



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公開本

(11) 公開編號：TW 201802075 A

(43) 公開日：中華民國 107 (2018) 年 01 月 16 日

(21) 申請案號：106105994

(22) 申請日：中華民國 106 (2017) 年 02 月 22 日

(51) Int. Cl. : C07D239/70 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2016/03/18 美國

62/310,202

(71) 申請人：陶氏全球科技責任有限公司 (美國) DOW GLOBAL TECHNOLOGIES LLC (US)
美國羅門哈斯電子材料韓國公司 (南韓) ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS
KOREA LTD. (KR)

南韓

(72) 發明人：高慶武 KOH, KYOUNG MOO (US)；翁德里 馬克 E ONDARI, MARK E.

(US)；慕赫佩德海 蘇克里特 MUKHOPADHYAY, SUKRIT (US)；加拉格爾 汀

摩子 J GALLAGHER, TIMOTHY J. (US)；羅弘燁 NA, HONG-YEOP (KR)

(74) 代理人：洪武雄；陳昭誠

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：6 項 圖式數：1 共 29 頁

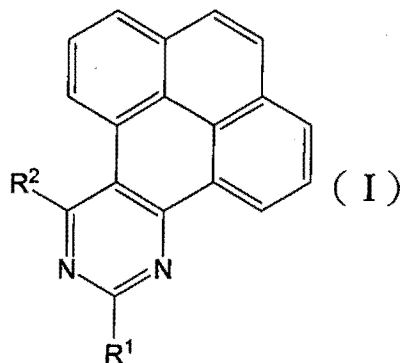
(54) 名稱

菲并喹啉核化合物

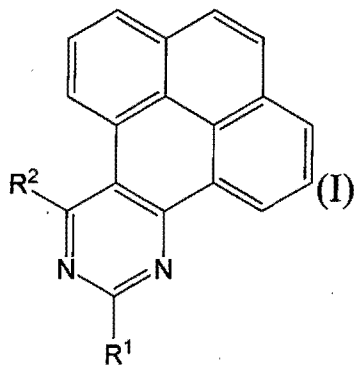
PHENANTHROQUINAZOLINE-CORE COMPOUNDS

(57) 摘要

提供一種組成物，其包括一或多種具有結構(I)之菲并喹啉核化合物，

其中 R¹ 及 R² 中之每一者獨立地為經取代或未經取代之苯基。

Provided is a composition comprising one or more phenanthroquinazoline-core compounds having structure (I)



wherein each of R^1 and R^2 is independently a substituted or unsubstituted phenyl group.

指定代表圖：

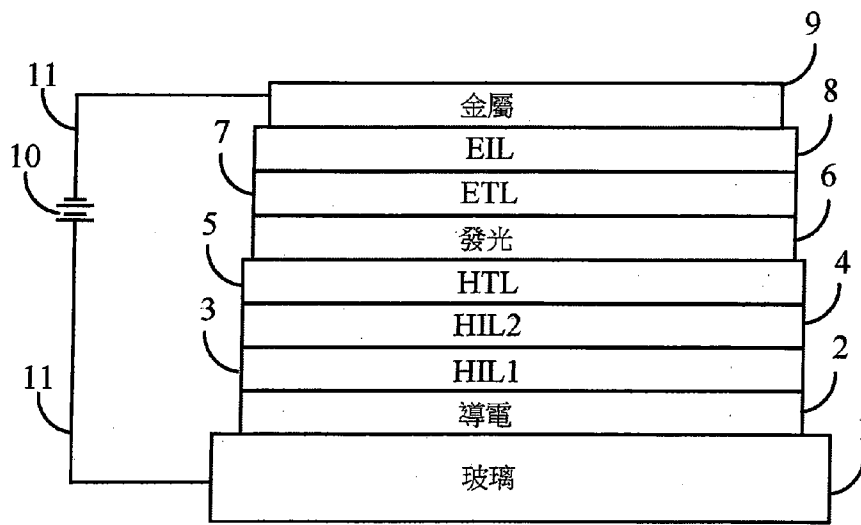
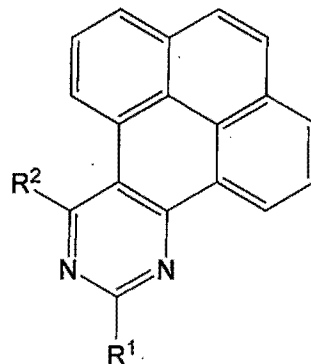


圖1

符號簡單說明：

- 1 . . . 玻璃基板
- 3 . . . 第一電洞注入層
- 4 . . . 第二電洞注入層
- 5 . . . 電洞傳輸層
- 6 . . . 發光層
- 7 . . . 電子傳輸層
- 8 . . . 電子注入層
- 9 . . . 金屬陰極
- 10 . . . 電壓源
- 11 . . . 導線

特徵化學式：



※ 申請案號： 106105994

G07D 239/70 (2006.01)

※ 申請日： 106/02/22

※IPC 分類： G09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

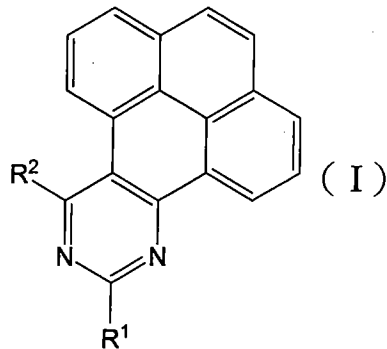
【發明名稱】(中文/英文)

菲并喹啉核化合物

PHENANTHROQUINAZOLINE-CORE COMPOUNDS

【中文】

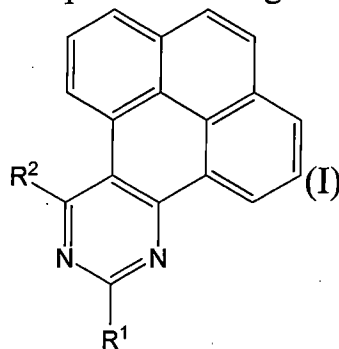
提供一種組成物，其包括一或多種具有結構 (I) 之菲并喹啉核化合物，



其中 R^1 及 R^2 中之每一者獨立地為經取代或未經取代之苯基。

【英文】

Provided is a composition comprising one or more phenanthroquinazoline-core compounds having structure (I)



wherein each of R^1 and R^2 is independently a substituted or unsubstituted phenyl group.

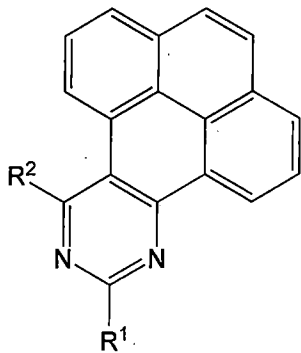
【代表圖】

【本案指定代表圖】：第（1）圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

- 1：玻璃基板
- 3：第一電洞注入層
- 4：第二電洞注入層
- 5：電洞傳輸層
- 6：發光層
- 7：電子傳輸層
- 8：電子注入層
- 9：金屬陰極
- 10：電壓源
- 11：導線

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



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)

菲并喹啉核化合物

PHENANTHROQUINAZOLINE-CORE COMPOUNDS

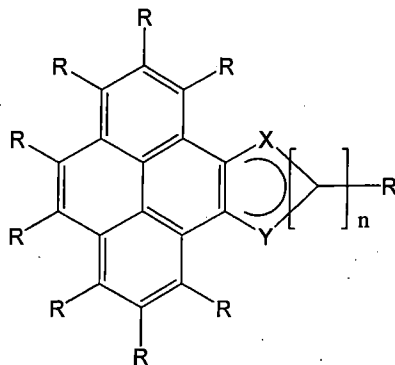
【技術領域】

【0001】 本發明有關一種可用於有機發光二極體的電子傳輸層之菲并喹啉核化合物。

【先前技術】

【0002】 許多光電裝置為多層組成物。舉例而言，有機發光二極管(OLED)通常含有多個層，尤其包含發光層及電子傳輸層(electron transport layer, ETL)。ETL中所用之化合物需要具有以下特徵中之一或多者：具有相對高玻璃轉移溫度之非晶結構；及/或最低未佔用分子軌域(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO)，其匹配或幾乎匹配發光層中材料之LUMO。為匹配通常適用之發光層，需要ETL中之化合物之LUMO為-1.9至-1.5 eV。

【0003】 WO 2007/004799 描述用於電子裝置之層的材料，其中所述材料具有以下結構：



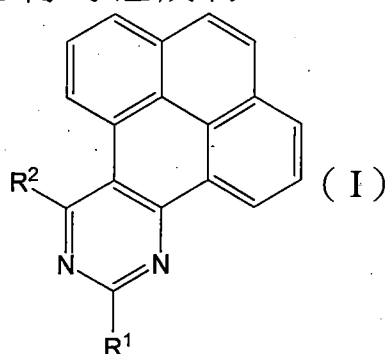
需要提供在如上文所述之特徵中之一或多者中具有改良

之組成物。設想此類組成物若含有適當摻雜材料，則其亦可適用於光電裝置之其他層，諸如電洞傳輸層。

【發明內容】

【0004】 以下為本發明之陳述。

【0005】 本發明之第一態樣為包括一或多種具有結構 (I) 之菲并喹啉核化合物的組成物，



其中 R¹ 及 R² 中之每一者獨立地為經取代或未經取代之苯基。

【0006】 本發明之第二態樣為包括發光層及電子傳輸層之有機發光二極體，其中所述電子傳輸層包括第一態樣之組成物。

【圖式簡單說明】

【0007】 以下為圖式之簡要說明。

【0008】 圖 1 展示使用本發明組成物製得之 OLED 的一個實施例。

【實施方式】

【0009】 以下為本發明之實施方式。

【0010】 如本文所用，除非上下文另外明確指示，否則以下術語具有所指定的定義。

【0011】 如本文所述之術語「烷氧基」指至少一個氫原子

經氧原子 O 取代之烷基。

【0012】 如本文所述之術語「烷基」指自烷烴藉由自其刪除一個氫原子衍生之有機基團。烷基可為直鏈、分支鏈、環狀或其組合。如本文所用之術語「經取代之烷基」指其中至少一個氫原子經包括至少一個雜原子之取代基取代之烷基。雜原子包含（但不限於）O、N、P 及 S。取代基包含（但不限於）鹵基、OR'、NR'₂、PR'₂、P(=O)R'₂、SiR'₃；其中各 R' 獨立地為 C₁-C₂₀ 烴基。

【0013】 「陽極」將電洞注入至位於發光層側上之層中，諸如電洞注入層、電洞傳輸層或發光層。將陽極安置於基板上。陽極通常由金屬、金屬氧化物、金屬鹵化物、導電聚合物及其組合製成。

【0014】 如本文所述之術語「芳基」指自芳族烴藉由自其刪除一個氫原子衍生之有機基團。芳基可為單環及/或稠環系統，其各環適當地含有 5 至 7 個、較佳 5 或 6 個原子。亦包含其中兩個或更多個芳基經由單鍵組合之結構。特定實例包含（但不限於）苯基、甲苯基、萘基、聯二苯、蔥基、茛基、蒾基、茈基、茈基、屈基、稠四苯基、蒾蔥基及其類似物。萘基可為 1-萘基或 2-萘基，蔥基可為 1-蔥基、2-蔥基或 9-蔥基，且蒾基可為 1-蒾基、2-蒾基、3-蒾基、4-蒾基及 9-蒾基中之任一者。如本文所用之術語「經取代之芳基」指其中至少一個氫原子經包括至少一個雜原子及其任何組合之取代基取代之芳基。雜原子包含（但不限於）O、N、P 及 S。取代基包含（但不限於）鹵基、OR'、NR'₂、PR'₂、P(=O)R'₂、SiR'₃；其中各 R' 獨立地為 C₁-C₂₀ 烴基。

【0015】 如本文所述之術語「芳氧基 (aryloxy)」指其中至少一個氫原子經氧原子 O 置換之芳基。

【0016】 如本文所述之術語「胺」指具有一或多個胺氮原子之化合物。胺氮原子為作為結構 $R^{11}NH_2$ 、 $R^{11}R^{12}NH$ 或 $R^{11}R^{12}R^{13}N$ 之一部分的氮原子，其中 R^{11} 、 R^{12} 及 R^{13} 各為經取代或未經取代之烷基或芳基。 R^{11} 、 R^{12} 及 R^{13} 可為獨立基團，或 R^{11} 、 R^{12} 及 R^{13} 中之任何兩者或更多者可彼此連接以形成一或多個芳環或一或多個脂環或其組合。胺可確切具有一個胺氮原子或可具有兩個或更多個胺氮原子。具有一或多個芳環之胺為芳胺。

【0017】 「陰極」將電子注入至位於發光層側上之層中(亦即電子注入層、電子傳輸層或發光層)。陰極通常由金屬、金屬氧化物、金屬鹵化物、導電聚合物或其組合製成。

【0018】 「摻雜劑」及類似術語指經歷來自激發態之輻射發射的材料。激發態可例如藉由在電致發光裝置中施加電流或藉由自另一分子之激發態能量轉移而產生。

【0019】 「電子注入層」或「EIL」及類似術語為將自陰極注入之電子有效注入至電子傳輸層之層。

【0020】 「電子傳輸層」或「ETL」及類似術語為安置於發光層與電子注入層之間改良 OLED 之發光功效的層。當置放於電場中時，電子傳輸層將自陰極注入之電子傳輸至發光層。ETL 之材料或組成物通常具有高電子遷移率以有效傳輸注入之電子。

【0021】 「電子伏特」或「eV」為藉由一伏特之電勢差上移動之單個電子之電荷獲得(或損失)之能量的量。

【0022】「發光層」及類似術語為位於電極（陽極與陰極）之間的層，且置放於電場中時藉由重組自陽極經由電洞注入層注入之電洞與自陰極經由電子傳輸層注入之電子來激發，發光層為主要發光來源。發光層由主體及摻雜劑組成。主體材料可為雙極性或單極性的，且可單獨使用或藉由組合兩種或更多種主體材料來使用。對於使用何種類型之摻雜劑（磷光或螢光），主體材料之光電特性可不同。對於螢光摻雜劑，在摻雜劑之吸收及主體之發射之間輔助主體材料應具有良好光譜重疊以誘導向摻雜劑之良好福斯特轉移。對於磷光摻雜劑，輔助主體材料應具有高三重態能量以限制摻雜劑之三重態。

【0023】如本文所用之「玻璃轉移溫度（ T_g ）」為非晶形固體由玻璃態至橡膠態轉移之溫度。玻璃轉移溫度以 $10^\circ\text{C}/\text{min}$ 之掃描速率量測且使用「轉折中點」方法測定。

【0024】如本文所述之術語「雜烷基」指其中至少一個碳原子或 CH 基團或 CH_2 經雜原子或含有至少一個雜原子之化學基團取代之烷基。雜原子包含（但不限於）O、N、P 及 S。雜烷基可為直鏈、分支鏈、環狀或其組合。如本文所用之術語「經取代之雜烷基」指其中至少一個氫原子經包括至少一個雜原子之取代基取代之雜烷基。雜原子包含（但不限於）O、N、P 及 S。取代基包含（但不限於）鹵基、 OR'' 、 NR''_2 、 PR''_2 、 $\text{P(=O)R}''_2$ 、 SiR''_3 ；其中各 R'' 獨立地為 C_1 - C_{20} 烴基。

【0025】如本文所述之術語「雜芳基」指其中芳環之至少一個碳原子或 CH 基團或 CH_2 經雜原子或含有至少一個雜原子之化學基團置換。雜原子包含（但不限於）O、N、P 及 S。

雜芳基可為 5 或 6 員單環雜芳基或與一個或多個苯環稠合之多環雜芳基且可為部分飽和的。亦包含一或多個雜芳基經由單鍵鍵結之結構。雜芳基可包含二價芳基，其雜原子經氧化或四級化以形成 N-氧化物、四級鹽或其類似物。特定實例包含（但不限於）單環雜芳基，諸如呋喃基、噻吩基、吡咯基、咪唑基、吡唑基、噻唑基、噻二唑基、異噻唑基、異噁唑基、噁唑基、噁二唑基、三嗪基、四嗪基、三唑基、四唑基、呋吡基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、噁嗪基；多環雜芳基，諸如苯并呋喃基、萸并[4,3-b]苯并呋喃基、苯并噻吩基、萸并[4,3-b]苯并噻吩基、異苯并呋喃基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、苯并異噻唑基、苯并異噁唑基、苯并噁唑基、異吲哚基、吲哚基、吲唑基、苯并噻二唑基、喹啉基、異喹啉基、噌啉基、喹啉基、喹喏啉基、呋唑基、啡啶基及苯并間二氧雜環戊烯基；及其相應的 N-氧化物（例如吡啶基 N-氧化物、喹啉基 N-氧化物）及四級鹽。如本文所用之術語「經取代之雜芳基」指其中至少一個氫原子經由未經取代之烷基、經取代之烷基、至少一個雜原子及其任何組合構成之取代基取代之雜芳基。雜原子包含（但不限於）O、N、P 及 S。取代基包含（但不限於）鹵基、OR'、NR'₂、PR'₂、P(=O)R'₂、SiR'₃；其中各 R'獨立地為 C₁-C₂₀ 烴基。

【0026】 「雜原子」為不為碳或氫之原子。雜原子之非限制性實例包含：F、Cl、Br、N、O、P、B、S、Si、Sb、Al、Sn、As、Se 及 Ge。

【0027】 「電洞注入層」或「HIL」及類似術語為使電洞由陽極傳輸至發光層之層。電洞注入層通常形成於陽極上。

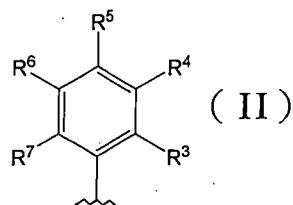
【0028】「電洞傳輸層（或「HTL」）」及類似術語指由傳輸電洞之材料製成之層。高電洞遷移率推薦用於 OLED 裝置。使用 HTL 以有助於阻斷藉由發光層傳輸之電子的通道。通常需要小電子親和力以阻斷電子。HTL 理想地應具有較大三重態以阻斷激子自相鄰 EML 層之遷移。

【0029】如本文所用之術語「烴」指僅含有氫原子及碳原子之化學基團。術語「烴」包括為具有價數之烴取代基（通常單價）的「烴基」。如本文所用之術語「經取代之烴」（或「經取代之烴基」）指其中至少一個氫原子經包括至少一個雜原子之取代基取代之烴（或烴基）。雜原子包含（但不限於）鹵基、O、N、P 及 S。「未經取代之烴」（或「未經取代之烴基」）為不含有雜原子之烴。

【0030】術語「獨立地」或「各自獨立地選自」或類似術語指目標基團內各個別成員之元素的獨立選擇。

【0031】如本文所用之術語「腈」指具有腈基之化合物，其為 $\text{—C}\equiv\text{N}$ ，其中鋸齒狀線表示腈基與分子之其餘部分的連接點。

【0032】術語「苯基」意謂具有結構（II）之基團：



苯基具有與另一分子之單個連接點。連接點在本文中之基團化學結構中以鋸齒狀線符號指示 \sim 。在「未經取代之苯基」中，R3 至 R7 中之每一者為氫。在「經取代之苯基」中，R3 至 R7 中之一或多者為除氫外之原子或基團。R³ 至 R⁷ 中之

每一者獨立地為氫或經取代或未經取代之烴基。 R^3 至 R^7 中之任何兩者或更多者可彼此連接以形成環結構，其可為脂族、芳族或其組合，且其可含有單個環或多個環。 R^3 至 R^7 中之每一者視情況含有一或多個除碳及氫外之雜原子。

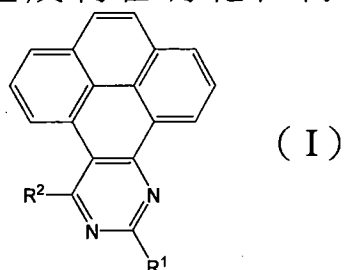
【0033】 如本文所用之「環結構」為三個或更多個原子彼此共價鍵結之化學基團，以使得至少一個路徑可自第一原子沿共價鍵追蹤，經由兩個或更多個其他原子，且返回所述第一原子。環結構可含有碳、氫、一或多個除碳及氫外之原子或其組合。環結構可為飽和或不飽和的，包含芳族結構，且環結構可含有一個或兩個或更多個環。

【0034】 「基板」為有機發光裝置之支撐物。適用於基板之材料的非限制性實例包括石英板、玻璃板、金屬板、金屬箔、來自諸如聚酯、聚甲基丙烯酸酯、聚碳酸酯及聚矽之聚合樹脂的塑膠膜。

【0035】 分子軌域特性藉由如下計算來界定。計算由雜化密度泛函理論 (DFT) 方法、B3LYP (如 Becke, A.D., 《化學物理雜誌 (J. Chem. Phys.)》, 1993, 98, 5648; Lee, C 等人, 《物理評論 B (Phys. Rev B)》, 1988, 37, 785; 及 Miehlich, B 等人, 《化學物理快報 (Chem. Phys. Lett)》, 1989, 157, 200 中所述) 及 6-31G* (5d) 基組 (如 Ditchfield, R 等人, 《化學物理雜誌》, 1971, 54, 724; Hehre, W.J 等人, 《化學物理雜誌》, 1972, 56, 2257; 及 Gordon, M.S. 《化學物理快報》, 1980, 76, 163 中所述) 來執行。單重態計算使用閉殼近似，且三重態計算使用開殼近似。所有值以電子伏特 (eV) 引述。自單重基態之最佳幾何結構之軌域能量測定最高佔用分子軌域

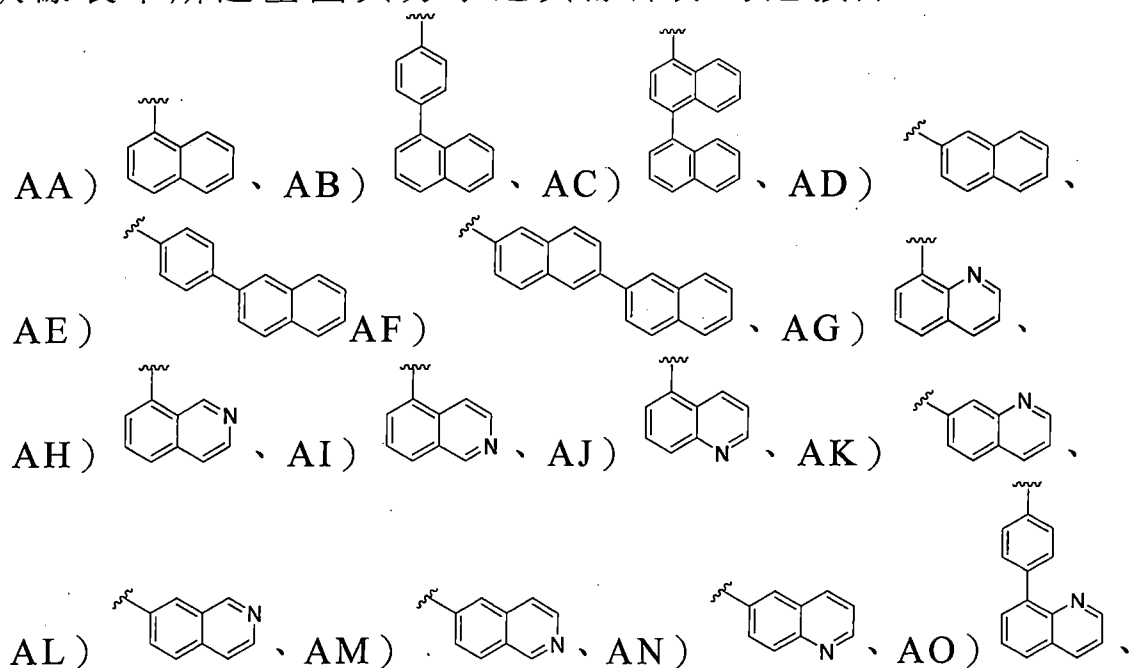
(HOMO) 及最低未佔用分子軌域 (LUMO) 值。三重態能量測定為最佳化三重態與最佳化單重態之總能量之間的差。「HOMO-1」為緊接著低於 HOMO 之能態之能量。「LUMO+1」為緊接著高於 LUMO 之能態之能量。 Δ LUMO+1 為 LUMO+1 與 LUMO 之間的差。T1 為三態能。「 λ -」為電子傳輸之重組能量。較低 λ -產生較高穿過 ETL 之電子遷移率。

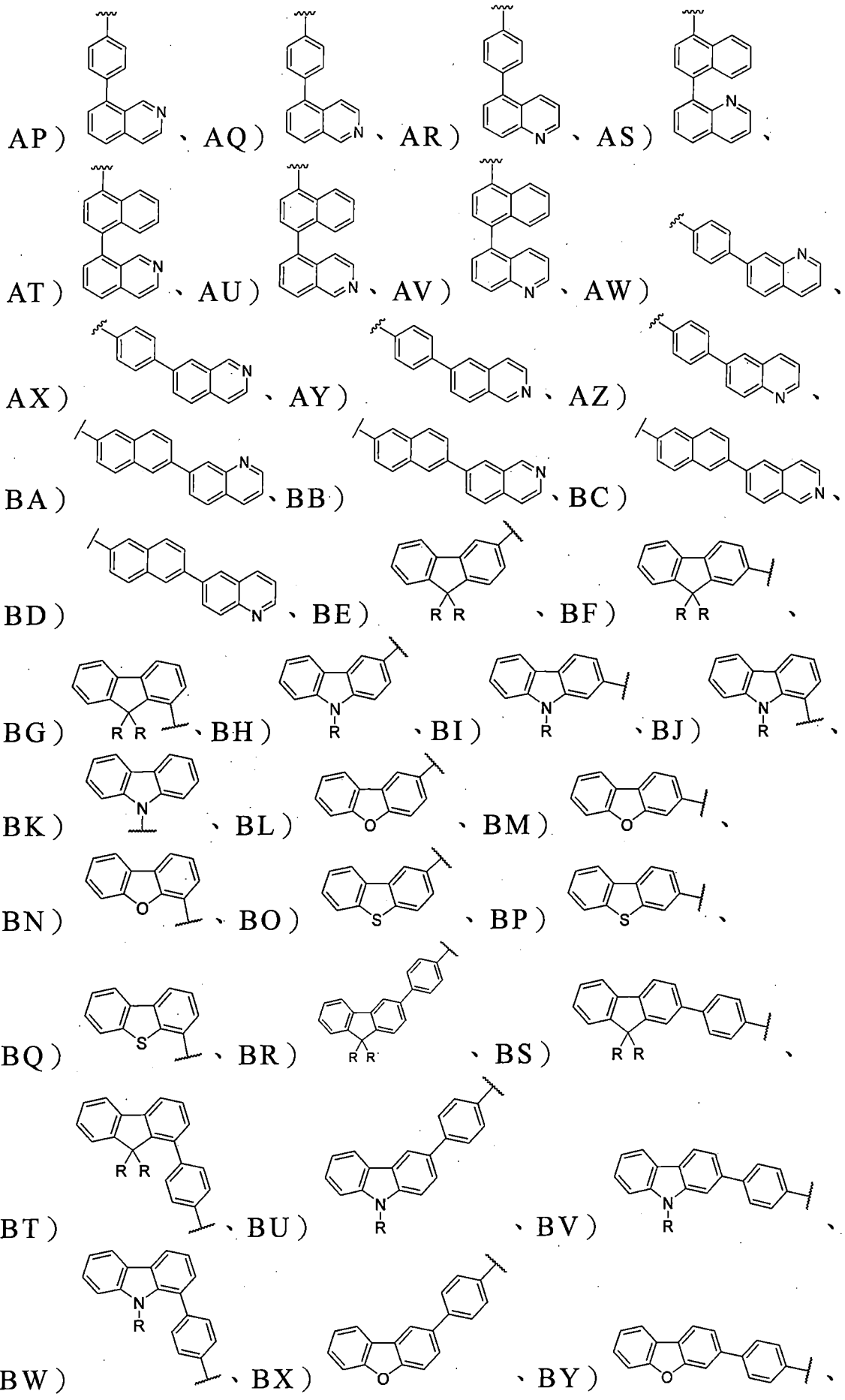
【0036】 本發明組成物含有化合物 (I)：

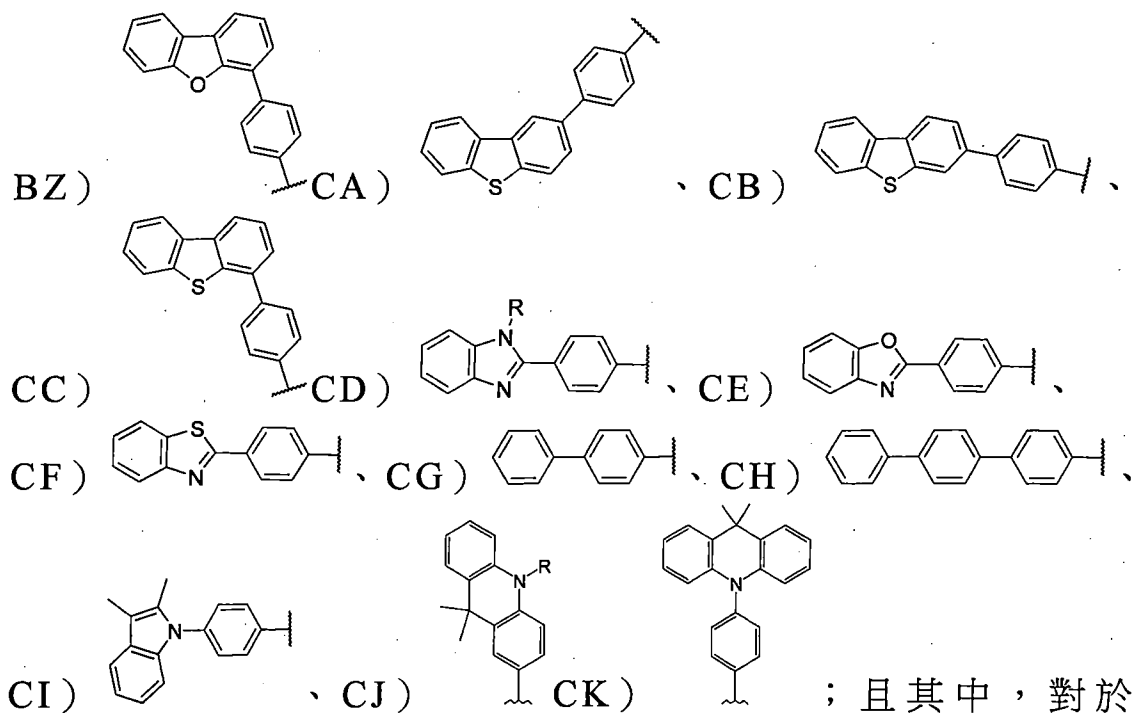


【0037】 其中 R^1 及 R^2 中之每一者獨立地為經取代或未經取代之苯基。較佳地， R^1 及 R^2 中之一或兩者含有兩個或更多個芳環；更佳地， R^1 及 R^2 中之一或兩者含有兩個或更多個六員芳環，其中所有六個成員均為碳原子。

【0038】 較佳 R^1 及 R^2 各自獨立地選自以下基團，其中鋸齒狀線表示所述基團與分子之其餘部分的連接點：







結構 BE)、BF)、BG)、BH)、BI)、BJ)、BR)、BS)、BT)、BU)、BV)、BW)、CD) 及 CJ)，各 R 獨立地為 C₁-C₂₀ 烷基、經取代之 C₁-C₂₀ 烷基、C₆-C₃₀ 芳基或經取代之 C₆-C₃₀ 芳基。

【0039】 一些特定結構如下進行標記：

DA) = GH)，其中 R 為苯基，

DB) = BI)，其中 R 為苯基，

DC) = BF)，其中兩個 R 基團為甲基，

DD) = BF)，其中兩個 R 基團為苯基，

DE) = BR)，其中兩個 R 基團為甲基，

DF) = BE)，其中兩個 R 基團為甲基，

DG) = BE)，其中兩個 R 基團為苯基，

DH) = CJ)，其中 R 為苯基。

【0040】 較佳地，R¹ 及 R² 中之一或兩者為不含有任何雜芳基之基團；更佳地，R¹ 及 R² 中之兩者為不含有任何雜芳基之基團。

【0041】 更佳 R^1 及 R^2 各自獨立地選自由以下組成之群：
AB)、AC)、DA)、DB)、DC)、DD)、DE、BL)、DF)、DG)、
CE)、AA)、AE)、AH)、DH) 及 CK)。

【0042】 更佳 R^1 及 R^2 各自獨立地選自 AE) 及 DC)；更佳地， R^1 為 DC) 且 R^2 為 AE)。

【0043】 較佳地，化合物(I)之 LUMO 為 -1.5 eV 或更低；更佳地為 -1.6 eV 或更低；更佳地為 -1.7 eV 或更低。較佳地，化合物(I)之 LUMO 為 -2.2 eV 或更高；更佳地為 -1.9 eV 或更高。

【0044】 較佳地，化合物(I)之分子量為 500 或更高。較佳地，化合物(I)之分子量為 1000 或更小；更佳地為 900 或更小；更佳地為 800 或更小；更佳地為 700 或更小；更佳地為 600 或更小。

【0045】 較佳地，化合物(I)之三態能為 2.1 eV 或更高；更佳地為 2.15 eV 或更高；更佳地為 2.2 eV 或更高。較佳地，化合物(I)具有 2.6 eV 或更小；更佳地為 2.5 eV 或更小；更佳地為 2.4 eV 或更小；更佳地為 2.3 eV 或更小。

【0046】 較佳地，化合物(I)之 HOMO 為 -4.8 eV 或更低；更佳地為 -5.0 eV 或更低；更佳地為 -5.2 eV 或更低。較佳地，化合物(I)之 HOMO 為 -5.6 eV 或更高；更佳地為 -5.5 eV 或更高；更佳地為 -5.4 eV 或更高。

【0047】 較佳地，化合物(I)之 T_g 為 90°C 或更高；更佳地為 110°C 或更高；更佳地為 130°C 或更高。較佳地，化合物(I)之 T_g 為 200°C 或更低。

【0048】 本發明組成物可用於任何目的。本發明組成物較

佳用於有機發光二極體（OLED）之一或多個層中。OLED 含有陽極、發光層及陰極。

【0049】 較佳地，OLED 含有以如下次序彼此接觸之以下各層：基板、導電層、第一電洞注入層、視情況存在之第二電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層及電子注入層。較佳地，當需要操作 OLED 時，使電子注入層與金屬陰極接觸。

【0050】 OLED 之較佳實施例示於圖 1 中。玻璃基板 1 塗佈有導電層。所示剩餘各層為第一電洞注入層 3、第二電洞注入層 4、電洞傳輸層 5、發光層 6、電子傳輸層 7、電子注入層 8 及金屬陰極 9。當需要使 OLED 發光時，將 OLED 經由導線 11 連接至電壓源 10。較佳施用電壓以使得相對於陽極陰極為負電壓。

【0051】 較佳基板材料為玻璃。較佳導電層為氧化銦錫（ITO）。第一電洞注入層較佳包括一或多種芳胺，更佳一或多種具有兩個或更多個胺氮之芳胺。第二電洞注入層若存在則較佳包括一或多種腓，更佳具有兩個或更多個腓基團之腓。發光層較佳包括一或多種主體及一或多種摻雜劑。較佳主體為芳胺。較佳摻雜劑為螢光摻雜劑。較佳摻雜劑為具有一或多個氟原子之芳胺。較佳電子注入層包含一或多種有機金屬化合物；更佳為一或多種金屬喹啉鹽；更佳為喹啉鎂。

【0052】 本發明組成物較佳用於併入至 OLED 之電子傳輸層中。電子傳輸層較佳由本發明組成物組成。

【0053】 亦涵蓋用作電洞傳輸層之組分的實施例。在此類實施例中，電洞傳輸層亦意欲含有一或多種摻雜劑，所述一

或多種摻雜劑經選擇特性適當匹配主體之特性以產生適當地充當電洞傳輸層之層。

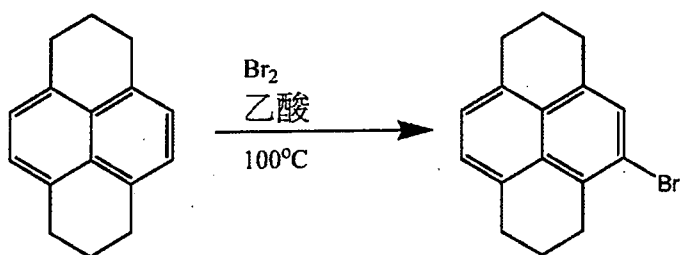
【0054】 以下為本發明之實例。

【0055】 除非另外說明，否則以下實例中之各操作在室溫下執行。室溫為大致 23°C。

【0056】 玻璃轉移溫度使用 DSC Q2000 儀器 (TA Instruments) 以 10°C/min 之掃描速率來量測，且所有循環均在氮氣氛圍中。由室溫至 300°C 掃描樣品 (約 7-10 mg)，冷卻至 -60°C，且再加熱至 300°C。玻璃態轉化溫度 (T_g) 經第二加熱掃描來量測。資料分析使用 TA 通用分析軟體 (TA instruments) 執行。 T_g 使用「轉折中點」方法來計算。

【0057】 除非另外說明，否則 $^1\text{H-NMR}$ 光譜 (500 MHz 或 400 MHz) 在 Varian VNMRS-500 或 VNMRS-400 光譜儀上在 30°C 下獲得。化學位移參比 CDCl_3 中之 TMS ($\delta=0.00$)。

【0058】 製備實例 1：製備 4-溴-1,2,3,6,7,8-六氫芘 (化合物 PE1)

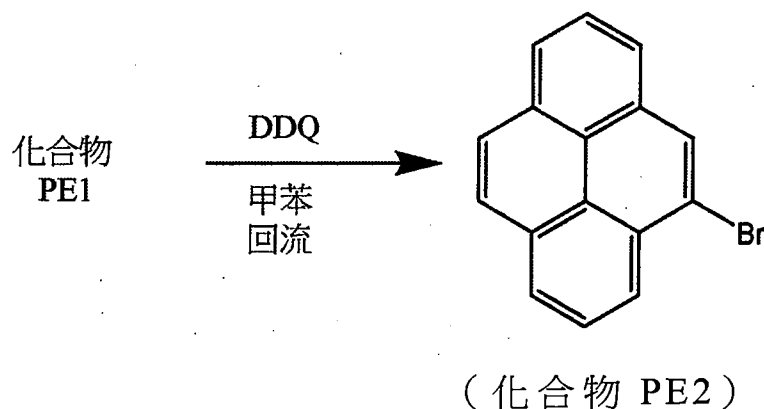


(化合物 PE1)

【0059】 在 1 h 內向 1,2,3,6,7,8-六氫芘 (6.06 g, 29.1 mmol) 於乙酸 (75 mL) 中之懸浮液中逐滴添加溴 (1.57 mL, 30 mmol) 於乙酸 (75 mL) 中之溶液。使混合物保持於室溫 (大致 23°C) 下 30 min，接著加熱至 100°C (沈澱物溶解)，

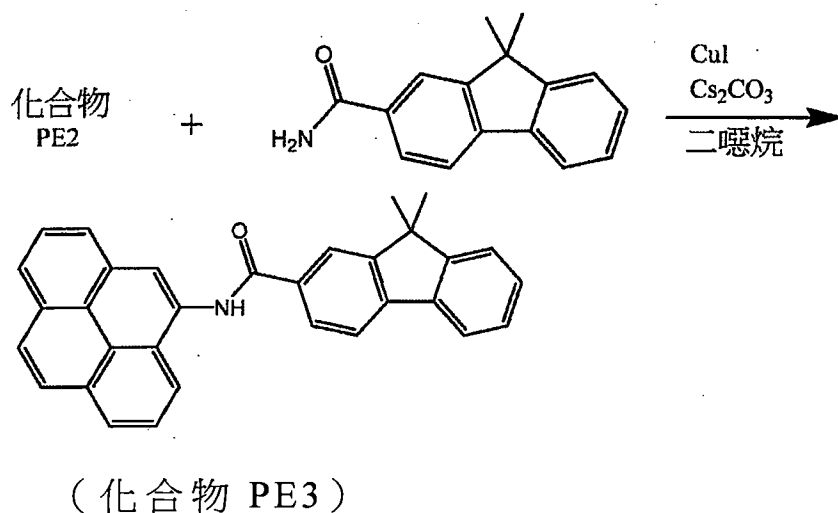
接著冷卻至室溫且用水 (75 mL) 稀釋。濾出固體且乾燥。粗產物藉由逆相管柱層析使用乙腈作為溶離劑來純化。在純化之後，獲得 2.01 g 粉末 (產率 24.3%)。

【0060】 製備實例 2：製 4-溴-芘 (化合物 PE2)



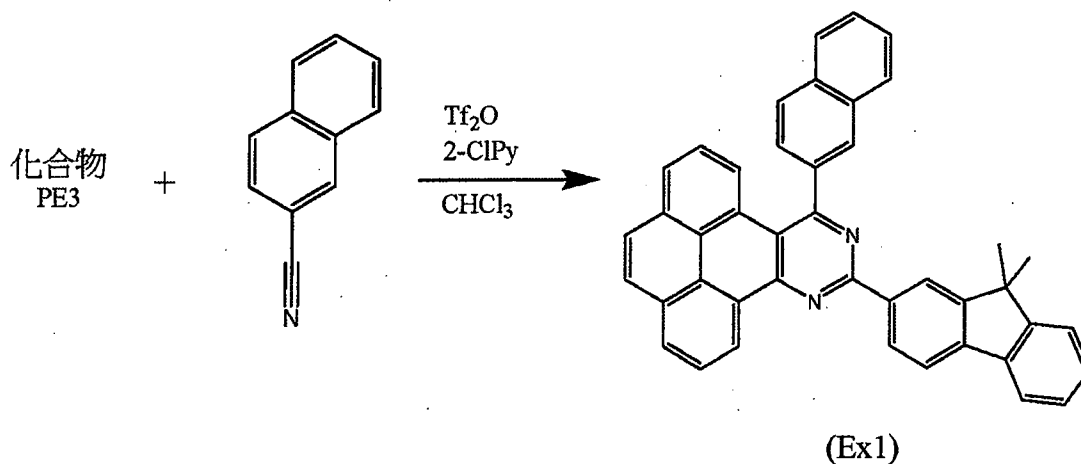
【0061】 向 4-溴-1,2,3,6,7,8-六氫芘 (2.01 g, 7.0 mmol) 於甲苯 (135 mL) 中之溶液中一次性添加 2,3-二氯-5,6-二氰基-1,4-苯醌 (DDQ) (5.30 g, 23 mmol)，用氫氣沖洗燒瓶且使混合物回流 20 min，接著冷卻至室溫且過濾。用 10% NaOH (30 mL)、水 (50 mL) 洗滌溶液且經硫酸鈉乾燥。在使用二氯甲烷作為溶離劑進行二氧化矽管柱分離之後，獲得純產物 (1.0 g) (產率 51.0%)。

【0062】 製備實例 3：製備 9,9-二甲基-N-(芘-4-基)-9H-芴-2-甲醯胺 (化合物 PE3)



【0063】 於 250 mL 圓底燒瓶中混合 4-溴苊 (1.00 g, 3.56 mmol)、9,9-二甲基-9H-芴-2-甲醯胺 (1.27 g, 5.34 mmol)、N,N-二甲基伸乙基二胺 (DMEDA) (0.13 g, 1.42 mmol)、Cs₂CO₃ (2.55 g, 7.83 mmol)、二噁烷 (100 mL), 且用氮氣鼓泡混合物 30 分鐘。在 N₂ 吹掃之後, 將 CuI (0.14 g, 0.71 mmol) 添加至混合物中。在 120°C 下在氮氣下攪拌反應混合物 15 h。在藉由 LC/MS 檢查反應物轉化之後, 必要時再將 CuI (0.14 g) 及 DMEDA (0.13 g) 添加至混合物中, 且在 120°C 下加熱混合物隔夜。接著使溶液冷卻至室溫且在冰水下沈澱產物。粗產物藉由矽膠管柱層析用甲醇及二氯甲烷 (0:10 至 0.5:9.5) 之混合物來純化。在純化之後, 獲得 1.27 g 粉末 (產率 81.4%)。

【0064】 實施例 1: 合成本發明化合物實例 1 (Ex1)



【0065】 在 -78°C 下經由注射器經 1 min 將三氟甲磺酸酐 (0.58 mL, 3.48 mmol) 添加至 9,9-二甲基-N-(苊-4-基)-9H-芴-2-甲醯胺 (1.27 g, 2.90 mmol)、2-氯吡啶 (2-ClPy) (0.33 mL, 3.48 mmol) 及 2-萘脲 (0.53 g, 3.48 mmol) 於氯仿 (50 mL) 中之經攪拌混合物中。在 5 min 之後, 將反應混合物置放於冰-水浴中 5 分鐘且升溫至 0°C。使所得溶液升溫至室溫維持 5

分鐘，之後將反應容器置放於在 45°C 下經預加熱油槽中且維持於所述溫度下。在 16 h 之後，使反應混合物冷卻至室溫，且引入氫氧化鈉水溶液 (1 mL, 1N) 以中和三氟甲烷磺酸鹽。添加氯仿 (5 mL) 以稀釋混合物且分離各層。用水 (2 mL) 洗滌有機層且經由相分離濾紙過濾以移除含內含物。減壓移除揮發物且殘餘物藉由急驟管柱層析用己烷及二氯甲烷混合物 (7:3) 來純化。在管柱分離之後，獲得純產物 (0.80 g, 產率 99.6%)。在昇華之後，獲得 0.27 g 純化合物 (Ex1)。¹H NMR (400 MHz, 氯仿-d) δ 9.79 (dd, $J = 7.8, 1.2$ Hz, 1H), 8.91 (dt, $J = 4.1, 2.0$ Hz, 2H), 8.48 - 8.42 (m, 1H), 8.40 - 8.33 (m, 1H), 8.18 (t, $J = 7.7$ Hz, 1H), 8.10 - 7.89 (m, 8H), 7.86 - 7.78 (m, 1H), 7.70 (dd, $J = 8.4, 1.7$ Hz, 1H), 7.59 (tt, $J = 7.1, 5.4$ Hz, 2H), 7.55 - 7.44 (m, 2H), 7.43 - 7.32 (m, 2H), 1.65 (s, 6H)。

【0066】 實例 2: HOMO 及 LUMO 值如上文針對化合物(I) 之各實施例所述來測定。結果如下。所有值以 eV 計。

表 1-計算結果

R1	R2	HOMO-1	HOMO	LUMO	LUMO+1	Δ LUMO	T1	λ -
CE	CE	-5.9557	-5.6088	-2.1825	-1.9202	0.2623	2.1968	0.2969
AE	CE	-5.8004	-5.5272	-2.0685	-1.7790	0.2895	2.1977	0.3976
CE	AB	-5.7631	-5.5552	-2.0666	-1.7872	0.2795	2.2404	0.2495
AB	CE	-5.6961	-5.5057	-2.0511	-1.7953	0.2558	2.2194	0.4020
AC	CE	-5.7310	-5.4706	-2.0506	-1.8029	0.2476	2.2378	0.3958
CE	BL	-5.9261	-5.5585	-2.0506	-1.7540	0.2966	2.2429	0.2726
CE	AE	-5.9187	-5.5585	-2.0478	-1.7986	0.2492	2.2683	0.2457
CE	DE	-5.6858	-5.5008	-2.0443	-1.7722	0.2721	2.2317	0.2420
AA	CE	-5.7944	-5.4923	-2.0432	-1.7956	0.2476	2.2454	0.4218
DE	CE	-5.6744	-5.4208	-2.0372	-1.7918	0.2454	2.2093	0.3677
CE	AC	-5.7832	-5.5500	-2.0372	-1.7608	0.2765	2.2778	0.2747
CE	DC	-5.8730	-5.4970	-2.0350	-1.7553	0.2797	2.2215	0.2474
CE	DD	-5.8733	-5.4951	-2.0345	-1.7599	0.2746	2.2297	0.2431
CE	DG	-5.8896	-5.5438	-2.0329	-1.7447	0.2882	2.2506	0.2656
BL	CE	-5.9753	-5.5500	-2.0320	-1.7768	0.2552	2.2310	0.4789
DG	CE	-5.7685	-5.5359	-2.0310	-1.7752	0.2558	2.2256	0.4356
DD	CE	-5.8085	-5.4676	-2.0304	-1.7736	0.2569	2.2041	0.3797

DC	CE	-5.8017	-5.4548	-2.0195	-1.7738	0.2457	2.2020	0.4060
CE	AA	-5.9029	-5.5732	-2.0195	-1.7580	0.2615	2.3078	0.2694
CE	DF	-5.8714	-5.5138	-2.0176	-1.7257	0.2920	2.2507	0.2671
CK	CK	-4.9405	-4.8175	-2.0174	-1.8906	0.1268	2.2875	0.3491
DF	CE	-5.7446	-5.5250	-2.0065	-1.7529	0.2536	2.2290	0.4564
DB	CE	-5.4330	-5.3517	-2.0008	-1.7341	0.2667	2.1978	0.4153
CE	DB	-5.5408	-5.4328	-2.0008	-1.7063	0.2944	2.2239	0.2644
AH	CE	-5.9639	-5.4790	-1.9507	-1.6955	0.2552	2.2685	0.3668
CE	DA	-5.5810	-5.3772	-1.9485	-1.6476	0.3009	2.2417	0.2728
CE	AH	-5.8534	-5.5087	-1.9267	-1.6699	0.2569	2.3847	0.2846
DA	CE	-5.6009	-5.2507	-1.9221	-1.6693	0.2528	2.2055	0.4999
AE	AB	-5.7236	-5.4679	-1.8614	-1.6963	0.1652	2.2583	0.3057

R1	R2	HOMO-1	HOMO	LUMO	LUMO+1	Δ LUMO	T1	λ -
DF	CK	-5.5634	-4.8954	-1.8598	-1.7703	0.0895	2.2934	0.3971
DF	CK	-5.5582	-5.0306	-1.8595	-1.7654	0.0942	2.2929	0.3939
AE	DE	-5.6464	-5.4303	-1.8584	-1.6827	0.1758	2.2457	0.3169
AE	AE	-5.7549	-5.4757	-1.8525	-1.7072	0.1453	2.3011	0.2767
AE	DD	-5.7258	-5.4191	-1.8503	-1.6699	0.1804	2.2466	0.3021
AB	AB	-5.6477	-5.4657	-1.8454	-1.7153	0.1301	0.0000	0.3046
AC	AB	-5.6303	-5.3906	-1.8435	-1.7126	0.1309	2.1655	0.2942
AE	DC	-5.7340	-5.4202	-1.8427	-1.6683	0.1744	2.2374	0.2902
DE	DE	-5.5631	-5.3674	-1.8418	-1.6865	0.1554	2.2540	0.2781
AA	AB	-5.6989	-5.4431	-1.8383	-1.7121	0.1263	2.2744	0.3208
AC	DE	-5.5963	-5.3968	-1.8380	-1.7031	0.1350	2.2641	0.2985
DD	DE	-5.6191	-5.3879	-1.8367	-1.6699	0.1668	2.2532	0.2888
DE	AB	-5.6170	-5.3811	-1.8367	-1.6897	0.1469	2.2709	0.2609
AE	BL	-5.7628	-5.4768	-1.8367	-1.6819	0.1548	2.2659	0.2602
AB	DE	-5.5974	-5.4262	-1.8331	-1.6952	0.1380	2.2702	0.3148
DC	AE	-5.7332	-5.3838	-1.8331	-1.6647	0.1684	2.2121	0.2909
AA	DE	-5.6113	-5.4123	-1.8331	-1.6995	0.1336	2.2905	0.3364
DD	AB	-5.6970	-5.4148	-1.8323	-1.6742	0.1581	2.2644	0.2696
AB	AE	-5.6627	-5.4616	-1.8318	-1.7243	0.1075	2.2976	0.2569
AA	DD	-5.6869	-5.3952	-1.8299	-1.6889	0.1410	2.2639	0.3125
AC	AE	-5.7038	-5.4200	-1.8280	-1.7292	0.0988	2.2876	0.2694
DE	AE	-5.6371	-5.3832	-1.8280	-1.7069	0.1211	2.2945	0.2354
DC	AB	-5.7000	-5.4083	-1.8255	-1.6827	0.1429	2.2641	0.2995
AB	DD	-5.6235	-5.4257	-1.8253	-1.6873	0.1380	2.4218	0.2986
DD	DD	-5.7223	-5.3783	-1.8253	-1.6601	0.1652	2.2499	0.2751
AC	DC	-5.6616	-5.3884	-1.8233	-1.6881	0.1352	2.2601	0.2741
DD	DC	-5.7258	-5.3838	-1.8231	-1.6557	0.1673	2.2463	0.2615
DC	DE	-5.6088	-5.3702	-1.8220	-1.6674	0.1546	2.2529	0.3005
DD	AE	-5.7715	-5.4181	-1.8217	-1.6927	0.1290	2.2914	0.2367
DE	BL	-5.6322	-5.3860	-1.8212	-1.6636	0.1576	2.2705	0.2491
AC	BL	-5.7013	-5.4254	-1.8206	-1.6821	0.1385	2.2661	0.3065

R1	R2	HOMO-1	HOMO	LUMO	LUMO+1	Δ LUMO	T1	λ -
AC	DD	-5.6657	-5.3879	-1.8204	-1.6862	0.1342	2.2632	0.2986

DE	DC	-5.5870	-5.3541	-1.8198	-1.6661	0.1537	2.2526	0.2468
DE	DD	-5.5862	-5.3541	-1.8193	-1.6691	0.1502	2.2592	0.2666
AE	AC	-5.7261	-5.4777	-1.8176	-1.6897	0.1279	2.2804	0.3710
AE	DG	-5.7470	-5.4619	-1.8168	-1.6663	0.1505	2.2750	0.2986
AB	DC	-5.6251	-5.4197	-1.8165	-1.6816	0.1350	2.2613	0.2801
DG	AB	-5.7225	-5.4850	-1.8149	-1.7050	0.1099	2.2851	0.3422
DD	BL	-5.7732	-5.4205	-1.8138	-1.6492	0.1646	0.0000	0.2452
AC	DG	-5.6763	-5.4047	-1.8125	-1.6813	0.1312	2.2803	0.2832
DC	DD	-5.7084	-5.3628	-1.8125	-1.6598	0.1527	2.2505	0.2987
AA	AE	-5.7511	-5.4374	-1.8125	-1.7227	0.0898	2.2902	0.2937
DG	DE	-5.6529	-5.4439	-1.8100	-1.6900	0.1200	2.2745	0.3610
AB	BL	-5.6575	-5.4616	-1.8062	-1.6870	0.1192	2.2834	0.2559
DE	DG	-5.6216	-5.3737	-1.8043	-1.6574	0.1469	2.2796	0.2577
AA	BL	-5.7538	-5.4442	-1.8043	-1.6748	0.1295	2.2715	0.2804
AC	AC	-5.6597	-5.4279	-1.8038	-1.6889	0.1148	2.2874	0.3362
DG	DD	-5.6932	-5.4287	-1.8029	-1.6748	0.1282	2.2835	0.3137
AB	DG	-5.6450	-5.4502	-1.8019	-1.6791	0.1227	2.2841	0.2819
DC	DC	-5.7100	-5.3606	-1.8016	-1.6525	0.1491	2.2475	0.2704
AE	DF	-5.7378	-5.4507	-1.8010	-1.6511	0.1499	2.2802	0.2665
DE	AC	-5.6107	-5.3898	-1.7994	-1.6729	0.1265	2.2974	0.2848
DG	AE	-5.7302	-5.4858	-1.7983	-1.7118	0.0865	2.3005	0.3066
AE	DB	-5.4861	-5.3734	-1.7975	-1.6361	0.1614	2.2579	0.2966
DD	DG	-5.7604	-5.4045	-1.7970	-1.6429	0.1540	2.2741	0.2662
AC	AA	-5.6706	-5.4202	-1.7959	-1.6800	0.1159	2.2883	0.3165
DB	DE	-5.3568	-5.3122	-1.7959	-1.6421	0.1537	2.2525	0.3316
DD	AC	-5.7073	-5.4240	-1.7950	-1.6576	0.1374	2.2945	0.3233
DE	AA	-5.6145	-5.3846	-1.7923	-1.6604	0.1320	2.2951	0.2638
AA	AC	-5.6877	-5.4439	-1.7921	-1.6868	0.1053	2.2922	0.3875
BL	DE	-5.6668	-5.4461	-1.7915	-1.6955	0.0961	2.2864	0.4012
DC	BL	-5.7617	-5.4026	-1.7904	-1.6560	0.1344	2.2764	0.2386

R1	R2	HOMO-1	HOMO	LUMO	LUMO+1	Δ LUMO	T1	λ -
BL	AB	-5.7538	-5.4994	-1.7891	-1.7186	0.0705	2.2895	0.4187
AE	AA	-5.7527	-5.4921	-1.7888	-1.6824	0.1064	2.3262	0.2676
DB	AB	-5.3813	-5.3174	-1.7872	-1.6495	0.1377	2.2666	0.3093
DG	DC	-5.7176	-5.4311	-1.7872	-1.6740	0.1132	2.2792	0.3124
DE	DF	-5.5968	-5.3593	-1.7866	-1.6370	0.1497	2.2765	0.2488
AA	AA	-5.7119	-5.4374	-1.7861	-1.6740	0.1121	2.2887	0.3018
AC	DF	-5.6839	-5.3982	-1.7839	-1.6552	0.1287	2.2764	0.3057
AA	DC	-5.7043	-5.4107	-1.7833	-1.6865	0.0969	2.2785	0.3679
AB	DF	-5.6319	-5.4281	-1.7825	-1.6555	0.1271	2.2806	0.2644
DF	DE	-5.6404	-5.4295	-1.7814	-1.6710	0.1105	2.2858	0.3847
BL	AE	-5.8989	-5.4978	-1.7812	-1.7175	0.0637	2.3016	0.3906
DC	DG	-5.7525	-5.3900	-1.7804	-1.6438	0.1366	2.2728	0.2788
DB	AE	-5.3811	-5.3138	-1.7787	-1.6644	0.1143	2.2961	0.2800
DD	DB	-5.4714	-5.3343	-1.7782	-1.6201	0.1581	2.2615	0.2482
AB	AC	-5.6352	-5.4763	-1.7779	-1.6971	0.0808	2.3201	0.3431
DB	DC	-5.3525	-5.3032	-1.7779	-1.6296	0.1483	2.2501	0.2982
DE	DB	-5.4627	-5.3291	-1.7776	-1.6334	0.1442	2.2686	0.2488

DD	DF	-5.7525	-5.3952	-1.7774	-1.6214	0.1559	2.2776	0.2486
DF	AB	-5.6961	-5.4613	-1.7771	-1.6821	0.0950	2.2890	0.3651
DC	AA	-5.7247	-5.4034	-1.7746	-1.6511	0.1235	2.2944	0.2788
DD	AA	-5.7680	-5.4260	-1.7738	-1.6538	0.1200	2.3149	0.2302
BL	DD	-5.8961	-5.4523	-1.7719	-1.6881	0.0838	2.2899	0.3773
AB	AA	-5.6643	-5.4681	-1.7714	-1.6854	0.0860	2.3209	0.2558
AE	AH	-5.6730	-5.3821	-1.7708	-1.5929	0.1780	2.3438	0.3365
AC	DB	-5.4730	-5.3560	-1.7695	-1.6541	0.1154	2.2732	0.2929
DC	AC	-5.7280	-5.4191	-1.7678	-1.6680	0.0999	2.3268	0.3152
DG	BL	-5.7386	-5.4834	-1.7651	-1.6789	0.0862	2.2895	0.2626
AB	DB	-5.4806	-5.3729	-1.7643	-1.6476	0.1167	2.2795	0.2850
DF	AE	-5.7043	-5.4730	-1.7643	-1.6908	0.0735	2.3042	0.3514
DF	AE	-5.7043	-5.4730	-1.7643	-1.6908	0.0735	2.3042	0.3514
BL	DC	-5.8774	-5.4409	-1.7638	-1.6838	0.0800	2.2828	0.3880

R1	R2	HOMO-1	HOMO	LUMO	LUMO+1	Δ LUMO	T1	λ -
AA	DG	-5.7402	-5.4436	-1.7635	-1.6756	0.0879	2.2898	0.3653
DB	BL	-5.3868	-5.3231	-1.7632	-1.6304	0.1328	2.2742	0.2655
DC	DF	-5.7438	-5.3797	-1.7632	-1.6239	0.1393	2.2770	0.2537
DB	DD	-5.3310	-5.3005	-1.7613	-1.6084	0.1529	2.2535	0.3248
DF	DC	-5.6874	-5.4314	-1.7608	-1.6582	0.1026	2.2830	0.3551
DG	DG	-5.7258	-5.4728	-1.7597	-1.6702	0.0895	2.2889	0.3209
DE	AH	-5.5617	-5.3054	-1.7586	-1.6076	0.1510	2.3207	0.2595
DB	DG	-5.3726	-5.3054	-1.7580	-1.6293	0.1287	2.2755	0.2946
AH	AB	-5.6864	-5.4148	-1.7570	-1.5605	0.1965	2.5023	0.2622
DC	DB	-5.4613	-5.3187	-1.7526	-1.6171	0.1355	2.2644	0.2731
DD	AH	-5.6932	-5.3247	-1.7510	-1.5948	0.1562	2.3187	0.2788
AH	DE	-5.6061	-5.3759	-1.7510	-1.5632	0.1878	2.2911	0.2686
DF	DD	-5.6842	-5.4045	-1.7496	-1.6353	0.1143	2.2853	0.3779
AA	DB	-5.4733	-5.3536	-1.7496	-1.6419	0.1078	2.2717	0.3165
BL	BL	-5.9380	-5.4994	-1.7480	-1.6857	0.0623	2.2841	0.3295
DG	DB	-5.4839	-5.3791	-1.7474	-1.6478	0.0996	2.2825	0.2667
AA	DF	-5.7304	-5.4328	-1.7466	-1.6527	0.0939	2.2888	0.3189
DB	AC	-5.3851	-5.3204	-1.7442	-1.6394	0.1048	2.2912	0.3759
DG	AA	-5.7130	-5.4872	-1.7439	-1.6702	0.0737	2.3031	0.3320
AH	AE	-5.8069	-5.4243	-1.7420	-1.5834	0.1586	2.3095	0.2561
DG	AH	-5.6668	-5.3952	-1.7414	-1.5858	0.1556	2.3263	0.3742
BL	DG	-5.8629	-5.4853	-1.7406	-1.6887	0.0520	2.2903	0.3907
DF	BL	-5.7108	-5.4747	-1.7401	-1.6560	0.0841	2.2843	0.2981
DG	AC	-5.7304	-5.5079	-1.7385	-1.6865	0.0520	2.3235	0.3958
DG	DF	-5.7171	-5.4630	-1.7368	-1.6481	0.0887	2.2888	0.2883
AH	DC	-5.7805	-5.3626	-1.7346	-1.5406	0.1940	2.5008	0.2570
DB	AA	-5.3860	-5.3149	-1.7330	-1.6263	0.1067	2.2985	0.3027
DC	AH	-5.6806	-5.3098	-1.7327	-1.5866	0.1461	2.3191	0.3131
AH	DD	-5.7865	-5.3974	-1.7327	-1.5333	0.1995	2.2897	0.2791
AH	BL	-5.9361	-5.4406	-1.7311	-1.5298	0.2014	2.2914	0.3141
DF	AC	-5.6937	-5.4687	-1.7303	-1.6688	0.0615	2.3035	0.4458

R1	R2	HOMO-1	HOMO	LUMO	LUMO+1	Δ LUMO	T1	λ -
AE	DA	-5.5664	-5.2929	-1.7303	-1.5684	0.1619	2.2491	0.2557
DB	DF	-5.3612	-5.3027	-1.7276	-1.6016	0.1260	2.2826	0.2753
DB	DB	-5.3231	-5.2992	-1.7268	-1.5964	0.1303	2.2702	0.2920
DF	DG	-5.7002	-5.4602	-1.7235	-1.6519	0.0716	2.2923	0.3621
BL	AC	-5.7813	-5.5174	-1.7216	-1.7023	0.0193	2.3211	0.5358
DE	DA	-5.4597	-5.2643	-1.7213	-1.5504	0.1709	2.2505	0.2545
BL	AA	-5.8798	-5.4978	-1.7213	-1.6748	0.0465	2.3051	0.4160
DH	CK	-4.8954	-4.8608	-1.7210	-1.6565	0.0645	2.2181	0.4380
AH	AC	-5.7424	-5.4469	-1.7180	-1.5254	0.1927	2.5132	0.2846
DD	DA	-5.5215	-5.2635	-1.7178	-1.5385	0.1793	2.2480	0.2394
AH	DG	-5.7732	-5.4333	-1.7151	-1.5352	0.1799	2.4632	0.3016
BL	DB	-5.5057	-5.3873	-1.7131	-1.6514	0.0618	2.2821	0.4130
DF	AA	-5.6883	-5.4706	-1.7129	-1.6549	0.0580	2.3047	0.3724
AH	DF	-5.7712	-5.3957	-1.7112	-1.4914	0.2199	2.2944	0.2893
AB	DA	-5.5220	-5.3019	-1.7093	-1.5670	0.1423	2.2572	0.2663
BL	DF	-5.8526	-5.4730	-1.7091	-1.6593	0.0498	2.2918	0.3674
AH	AA	-5.7644	-5.4521	-1.7061	-1.5104	0.1956	2.3342	0.3117
DF	DB	-5.4763	-5.3642	-1.7055	-1.6231	0.0824	2.2807	0.3712
DF	DF	-5.6915	-5.4491	-1.7036	-1.6302	0.0735	2.2919	0.3217
AC	DA	-5.5068	-5.2913	-1.7028	-1.5749	0.1279	2.2625	0.3236
AH	DB	-5.4276	-5.3117	-1.7020	-1.5020	0.2000	2.2935	0.2705
AA	DA	-5.4997	-5.2929	-1.7004	-1.5594	0.1409	2.2558	0.2750
DC	DA	-5.5027	-5.2567	-1.6976	-1.5395	0.1581	2.2514	0.2455
AC	AH	-5.6630	-5.3560	-1.6887	-1.5964	0.0922	2.3155	0.3541
AB	AH	-5.6053	-5.4080	-1.6859	-1.6005	0.0854	2.3271	0.3378
DA	DE	-5.4921	-5.1993	-1.6859	-1.5972	0.0887	2.2797	0.4199
AA	AH	-5.6825	-5.3655	-1.6794	-1.5964	0.0830	2.3163	0.3627
DA	AB	-5.5500	-5.2145	-1.6745	-1.6130	0.0615	0.0000	0.4233
DG	DA	-5.5753	-5.3024	-1.6742	-1.5621	0.1121	2.2644	0.2640
DA	DD	-5.4986	-5.1704	-1.6723	-1.5806	0.0917	2.2811	0.3822
DB	DA	-5.2782	-5.2328	-1.6614	-1.5205	0.1410	2.2554	0.2599

R1	R2	HOMO-1	HOMO	LUMO	LUMO+1	Δ LUMO	T1	λ -
DA	AE	-5.5587	-5.2042	-1.6612	-1.6122	0.0490	2.2970	0.5081
AH	DA	-5.5176	-5.2309	-1.6497	-1.4027	0.2471	2.2729	0.3031
BL	AH	-5.8529	-5.4445	-1.6489	-1.6100	0.0389	2.3279	0.4671
BL	DA	-5.5914	-5.3122	-1.6454	-1.5711	0.0743	2.2699	0.3200
DA	DC	-5.5043	-5.1881	-1.6440	-1.5806	0.0634	2.2790	0.3995
DA	AH	-5.4831	-5.1264	-1.6416	-1.4761	0.1654	2.3213	0.4633
DB	AH	-5.3223	-5.2458	-1.6408	-1.5515	0.0893	2.3257	0.3648
DF	DA	-5.5664	-5.2877	-1.6391	-1.5428	0.0963	2.2686	0.2869
DA	BL	-5.5585	-5.2115	-1.6375	-1.5708	0.0667	2.2793	0.3271
DF	AH	-5.6311	-5.4202	-1.6356	-1.5801	0.0555	2.3300	0.4359
DF	DH	-5.4260	-4.9707	-1.6312	-1.5385	0.0928	2.2597	0.2537
DF	DH	-5.4260	-4.9707	-1.6312	-1.5385	0.0928	2.2597	0.2537
DA	AC	-5.5310	-5.2129	-1.6228	-1.5785	0.0444	2.3004	0.4929
AH	AH	-5.9010	-5.3819	-1.6166	-1.5197	0.0969	2.5217	0.3213
DA	DG	-5.5481	-5.1993	-1.6152	-1.5746	0.0405	2.2858	0.4130

DA	AA	-5.5391	-5.2042	-1.6122	-1.5559	0.0563	2.3003	0.4145
DA	DF	-5.5391	-5.1890	-1.5970	-1.5453	0.0517	2.2855	0.3665
DA	DB	-5.4020	-5.1601	-1.5942	-1.5507	0.0435	2.2787	0.4239
DA	DA	-5.3642	-5.1253	-1.5333	-1.4612	0.0721	2.2783	0.3127
DH	DH	-4.9294	-4.7770	-1.5107	-1.4307	0.0800	2.2237	0.2698

【0067】 實例 3：製造及測試 OLED

【0068】 所有有機物質藉由在沈積之前昇華來純化。將 OLED 製造於充當陽極之 ITO 塗佈之玻璃基板上，且以鋁陰極為頂部。所有有機層在真空腔室中在基礎壓力 $<10^{-7}$ 托下藉由物理氣相沈積熱沈積。

【0069】 將含有 HIL1、HIL2、HTL、EML 主體、EML 摻雜劑、ETL 或 EIL 之各單元置放於真空腔室內，直至其達到 10^{-6} 托。為蒸發各物質，將控制電流施加於含有物質之單元以使細胞之溫度升高。施用適當溫度以在整個蒸發過程中保持物質之蒸發速率恆定。

【0070】 對於 HIL1 層，使 *N4,N4'*-二苯基-*N4,N4'*-雙(9-苯基-9*H*-吡啶-3-基)-[1,1'-聯苯基]-4,4'-二胺蒸發，直至層之厚度達到 60 nm。接下來，對於 HIL2 層，使二吡嗪并[2,3-*f*:2',3'-*h*]喹啉-2,3,6,7,10,11-六甲腈蒸發，直至厚度達到 5 nm。對於 HTL 層，使 *N*-([1,1'-聯苯基]-4-基)-9,9-二甲基-*N*-(4-(9-苯基-9*H*-吡啶-3-基)苯基)-9*H*-蒽-2-胺蒸發，直至厚度達到 25 nm。對於 EML 層，使 9-苯基-10-(4-苯基萘-1-基)蒽 (BH-1，主體) 及 *N1,N6*-雙(5'-氟-[1,1':3',1''-聯三苯]-4'-基)-*N1,N6*-二苯苊-1,6-二胺 (BD-1，摻雜劑) 共蒸發，直至厚度達到 20 nm。摻雜劑材料之摻雜比率為 2 wt%。對於 ETL 層，使 ETL 化合物與喹啉鋰 (液體) 共蒸發，直至厚度達到 30 nm，其中蒸發比率為 1:1。最終，對「2 nm」之薄電子注入層 (液體) 進行

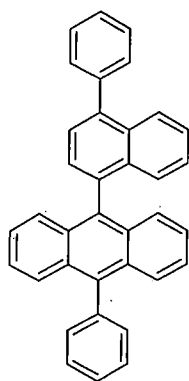
蒸發。參見表 2。

【0071】 對於本發明之實例，遵循以上程序，且 ETL 為上文所述之 Ex.1。對於比較實例，遵循以上程序，且 ETL 為 2,4-雙(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-(萘-2-基)-1,3,5-三嗪 (比較 ETL-1)。

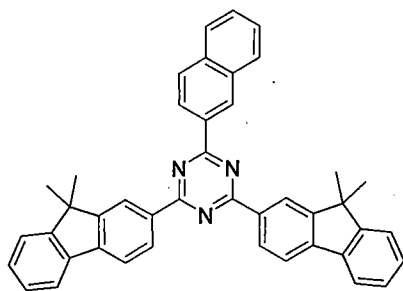
【0072】 OLED 裝置之電流密度-電壓-亮度 (J-V-L) 表徵用源量測單元 (KEITHLY 2635A) 及發光計 (MINOLTA CS-100A) 執行。OLED 裝置之電致發光 (EL) 光譜藉由經校準 CCD 光譜儀收集。顏色使用 CIE 系統報導，報導 X 及 Y 座標。

表 2：裝置材料

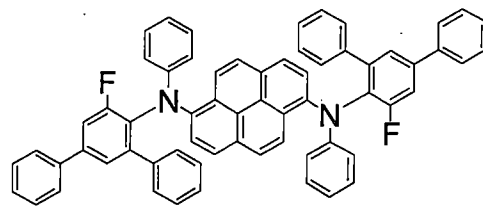
	名稱
電洞注入材料 1	N4,N4'-二苯基-N4,N4'-雙(9-苯基-9H-呋啶-3-基)-[1,1'-聯苯基]-4,4'-二胺
電洞注入材料 2	二吡嗪并[2,3-f:2',3'-h]喹啉-2,3,6,7,10,11-六甲腈
電洞傳輸材料	N-([1,1'-聯苯基]-4-基)-9,9-二甲基-N-(4-(9-苯基-9H-呋啶-3-基)苯基)-9H-芴-2-胺
F1 藍主體	9-苯基-10-(4-苯基萘-1-基)蒽
F1 藍摻雜物	N1,N6-雙(5'-氟-[1,1':3',1''-聯三苯]-4'-基)-N1,N6-二苯苊-1,6-二胺
比較 ETL-1	2,4-雙(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-6-(萘-2-基)-1,3,5-三嗪
電子注入材料	喹啉鋰



BH-1



ETL-1



BD-1

ETL-1 為比較化合物。如上文所述之 Ex.1 為本發明組成物之實例，其具有結構 (I)，其中 R1=DC) 且 R2=AE)。

【0073】 測試 OLED 裝置之結果如下：

表 3 裝置結果

		電壓 在 1000 尼特下 [V]	發光效率 在 1000 尼特下 [Cd/A]	CIE (X,Y)
比較	ETL-1:Liq	4.5	4.7	0.139, 0.088
本發明	Ex. 1:Liq	4.2	5.9	0.139, 0.089

【0074】 本發明之 OLED 裝置具有類似於比較 OLED 裝置之顏色及電壓，且本發明之 OLED 裝置具有優良發光效率。

【0075】 實例 5：玻璃轉移溫度

【0076】 Ex.1 之 Tg 如上文所述量測。Tg 為 143°C。

【符號說明】

【0077】

- 1：玻璃基板
- 3：第一電洞注入層
- 4：第二電洞注入層
- 5：電洞傳輸層
- 6：發光層
- 7：電子傳輸層

8：電子注入層

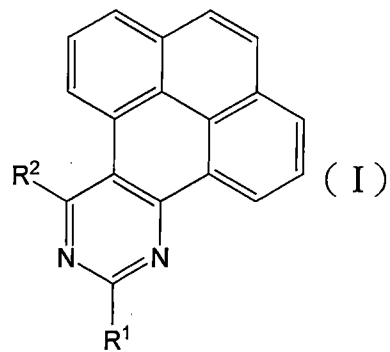
9：金屬陰極

10：電壓源

11：導線

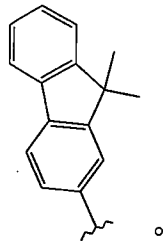
申請專利範圍

1. 一種組成物，其包括一或多種具有結構 (I) 之菲并喹啉核化合物

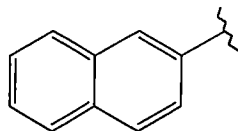


其中 R^1 及 R^2 中之每一者獨立地為經取代或未經取代之苯基。

2. 如申請專利範圍第 1 項所述之組成物，其中 R^1 為



3. 如申請專利範圍第 1 項所述之組成物，其中 R^2 為



4. 如申請專利範圍第 1 項所述之組成物，其中具有結構 (I) 之所述化合物之 LUMO 為 -1.5 eV 至 -1.9 eV 。
5. 如申請專利範圍第 1 項所述之組成物，其中具有結構 (I) 之所述化合物之 T_g 為 90°C 至 200°C 。
6. 一種有機發光二極體，其包括發光層及電子傳輸層，其中所述電子傳輸層包括如申請專利範圍第 1 項所述之組成物。

圖式

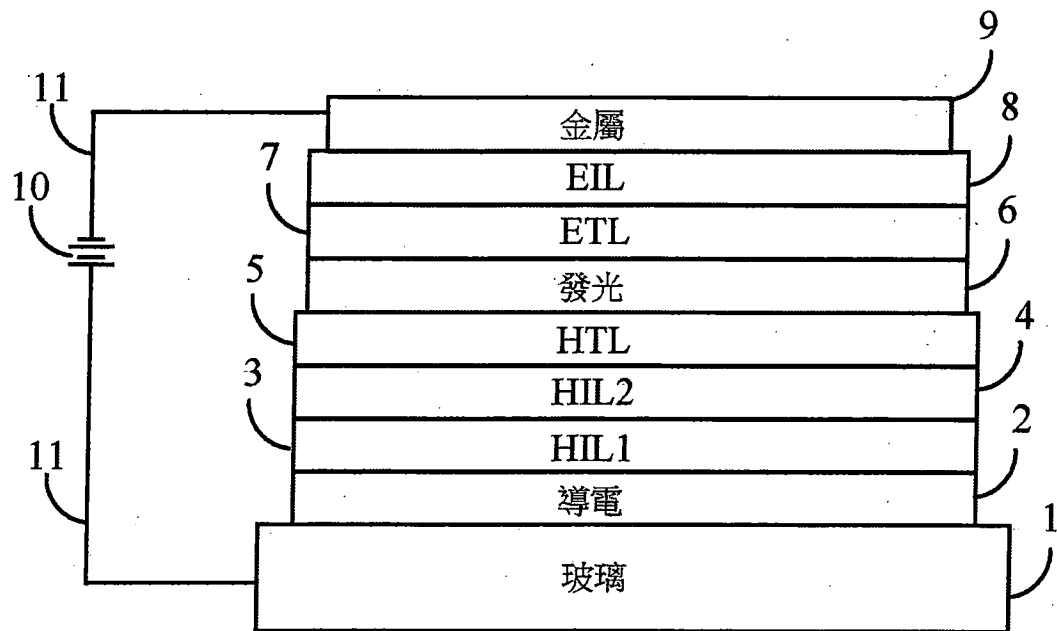


圖1