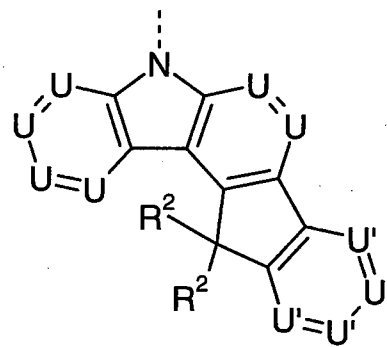
式 (W-17)



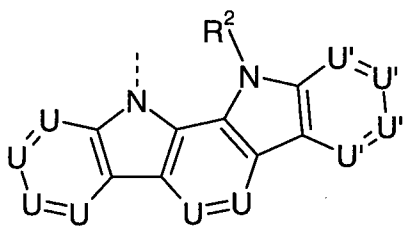
式 (W-18)



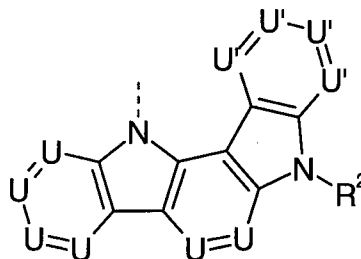
式 (W-19)



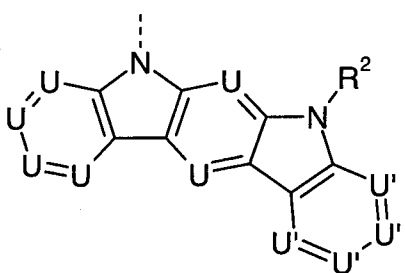
式 (W-20)



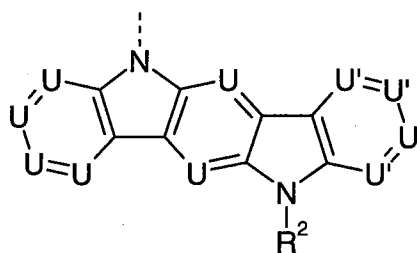
式 (W-21)



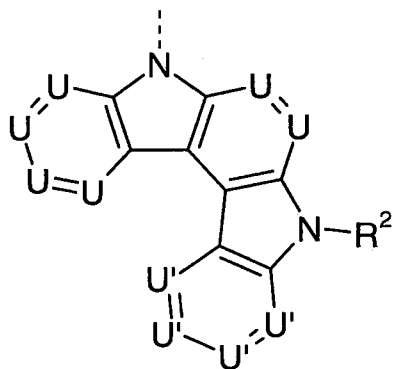
式 (W-22)



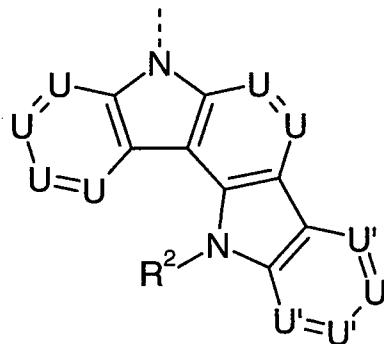
式 (W-23)



式 (W-24)



式 (W-25)



式 (W-26)

【請求項 8】一種組成物，其包含至少一種根據請求項 1 至 7 中任一項之化合物和至少一種選自由下列所組成群組之另外的化合物：螢光發光體、磷光發光體、主體材料、基質材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞導體材料、電洞注入材料、電子阻擋材料和電洞阻擋材料。

【請求項 9】根據請求項 8 之組成物，其中該另外的化合物為主體材料或基質材料。

【請求項 10】根據請求項 8 或 9 之組成物，其中該

另外的化合物具有 2.5 eV 或更高之能帶隙。

【請求項 11】一種調配物，其包含至少一種根據請求項 1 至 7 中任一項之化合物或至少一種根據請求項 8 至 10 中任一項之組成物和至少一種溶劑。

【請求項 12】一種至少一種根據請求項 1 至 7 中任一項之化合物之用途，其係用於電子裝置。

【請求項 13】一種電子裝置，其包含至少一種根據請求項 1 至 7 中任一項之化合物或至少一種根據請求項 8 至 10 中任一項之組成物。

【請求項 14】根據請求項 13 之電子裝置，其係選自有機積體電路(OIC)、有機場效電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機電致發光裝置、有機太陽能電池(OSC)、有機光學檢測器、有機感光器(photoreceptor)。

【請求項 15】根據請求項 13 或 14 之電子裝置，其為亦選自由下列所組成之群組的有機電致發光裝置：有機發光電晶體(OLET)、有機場淬滅裝置(OFQD)、有機發光電化學電池(OLEC、LEC、LEEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機發光二極體(OLED)。

【請求項 16】一種製造根據請求項 13 至 15 中任一項之電子裝置之方法，其特徵在於以氣相沈積或從溶液施加至少一層有機層。

【請求項 17】根據請求項 15 之電子裝置，其係用於光療法之醫學。