



(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 202104238 A

(43) 公開日：中華民國 110 (2021) 年 02 月 01 日

---

(21) 申請案號：109111767 (22) 申請日：中華民國 109 (2020) 年 04 月 08 日

(51) Int. Cl. :                    *C07F5/02 (2006.01)*                    *C09K11/06 (2006.01)*  
   *H01L51/54 (2006.01)*                    *H01L51/52 (2006.01)*

(30) 優先權：2019/04/11            歐洲專利局                    19168728.4

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

(72) 發明人：史坦杰 艾歐娜 STENGEL, ILONA (DE)；雷克納 艾倫 LACKNER, AARON  
   (US)；羅瑞蓋茲 雷拉依沙貝爾 RODRIGUEZ, LARA-ISABEL (ES)；華特 夏綠  
   蒂 WALTER, CHARLOTTE (DE)；梅克 阿梅爾 MEKIC, AMEL (DE)

(74) 代理人：林志剛

申請實體審查：無    申請專利範圍項數：24 項    圖式數：2            共 138 頁

---

(54) 名稱

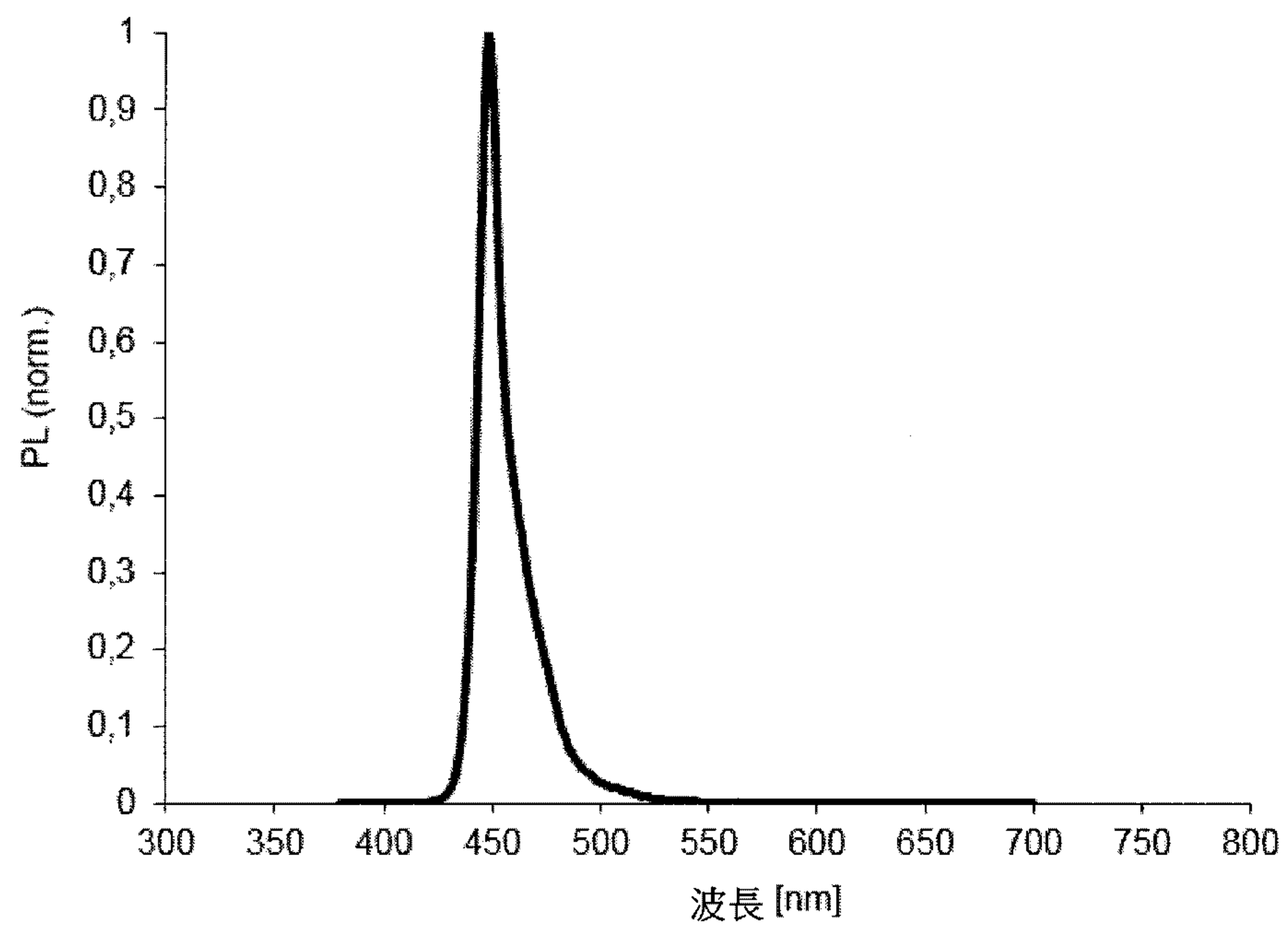
用於有機電致發光裝置之材料

(57) 摘要

本發明係關於式(1)之化合物，其係適用於電子裝置、特別是有機電致發光裝置，並關於包含此等化合物之電子裝置。

The present invention relates to compounds of the formula (1) which are suitable for use in electronic devices, in particular organic electroluminescent devices, and to electronic devices which comprise these compounds.

指定代表圖：



【圖 1】



202104238

## 【發明摘要】

### 【中文發明名稱】

用於有機電致發光裝置之材料

### 【英文發明名稱】

MATERIALS FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICES

### 【中文】

本發明係關於式(1)之化合物，其係適用於電子裝置、特別是有機電致發光裝置，並關於包含此等化合物之電子裝置。

### 【英文】

The present invention relates to compounds of the formula (1) which are suitable for use in electronic devices, in particular organic electroluminescent devices, and to electronic devices which comprise these compounds.

【指定代表圖】第(1)圖。

【代表圖之符號簡單說明】無

【特徵化學式】無



# 【發明說明書】

## 【中文發明名稱】

用於有機電致發光裝置之材料

## 【英文發明名稱】

MATERIALS FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICES

## 【技術領域】

本發明係關於式(1)之化合物、該化合物在電子裝置中之用途，以及包含式(1)之化合物之電子裝置。本發明另外關於製備式(1)之化合物之方法及包含一或多種式(1)之化合物之調配物。

## 【先前技術】

用於電子裝置的功能性化合物之開發係目前深入研究的主题。特別地，目的在開發化合物，利用該化合物可使電子裝置在一或多個相關方面實現經改善的性能，例如，裝置的功率效率及壽命以及發射光的色坐標。

根據本發明，用語電子裝置用來意指尤其係有機積體電路(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)、有機光學偵測器、有機感光器、有機場淬滅裝置(OFQD)、有機發光電化學電池(OLEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機電致發光裝置(OLED)。

特別令人感興趣的是提供用於最後提到稱為 OLED 的電子裝置之化合物。OLED 之一般結構及功能原理係所屬技術領域中具有通常知識者已知的，並描述於例如 US 4539507 中。

關於 OLED 的性能數據，特別是考慮到廣泛的商業用途，例如在顯示裝置中或作為光源，仍需要進一步的改進。在此方面特別重要的是 OLED 的壽命、效率及操作電壓、以及所達到的色值。特別地，在發藍光 OLED 的情況下，關於裝置的壽命、效率及發射體的色純度方面有改進的潛力。

實現所述改進的重要出發點係選擇電子裝置中所使用的發射體化合物及主體化合物。

從先前技術中已知的藍色螢光發射體係多種化合物。從先前技術中已知含有一或多種縮合芳基的芳基胺。從先前技術中亦已知含有二苯并呋喃基團(如於 US 2017/0012214 中所揭示者)或茚并二苯并呋喃基團(如於 CN 10753308 中所揭示者)的芳基胺。

在過去十年中，亦對展現熱活化延遲螢光 (thermally activated delayed fluorescence, TADF) 的化合物(例如，H. Uoyama 等人，Nature 2012, vol. 492, 234) 進行深入的研究。TADF 材料通常係有機材料，其中在最低三重態  $T_1$  與第一激發單重態  $S_1$  之間的能隙夠小，使得  $S_1$  態可從  $T_1$  態以熱的方式進入。由於量子統計的原因，在 OLED 中進行電子激發時，75% 的激發態處於三重態，而 25% 的激發態處

於單重態。由於純有機分子通常不能從三重態有效地發射，因此不能將75%的激發態用於發射，這意味著原則上僅可將25%的激發能轉換為光。然而，如果最低三重態與最低激發單重態之間的能隙夠小，則分子的第一激發單重態可藉由熱激發而從三重態進入，並且可以熱的方式盛行。由於此單重態係可能發出螢光的發射態，因此該狀態可用於產生光。因此，原則上，當使用純有機材料作為發射體時，可將高達100%的電能轉換為光。

近來，已經描述了包含硼及氮原子的多環芳族化合物(例如，於US2015/0236274A1、CN107501311A、WO2018/047639A1中)。此等化合物可用作為螢光發射體，其中螢光發射主要是即時螢光或作為TADF化合物。

然而，仍然需要可在OLED中使用並且可使OLED在壽命、顏色發射及效率方面具有非常良好的性質之其他螢光發射體，尤其是藍色螢光發射體。更特別地，需要有結合非常高的效率、非常良好的使用壽命及合適的色坐標以及高色純度之藍色螢光發射體。

近來，已(例如，在WO2015/135624中)描述在發光層中具有TADF化合物作為敏化劑及相對於其環境具有高立體屏蔽(high steric shielding)之螢光化合物作為發射體之有機電致發光裝置。此裝置構造使其可提供發射所有發射顏色之有機電致發光裝置，使得其可使用已知的螢光發射體之基本結構，但仍然展現出具有TADF之電致發光裝置的高效率。這亦稱為超螢光(hyperfluorescence)。



作為替代方案，先前技術描述一種有機電致發光裝置，其在發光層中包含磷光有機金屬錯合物作為敏化劑（由於自旋軌域偶合大，其顯示S1態與T1態的混合）以及螢光化合物作為發射體，使得發射衰減時間可顯著縮短。這亦稱為超磷光(hyperphosphorescence)。

超螢光及超磷光亦是對於改善OLED性質(尤其是在深藍色發射方面)前景看好的技術。

然而，在此同樣地，關於OLED的性能數據，特別是為了廣泛的商業用途，例如在顯示裝置中或作為光源，仍然需要進一步的改進。在此方面特別重要的是OLED的壽命、效率、操作電壓以及所達到的色值，特別是色純度。

在超螢光及超磷光系統中實現該改進的重要起點係選擇立體阻礙型螢光發射體化合物。

在WO 2015/135624中，描述基於紅螢烯(rubrene)之立體阻礙型螢光發射體。然而，對於進一步立體阻礙型螢光發射體仍有需求，尤其是立體阻礙型藍色螢光發射體，其使得OLED在效率及顏色發射方面具有非常好的特性。更特別地，需要有結合非常高的效率、非常良好的使用壽命及合適的色坐標以及高色純度之深藍色螢光發射體。

此外，已知OLED可包含不同的層，其可藉由在真空中氣相沉積或藉由從溶液進行處理來施加。基於氣相沉積的程序得到良好的結果，但是這種程序係複雜且昂貴的。因此，亦需要能夠從溶液容易且可靠地處理之OLED材料。在此情況下，材料應在包含彼等之溶液中具有良好

的溶解度。另外，從溶液處理之 OLED 材料應該能夠在沉積的膜中定向彼等自身，以提高 OLED 的整體效率。用語位向在此處意指化合物之水平分子位向，如 Zhao 等人於 *Horizontal molecular orientation in solution-processed organic light-emitting diodes*, *Appl.Phys.Lett.*106063301, 2015 中所解釋的。

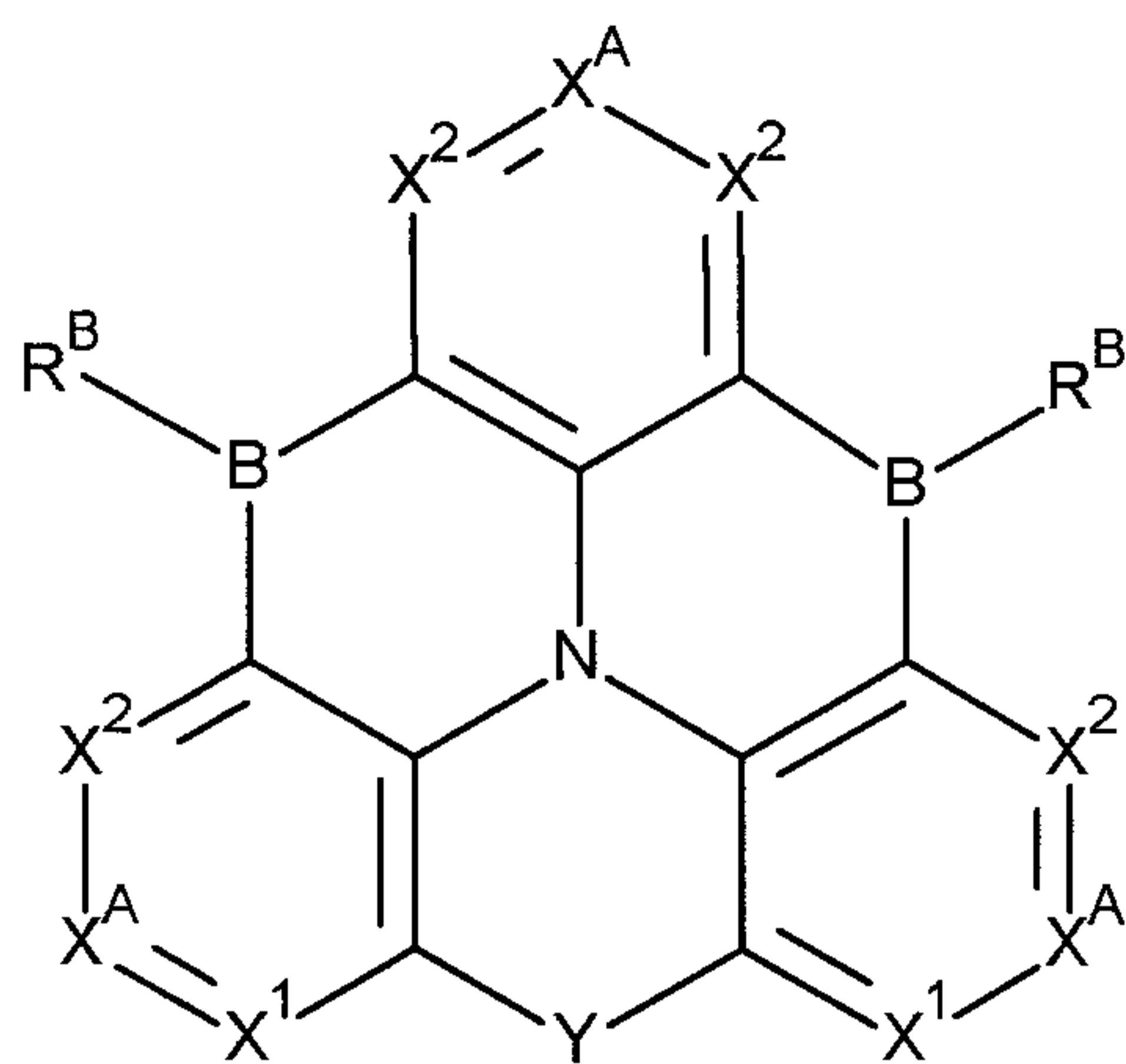
### 【發明內容】

因此，本發明係基於提供展現即時螢光及/或延遲螢光的發射體之技術目的。本發明亦基於提供立體阻礙型螢光發射體的技術目的，其可與敏化劑化合物組合使用於超螢光或超磷光系統中。本發明亦基於提供適用於電子裝置（諸如 OLED）、更特別地作為適用於真空處理或溶液處理之發射體的化合物之技術目的。

在用於電子裝置中之新穎化合物的研究中，現已發現，如下文所定義之式(1)之化合物非常適合用於電子裝置中。特別地，彼等實現上述技術目的之一或多者，較佳地係全部。

因此，本發明係關於式(1)之化合物，





式 (1)

其中下列適用於所使用之符號及標號：

$X^1$  在每次出現時相同或不同地代表  $CR^1$  或  $N$ ；

$X^2$  在每次出現時相同或不同地代表  $CR^2$  或  $N$ ；

$X^A$  在每次出現時相同或不同地代表  $CR^A$  或  $N$ ；

$Y$  係單鍵或選自下列之伸烷基： $-C(R^Y)_2-$ 、

$-C(R^Y)_2-C(R^Y)_2-$ ；

$R^B$  在每次出現時相同或不同地代表  $CN$ 、 $N(Ar)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $S(=O)Ar$ 、 $S(=O)_2Ar$ 、 $N(R)_2$ 、 $Si(R)_3$ 、 $OSO_2R$ 、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基 (thioalkoxy)、或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基、或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基 (其各者可經一或多個基團  $R$  取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $RC=CR$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$  或  $CONR$  置換，且其中一或多個  $H$  原子可經  $D$ 、 $F$ 、 $Cl$ 、 $Br$ 、 $I$ 、 $CN$  或



NO<sub>2</sub>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基團R取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳氧基(其可經一或多個基團R取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個R基團取代);

R<sup>Y</sup> 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、Cl、Br、I、CHO、CN、N(Ar)<sub>2</sub>、C(=O)Ar、P(=O)(Ar)<sub>2</sub>、S(=O)Ar、S(=O)<sub>2</sub>Ar、NO<sub>2</sub>、N(R)<sub>2</sub>、Si(R)<sub>3</sub>、B(OR)<sub>2</sub>、OSO<sub>2</sub>R、具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有2至40個碳原子之烯基或炔基、或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團R取代,其中在各情況下,一或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基團可經RC=CR、C≡C、Si(R)<sub>2</sub>、Ge(R)<sub>2</sub>、Sn(R)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R)、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR置換,且其中一或多個H原子可經D、F、Cl、Br、I、CN或NO<sub>2</sub>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基團R取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳氧基(其可經一或多個基團R取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個R基團取代);其中兩個相鄰取代基R<sup>Y</sup>可形成單環或多環脂族環

系統或芳族環系統(其可經一或多個基團 R' 取代)；

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^A$  在每次出現時相同或不同地代表 H、D、F、Cl、Br、I、CHO、CN、 $N(Ar)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $S(=O)Ar$ 、 $S(=O)_2Ar$ 、 $NO_2$ 、 $Si(R)_3$ 、 $B(OR)_2$ 、 $OSO_2R$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團 R 取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $RC=CR$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$  或  $CONR$  置換，且其中一或多個 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基團 R 取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基(其可經一或多個基團 R 取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個基團 R 取代)；其中兩個選自  $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^A$  之相鄰基團可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團 R 取代)；

R 在每次出現時相同或不同地代表 H、D、F、Cl、Br、I、CHO、CN、 $N(Ar)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $S(=O)Ar$ 、 $S(=O)_2Ar$ 、 $NO_2$ 、

$\text{Si}(\text{R}')_3$ 、 $\text{B}(\text{OR}')_2$ 、 $\text{OSO}_2\text{R}'$ 、具有 1 至 40 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 3 至 40 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團  $\text{R}'$  取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $\text{CH}_2$  基團可經  $\text{R}'\text{C}=\text{CR}'$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}')_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}')_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}')_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}')$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$  或  $\text{CONR}'$  置換，且其中一或多個 H 原子可經  $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{Cl}$ 、 $\text{Br}$ 、 $\text{I}$ 、 $\text{CN}$  或  $\text{NO}_2$  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基團  $\text{R}'$  取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳氧基(其可經一或多個基團  $\text{R}'$  取代)；其中兩個相鄰基團  $\text{R}$  可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團  $\text{R}'$  取代)；

**Ar** 在每次出現時相同或不同地係具有 5 至 24 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下亦可經一或多個基團  $\text{R}'$  取代；

**R'** 在每次出現時相同或不同地代表  $\text{H}$ 、 $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{Cl}$ 、 $\text{Br}$ 、 $\text{I}$ 、 $\text{CN}$ 、具有 1 至 20 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 3 至 20 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其中在各情況下，一或多個非相鄰  $\text{CH}_2$  基團可經  $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$  置換，且其中一或多個 H 原子可經  $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{Cl}$ 、 $\text{Br}$  或  $\text{I}$  置換)、或具有 5 至 24 個 C 原子之芳族或雜芳族環



系統。

在本發明的意義上，相鄰取代基係鍵結至彼此直接連接之原子上或鍵結至相同原子上的取代基。

此外，下列化學基團之定義適用於本申請案之目的：

在本發明的意義上，芳基含有6至60個芳族環原子，較佳係6至40個芳族環原子，更佳係6至20個芳族環原子；在本發明的意義上，雜芳基含有5至60個芳族環原子，較佳係5至40個芳族環原子，更佳係5至20個芳族環原子，其至少一者係雜原子。雜原子較佳地係選自N、O及S。這代表基本定義。如果在本發明之說明書中指出其他較佳者，例如關於芳族環原子之數目或存在的雜原子，則適用這些。

此處的芳基或雜芳基係用來意指簡單的芳族環(亦即苯)、或簡單的雜芳族環(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、喹啉或咔唑。在本申請案的意義上，縮合(稠合)芳族或雜芳族多環由二或更多個彼此縮合的簡單芳族或雜芳族環組成。

在各情況下可經上述基團取代且可經由任何所欲的位置連接至芳族或雜芳族環系統之芳基或雜芳基用來意指特別係衍生自下列者之基團：苯、萘、蔥、菲、芘、二氫芘、蒽、芘、丙二烯合萘(fluoranthene)、苯并蔥、苯并菲、稠四苯、稠五苯、苯并芘、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯



并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、吡嗪、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶(acridine)、啡啶(phenanthridine)、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻吡(phenothiazine)、啡噻吡(phenoxazine)、吡啶、吡啶、咪啶、苯并咪啶、萘并咪啶、菲并咪啶、吡啶并咪啶、吡啶并咪啶(pyrazinimidazole)、喹噻啉并咪啶(quinoxalinimidazole)、噻啶、苯并噻啶、萘并噻啶、蔥并噻啶、菲并噻啶(phenanthroxazole)、異噻啶、1,2-噻啶、1,3-噻啶、苯并噻啶、噻吡、苯并噻吡、噻啶、苯并噻啶、喹噻啉(quinoxaline)、吡啶、啡啶、噻啶(naphthyridine)、氮雜吡啶、苯并吡啶、啡啶(phenanthroline)、1,2,3-三啶、1,2,4-三啶、苯并三啶、1,2,3-噻二啶、1,2,4-噻二啶、1,2,5-噻二啶、1,3,4-噻二啶、1,2,3-噻二啶、1,2,4-噻二啶、1,2,5-噻二啶、1,3,4-噻二啶、1,3,5-三吡、1,2,4-三吡、1,2,3-三吡、四啶、1,2,4,5-四吡、1,2,3,4-四吡、1,2,3,5-四吡、噻啶、噻啶、吡啶(indolizine)及苯并噻二啶。

根據本發明之定義，芳氧基係用來意指經由氧原子鏈結之如上文所定義之芳基。類似的定義適用於雜芳氧基。

根據本發明之定義，芳烷基係用來意指其中至少一個氫原子經芳基置換之烷基。類似的定義適用於雜芳烷基。

在本發明的意義上，芳族環系統在環系統中含有6至60個C原子，較佳係6至40個C原子，更佳係6至20個C原子。在本發明的意義上，雜芳族環系統含有5至60個芳族



環原子，較佳係5至40個芳族環原子，更佳係5至20個芳族環原子，其至少一者係雜原子。雜原子較佳地係選自N、O及/或S。在本發明的意義上，芳族或雜芳族環系統旨在意指不一定僅含有芳基或雜芳基的系統，而是在其中另外含有可由非芳族單元(較佳地小於10%之H以外的原子)，諸如例如 $sp^3$ 混成的C、Si、N或O原子、 $sp^2$ 混成的C或N原子或 $sp$ 混成的C原子連接之多個芳基或雜芳基。因此，在本發明的意義上，例如，諸如9,9'-螺聯萸、9,9'-二芳基萸、三芳基胺、二芳基醚、二苯乙烯等系統亦應視為芳族環系統，乃因其等為其中二或更多個芳基係例如藉由直鏈或環狀烷基、烯基或炔基、或藉由矽基連接之系統。此外，在本發明的意義上，其中二或更多個芳基或雜芳基經由單鍵彼此連接之系統亦應視為芳族或雜芳族環系統，諸如例如，諸如聯苯、三聯苯或二苯基三吡等系統。

在各情況下可經如上文所定義之基團取代且可經由任何所欲的位置連接至芳族或雜芳族基團之具有5至60個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統用來意指特別係衍生自下列者之基團：苯、萘、蒽、苯并蒽、菲、苯并菲、芘、蒽、芘、丙二烯合萸、稠四苯、稠五苯、苯并芘、聯苯、聯伸二苯、聯三苯(terphenyl)、聯伸三苯、聯四苯、萸、螺聯萸、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛并萸、順-或反-單苯并茛并萸、參茛并苯(truxene)、異參茛并苯(isotruxene)、螺參茛并苯、螺異參茛并苯、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并



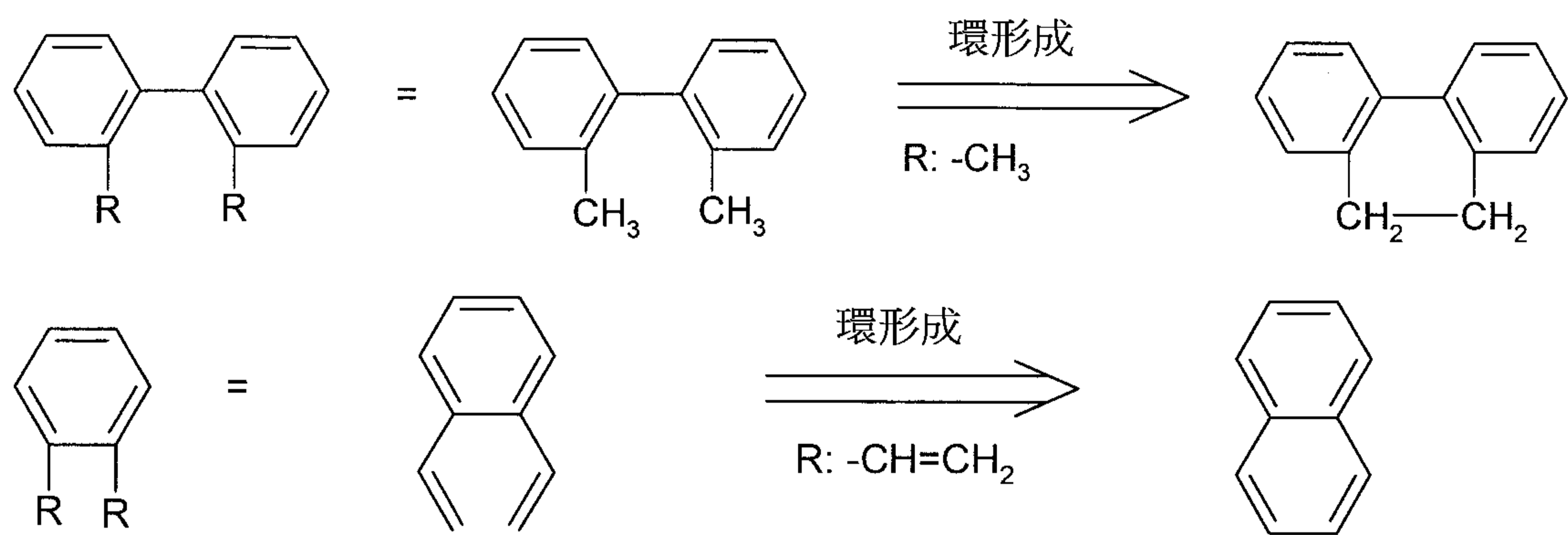
噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、吡啶、吡啶并吡啶、茛并吡啶、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻吡、啡噻吡、吡啶、吡啶、咪啶、苯并咪啶、萘并咪啶、菲并咪啶、吡啶并咪啶、吡啶并咪啶、喹噻吡并咪啶、噻啶、苯并噻啶、萘并噻啶、蔥并噻啶、菲并噻啶、異噻啶、1,2-噻啶、1,3-噻啶、苯并噻啶、噻吡、苯并噻吡、噻啶、苯并噻啶、喹噻吡、1,5-二氮雜蔥、2,7-二氮雜萘、2,3-二氮雜萘、1,6-二氮雜萘、1,8-二氮雜萘、4,5-二氮雜萘、4,5,9,10-四氮雜萘、吡啶、啡啶、啡噻吡、啡噻吡、螢紅環 (fluorubin)、噻啶、氮雜吡啶、苯并吡啶、啡啶、1,2,3-三啶、1,2,4-三啶、苯并三啶、1,2,3-噻二啶、1,2,4-噻二啶、1,2,5-噻二啶、1,3,4-噻二啶、1,2,3-噻二啶、1,2,4-噻二啶、1,2,5-噻二啶、1,3,4-噻二啶、1,3,5-三吡、1,2,4-三吡、1,2,3-三吡、四啶、1,2,4,5-四吡、1,2,3,4-四吡、1,2,3,5-四吡、噻啶、噻啶、吡啶及苯并噻二啶或這些基團的組合。

為了本發明之目的，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，此外，個別H原子或CH<sub>2</sub>基團可經上述在基團之定義下的基團取代)，較佳地係用來意指基團甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、三級丁基、2-甲基丁基、正戊基、二級戊基、環戊基、新戊基、正己基、環己基、新己基、正庚基、環

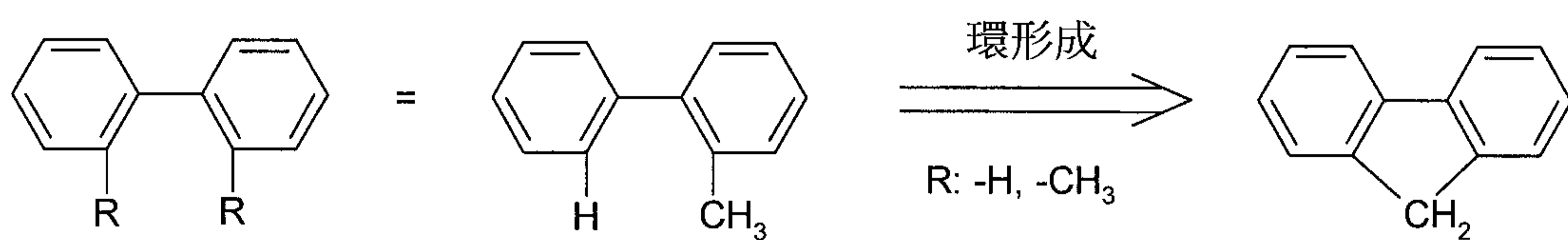


庚基、正辛基、環辛基、2-乙基己基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、庚烯基、環庚烯基、辛烯基、環辛烯基、乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基或辛炔基。具有1至40個C原子之烷氧基或烷硫基較佳地係用來意指甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、異丁氧基、二級丁氧基、三級丁氧基、正戊氧基、二級戊氧基、2-甲基丁氧基、正己氧基、環己氧基、正庚氧基、環庚氧基、正辛氧基、環辛氧基、2-乙基己氧基、五氟乙氧基、2,2,2-三氟乙氧基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、異丙硫基、正丁硫基、異丁硫基、二級丁硫基、三級丁硫基、正戊硫基、二級戊硫基、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。

為了本申請案之目的，二或更多個基團可彼此形成環之措辭(formulation)旨在用來意指尤其是兩個基團係藉由化學鍵彼此連接。這可藉由下列方案來說明：

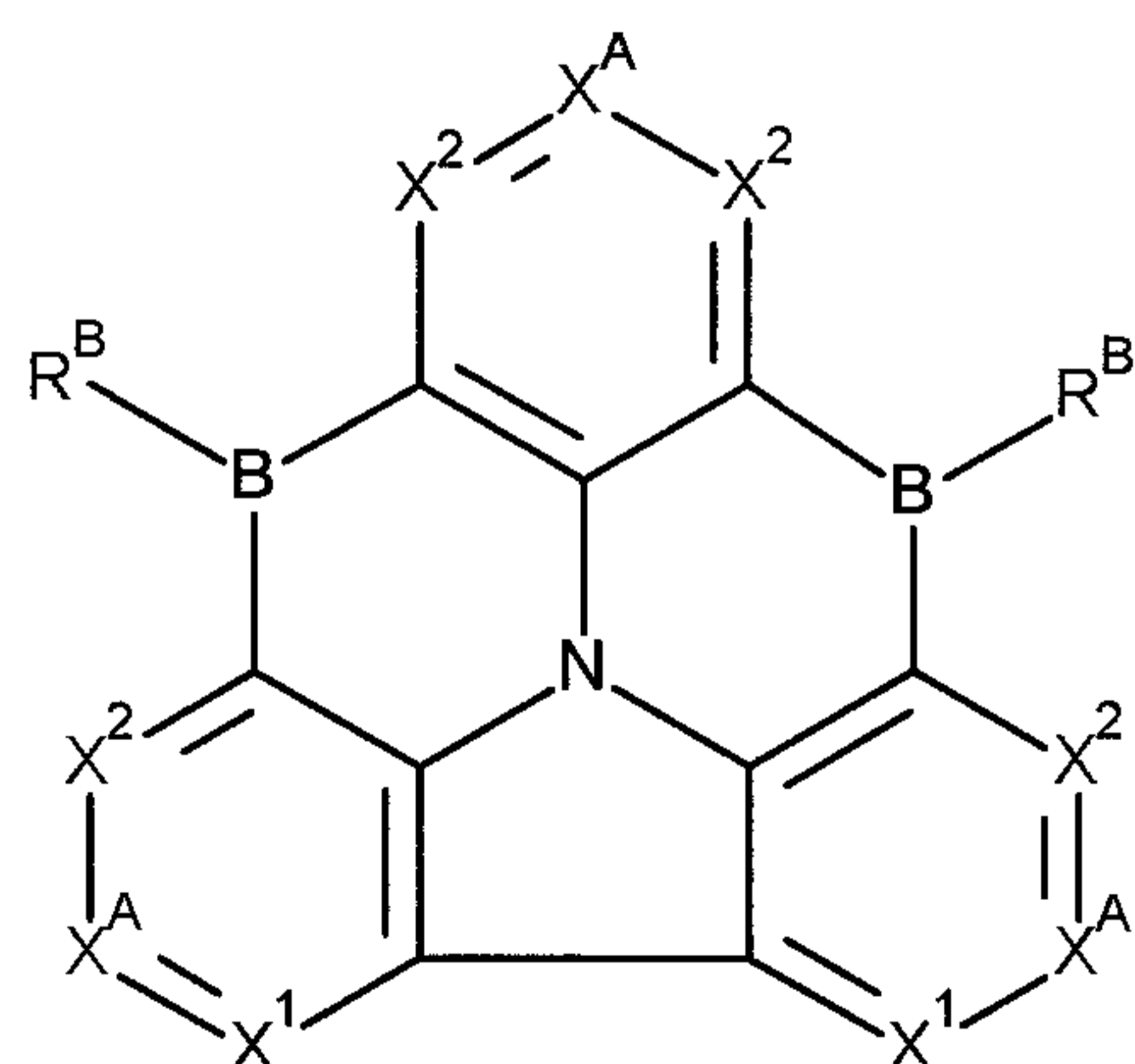


然而，此外，上述措辭亦旨在用來意指其中兩個基團之一者表示氫，則第二個基團鍵結至氫原子鍵結的位置而形成環的情況。這可藉由下列方案來說明：



較佳地，基團 Y 係單鍵或基團  $-C(R^Y)_2-$ ，更佳係單鍵。

根據較佳實施例，基團 Y 代表單鍵，並且式 (1) 之化合物對應於式 (1-Y1) 之化合物，



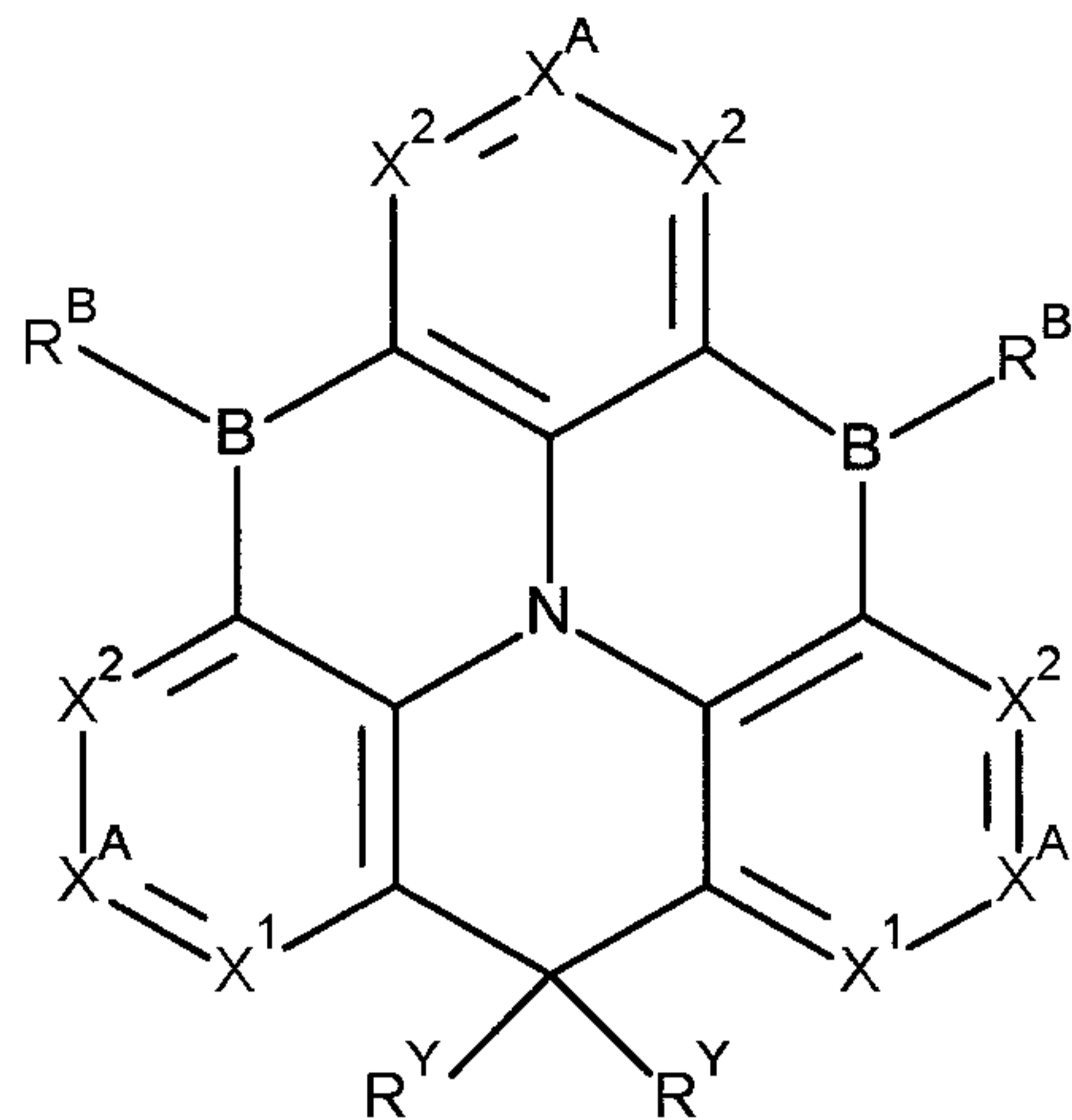
式 (1-Y1)

其中該等符號具有如上之相同含意。

根據另一較佳實施例，基團 Y 代表基團  $-C(R^Y)_2-$ ，並



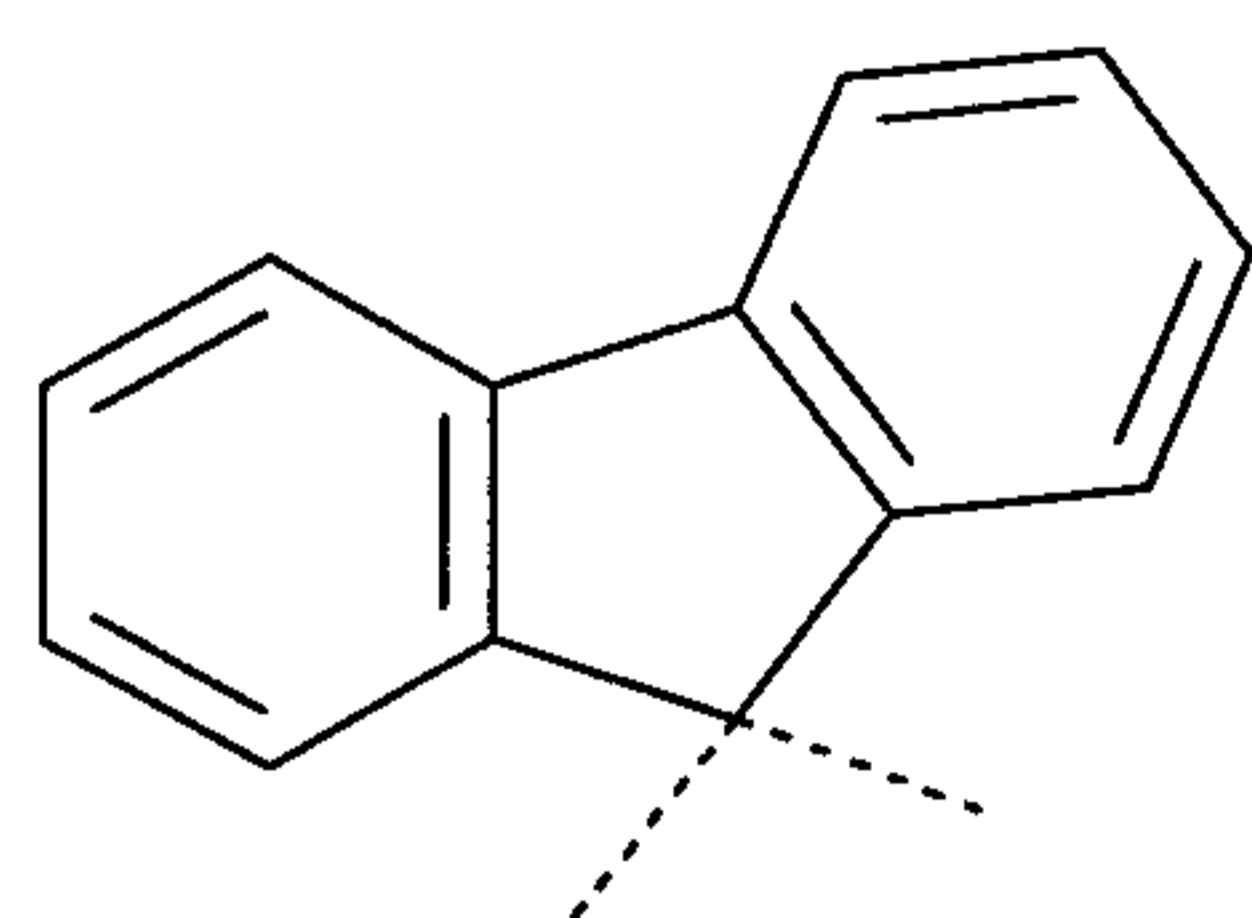
且式(1)之化合物對應於式(1-Y2)之化合物，



式 (1-Y2)

其中該等符號具有如上之相同含意。

較佳地，基團  $R^Y$  在每次出現時相同或不同地代表 H、D、具有 1 至 20 個、較佳係 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、或具有 2 至 20 個、較佳係 2 至 10 個碳原子之烯基或炔基、或具有 3 至 20 個、較佳係 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基(其各者可經一或多個基團  $R$  取代)、或具有 5 至 60 個、較佳係 5 至 40 個、更佳係 5 至 30 個、非常佳係 5 至 18 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基團  $R$  取代)；其中兩個相鄰取代基  $R^Y$  可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團  $R$  取代)。根據較佳實施例，兩個相鄰取代基  $R^Y$  可形成式  $(R^Y-1)$  之環，

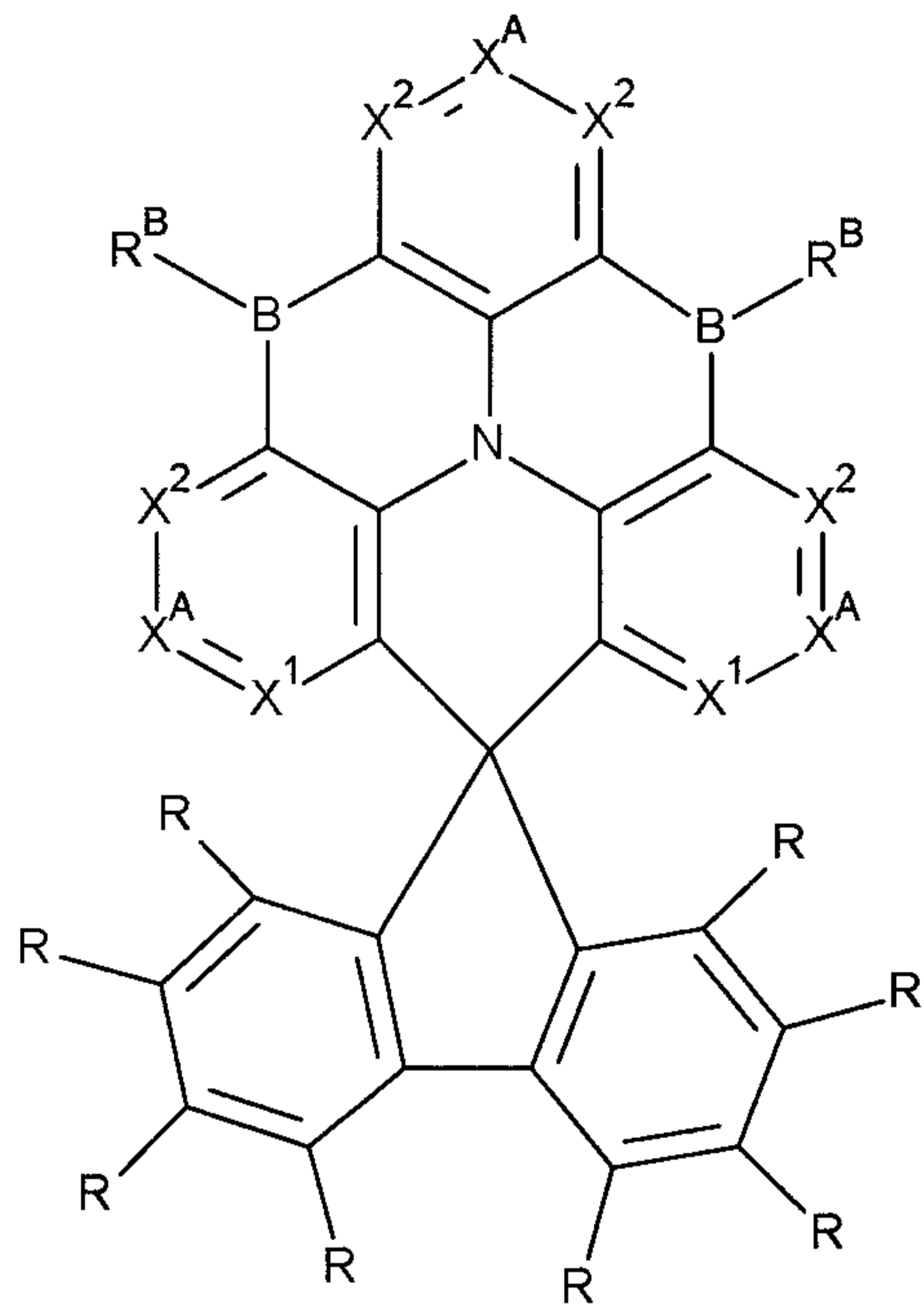


(RY-1)



其中式(R<sup>Y</sup>-1)之基團可經一或多個基團R取代，且其中虛線鍵表示至式(1)結構之鍵結。

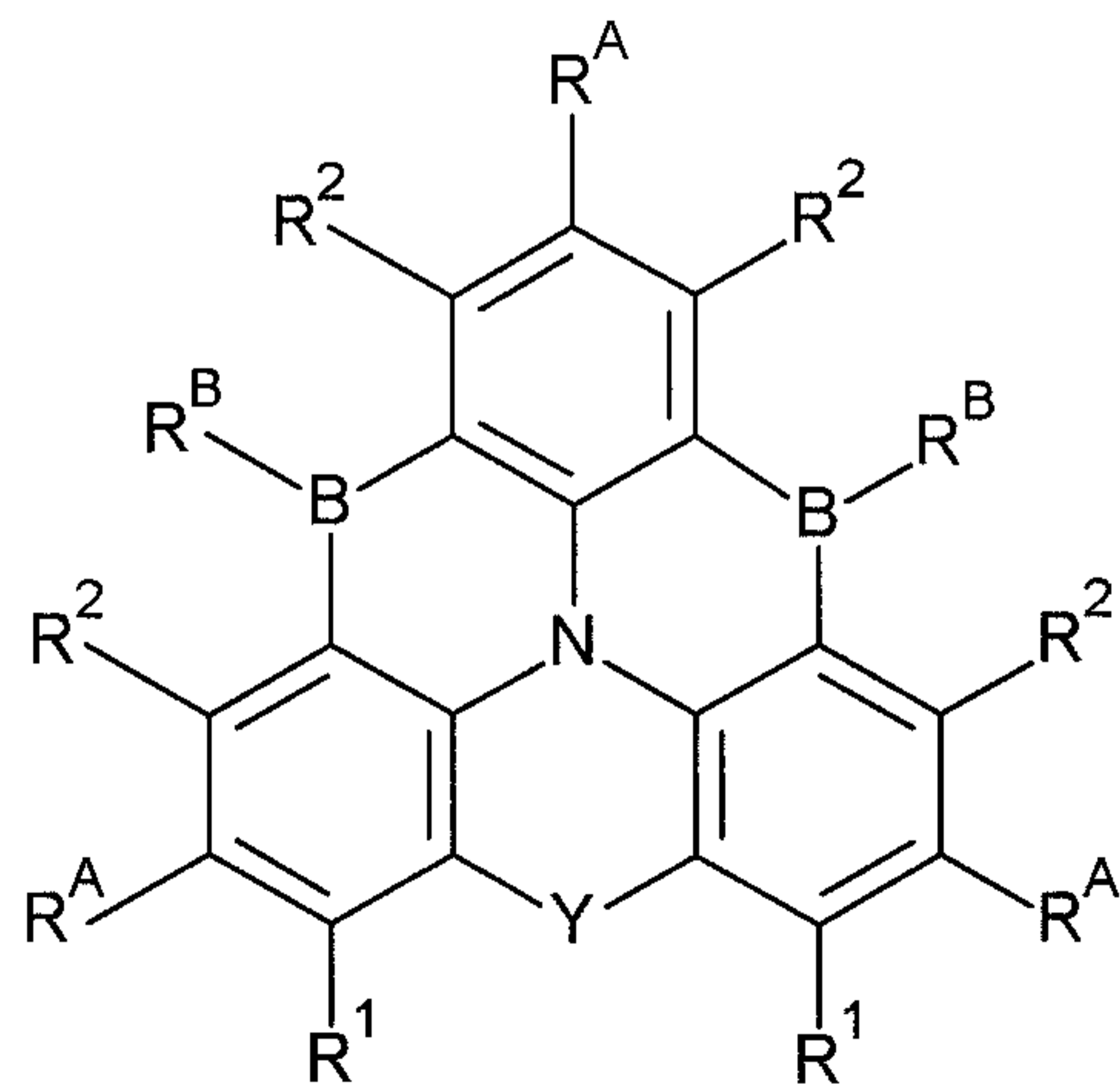
如果兩個相鄰取代基R<sup>Y</sup>形成式(R<sup>Y</sup>-1)之環，則式(1)之化合物對應於式(1-Y3)之化合物，



式(1-Y3)

其中該等符號具有如上之相同含意。

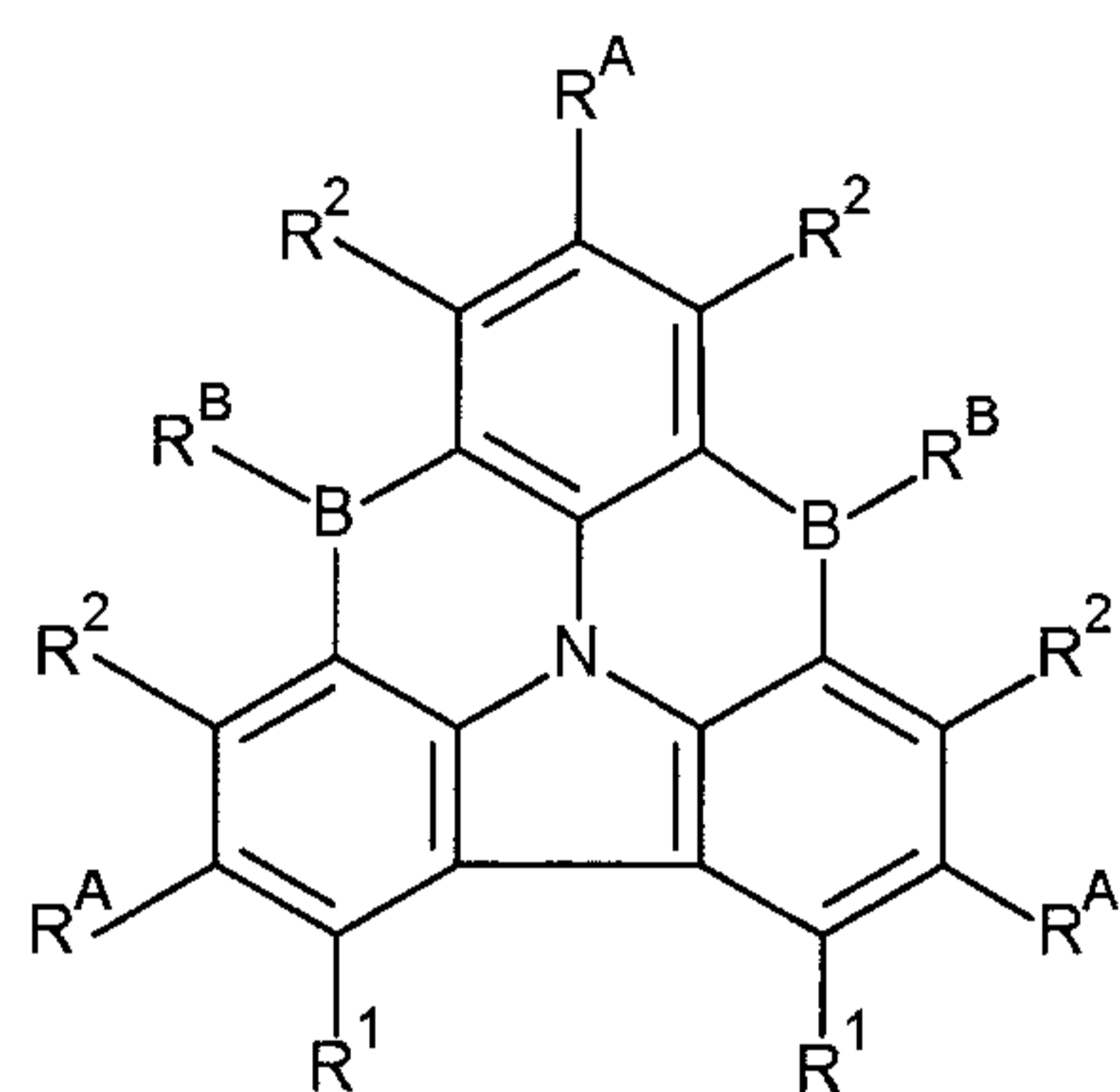
根據較佳實施例，式(1)之化合物係選自式(2)之化合物，



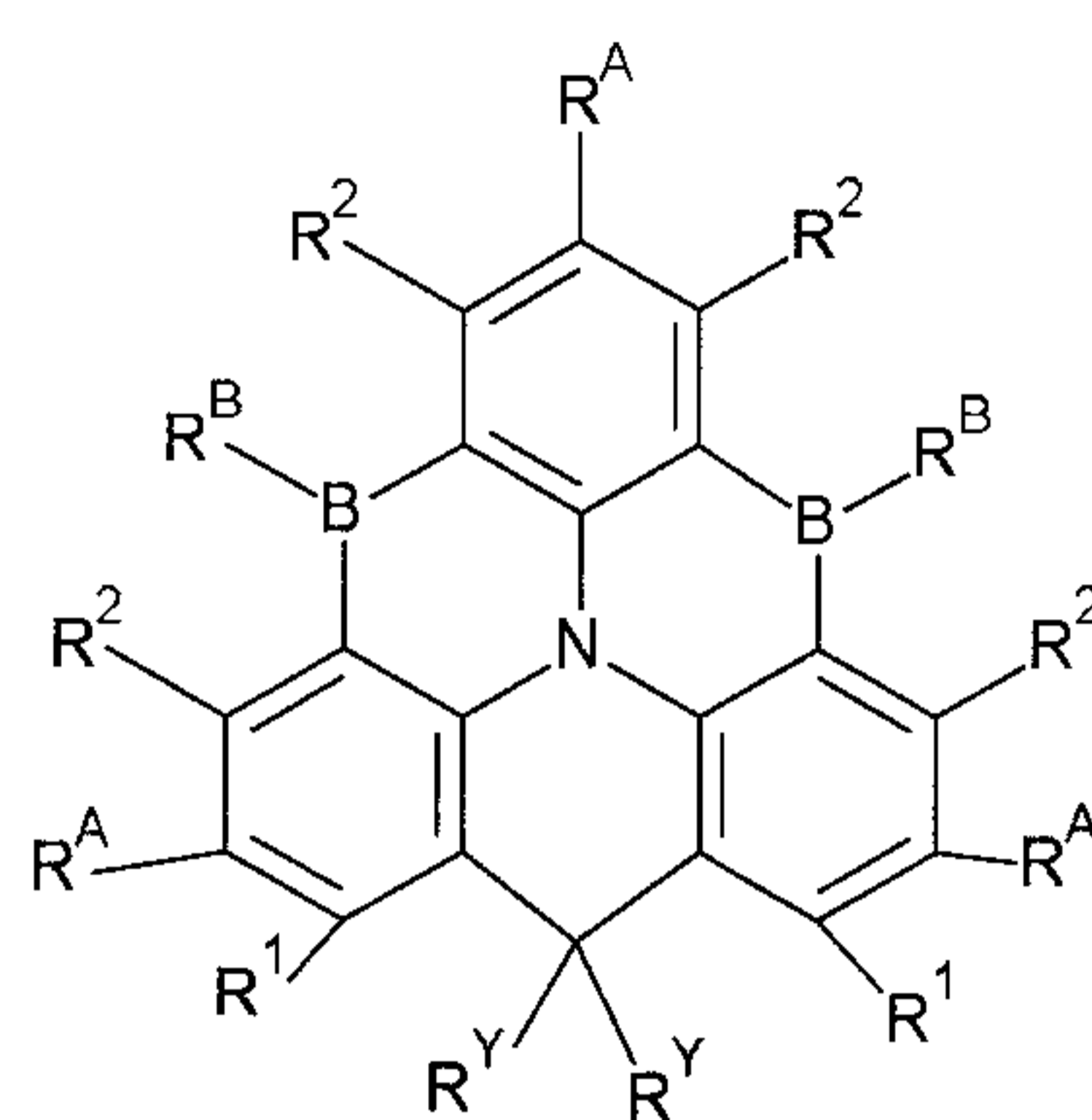
式(2)

其中該等符號具有如上之相同含意。

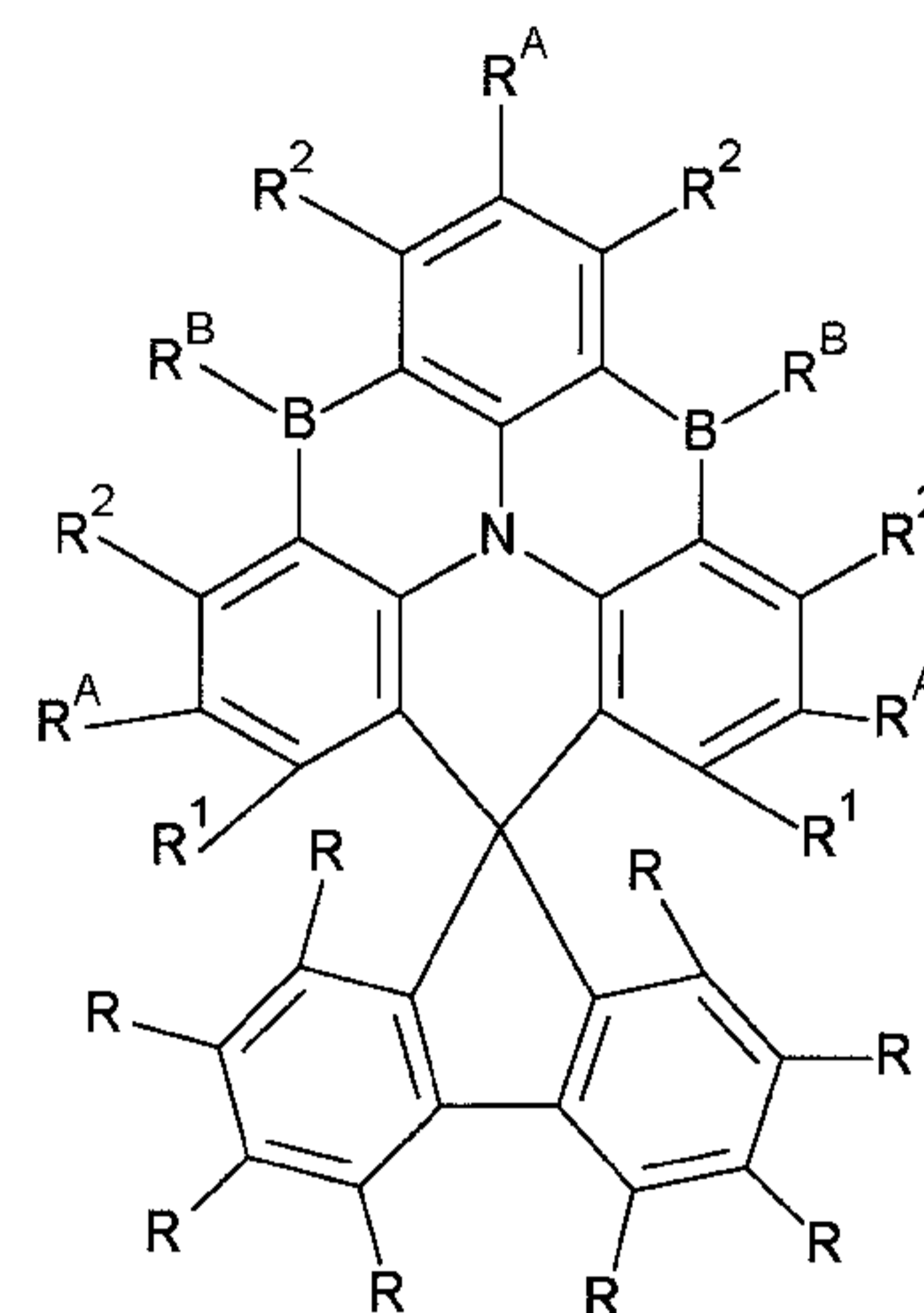
較佳地，式(2)之化合物對應於式(2-Y1)、(2-Y2)及(2-Y3)之化合物，



式(2-Y1)



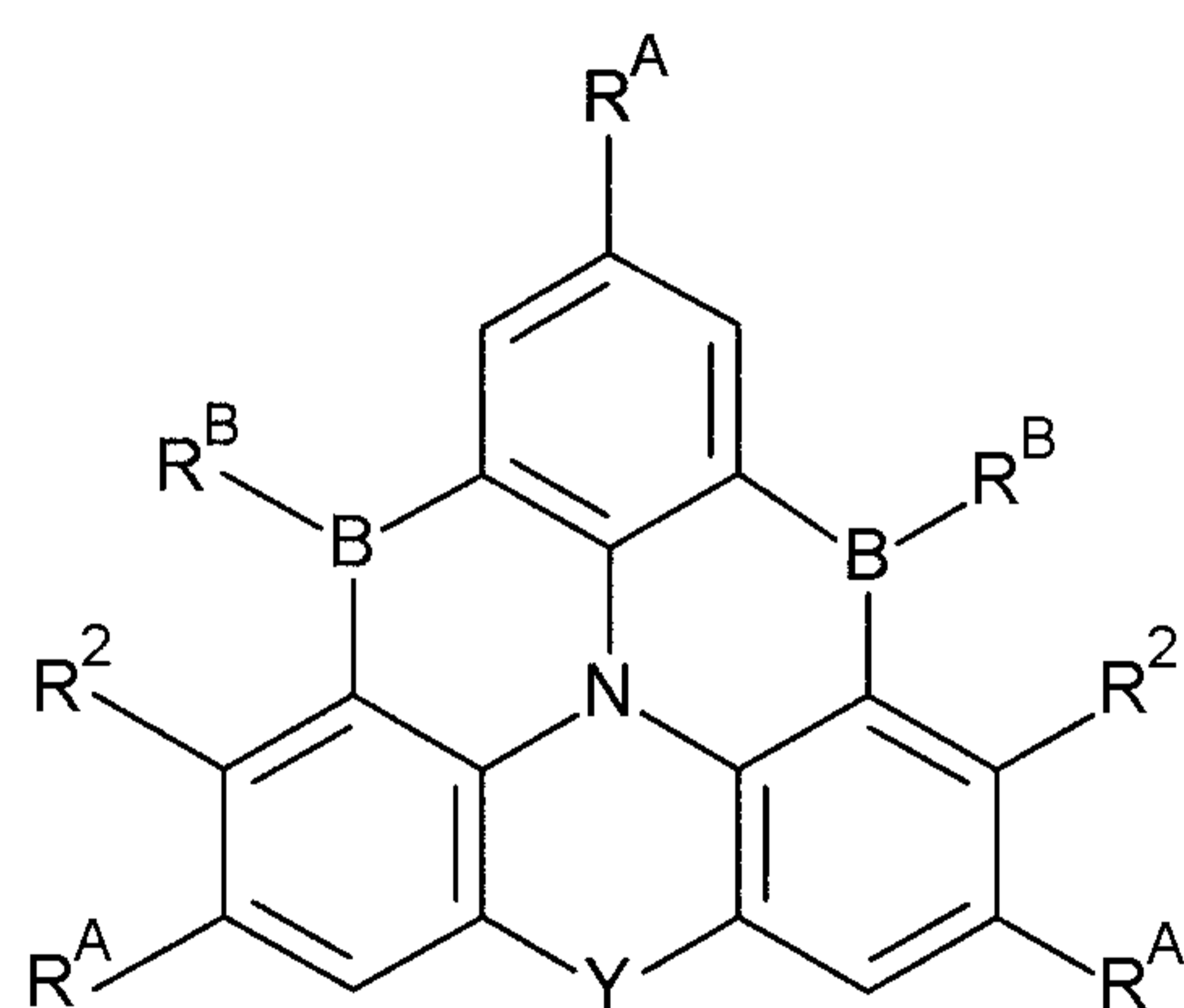
式(2-Y2)



式(2-Y3)

其中該等符號具有如上之相同含意。

根據非常佳的實施例，式(1)之化合物係選自式(3)之化合物，

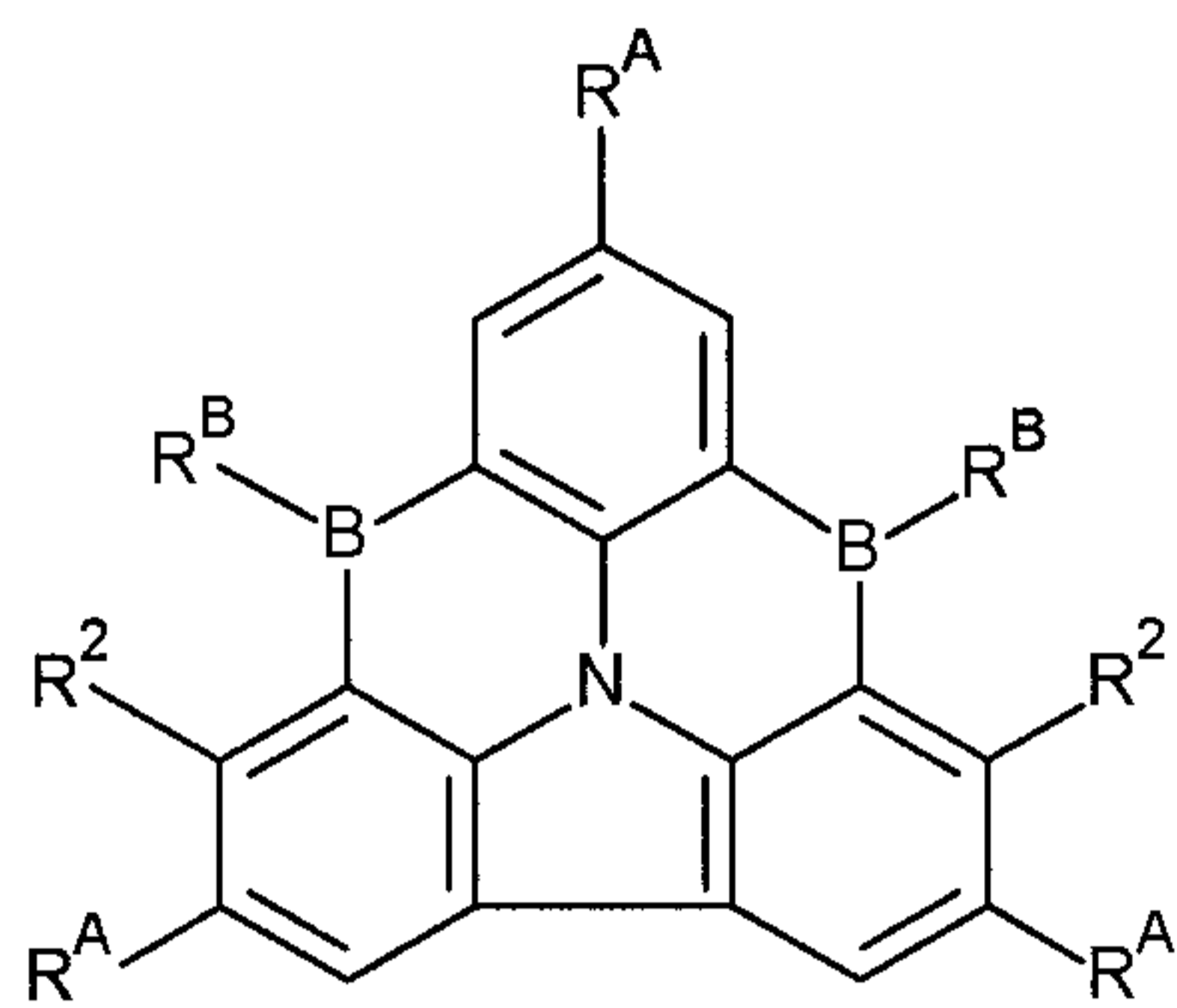


式(3)

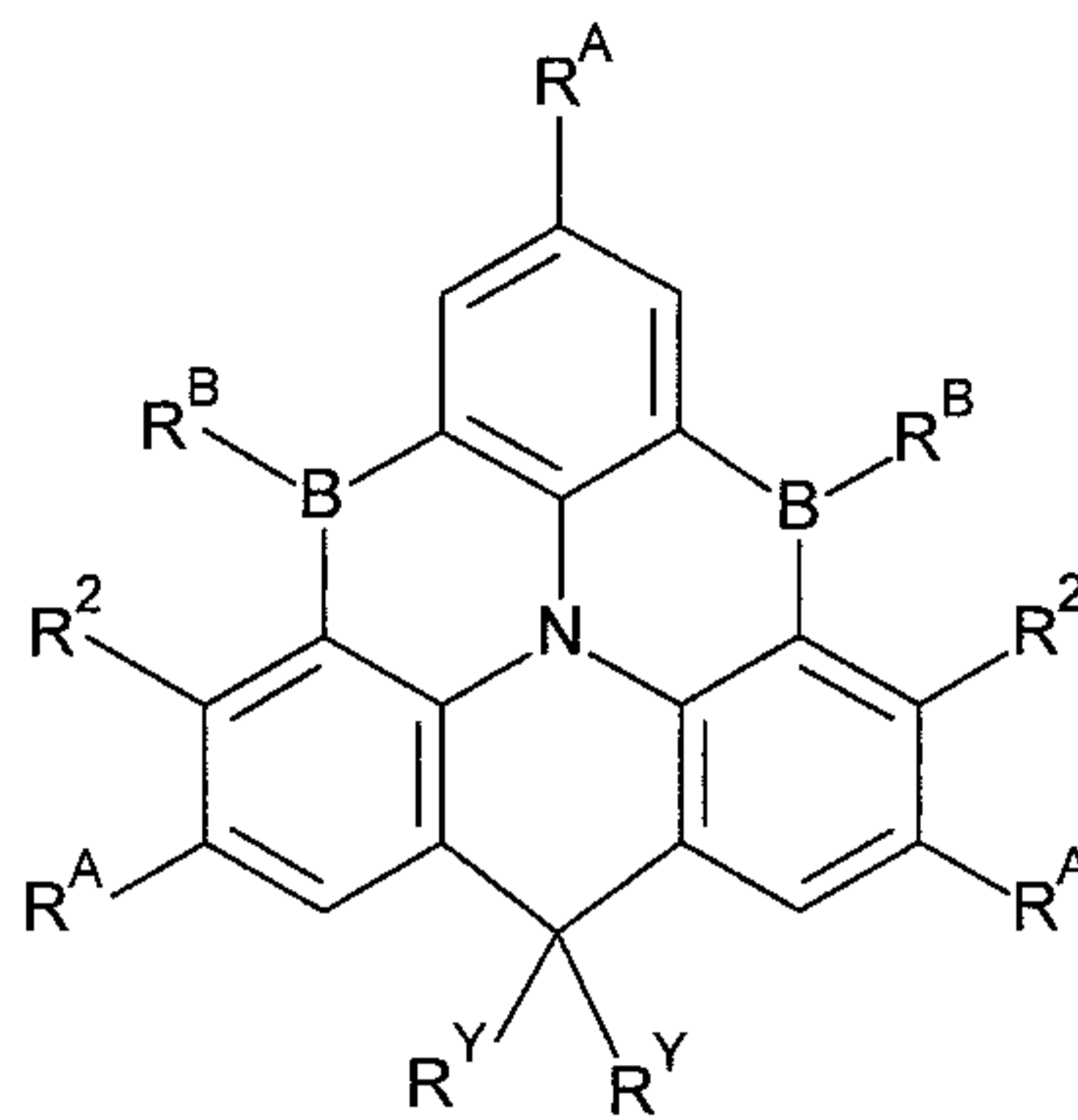
其中該等符號具有如上之相同含意。

較佳地，式(3)之化合物對應於式(3-Y1)、(3-Y2)及(3-Y3)之化合物，

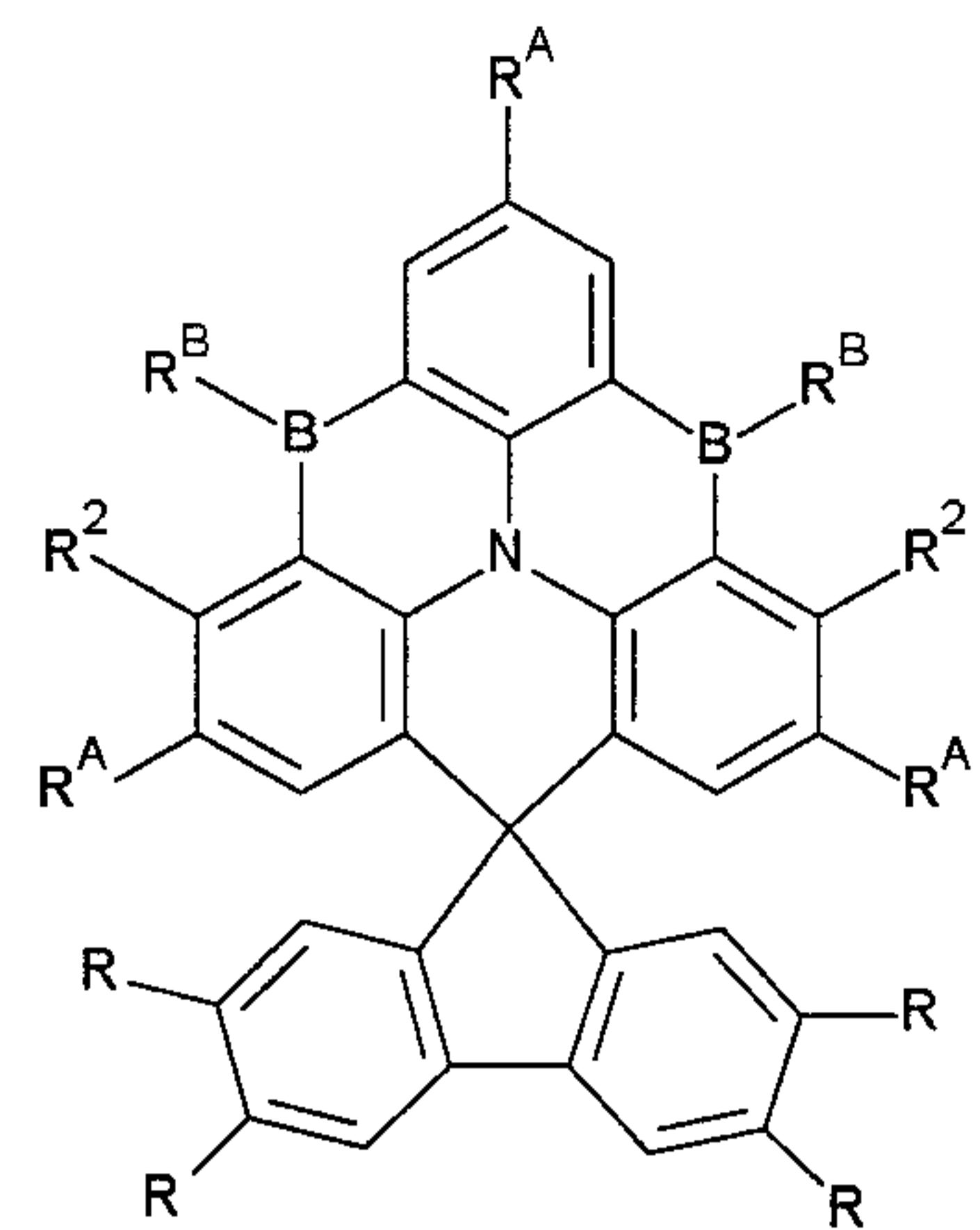




式 (3-Y1)



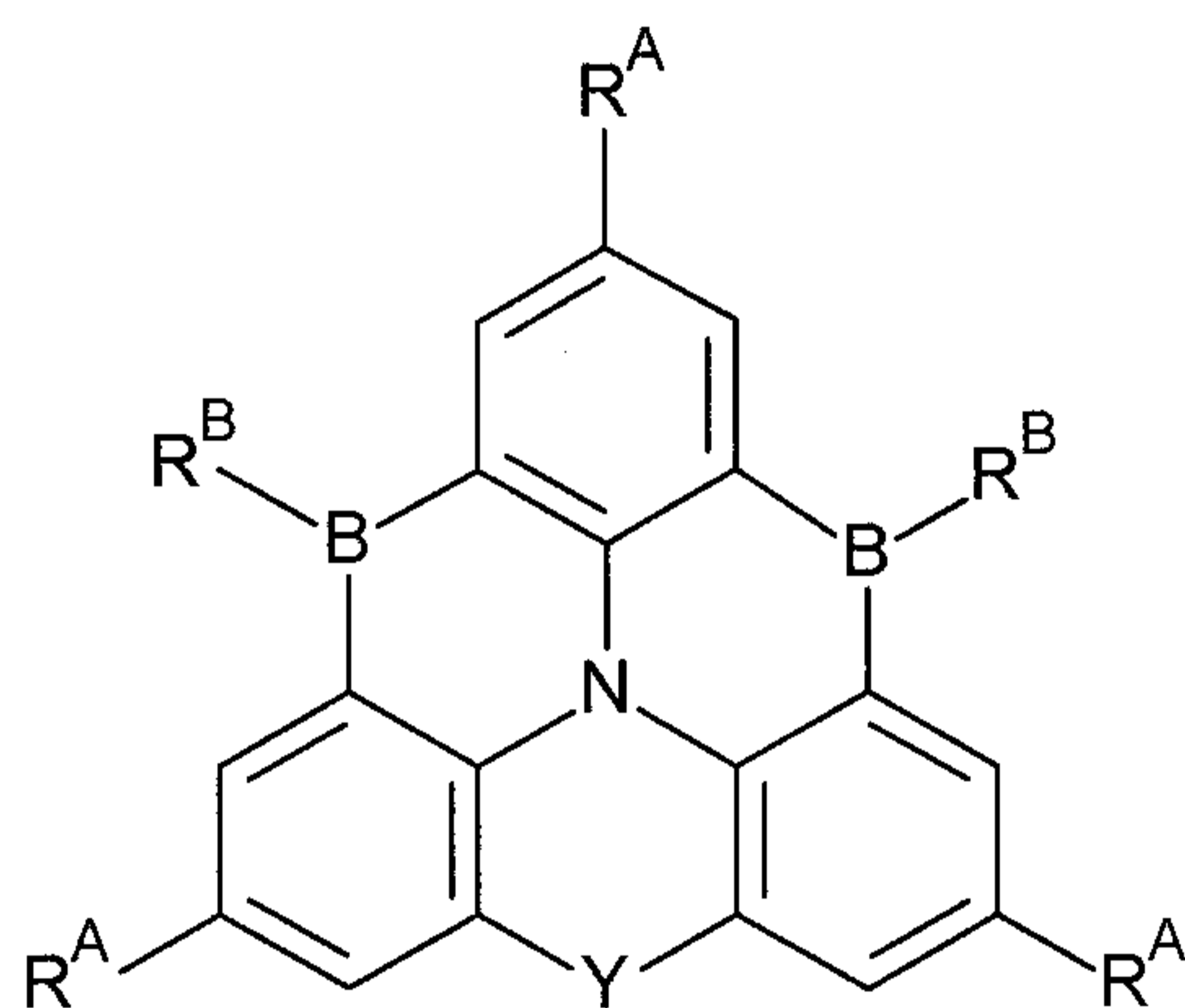
式 (3-Y2)



式 (3-Y3)

其中該等符號具有如上之相同含意。

根據特佳的實施例，式(1)之化合物係選自式(4)之化合物，

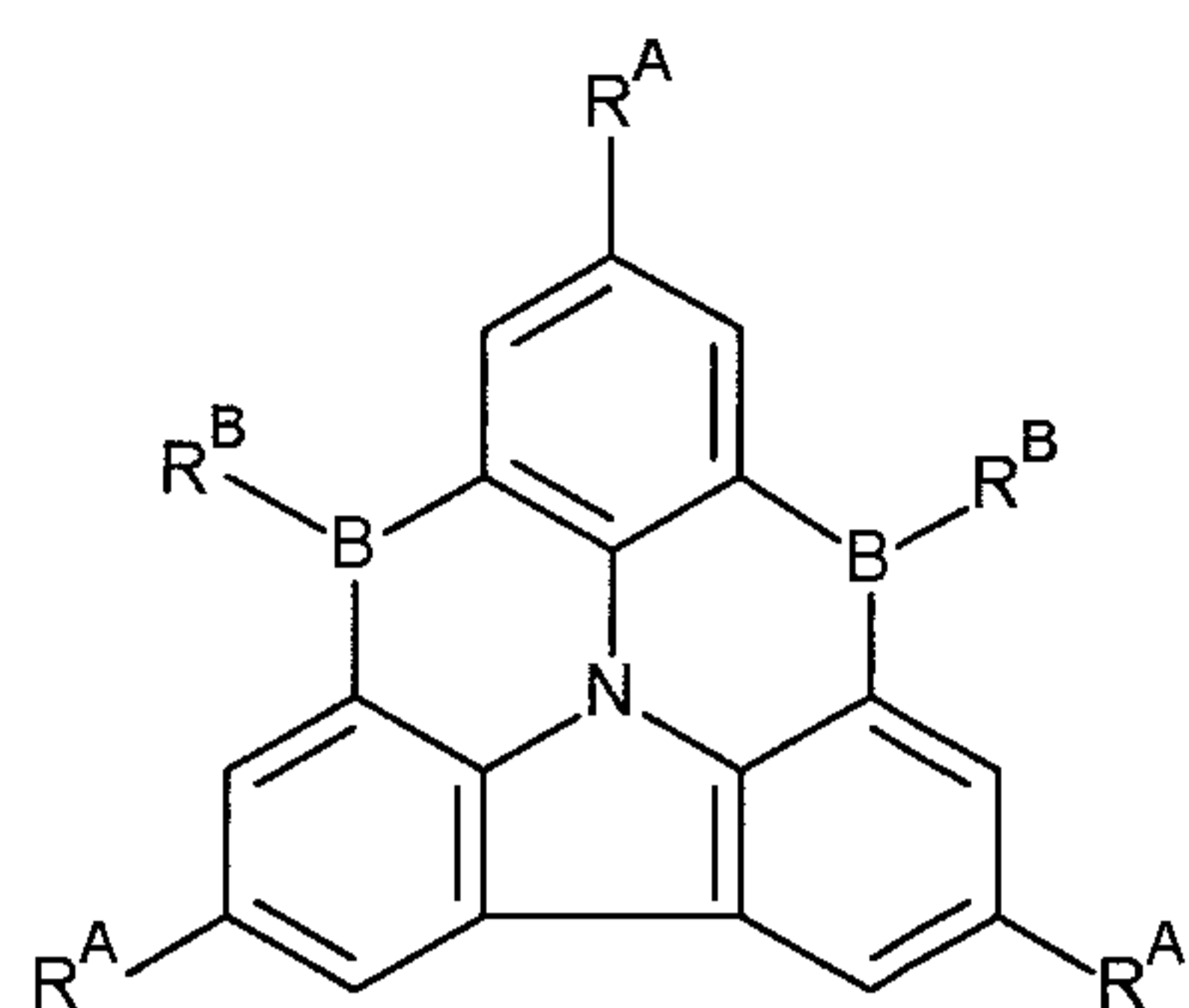


式 (4)

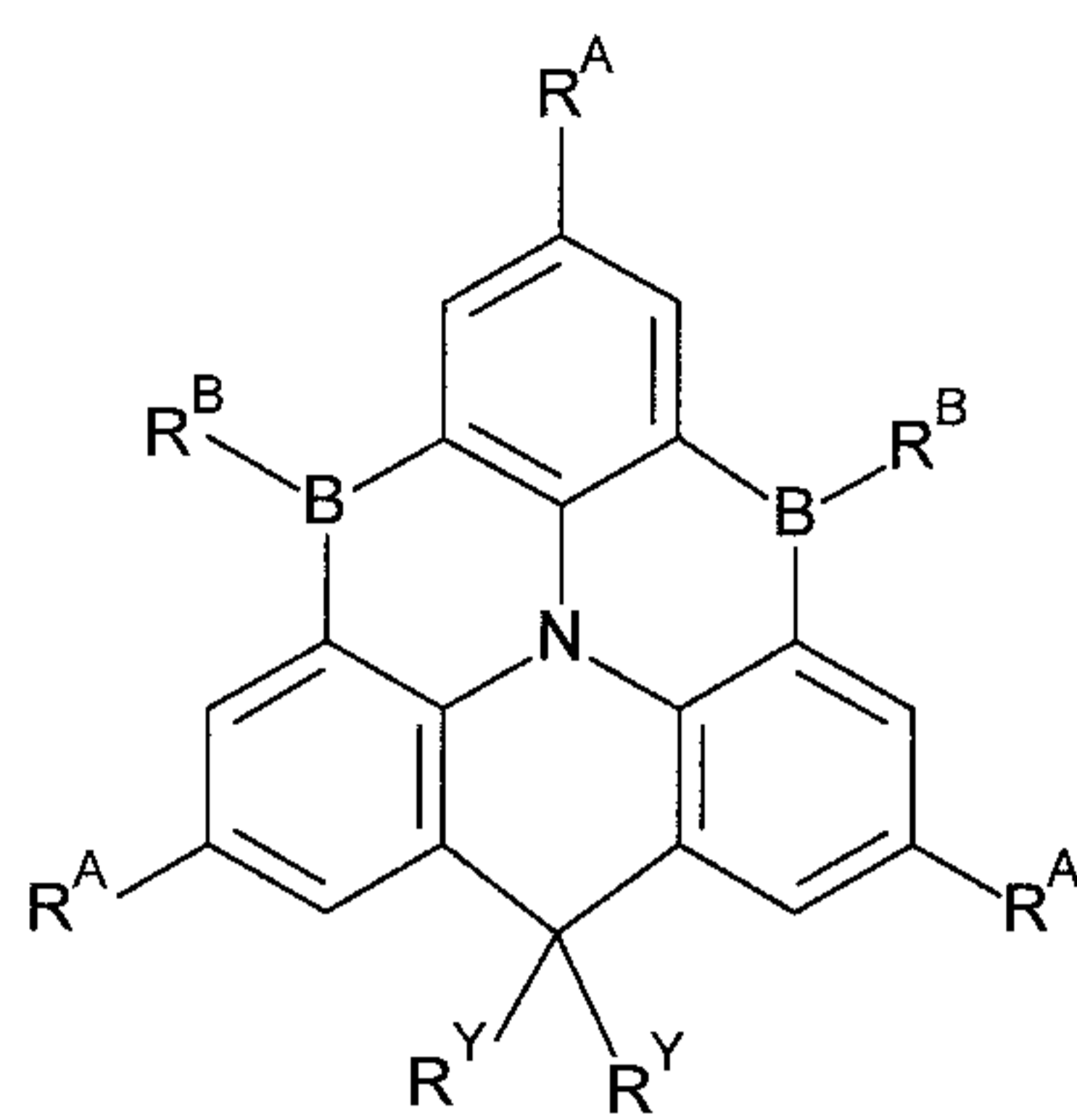
其中該等符號及標號具有如上之相同含意。

較佳地，式(4)之化合物對應於式(4-Y1)、(4-Y2)及(4-Y3)之化合物，

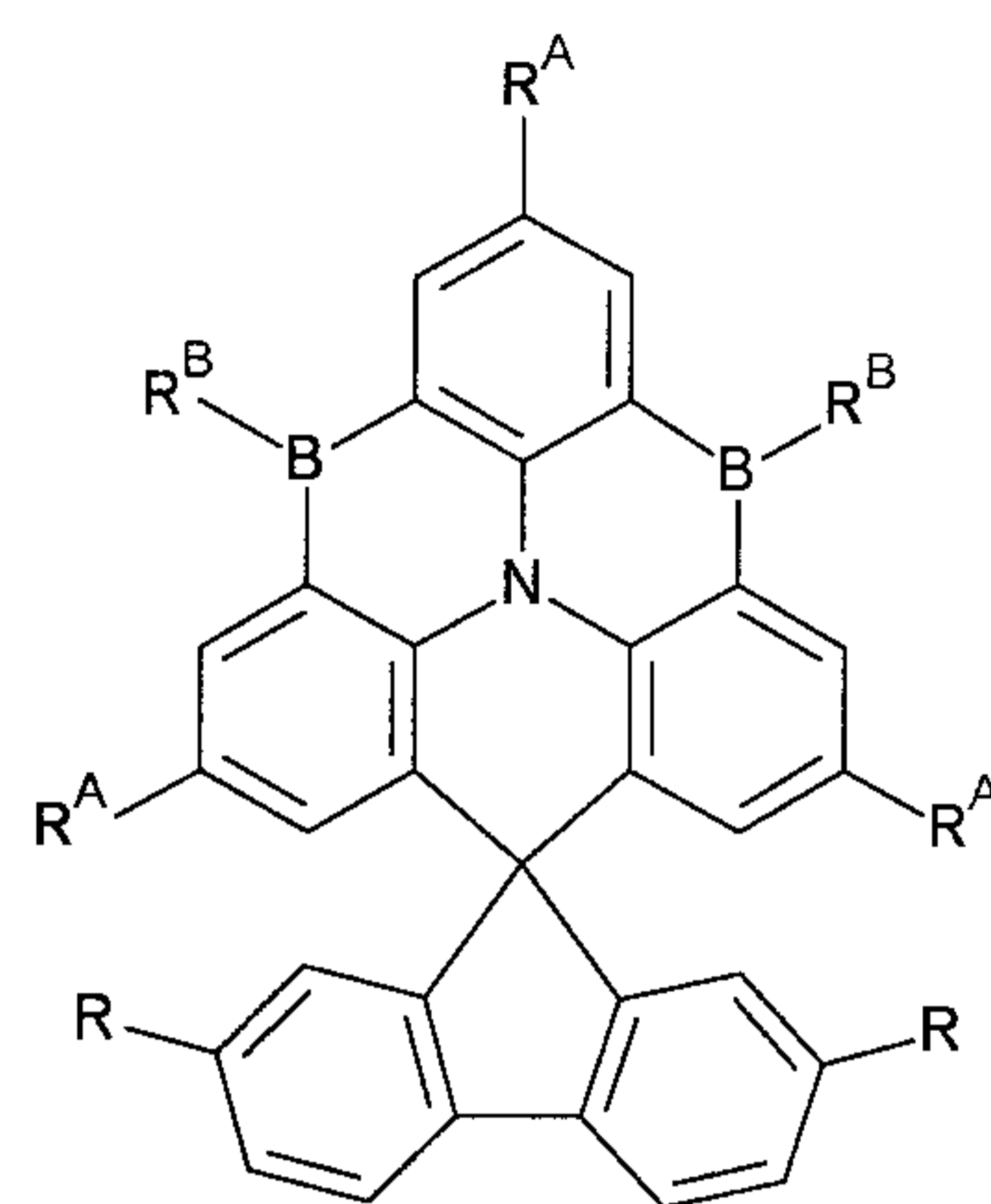




式 (4-Y1)



式 (4-Y2)



式 (4-Y3)

其中該等符號具有如上之相同含意。

較佳地，基團  $R^B$  在每次出現時相同或不同地代表具有 1 至 40 個、較佳係 1 至 20 個、更佳係 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 2 至 40 個、較佳係 2 至 20 個、更佳地係 1 至 10 個碳原子之烯基或炔基、或具有 3 至 40 個、較佳係 3 至 20 個、更佳地係 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團  $R$  取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $RC=CR$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$  或  $CONR$  置換，且其中一或多個  $H$  原子可經  $D$ 、 $F$ 、 $Cl$ 、 $Br$ 、 $I$ 、 $CN$  或  $NO_2$  置換)、或具有 5 至 60 個、較佳係 5 至 40 個、更佳地係 5 至 30 個、非常佳係 5 至 18 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基團  $R$  取代)、或具有 5 至 60 個、較佳係 5 至 40 個、更佳地係 5 至 30 個、非常佳係 5 至 18 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個  $R$  基團取代)。

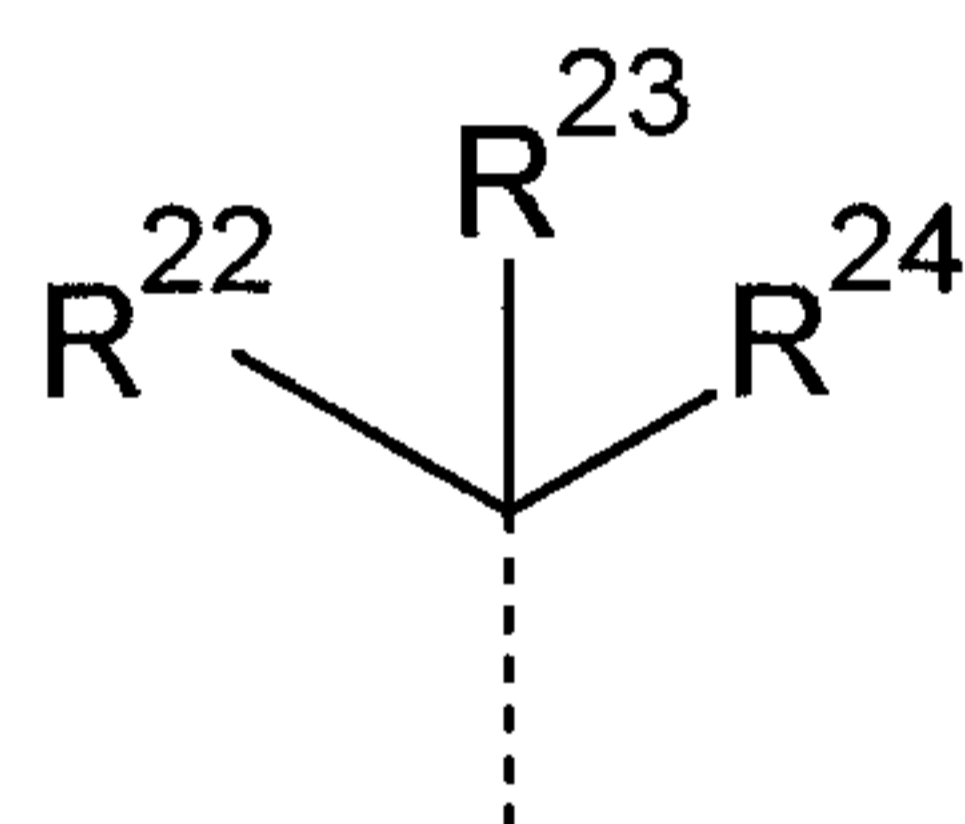
更佳地，基團  $R^B$  在每次出現時相同或不同地代表具有



1至20個、較佳係1至10個碳原子之直鏈烷基或烷氧基、或具有2至20個、較佳係2至10個碳原子之烯基或炔基、或具有3至20個、較佳係3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基(其各者可經一或多個基團R取代，其中一或多個H原子可經D、F、Cl或CN置換)、或具有5至60個、較佳係5至40個、更佳係5至30個、非常佳係5至18個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團R取代)、或具有5至60個、較佳係5至40個、更佳係5至30個、非常佳係5至18個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個R基團取代)。

非常佳地，基團R<sup>B</sup>在每次出現時相同或不同地選自：

由下列通式(RS-a)所表示之支鏈或環狀烷基：



(RS-a)

其中

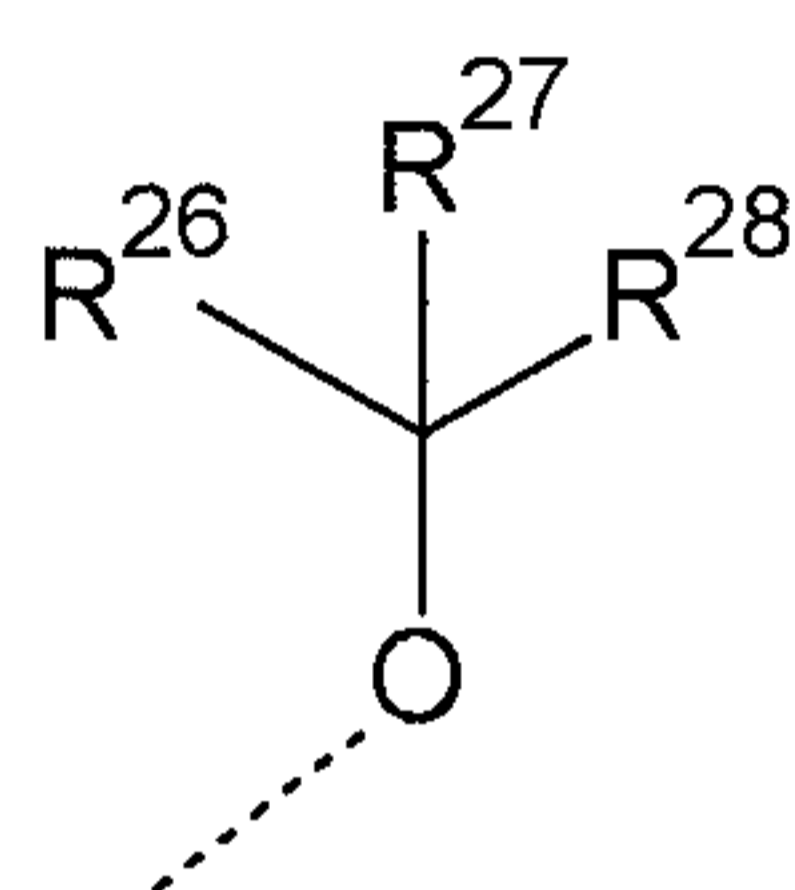
R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基，其中上述基團可各自經一或多個基團R<sup>25</sup>取代，且其中基團R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>中之二者或所有基團R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>可連接而形成(多)環狀烷基(其可經一或多個基團R<sup>25</sup>取代)；



$R^{25}$ 在每次出現時相同或不同地選自具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基；

其先決條件為在每次出現時，基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 及 $R^{24}$ 中之至少一者係非H，其先決條件為在每次出現時，所有基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 及 $R^{24}$ 一起具有至少4個碳原子，以及先決條件為在每次出現時，若基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 中之二者係H，則餘留的基團係非直鏈；

或由下列通式(RS-b)所表示之支鏈或環狀烷氧基：



(RS-b)

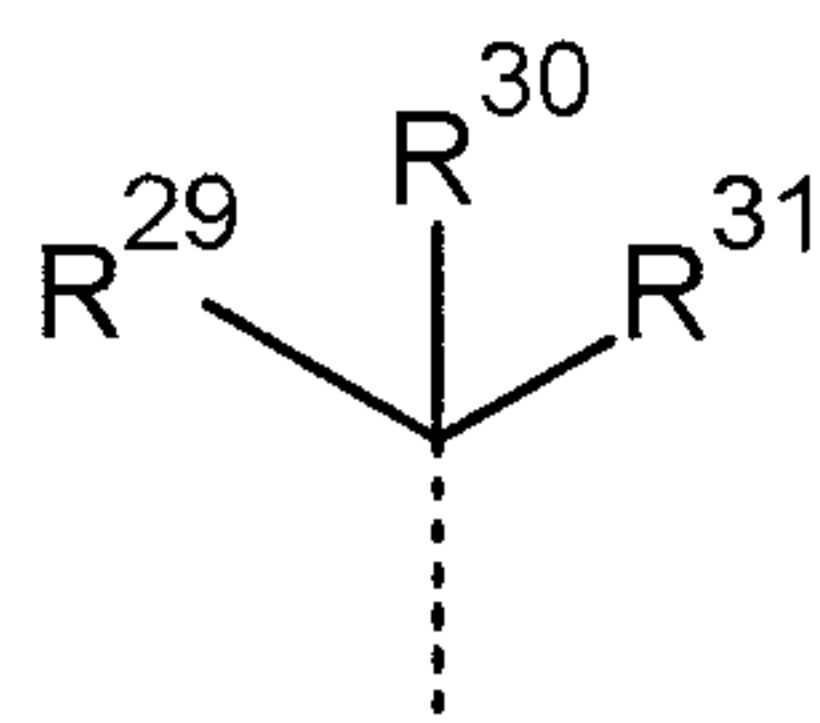
其中

$R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基，其中上述基團可各自經一或多個如上文所定義之基團 $R^{25}$ 取代，且其中基團 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ 中之二者或所有基團 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ 可連接而形成(多)環狀烷基(其可經一或多個如上文所定義之基團 $R^{25}$ 取代)；

其先決條件為在每次出現時，基團 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 及 $R^{28}$ 中僅一者可係H；

或由下列通式(RS-c)所表示之芳烷基：





(RS-c)

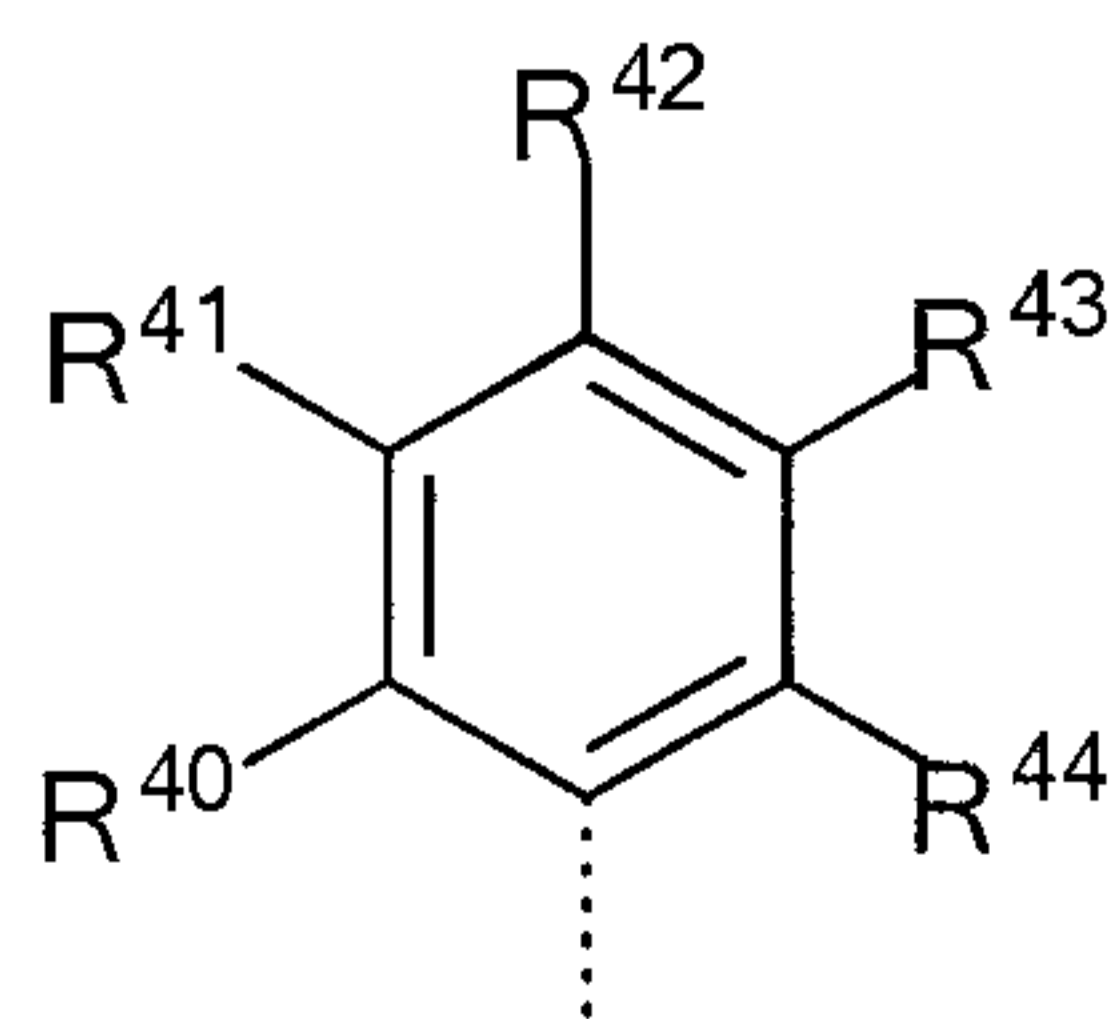
其中

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)，且其中二或所有基團 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$ 可連接而形成(多)環狀烷基或芳族環系統(其各者可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)；

$R^{32}$ 在每次出現時相同或不同地選自具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基、或具有6至24個芳族環原子之芳族環系統；

其先決條件為在每次出現時，基團 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 及 $R^{31}$ 中之至少一者係非H，並且在每次出現時，基團 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 及 $R^{31}$ 中之至少一者係或含有具有至少6個芳族環原子之芳族環系統；

或由下列通式(RS-d)所表示之芳族環系統：



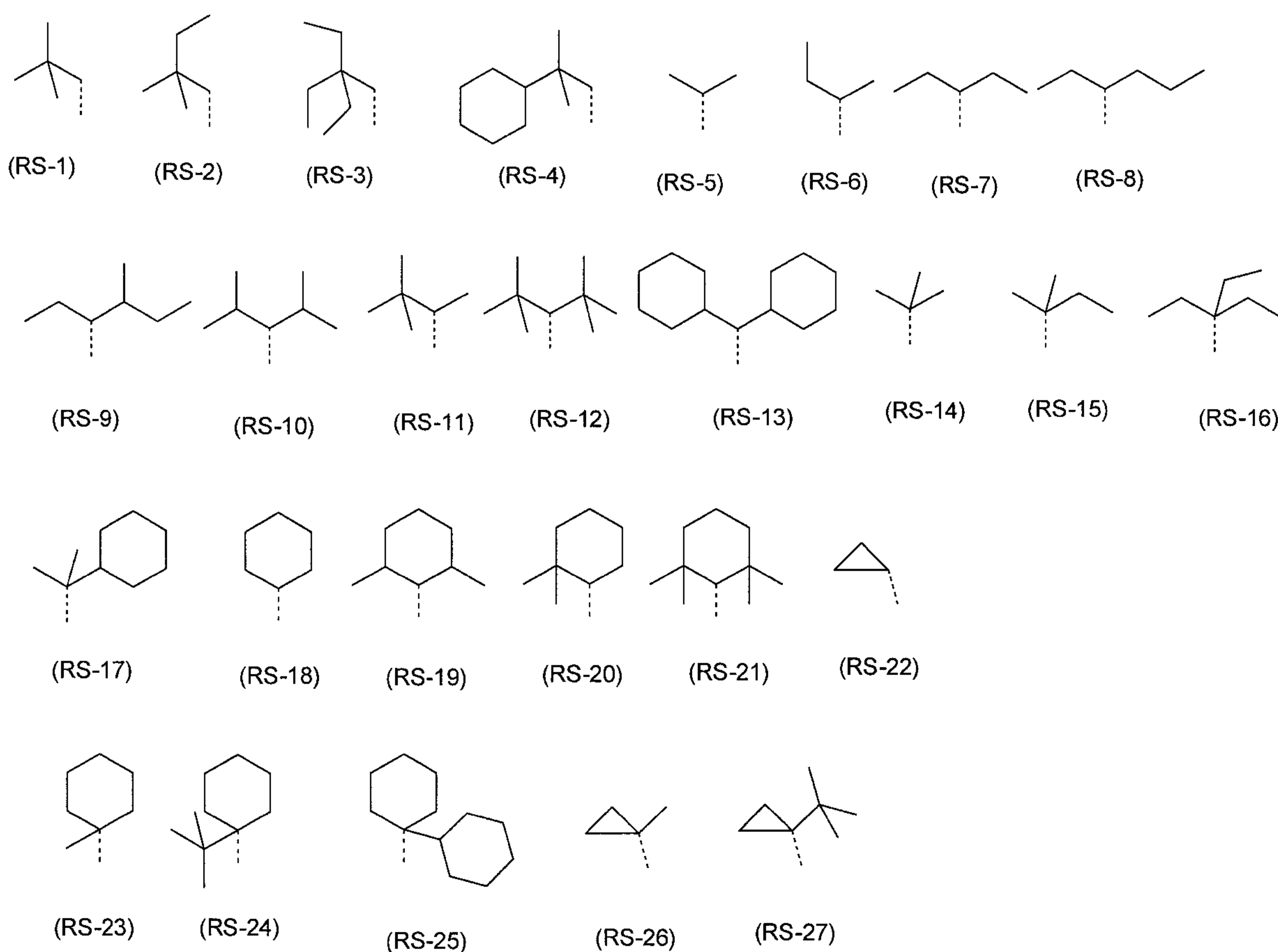
(RS-d)



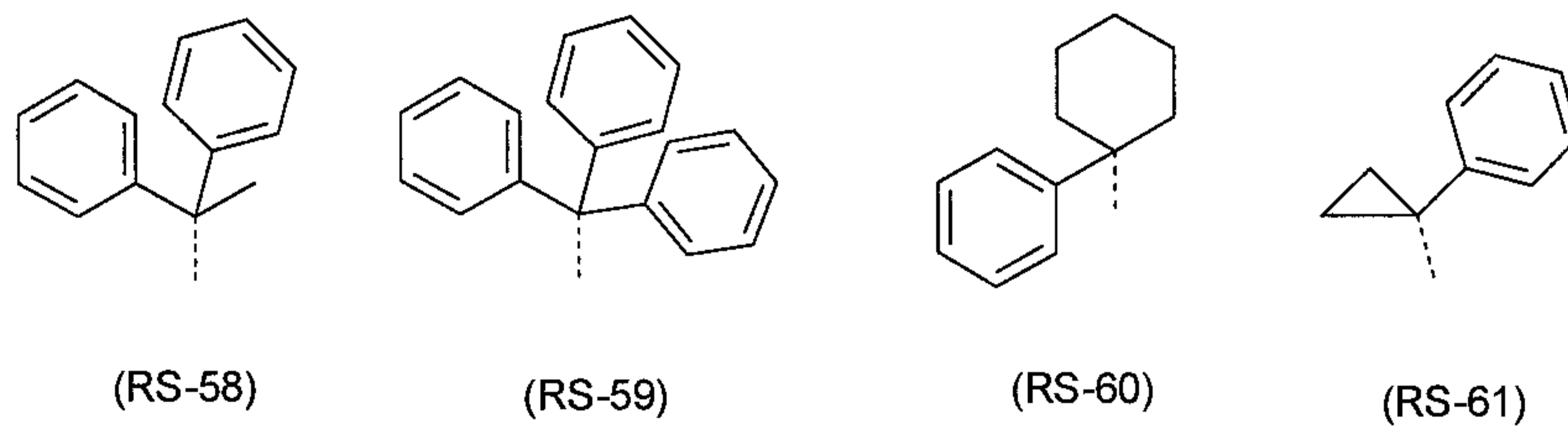
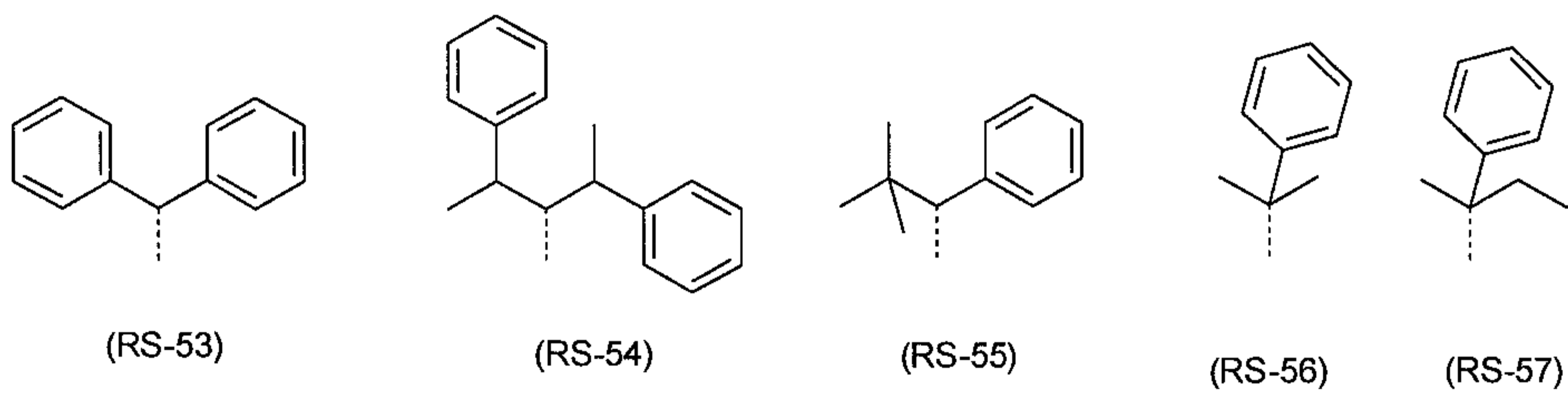
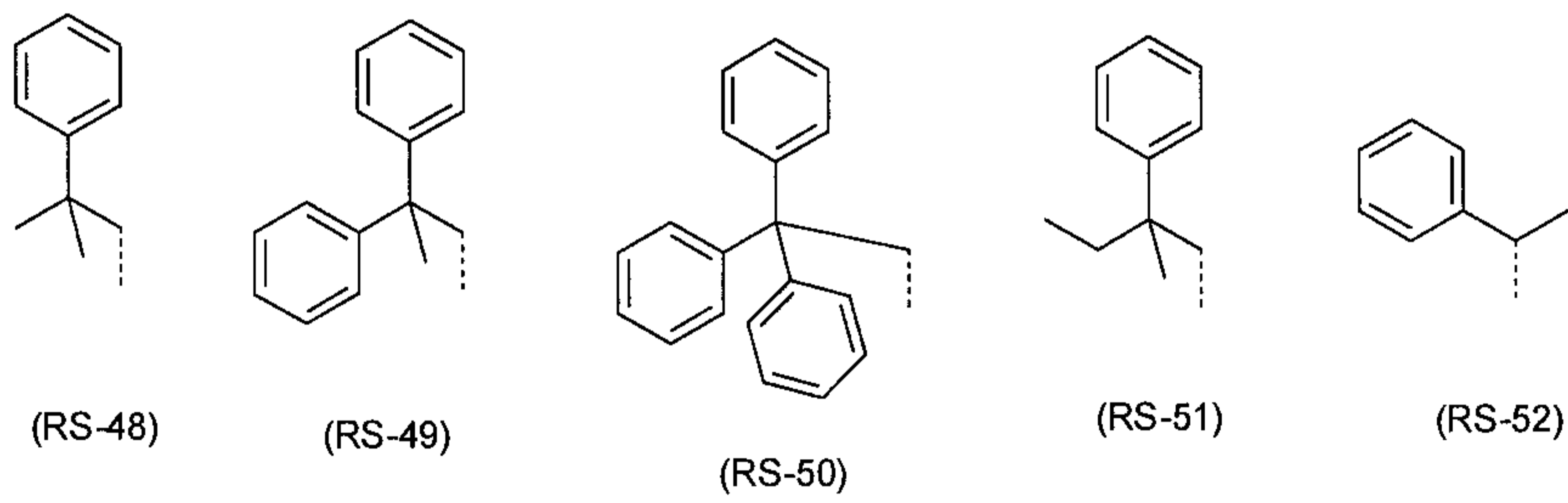
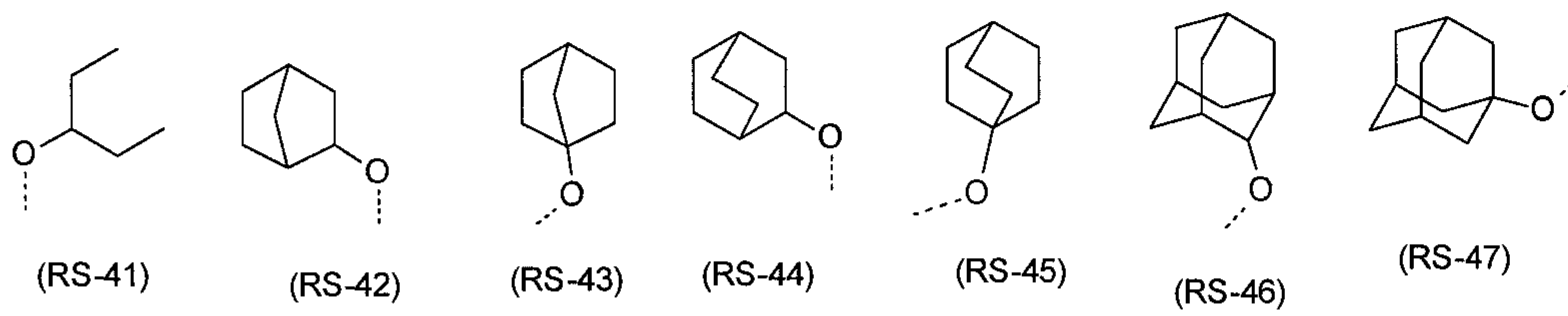
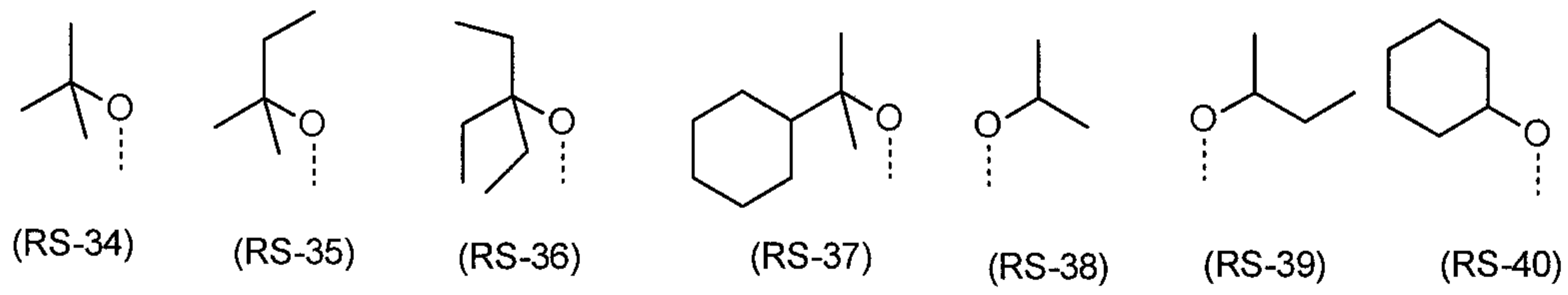
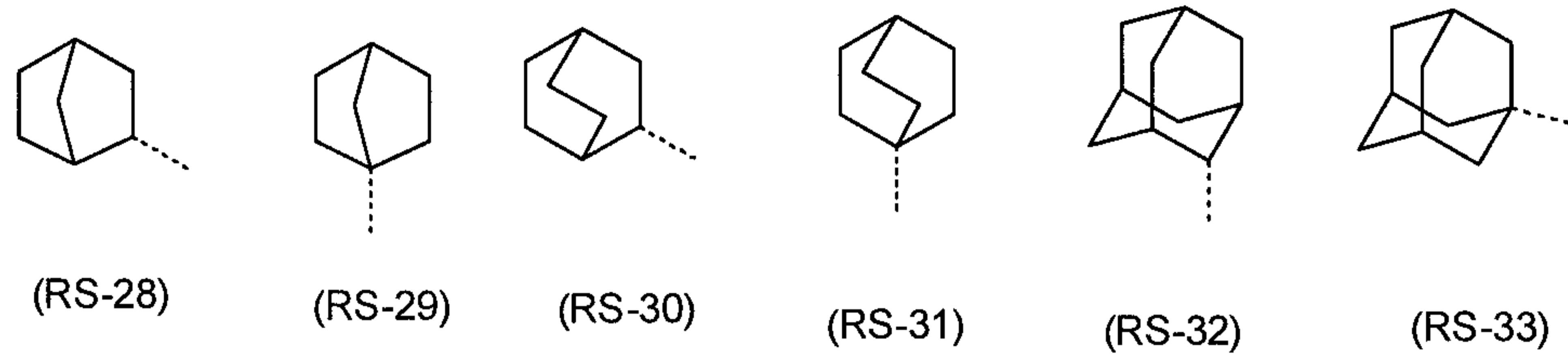
其中

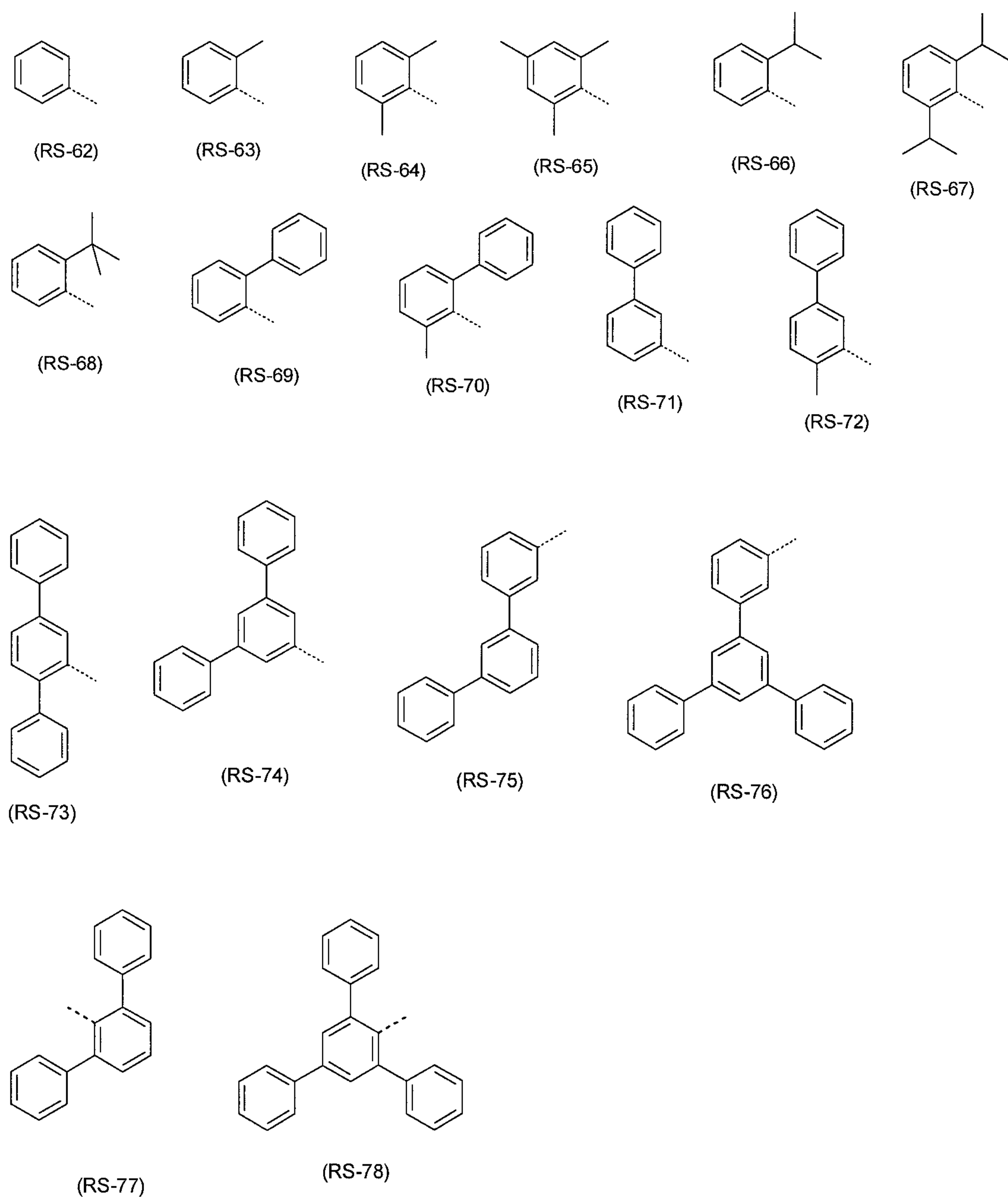
$R^{40}$ 至 $R^{44}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代),且其中二或更多個基團 $R^{40}$ 至 $R^{44}$ 可連接而形成(多)環狀烷基或芳族環系統(其各者可經一或多個如上文所定義之基團 $R^{32}$ 取代)。

式(RS-a)至(RS-d)之合適基團之實例係基團(RS-1)至(RS-78):









其中虛線鍵表示此等基團至式(1)結構之鍵結，且其中式(RS-1)至(RS-47)之基團可進一步經至少一個如上文所定義之基團 $R^{25}$ 取代，而基團(RS-48)至(RS-78)可進一步經至少一個如上文所定義之基團 $R^{32}$ 取代。

式(RS-1)至(RS-78)之基團中，基團(RS-62)、(RS-64)、(RS-65)、(RS-67)、(RS-70)、(RS-77)及(RS-78)係較



佳的。

較佳地， $R^1$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、CN、 $N(Ar)_2$ 、具有1至40個、較佳係1至20個、更佳係1至10個C原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有3至40個、較佳係3至20個、更佳係3至10個C原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團R取代)、具有5至60個、較佳係5至40個、更佳係5至30個、非常佳係5至18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基團R取代)。更佳地， $R^1$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、CN、具有1至10個C原子之直鏈烷基、或具有3至10個C原子之支鏈或環狀烷基(其各者可經一或多個基團R取代)。非常佳地， $R^1$ 代表H。

較佳地， $R^2$ 及 $R^A$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、Cl、Br、I、CN、 $N(Ar)_2$ 、具有1至40個、較佳係1至20個、更佳係1至10個C原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有3至40個、較佳係3至20個、更佳係3至10個C原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團R取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰 $CH_2$ 基團可經 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、O、S或CONR置換，且其中一或多個H原子可經D、F、Cl、Br、I、CN或 $NO_2$ 置換)、具有5至60個、較佳係1至40個、更佳係1至30個、非常佳係1至18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基團R取代)、或具有5至60個

、較佳係 1 至 40 個、更佳係 1 至 30 個、非常佳係 1 至 18 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個 R 基團取代)。

更佳地， $R^2$  及  $R^A$  在每次出現時相同或不同地代表 H、D、F、CN、具有 1 至 40 個、較佳係 1 至 20 個、更佳係 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 3 至 40 個、較佳係 3 至 20 個、更佳係 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團 R 取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $RC=CR$ 、 $C \equiv C$ 、O 或 S 置換，且其中一或多個 H 原子可經 D、F 置換)、或具有 5 至 60 個、較佳係 1 至 40 個、更佳係 1 至 30 個、非常佳係 1 至 18 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基團 R 取代)、或具有 5 至 60 個、較佳係 1 至 40 個、更佳係 1 至 30 個、非常佳係 1 至 18 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個 R 基團取代)。

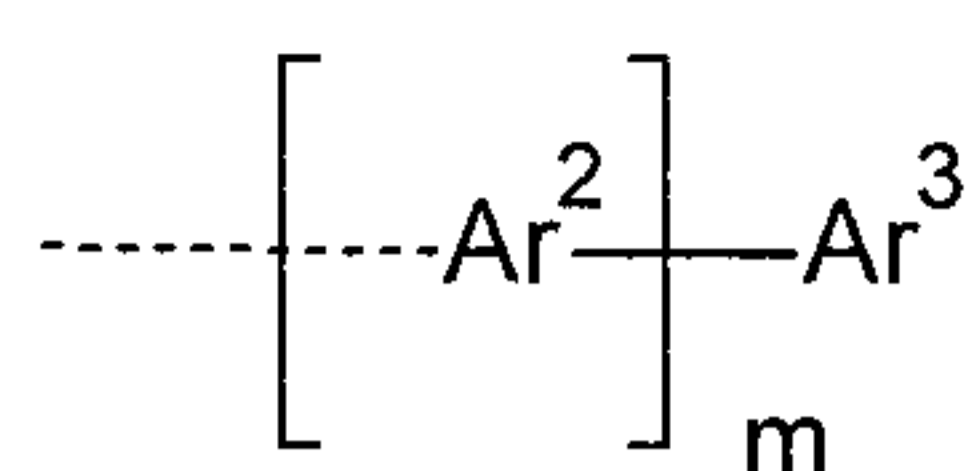
非常佳地， $R^2$  及  $R^A$  在每次出現時相同或不同地代表：

H、D、F、CN；或

式 (RS-a) 之基團、式 (RS-b) 之基團、式 (RS-c) 之基團或式 (RS-d) 之基團，其中式 (RS-a)、(RS-b)、(RS-c) 及 (RS-d) 之基團具有如請求項 6 之相同定義；或

式 (ArL-1) 之基團，





式 (ArL-1)

其中式 (ArL-1) 中之虛線鍵表示至式 (1) 結構之鍵結，其中  $\text{Ar}^2$ 、 $\text{Ar}^3$  在每次出現時相同或不同地代表具有 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基團  $\text{R}$  取代)；且其中  $m$  係選自 1 至 10 之整數。

根據較佳實施例，基團  $\text{R}^2$  或  $\text{R}^A$  中之至少一者代表式 (RS-a) 之基團、式 (RS-b) 之基團、式 (RS-c) 之基團或式 (RS-d) 之基團，其中式 (RS-a)、(RS-b)、(RS-c) 及 (RS-d) 之基團係如上文所定義。

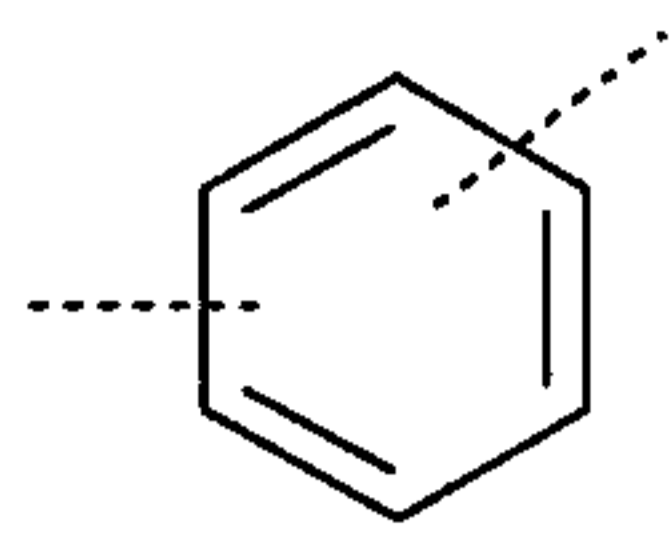
根據較佳實施例，基團  $\text{R}^B$  及  $\text{R}^A$  在每次出現時相同或不同地選自式 (RS-a)、(RS-b)、(RS-c) 及 (RS-d) 之基團，其中式 (RS-a)、(RS-b)、(RS-c) 及 (RS-d) 之基團具有如上之相同定義。

根據較佳實施例，基團  $\text{R}$ 、 $\text{R}^2$  或  $\text{R}^A$  中之至少一者代表如上文所定義之式 (ArL-1) 之基團。

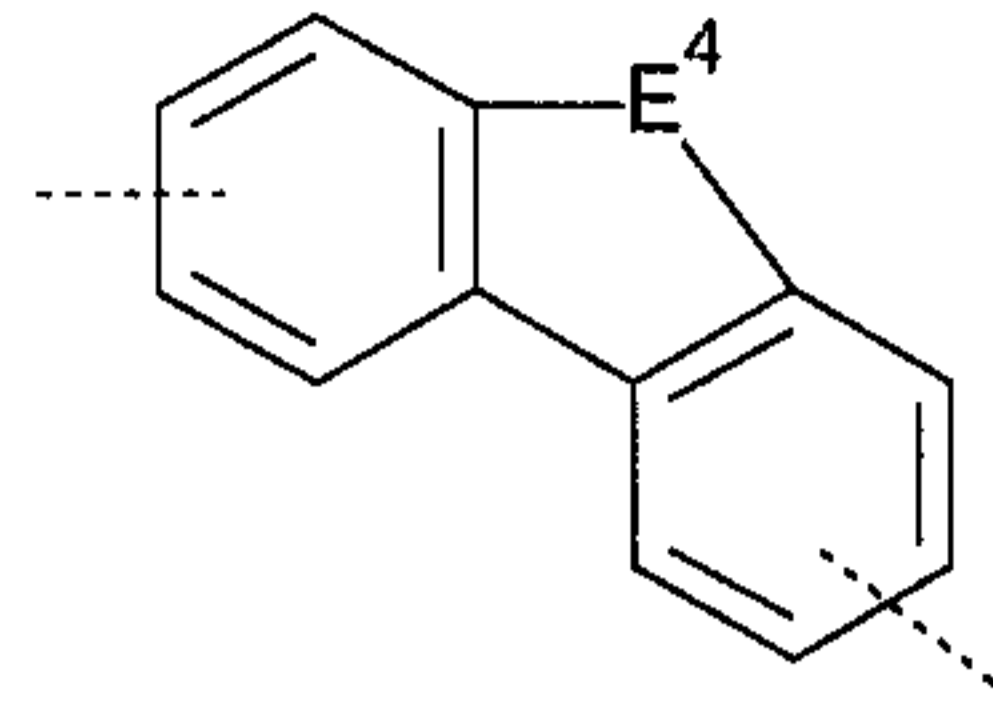
較佳地，式 (ArL-1) 之基團中之標號  $m$  係選自 1 至 6、非常佳地係選自 1 至 4 之整數。

在式 (ArL-1) 中，較佳地基團  $\text{Ar}^2$  係選自式 (Ar2-1) 至 (Ar2-25) 之基團，

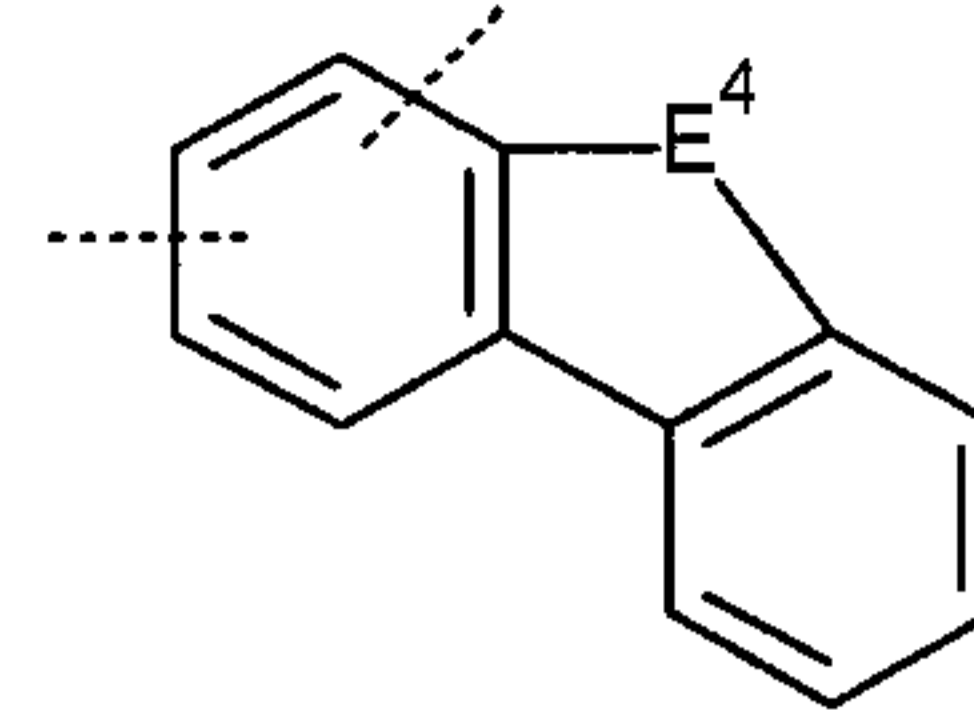




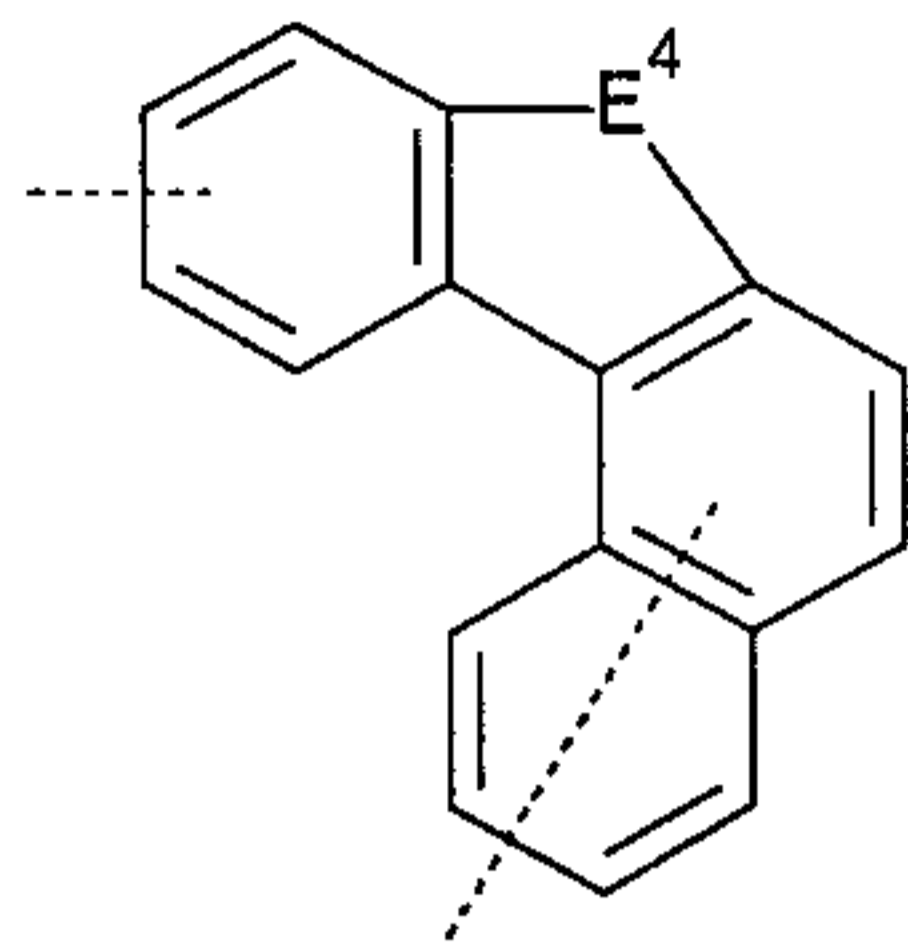
(Ar2-1)



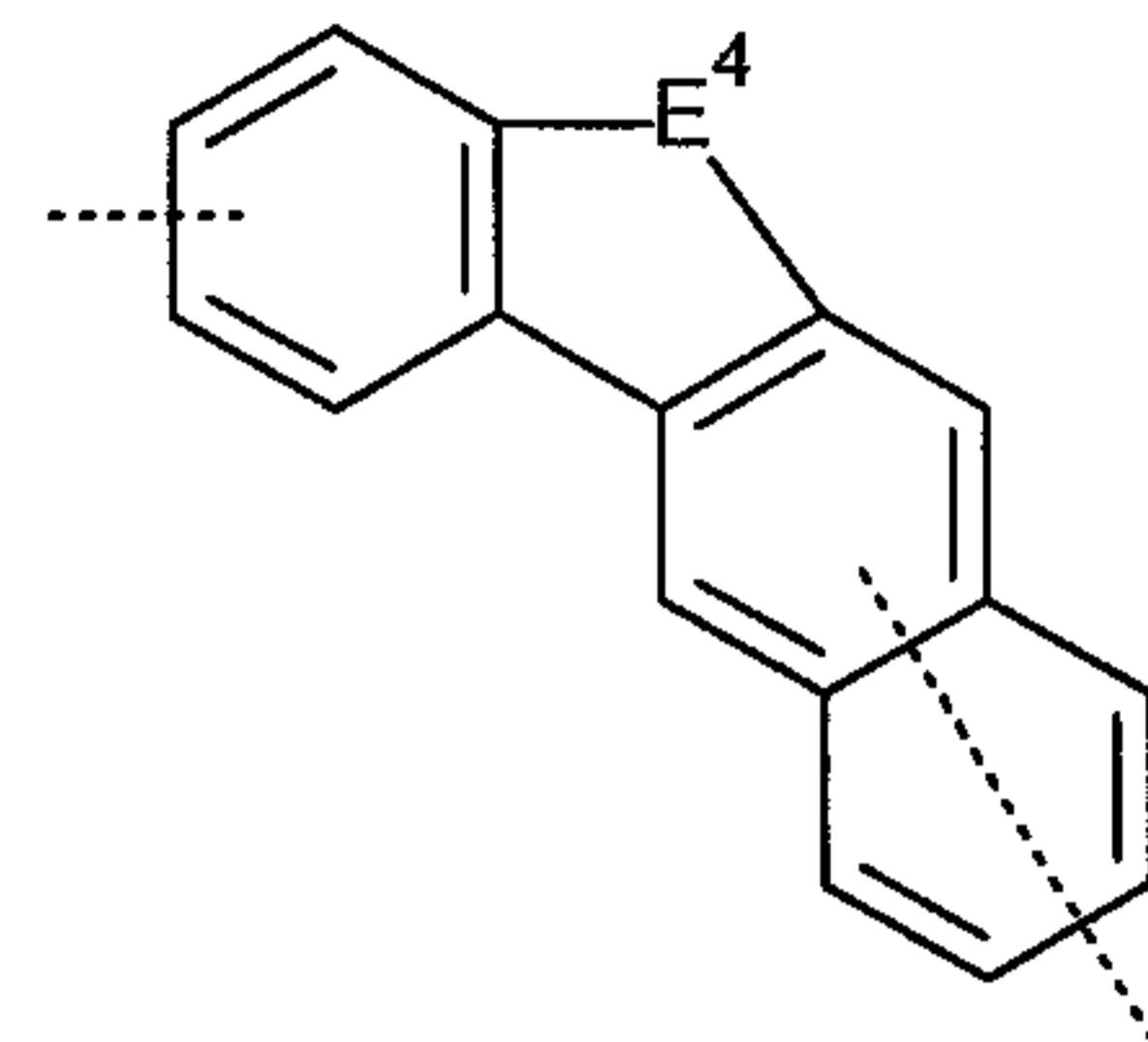
(Ar2-2)



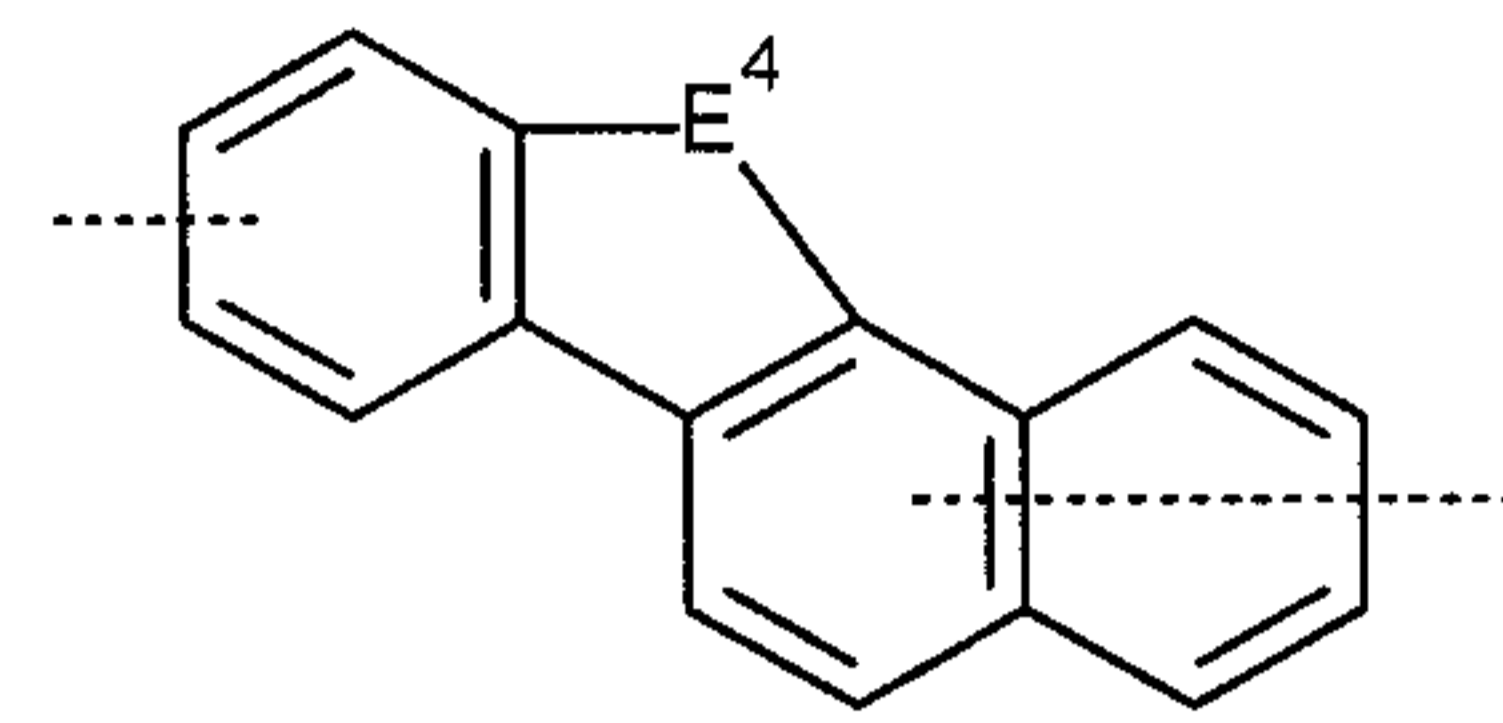
(Ar2-3)



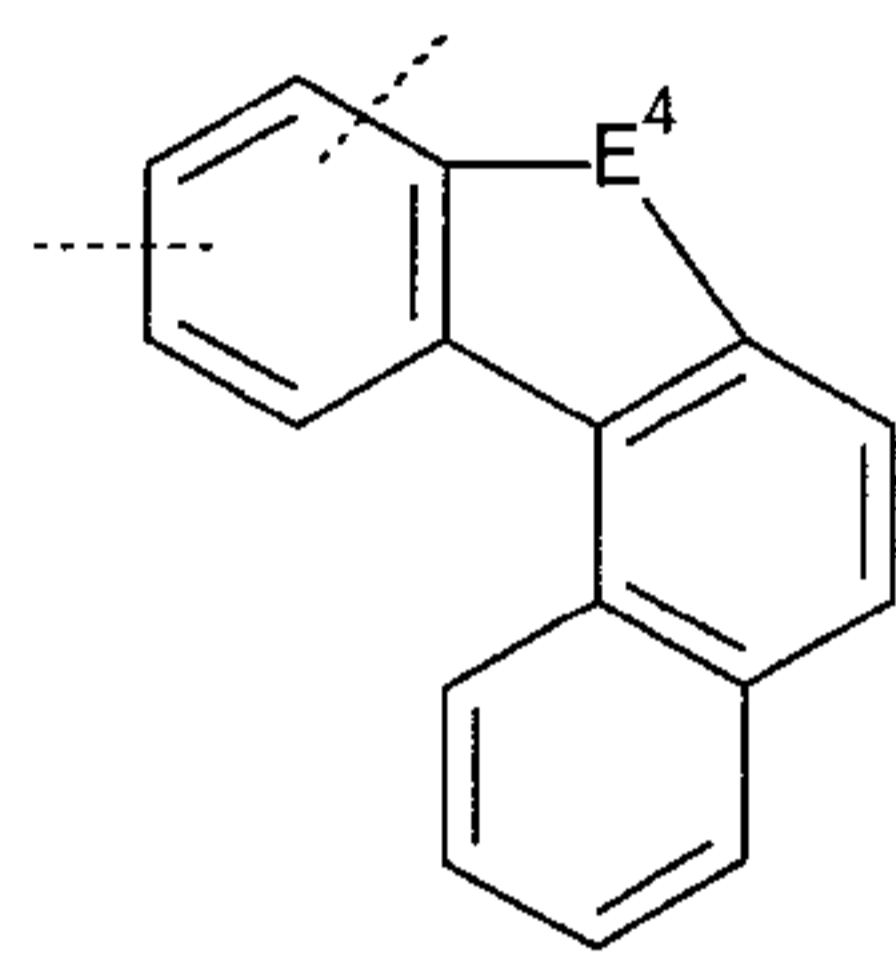
(Ar2-4)



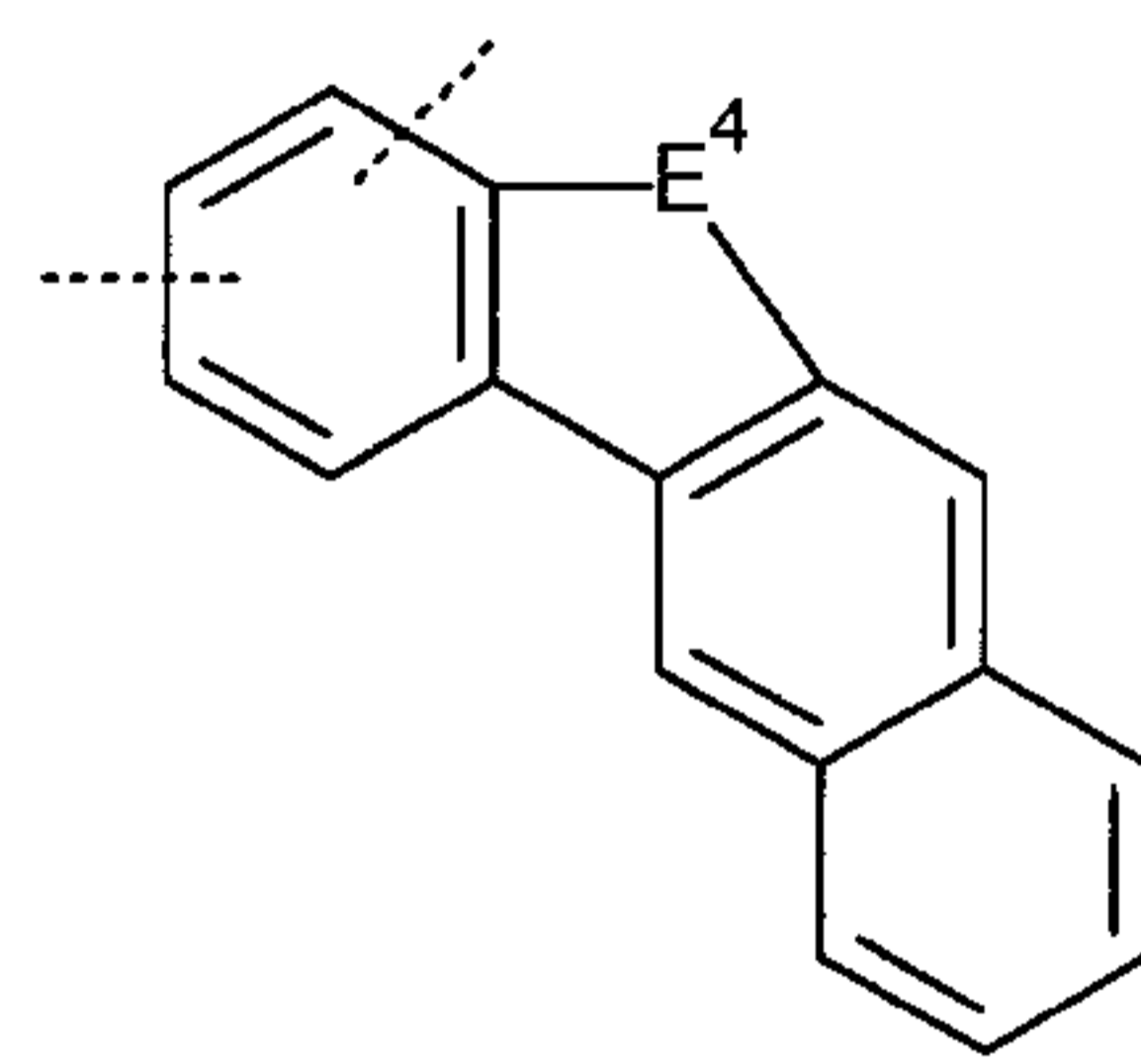
(Ar2-5)



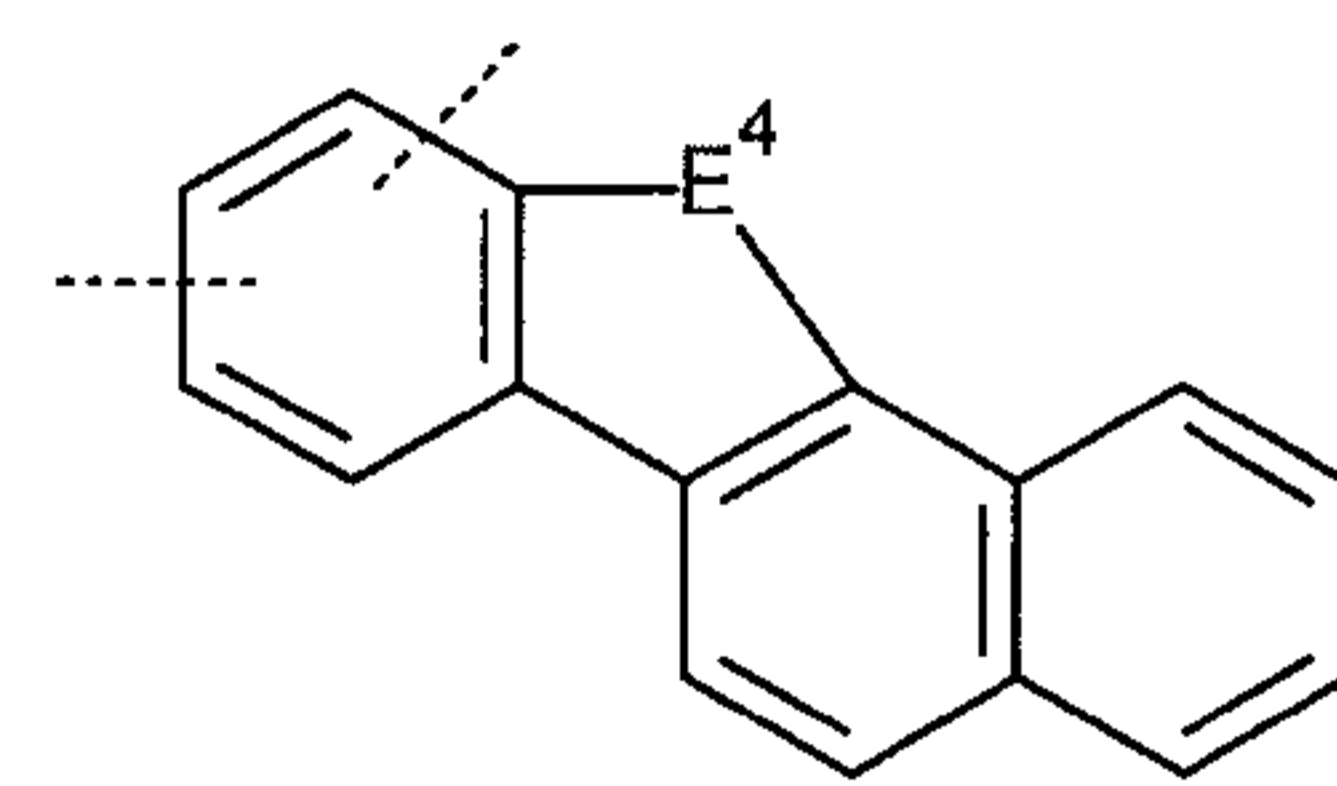
(Ar2-6)



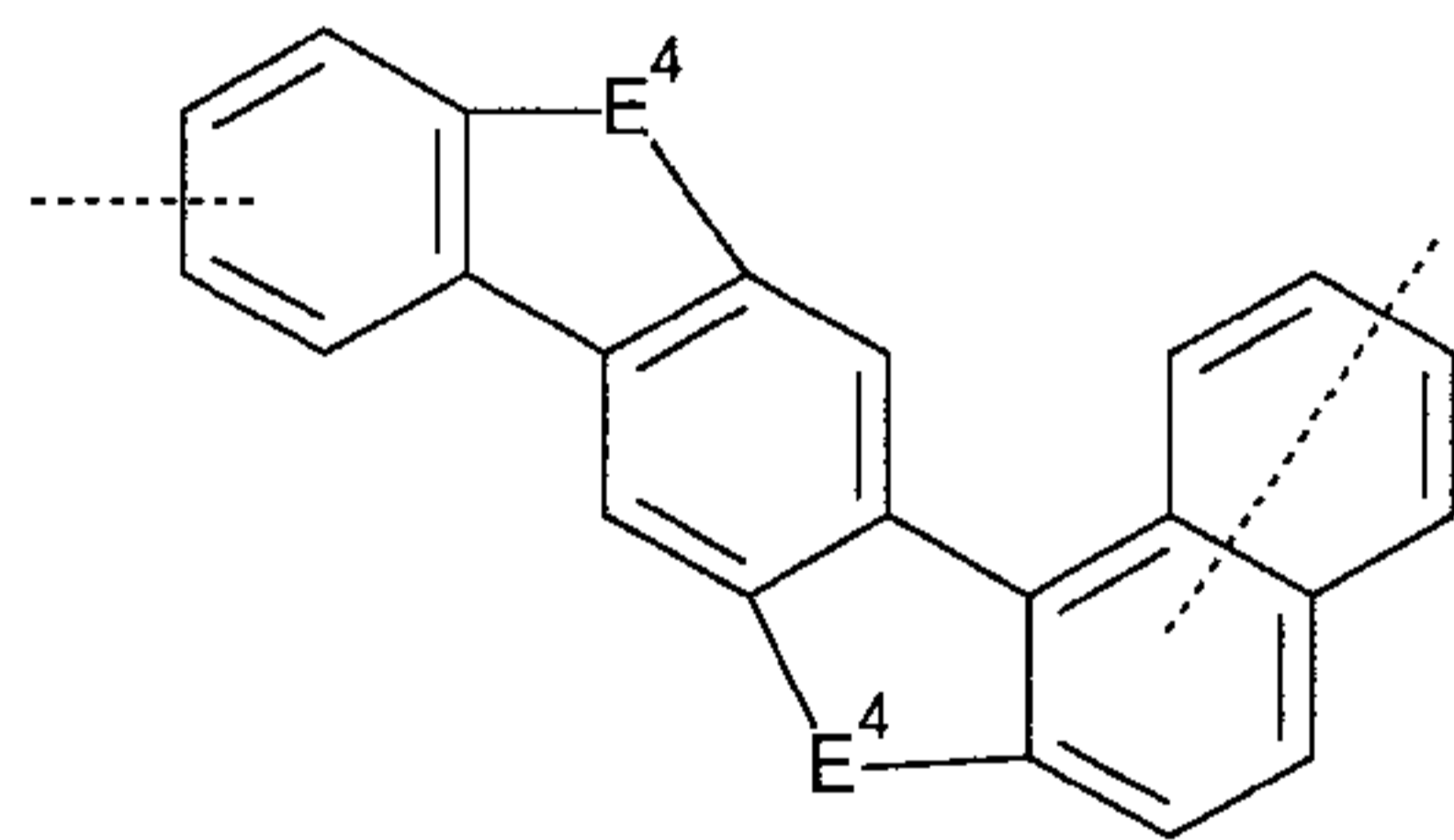
(Ar2-7)



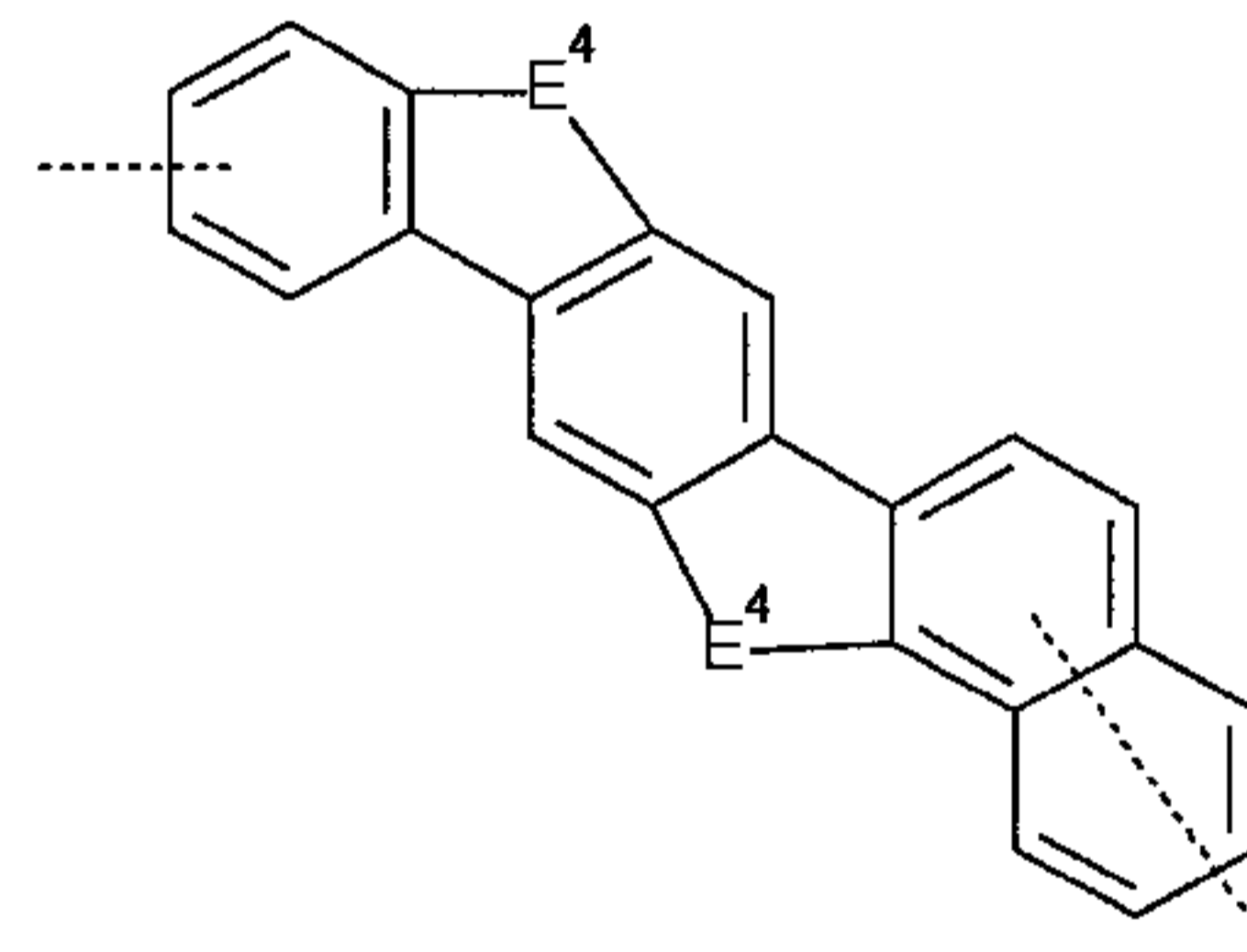
(Ar2-8)



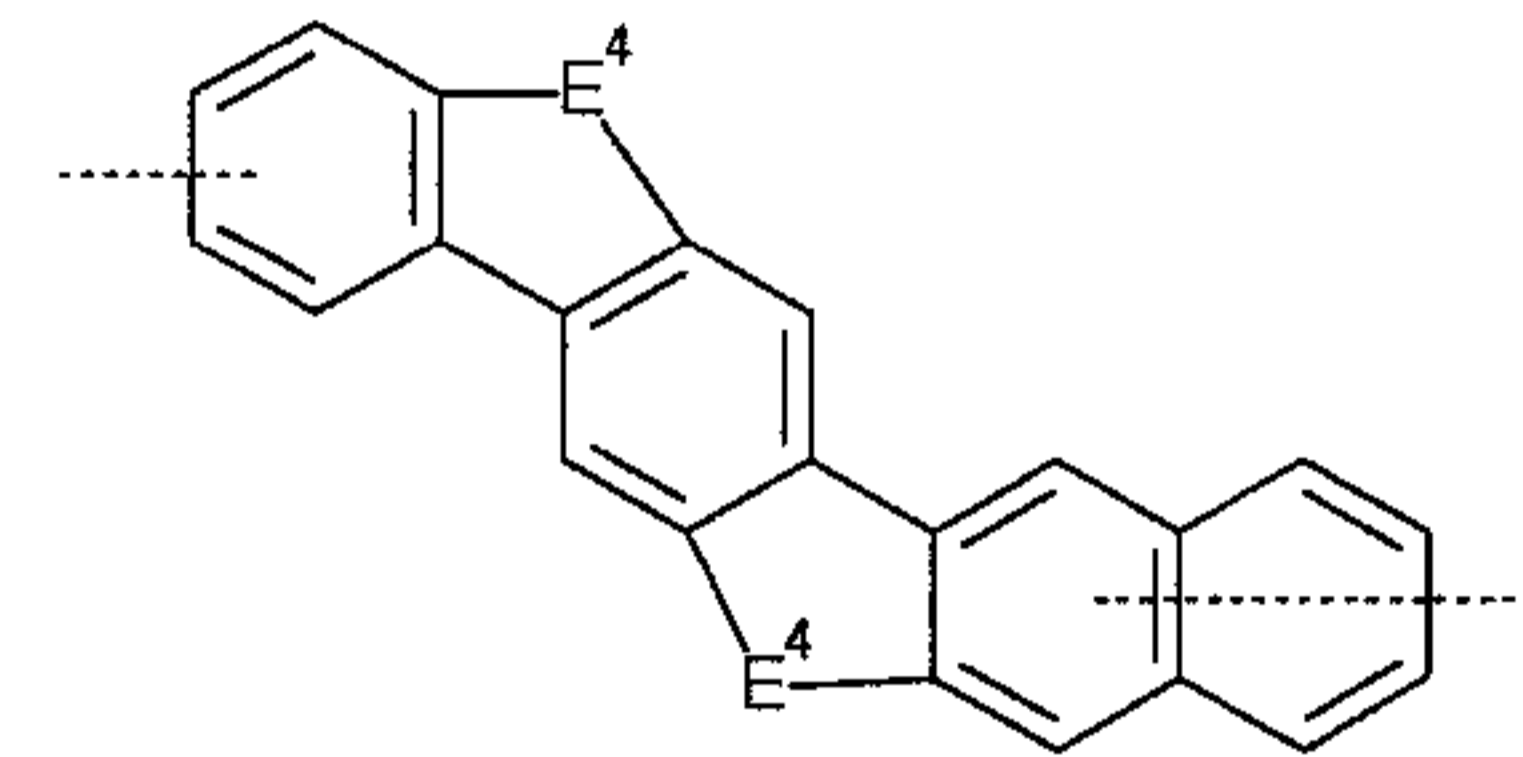
(Ar2-9)



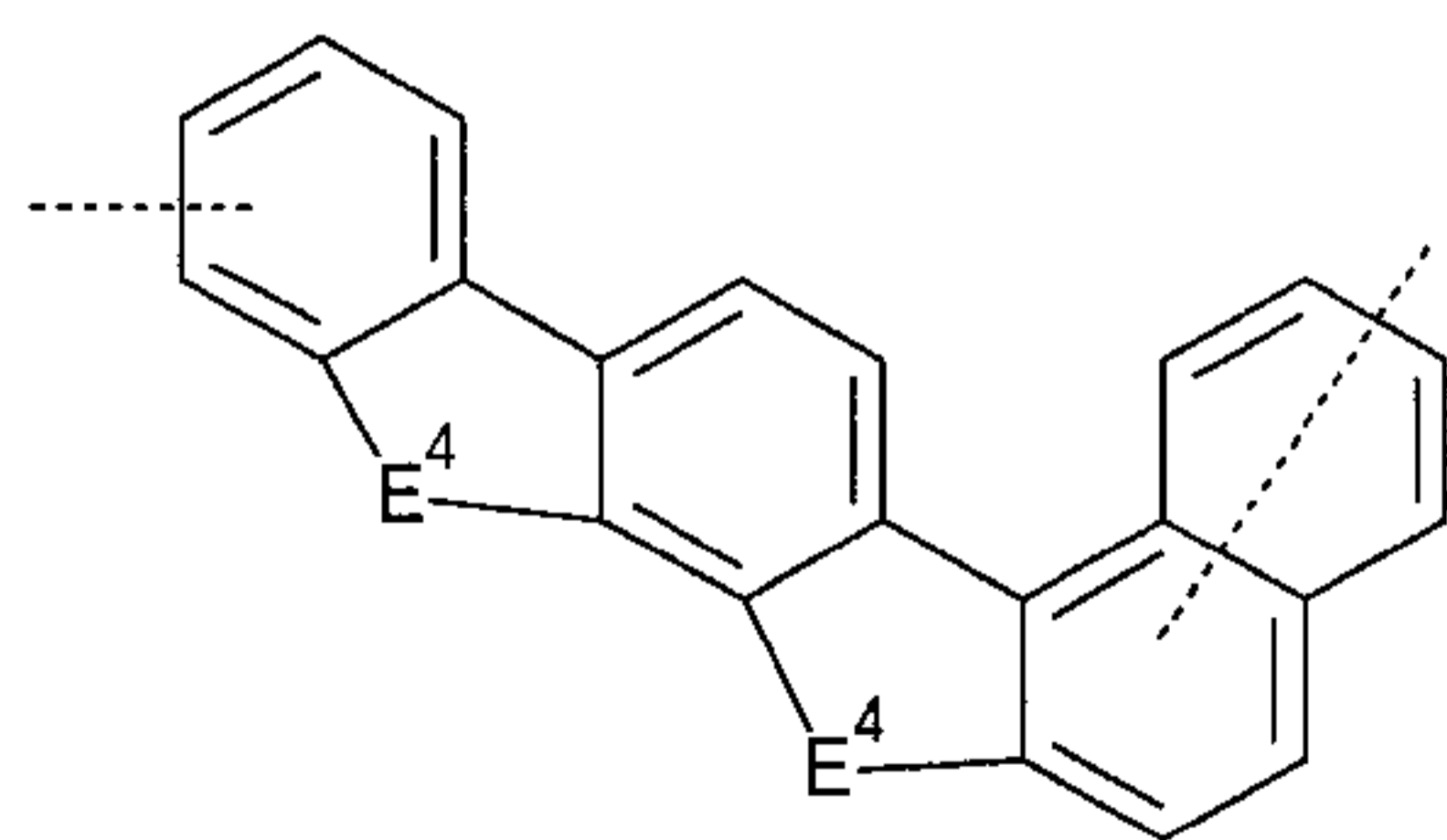
(Ar2-10)



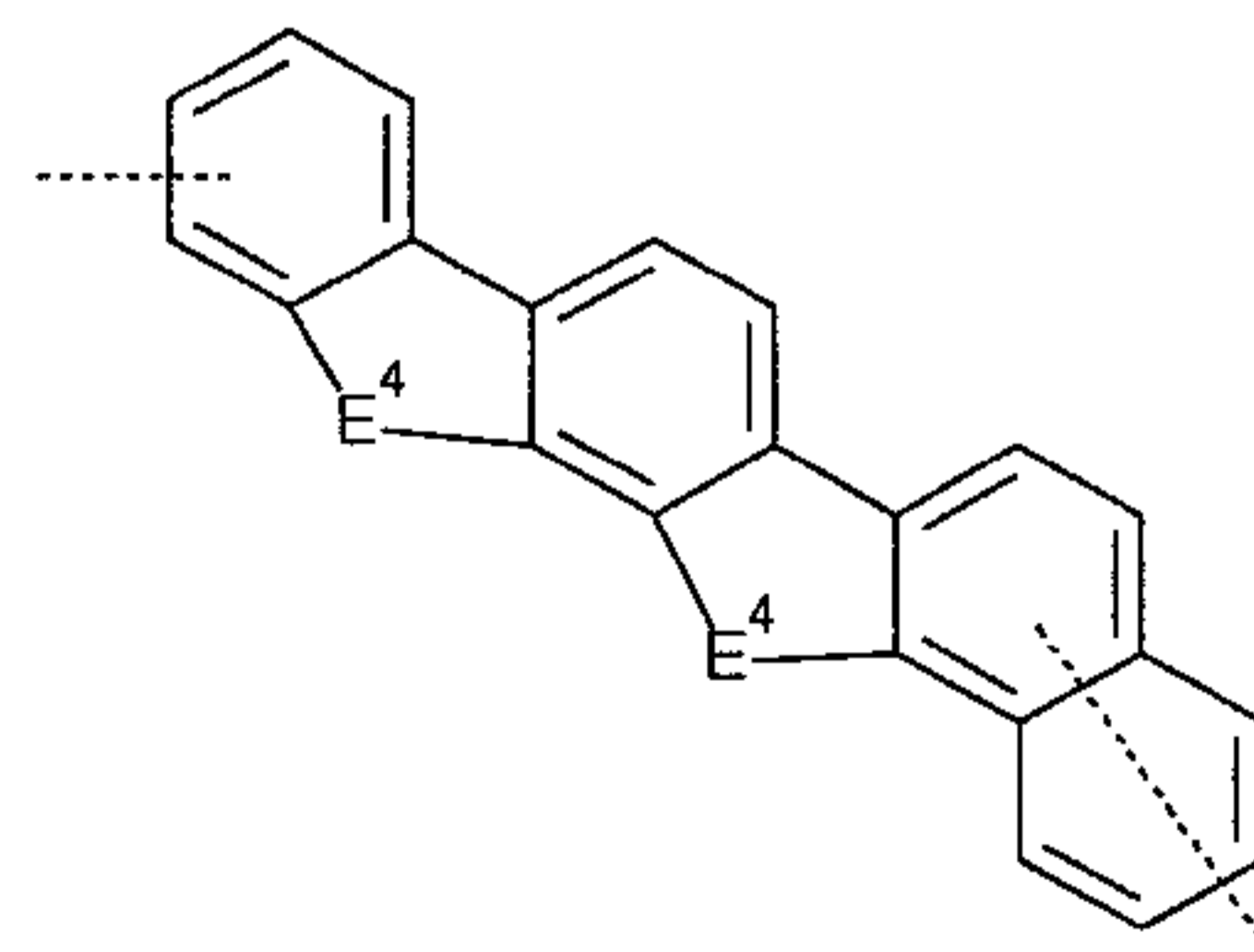
(Ar2-11)



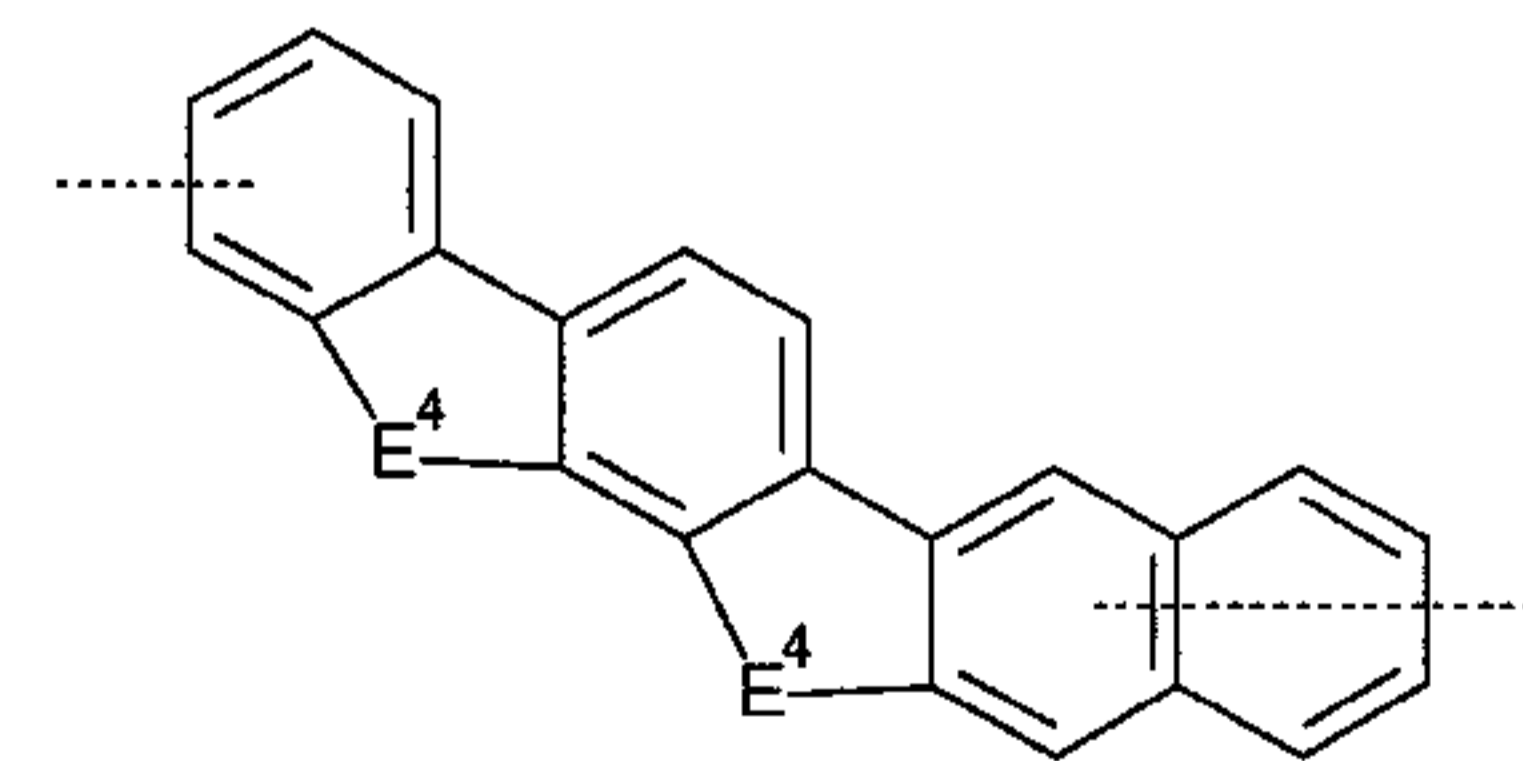
(Ar2-12)



(Ar2-13)

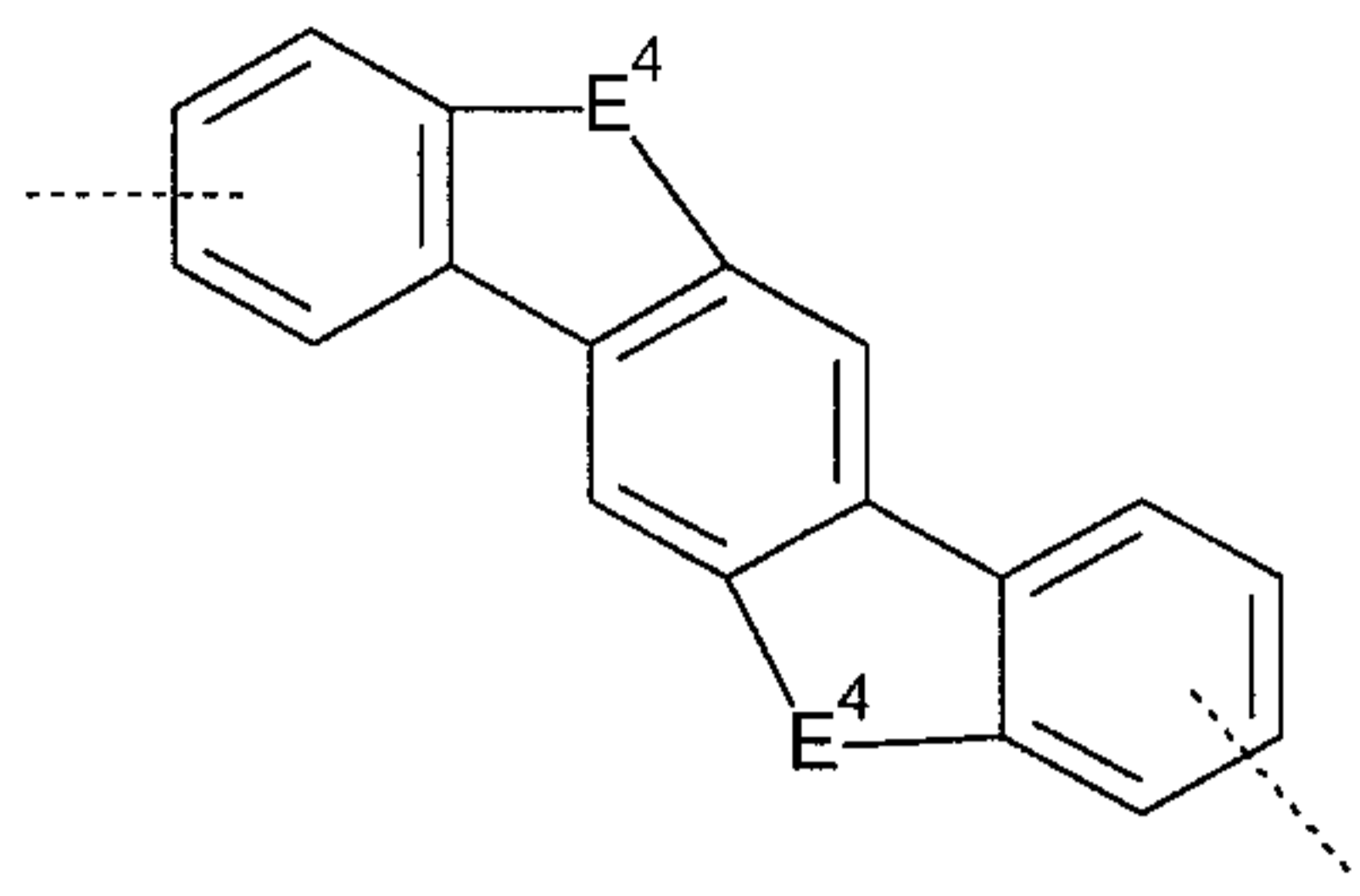


(Ar2-14)

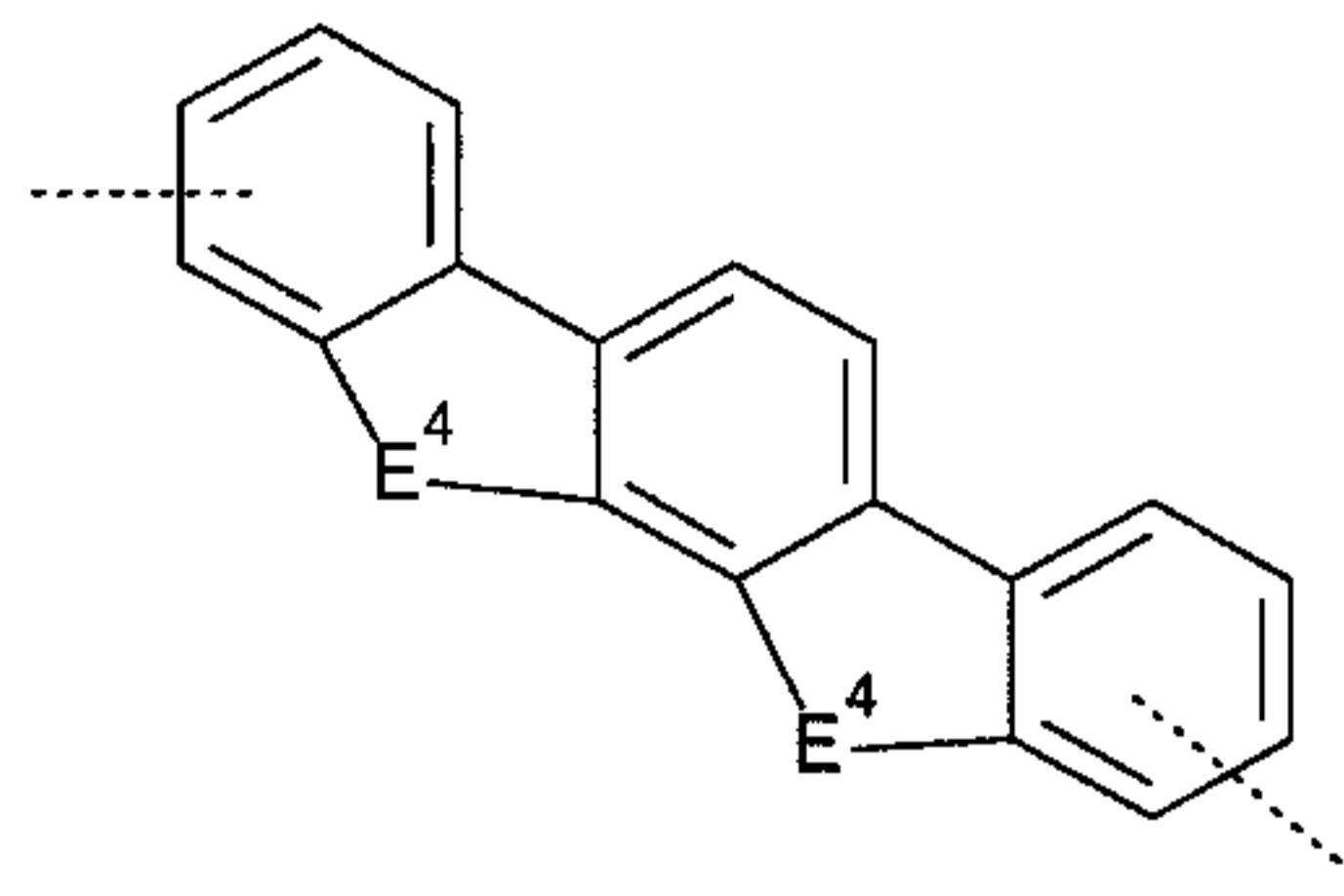


(Ar2-15)

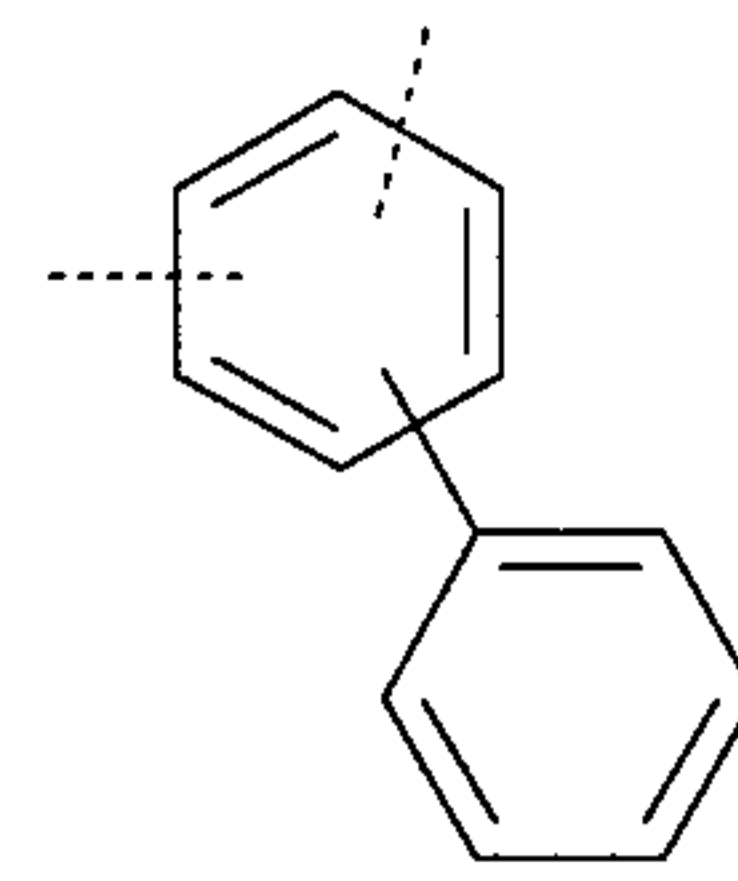




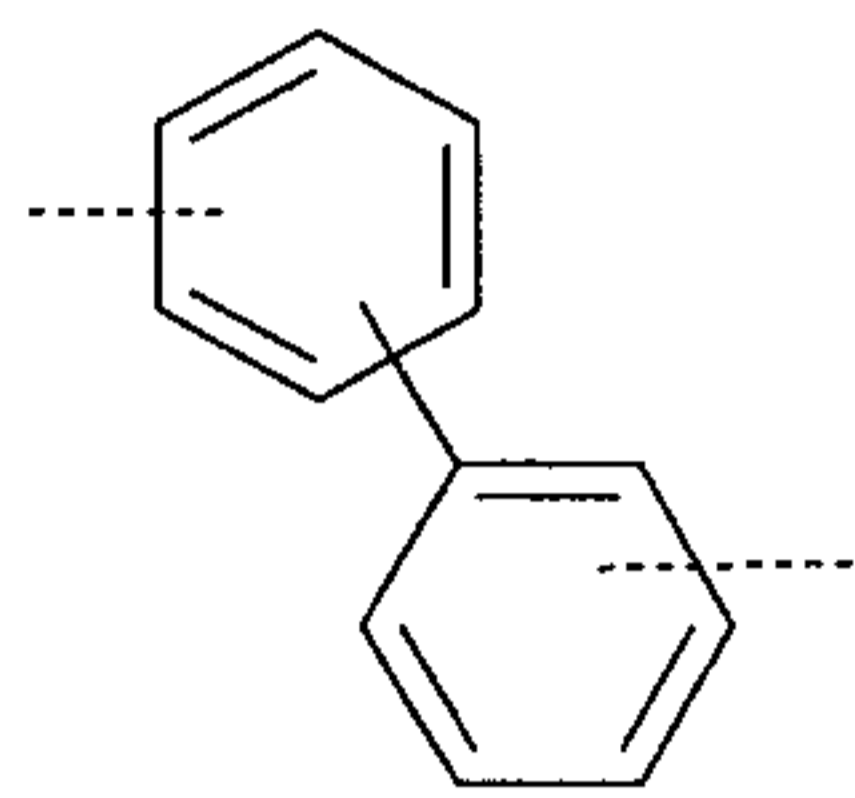
(Ar2-16)



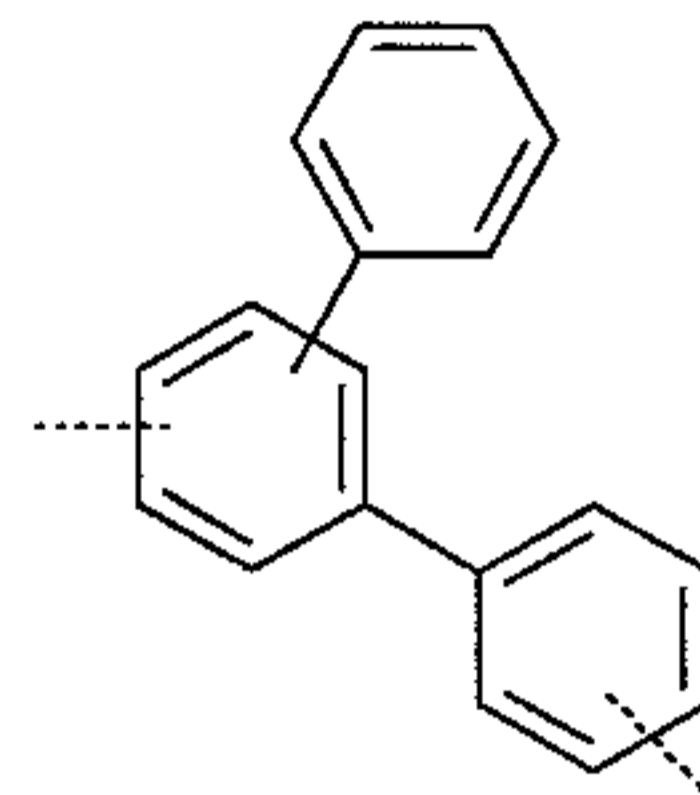
(Ar2-17)



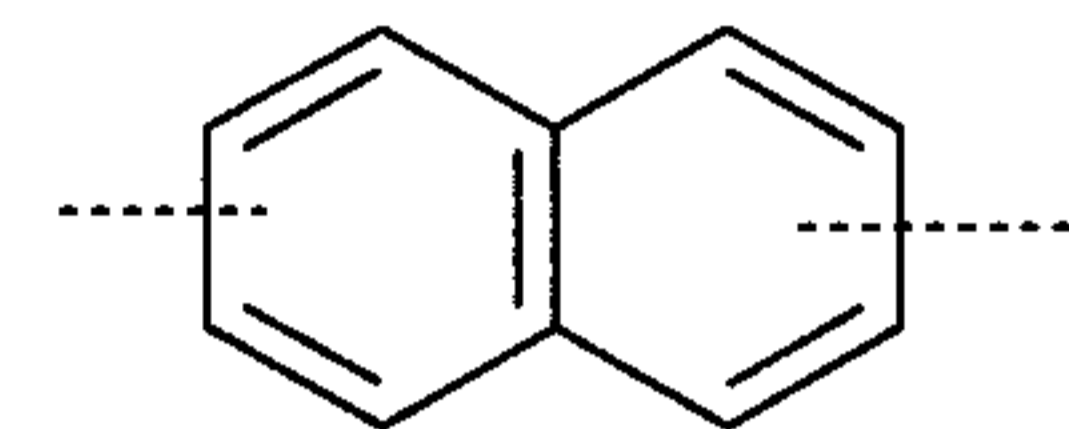
(Ar2-18)



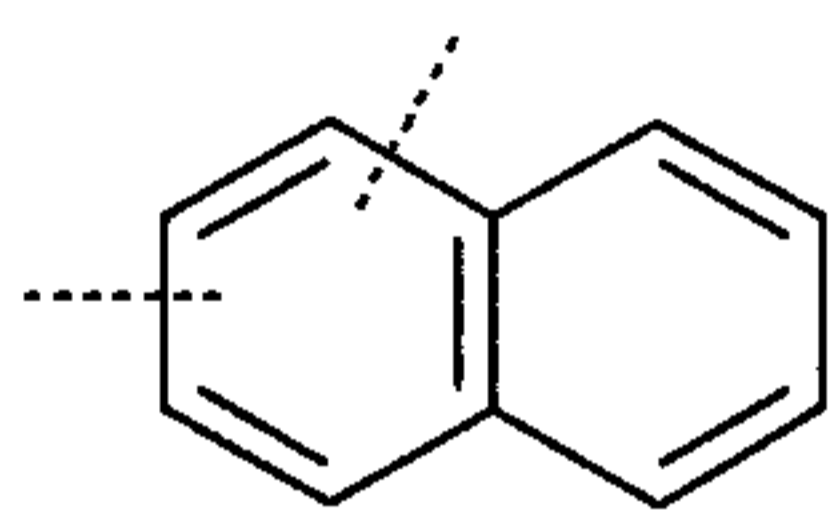
(Ar2-19)



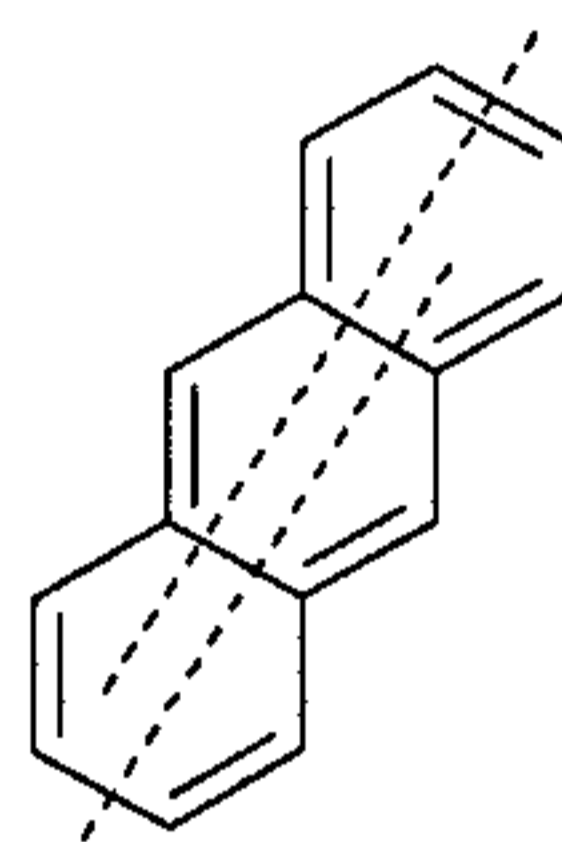
(Ar2-20)



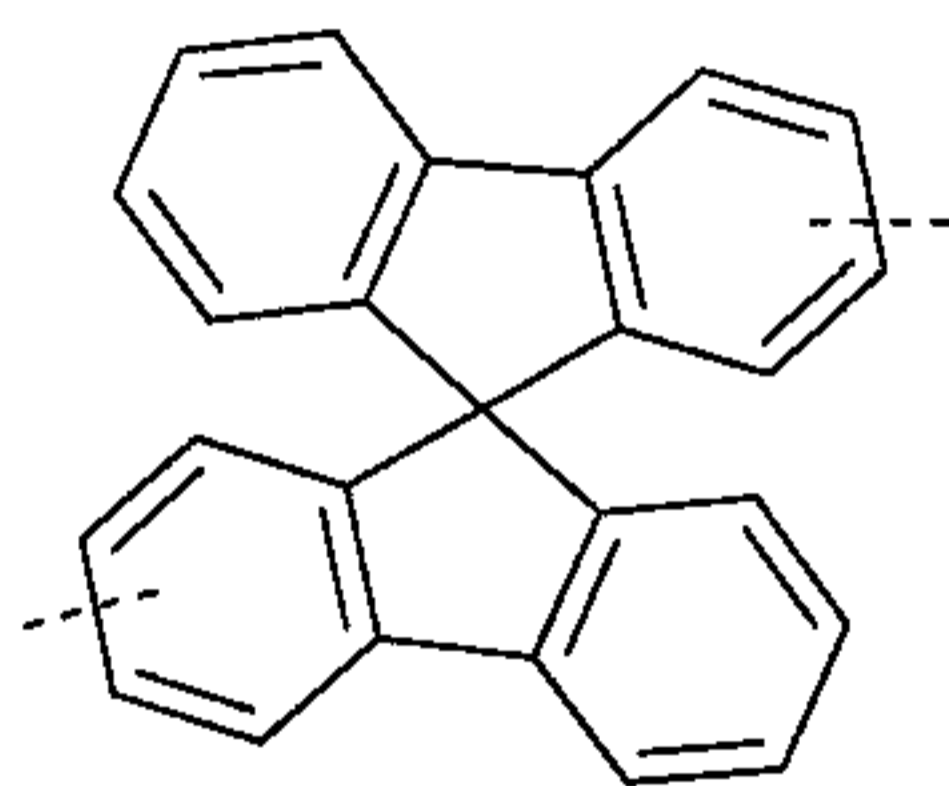
(Ar2-21)



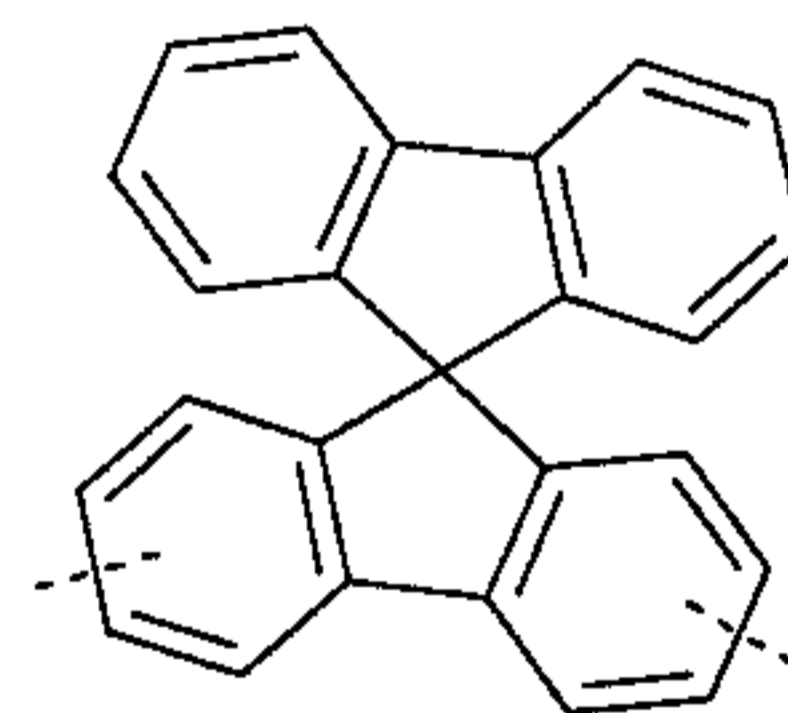
(Ar2-22)



(Ar2-23)



(Ar2-24)



(Ar2-25)

其中虛線鍵表示至式(1)結構及至基團  $Ar^2$  或  $Ar^3$  之鍵結，且式(Ar2-1)至(Ar2-25)之基團可在各自由位置經基團  $R$  取代，該基團  $R$  具有如上之相同含意，且其中：

$E^4$  係選自  $-B(R^0)-$ 、 $-C(R^0)_2-$ 、 $-C(R^0)_2-C(R^0)_2-$ 、  
 $-Si(R^0)_2-$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-C(=NR^0)-$ 、 $-C=(C(R^0))_2-$ 、  
 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(=O)-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^0)-$ 、 $-P(R^0)-$  及  
 $-P((=O)R^0)-$ ；

$R^0$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、CN、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(其各者可經一或多個基團R取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰 $CH_2$ 基團可經 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、O或S置換，且其中一或多個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基團R取代)；其中兩個相鄰取代基 $R^0$ 可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團R取代)，R具有如上之相同含意。

較佳地， $E^4$ 係選自 $-C(R^0)_2-$ 、 $-Si(R^0)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-N(R^0)-$ ，其中取代基 $R^0$ 具有如上之相同含意。

較佳地， $R^0$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、CN、具有1至40個、較佳係1至20個、更佳係1至10個C原子之直鏈烷基、或具有3至40個、較佳係3至20個、更佳係3至10個C原子之支鏈或環狀烷基(其各者可經一或多個基團R取代)、或具有5至60個、較佳係5至40個、更佳係5至30個、非常佳係5至18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基團R取代)；其中兩個相鄰取代基 $R^0$ 可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團R取代)，其具有如上之相同含意。合適的基團 $R^0$ 之實例係H、甲基、乙基、丙基、丁基、經

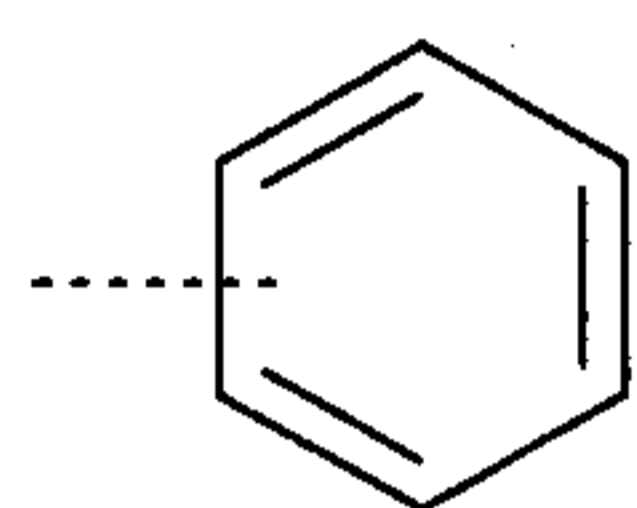


取代及未經取代苯基、經取代及未經取代聯苯、經取代及未經取代萘基及經取代及未經取代蒽。

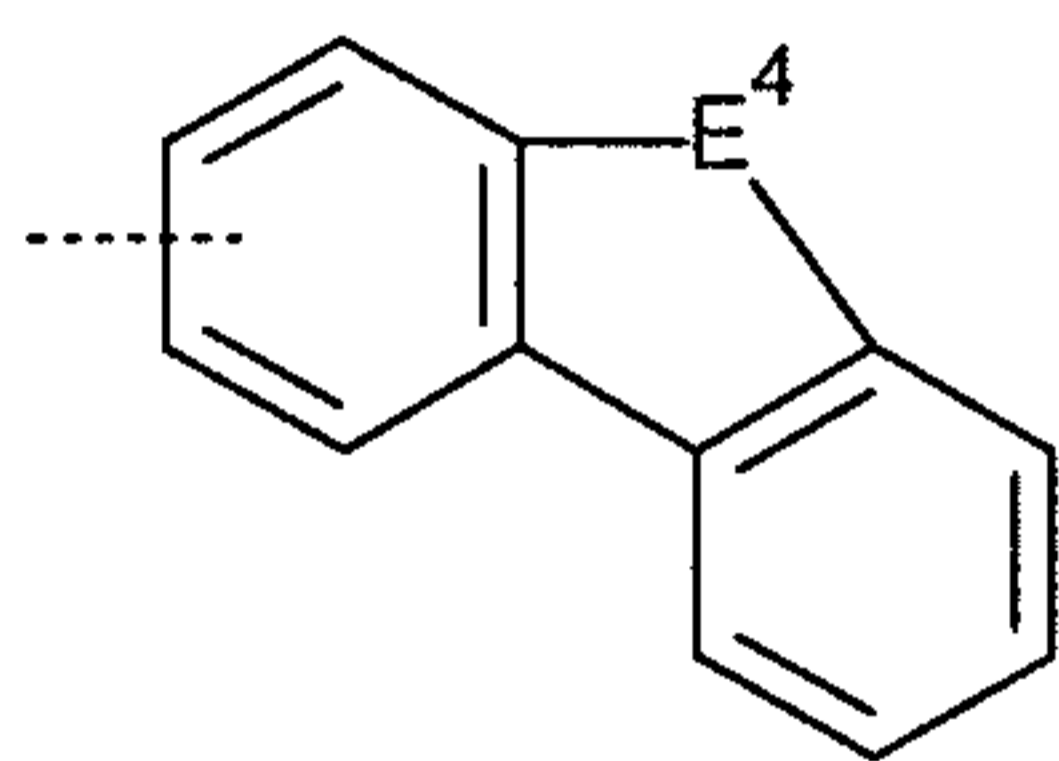
在式(Ar2-1)至(Ar2-25)中，下列式係較佳的：

(Ar2-1)、(Ar2-2)、(Ar2-3)、(Ar2-18)、(Ar2-19)、(Ar2-20)、(Ar2-21)、(Ar2-22)及(Ar2-25)。

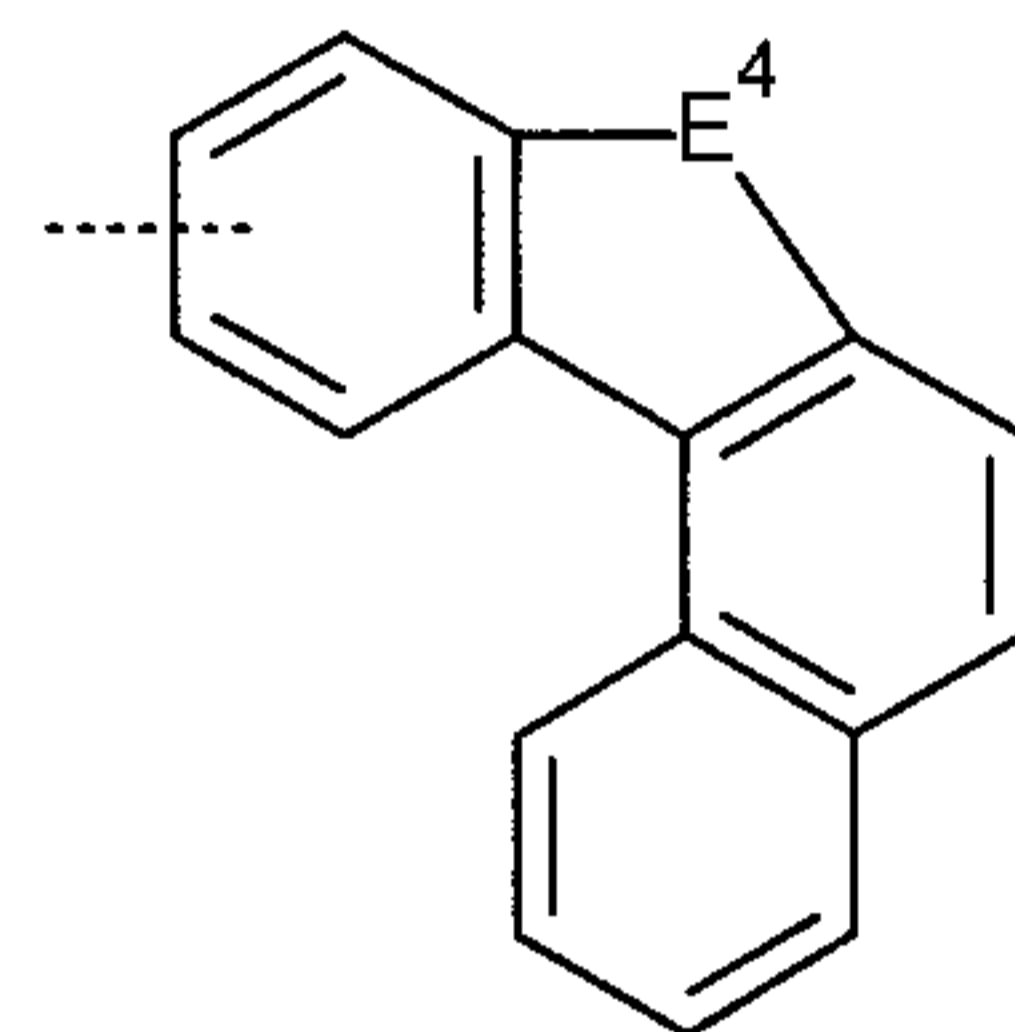
此外，在式(ArL-1)中，較佳地基團Ar<sup>3</sup>在每次出現時相同或不同地選自由式(Ar3-1)至(Ar3-27)之基團所組成之群組，



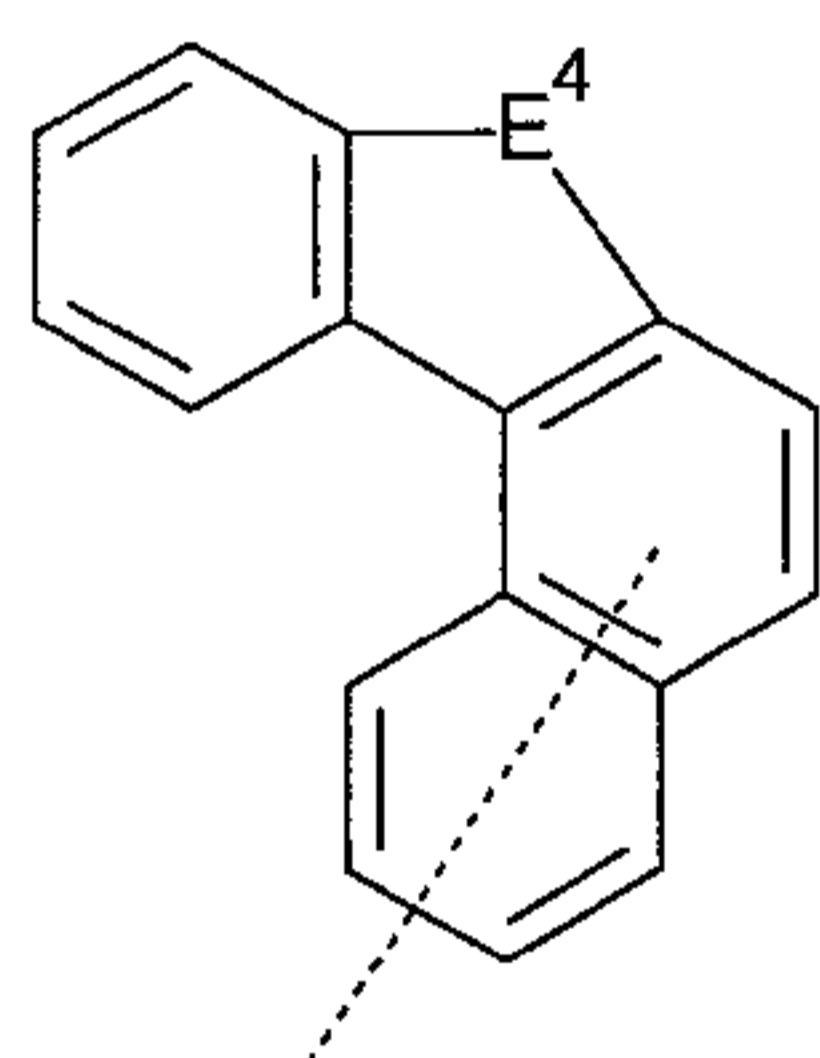
(Ar3-1)



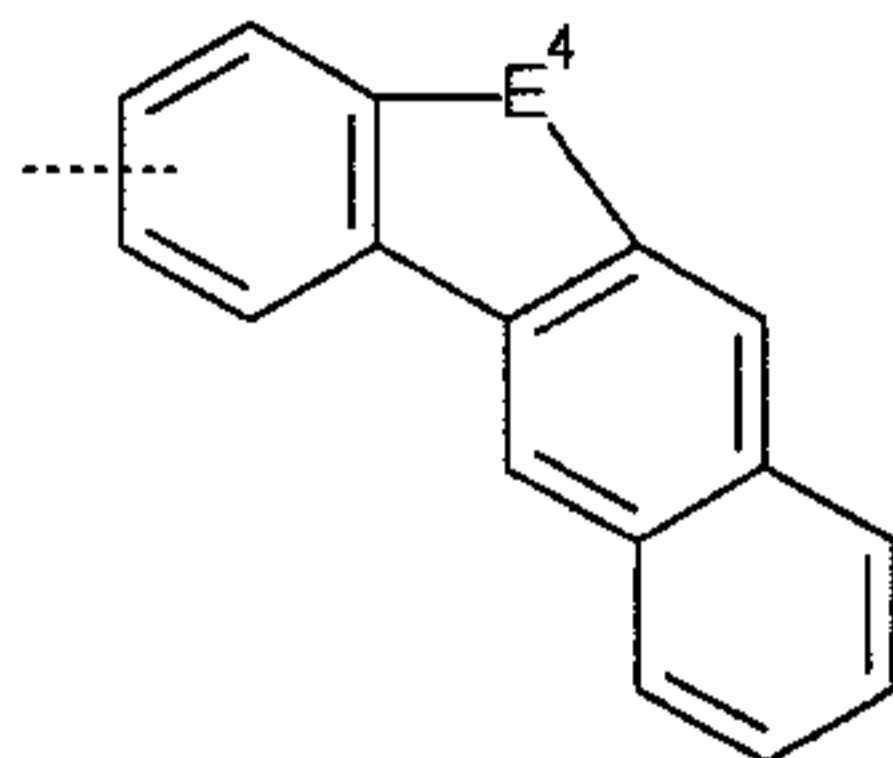
(Ar3-2)



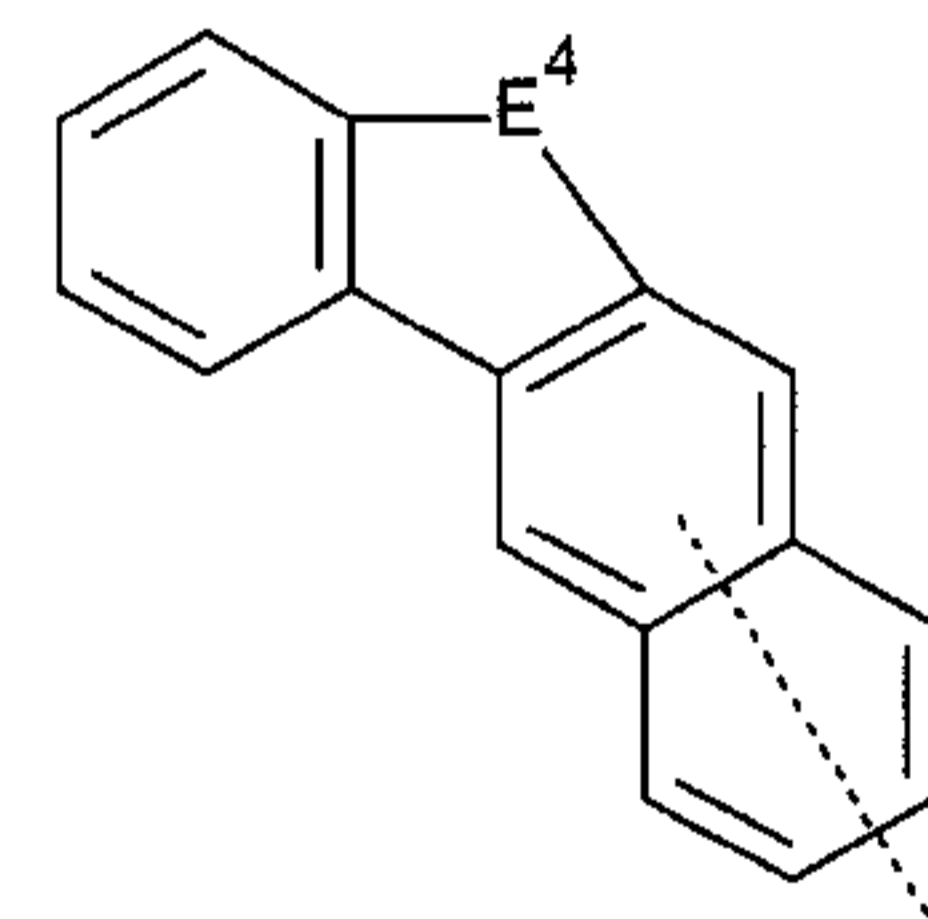
(Ar3-3)



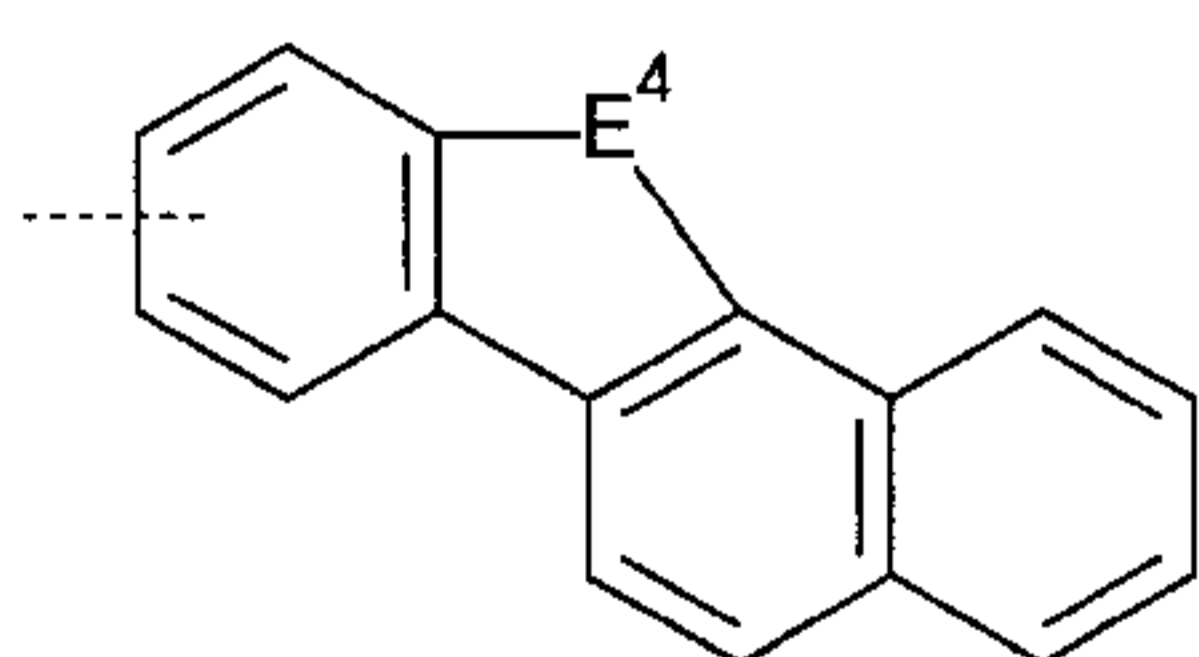
(Ar3-4)



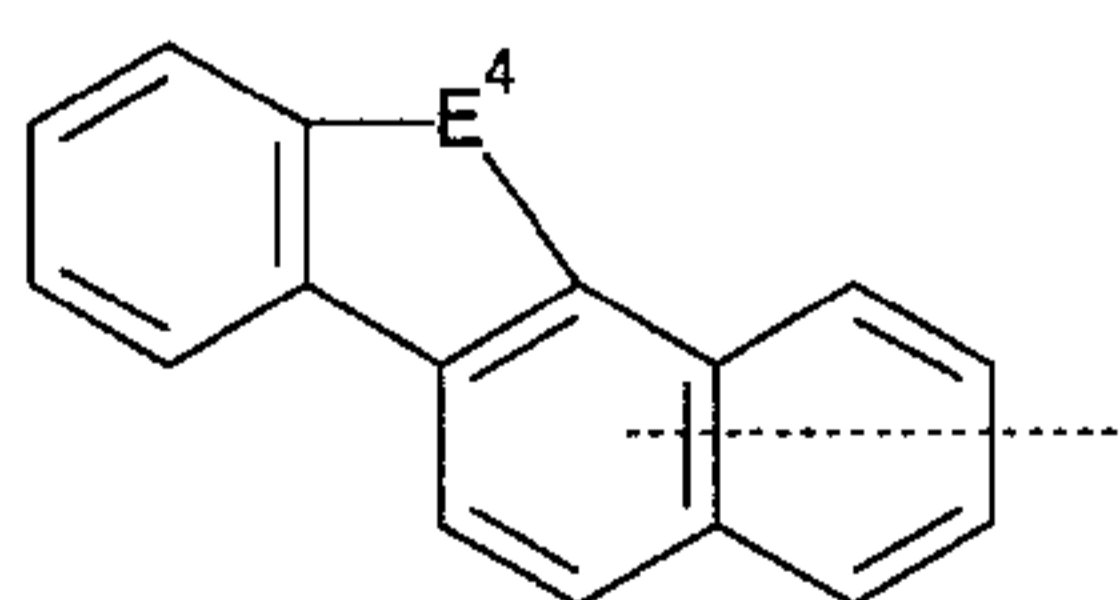
(Ar3-5)



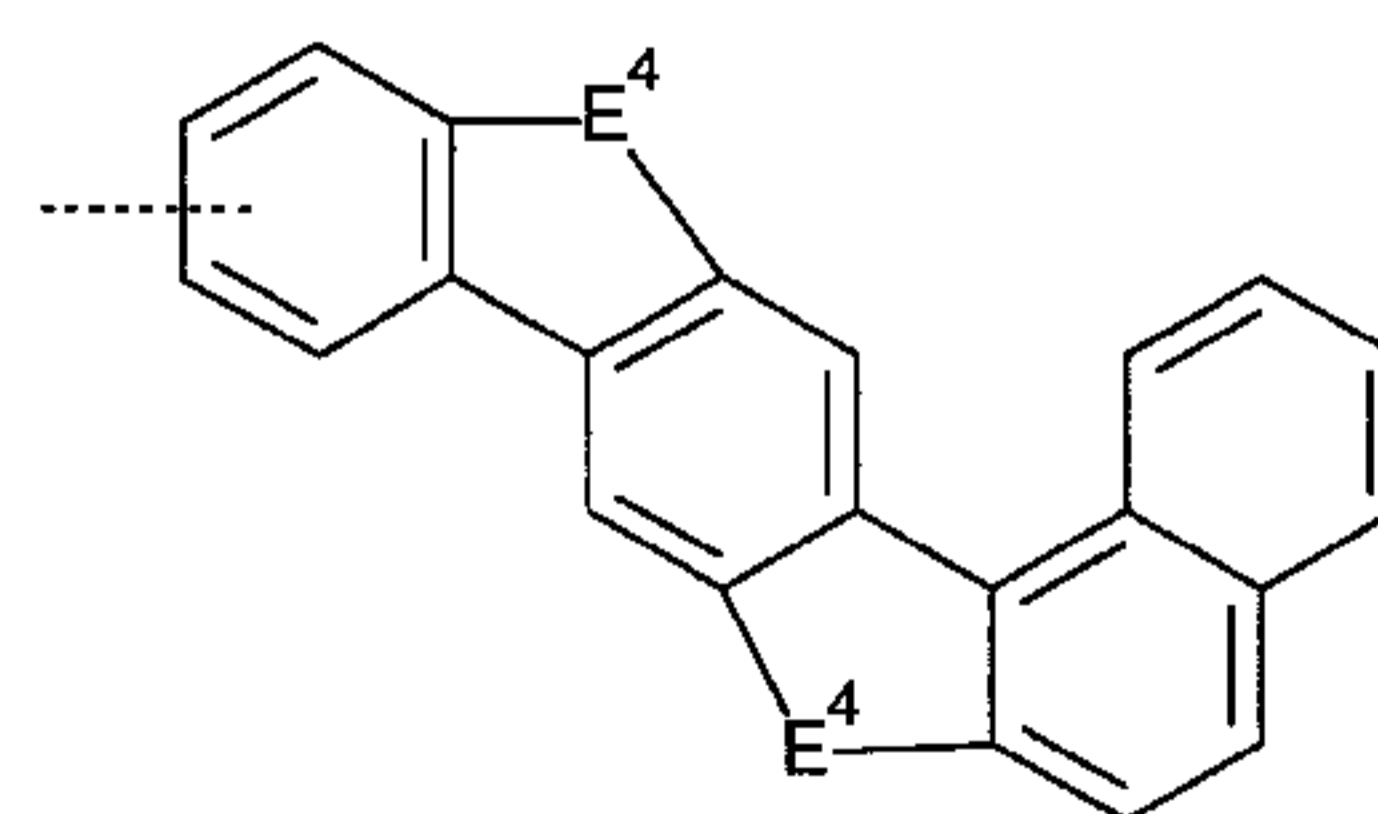
(Ar3-6)



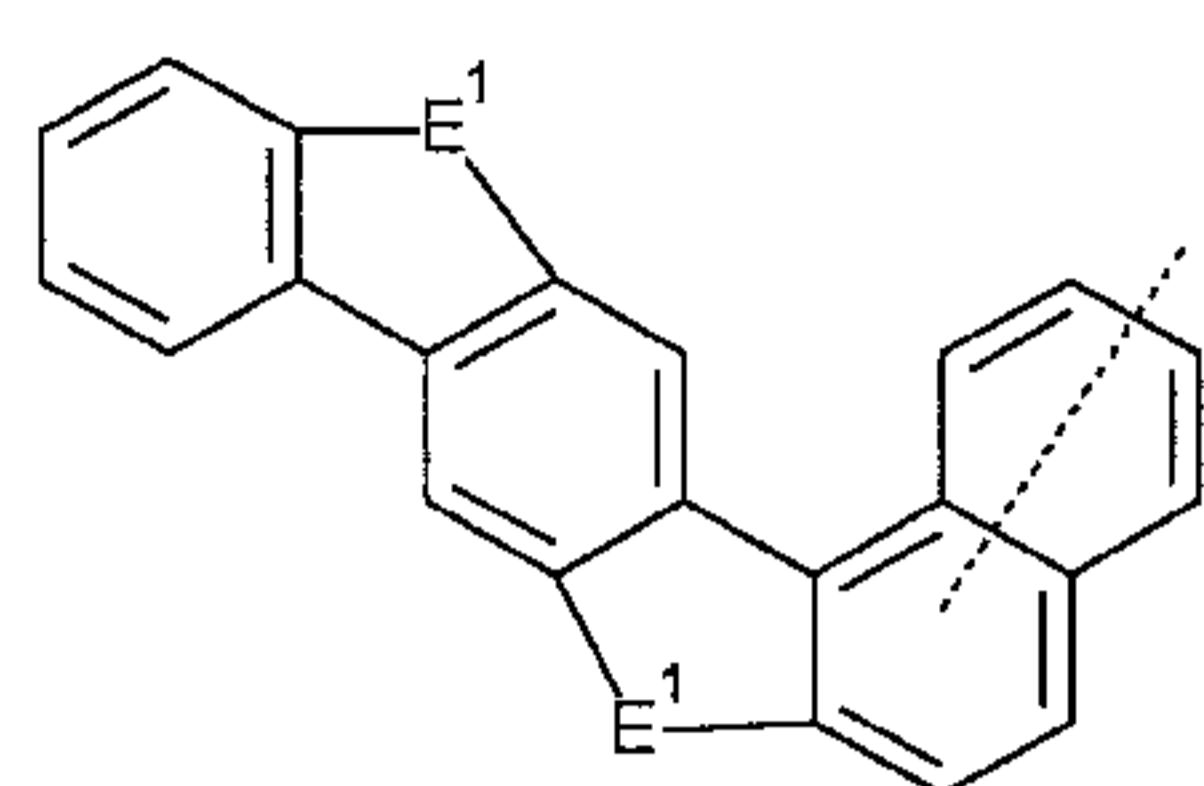
(Ar3-7)



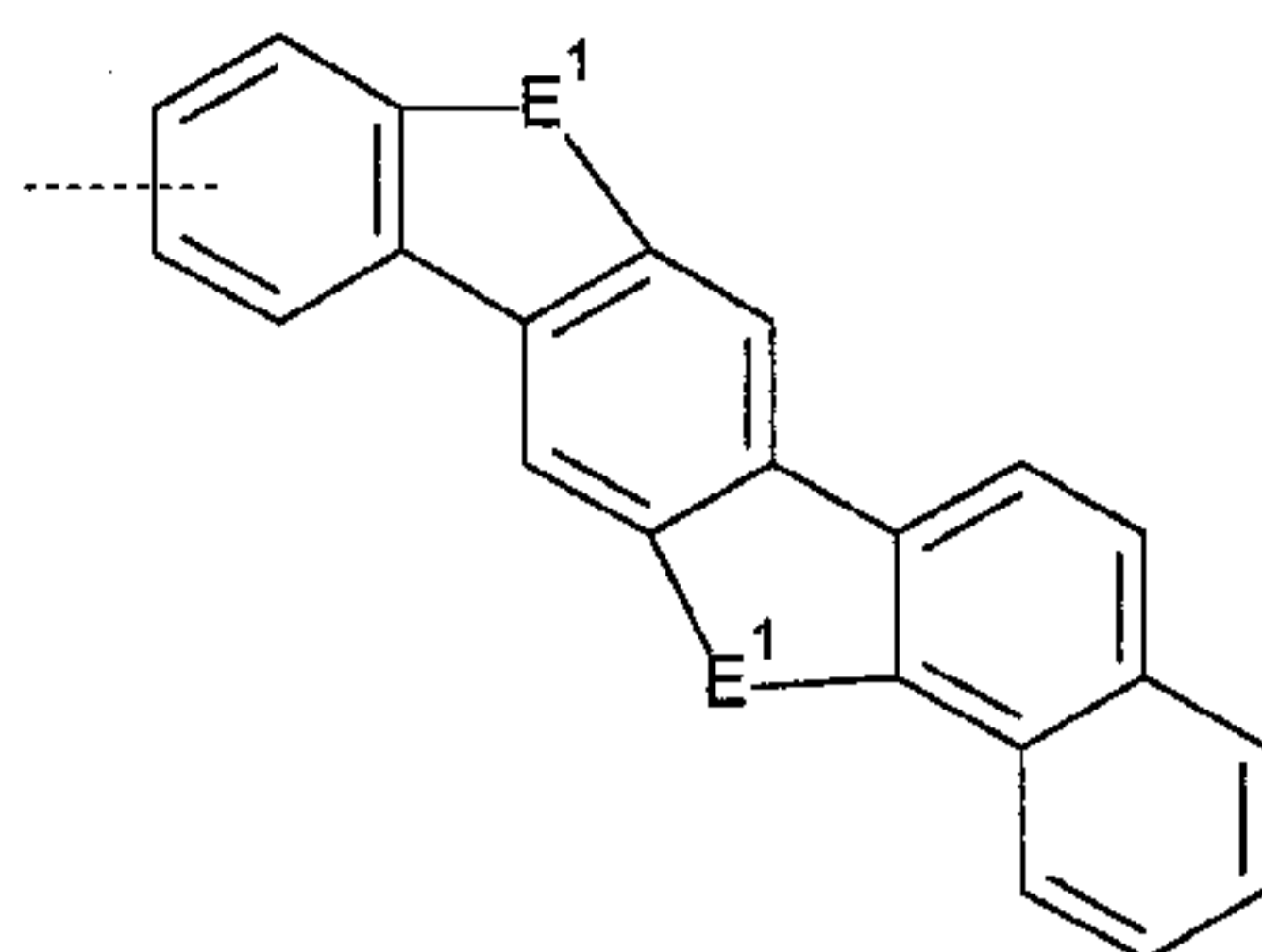
(Ar3-8)



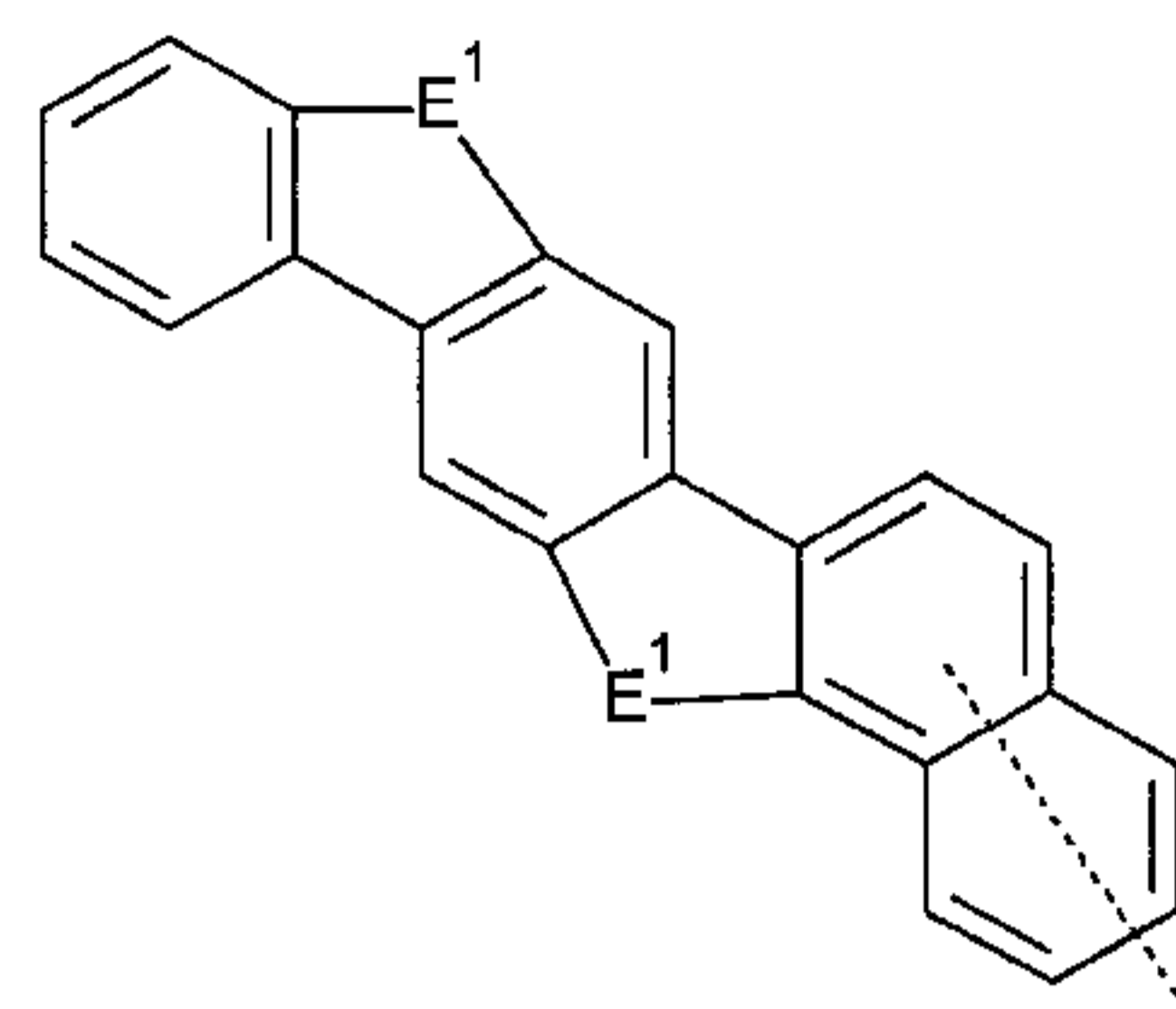
(Ar3-9)



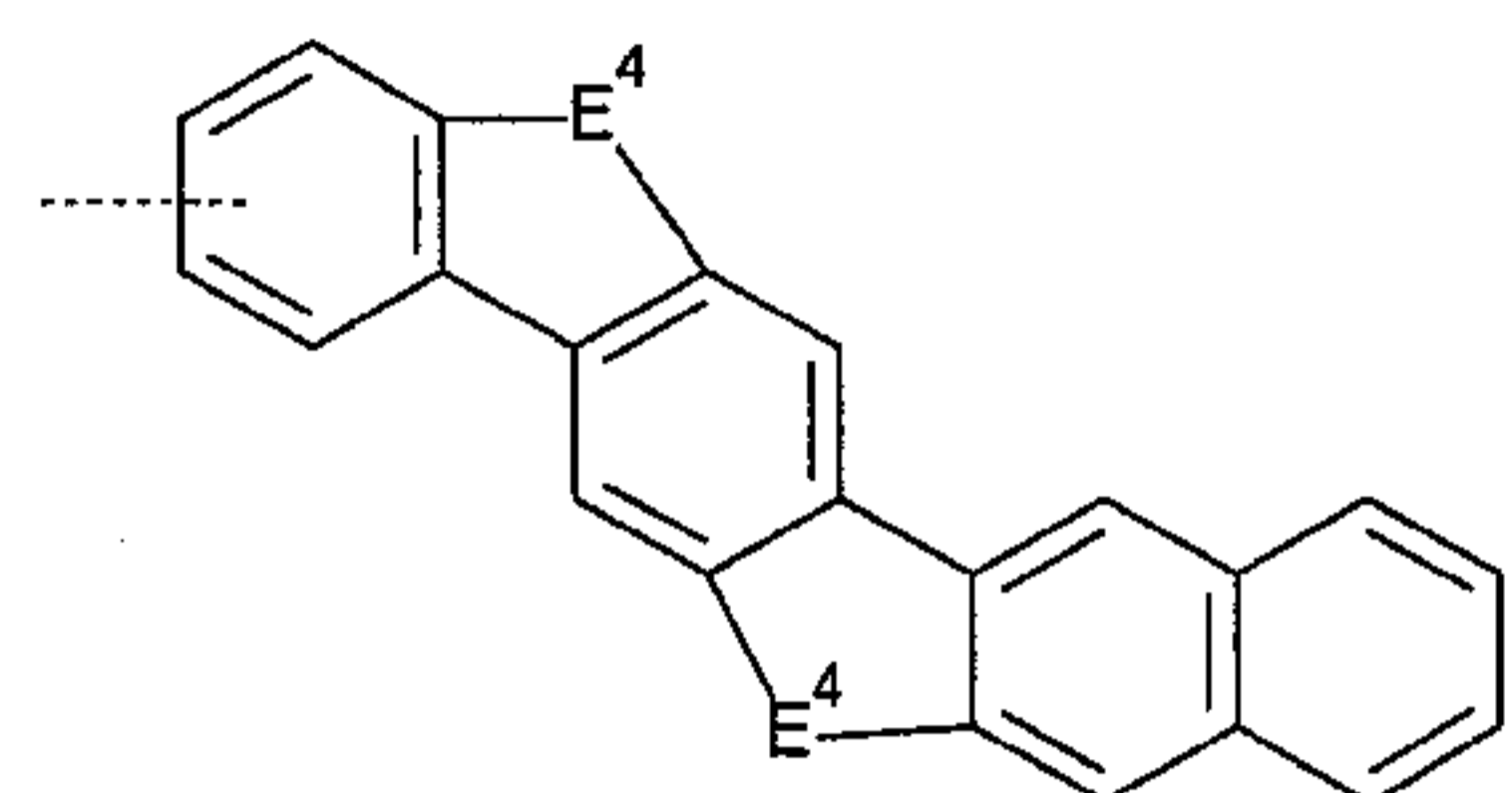
(Ar3-10)



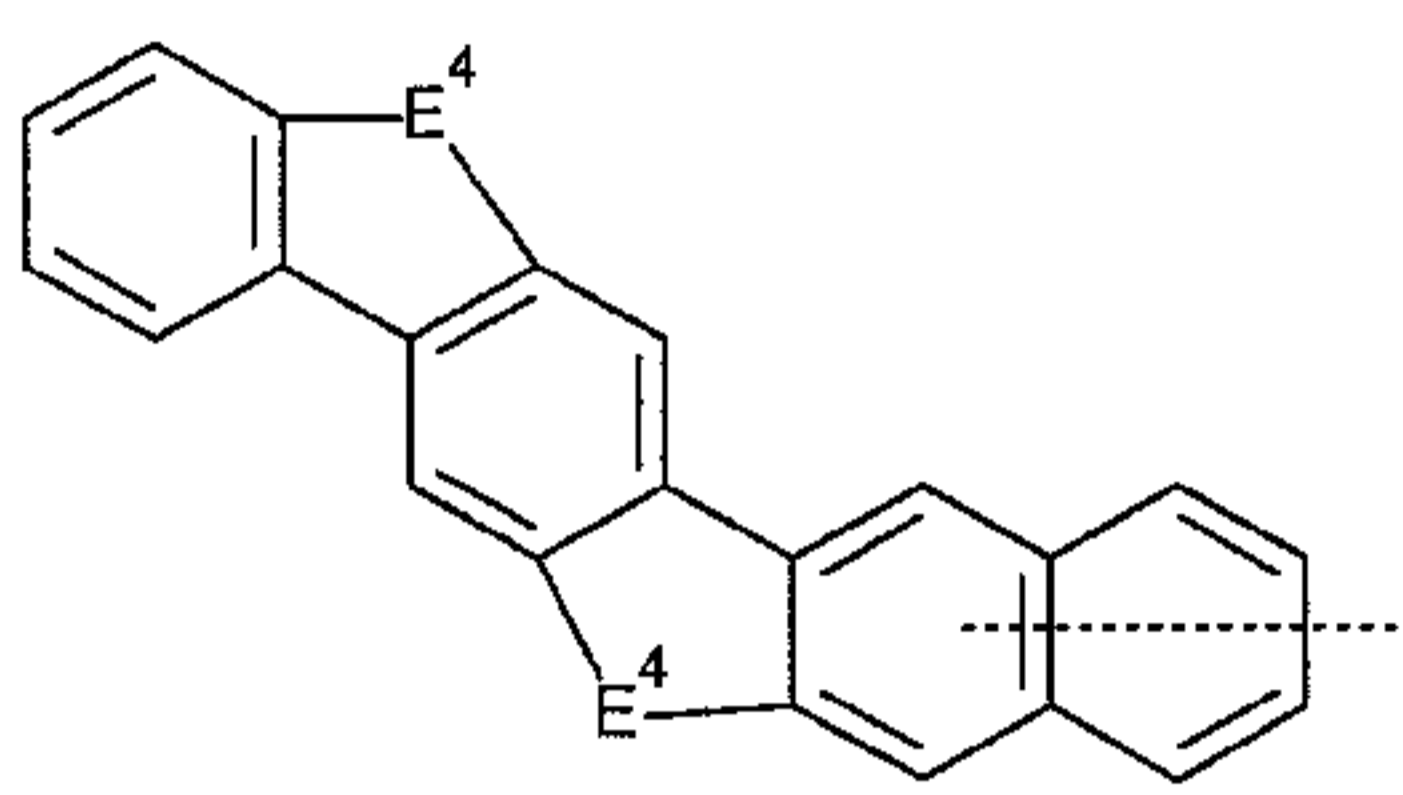
(Ar3-11)



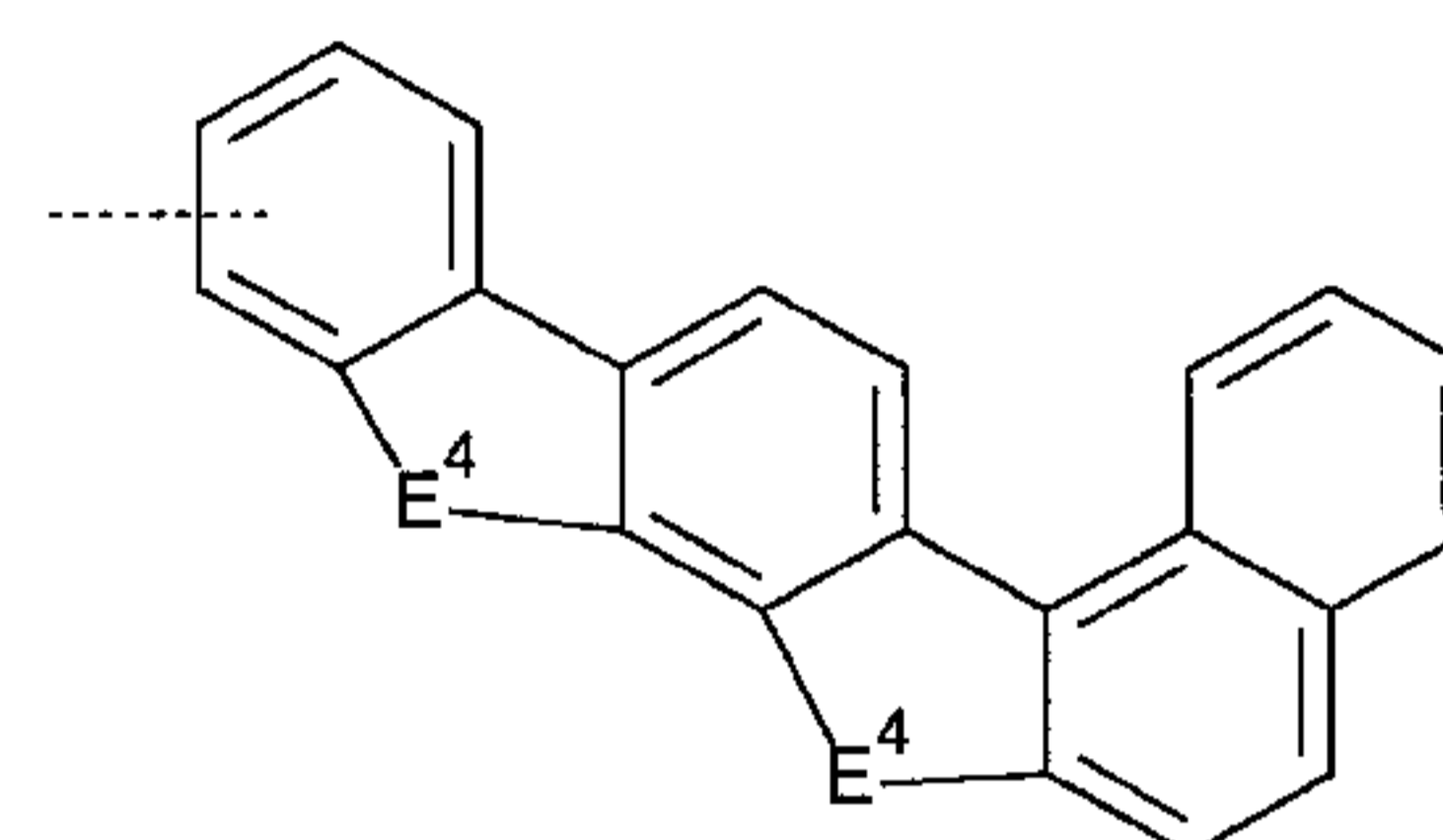
(Ar3-12)



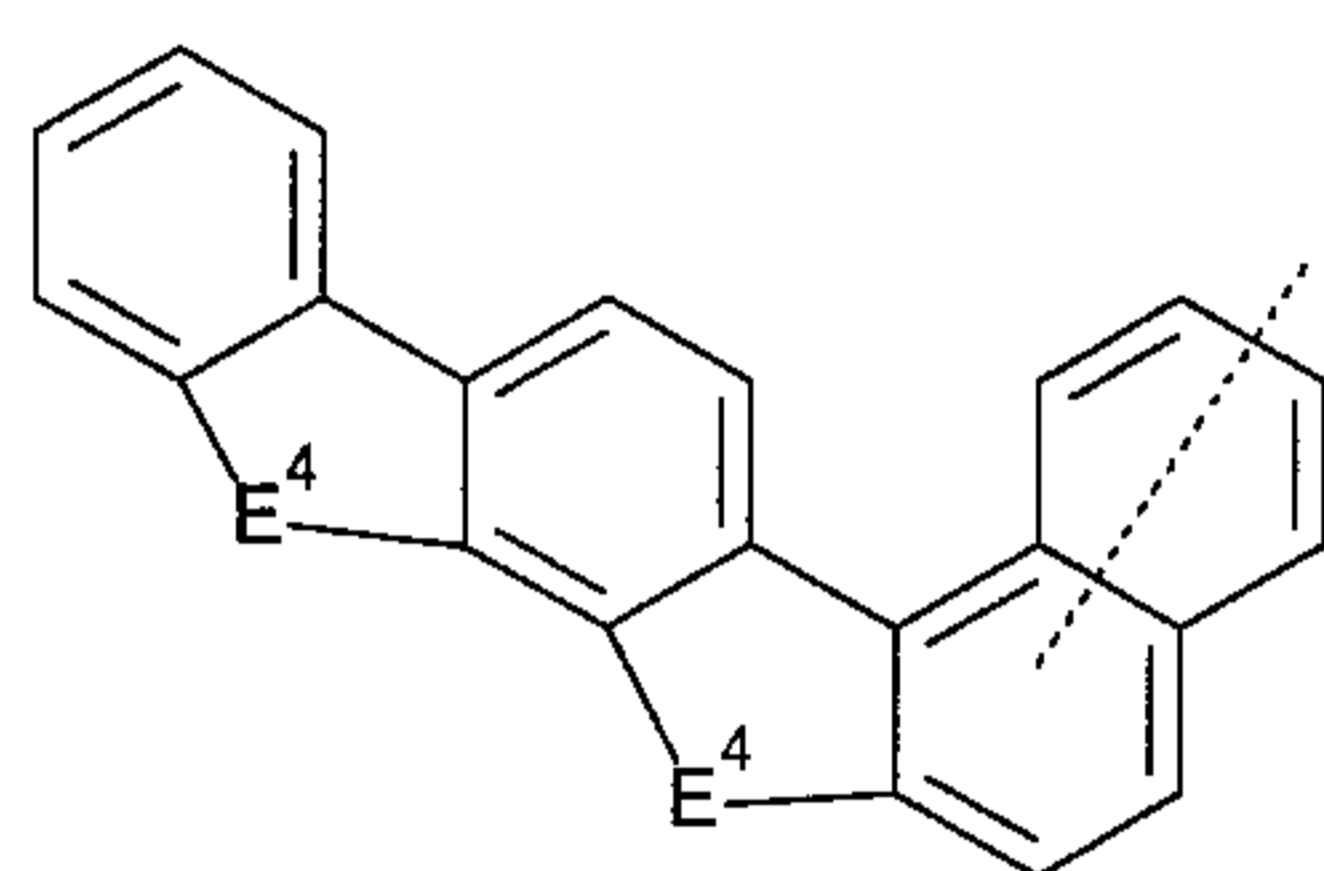
(Ar3-13)



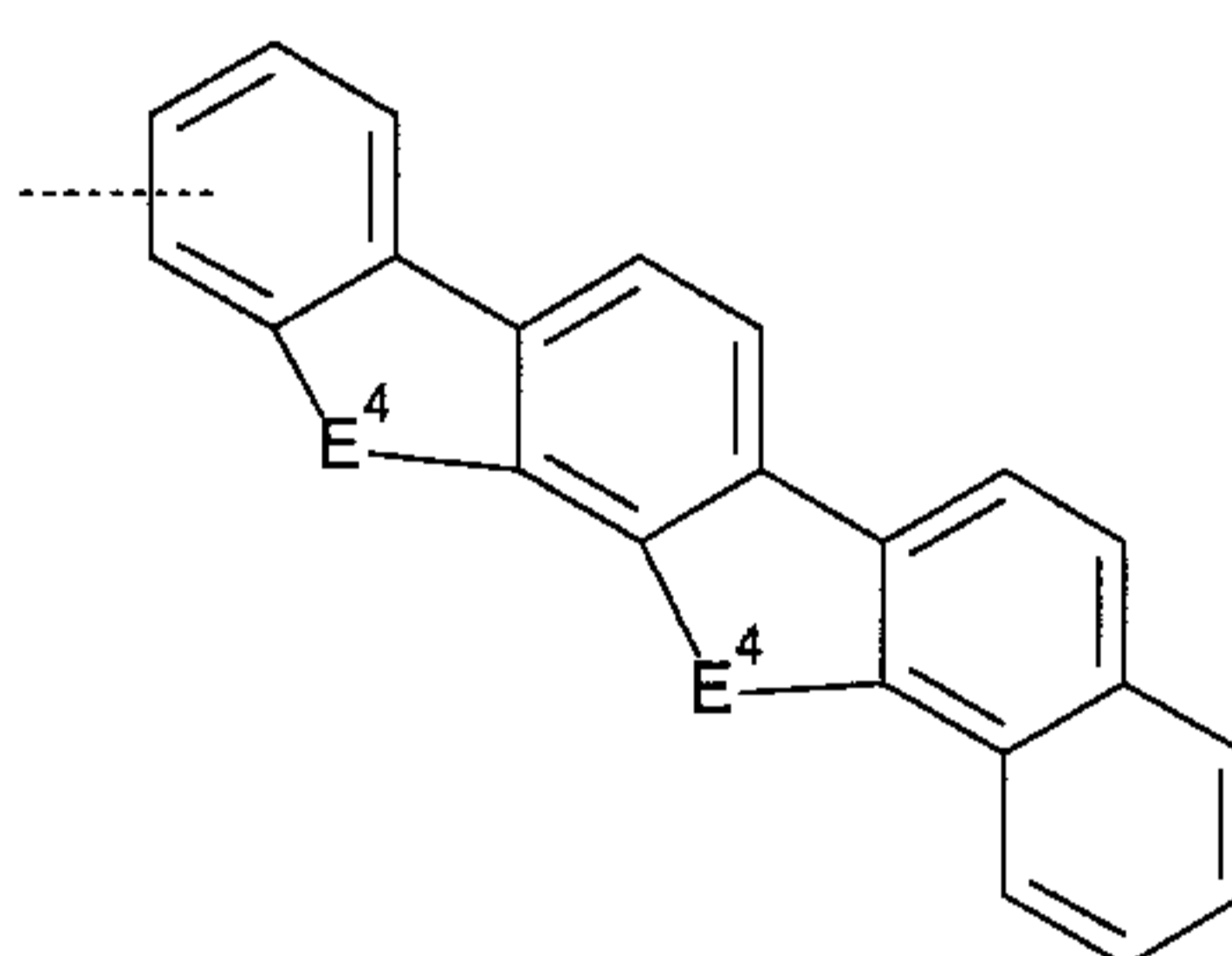
(Ar3-14)



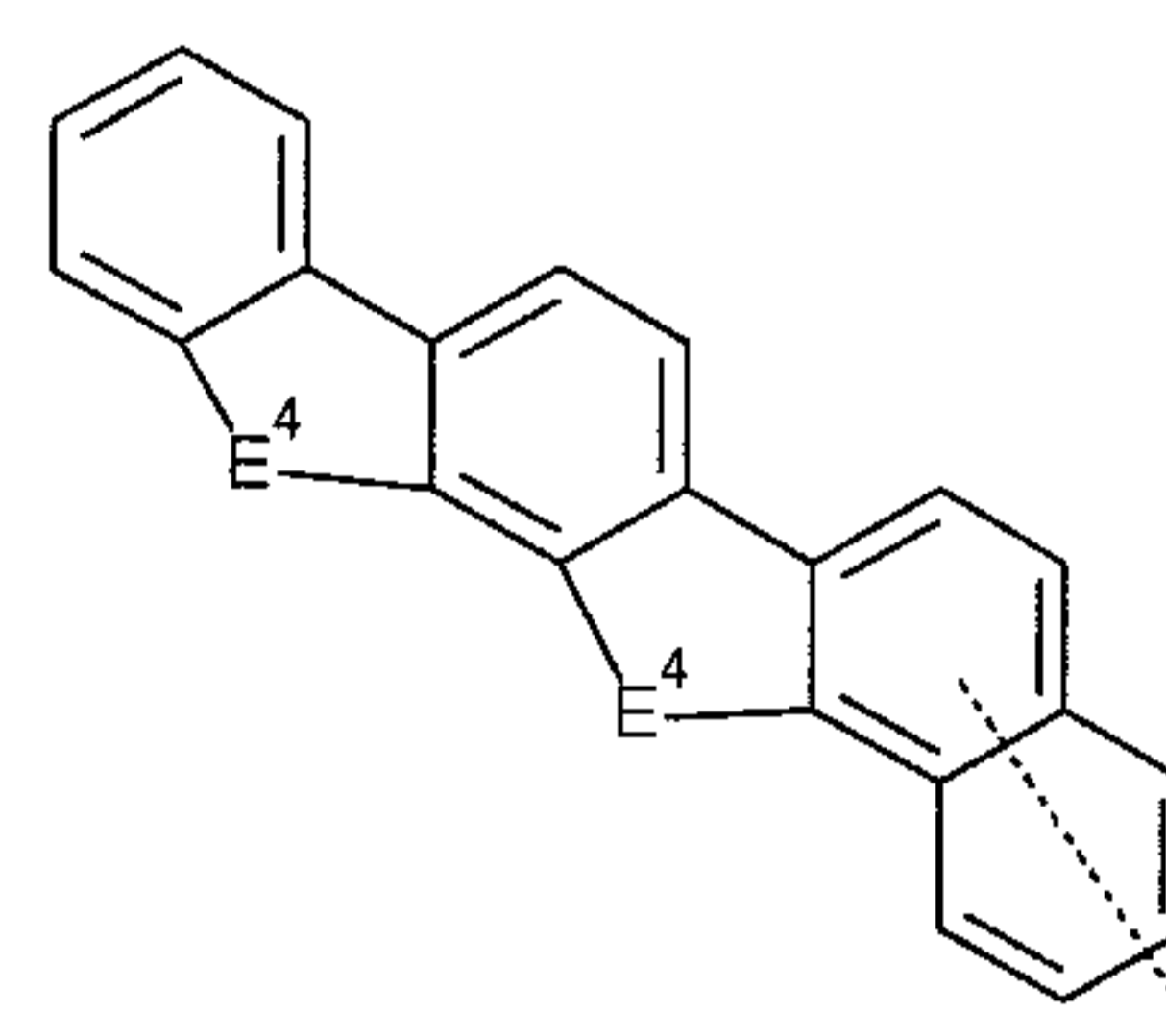
(Ar3-15)



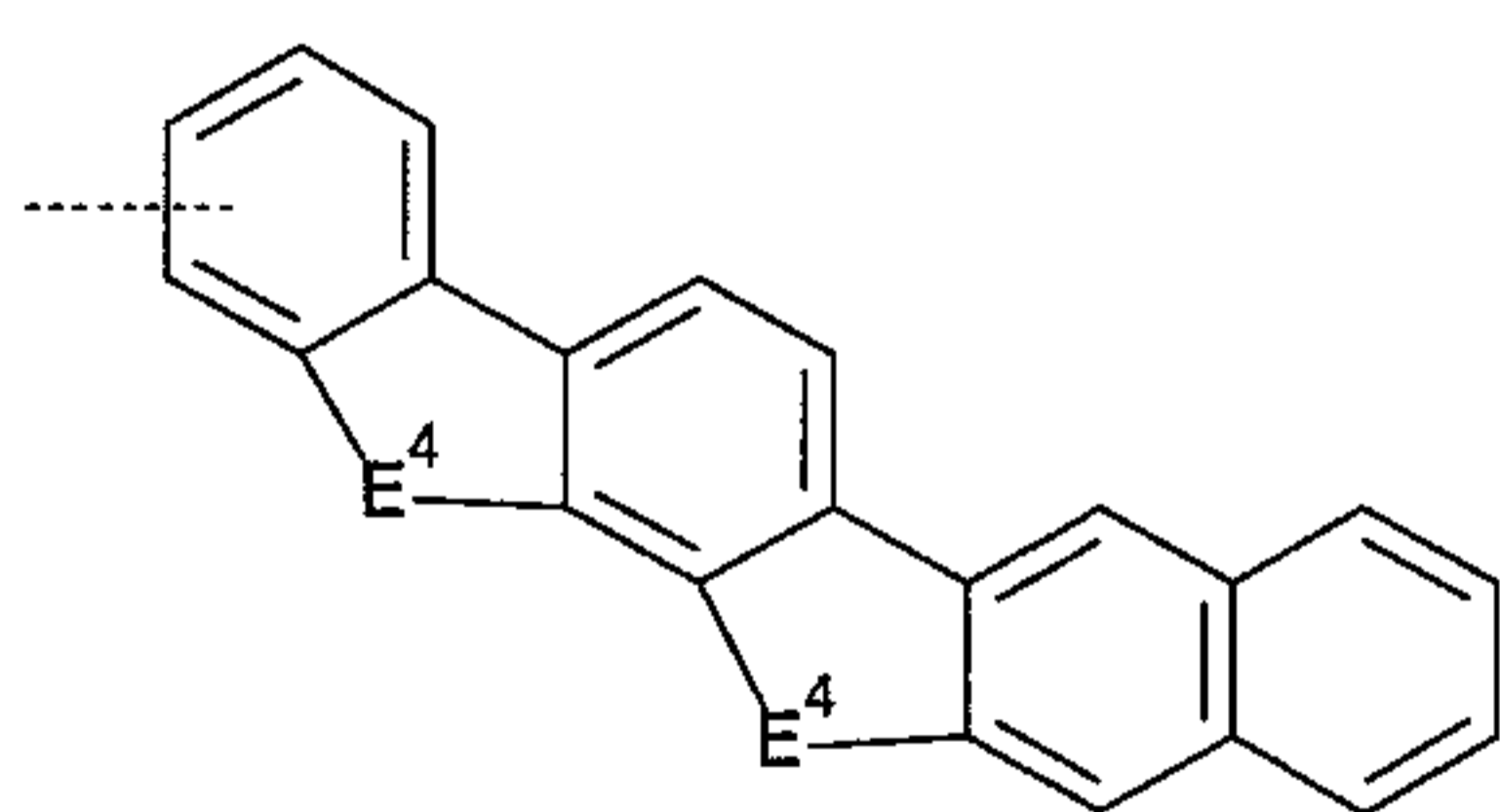
(Ar3-16)



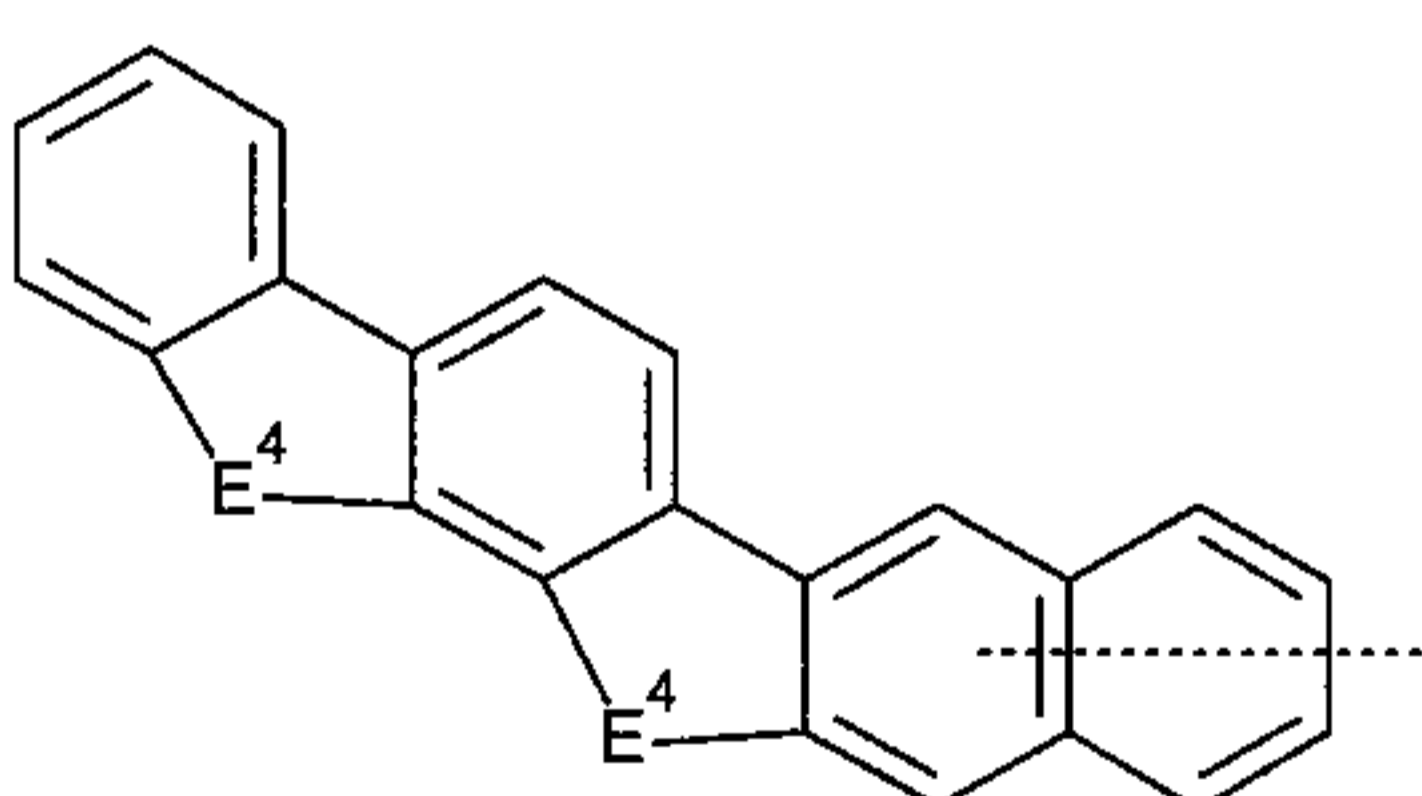
(Ar3-17)



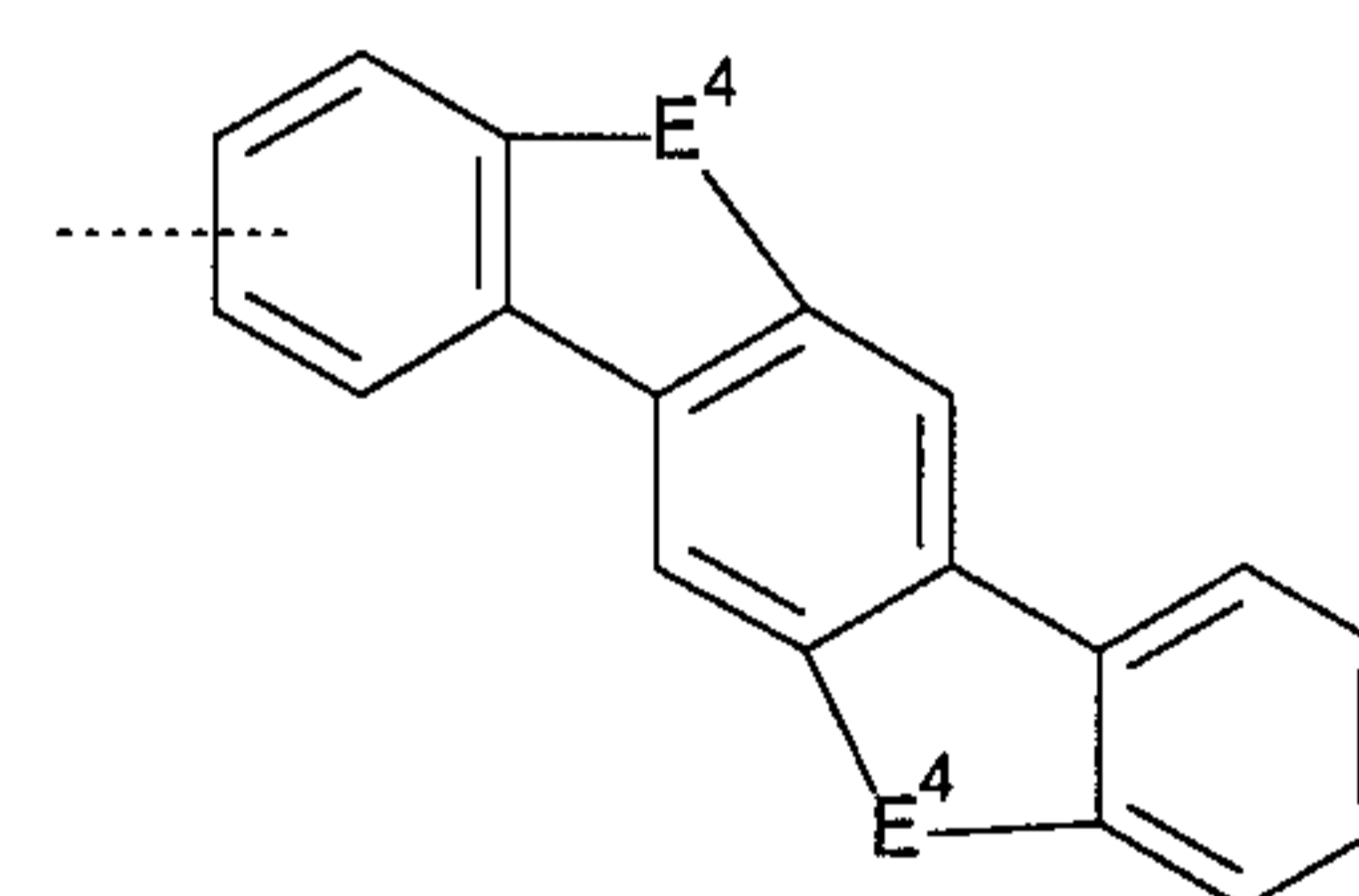
(Ar3-18)



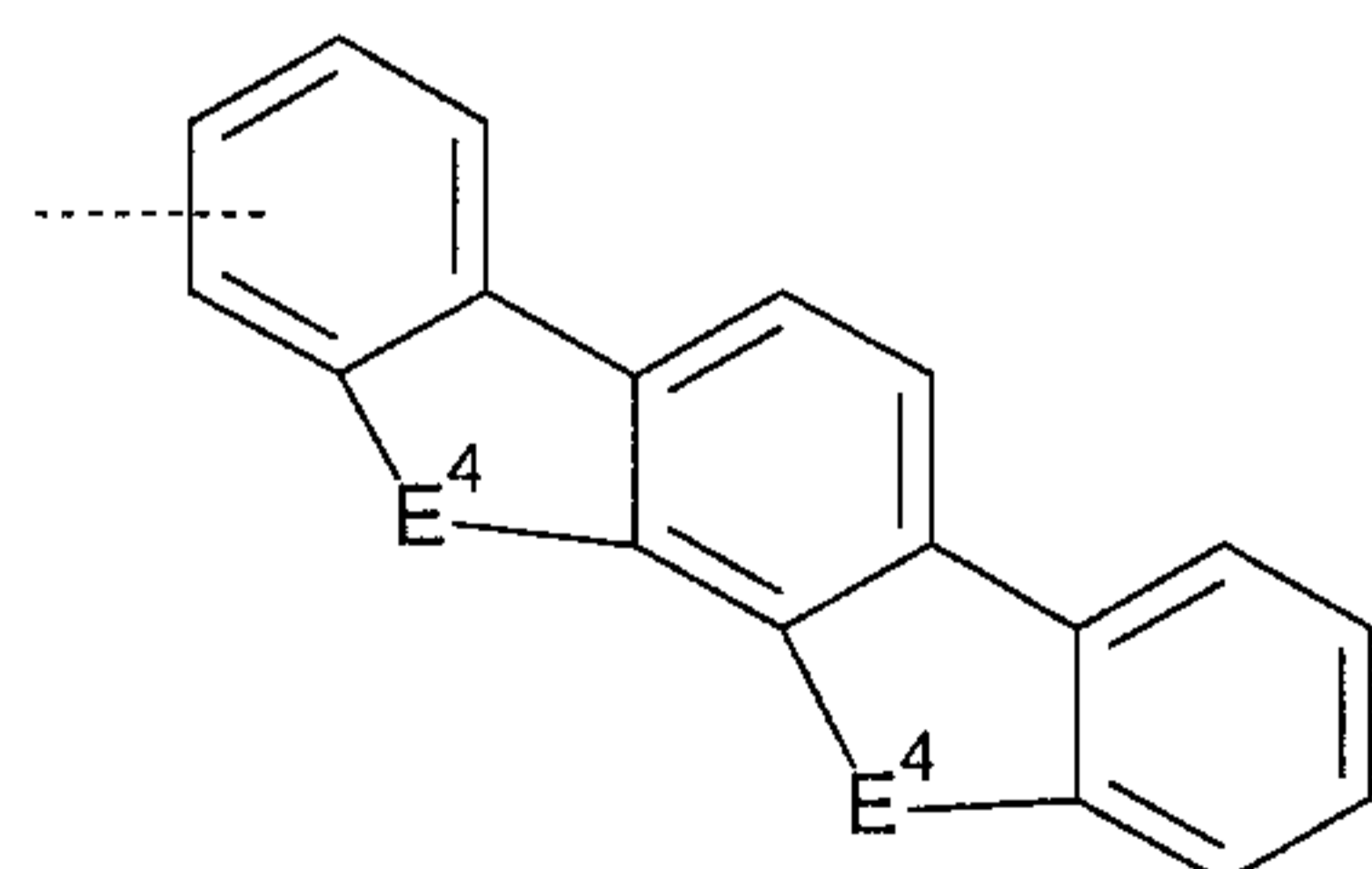
(Ar3-19)



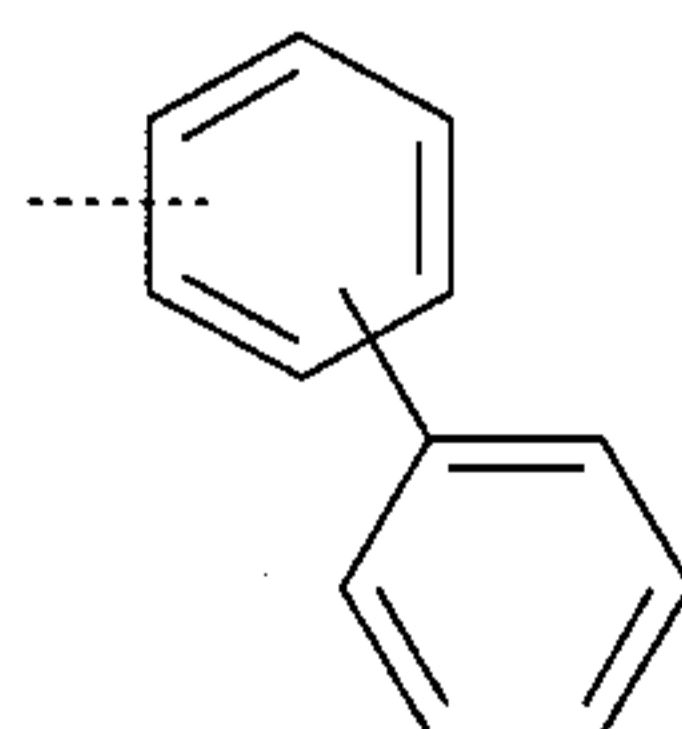
(Ar3-20)



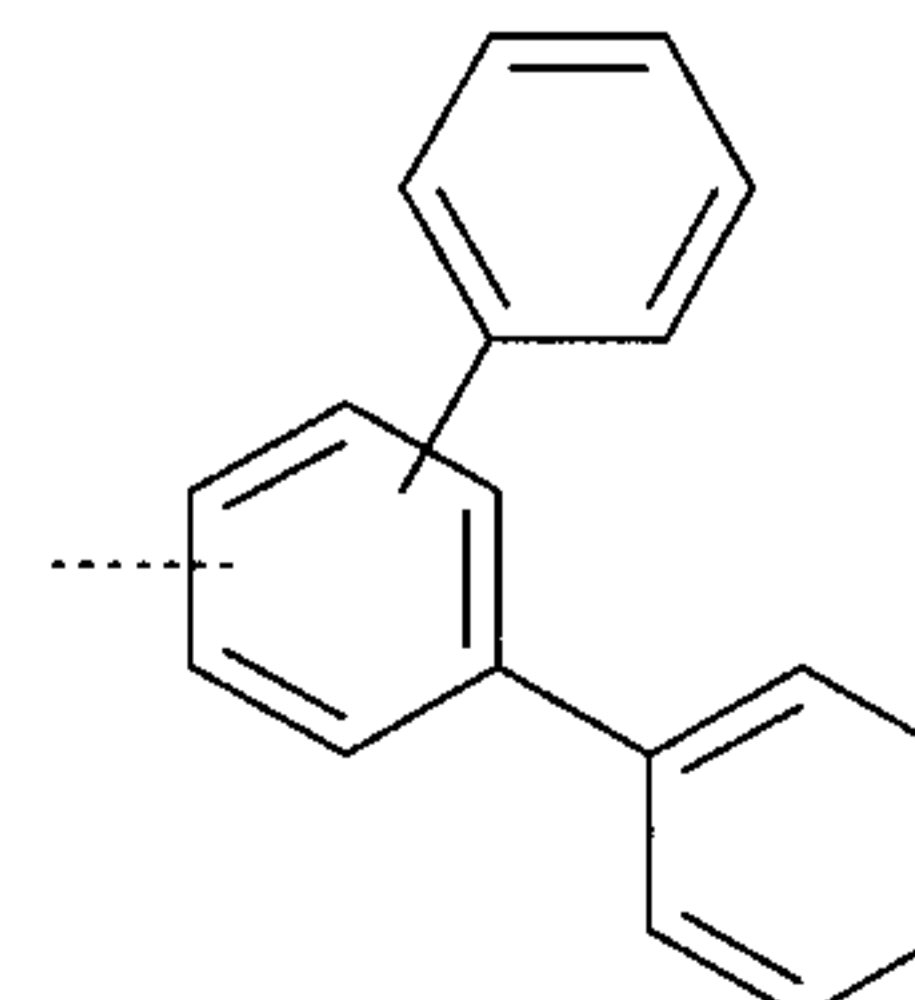
(Ar3-21)



(Ar3-22)

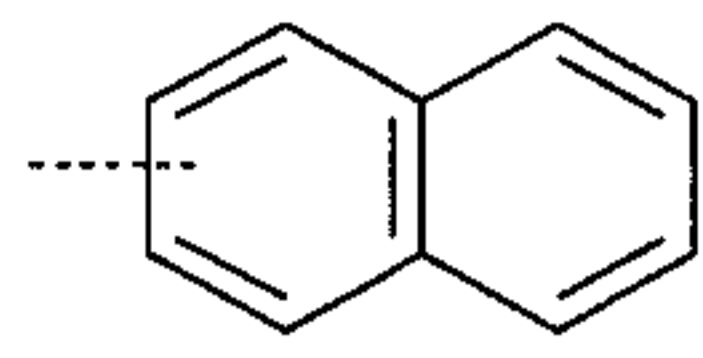


(Ar3-23)

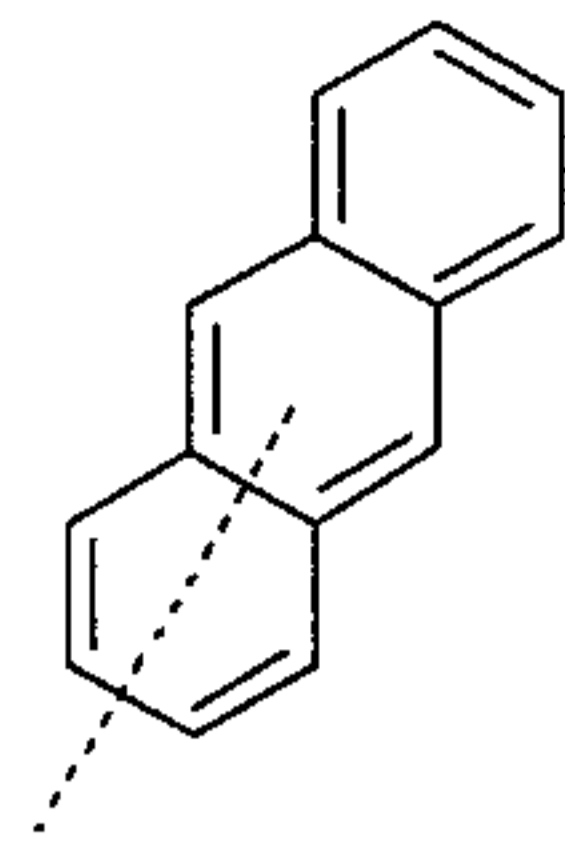


(Ar3-24)

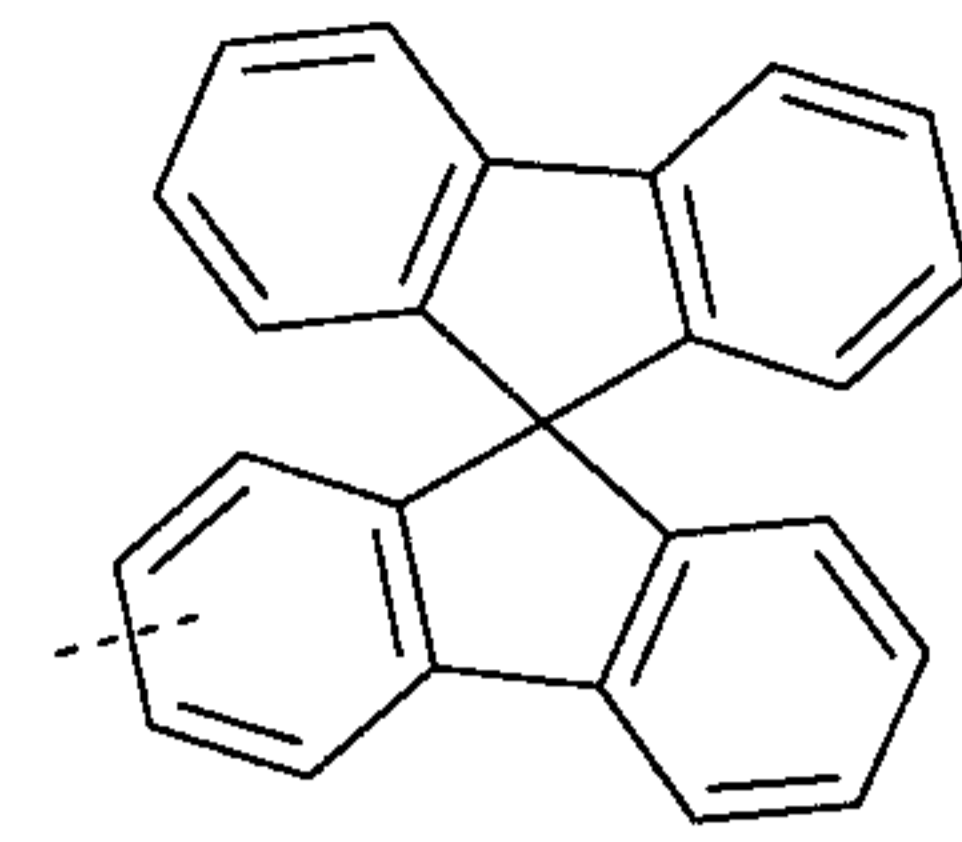




(Ar3-25)



(Ar3-26)



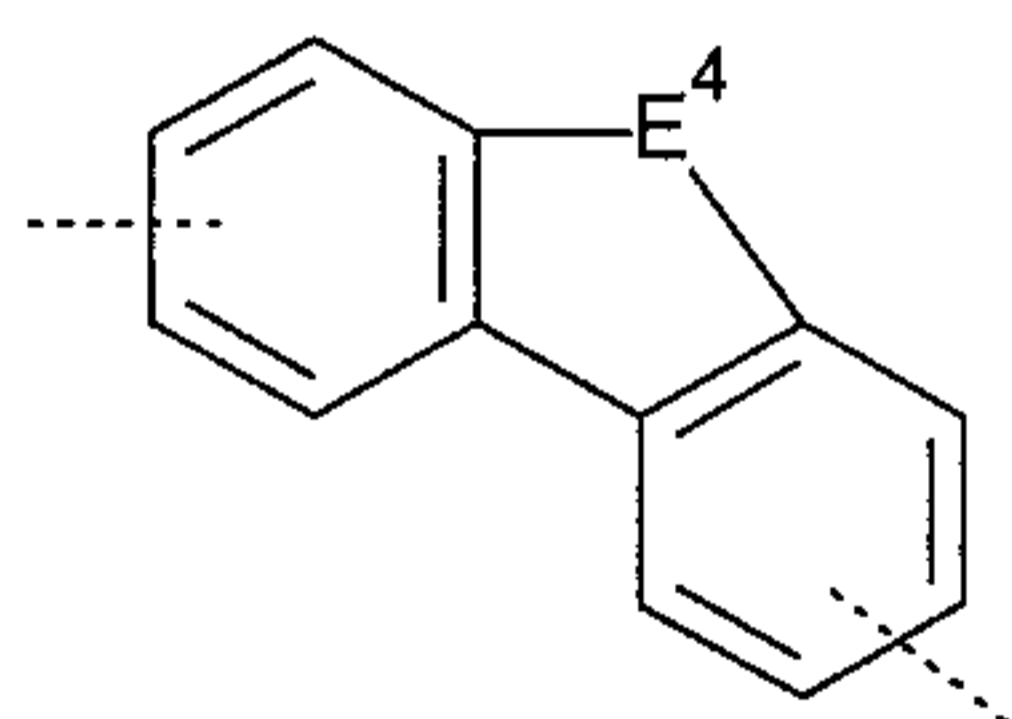
(Ar3-27)

其中虛線鍵表示至  $\text{Ar}^2$  之鍵結，且其中  $\text{E}^4$  具有如上之相同含意，及式 (Ar3-1) 至 (Ar3-27) 之基團可在各自由位置經基團  $\text{R}$  取代，該基團  $\text{R}$  具有如上之相同含意。

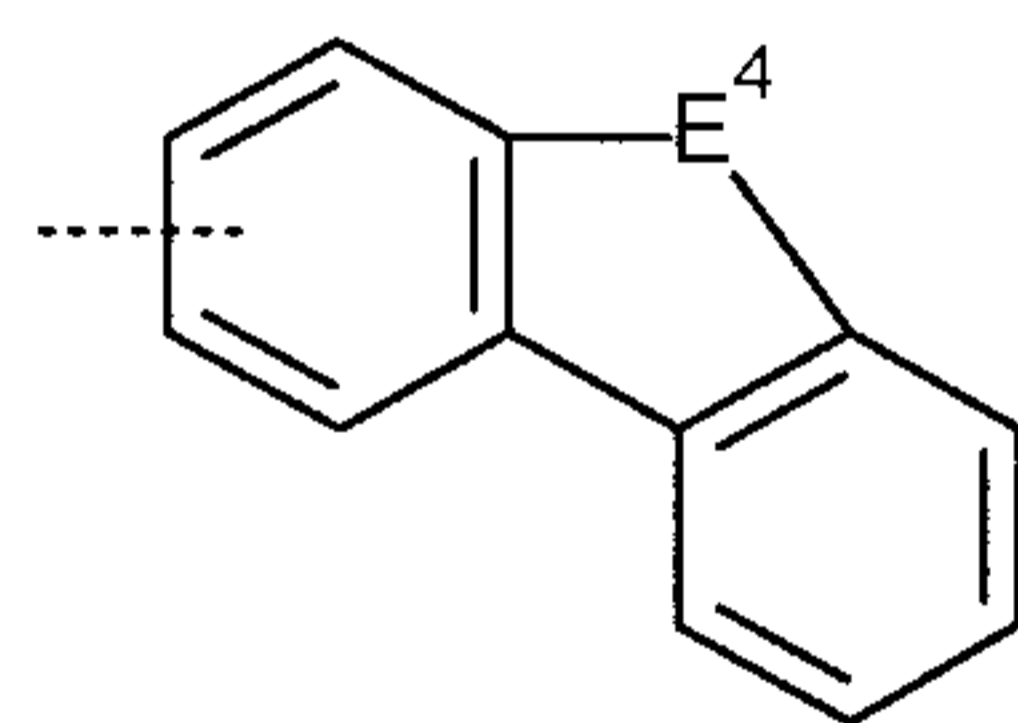
在式 (Ar3-1) 至 (Ar3-27) 中，下列式係較佳的：

(Ar3-1)、(Ar3-2)、(Ar3-23)、(Ar3-24)、(Ar3-25) 及 (Ar3-27)。

根據較佳實施例，至少一個基團  $\text{Ar}^2$  代表式 (Ar2-2) 之基團及 / 或至少一個基團  $\text{Ar}^3$  代表式 (Ar3-2) 之基團，



(Ar2-2)



(Ar3-2)

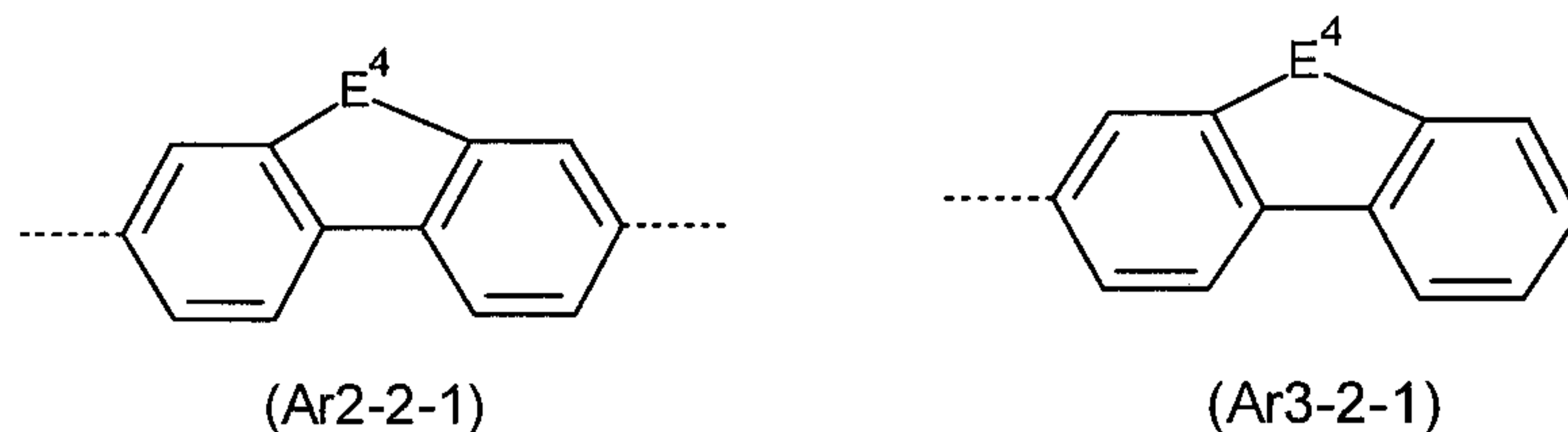
其中

式 (Ar2-2) 中之虛線鍵表示至式 (1) 結構及至基團  $\text{Ar}^2$  或  $\text{Ar}^3$  之鍵結；及式 (Ar3-2) 中之虛線鍵表示至基團  $\text{Ar}^2$  之鍵結；且  $\text{E}^4$  具有如上之相同含意；及式 (Ar2-2) 及 (Ar3-2) 之基團可在各自由位置經基團  $\text{R}$  取代，該基團  $\text{R}$  具有如上之相同含意。

根據非常佳的實施例，至少一個基團  $\text{Ar}^2$  代表式 (Ar2-2-1) 之基團及 / 或至少一個基團  $\text{Ar}^3$  代表式 (Ar3-2-1) 之基



團，



其中

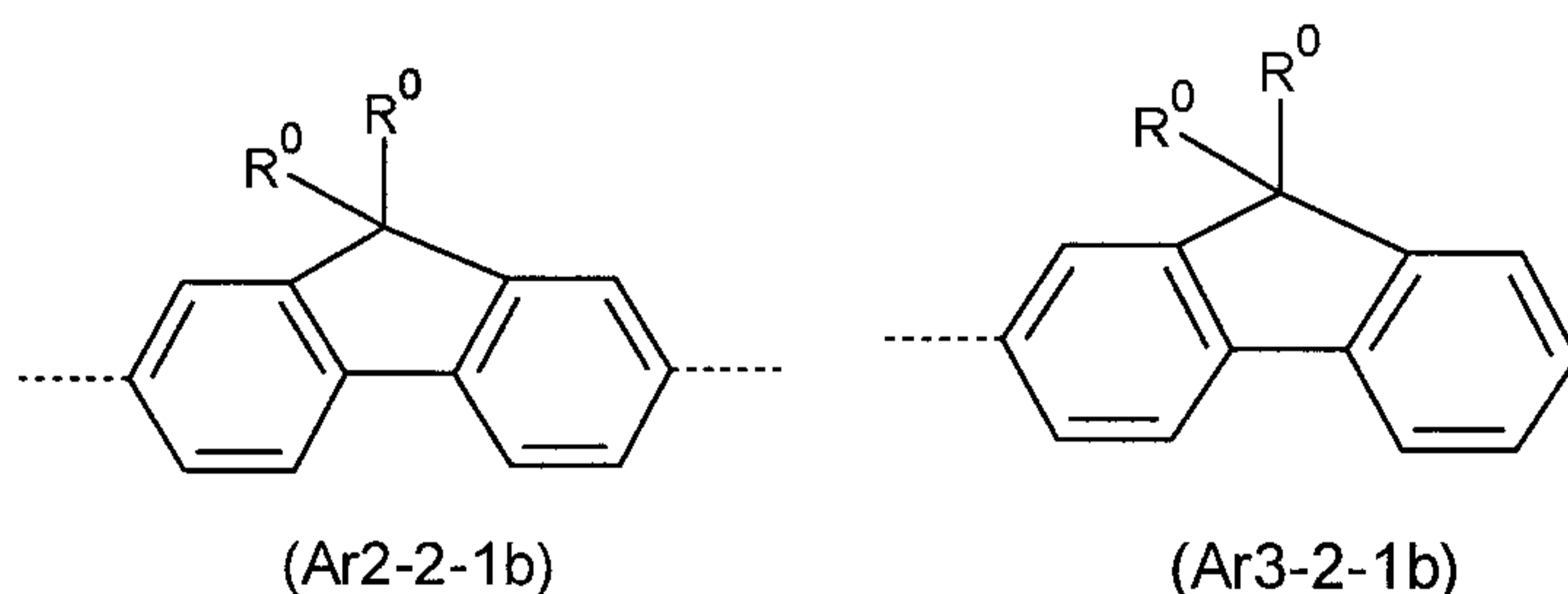
式 (Ar2-2-1) 中之虛線鍵表示至式 (1) 結構及至基團  $Ar^2$  或  $Ar^3$  之鍵結；

式 (Ar3-2-1) 中之虛線鍵表示至  $Ar^2$  之鍵結；

$E^4$  具有如上之相同含意；及

式 (Ar2-2-1) 及 (Ar3-2-1) 之基團可在各自由位置經基團  $R$  取代，該基團  $R$  具有如上之相同含意。

根據特佳的實施例，至少一個基團  $Ar^2$  代表式 (Ar2-2-1b) 之基團及 / 或至少一個基團  $Ar^3$  代表式 (Ar3-2-1b) 之基團，



其中

式 (Ar2-2-1b) 中之虛線鍵表示至式 (1) 結構及至基團  $Ar^2$  或  $Ar^3$  之鍵結；

式 (Ar3-2-1b) 中之虛線鍵表示至  $Ar^2$  之鍵結；

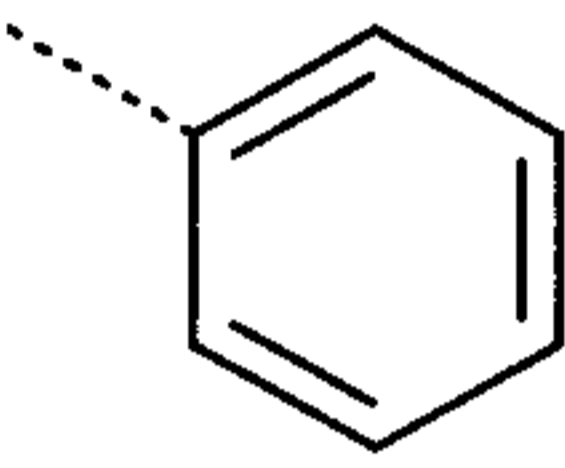
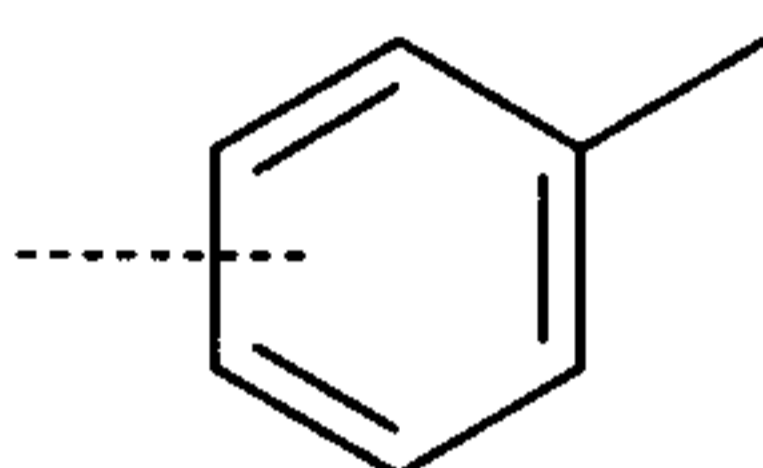
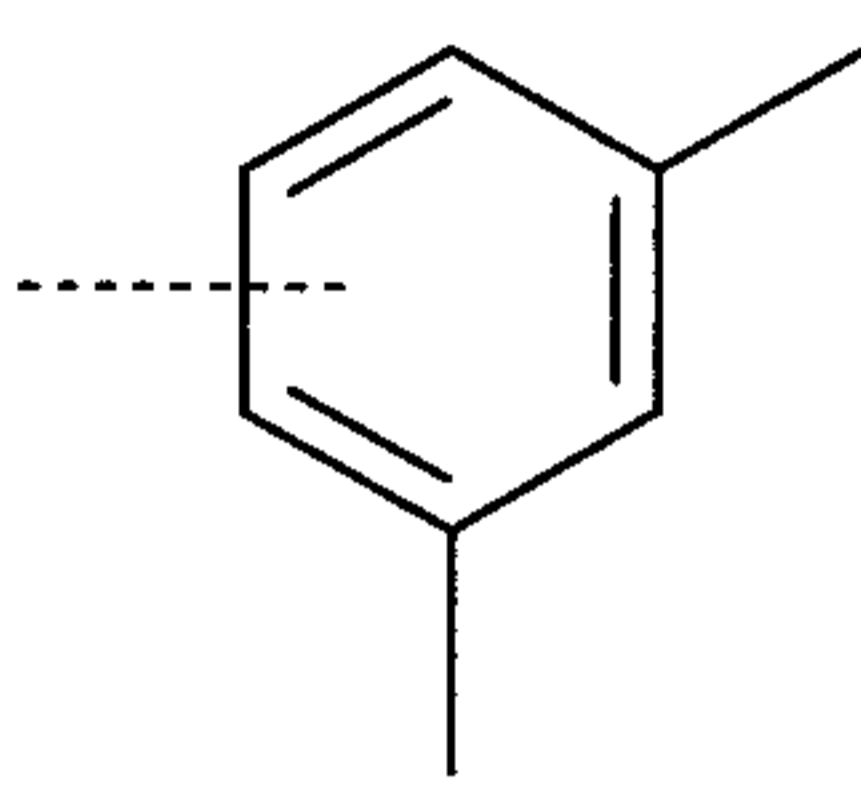
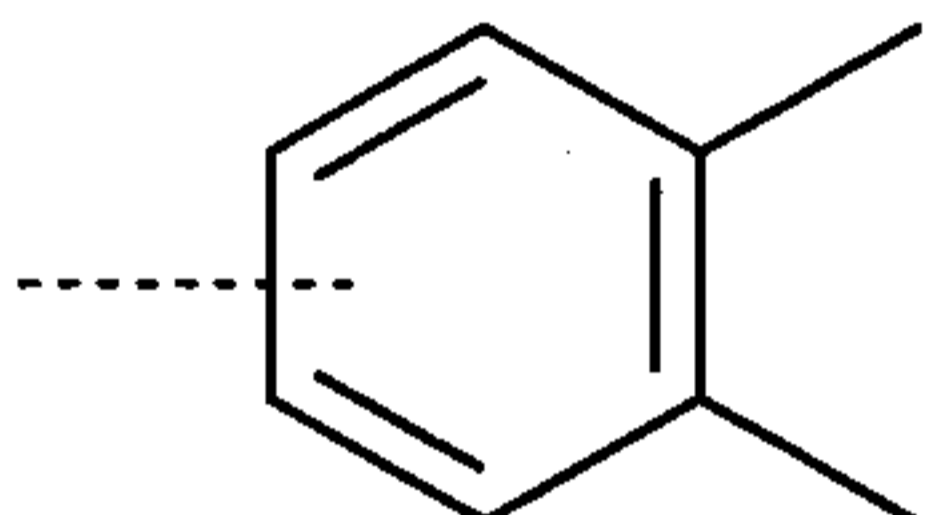
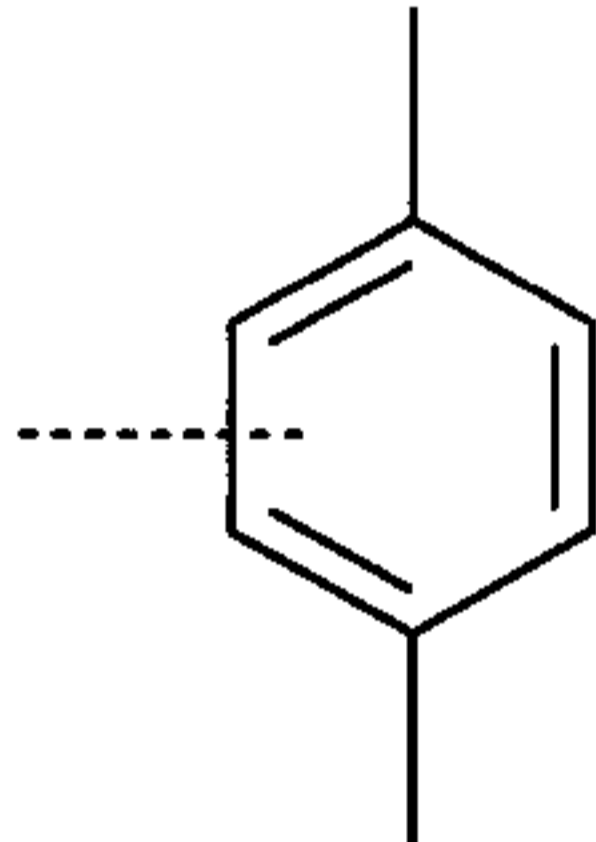
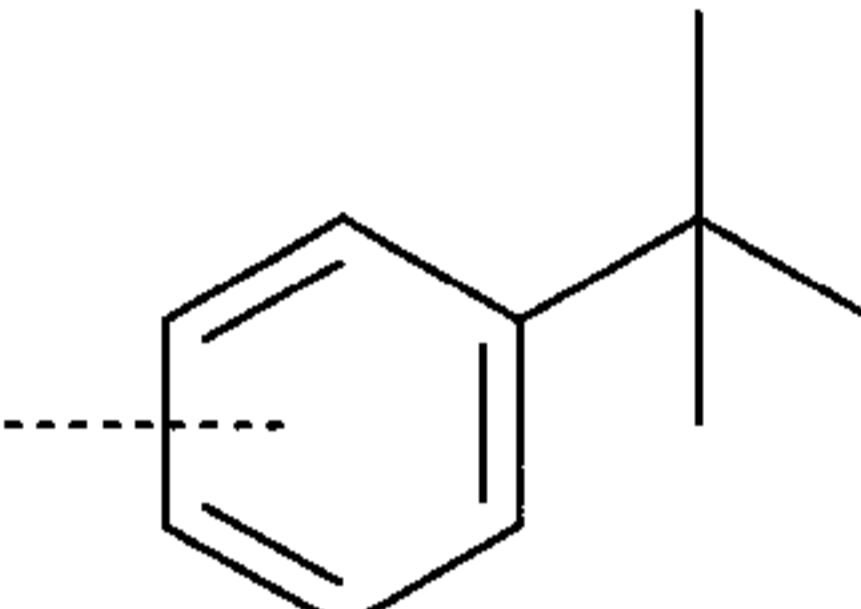
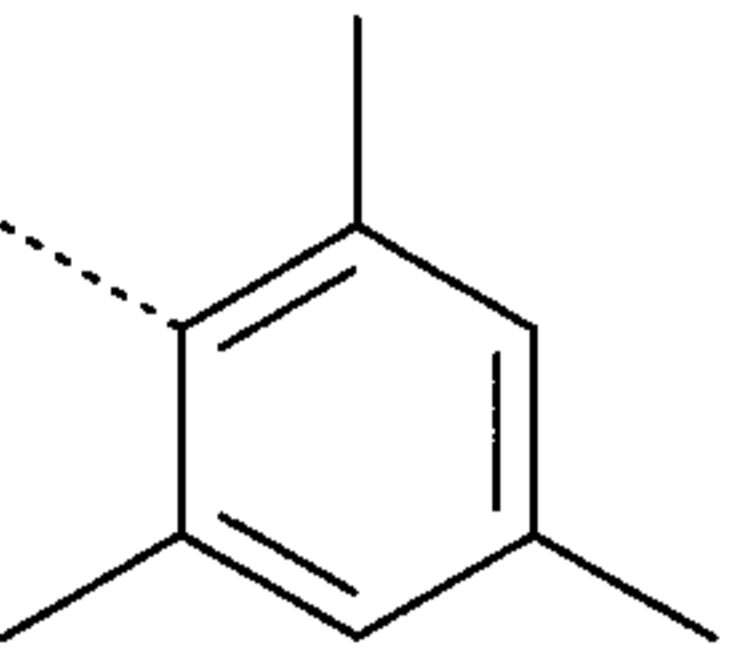
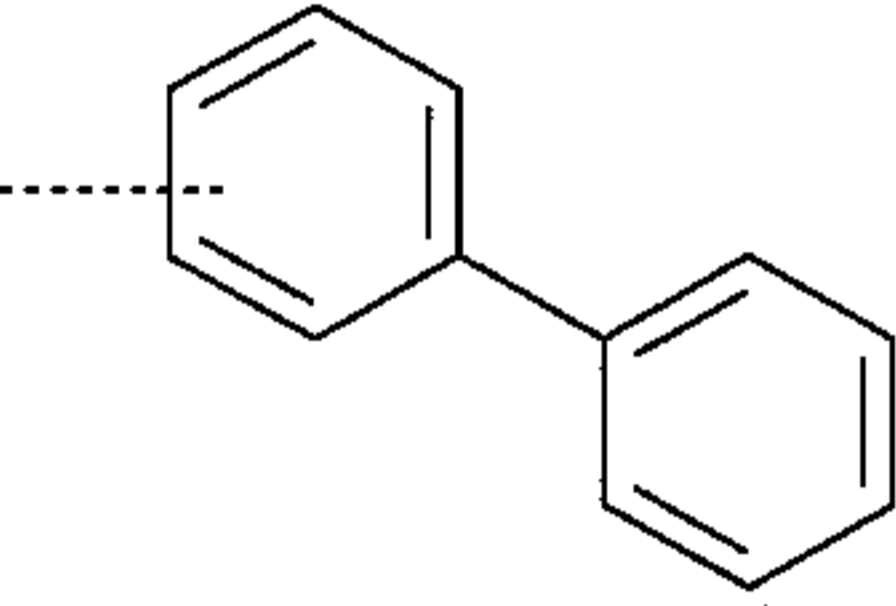
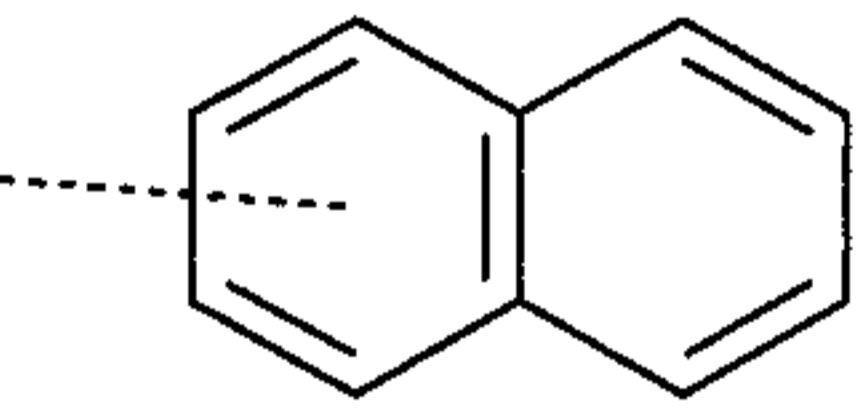
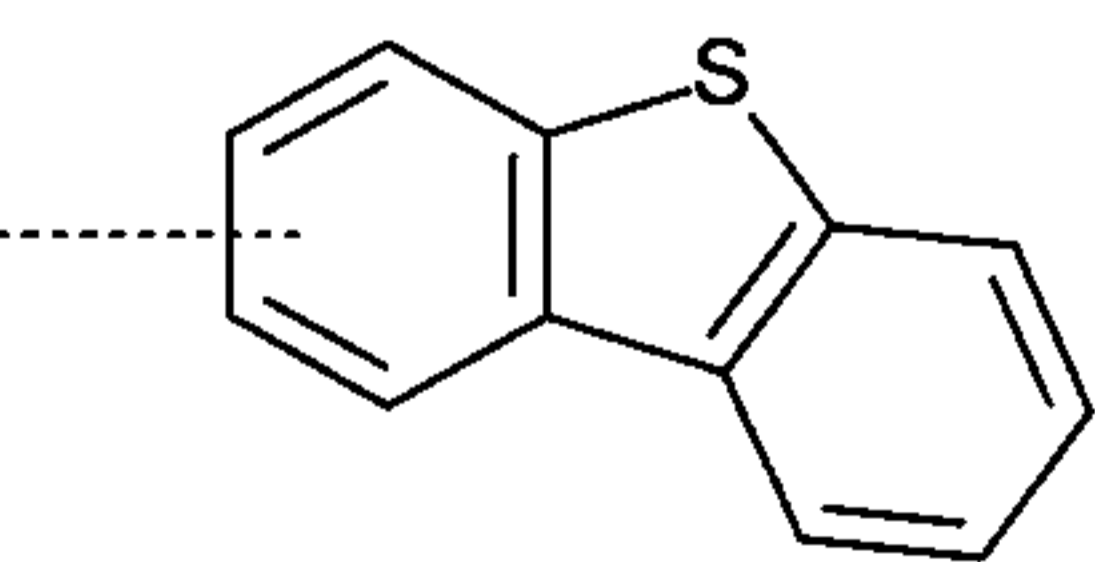
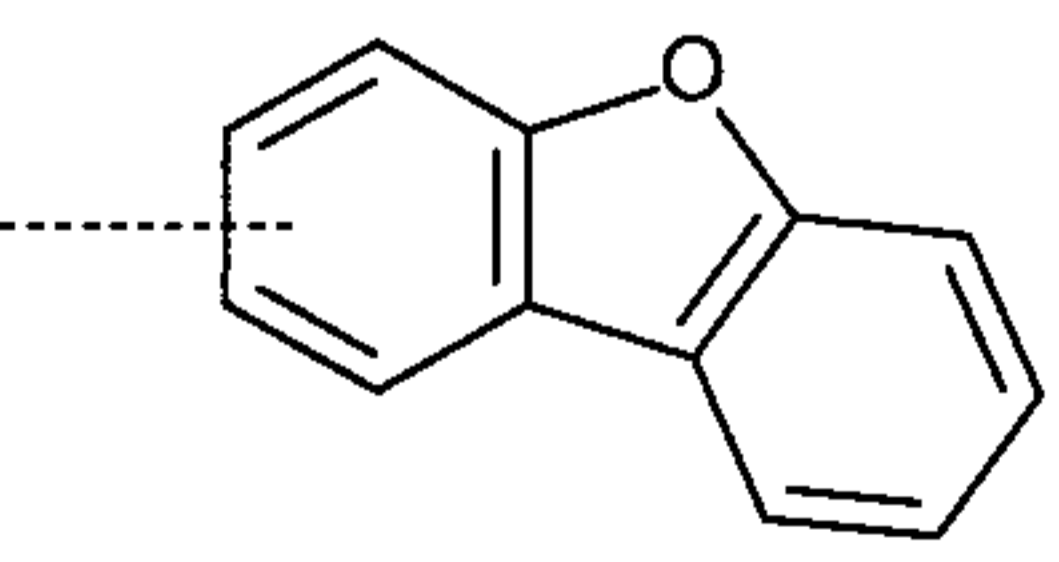
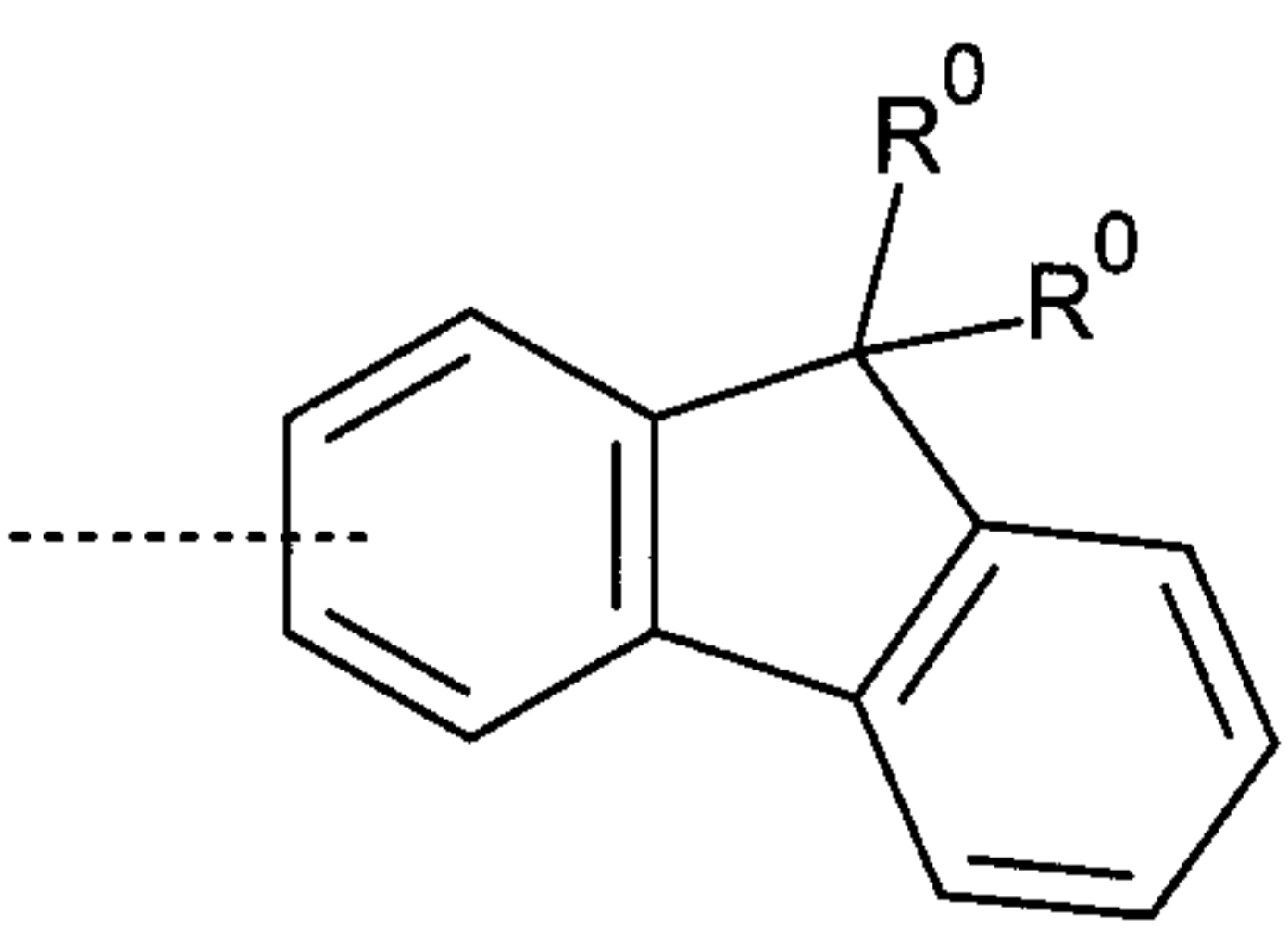
$R^0$  具有如上之相同含意；及

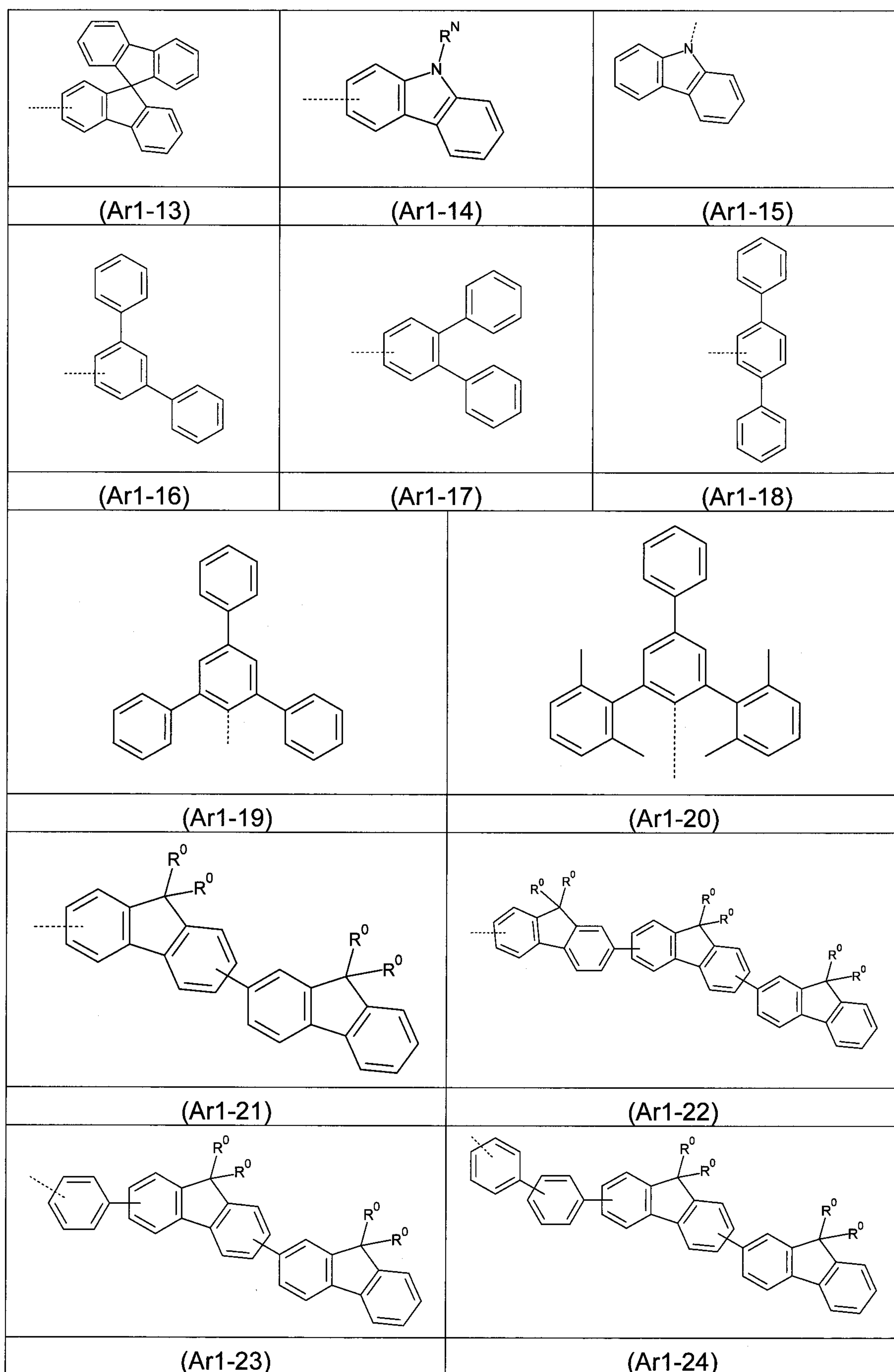
式 (Ar2-2-1b) 及 (Ar3-2-1b) 之基團可在各自由位置經基



團 **R** 取代，該基團 **R** 具有如上之相同含意。

非常合適的基團  $R^2$  及  $R^A$  之實例係 **H**、**D**、**F**、**CN**、經取代及未經取代之具有 1 至 10 個 **C** 原子之直鏈烷基，更特別地係甲基、乙基、丙基、丁基、經取代及未經取代之具有 3 至 10 個 **C** 原子之直鏈或環狀烷基，更特別地係 **t**-丁基、以及選自式 (Ar1-1) 至 (Ar1-24) 之基團的芳族或雜芳族環系統，

		
(Ar1-1)	(Ar1-2)	(Ar1-3)
		
(Ar1-4)	(Ar1-5)	(Ar1-6)
		
(Ar1-7)	(Ar1-8)	(Ar1-9)
		
(Ar1-10)	(Ar1-11)	(Ar1-12)





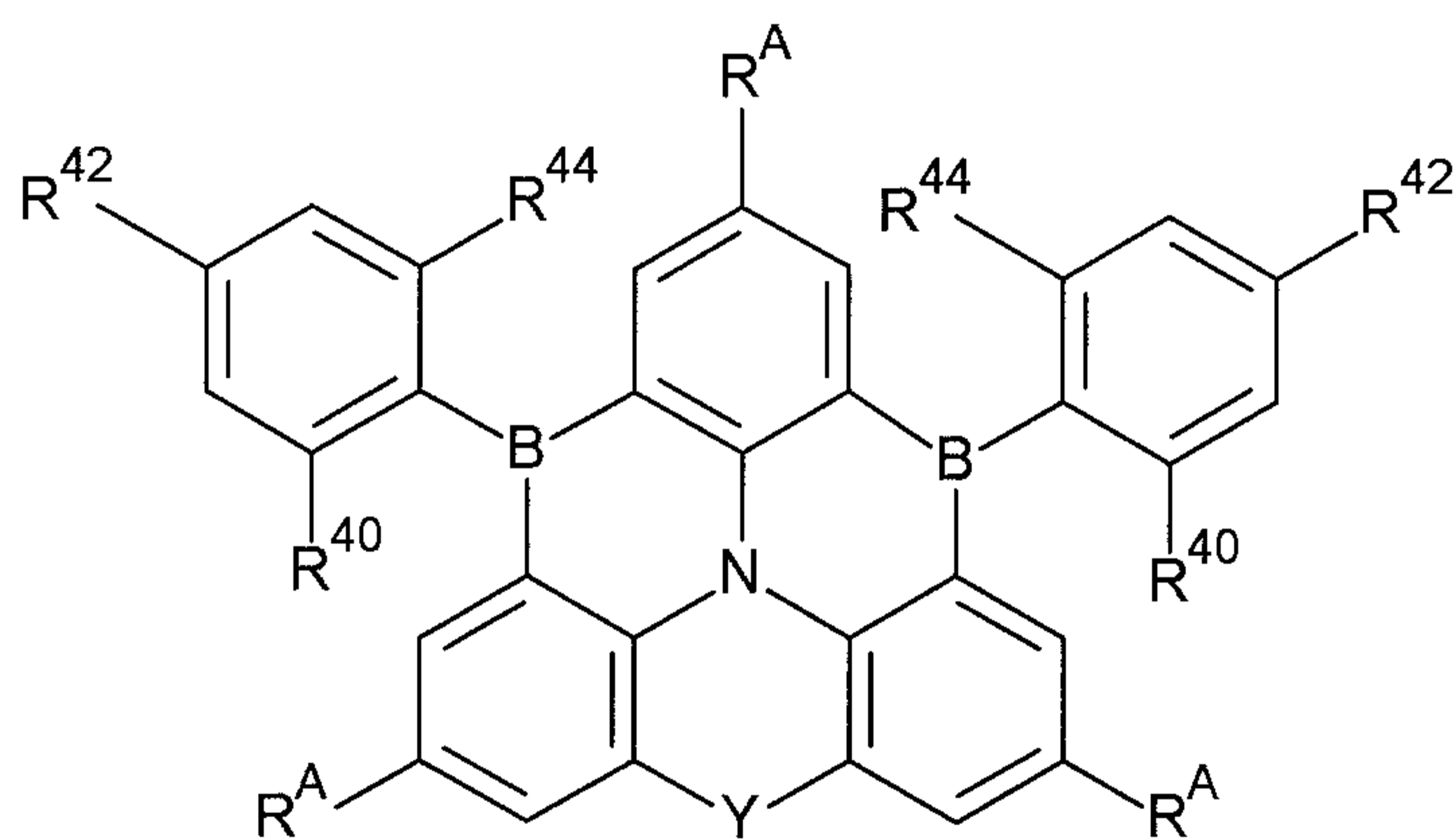
其中在式(Ar1-1)至(Ar1-24)中：

- 虛線鍵表示至式(1)結構之鍵結；
- 式(Ar1-14)中之 $R^N$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、具有1至40個、較佳係1至20個、更佳係1至10個C原子之直鏈烷基、或具有3至40個、較佳係3至20個、更佳係3至10個C原子之支鏈或環狀烷基(其各者可經一或多個基團R取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰 $CH_2$ 基團可經 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、O或S置換，且其中一或多個H原子可經D、F、或CN置換)、或具有5至60個、較佳係5至40個、更佳係5至30個、特佳係5至18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基團R取代)，其中兩個相鄰取代基 $R^N$ 可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團R取代)，其中R具有如請求項1中之相同含意；
- 式(Ar1-12)及(Ar1-21)至(Ar1-24)中之 $R^0$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、CN、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(其各者可經一或多個基團R取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰 $CH_2$ 基團可經 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、O或S置換，且其中一或多個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基團R取代),其中兩個相鄰取代基 $R^0$ 可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團R取代),R具有如上之相同含意;

- 式(Ar1-1)至(Ar1-24)之基團可在各自由位置經基團R取代,該基團R具有如上之相同含意。

根據特佳的實施例,式(1)之化合物係選自式(5)之化合物,



式(5)

其中:

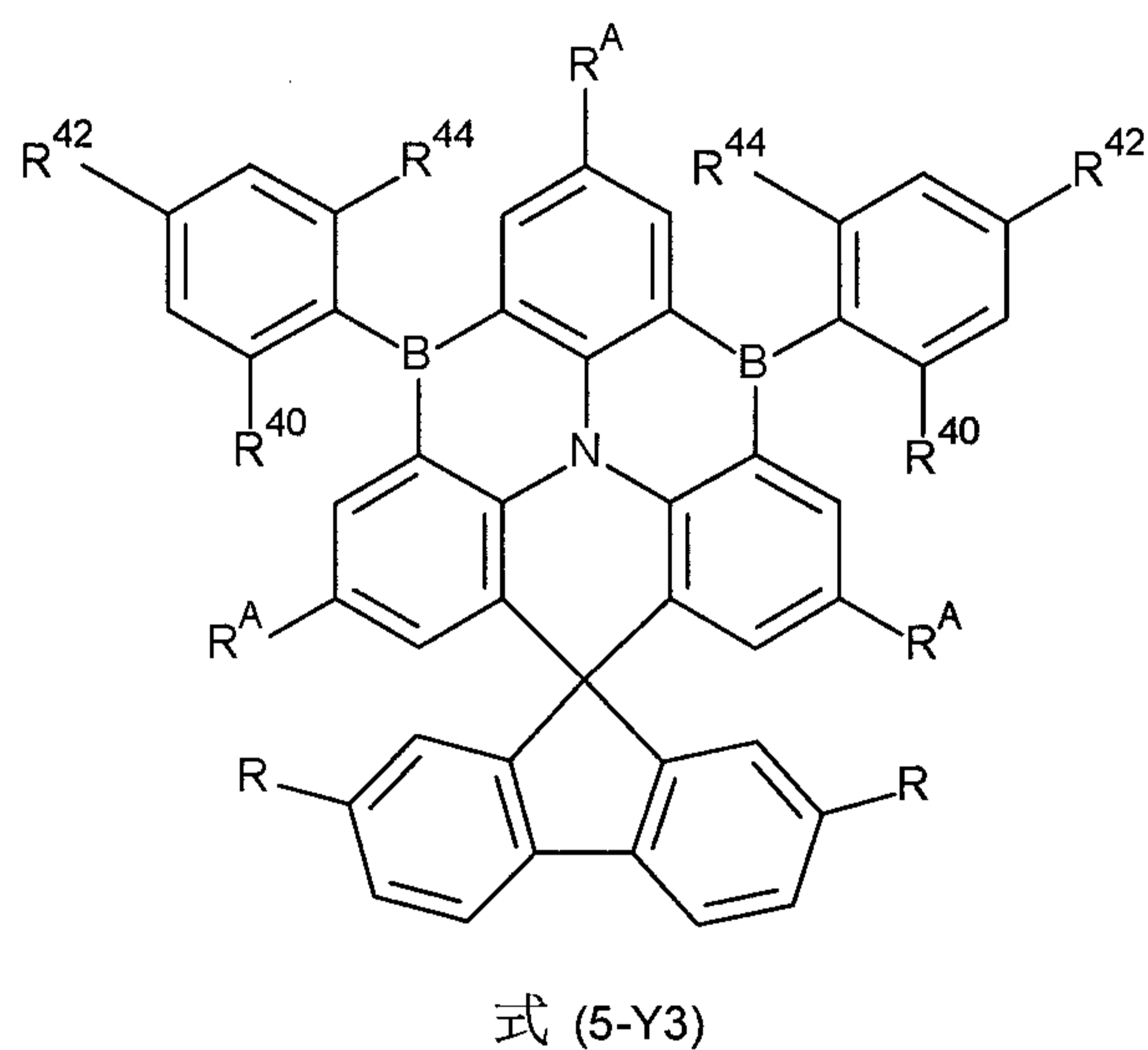
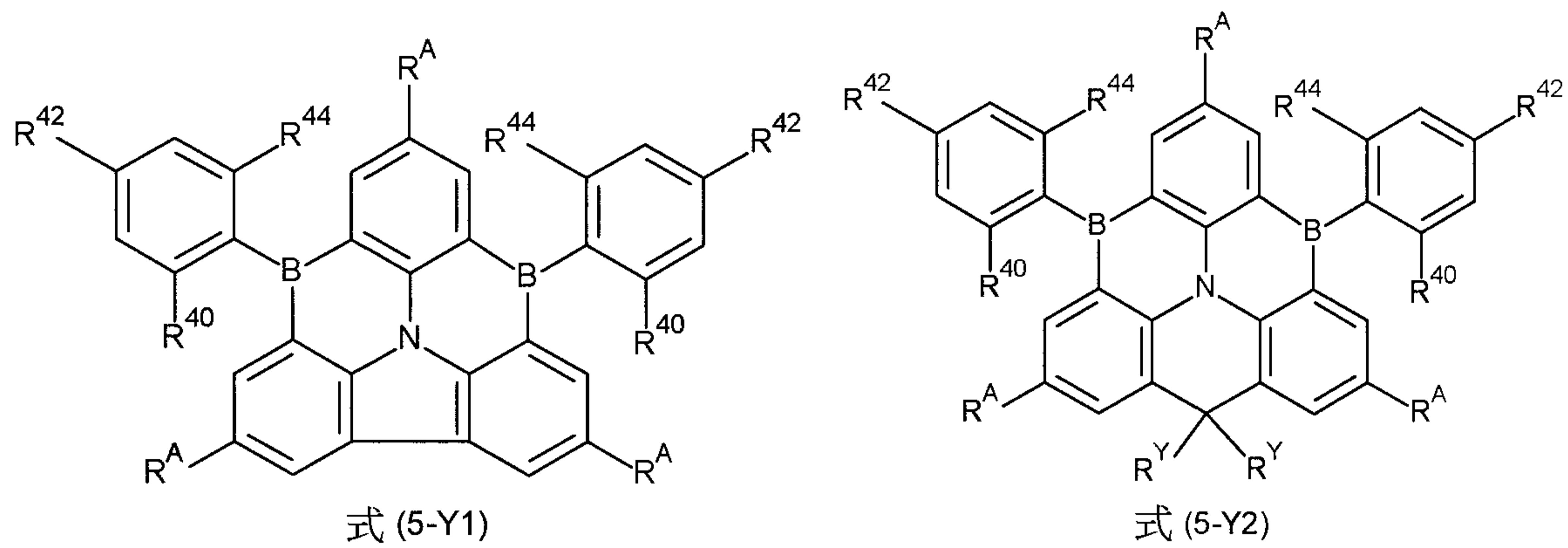
$R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代);其中 $R^{32}$ 係如上文所定義;

其先決條件為 $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$ 中之至少一者係非H;



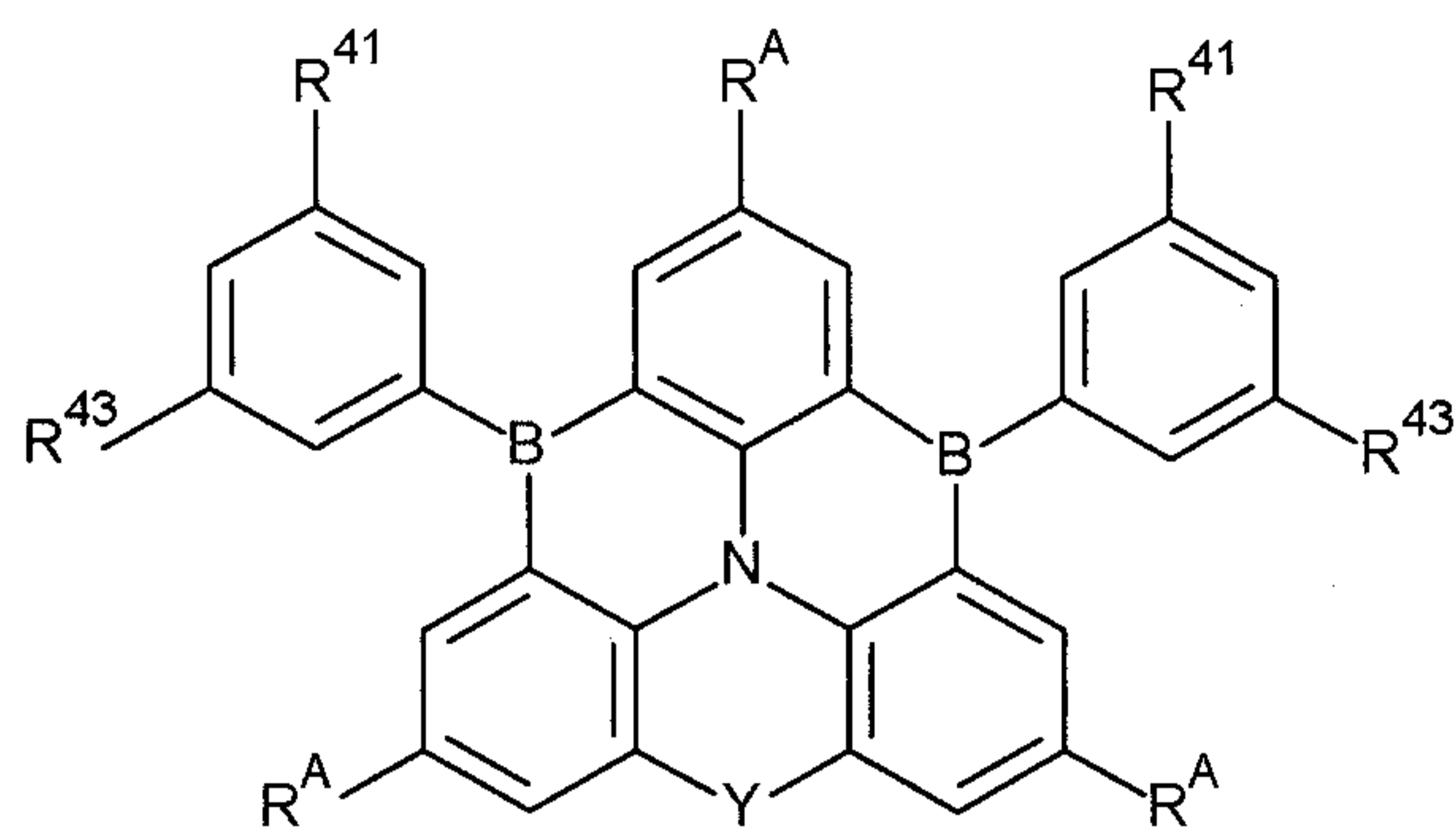
並且該等其他符號具有如上之相同含意。

較佳地，式(5)之化合物對應於式(5-Y1)、(5-Y2)及(5-Y3)之化合物，



其中該等符號具有如上之相同含意。

根據另一特佳的實施例，式(1)之化合物係選自式(6)之化合物，



式 (6)

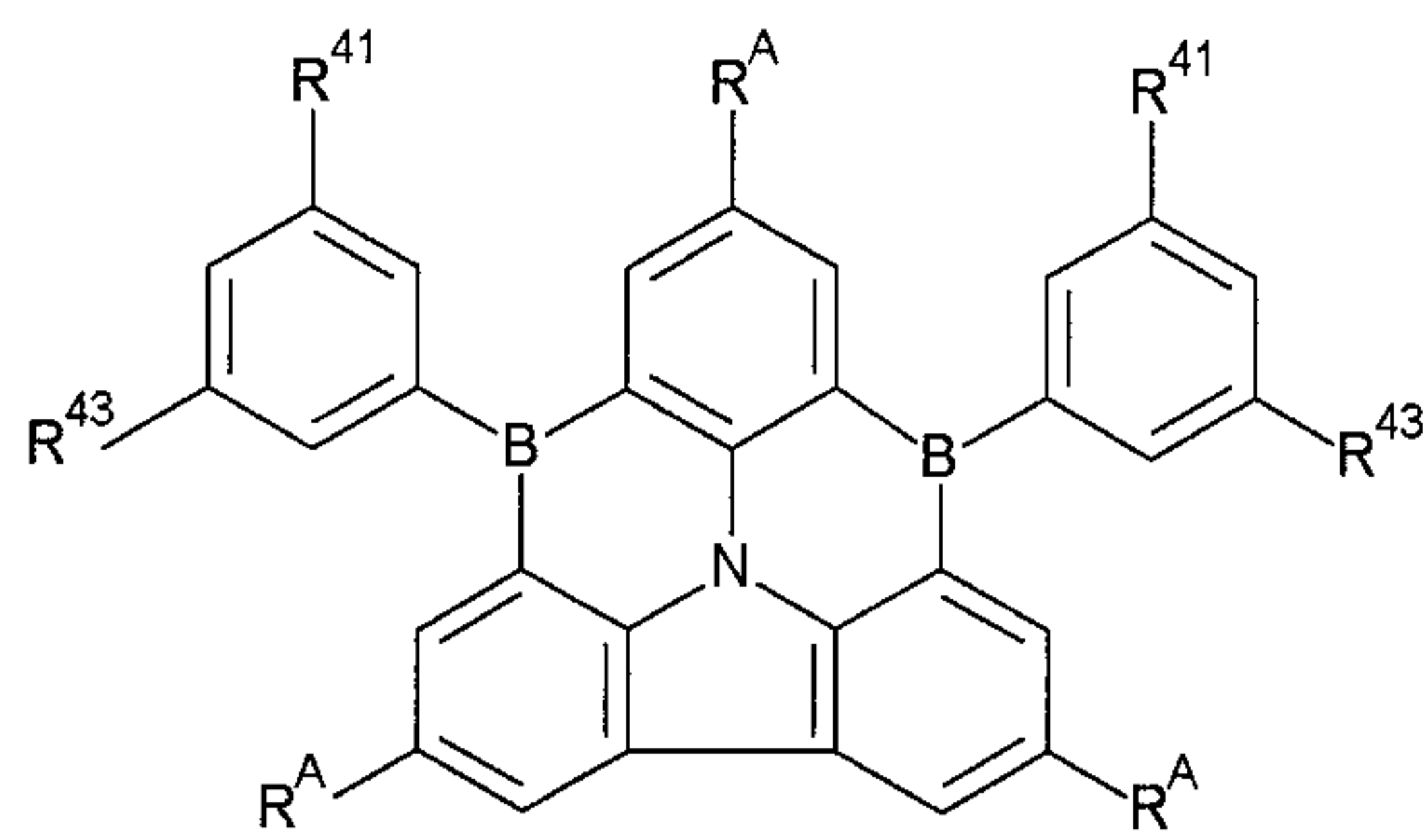
其中：

$R^{41}$ 、 $R^{43}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)；其中 $R^{32}$ 係如上文所定義；

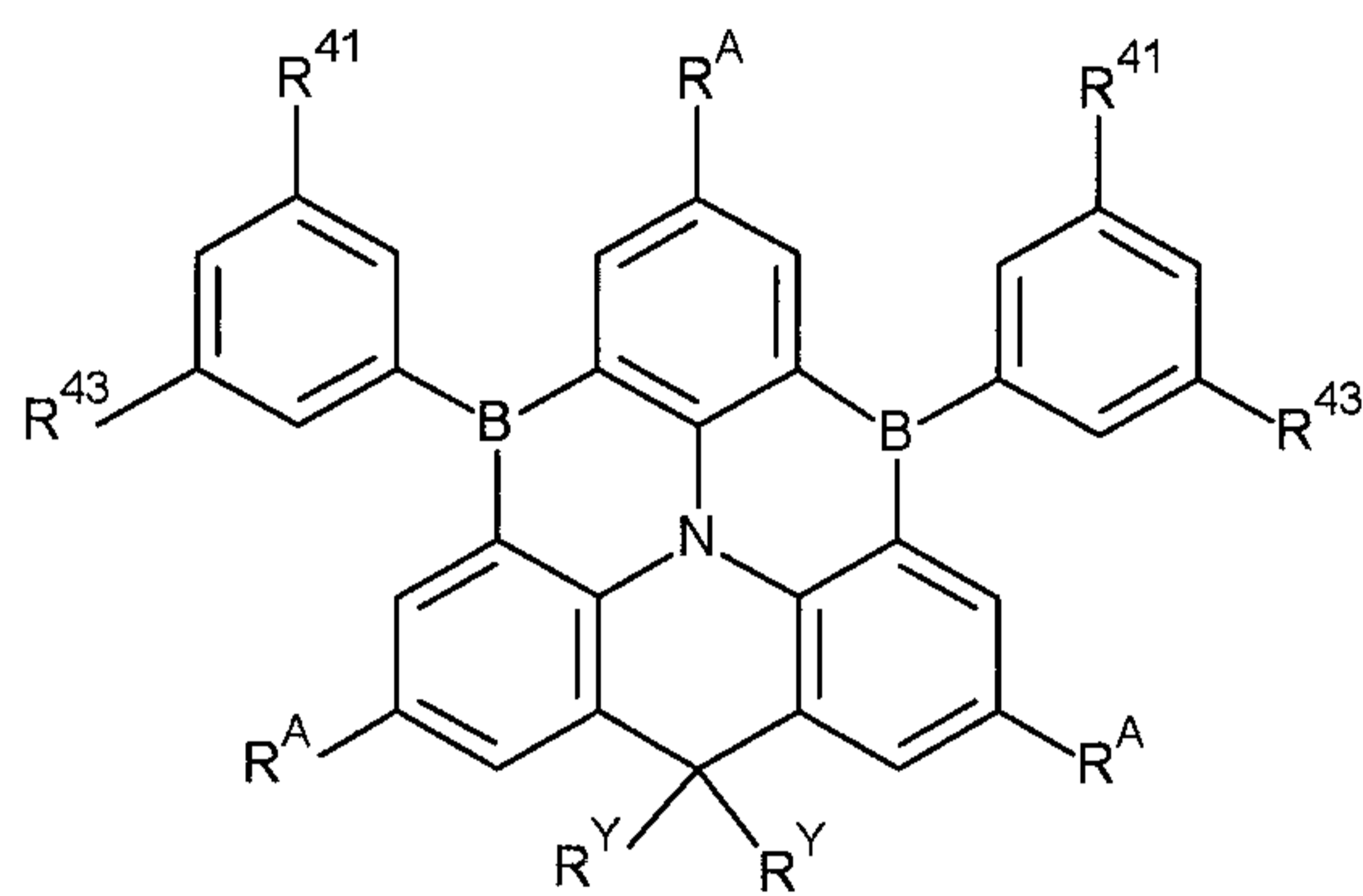
其先決條件為 $R^{41}$ 、 $R^{43}$ 中之至少一者係非H。

較佳地，式(6)之化合物對應於式(6-Y1)、(6-Y2)及(6-Y3)之化合物，

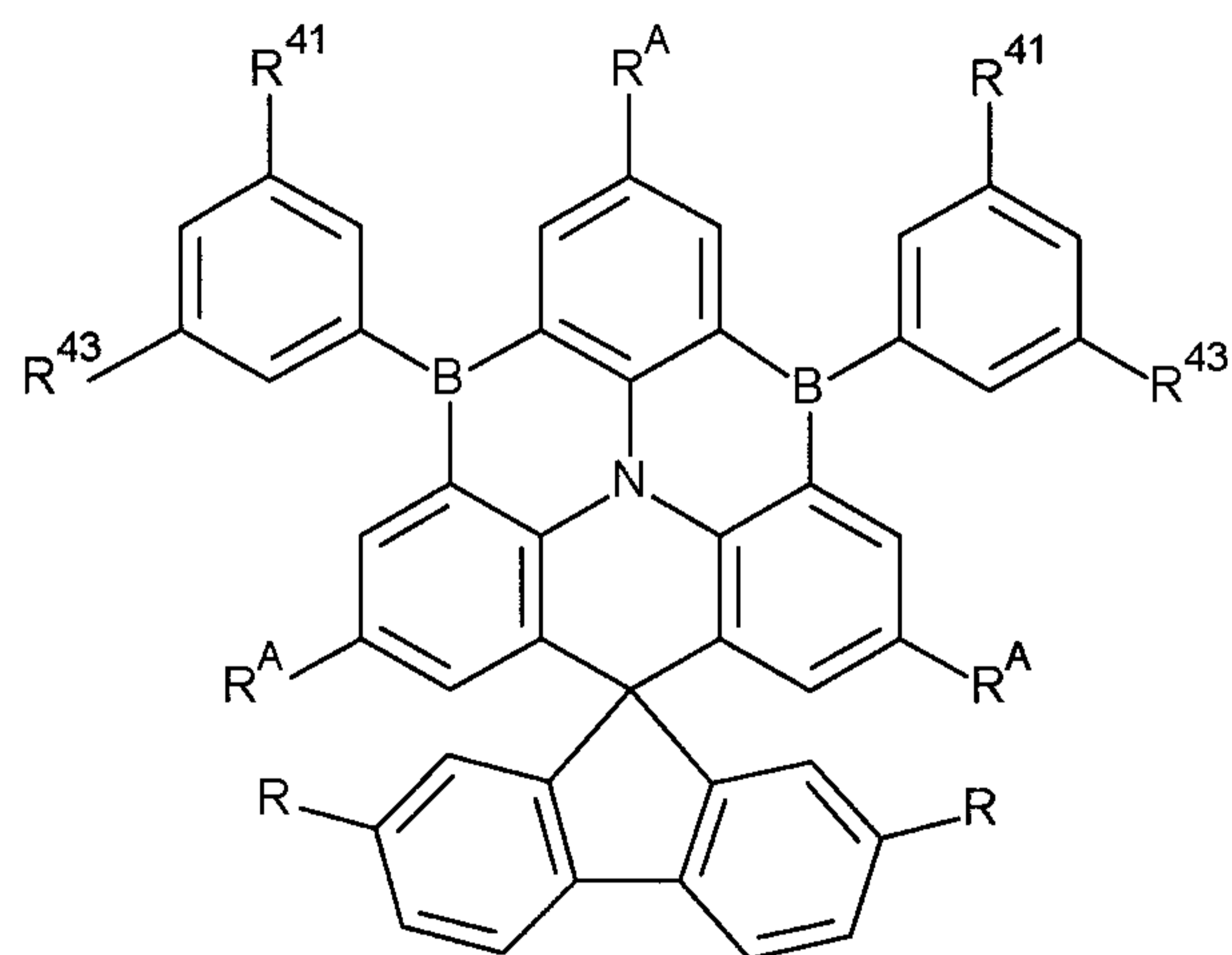




式 (6-Y1)



式 (6-Y2)



式 (6-Y3)

其中該等符號具有如上之相同含意。

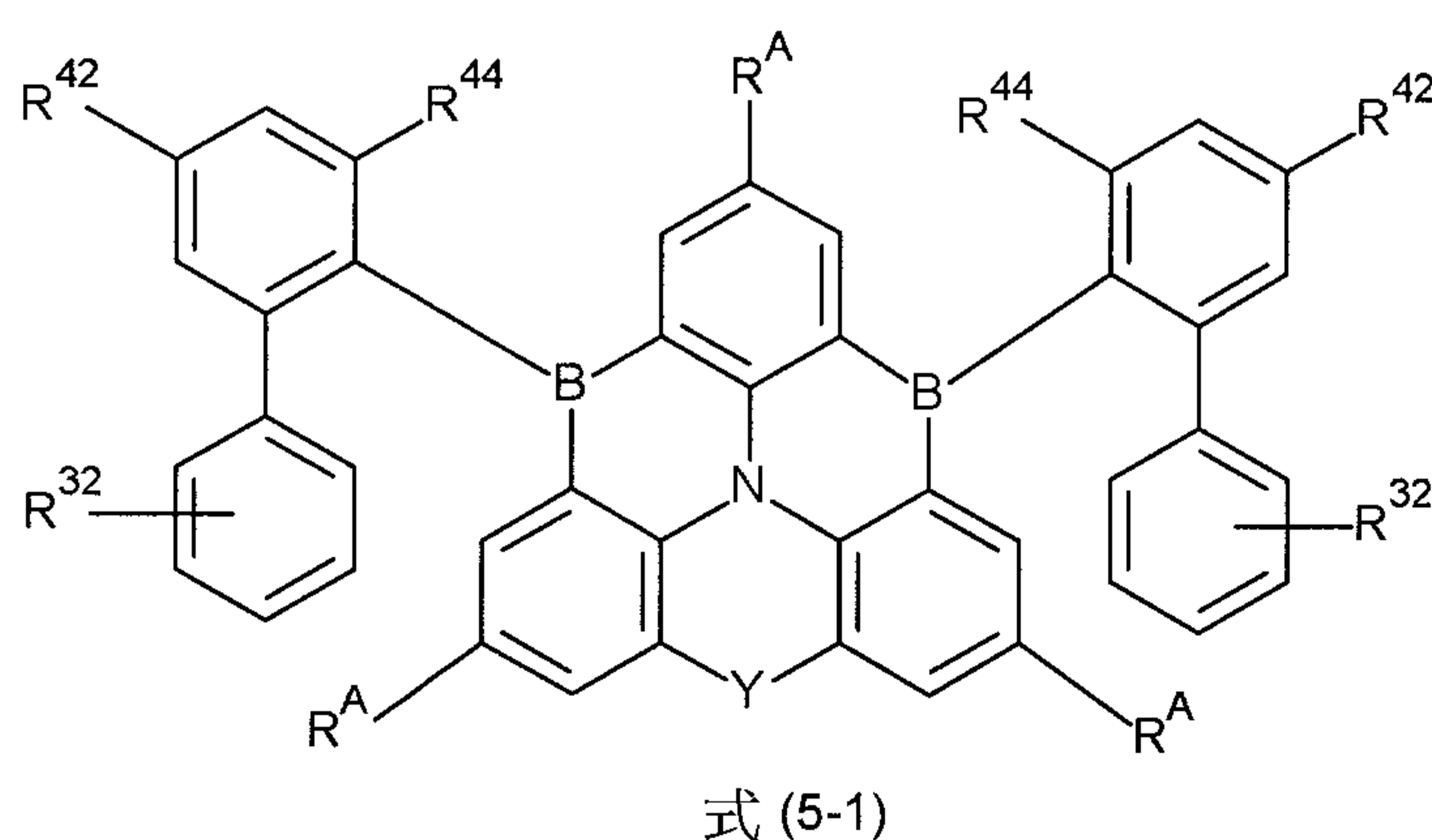
較佳地，基團  $R^{42}$  在每次出現時相同或不同地選自 H、具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基 (其中上述基團可各自經一或多個基團  $R^{32}$  取代)、或具有 6 至 30 個芳族環原子之芳族環系統 (其在各



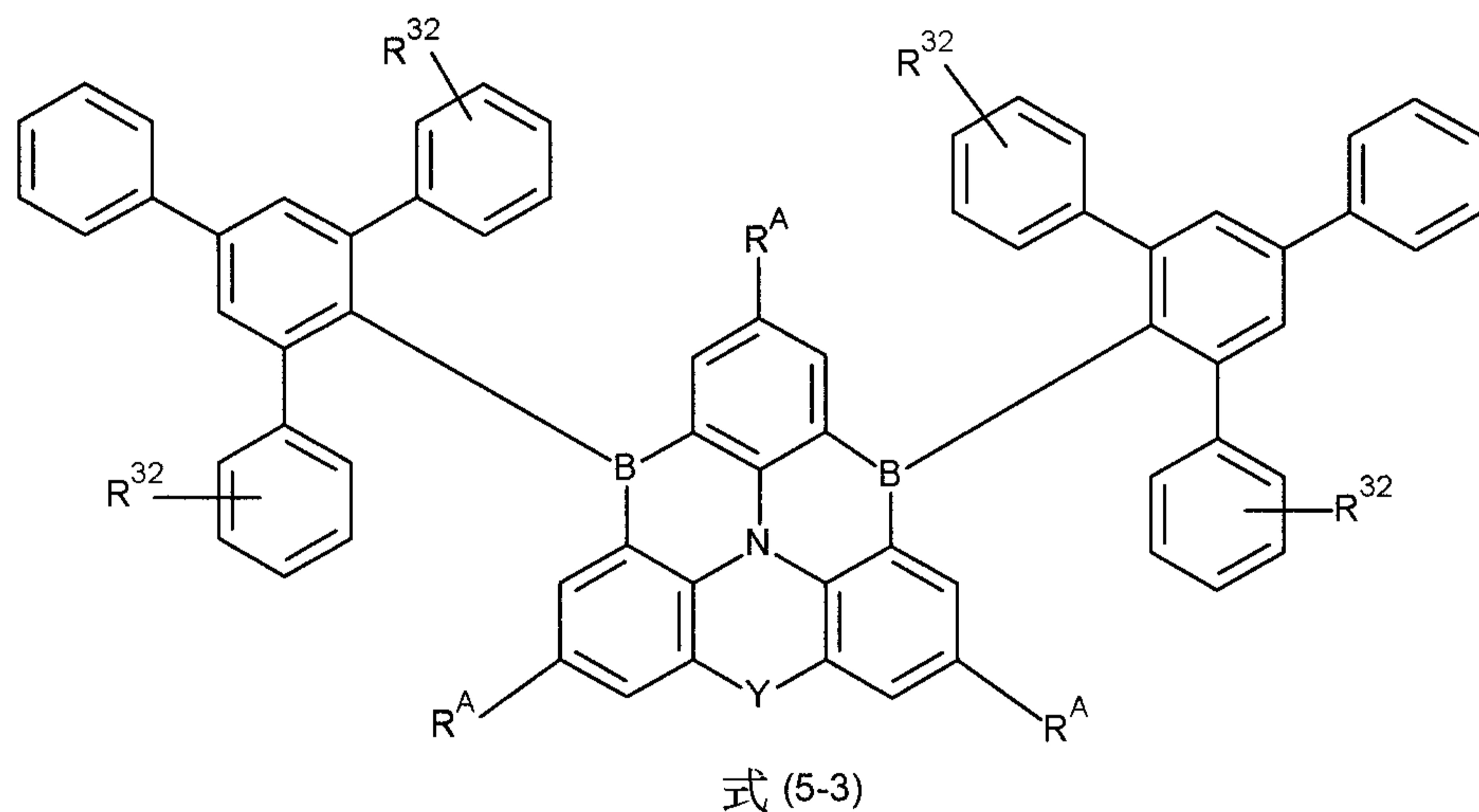
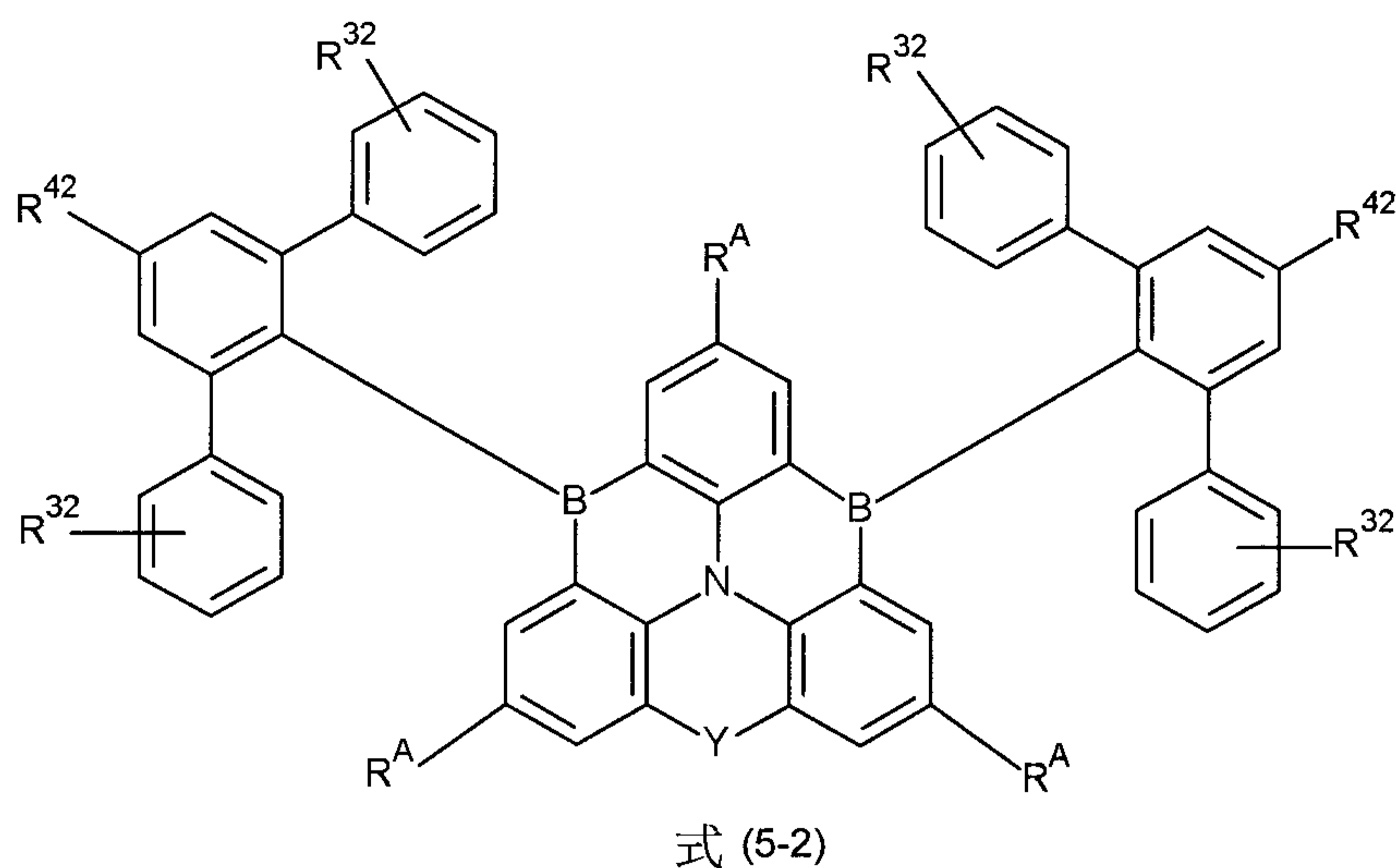
情況下可經一或多個基團  $R^{32}$  取代)，且其中基團  $R^{40}$ 、 $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自具有 6 至 30 個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團  $R^{32}$  取代)。

根據較佳實施例，式 (5)、(5-Y1)、(5-Y2) 及 (5-Y3) 中之基團  $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基，其中上述基團可各自經一或多個基團  $R^{32}$  取代。更佳地，基團  $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自具有 1 至 10 個、較佳係 1 至 5 個、更佳係 1 至 3 個碳原子之直鏈烷基，其中上述基團可各自經一或多個基團  $R^{32}$  取代。合適的基團  $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$  之實例在此情況下係甲基、乙基及丁基。

根據另一較佳實施例，基團  $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自具有 6 至 30 個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團  $R^{32}$  取代)。較佳地，式 (1) 之化合物係選自式 (5-1)、(5-2) 及 (5-3) 之化合物，







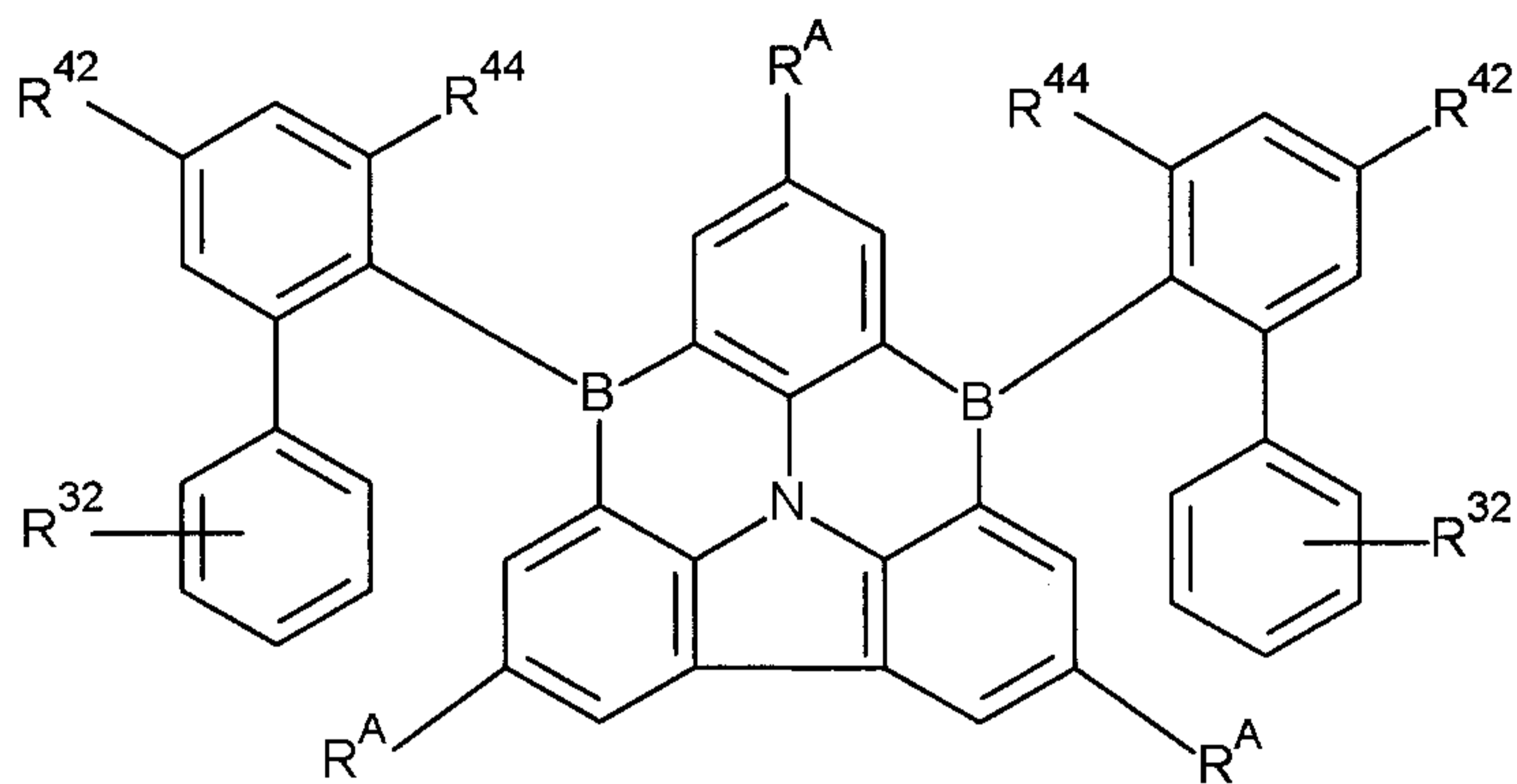
其中

在式 (5-1)、(5-2) 及 (5-3) 之各者中，標示有  $-R^{32}$  之苯基係未經取代或經一或多個基團  $R^{32}$  取代；

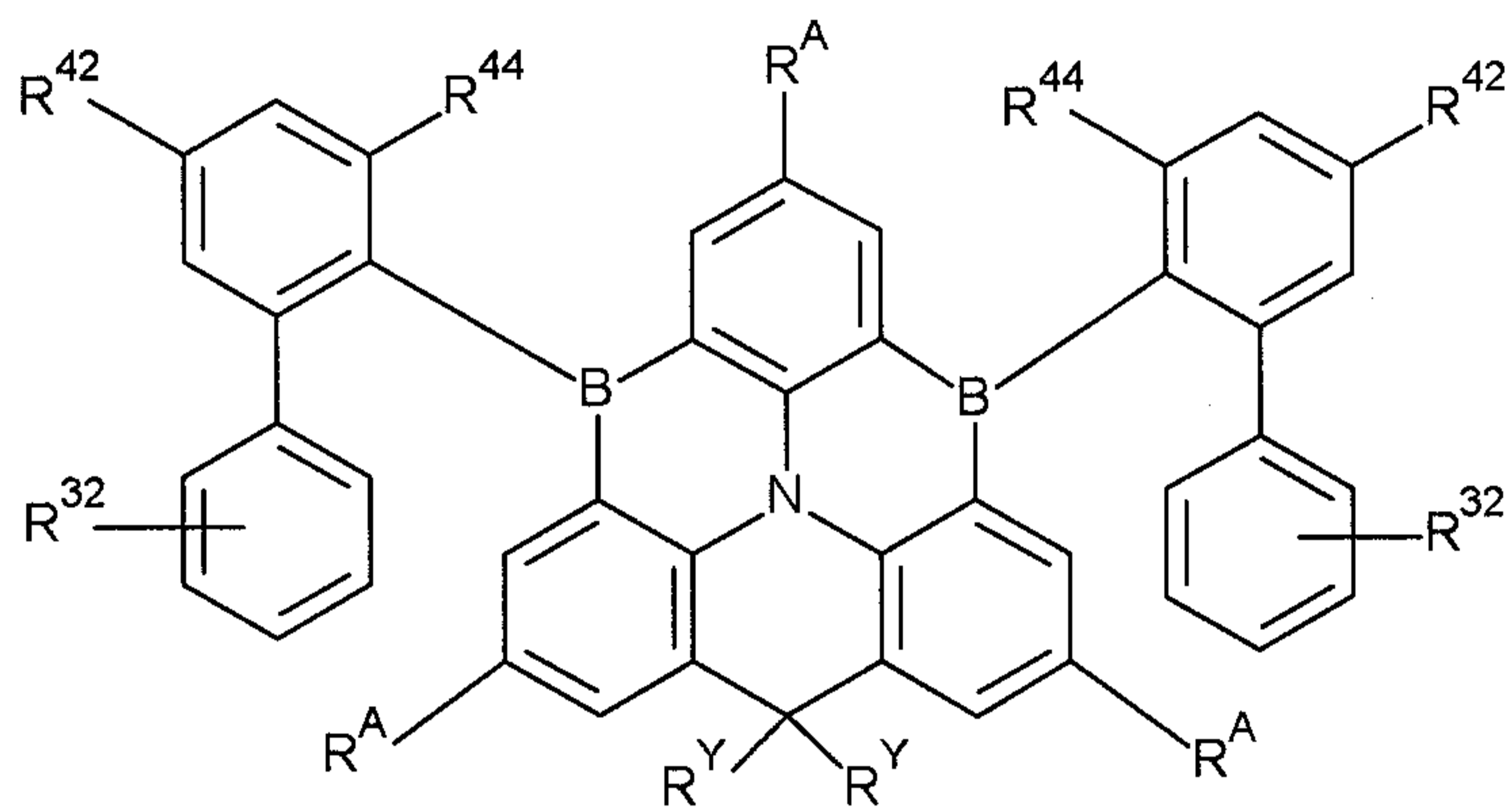
$R^{42}$  及  $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自 H、具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基 (其中上述基團可各自經一或多個基團  $R^{32}$  取代)；其中  $R^{32}$  係如上文所定義。

更佳地，式 (5-1)、(5-2) 及 (5-3) 之化合物對應於式 (5-1-Y1)、(5-1-Y2)、(5-1-Y3)、(5-2-Y1)、(5-2-Y2)、(5-2-

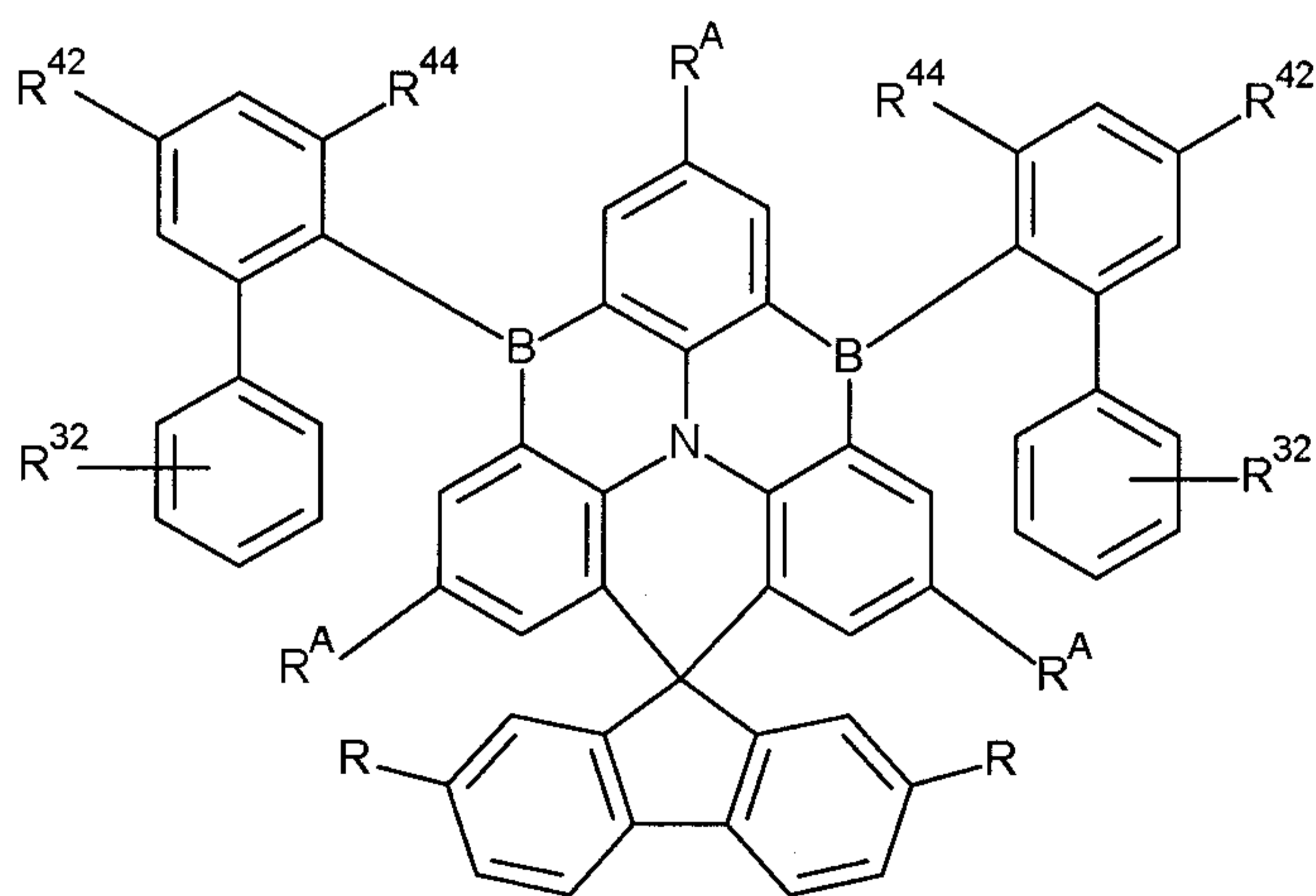
Y3)以及(5-3-Y1)、(5-3-Y2)及(5-3-Y3)，



式 (5-1-Y1)

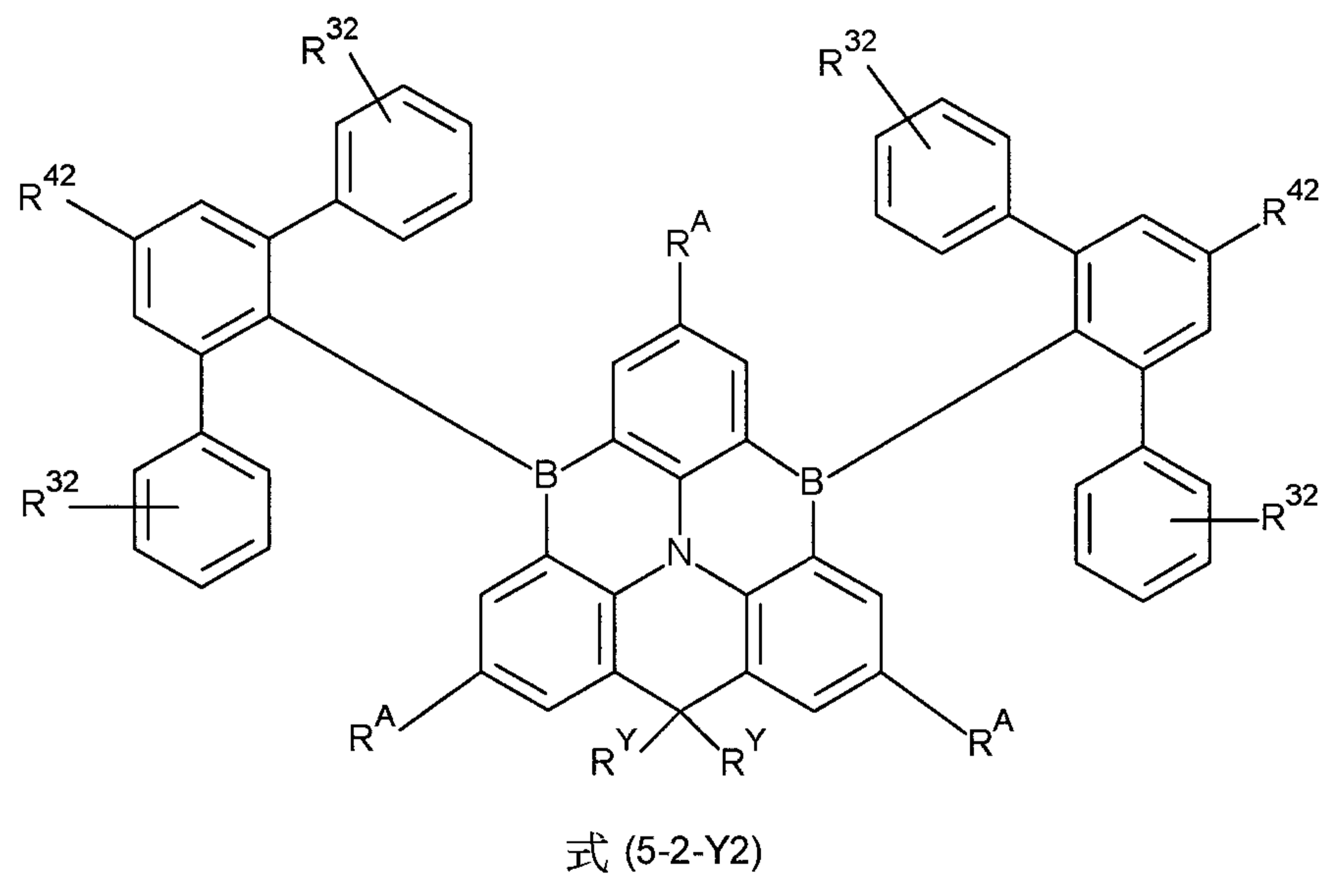
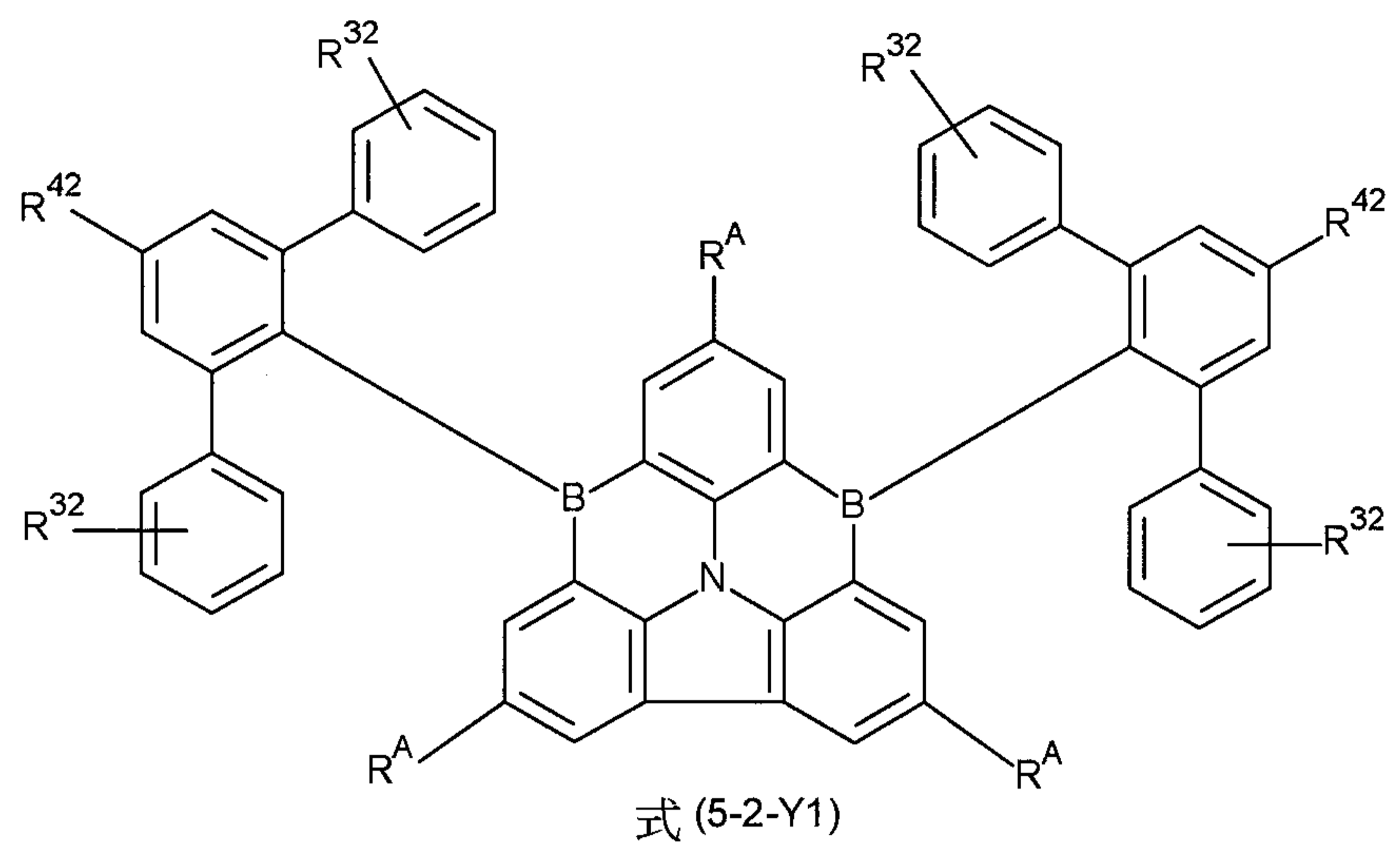


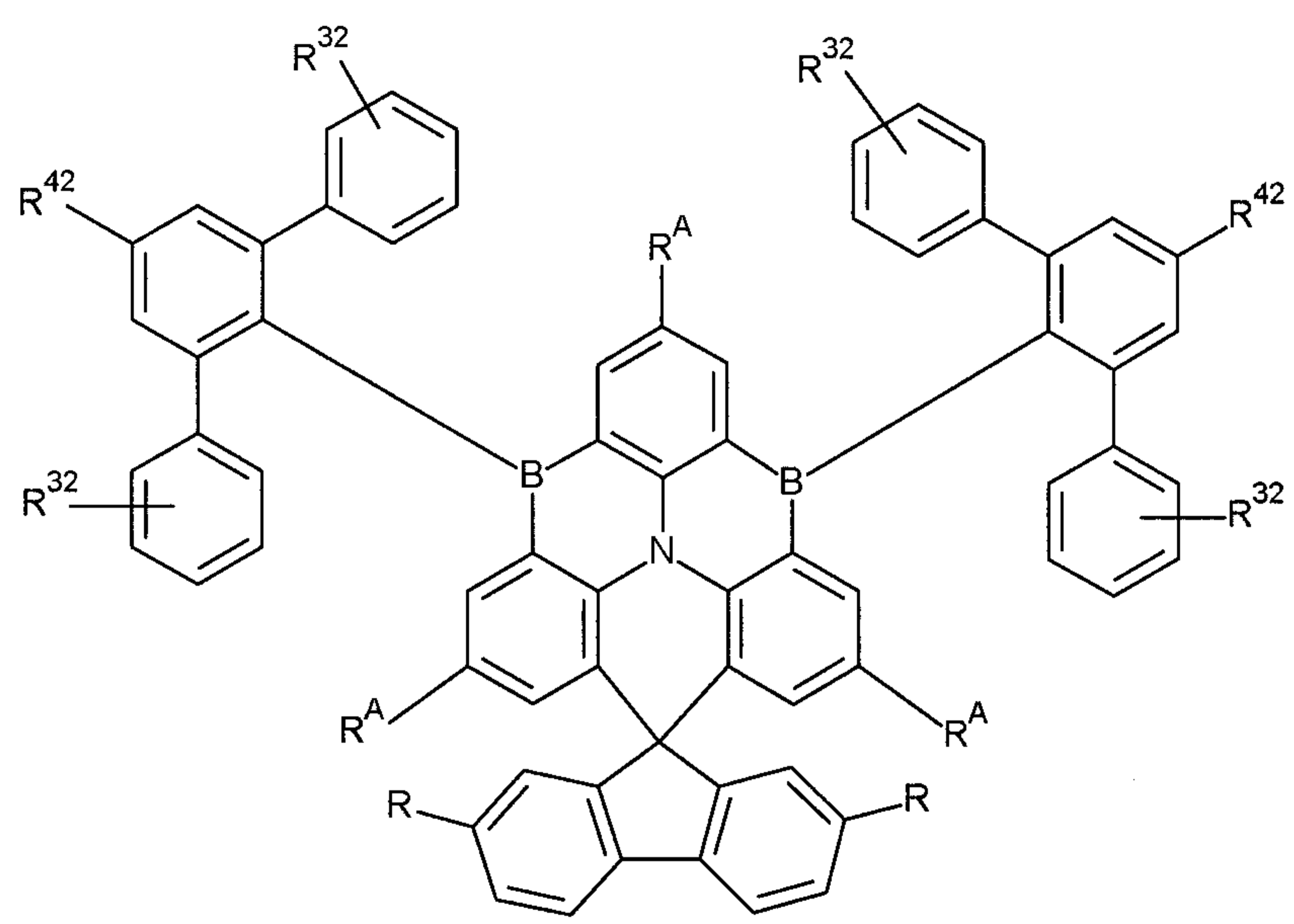
式 (5-1-Y2)



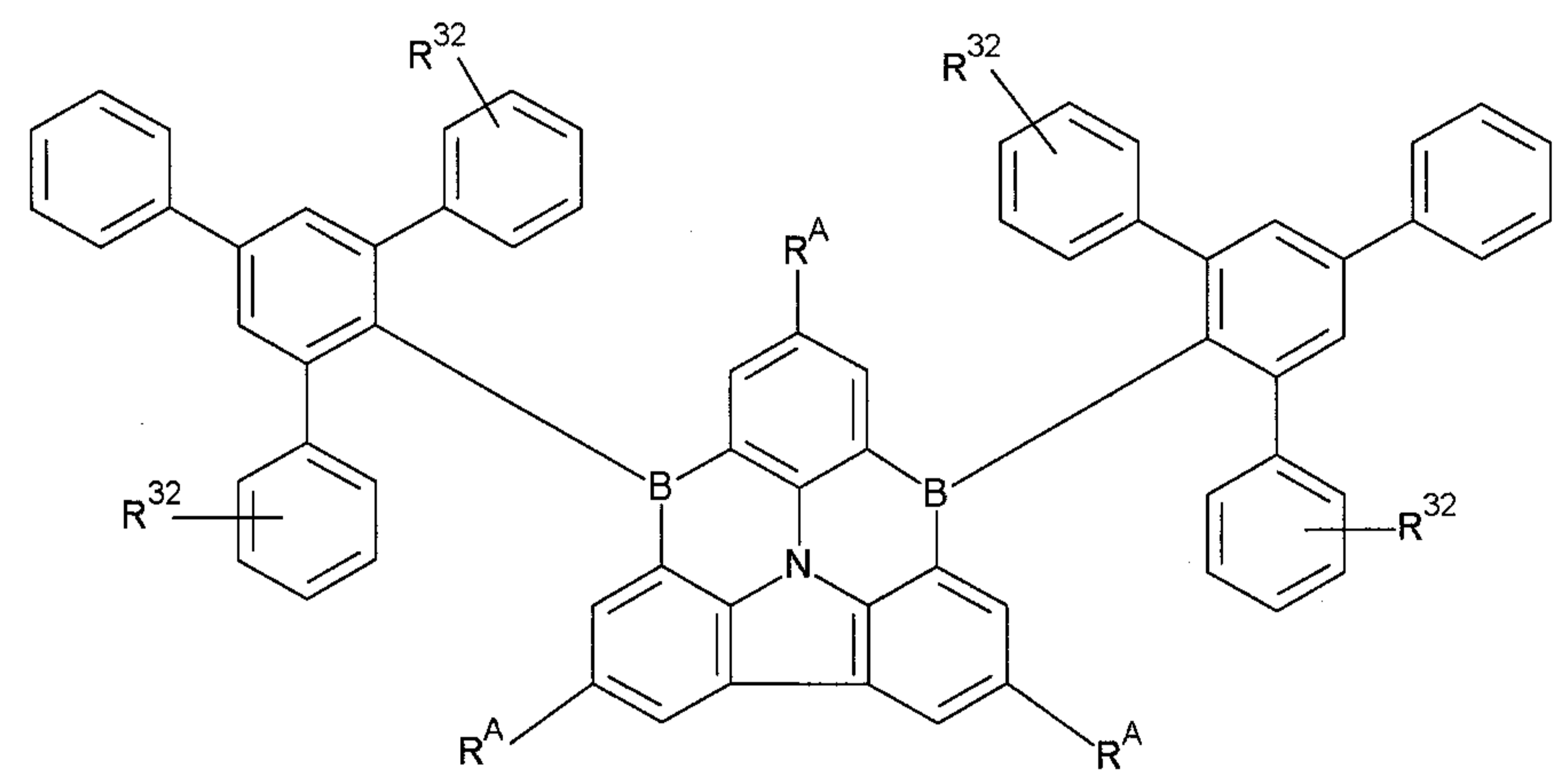
式 (5-1-Y3)



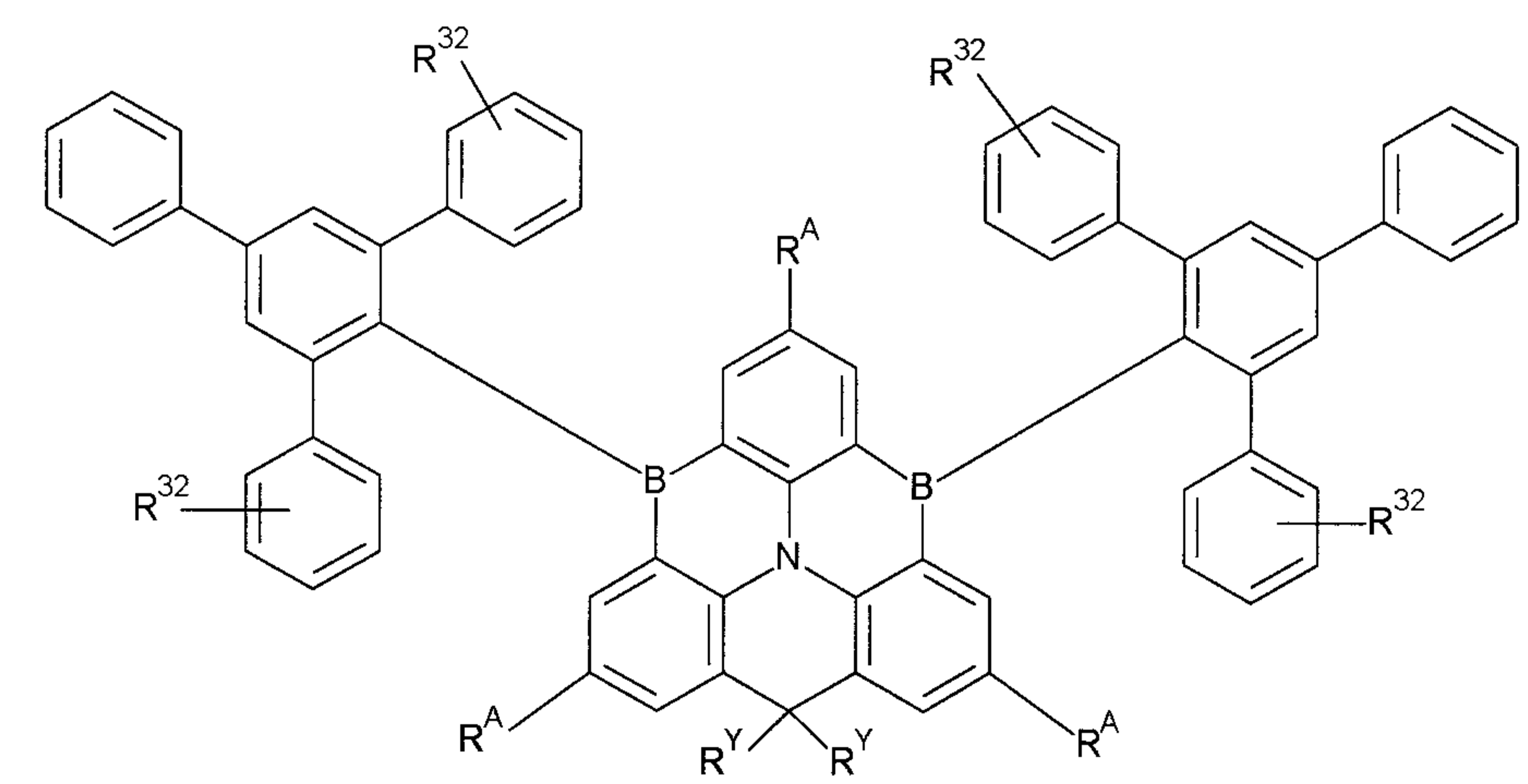




式 (5-2-Y3)

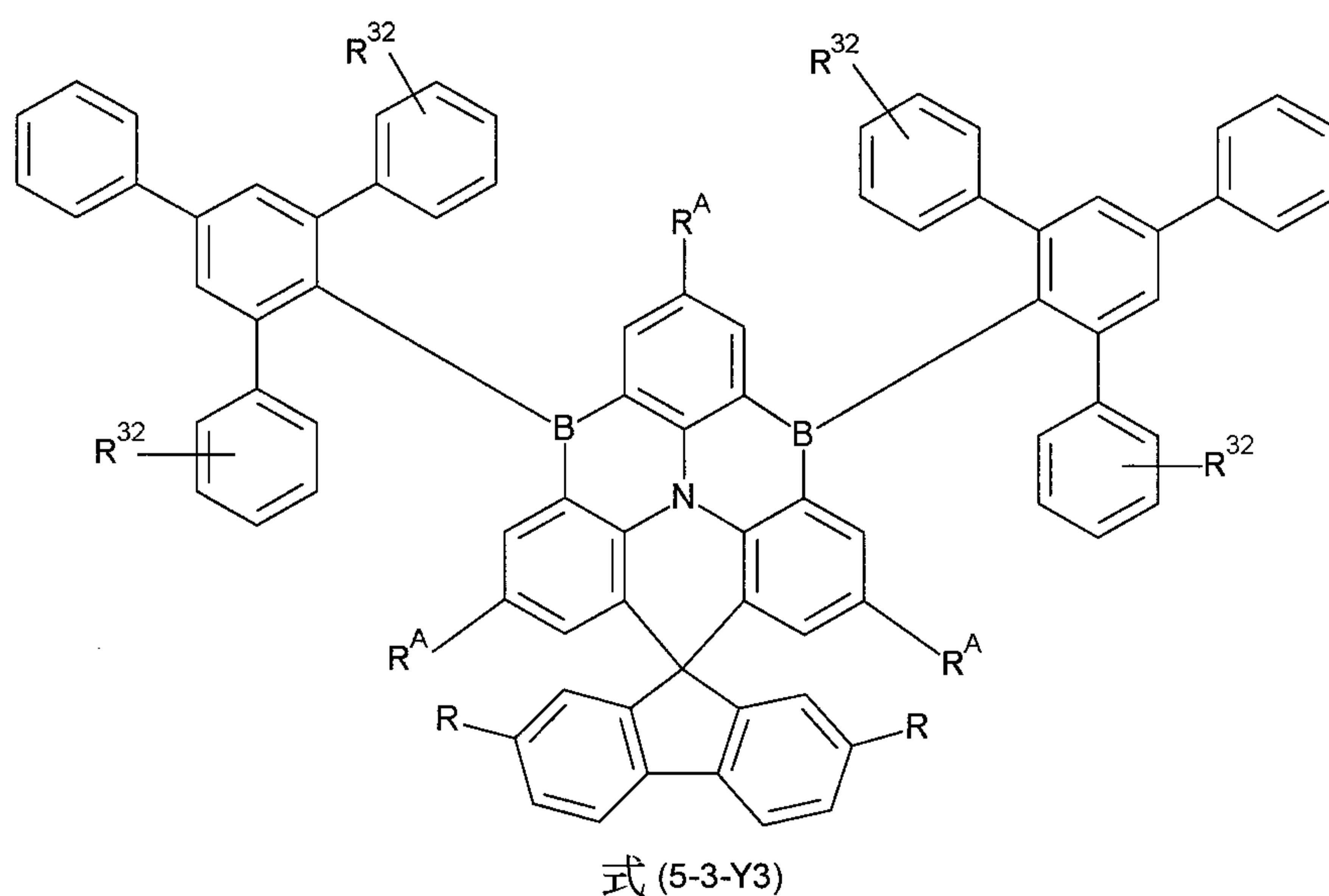


式 (5-3-Y1)



式 (5-3-Y2)





其中該等符號具有如上之相同含意。

較佳地，基團  $R$  在每次出現時相同或不同地代表  $H$ 、 $D$ 、 $F$ 、 $Cl$ 、 $Br$ 、 $I$ 、 $CHO$ 、 $CN$ 、 $N(Ar)_2$ 、 $Si(R')_3$ 、具有 1 至 40 個、較佳係 1 至 20 個、更佳係 1 至 10 個  $C$  原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 3 至 40 個、較佳係 3 至 20 個、更佳係 3 至 10 個  $C$  原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基 (其各者可經一或多個基團  $R'$  取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $R'C=CR'$ 、 $O$  或  $S$  置換，且其中一或多個  $H$  原子可經  $D$ 、 $F$ 、或  $CN$  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基團  $R'$  取代)、或具有 5 至 60 個、較佳係 5 至 40 個、更佳係 5 至 30 個、非常佳係 5 至 18 個芳族環原子之芳氧基 (其可經一或多個基團  $R'$  取代)，其中兩個相鄰基團  $R$  可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統 (其可經一或多個基團  $R'$  取代)。當  $R$  係選自芳族及雜芳族環系統時，其較佳地係選自具有 5 至 40 個、較佳係 5 至 30 個、更佳係 5 至 18 個芳族

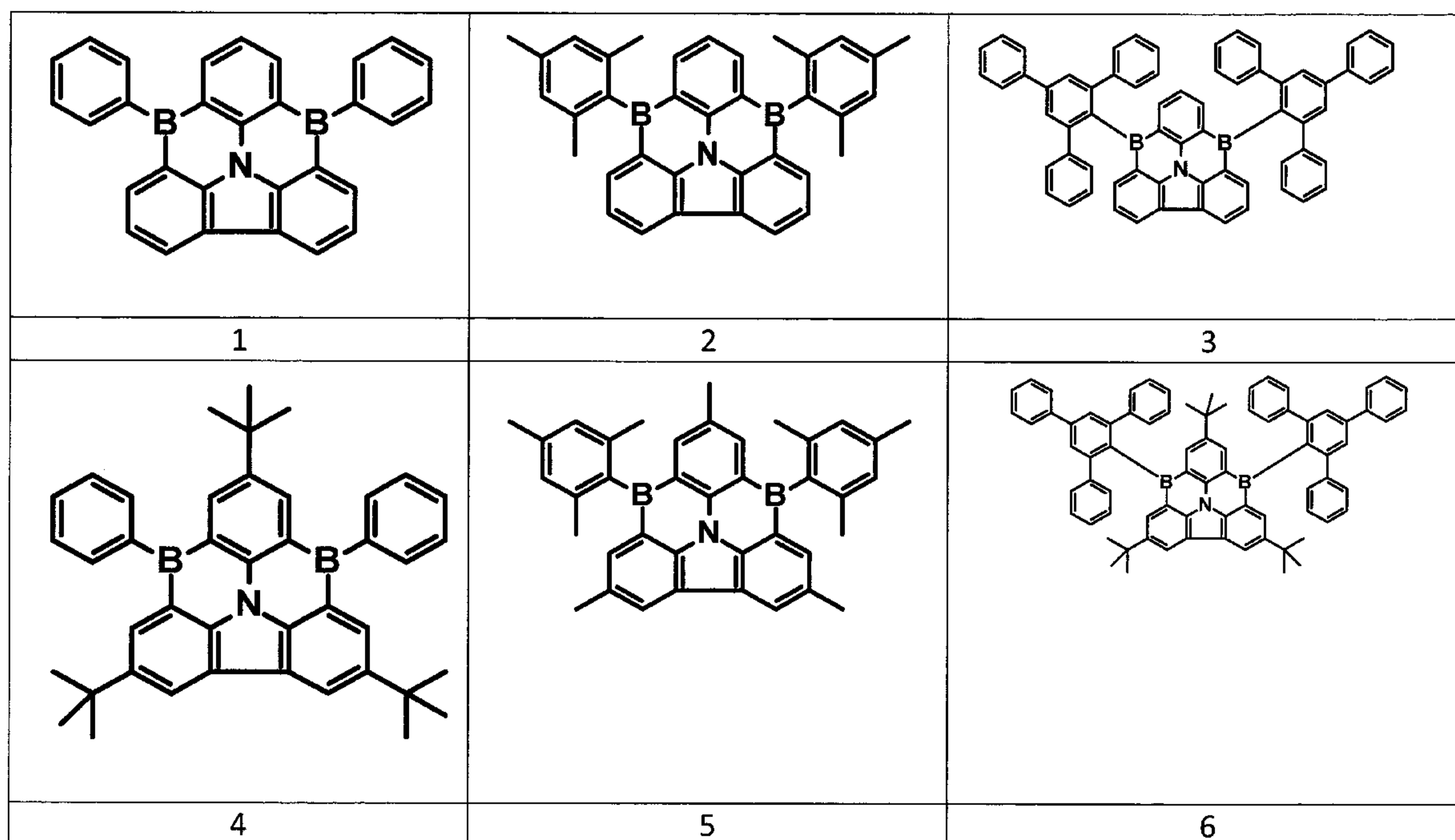


環原子之芳族及雜芳族環系統、或選自具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其對應於如上文所定義之式 (ArL-1) 之基團。

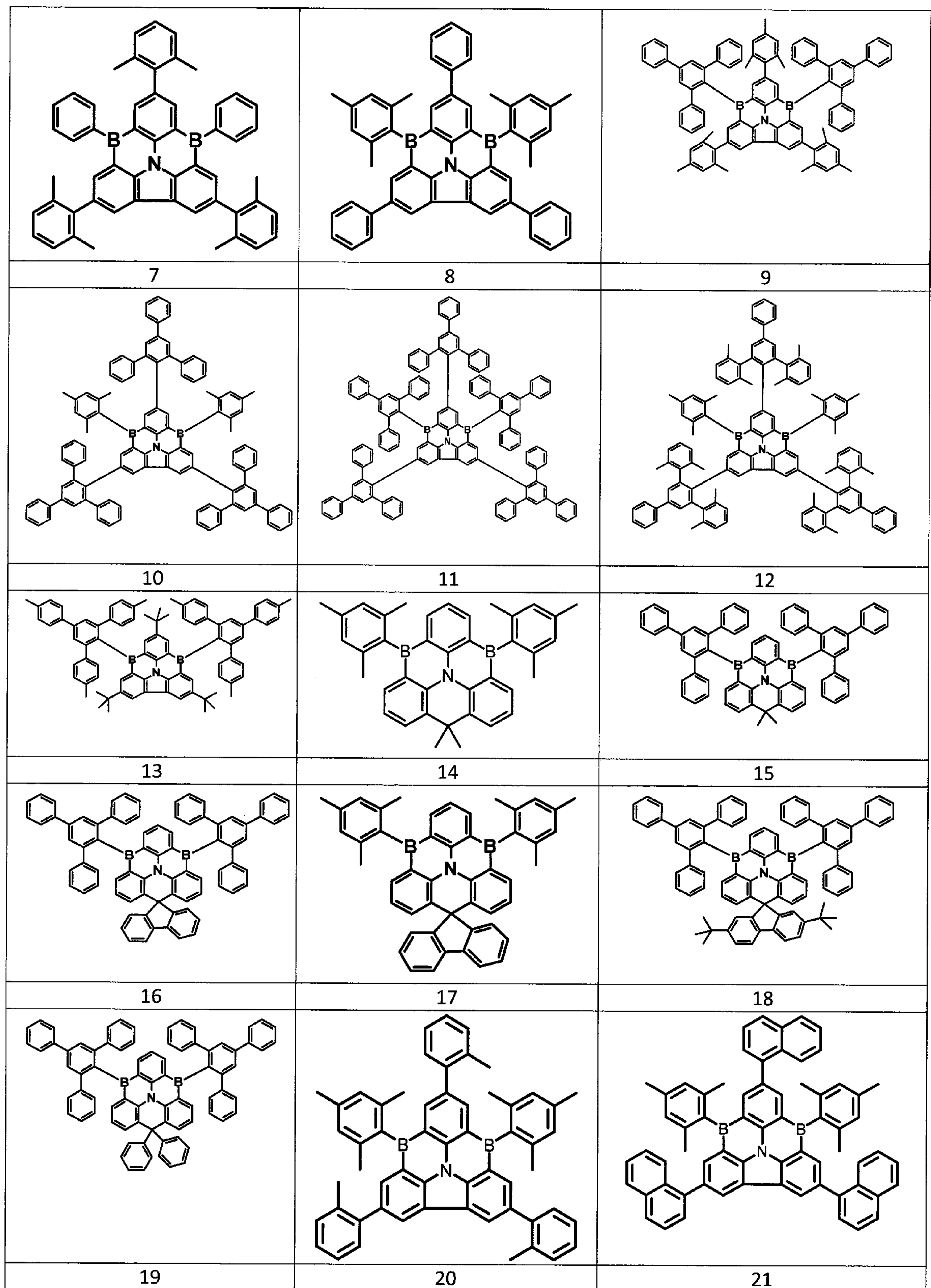
較佳地，基團 Ar 在每次出現時相同或不同地係具有 5 至 18 個、較佳係 6 至 18 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下亦可經一或多個基團 R' 取代。

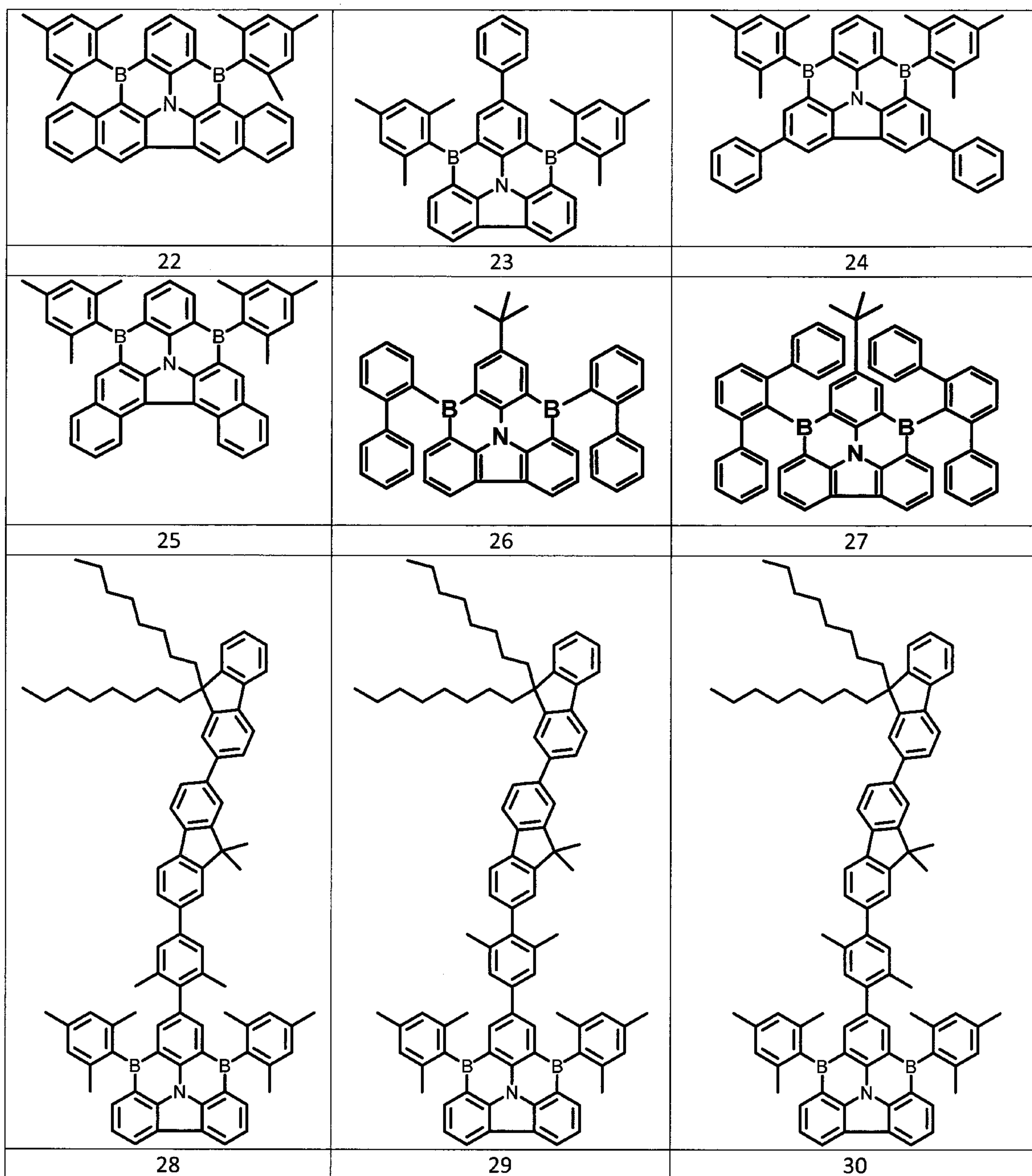
較佳地，R' 在每次出現時相同或不同地代表 H、D、F、Cl、Br、I、CN、具有 1 至 10 個 C 原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 3 至 10 個 C 原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基 (其中一或多個 H 原子可經 D 或 F 置換)、或具有 5 至 18 個、較佳係 6 至 18 個 C 原子之芳族或雜芳族環系統。

下列化合物係式 (1) 之化合物之實例：

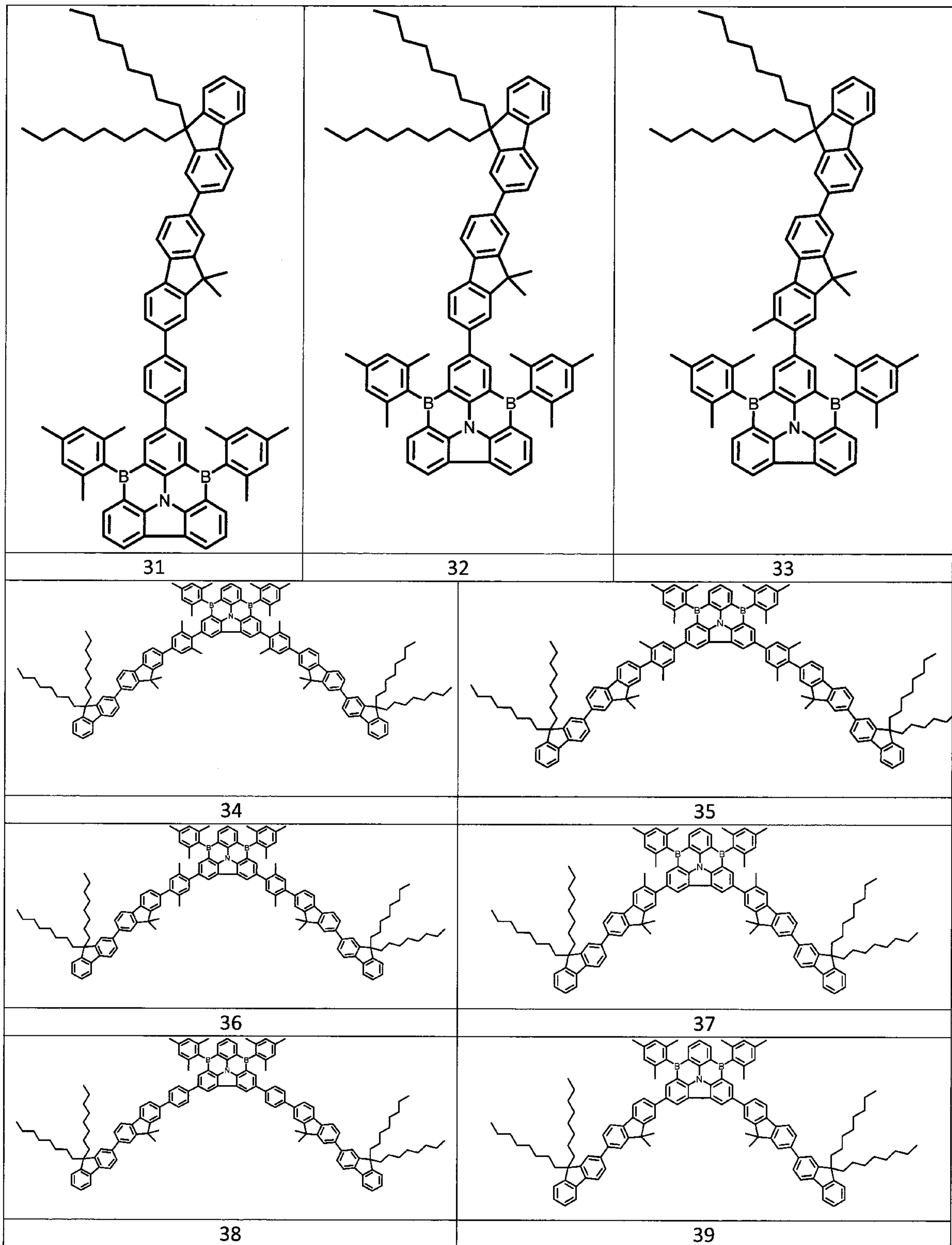


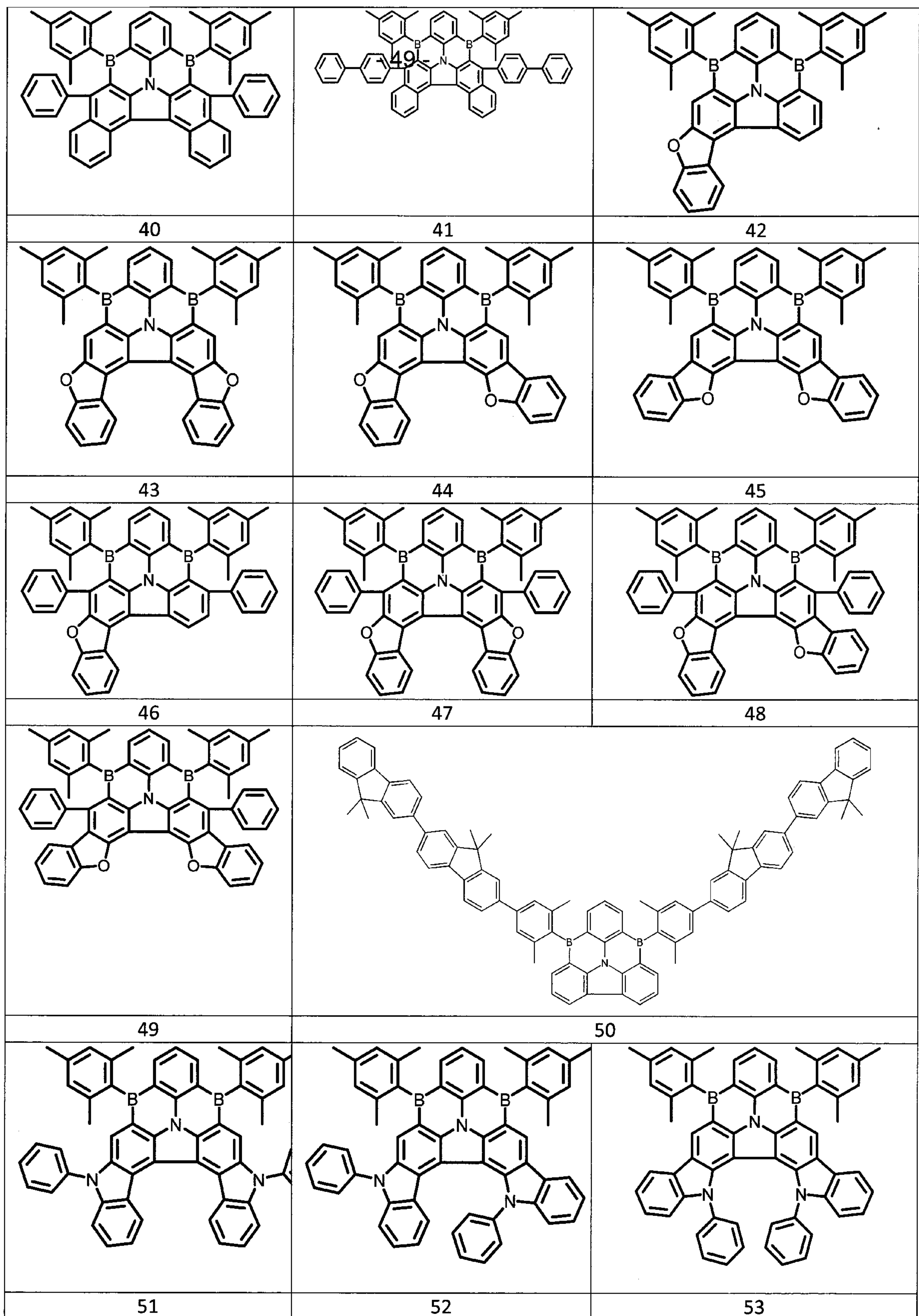








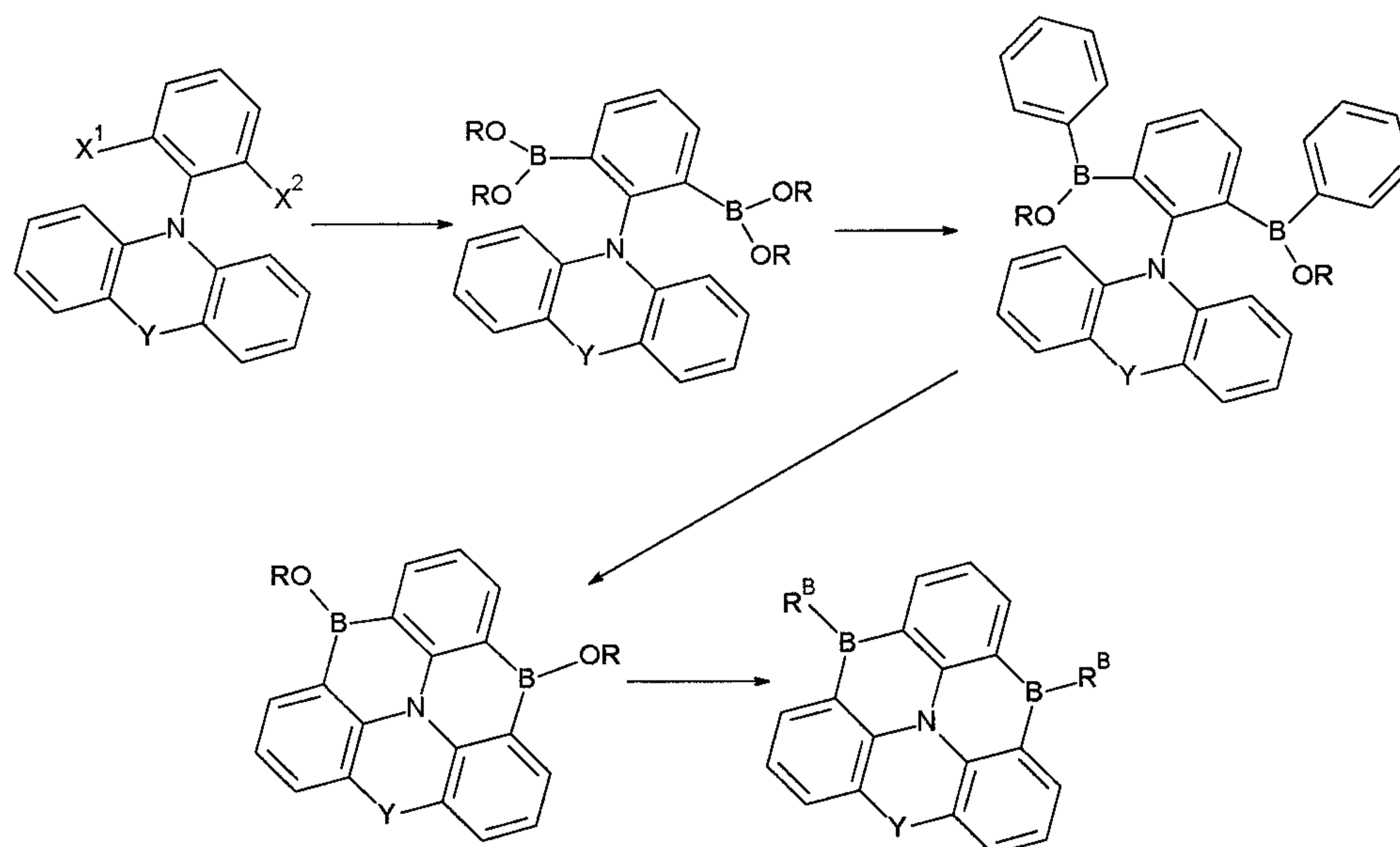






根據本發明之化合物可藉由所屬技術領域中具有通常知識者已知的合成步驟來製備，諸如溴化、Suzuki偶合、Ullmann偶合、Hartwig-Buchwald偶合等。合適的合成方法之實例係以一般用語描述於以下方案1及2中。

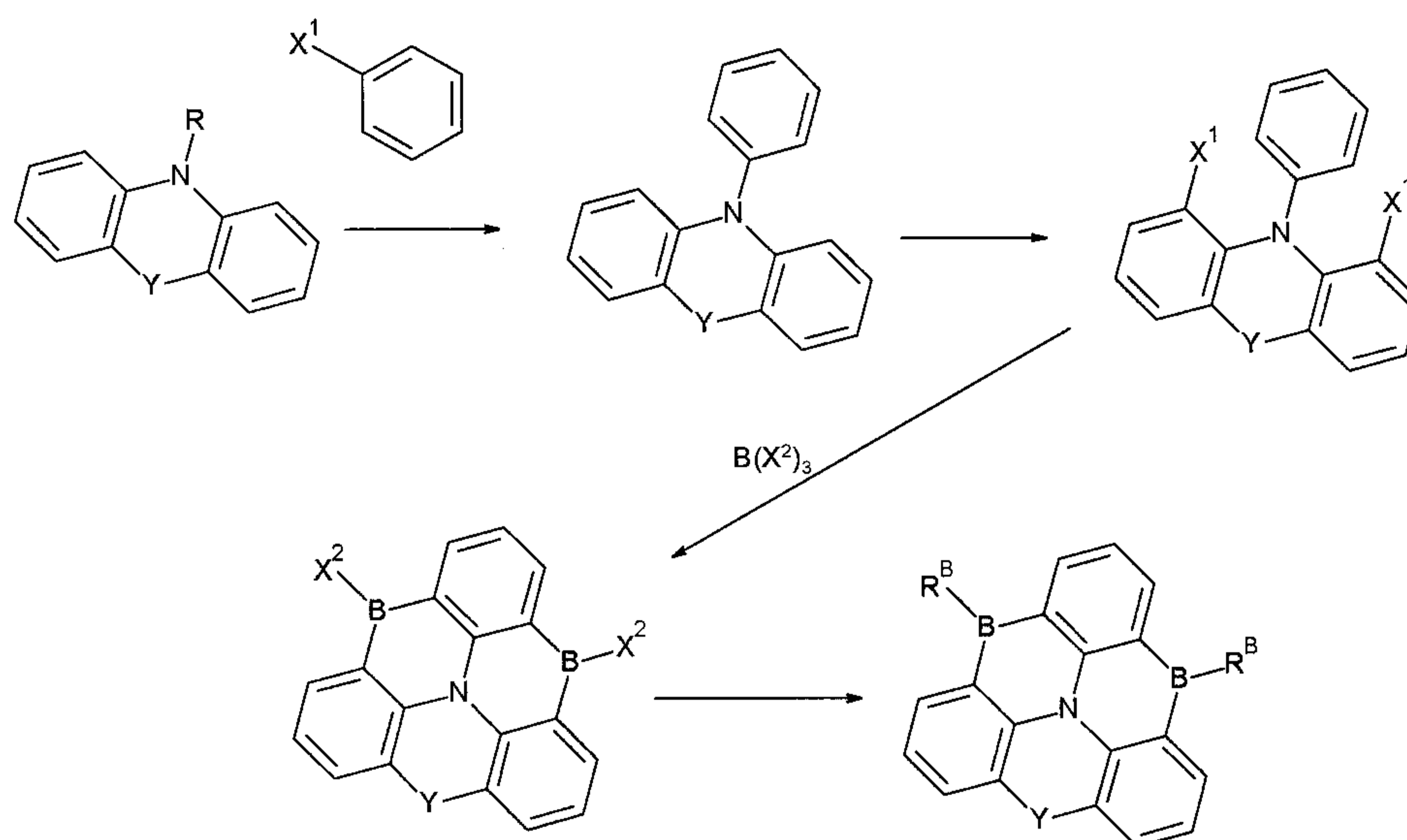
### 方案1



其中  $X^1$  及  $X^2$  係脫離基，其較佳地選自鹵素如 Br、Cl、I，較佳係 Br，其中存在於相同有機硼酸 (boronic acid) 或有機硼酸酯 (boronic ester) 基團中的兩個基團 R 可彼此鍵結並形成環，其中符號 Y 及  $R^B$  具有如上之相同含意，並且其中方案 1 中所述之化合物可進一步經如上文所定義之基團  $R^1$ 、 $R^2$  及  $R^A$  取代。



## 方案2



其中 X<sup>1</sup>及 X<sup>2</sup>係脫離基，其較佳地選自鹵素如 Br、Cl、I，較佳係 Br，其中符號 Y及 R<sup>B</sup>具有如上之相同含意，並且其中方案 2 中所述之化合物可進一步經如上文所定義之基團 R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>及 R<sup>A</sup>取代。

因此，本發明係關於一種用於合成根據本發明之化合物的方法，其包含下列步驟：其中三芳基胺係經至少兩個有機硼酸或有機硼酸酯基團取代，其中發生環化反應使得有機硼酸或有機硼酸酯基團與三芳基胺中存在的相鄰芳族或雜芳族基團形成 6 員環。

因此，本發明亦關於一種用於合成根據本發明之化合物的方法，其包含下列步驟：其中三芳基胺係經至少兩個硼-鹵素化合物取代，其中發生環化反應使得硼-鹵素化合物與三芳基胺中存在的相鄰芳族或雜芳族基團形成 6 員環。



為了從液相處理根據本發明之化合物(例如藉由旋塗或藉由印刷方法)，根據本發明之化合物的調配物係必需的。此等調配物可係例如溶液、分散液或乳液。為此目的，較佳可使用二或更多種溶劑之混合物。合適且較佳的溶劑係例如甲苯、苯甲醚、鄰-、間-或對-二甲苯、苯甲酸甲酯、均三甲苯、四氫萘、藜蘆醚(veratrol)、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-甲基苯并噻唑、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、 $\alpha$ -萘品醇、苯并噻唑、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、二苯甲醚、二乙二醇丁基甲醚、三乙二醇丁基甲醚、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。

本發明因此進一步關於一種調配物，其包含根據本發明之化合物及至少一其他化合物。其他化合物可係例如溶劑，特別是上述溶劑中之一者或此等溶劑之混合物。然而，其他化合物亦可係至少一種同樣可用於電子裝置之其他有機或無機化合物，例如發光化合物(特別是磷光摻雜



劑)及/或其他基質材料。合適的發光化合物及其他基質材料係如下所示與有機電致發光裝置有關者。此其他化合物亦可係聚合的。

根據本發明之化合物及混合物適用於電子裝置。此處的電子裝置係用來意指包含至少一層之裝置，該層包含至少一有機化合物。然而，此處的組件亦可包含無機材料或亦完全由無機材料構建之層。

本發明因此另外關於根據本發明之化合物或混合物於電子裝置(特別是於有機電致發光裝置)中之用途。

本發明又另外關於一種包含至少一種如上所述之根據本發明之化合物或混合物之電子裝置。以上針對化合物所述之偏好亦適用於電子裝置。

電子裝置較佳係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置(OLED, PLED)、有機積體電路(O-IC)、有機場效電晶體(O-FET)、有機薄膜電晶體(O-TFT)、有機發光電晶體(O-LET)、有機太陽能電池(O-SC)、有機染料敏化太陽能電池、有機光學偵測器、有機感光器、有機場淬滅裝置(O-FQD)、發光電化學電池(LEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及「有機電漿子發光裝置(organic plasmon emitting device)」(D. M. Koller等人，*Nature Photonics* **2008**, 1-4)，較佳係有機電致發光裝置(OLED, PLED)，特佳係磷光OLED。

有機電致發光裝置包含陰極、陽極及至少一發光層。除了此等層以外，有機電致發光裝置亦可包含其他層，例



如在各情況下一或多個電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、電子傳輸層、電子注入層、激子阻擋層、電子阻擋層及/或電荷產生層。同樣可在兩個發光層之間引入具有例如激子阻擋功能之中間層。然而，應指出的是此等層之各者不一定必須存在。有機電發致光裝置在此可包含一個發光層或多個發光層。若存在多個發光層，則此等較佳地具有總計多個在380奈米與750奈米之間的發光最大值，導致整體白色發光，亦即將能夠發螢光或磷光的各種發光化合物使用於發光層中。特佳者係具有三個發光層之系統，其中該三層呈現藍色、綠色及橙色或紅色發光(基本結構參見例如WO 2005/011013)。此等可係螢光或磷光發光層或混合系統，其中螢光及磷光發光層彼此結合。

根據上示實施例的根據本發明之化合物可用於各種層中，取決於精確結構及取代基。

較佳者係包含式(1)或根據較佳實施例之化合物作為螢光發射體或TADF(熱活化延遲螢光)發射體之有機電致發光裝置。更特別地，式(1)或根據較佳實施例之化合物，較佳地係用作為顯示即時螢光(prompt fluorescence)之藍色螢光發射體或用作為藍色TADF發射體。

根據本發明之另一較佳實施例，式(1)或根據較佳實施例之化合物係用於超螢光系統中，如例如

WO2015/135624中所述，其包含式(1)之化合物作為螢光發射體以及選自熱活化延遲螢光化合物(TADF化合物)之敏化劑化合物，其中敏化劑的能量係經由Förster共振能量轉



移而轉移至螢光發射體。

根據本發明之又另一較佳實施例，式(1)或根據較佳實施例之化合物係用於超磷光系統中，如例如 WO2001/08230A1中所述，其包含式(1)之化合物作為螢光發射體以及選自磷光化合物之敏化劑化合物，其中敏化劑的能量係經由 Förster 共振能量轉移而轉移至螢光發射體。

取決於精確的取代，式(1)之化合物亦可用於電子傳輸層及/或電子阻擋層或激子阻擋層及/或電洞傳輸層中。上示較佳實施例亦適用於該等材料於有機電子裝置中材料的用途。

式(1)之化合物特別適合用作為藍色發射體化合物。有關的電子裝置可包含單一發光層(其包含根據本發明之化合物)，或者其可包含二或更多個發光層。其他發光層在此可包含一或多種根據本發明之化合物或替代地其他化合物。

若將根據本發明之化合物用作為發光層中之螢光發射體或 TADF 發射體，則較佳地係與一或多種基質材料組合使用。此處的基質材料係用來意指存在於發光層中(較佳作為主要成分)並且在裝置操作時不發光之材料。

較佳地，基質化合物之玻璃轉移溫度  $T_g$  係大於  $70^\circ\text{C}$ 、更佳係大於  $90^\circ\text{C}$ 、最佳係大於  $110^\circ\text{C}$ 。

發光化合物在發光層之混合物中的比例係在 0.1 與 50.0% 之間、較佳地在 0.5 與 20.0% 之間、特佳地在 1.0 與 10.0% 之間。對應地，基質材料或多種基質材料的比例在



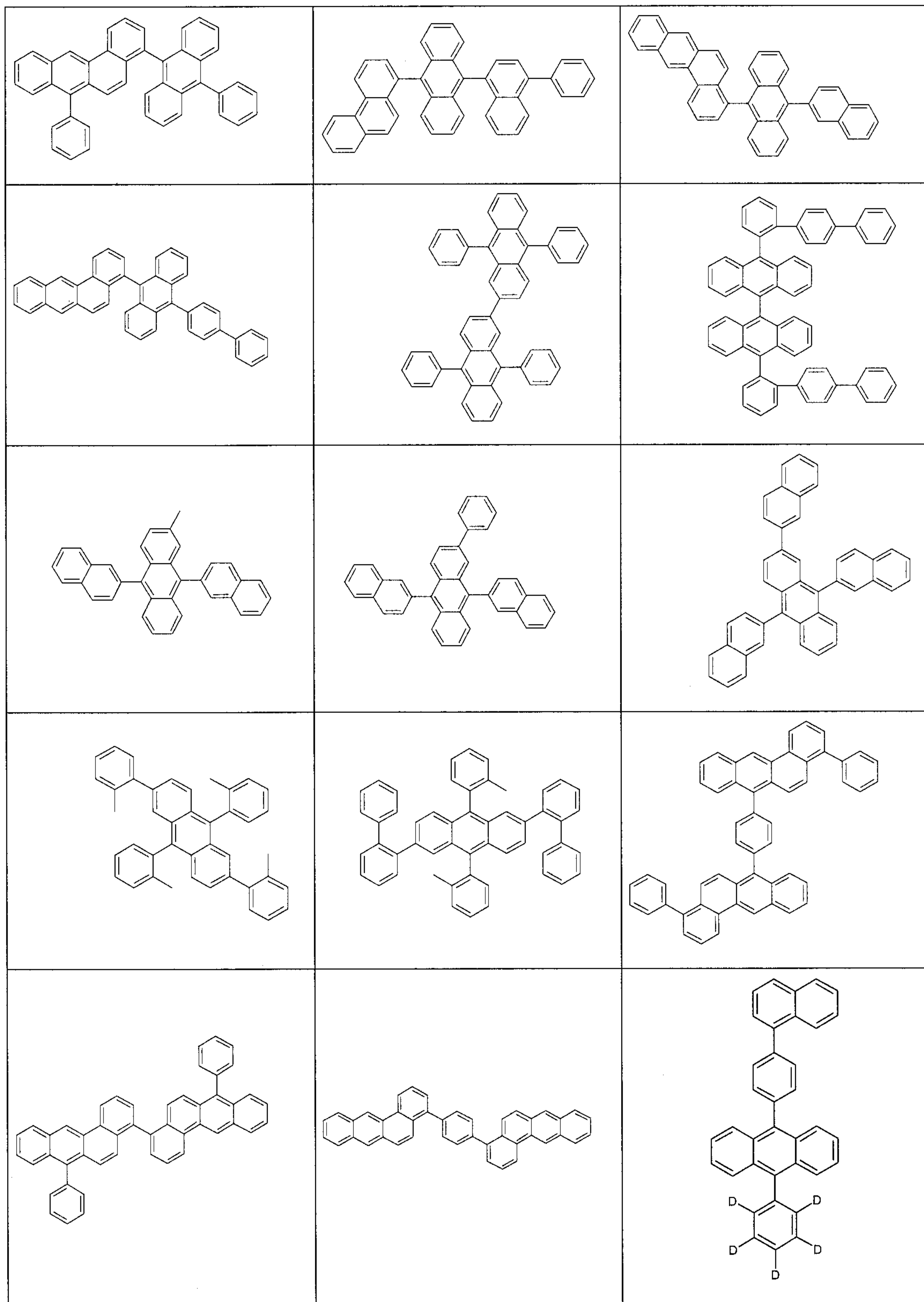
50.0與99.9%之間、較佳地在80.0與99.5%之間、特佳地在90.0與99.0%之間。

為了本申請案之目的，以%表示的比例之規格用來意指，如果化合物係從氣相施加，則為體積%，如果化合物係從溶液施加，則為重量%。

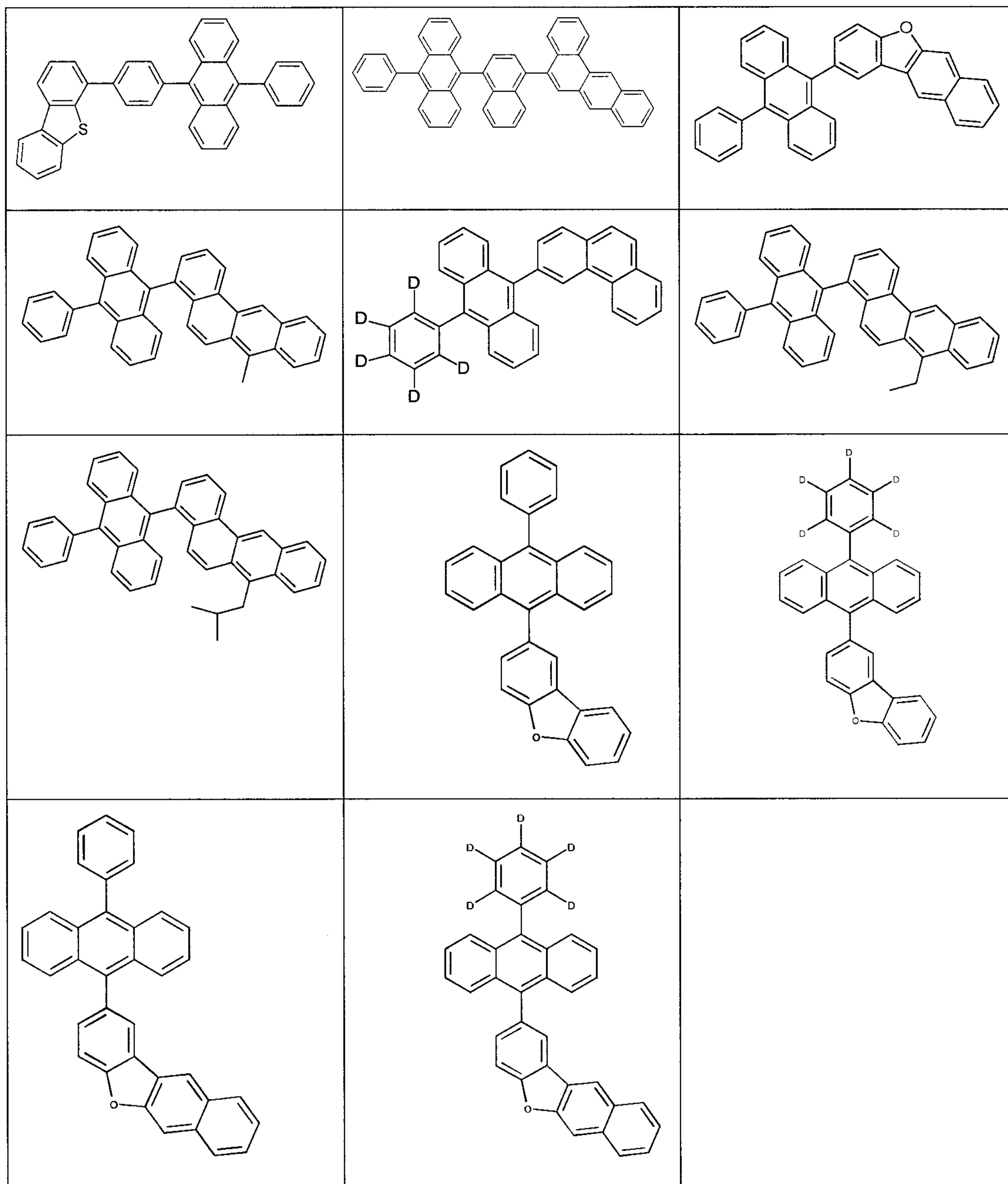
如果式(1)或根據較佳實施例之化合物係用於發光層中作為螢光發射體(即時螢光)，則用於與螢光發射體組合之較佳基質材料係選自以下類別：寡聚伸芳基(例如，根據EP 676461之2,2',7,7'-四苯基螺聯萘或二萘蔥)、特別是含有縮合芳族基團之寡聚伸芳基、寡聚伸芳基伸乙烯基(例如，根據EP 676461之DPVBi或螺-DPVBi)、多足金屬錯合物(例如，根據WO 2004/081017)、電洞傳導化合物(例如，根據WO 2004/058911)、電子傳導化合物、特別是酮、氧化膦、亞砷等(例如，根據WO 2005/084081及WO 2005/084082)、阻轉異構物(例如，根據WO 2006/048268)、有機硼酸衍生物(例如，根據WO 2006/117052)或苯并蔥(例如，根據WO 2008/145239)。特佳的基質材料係選自以下類別：寡聚伸芳基(其包含萘、蔥、苯并蔥及/或芘、或此等化合物之阻轉異構物)、寡聚伸芳基伸乙烯基、酮、氧化膦及亞砷。非常特佳的基質材料係選自以下類別：寡聚伸芳基(其包含蔥、苯并蔥、苯并菲及/或芘、或此等化合物之阻轉異構物)。在本發明的意義上，寡聚伸芳基旨在意指其中至少三個芳基或伸芳基彼此鍵結之化合物。

用於與在發光層中作為螢光發射體所使用之式(1)之  
化合物組合之特佳的基質材料描述於下表中：





若將根據本發明之化合物用作發光層中之螢光發光化合物，則該化合物可與一或多種其他螢光發光化合物組合使用。

除了根據本發明之化合物外，較佳的螢光發射體係選自芳基胺之類別。在本發明的意義上，芳基胺係用來意指含有三個直接鍵結至氮之經取代或未經取代之芳族或雜芳族環系統之化合物。此等芳族或雜芳族環系統之至少一者

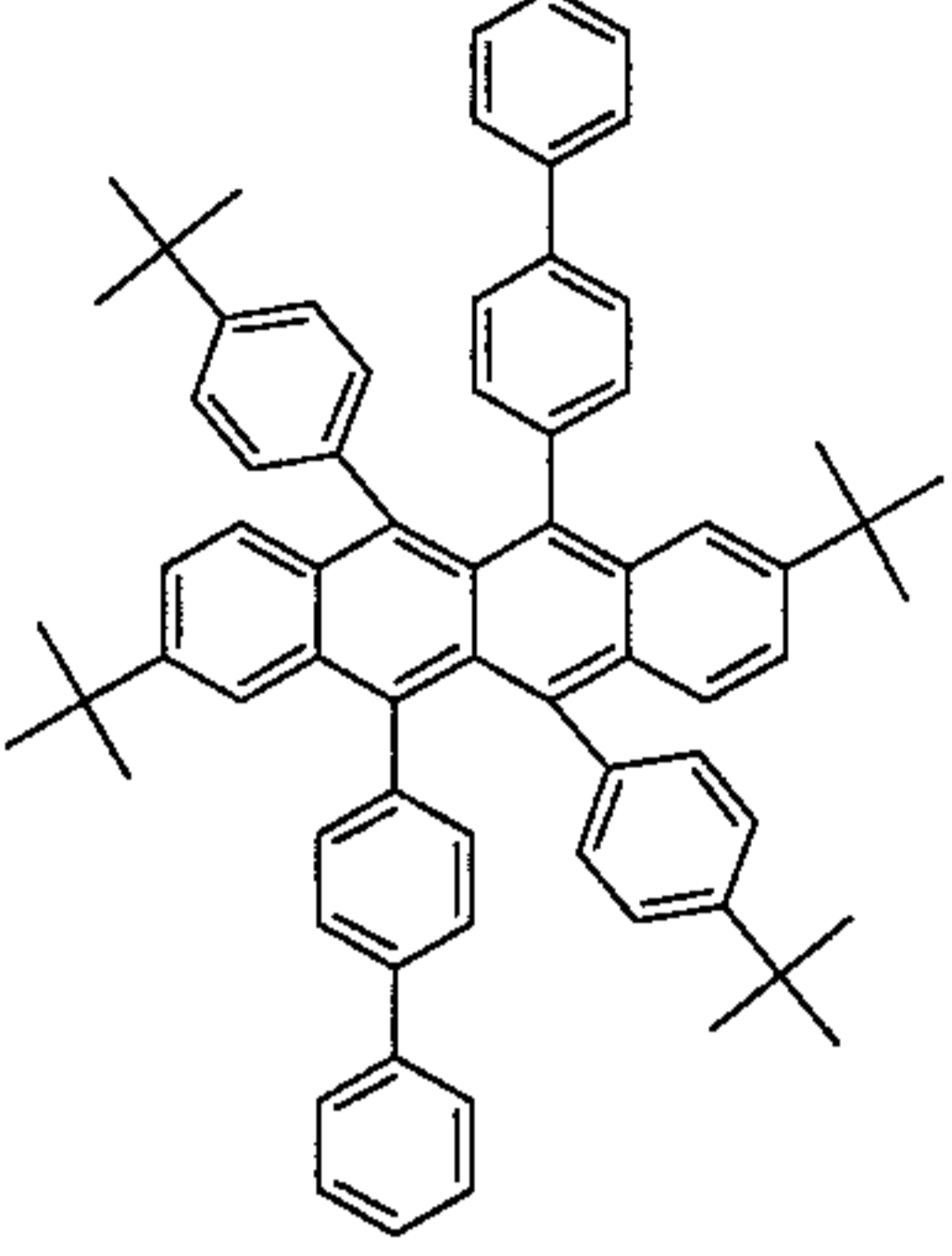
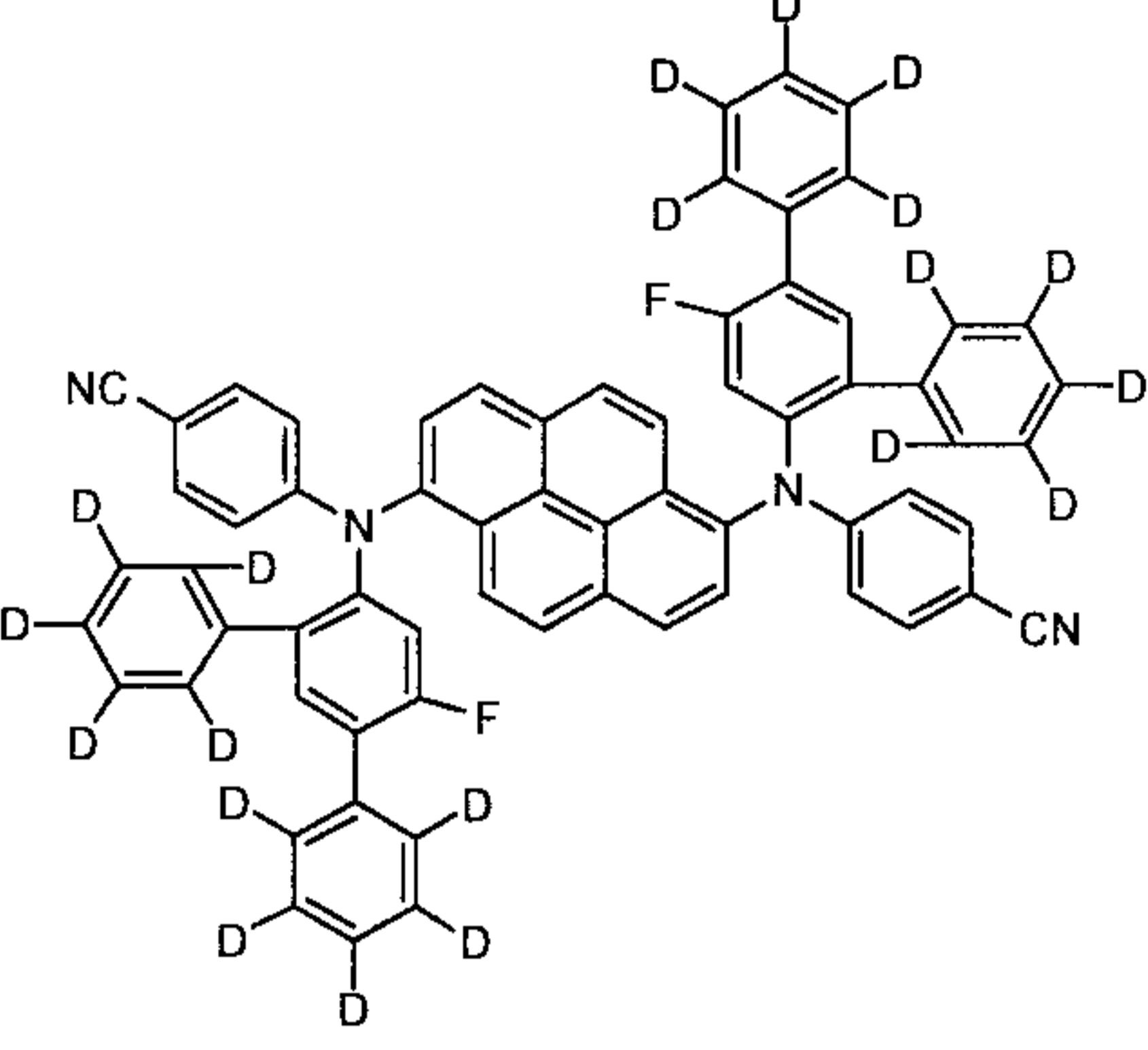
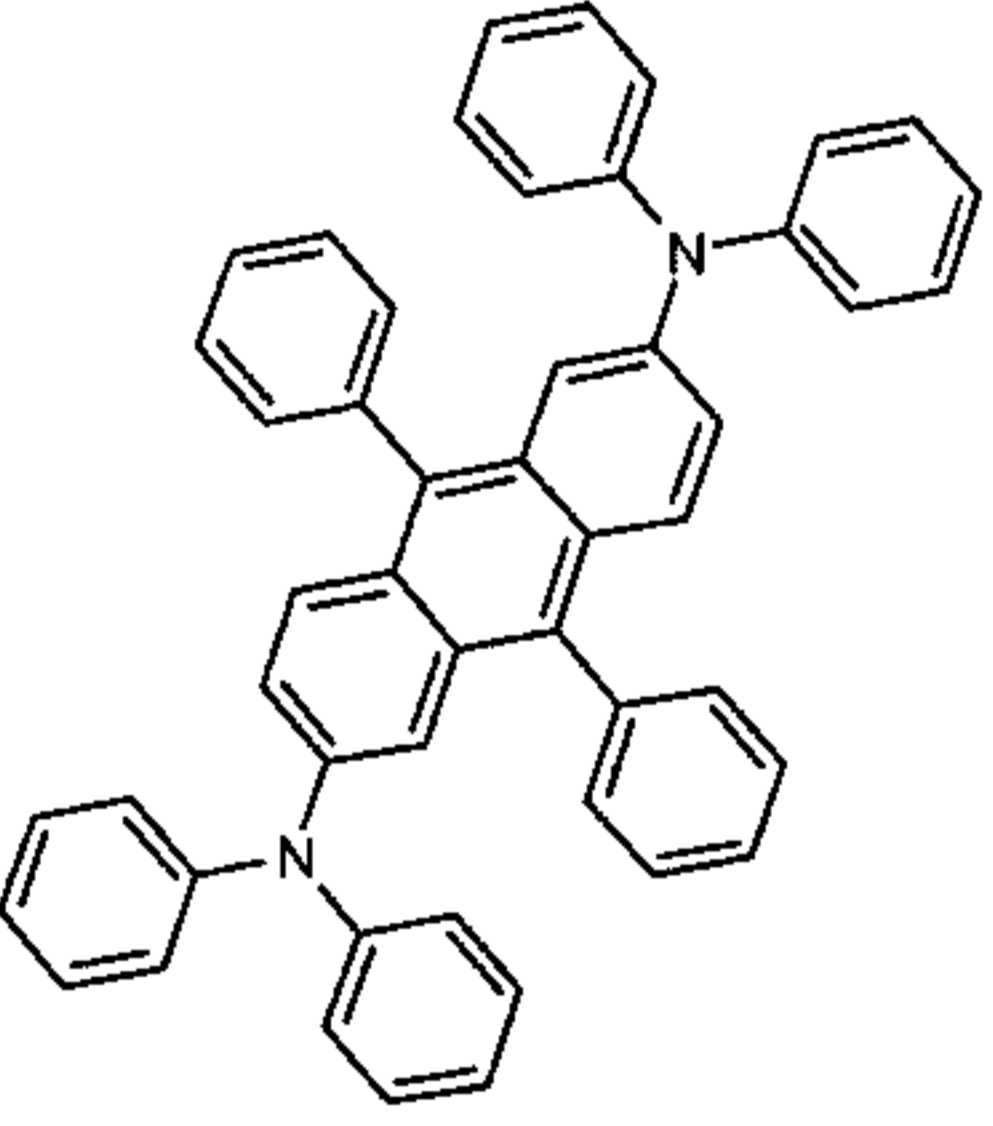
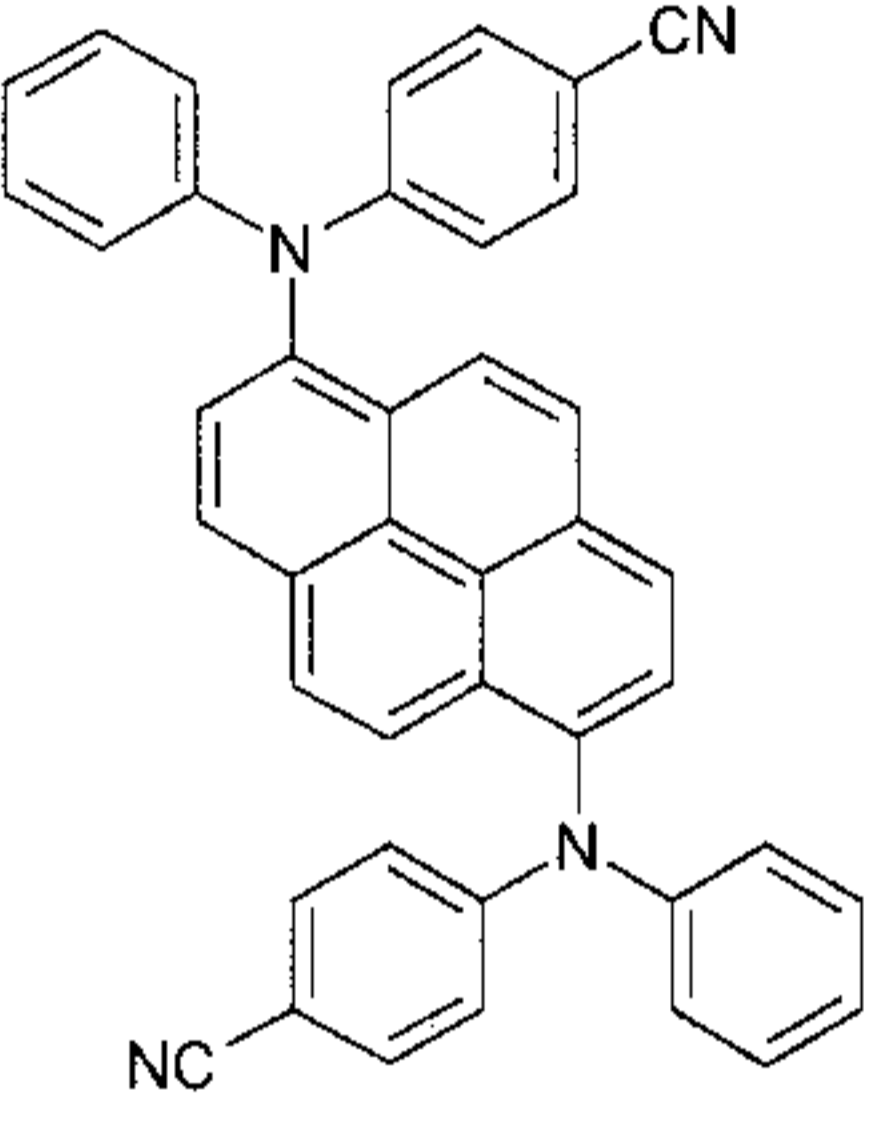
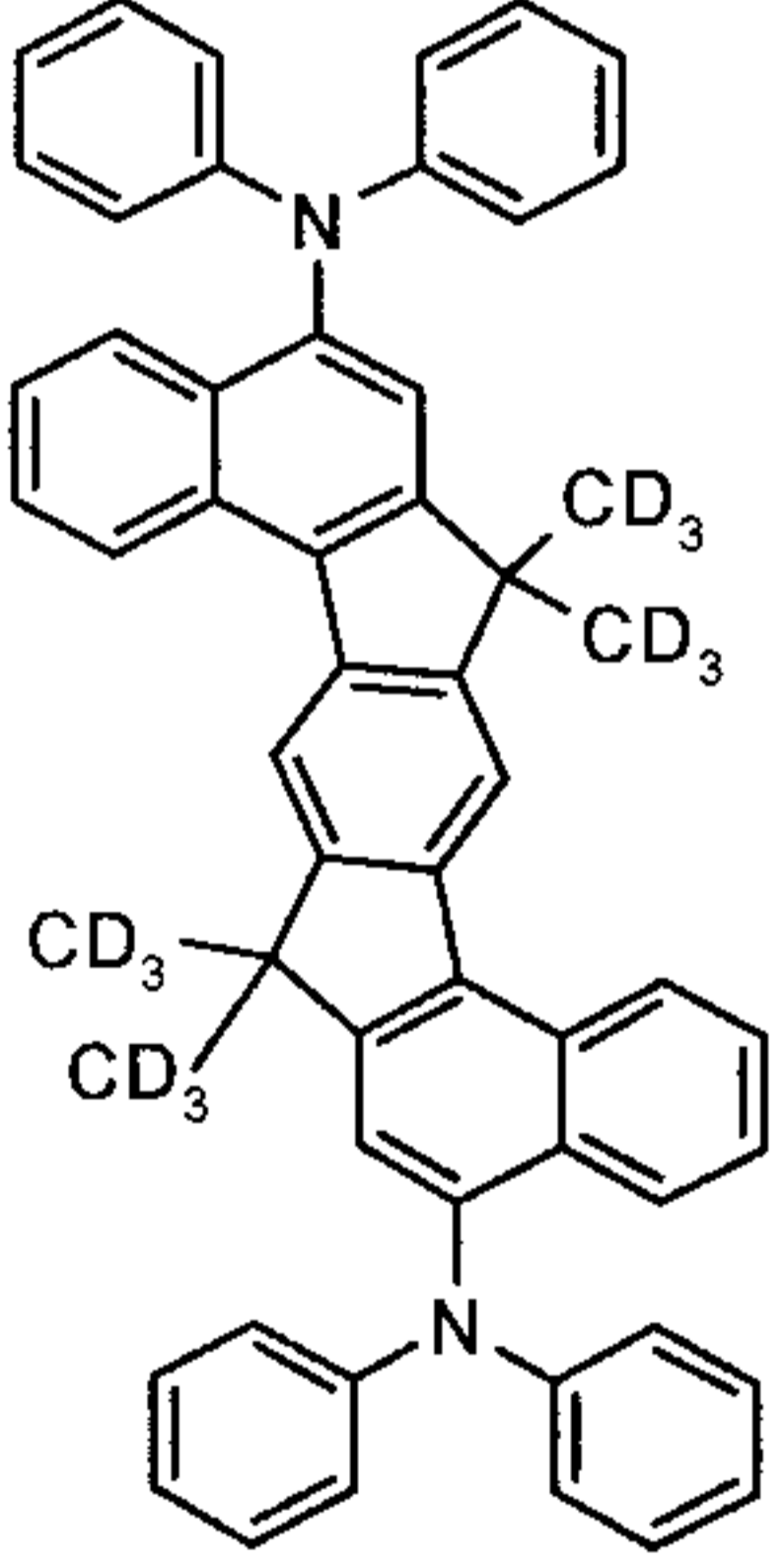
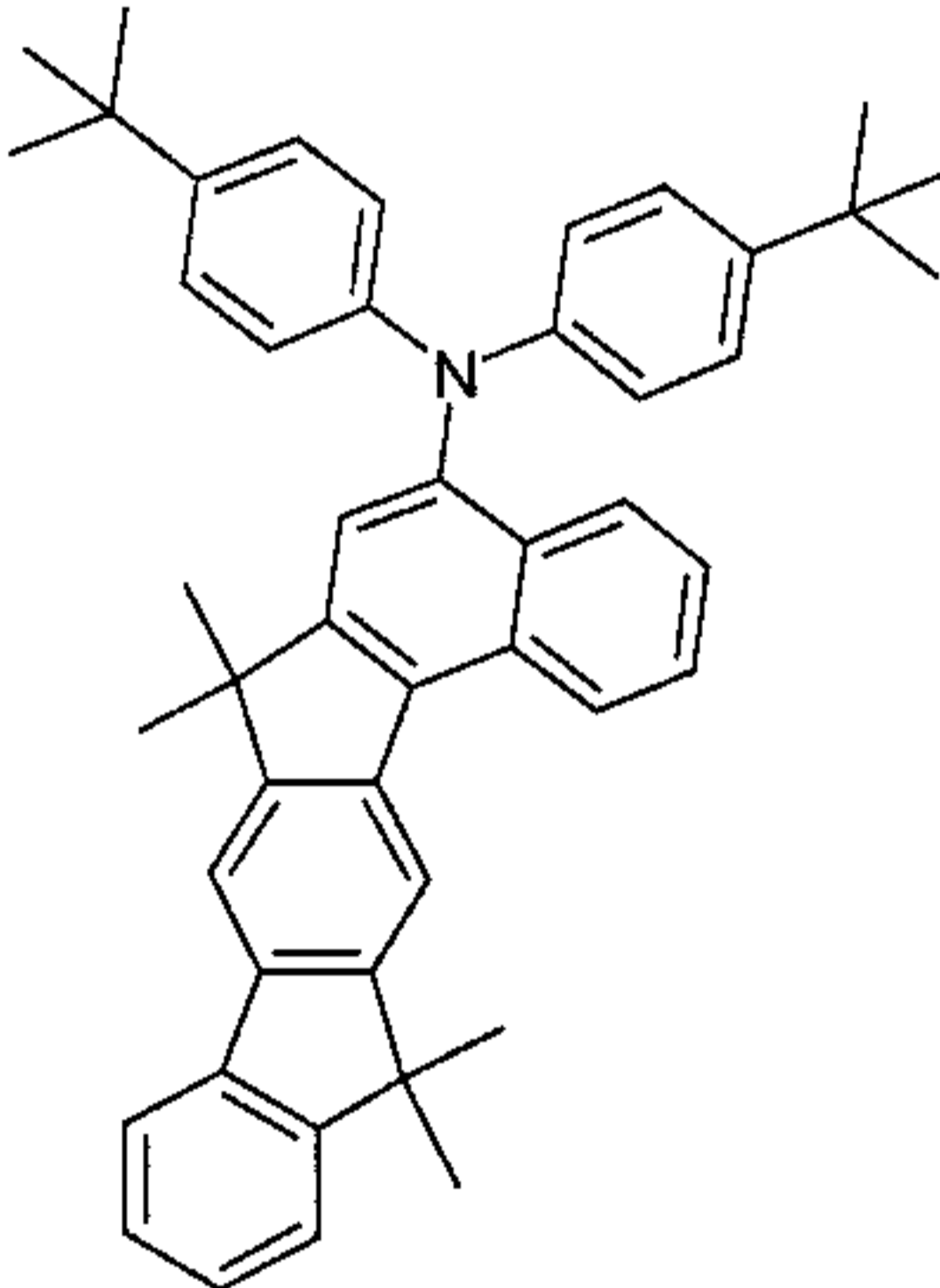


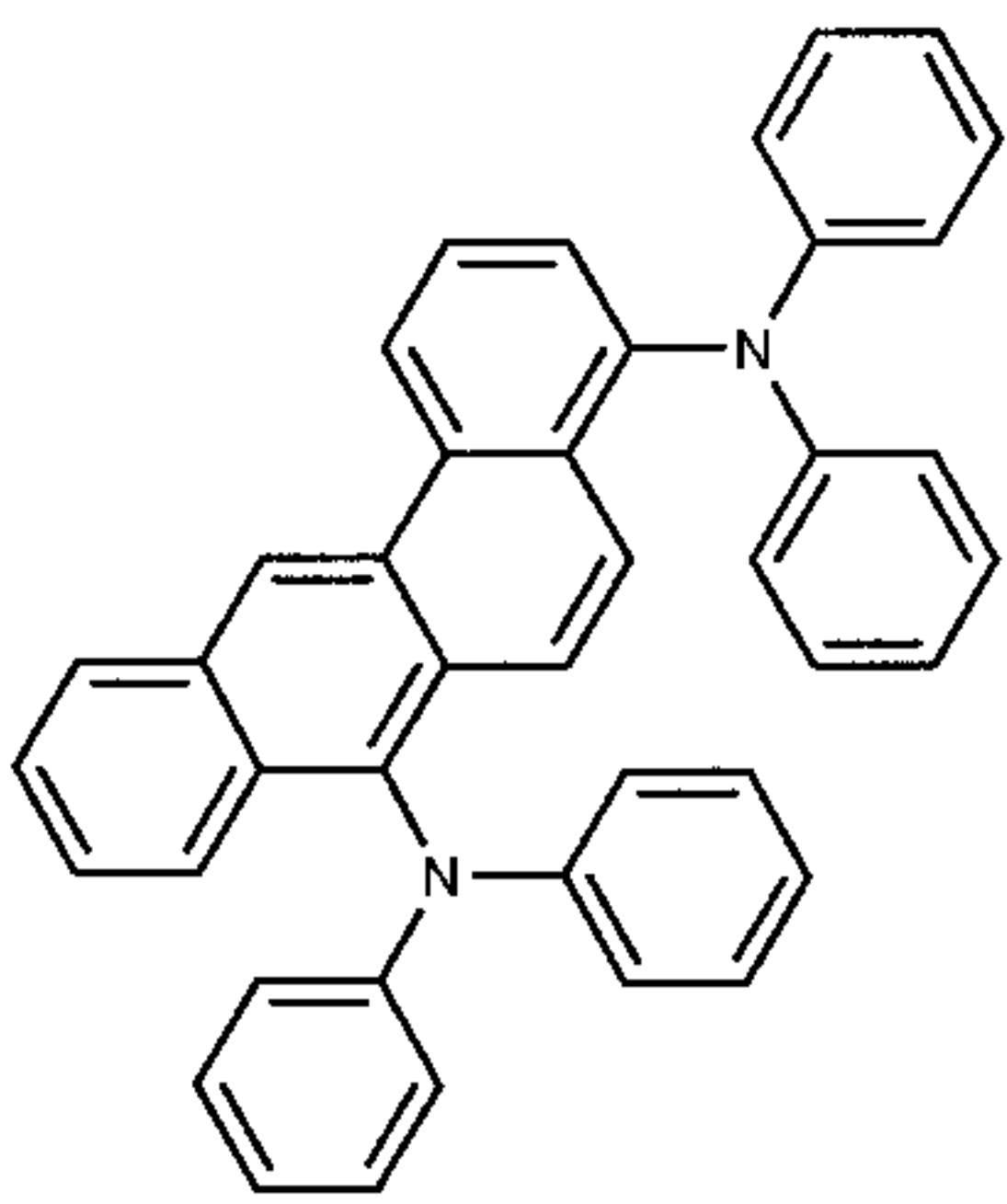
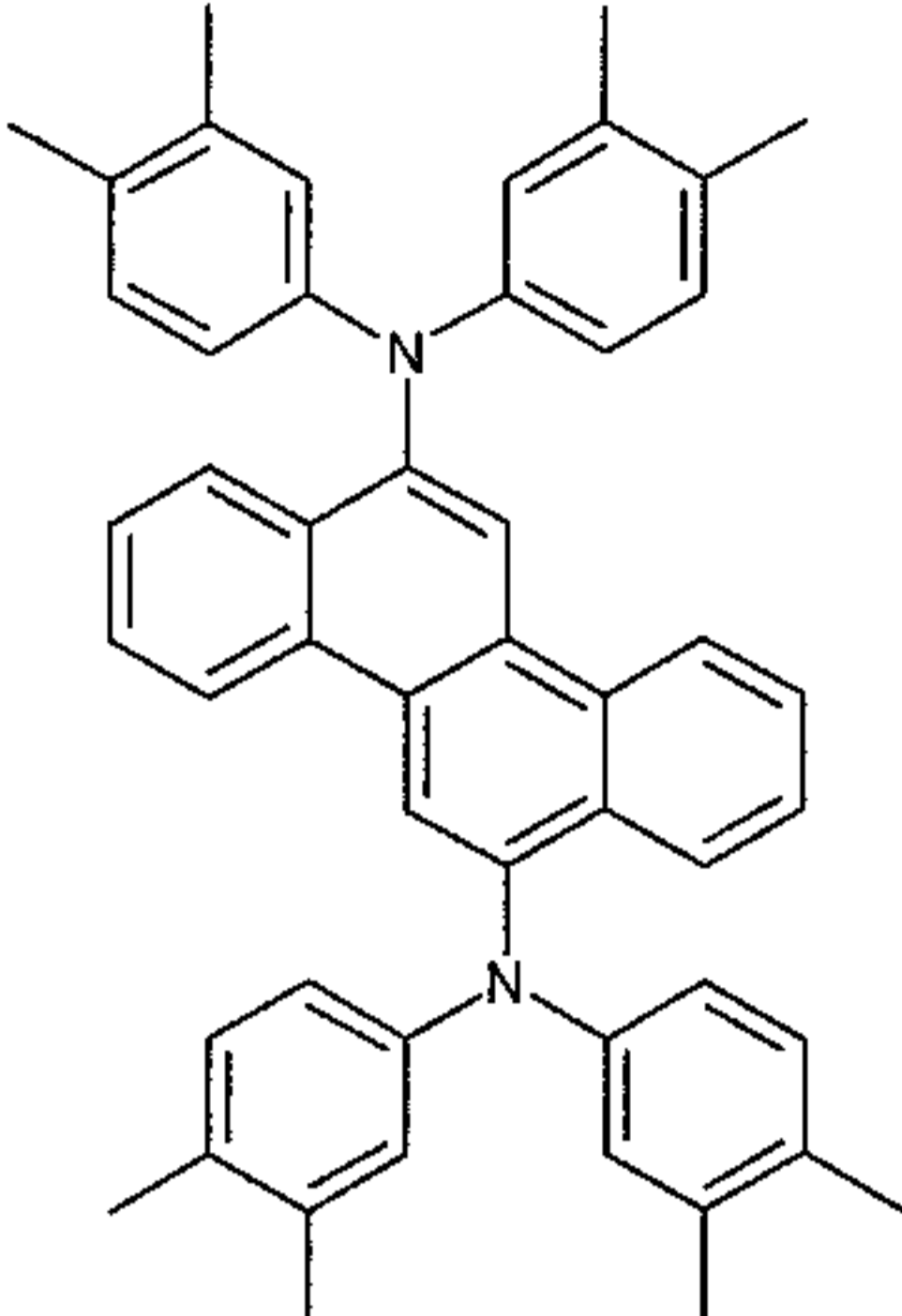
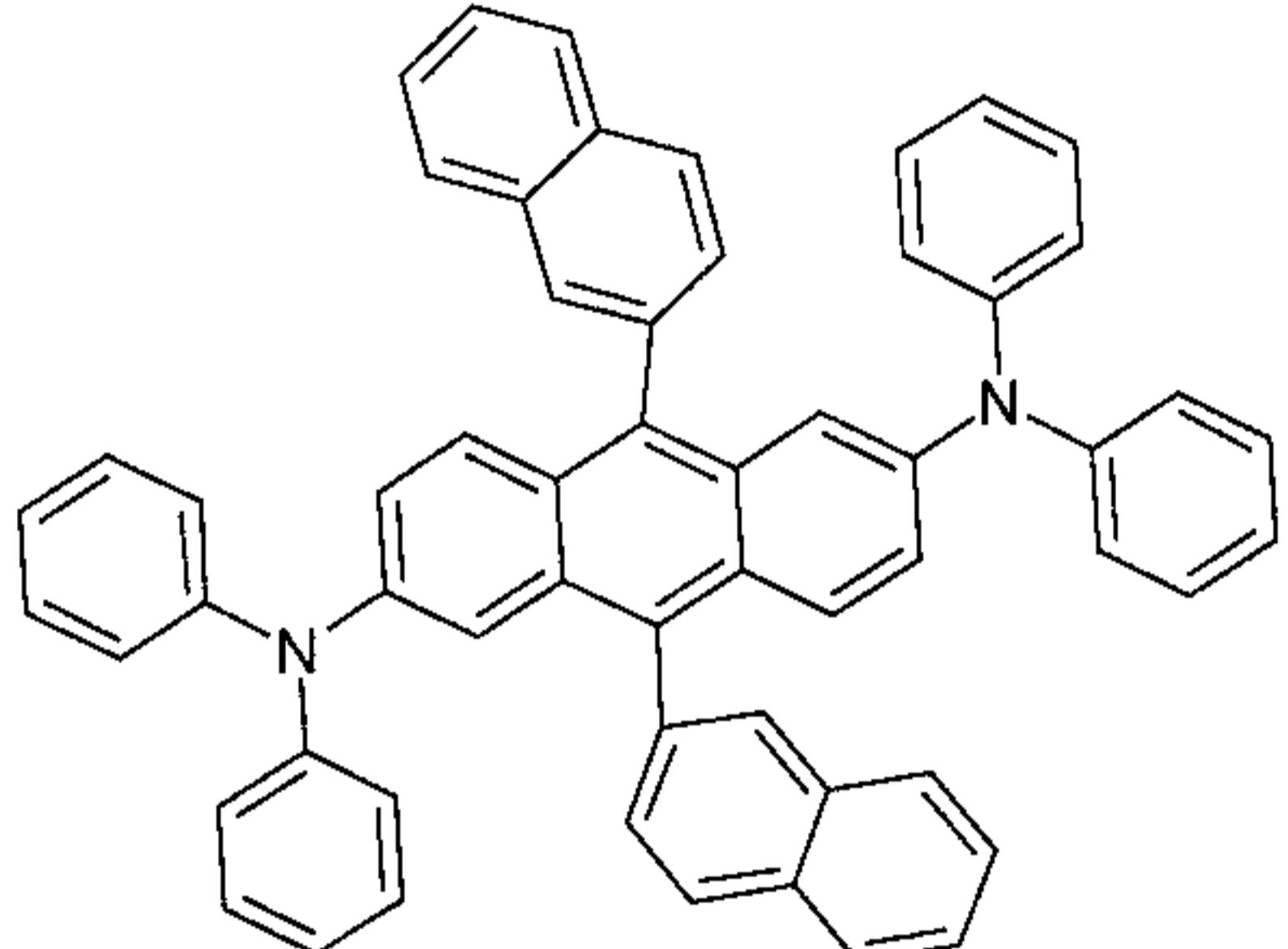
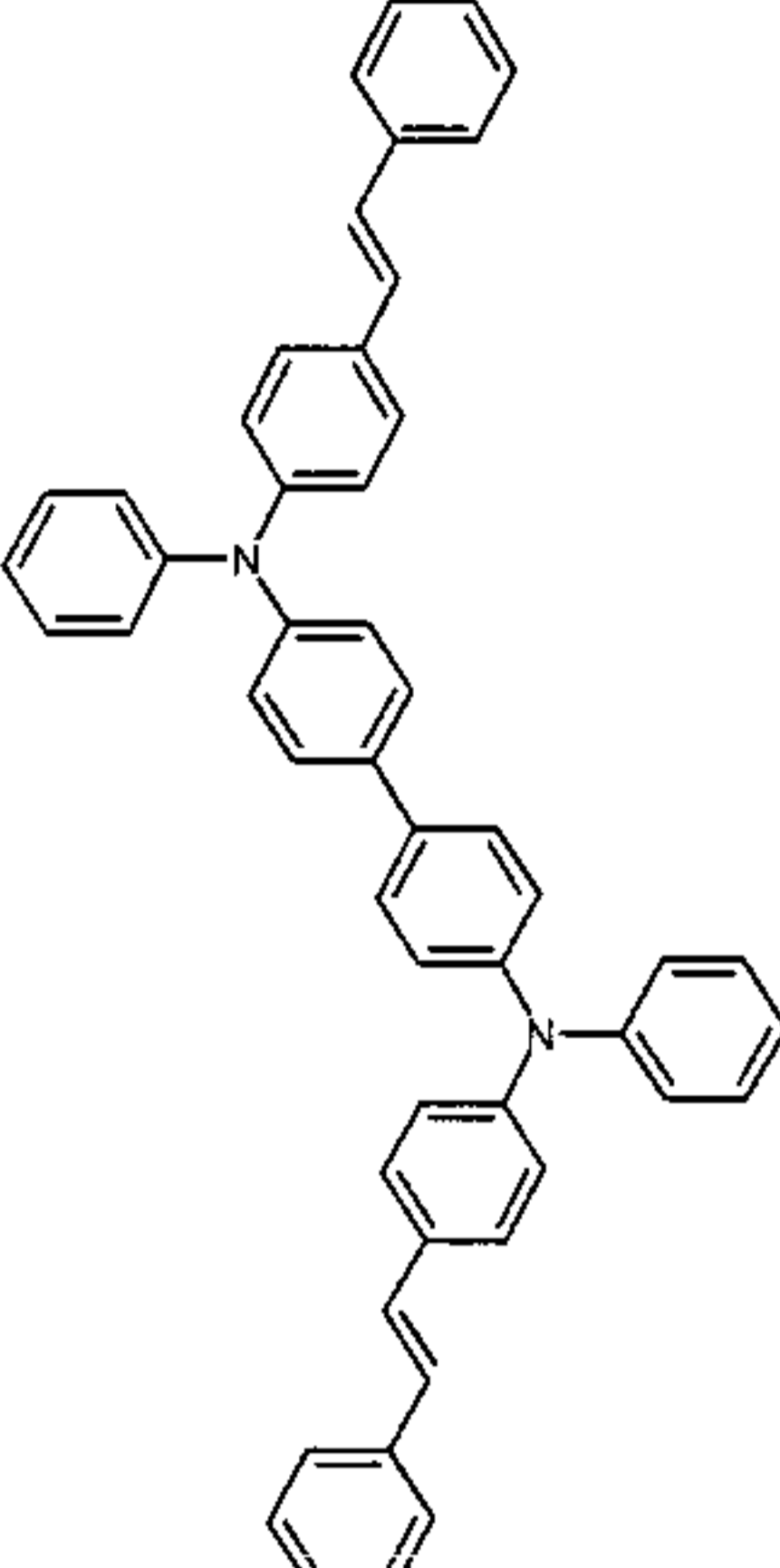
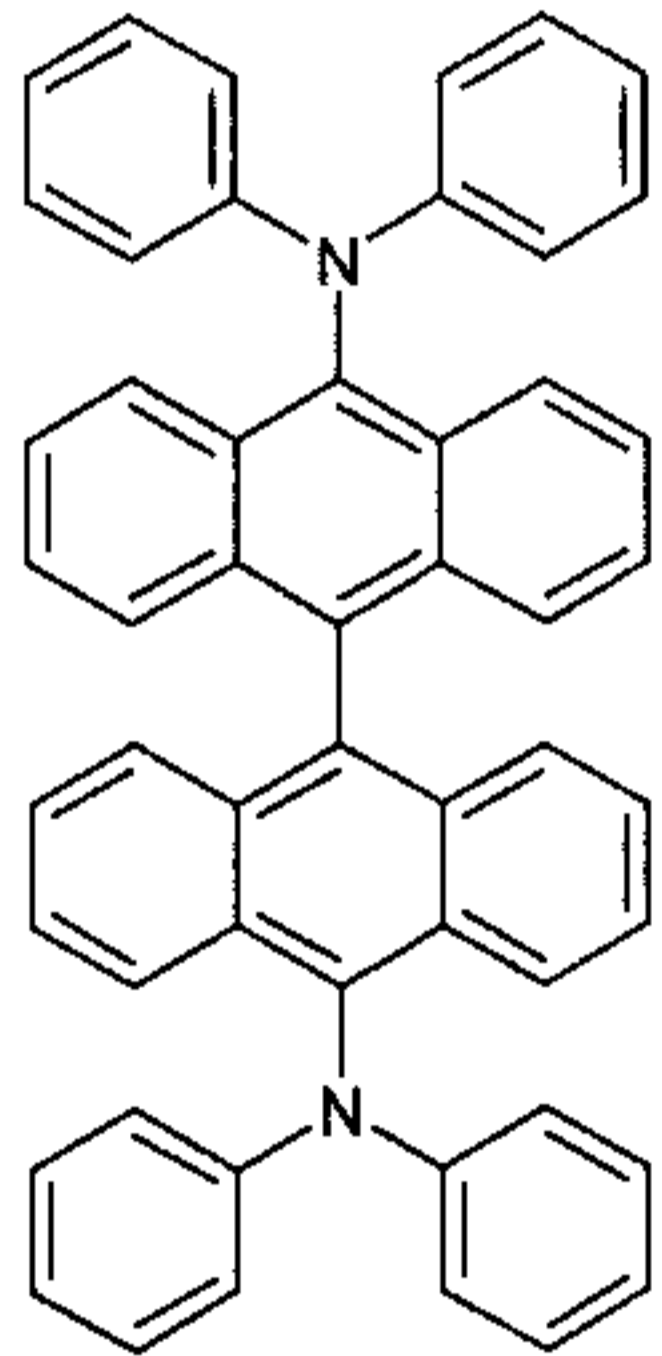
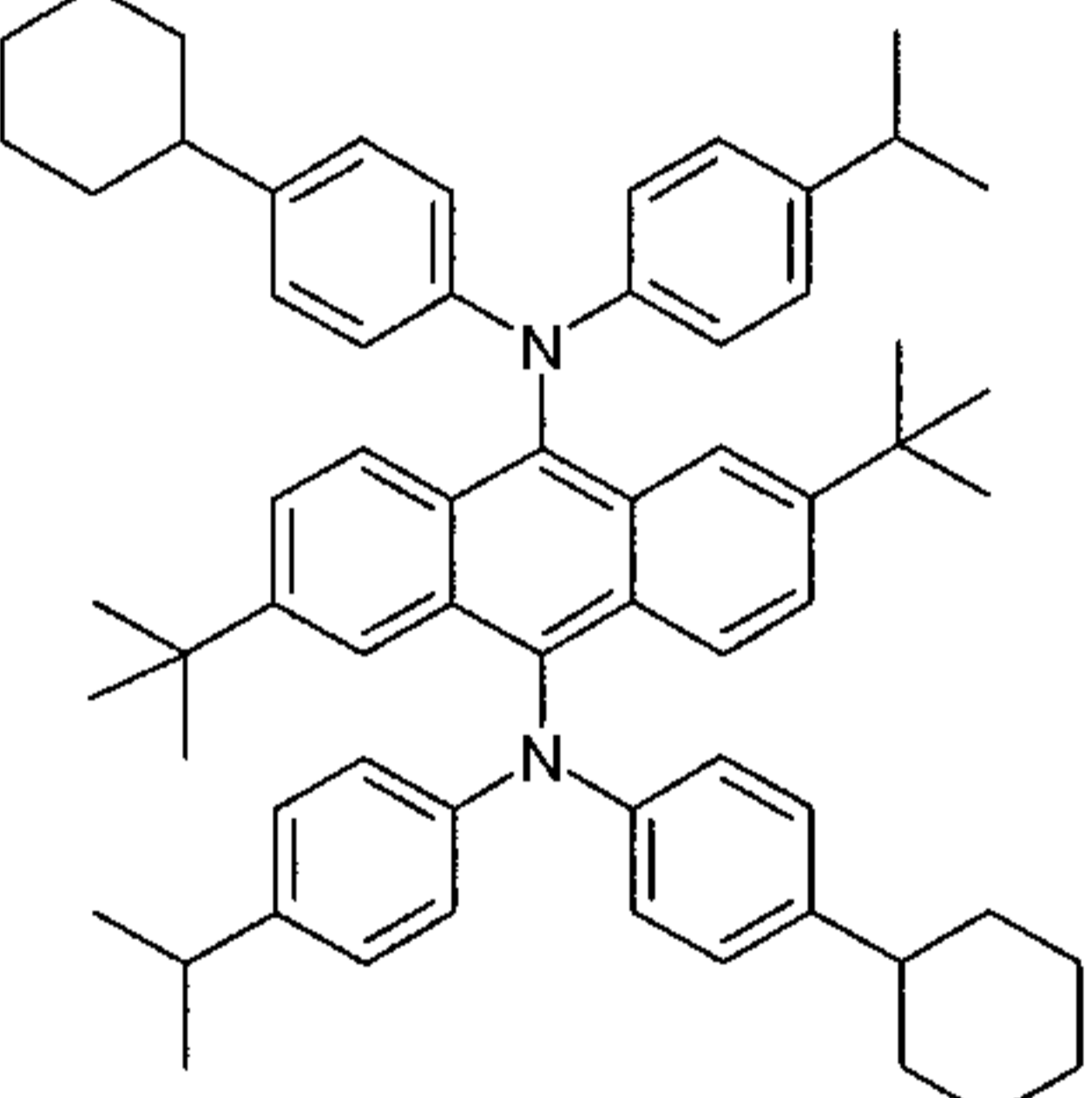
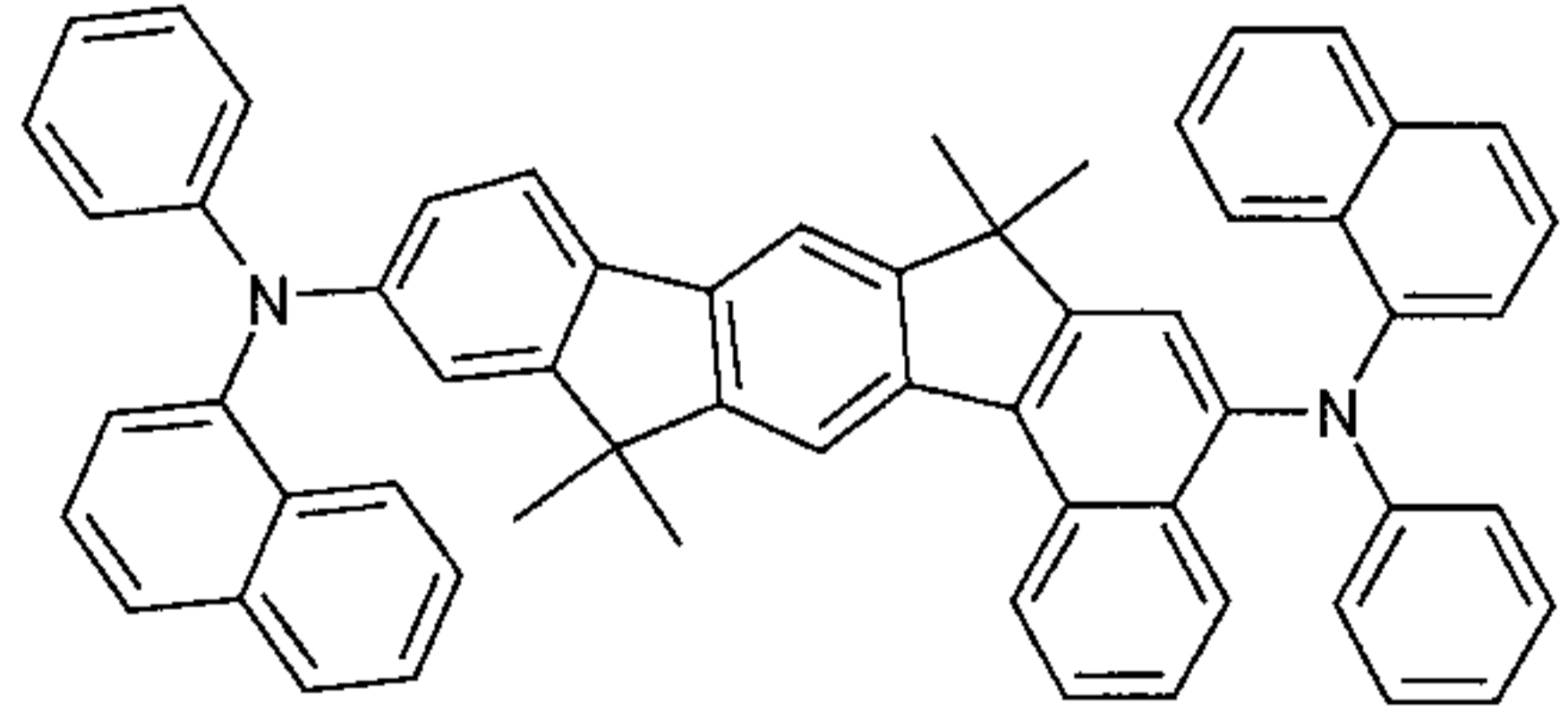
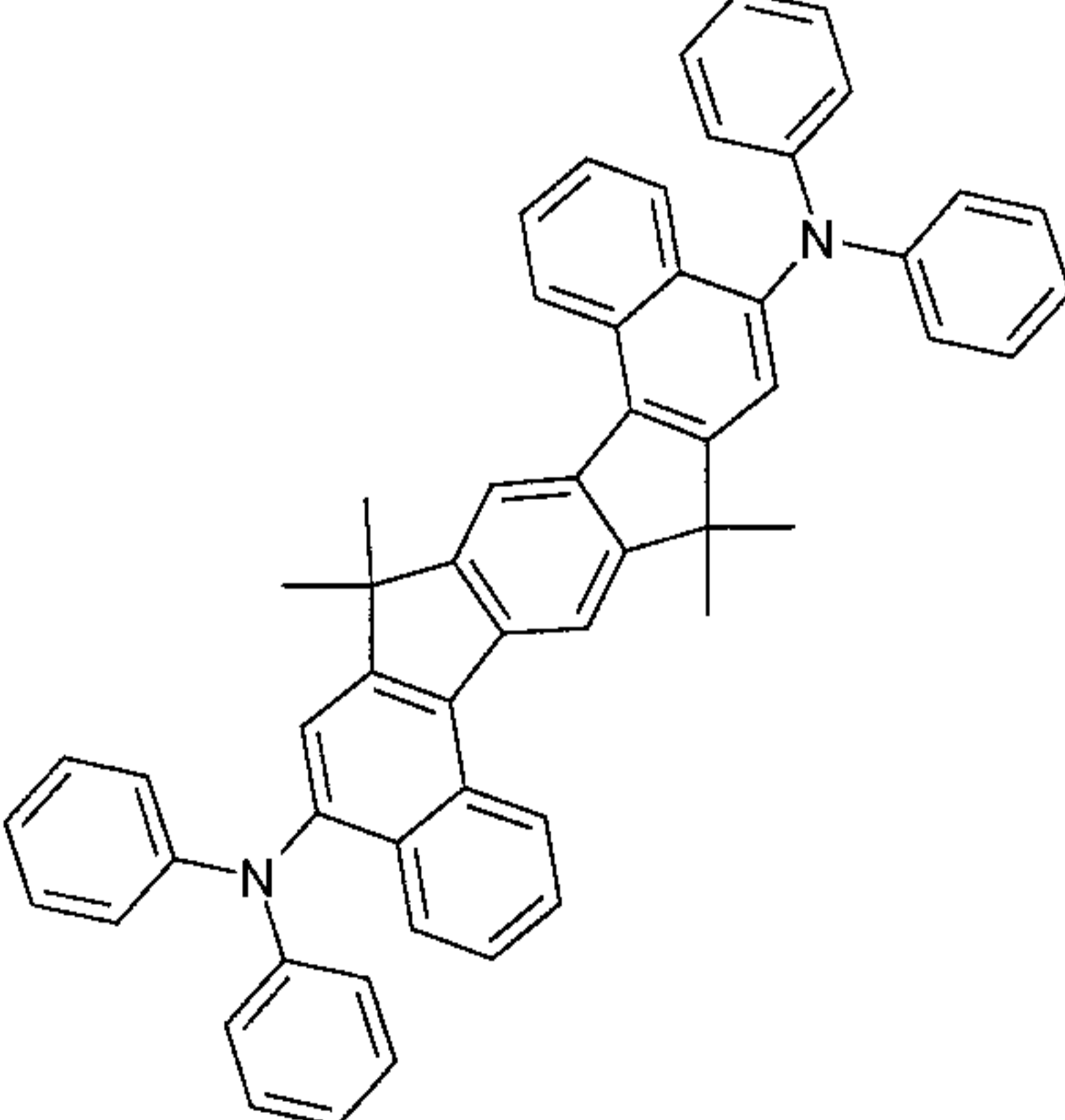
較佳係縮合環系統，特佳地具有至少14個芳族環原子。其較佳的實例係芳族蔥胺、芳族蔥二胺、芳族芘胺、芳族芘二胺、芳族萸胺或芳族萸二胺。芳族蔥胺係用來意指其中一個二芳基胺基直接鍵結至蔥基(較佳係在9-位置)之化合物。芳族蔥二胺係用來意指其中兩個二芳基胺基直接鍵結至蔥基(較佳係在9,10-位置)之化合物。與此類似地定義芳族芘胺、芘二胺、萸胺及萸二胺，其中二芳基胺基較佳係鍵結至芘之1-位置或1,6-位置上。其他較佳發射體係茚并萸胺或茚并萸二胺(例如根據WO 2006/108497或WO 2006/122630)、苯并茚并萸胺或苯并茚并萸二胺(例如根據WO 2008/006449)及二苯并茚并萸胺或二苯并茚并萸二胺(例如根據WO 2007/140847)，以及含有縮合芳基之茚并萸衍生物(其揭示於WO 2010/012328中)。又其他較佳發射體係如於WO 2015/158409中所揭示之苯并蔥衍生物、如於WO 2017/036573中所揭示之蔥衍生物、如於WO 2016/150544中所揭示之萸二聚體或如於WO 2017/028940及WO 2017/028941中所揭示之啡啶衍生物。同樣較佳者係揭示於WO 2012/048780及WO 2013/185871中之芘芳基胺(pyrenarylamine)。同樣較佳者係揭示於WO 2014/037077中之苯并茚并萸胺(benzoindenofluorenamine)、揭示於WO 2014/106522之苯并萸胺及揭示於WO 2014/111269或WO 2017/036574中之茚并萸。

除了根據本發明之化合物外，可與本發明之化合物組

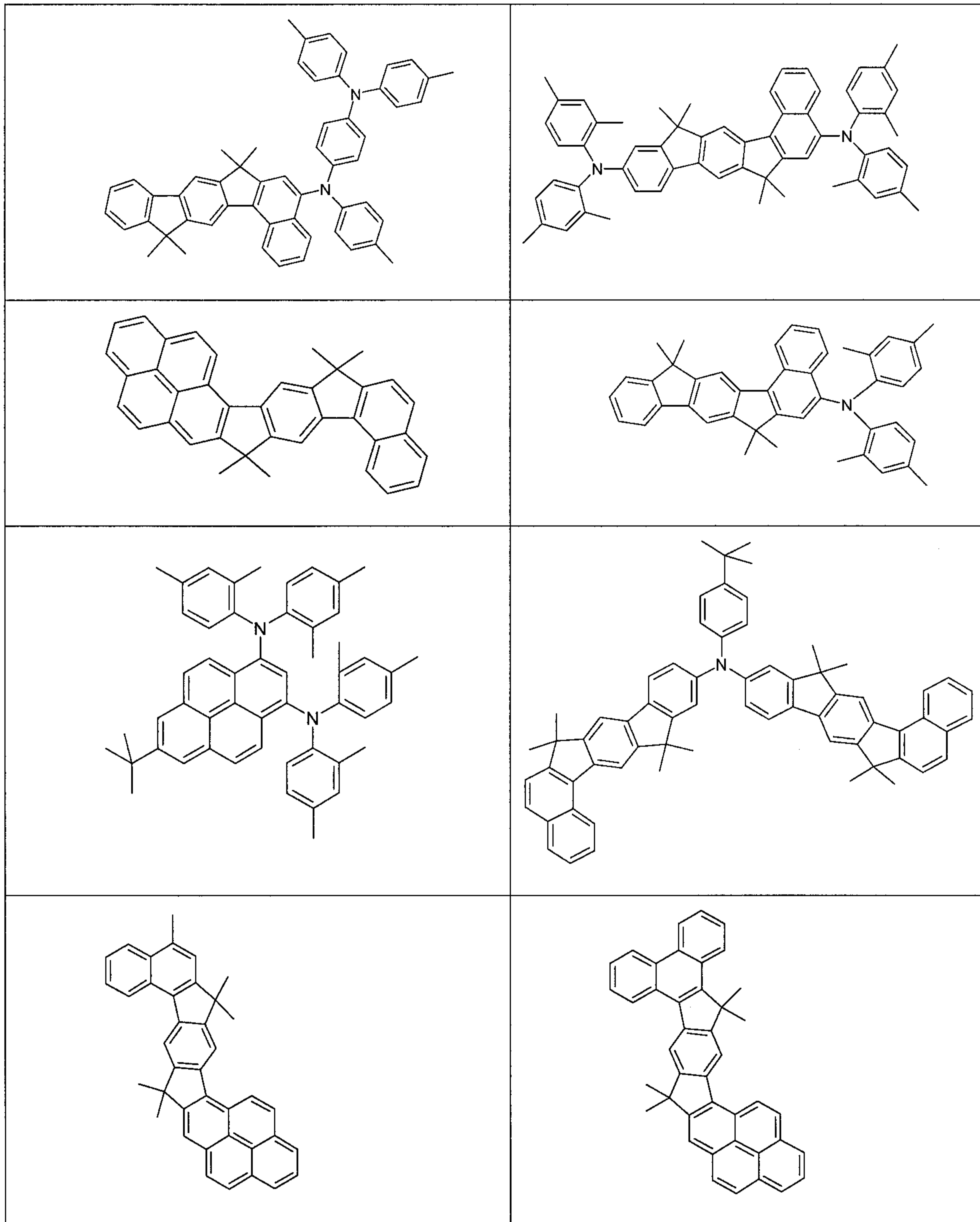


合使用於發光層中或者可在同一裝置的另一發光層中使用的較佳螢光發光化合物之實例描述於下表中：

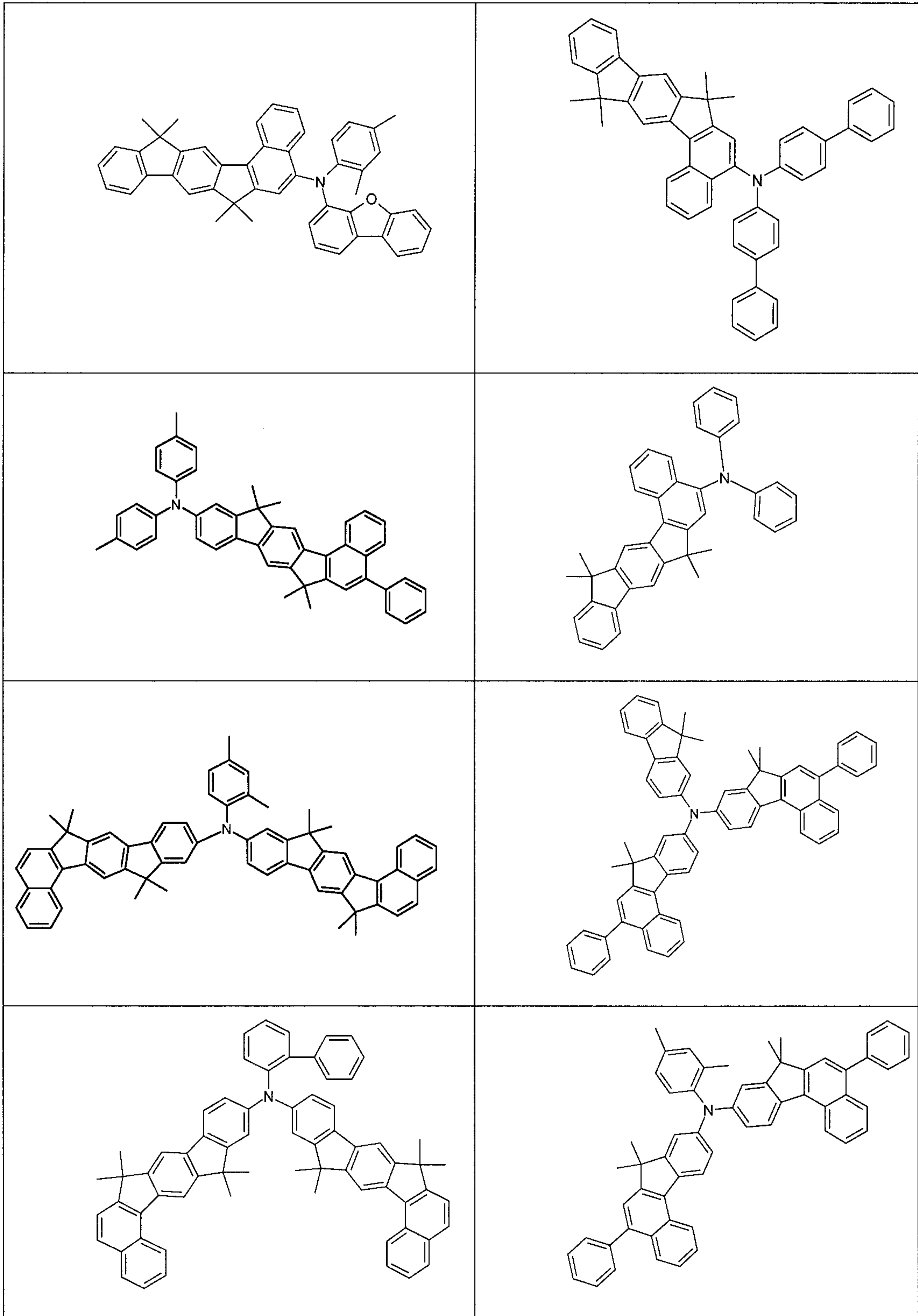
	
	
	

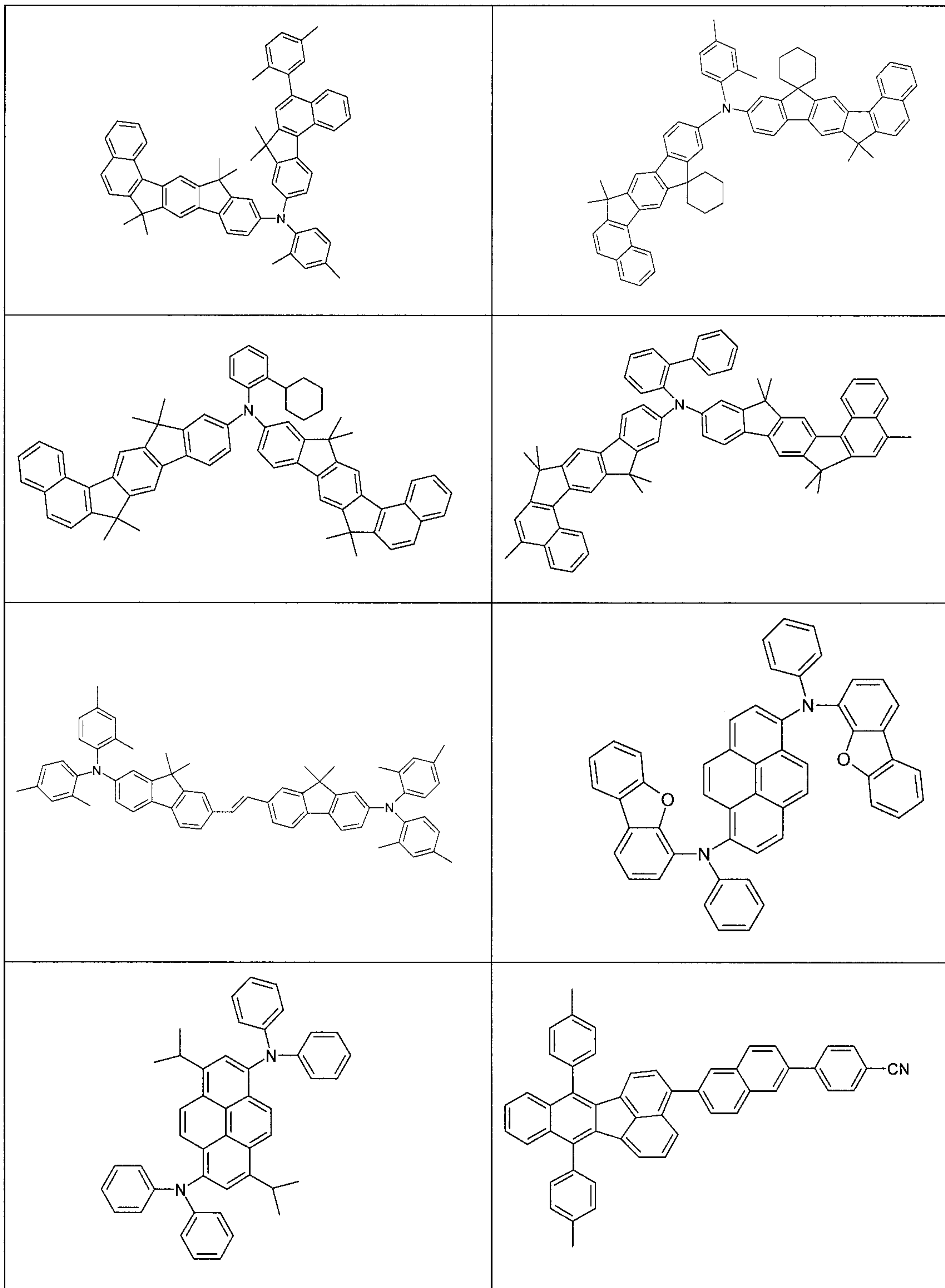
	
	
	
	



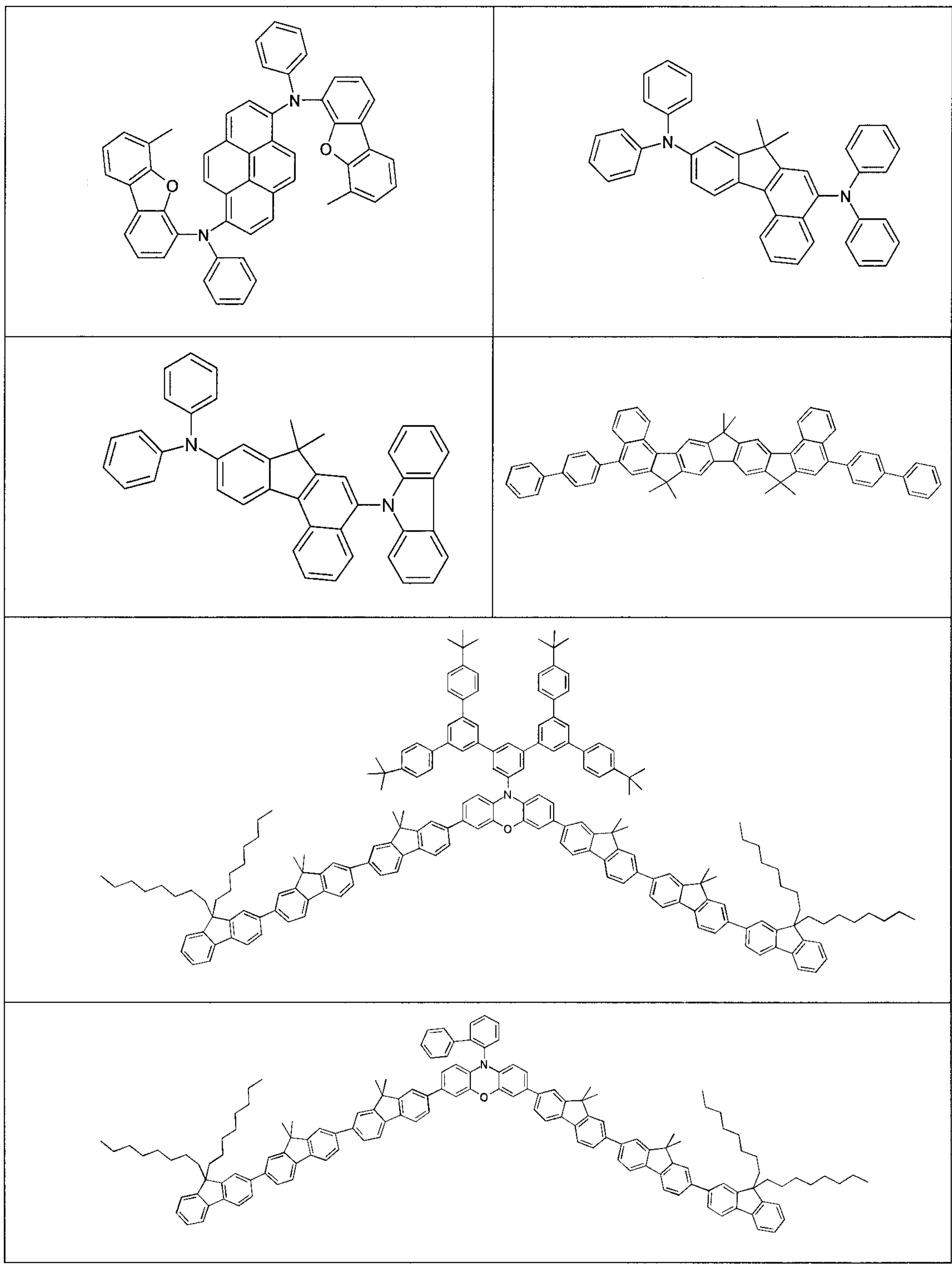


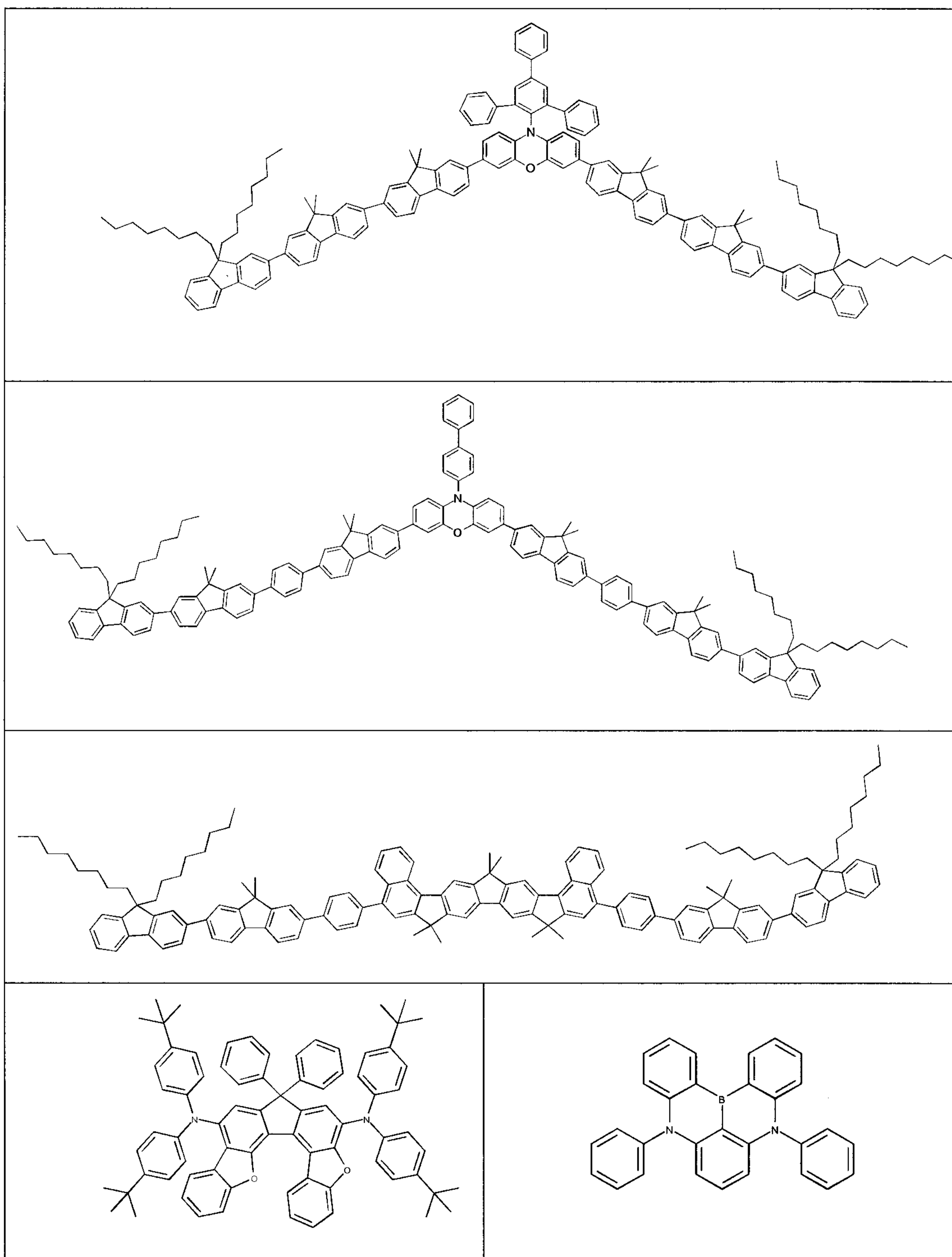












如果式(1)或根據較佳實施例之化合物在發光層中用作為TADF發射體，則與TADF發射體組合使用的較佳基質材料係選自下列類別：酮、氧化磷、亞砷及砷(例如根據WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或WO 2010/006680)、三芳基胺、吡啶衍生物(例如，CBP



(N,N-雙咔唑基聯苯)、m-CBP或在WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527、WO 2008/086851或US 2009/0134784中揭示之咔唑衍生物)、二苯并呋喃衍生物、吡啶并咔唑衍生物(例如根據WO 2007/063754或WO 2008/056746)、茚并咔唑衍生物(例如根據WO 2010/136109或WO 2011/000455)、氮雜咔唑(例如根據EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160)、雙極性基質材料(例如根據WO 2007/137725)、矽烷(例如根據WO 2005/111172)、氮雜硼雜環戊二烯或有機硼酸酯(例如根據WO 2006/117052)、二氮雜矽雜環戊二烯(diazasilole)衍生物(例如根據WO 2010/054729)、二氮雜磷雜環戊二烯(diazaphosphole)衍生物(例如根據WO 2010/054730)、三吡啶衍生物(例如根據WO 2010/015306、WO 2007/063754或WO 2008/056746)、嘧啶衍生物、喹啉衍生物、Zn錯合物、Al錯合物或Be錯合物(例如根據EP 652273或WO 2009/062578)、或橋聯咔唑衍生物(例如根據US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107或WO 2011/088877)。合適的基質材料亦係描述於WO 2015/135624中者。此等藉由引用併入本發明中。亦可使用二或更多種此等基質材料之混合物。

用於TADF發射體之基質化合物較佳係電荷傳輸的，亦即電子傳輸或電洞傳輸、或雙極性(bipolar)化合物。在本申請案的上下文中，所使用的基質化合物可另外亦係既非電洞傳輸亦非電子傳輸的化合物。在本發明的上下文



中，電子傳輸化合物係具有  $LUMO \leq -2.50 \text{ eV}$  的化合物。較佳地， $LUMO$  係  $\leq -2.60 \text{ eV}$ 、更佳係  $\leq -2.65 \text{ eV}$ 、最佳係  $\leq -2.70 \text{ eV}$ 。 $LUMO$  係最低未佔用分子軌域。化合物之  $LUMO$  值係藉由量子化學計算來判定，一般而言係如之後的實例部分中所述。在本發明的上下文中，電洞傳輸化合物係具有  $HOMO \geq -5.5 \text{ eV}$  的化合物。 $HOMO$  較佳係  $\geq -5.4 \text{ eV}$ 、更佳係  $\geq -5.3 \text{ eV}$ 。 $HOMO$  係最高佔用分子軌域。化合物之  $HOMO$  值係藉由量子化學計算來判定，一般而言係如之後的實例部分中所述。在本發明的上下文中，雙極性化合物係電洞傳輸及電子傳輸兩者的化合物。

用於 TADF 發射體之合適的電子傳導基質化合物係選自下列之物質類別：三吡啶、嘧啶、內醯胺、金屬錯合物（尤其是 Be、Zn 及 Al 錯合物）、芳族酮、芳族氧化膦、氮雜磷雜環戊二烯 (azaphosphole)、經至少一電子傳導取代基取代之氮雜硼雜環戊二烯 (azaborole)、及喹啉。在本發明之較佳實施例中，電子傳導化合物係純有機化合物，亦即不含金屬之化合物。

此外，除了敏化劑及螢光發射體之外，如上所述之超螢光及超磷光系統較佳地包含至少一基質材料。在此情況下，較佳地，基質化合物的最低三重態能量比敏化劑化合物的三重態能量低不多於  $0.1 \text{ eV}$ 。

尤佳地， $T_1(\text{基質}) \geq T_1(\text{敏化劑})$ 。

更佳地： $T_1(\text{基質}) - T_1(\text{敏化劑}) \geq 0.1 \text{ eV}$ ；

最佳地： $T_1(\text{基質}) - T_1(\text{敏化劑}) \geq 0.2 \text{ eV}$ 。



此處之  $T_1$ (基質)係基質化合物的最低三重態能量，而  $T_1$ (敏化劑)係敏化劑化合物的最低三重態能量。此處由在 4 K 下的純膜(neat film)所測得的光致發光光譜邊緣來判定基質化合物的三重態能量  $T_1$ (基質)。由在室溫下於甲苯溶液中測得的光致發光光譜邊緣來判定  $T_1$ (敏化劑)。

適用於超螢光或超磷光系統的基質材料係與上述相同的基質材料，更佳地係對於 TADF 材料亦為較佳之基質材料。

合適的磷光發射體特別係在適當激發時發光(較佳在可見光區域)且另外含有至少一種原子序大於 20、較佳係大於 38 且小於 84、特佳係大於 56 且小於 80 之化合物。所使用之磷光發射體較佳係含有銅、鋁、鎢、銻、釷、鐵、銻、銻、鈹、鉑、銀、金或鎘的化合物，特別是含有銻、鉑或銅的化合物。

為了本發明之目的，所有發光的銻、鉑或銅錯合物被認為係磷光化合物。

上述磷光發射體之實例由下列申請案所揭示：

WO 2000/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 2005/033244、WO 2005/01937 及 US 2005/0258742。通常，根據先前技術用於磷光 OLED 且係有機電致發光裝置領域中之所屬技術領域中具有通常知識者已知的所有磷光錯合物皆適合用於根據本發明之裝置中。在 OLED 中，所屬技術領域中具有通常知識者亦將能夠將其他不具進步性



的磷光錯合物與根據本發明之化合物組合使用於 OLED 中。

用於磷光發射體之較佳的基質材料係芳族酮、芳族氧化磷或芳族亞砷或砷(例如根據 WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627或 WO 2010/006680)、三芳基胺、咔唑衍生物(例如 CBP(N,N-雙咔唑基聯苯)或於 WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527或 WO 2008/086851中所揭示之咔唑衍生物)、吡啶并咔唑衍生物(例如根據 WO 2007/063754或 WO 2008/056746)、茚并咔唑衍生物(例如根據 WO 2010/136109、WO 2011/000455或 WO 2013/041176)、氮雜咔唑衍生物(例如根據 EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160)、雙極性基質材料(例如根據 WO 2007/137725)、矽烷(例如根據 WO 2005/111172)、氮雜硼雜環戊二烯(azaborole)或有機硼酸酯(例如根據 WO 2006/117052)、三吡啶衍生物(例如根據 WO 2010/015306、WO 2007/063754或 WO 2008/056746)、鋅錯合物(例如根據 EP 652273或 WO 2009/062578)、二氮雜矽雜環戊二烯(diazasilole)或四氮雜矽雜環戊二烯衍生物(例如根據 WO 2010/054729)、二氮雜磷雜環戊二烯衍生物(例如根據 WO 2010/054730)、橋聯咔唑衍生物(例如根據 US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877或 WO 2012/143080)、聯伸三苯衍生物(例如根據 WO 2012/048781)或內醯胺(例如根據



WO 2011/116865或WO 2011/137951)。

更特別地，當如上所述將磷光化合物用於超磷光系統中時，磷光化合物較佳地係選自磷光有機金屬錯合物，其係描述於例如WO2015/091716中。亦特佳地係磷光有機金屬錯合物，其描述於WO2000/70655、WO2001/41512、WO2002/02714、WO2002/15645、EP1191612、WO2005/033244、WO2005/019373、US2005/0258742、WO2006/056418、WO2007/115970、WO2007/115981、WO2008/000727、WO2009/050281、WO2009/050290、WO2011/051404、WO2011/073149、WO2012/121936、US2012/0305894、WO2012/170571、WO2012/170461、WO2012/170463、WO2006/121811、WO2007/095118、WO2008/156879、WO2008/156879、WO2010/068876、WO2011/106344、WO2012/172482、EP3126371、WO2015/014835、WO2015/014944、WO2016/020516、US20160072081、WO2010/086089、WO2011/044988、WO2014/008982、WO2014/023377、WO2014/094961、WO2010/069442、WO2012/163471、WO2013/020631、US20150243912、WO2008/000726、WO2010/015307、WO2010/054731、WO2010/054728、WO2010/099852、WO2011/032626、WO2011/157339、WO2012/007086、WO2015/036074、WO2015/104045、WO2015/117718、WO2016/015815中，其較佳係銥及鉑錯合物。

特佳地亦係具有多足配體之磷光有機金屬錯合物，如



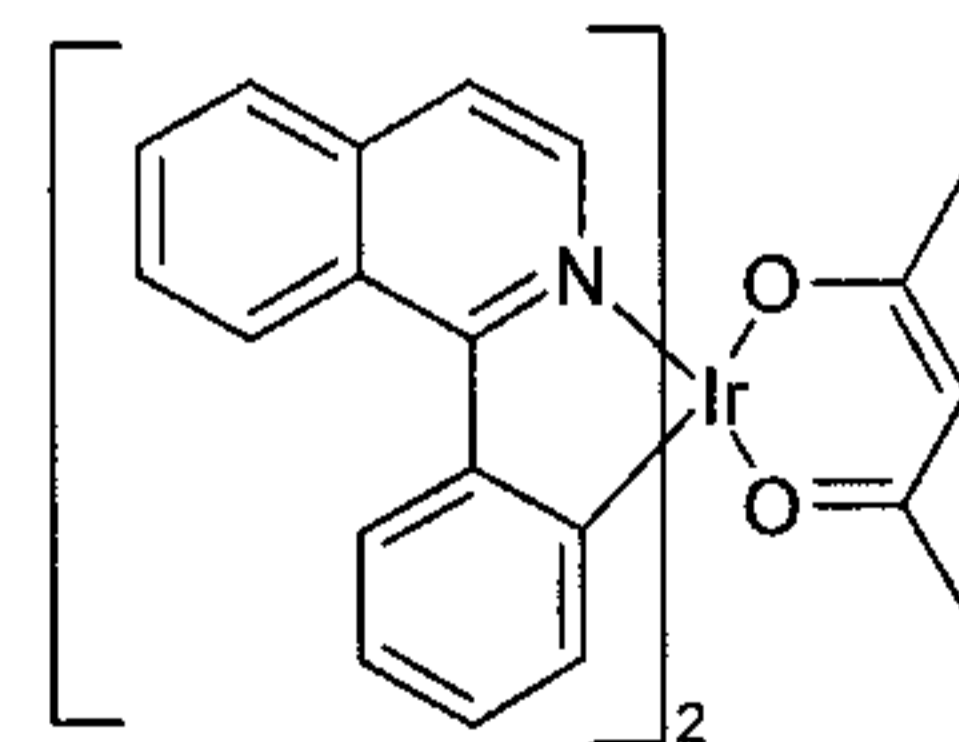
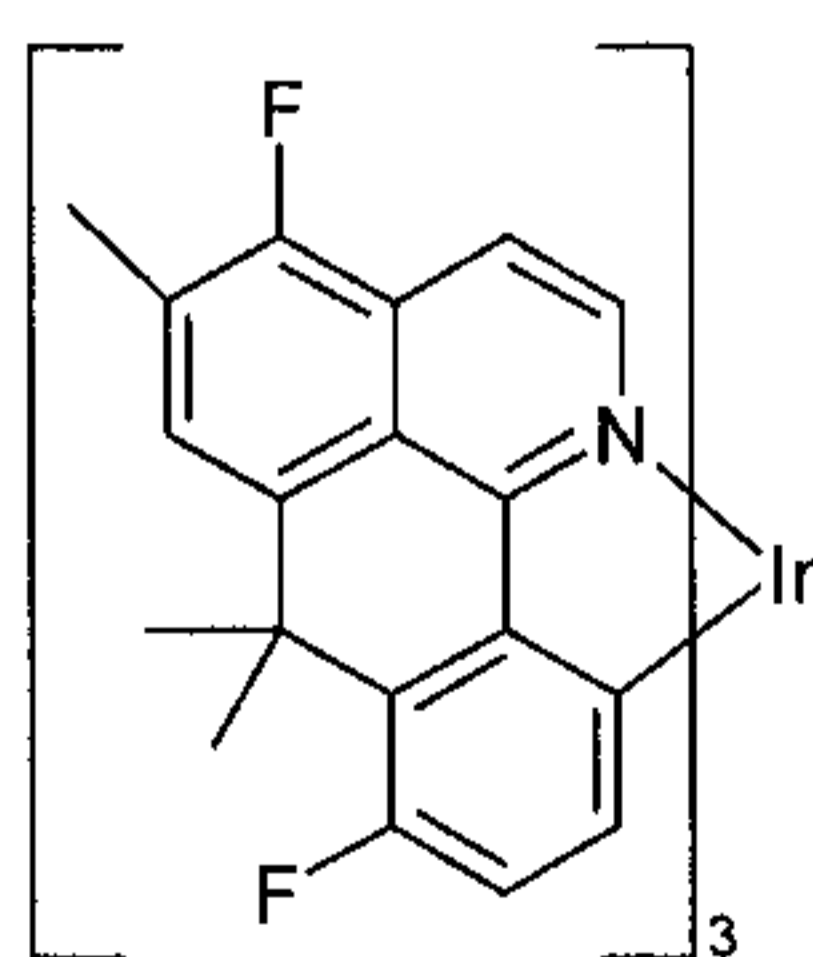
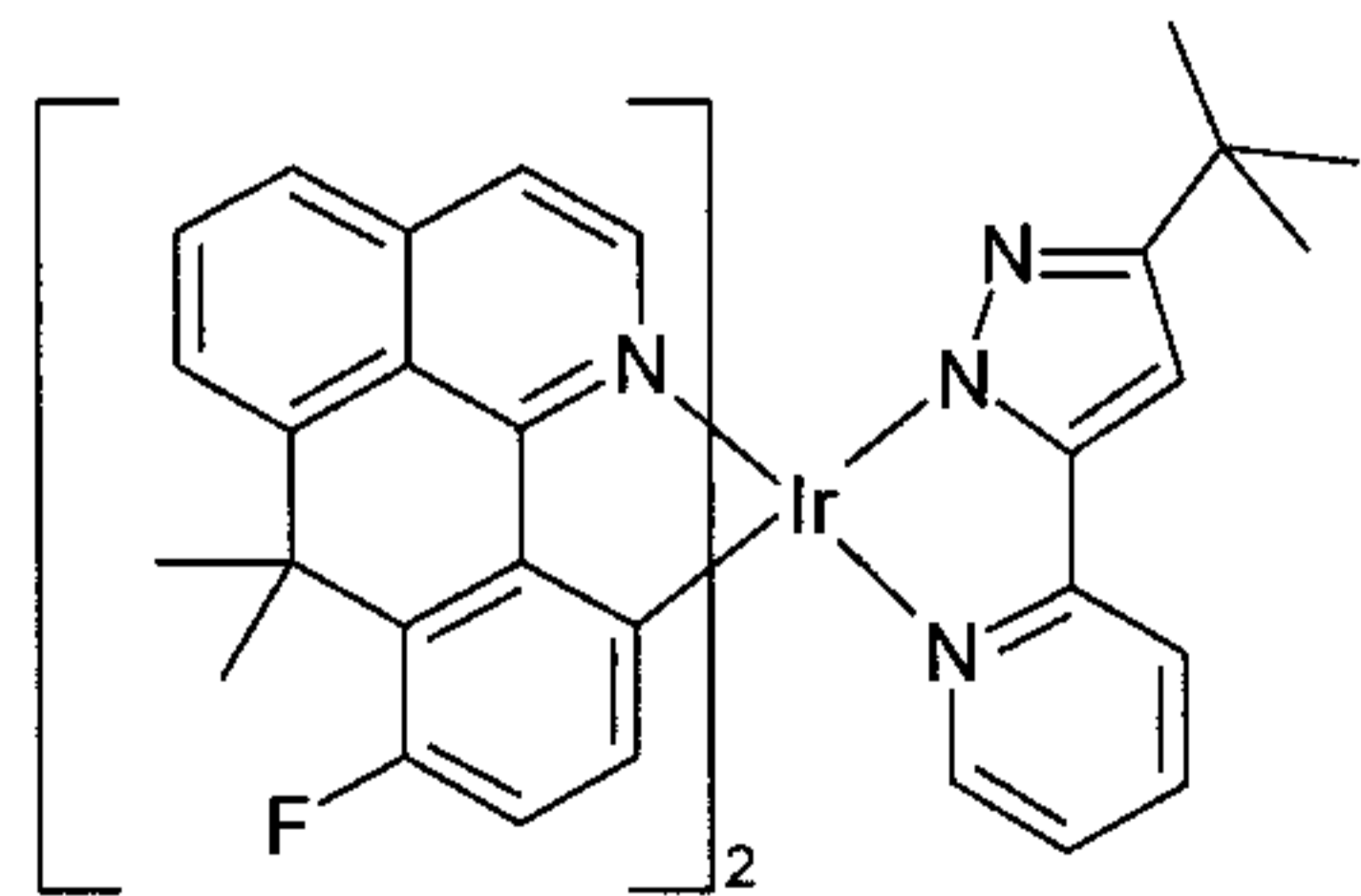
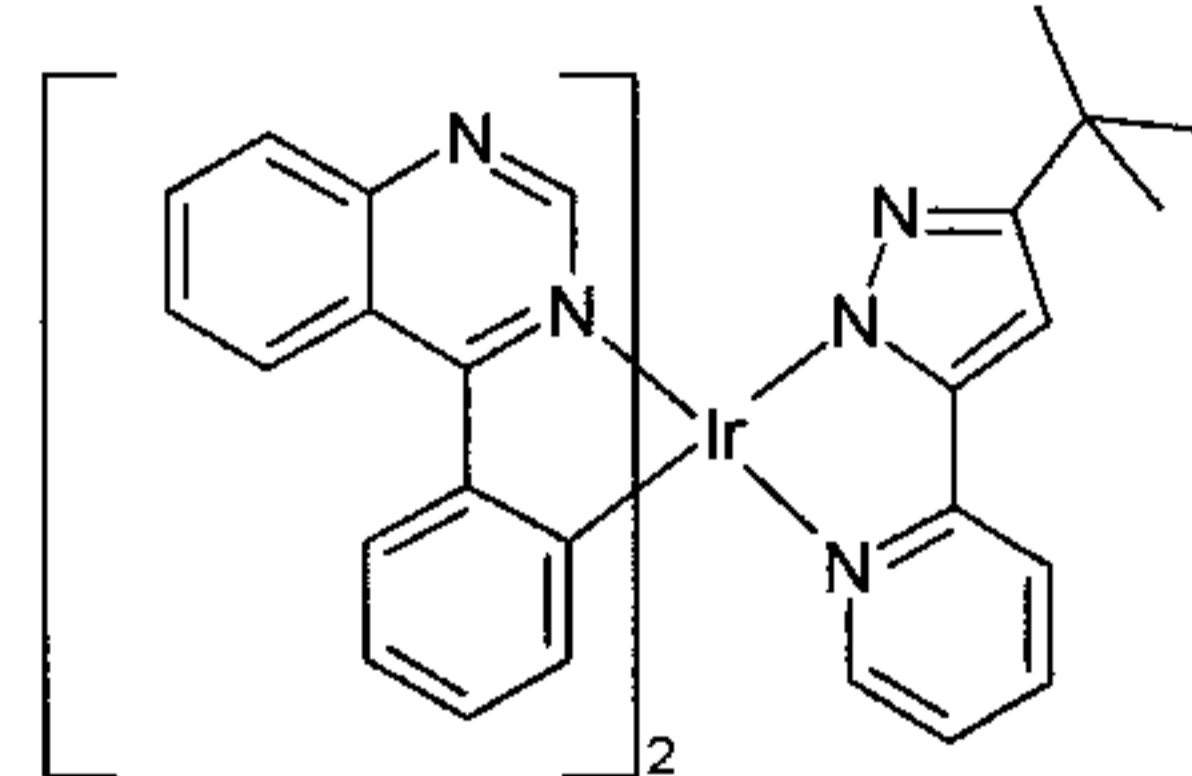
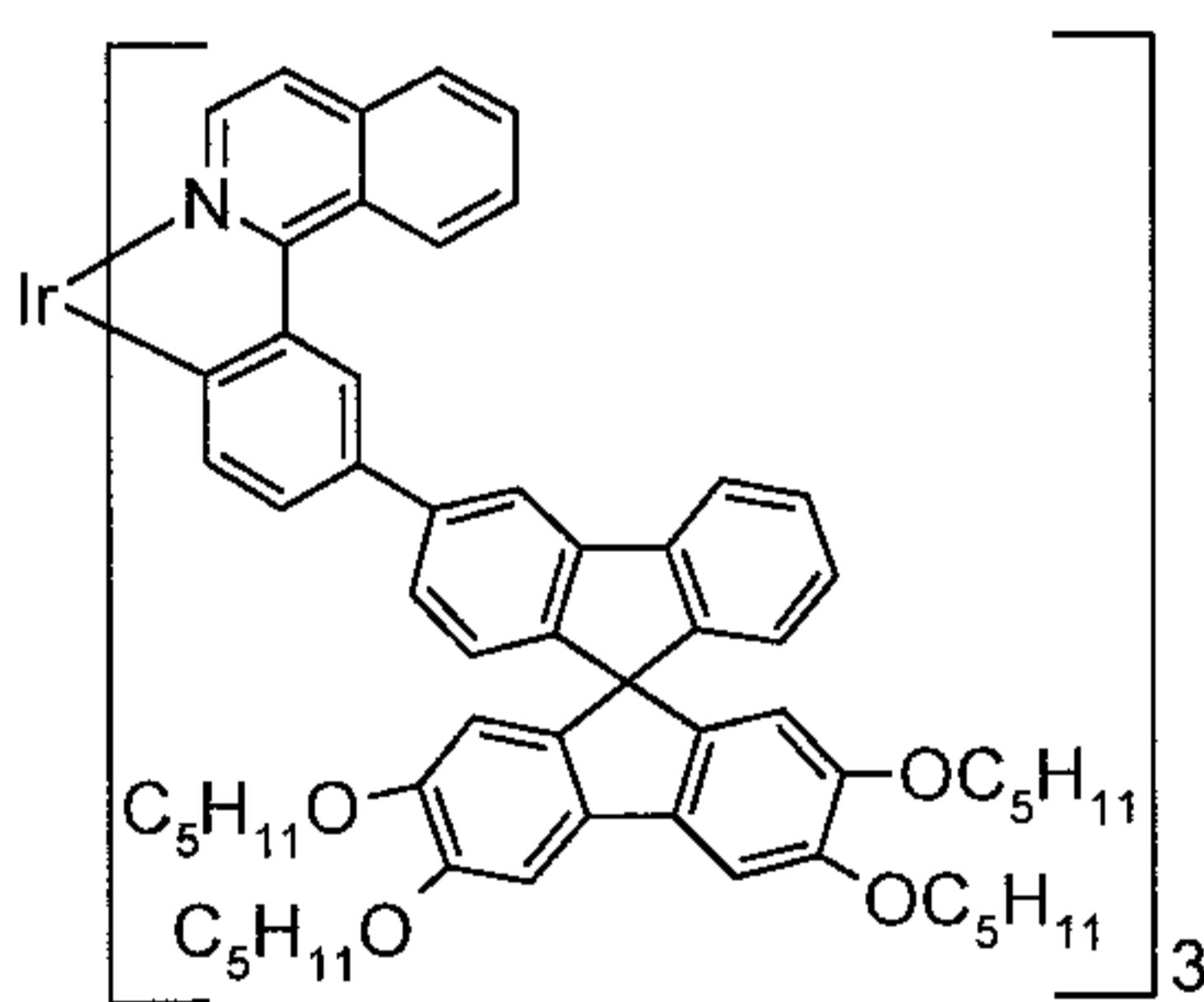
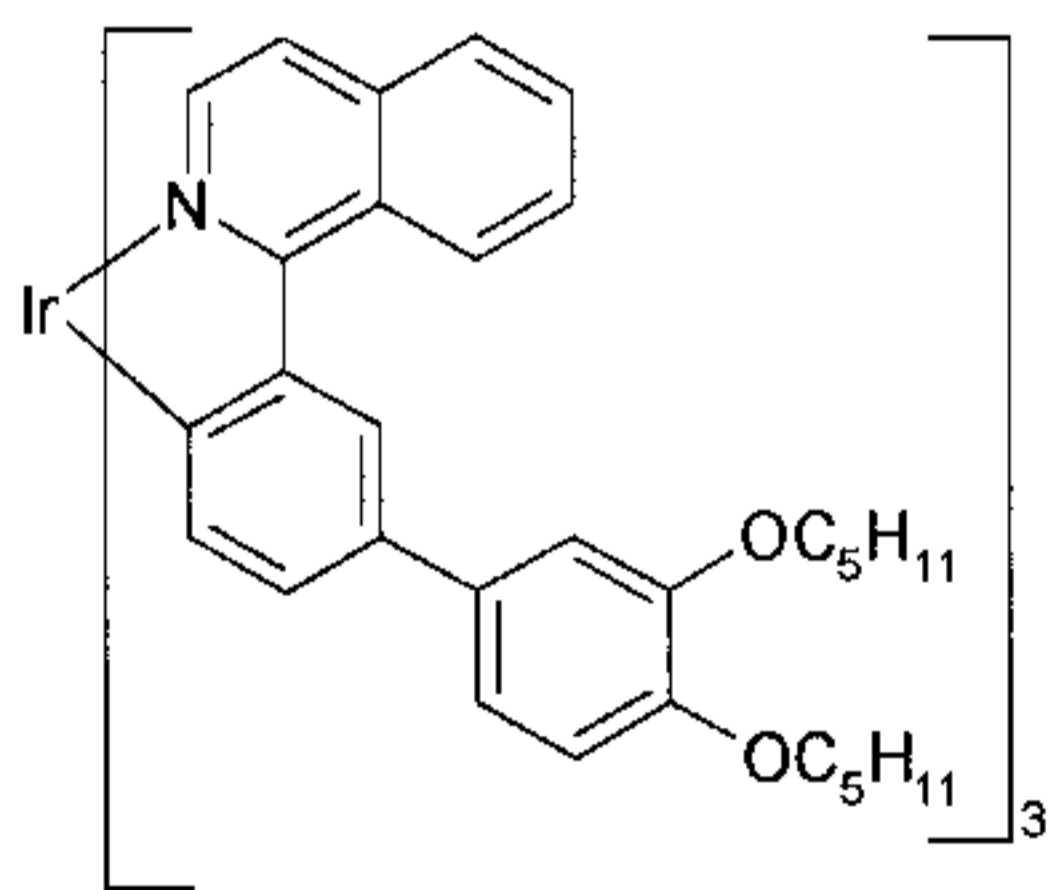
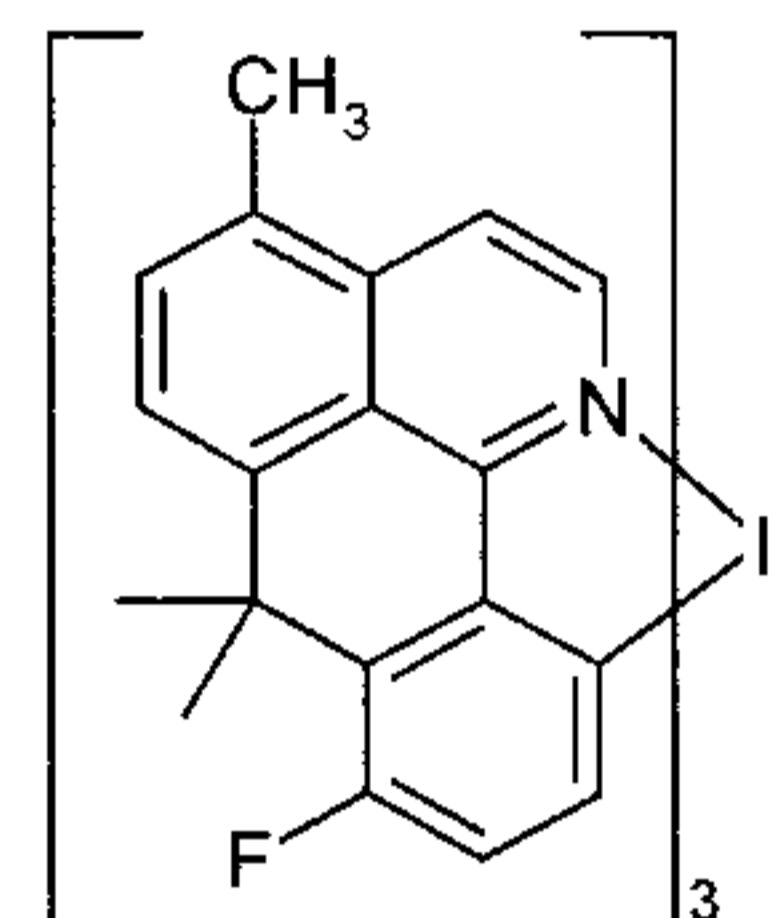
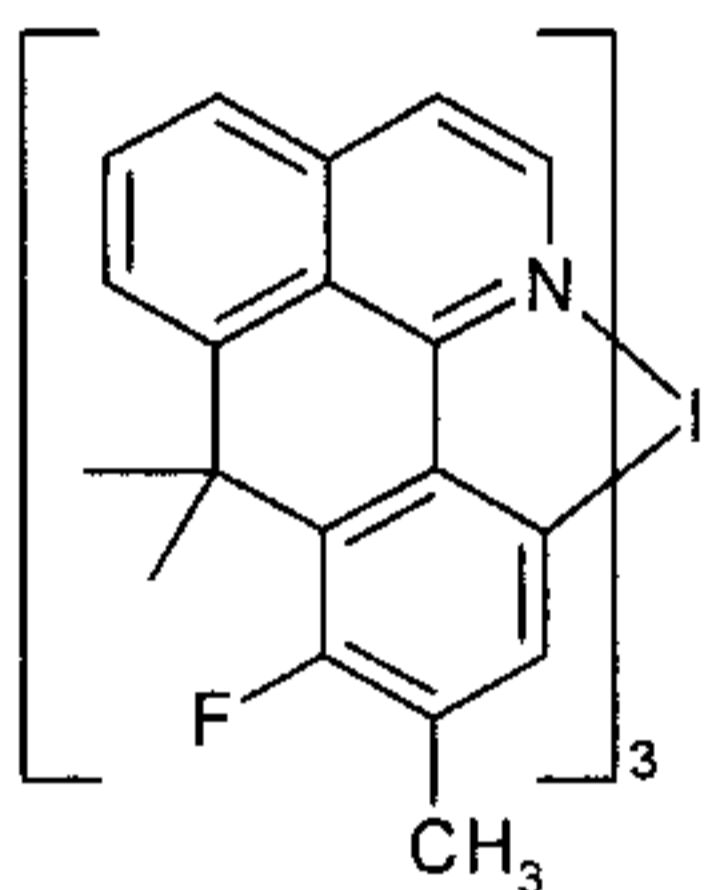
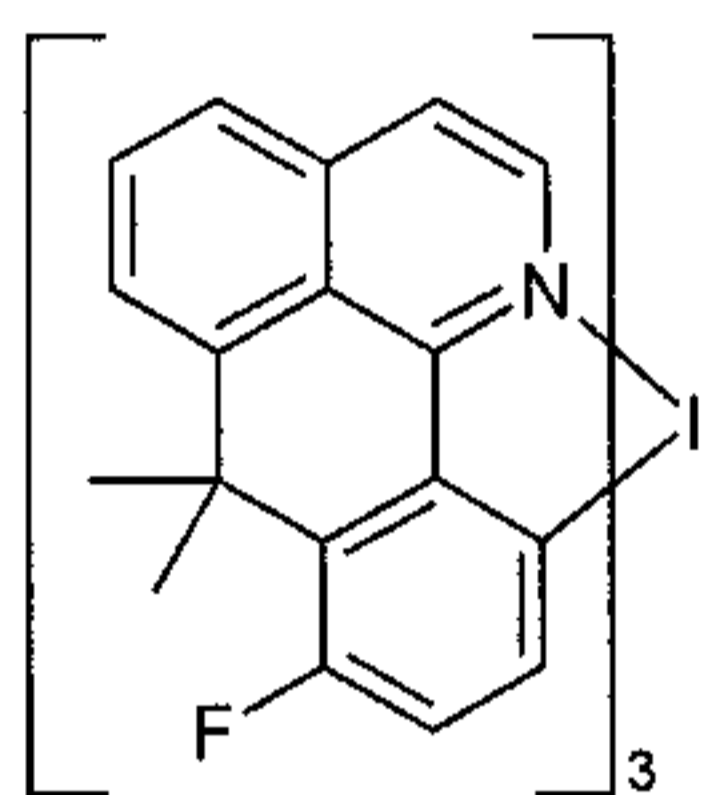
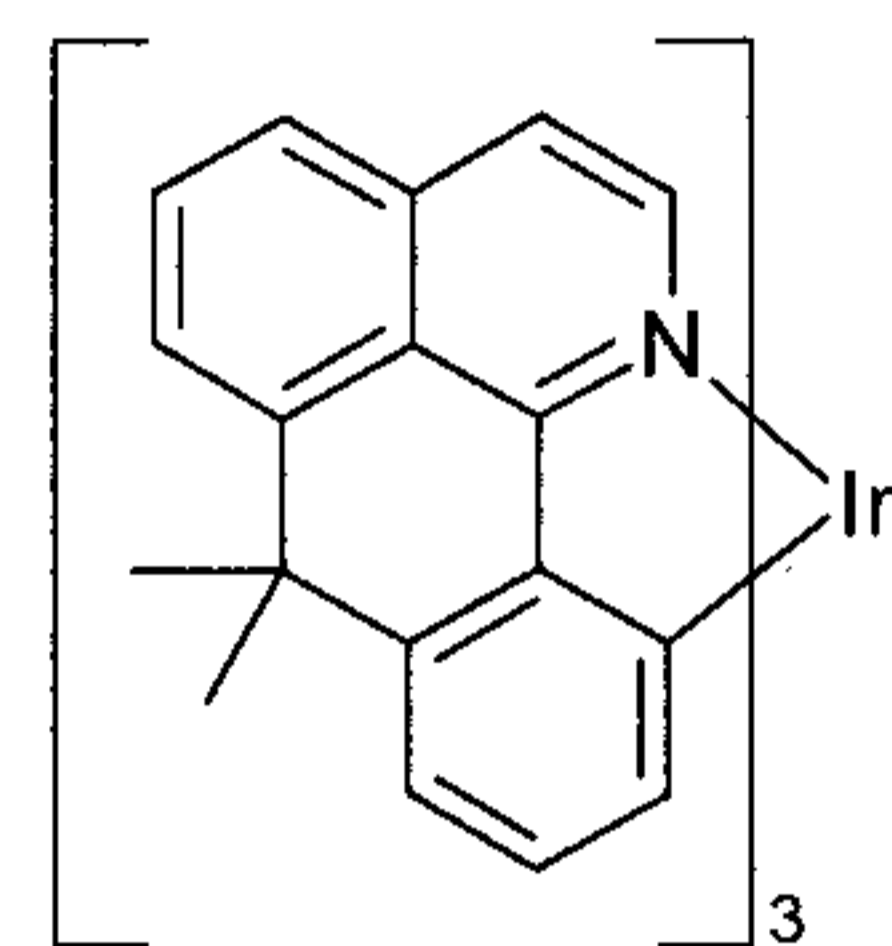
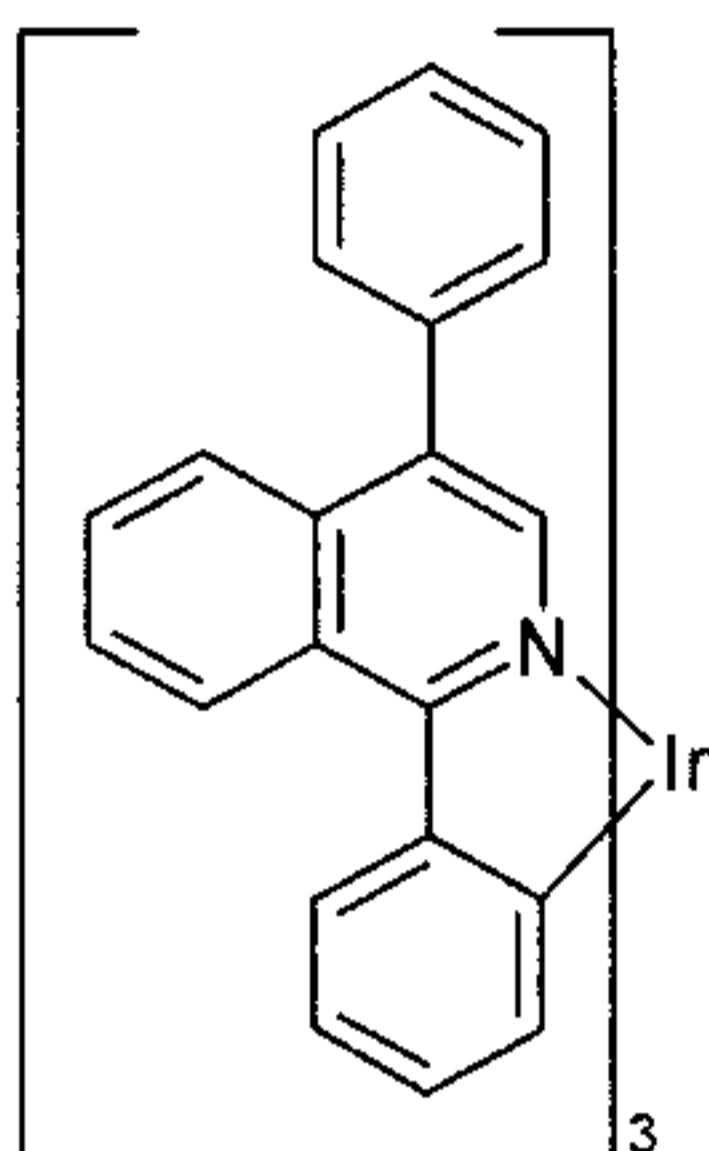
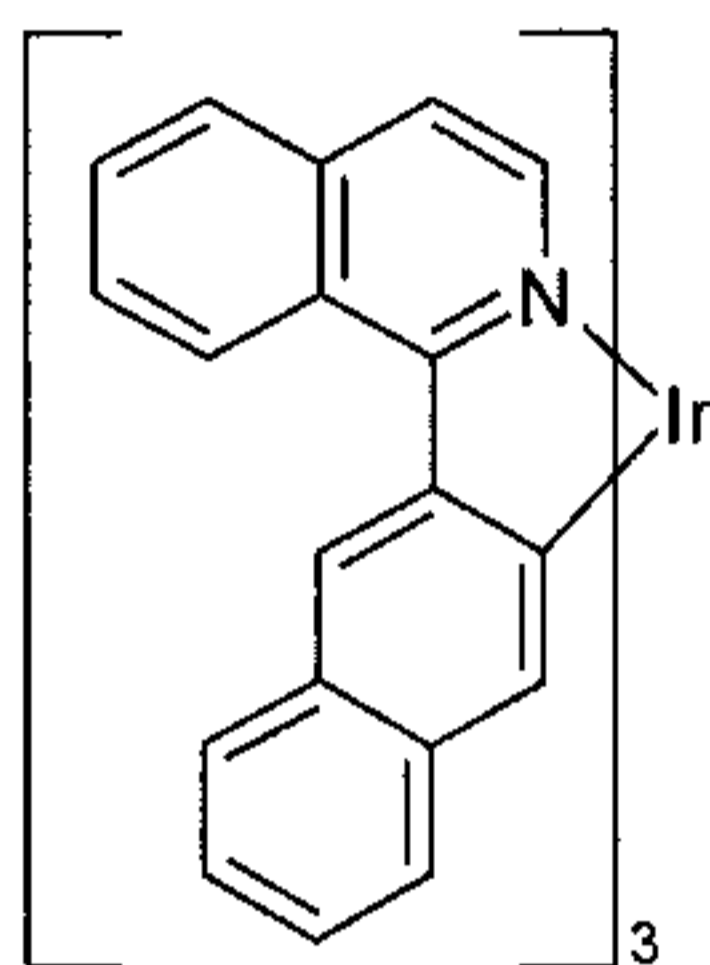
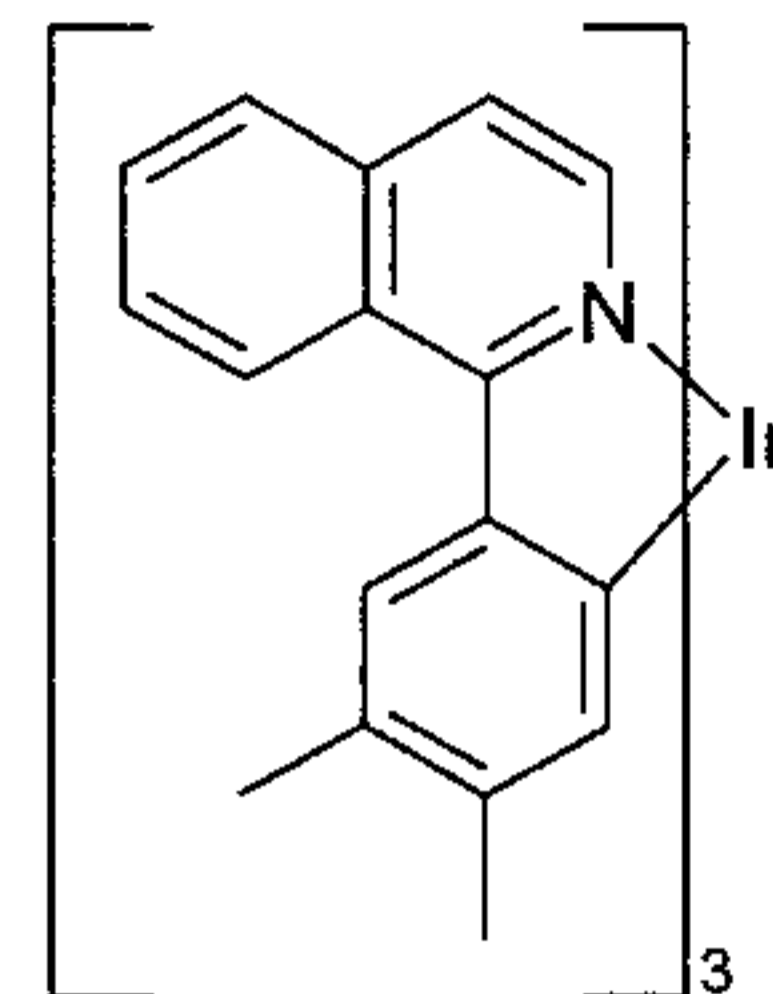
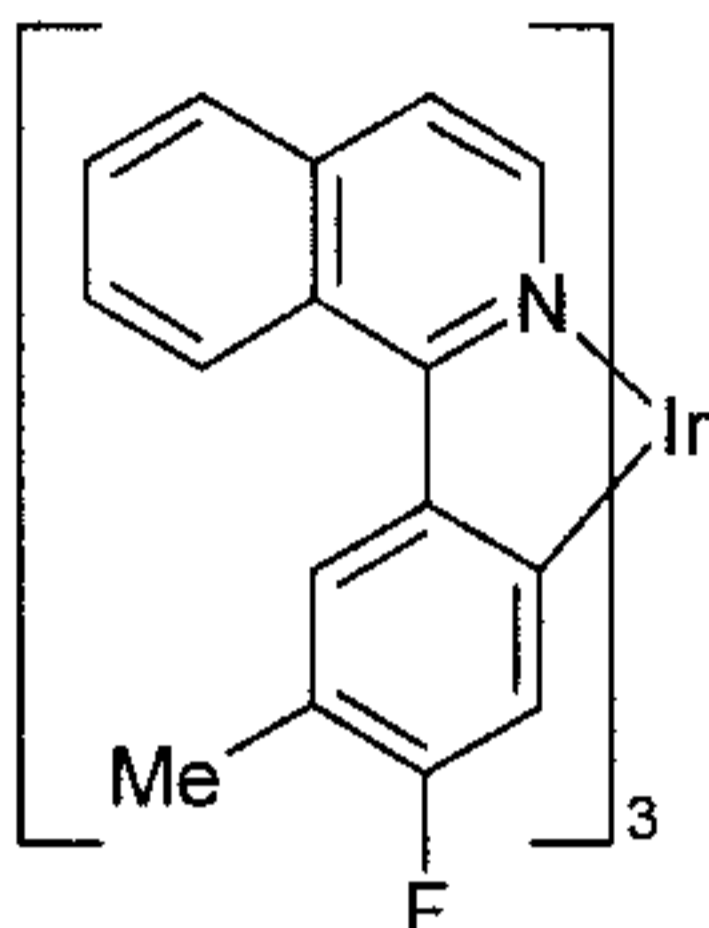
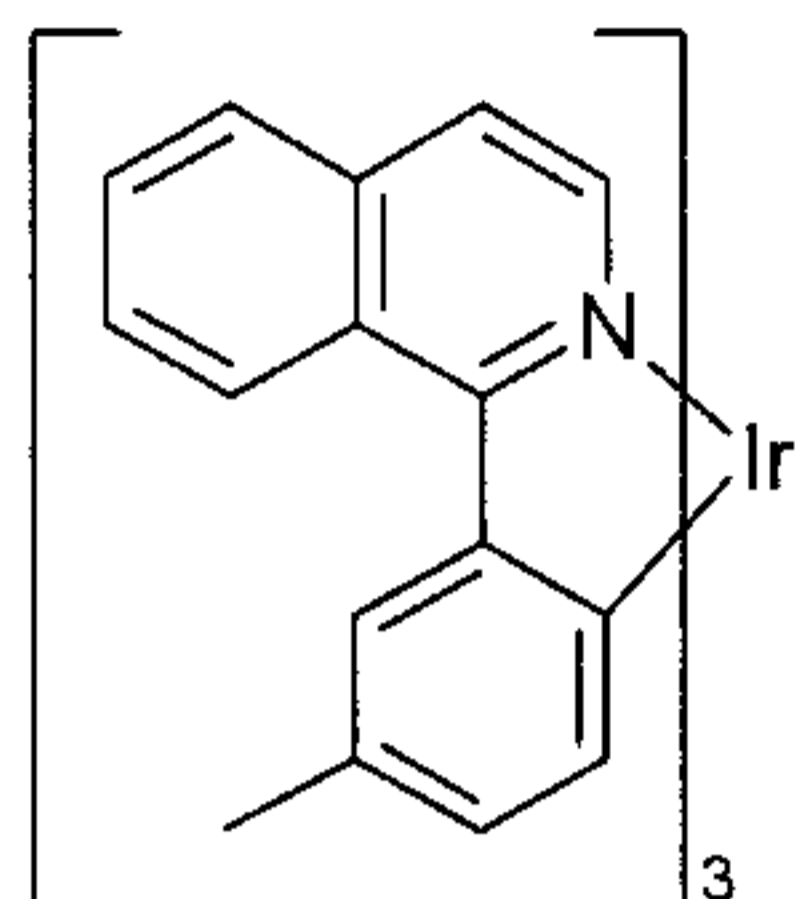
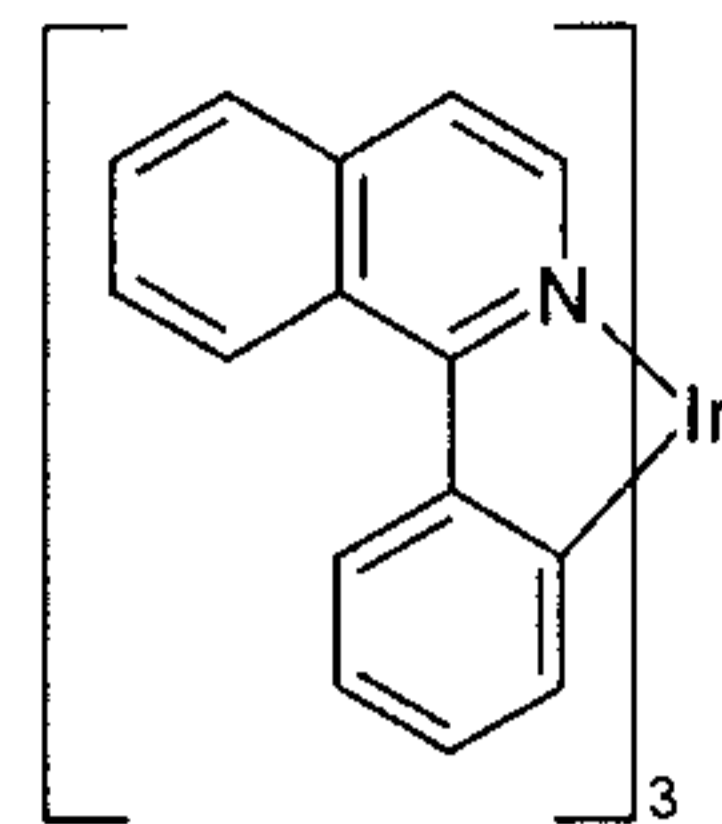
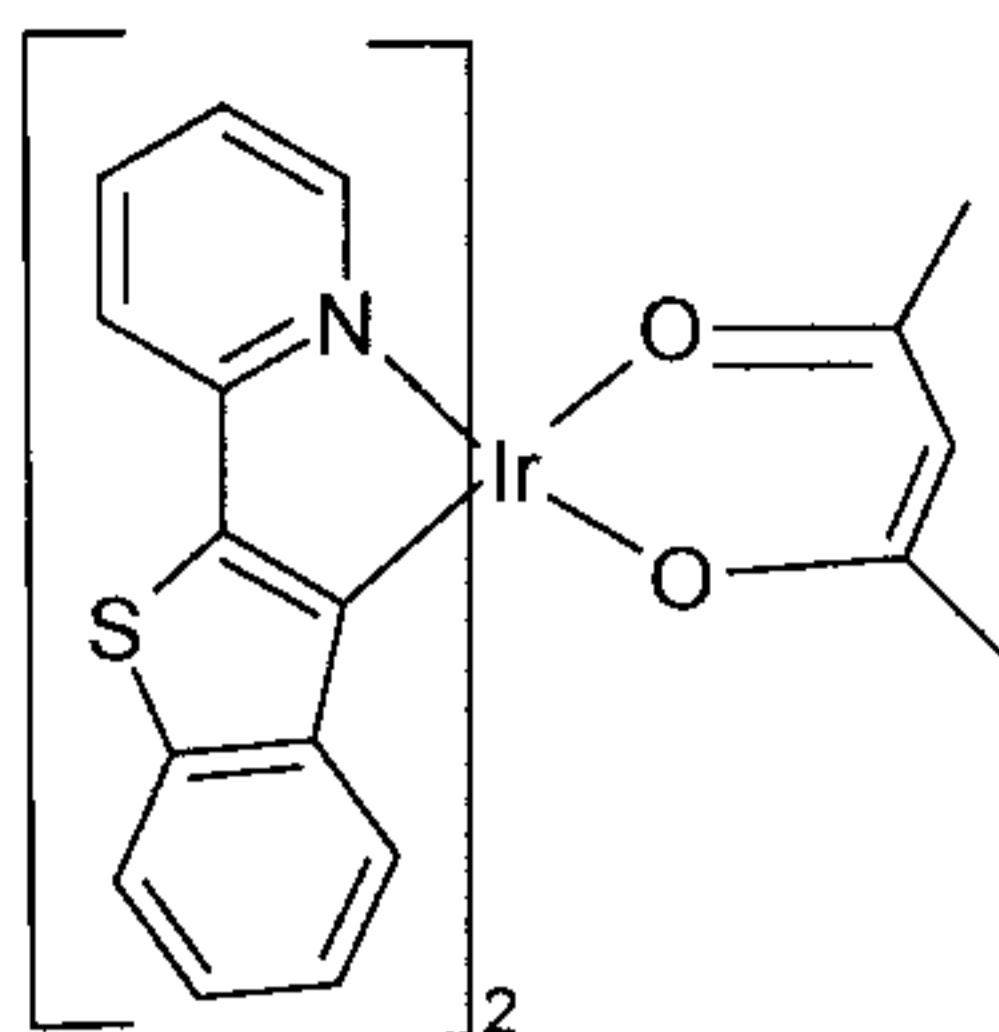
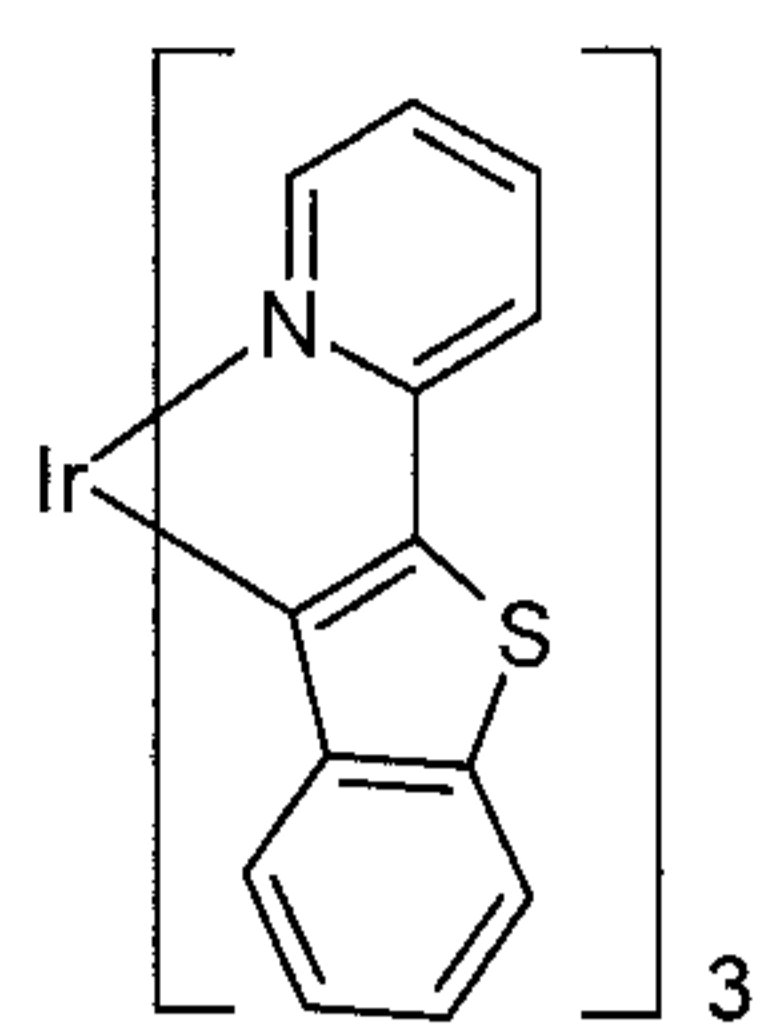
描述於例如 WO2004/081017、WO2005/042550、  
US2005/0170206、WO2009/146770、WO2010/102709、  
WO2011/066898、WO2016124304、WO2017/032439、  
WO2018/019688、EP3184534及 WO2018/011186中者。

特佳地亦係磷光雙核有機金屬錯合物，如描述於例如  
WO2011/045337、US20150171350、WO2016/079169、  
WO2018/019687、WO2018/041769、WO2018/054798、  
WO2018/069196、WO2018/069197及 WO2018/069273 中  
者。

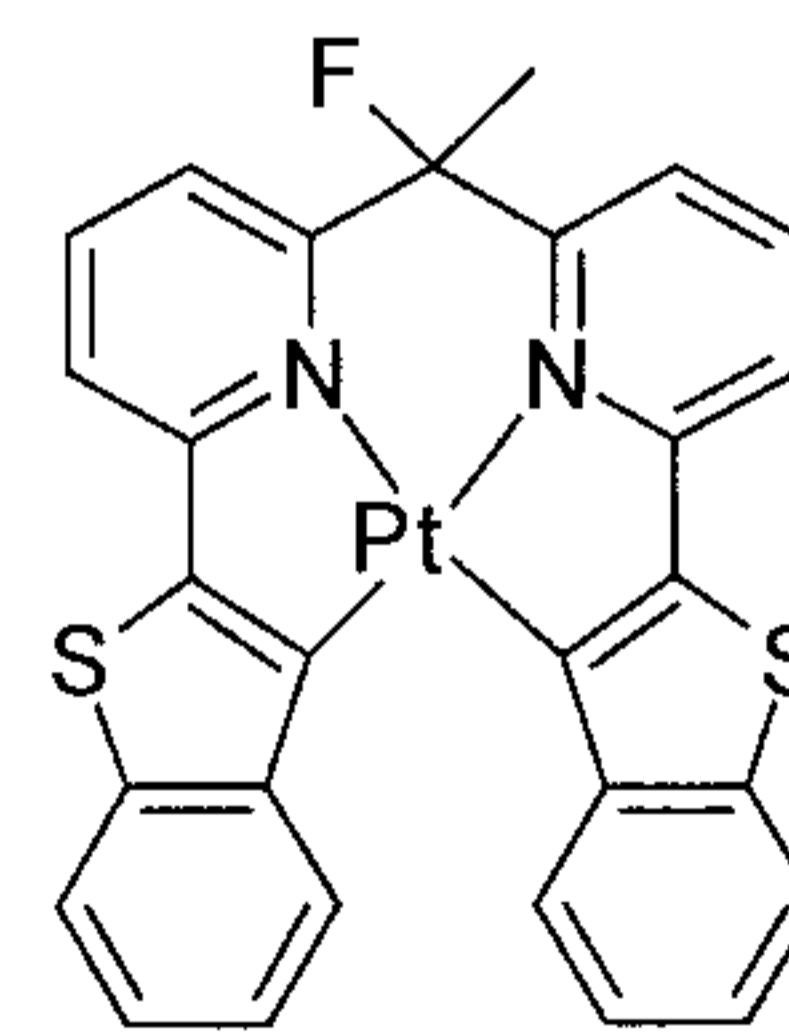
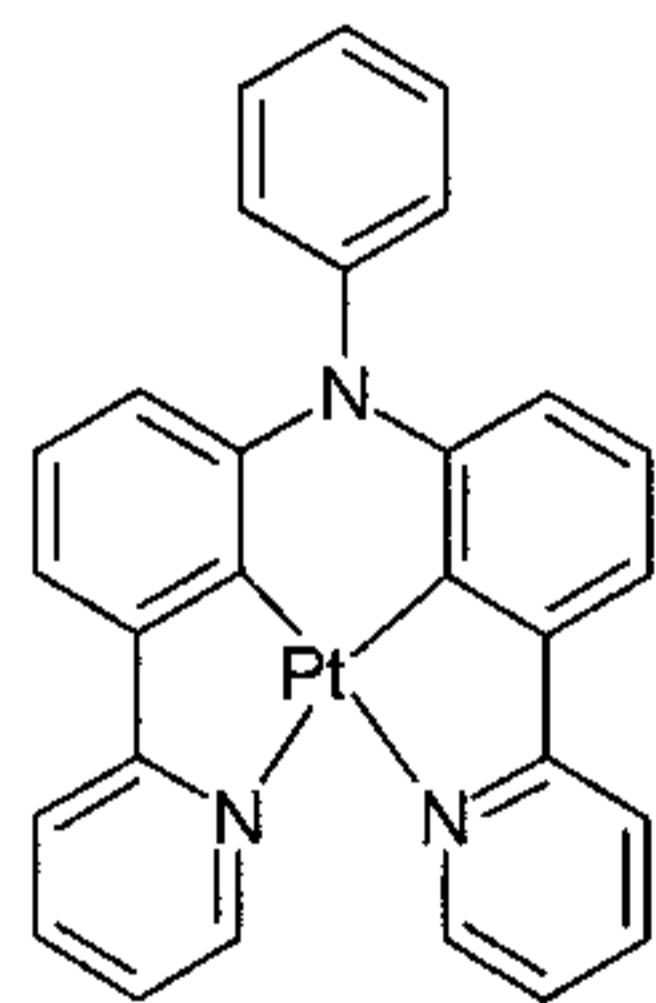
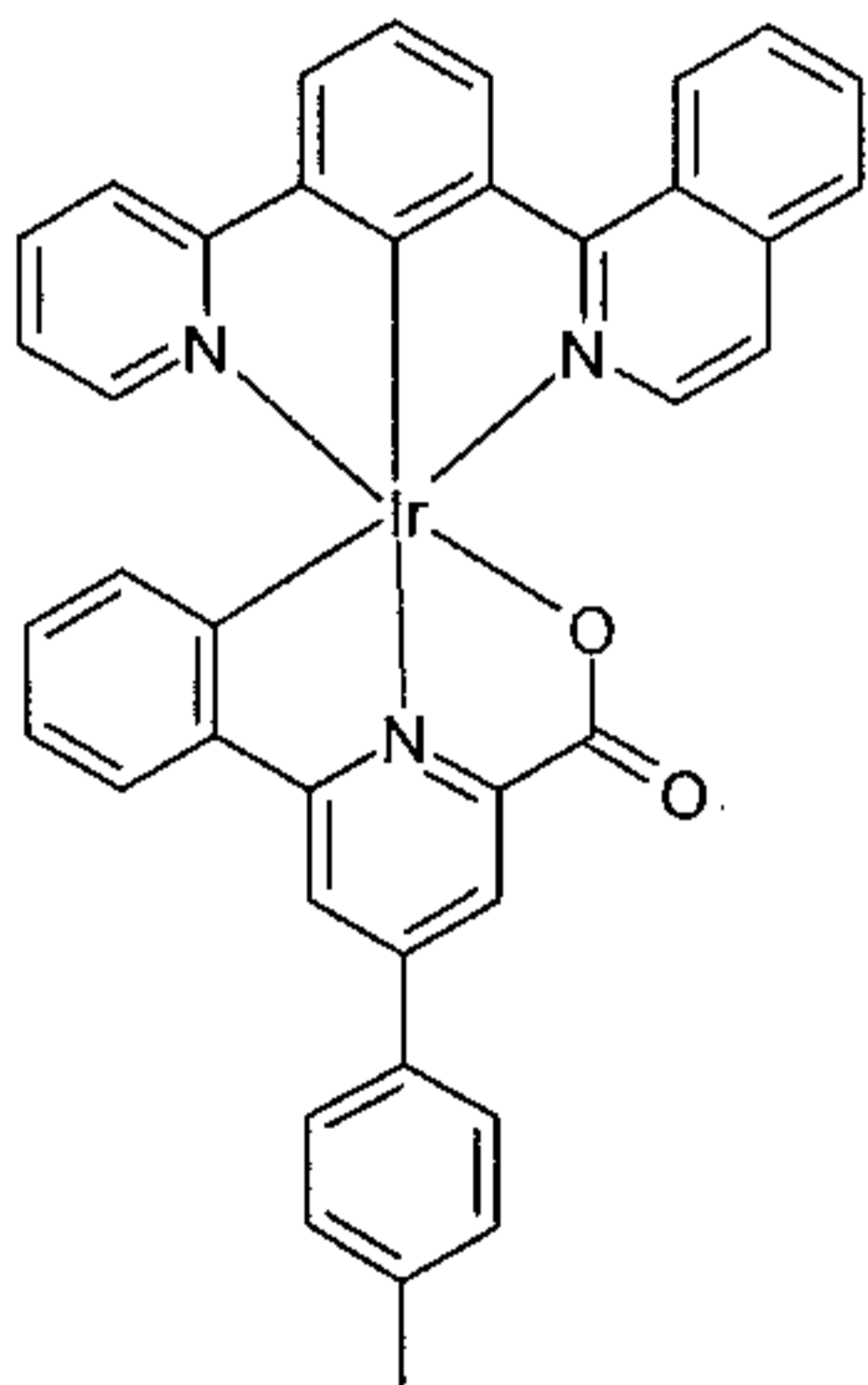
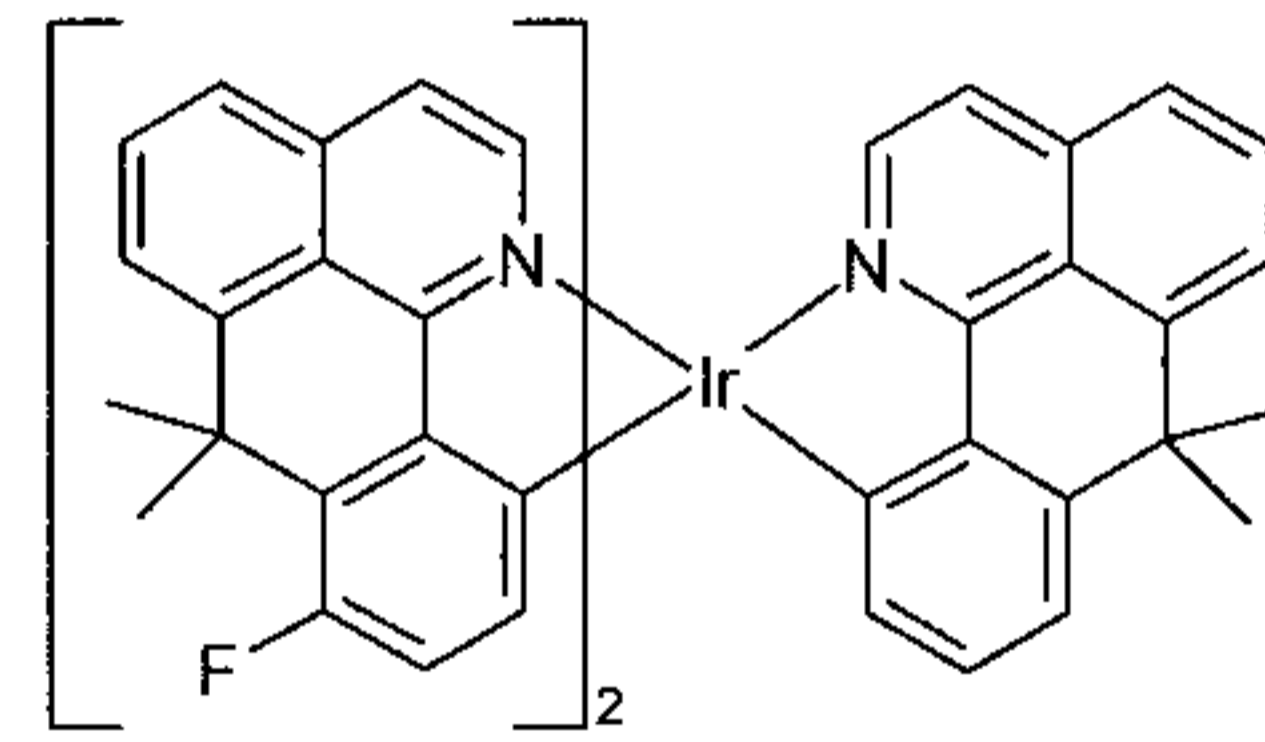
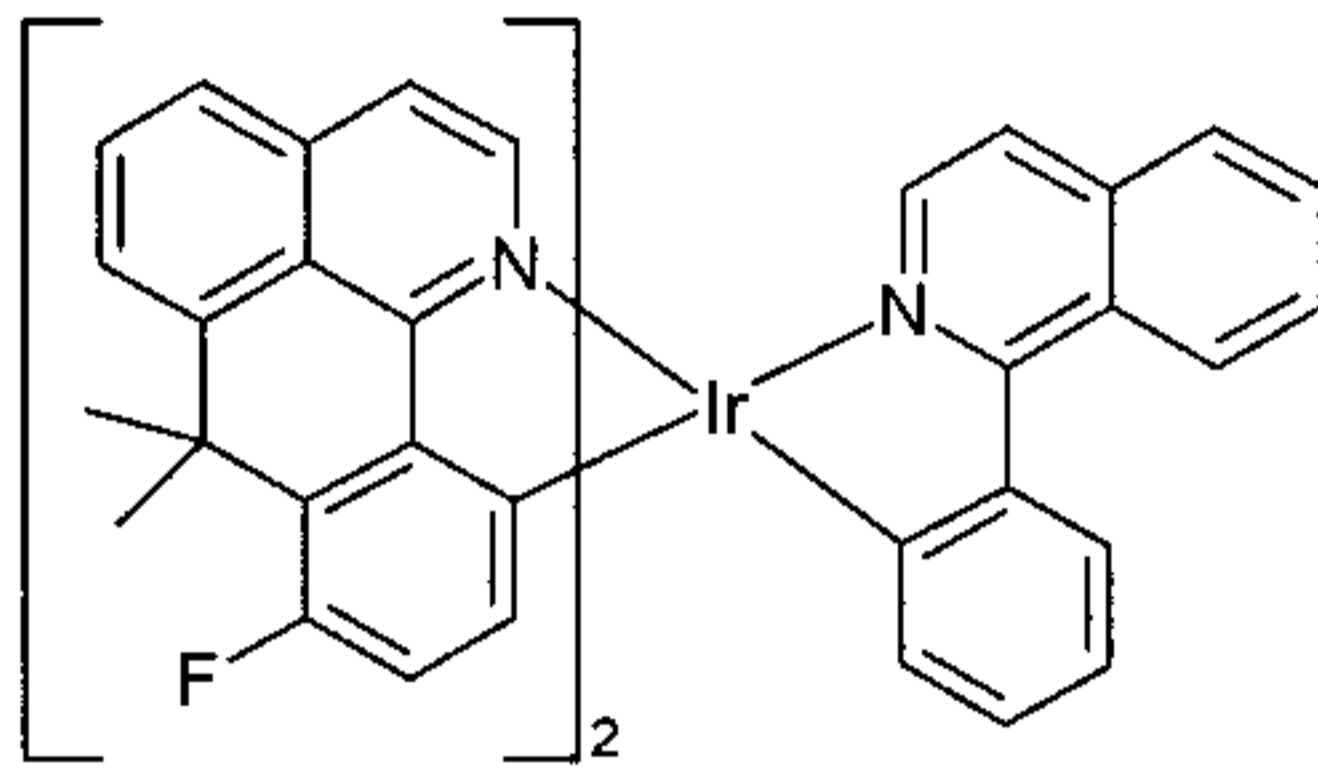
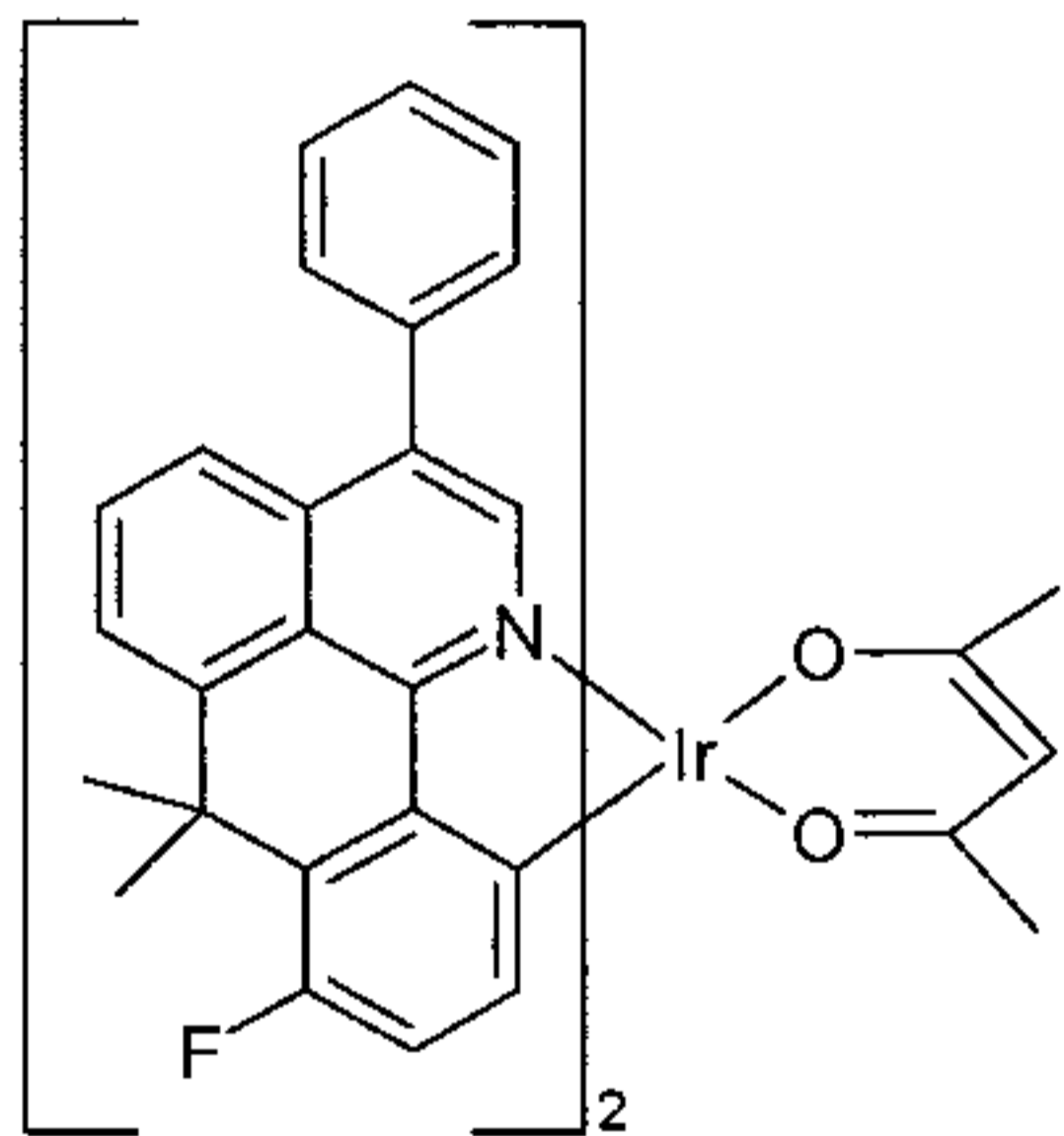
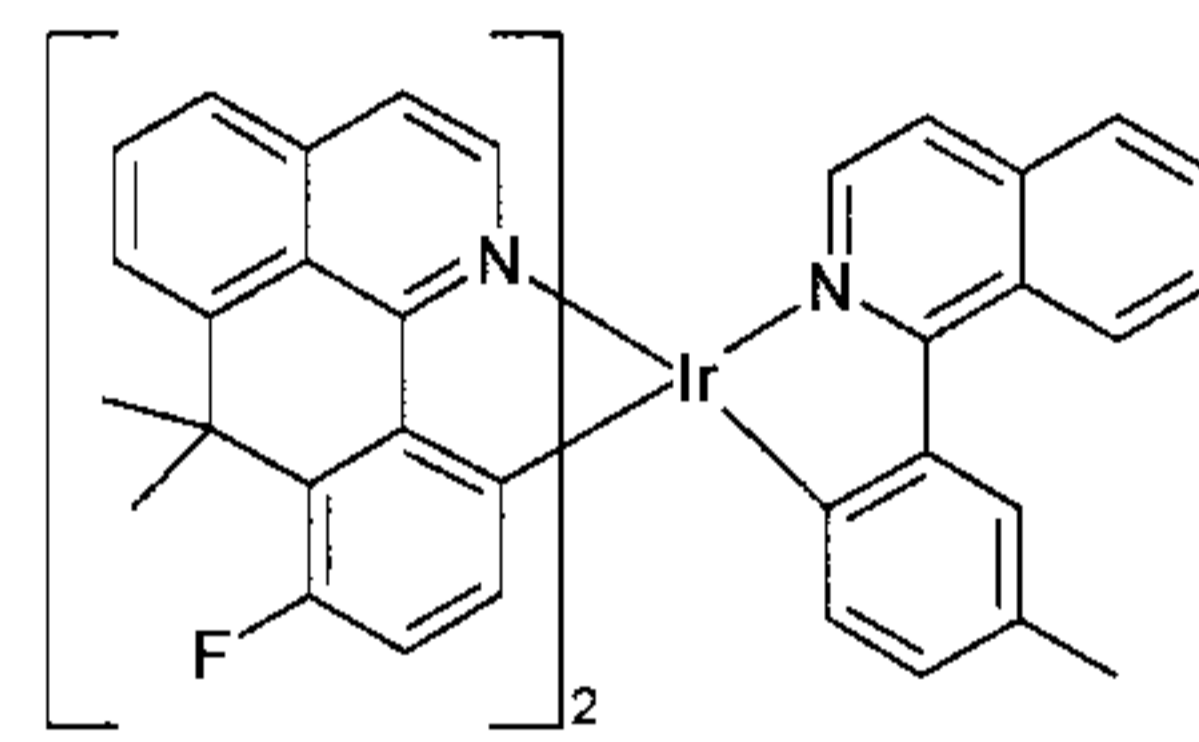
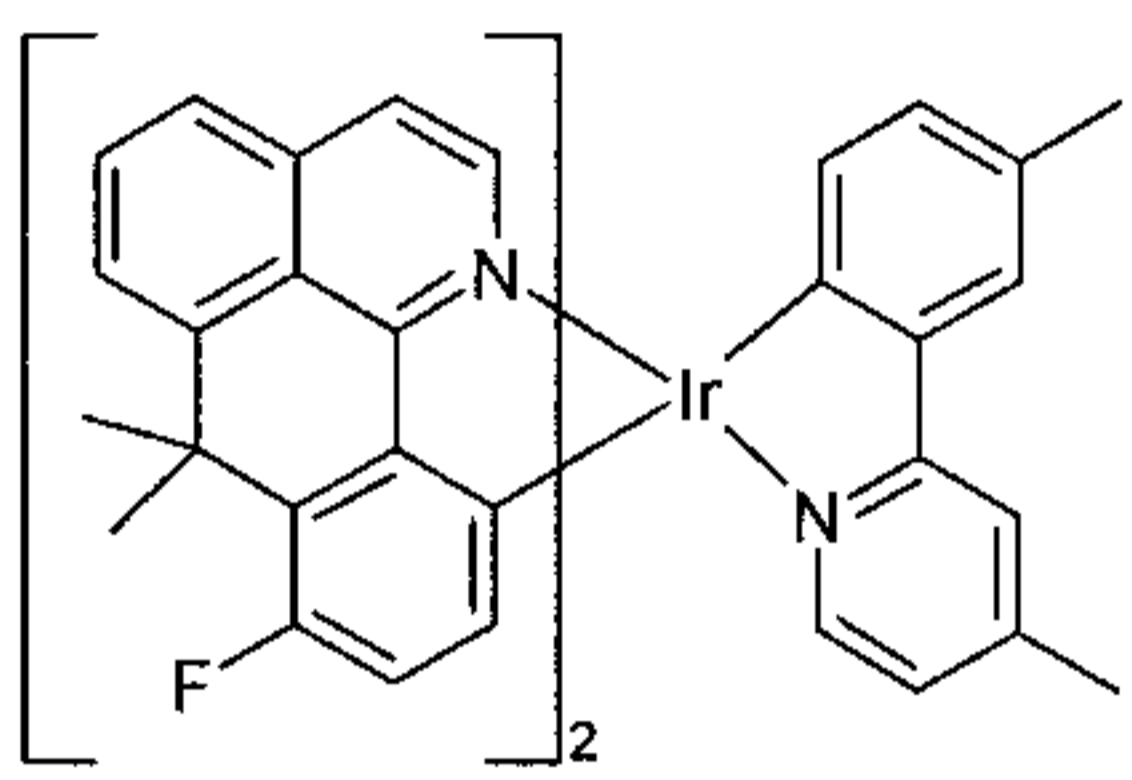
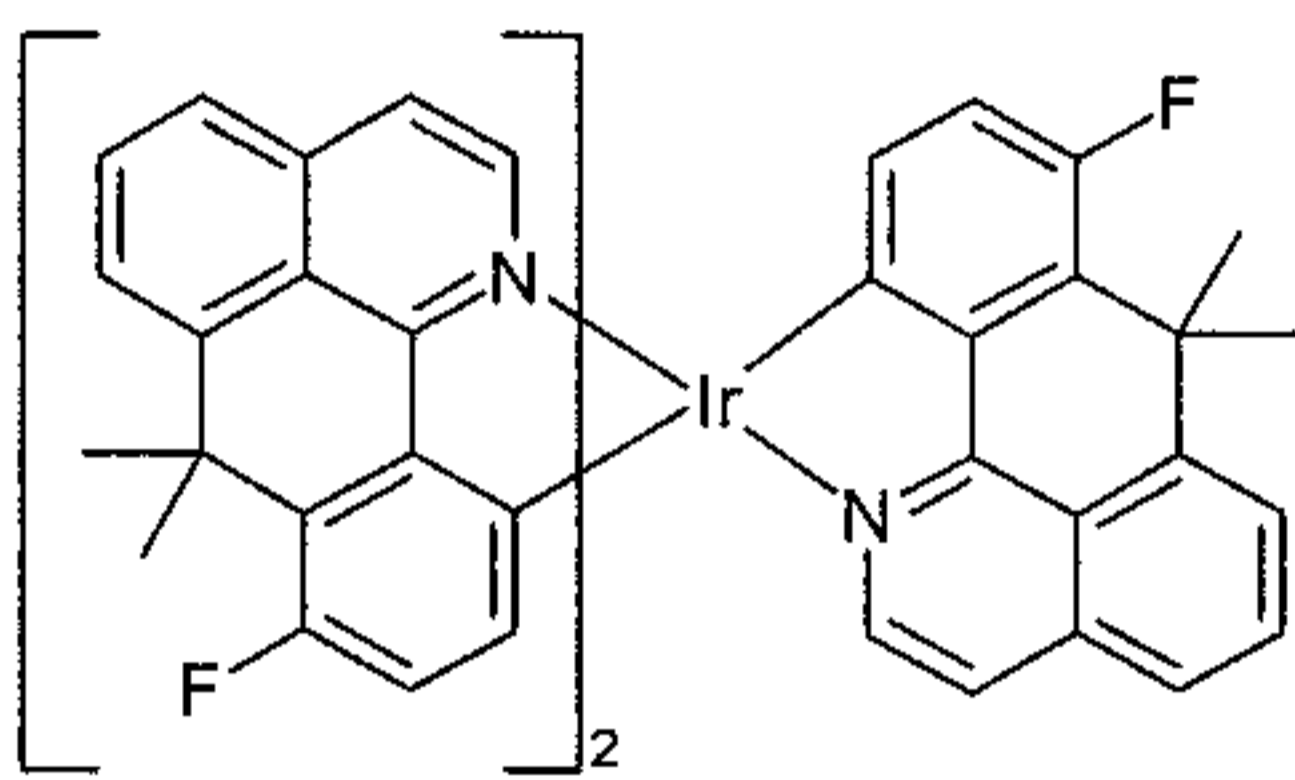
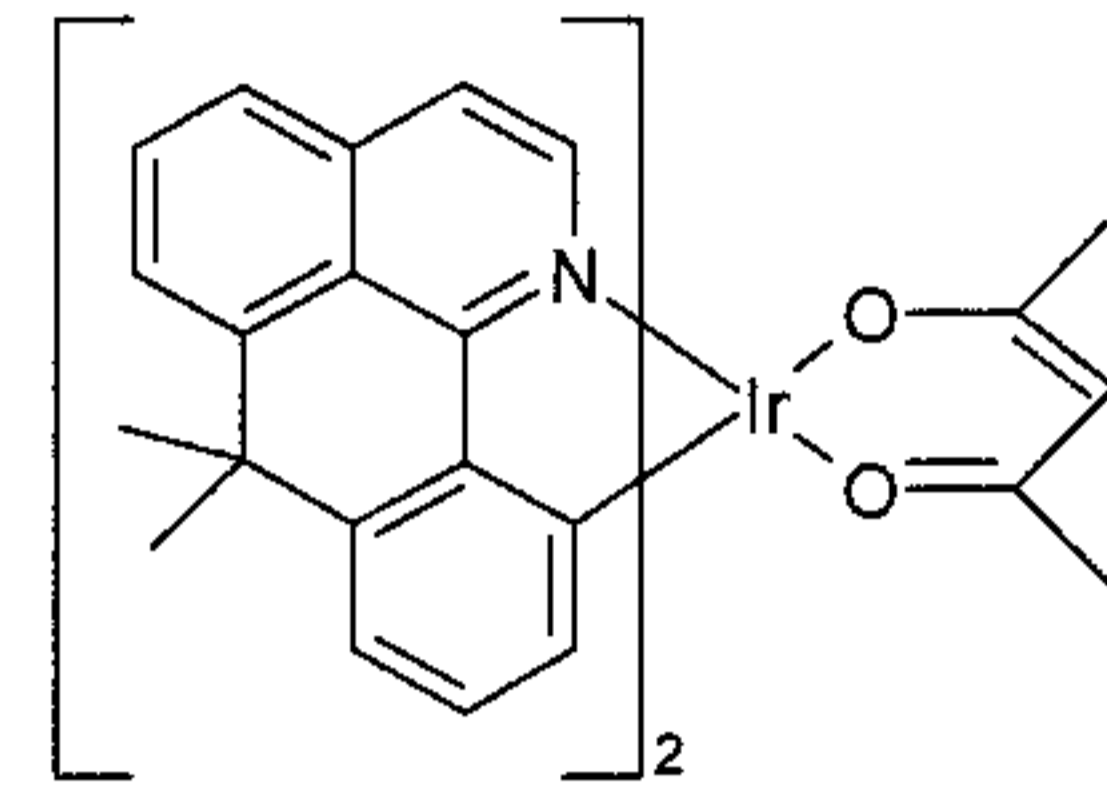
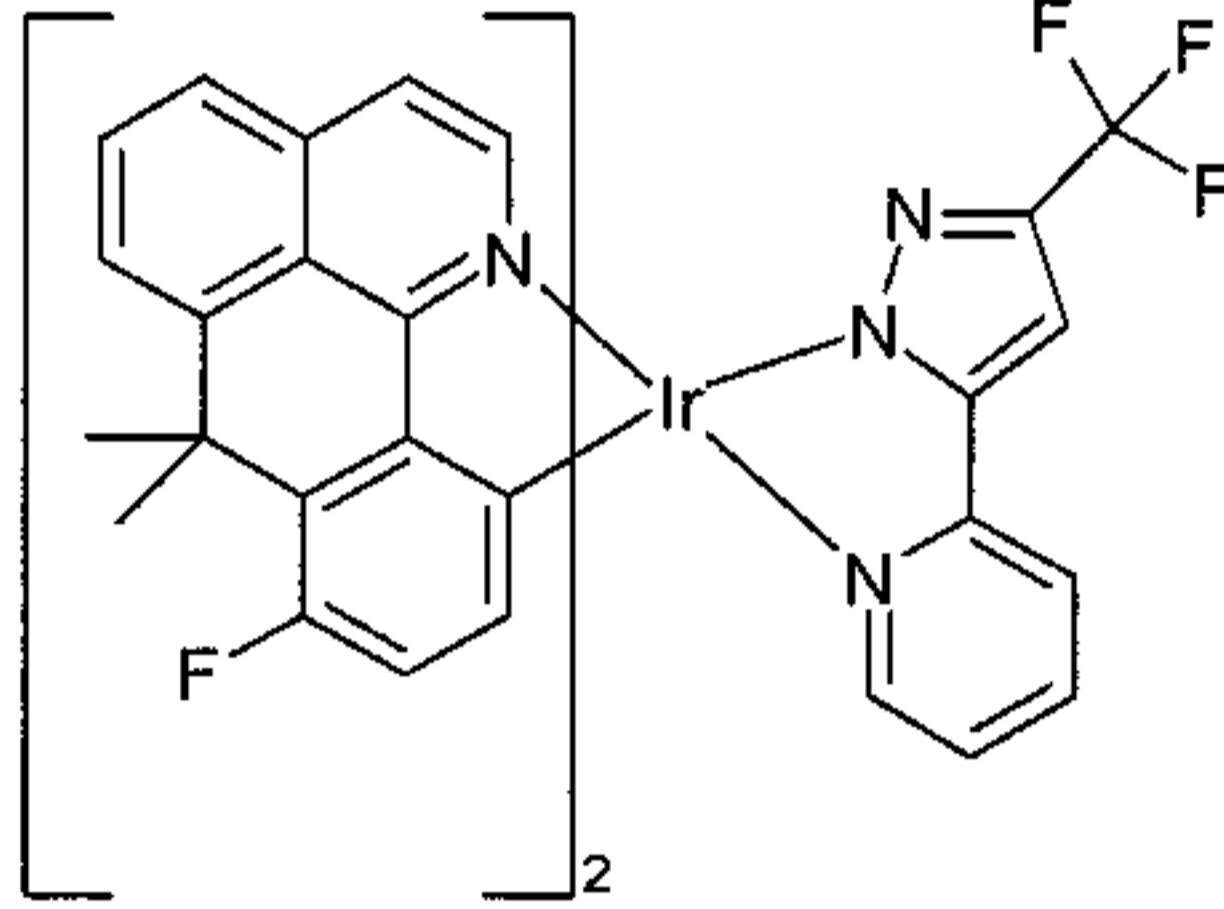
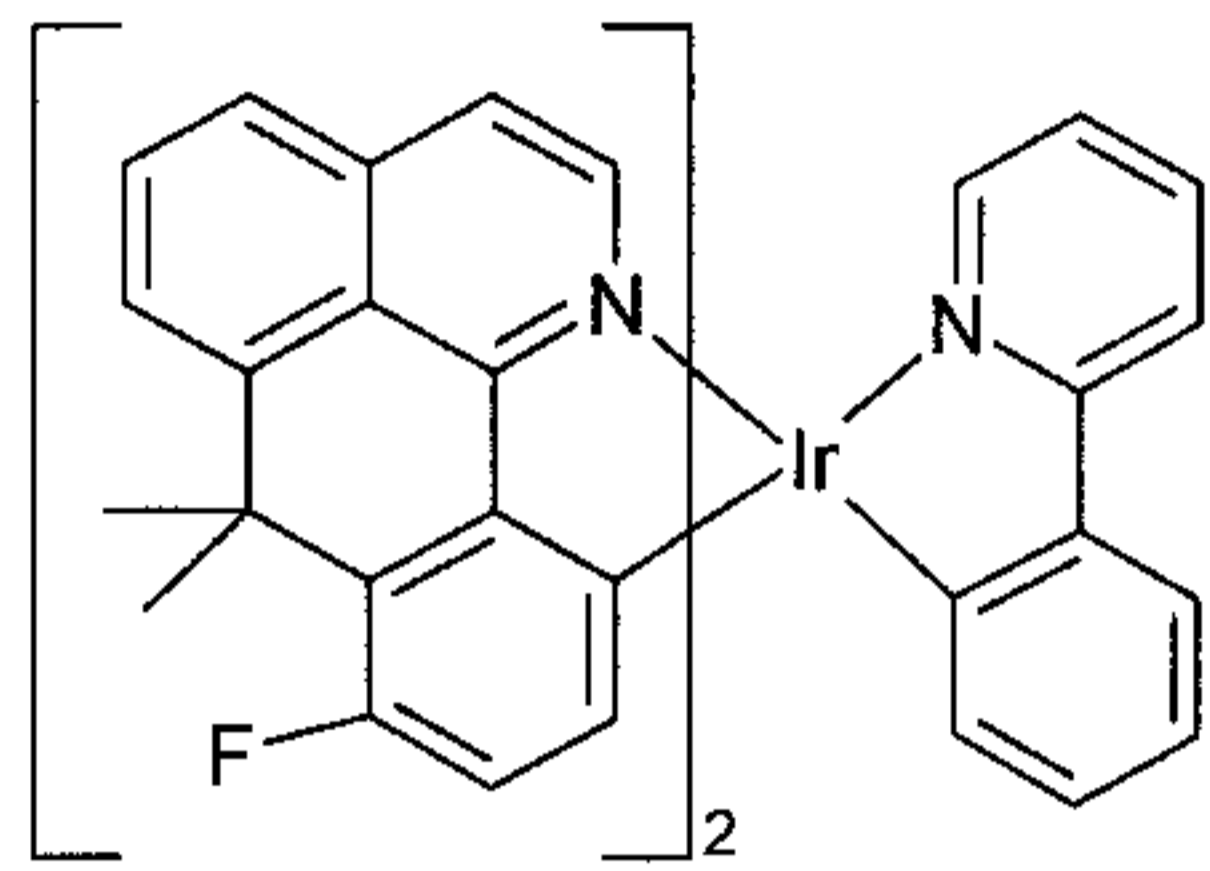
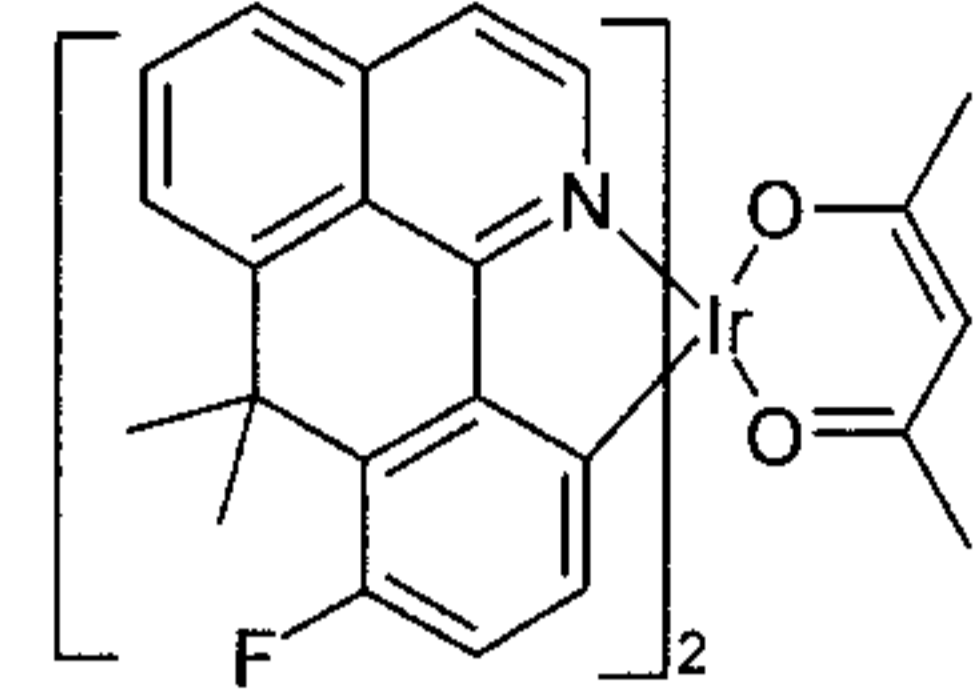
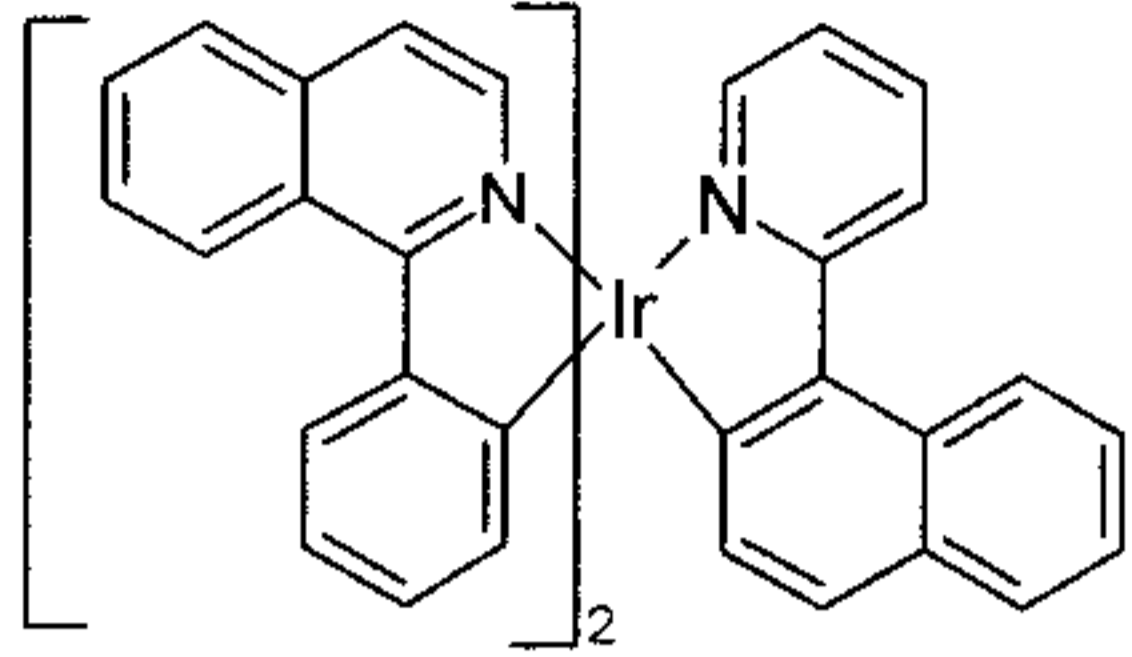
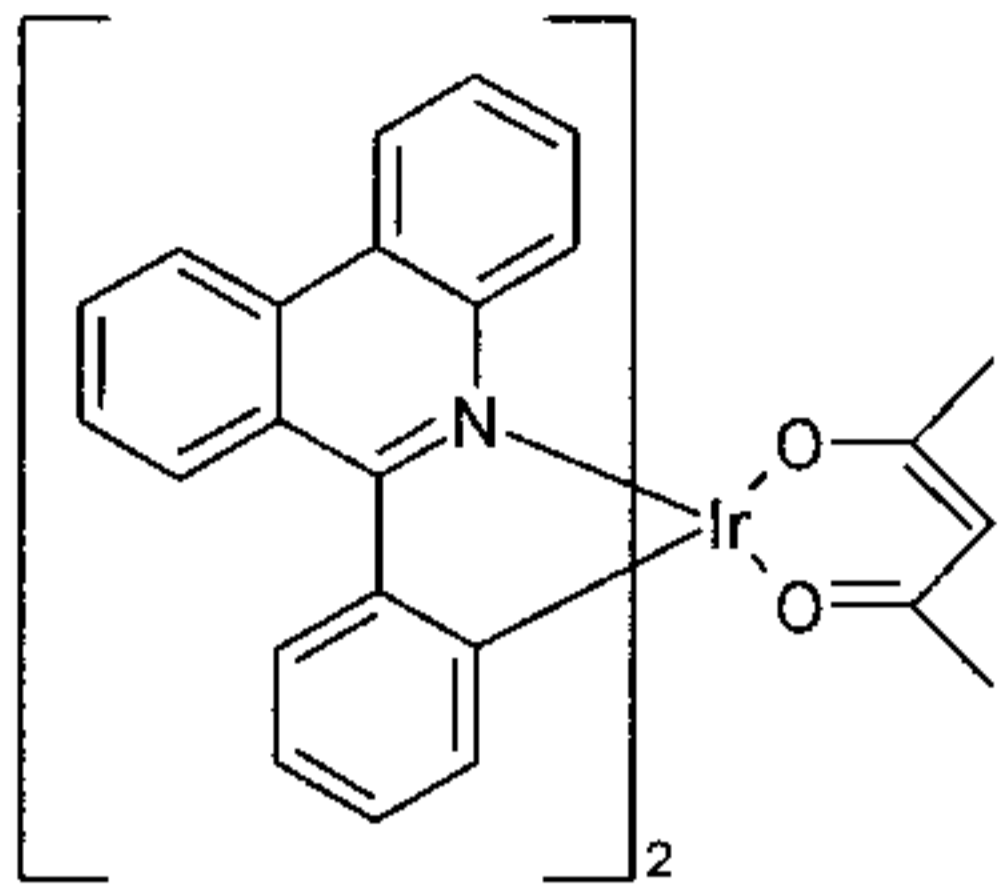
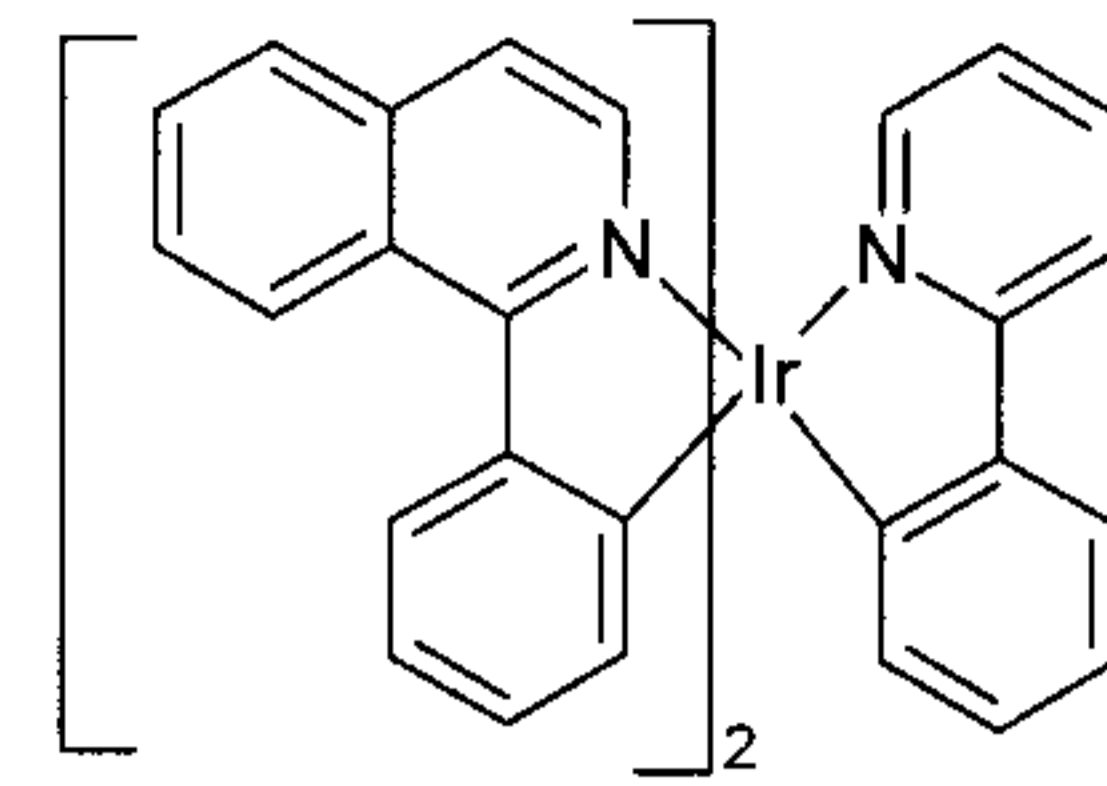
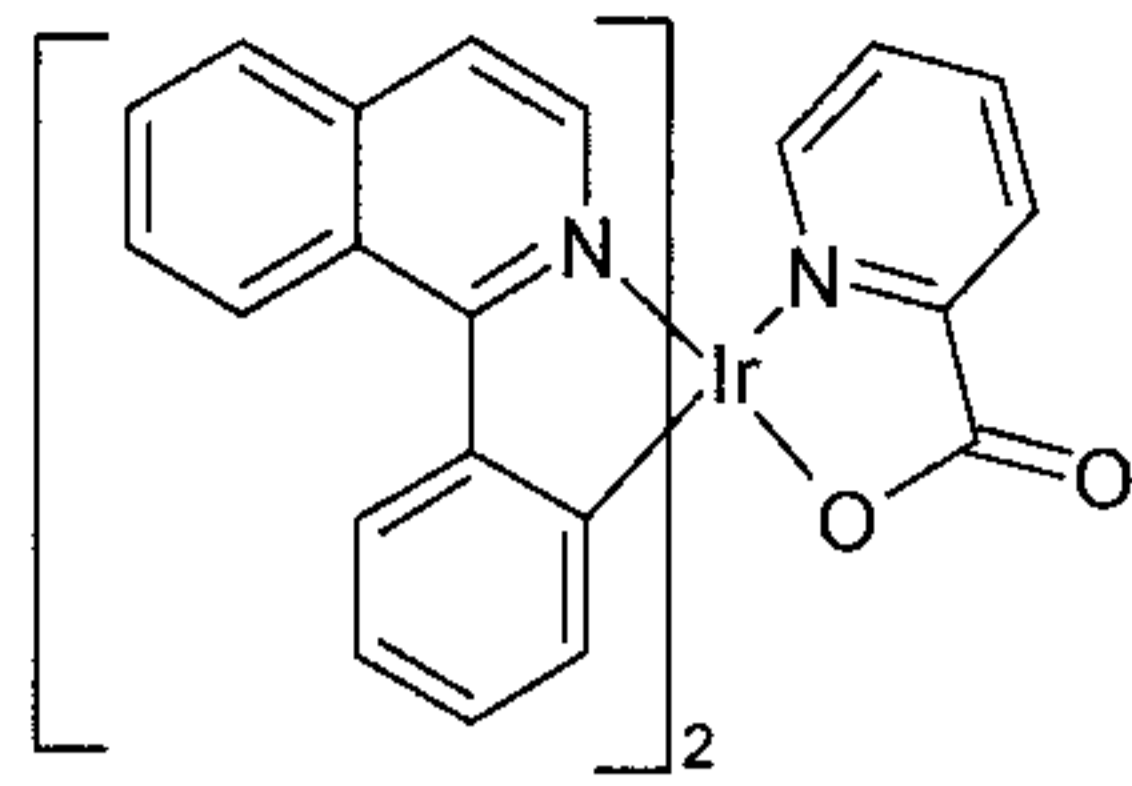
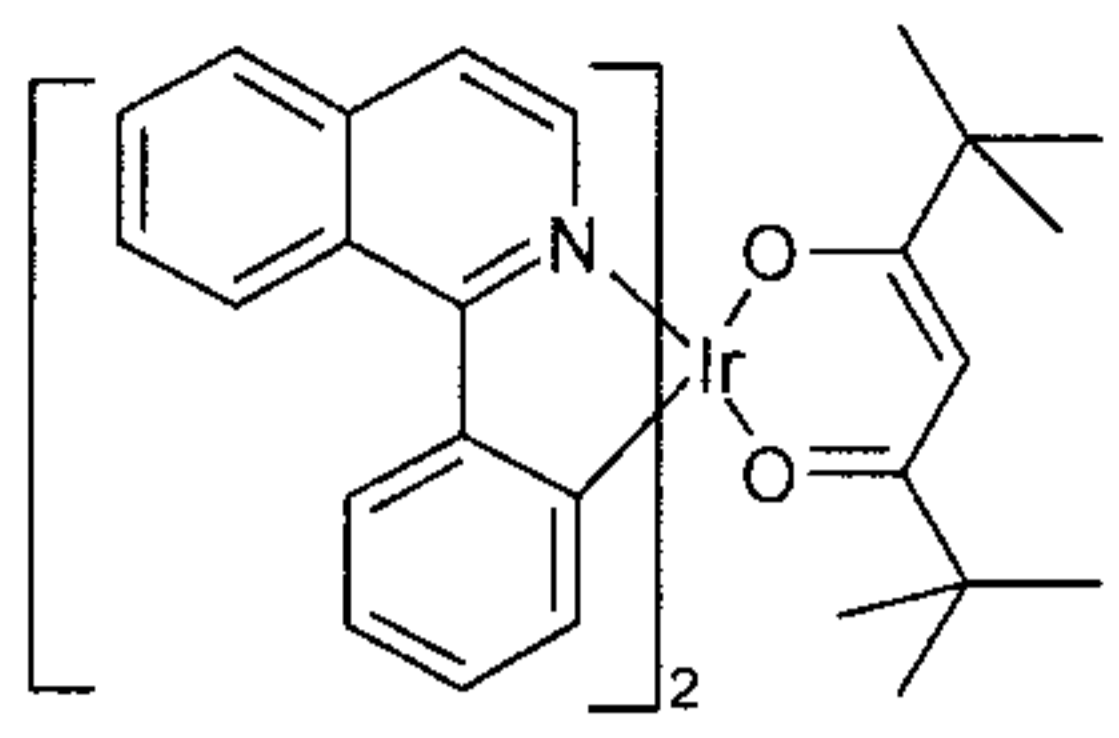
特佳地亦係銅錯合物，如描述於例如  
WO2010/031485、US2013150581、WO2013/017675、  
WO2013/007707、WO2013/001086、WO2012/156378、  
WO2013/072508及 EP2543672中者。

磷光敏化劑之明確實例係  $\text{Ir(ppy)}_3$  及其衍生物以及下  
列之結構：

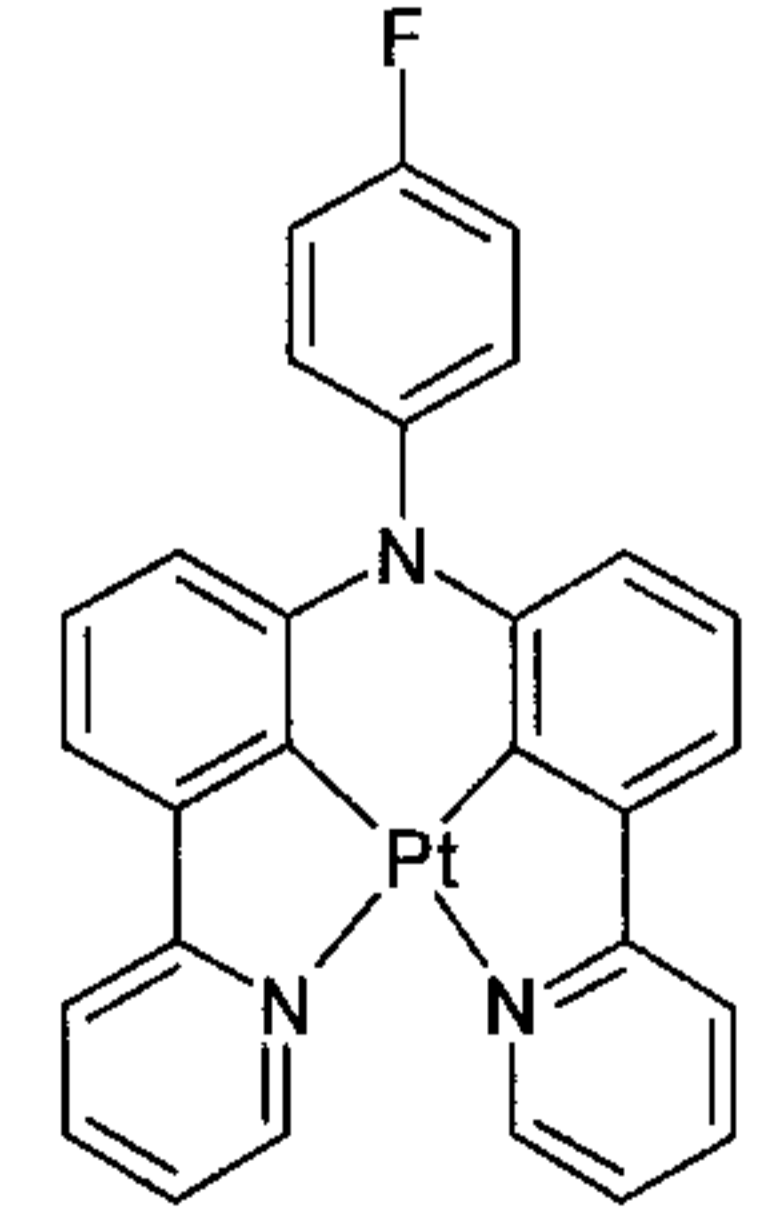
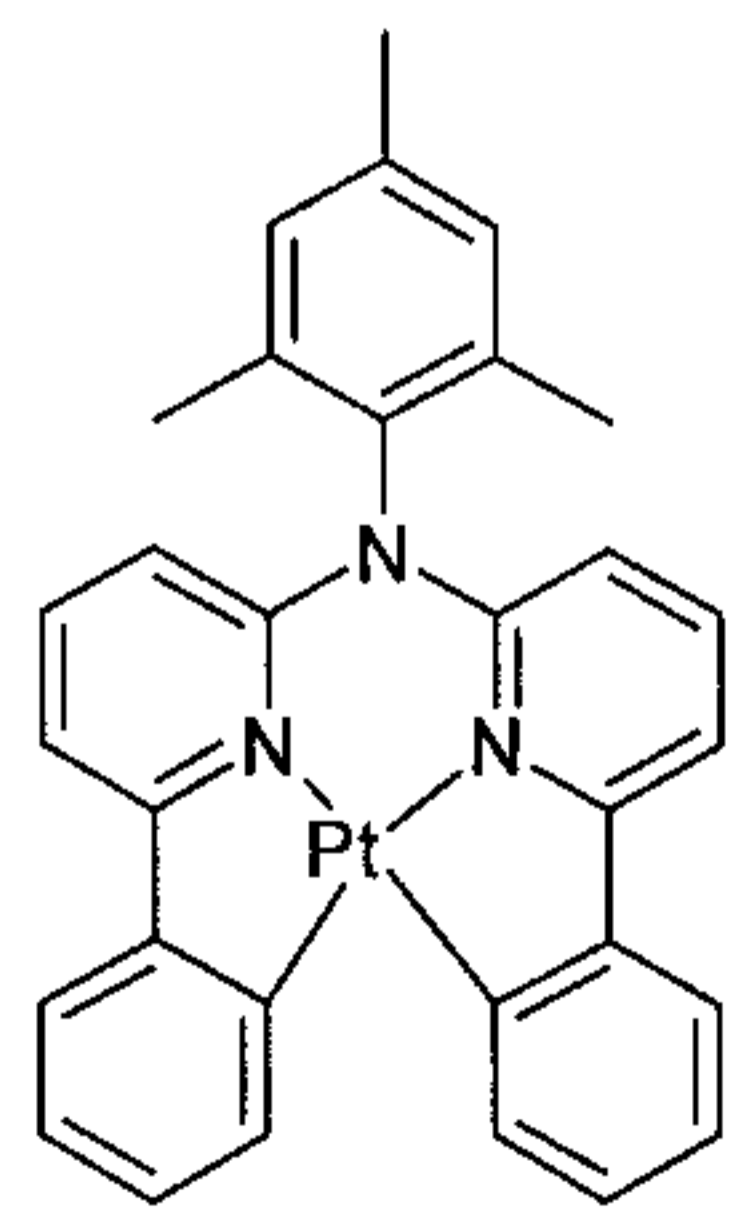
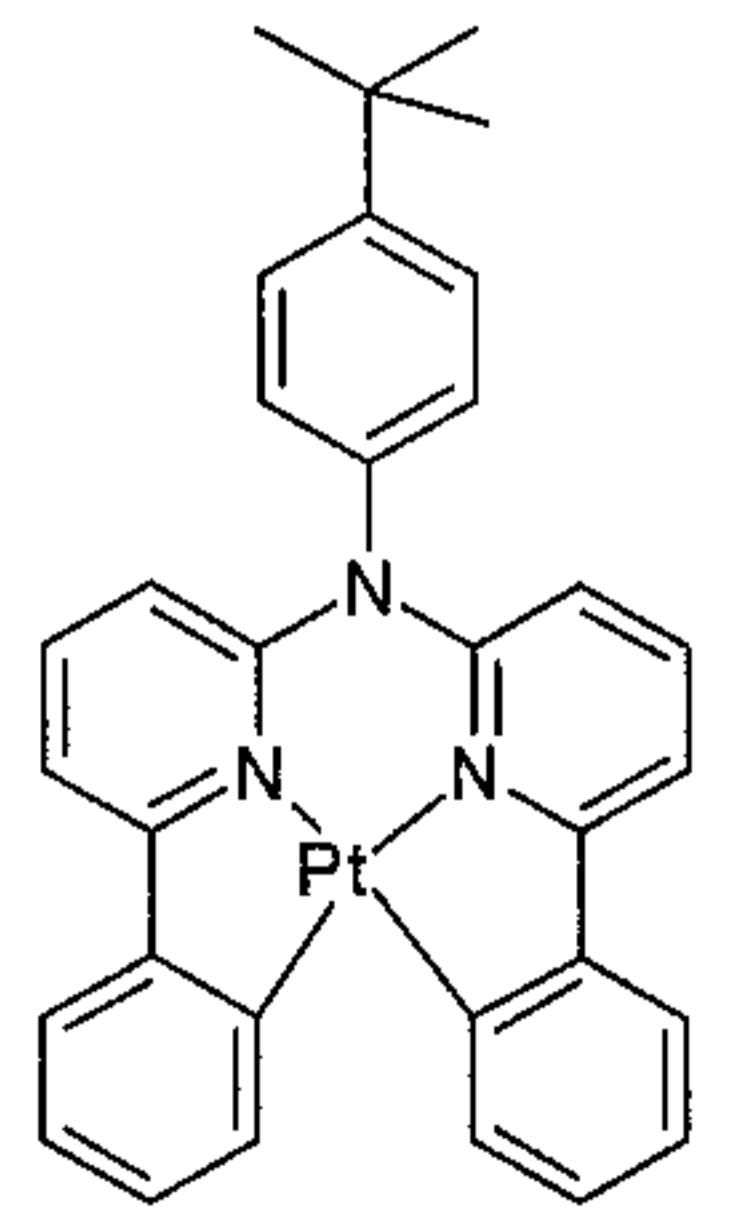
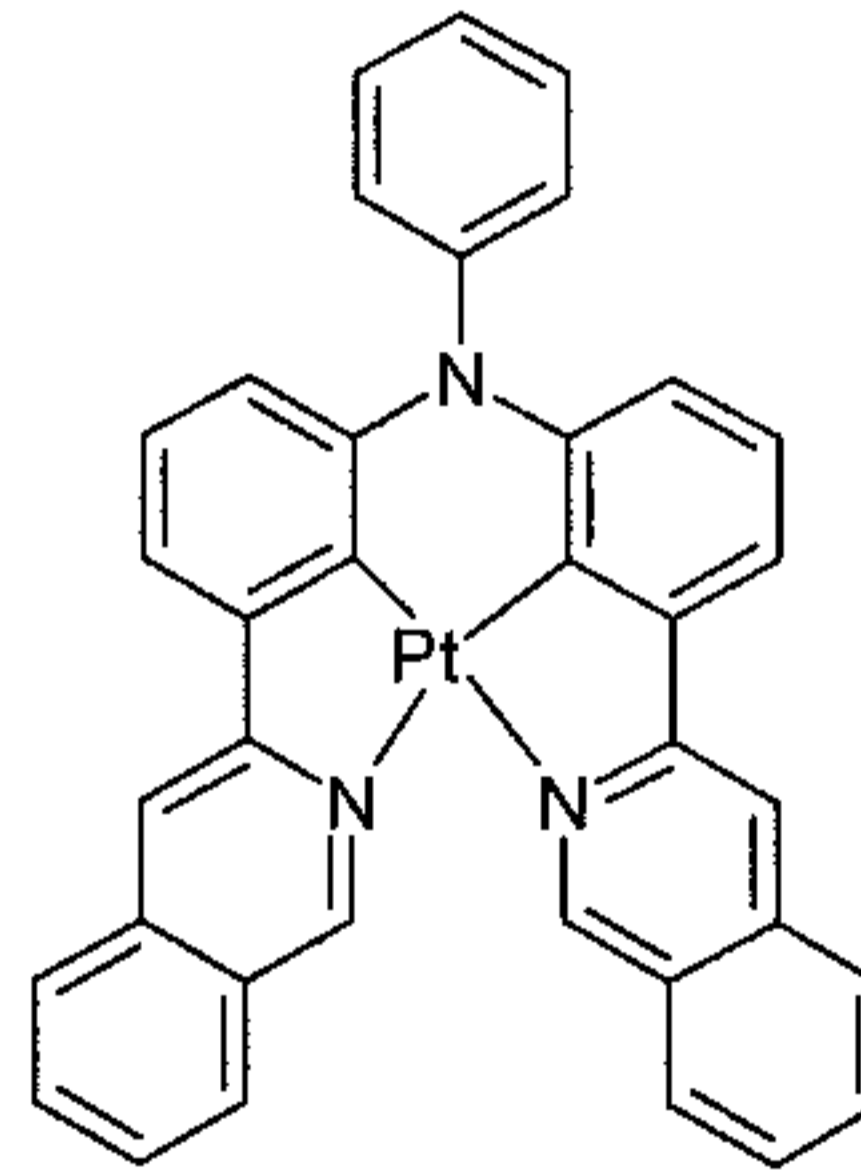
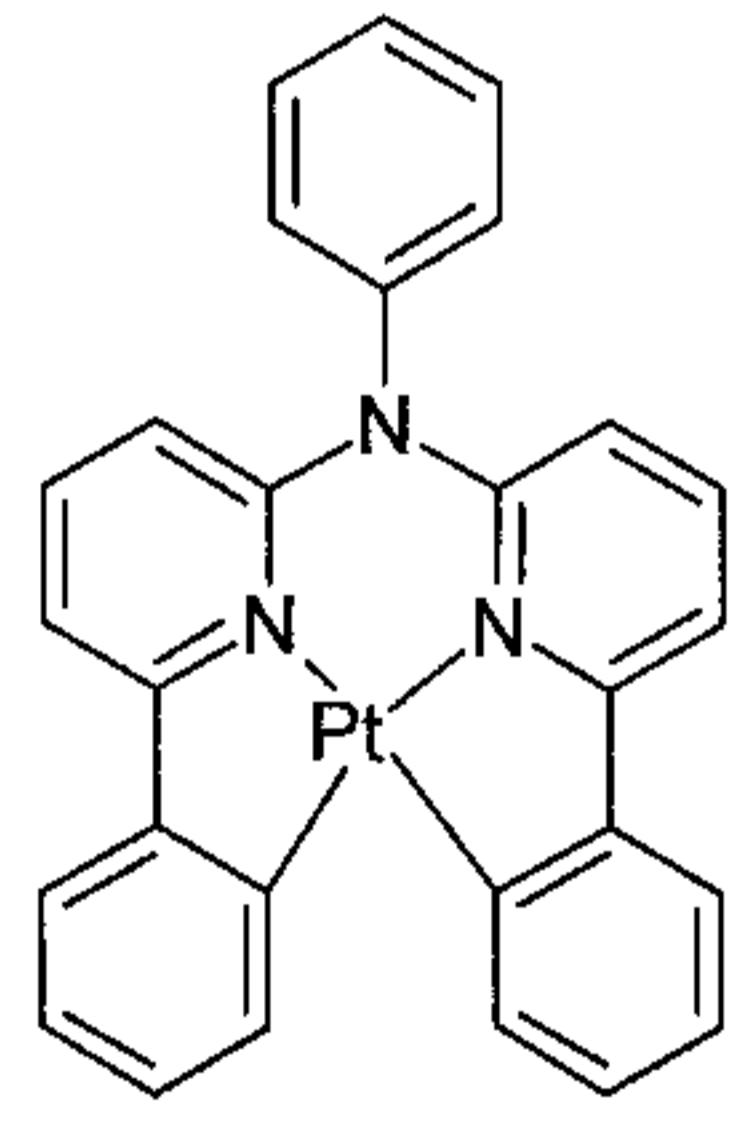
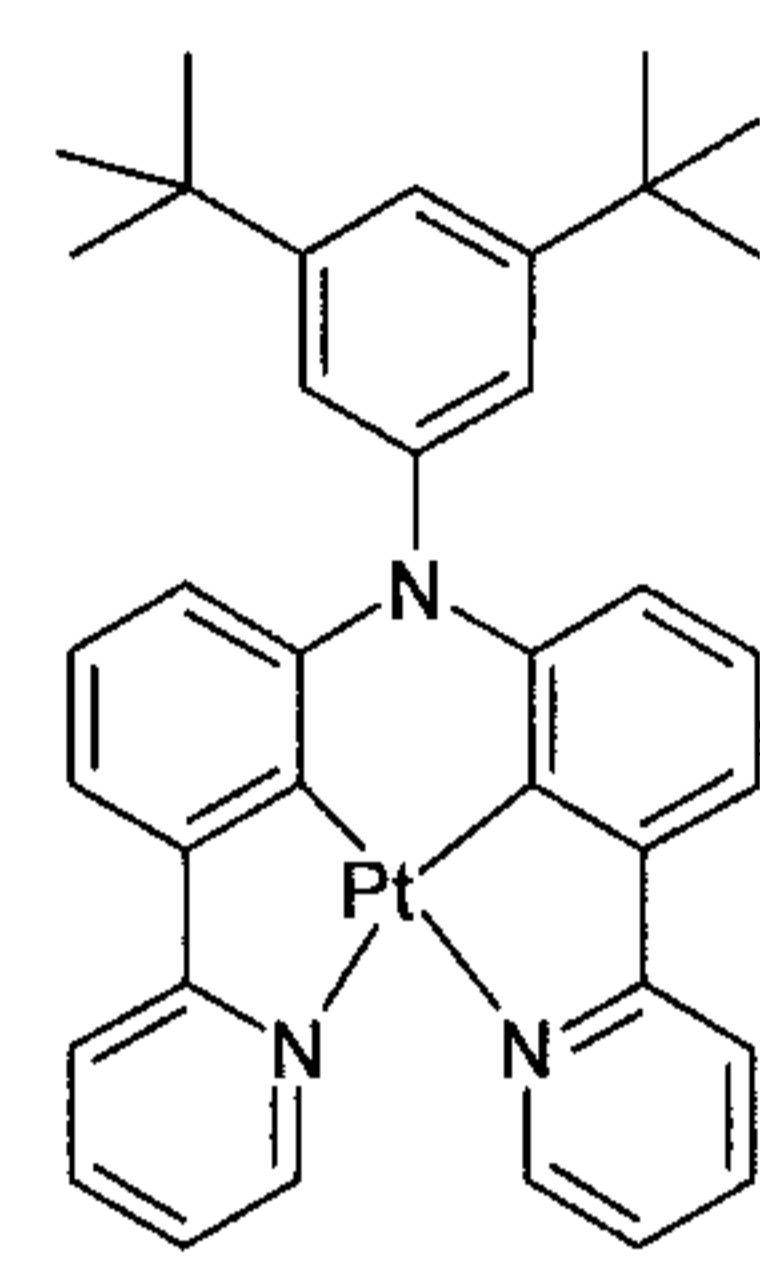
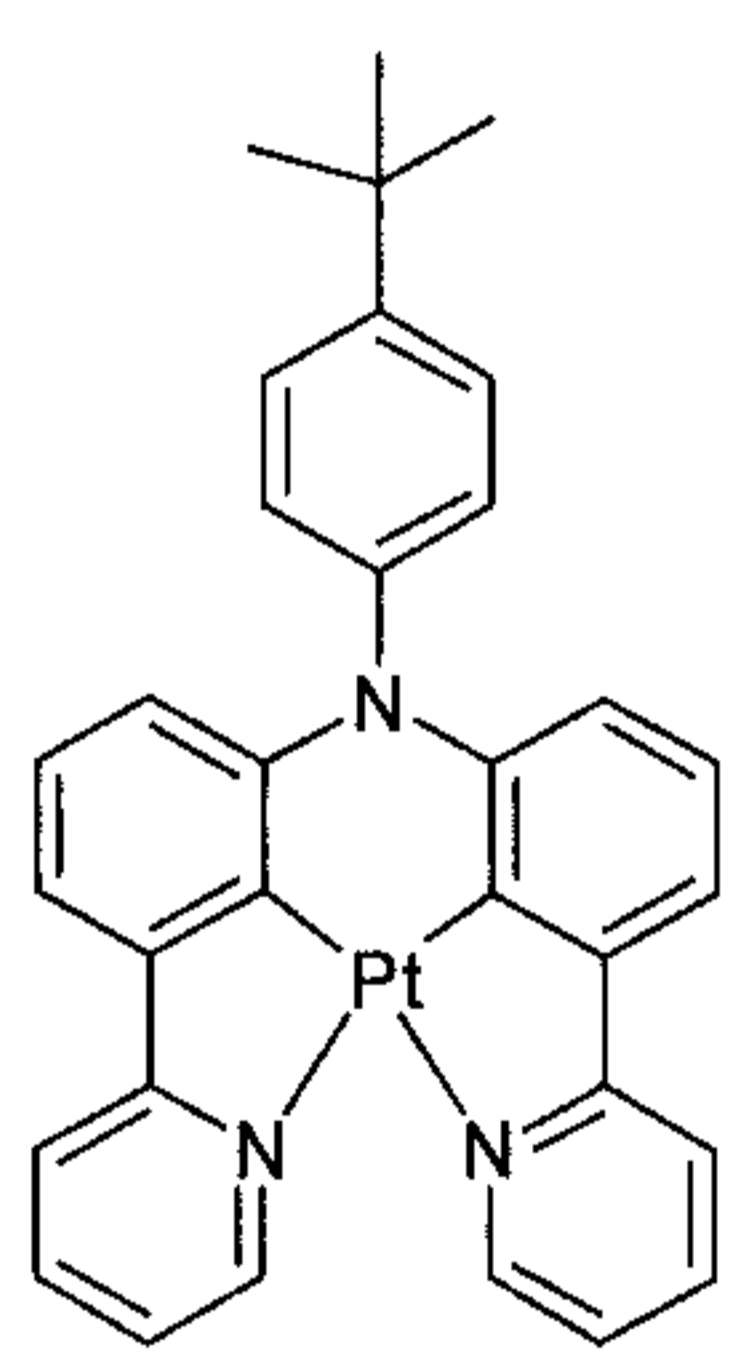
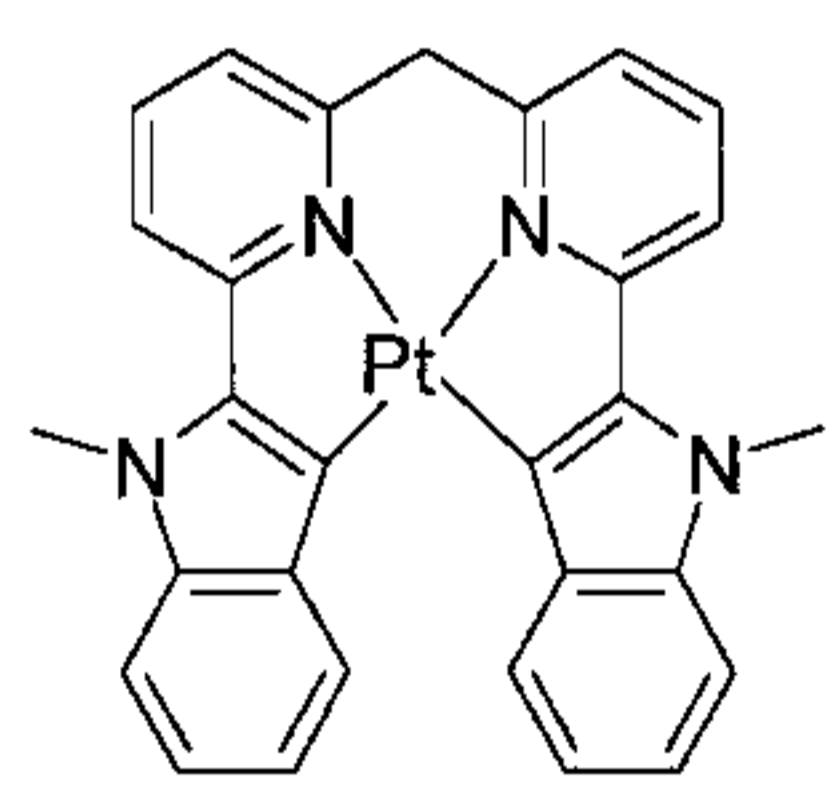
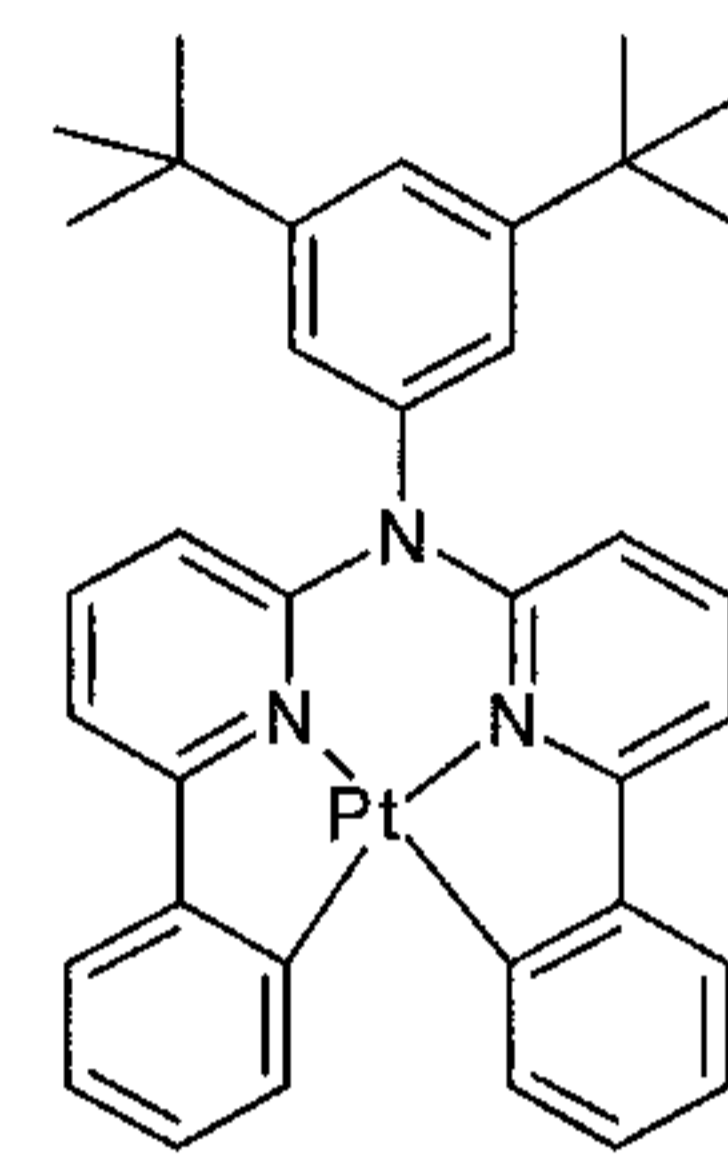
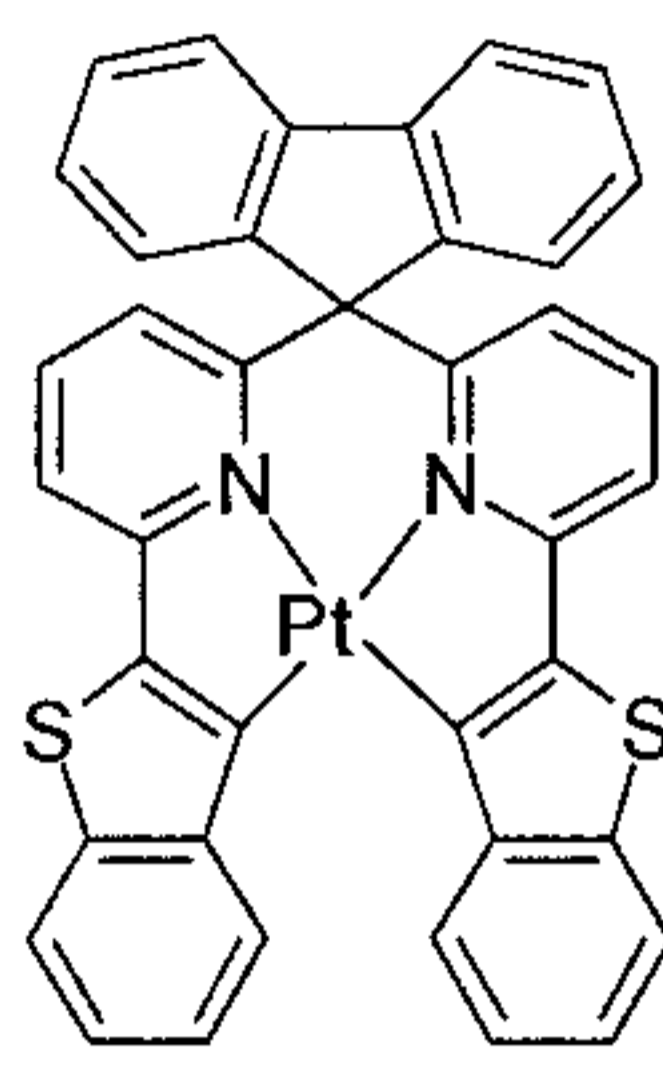
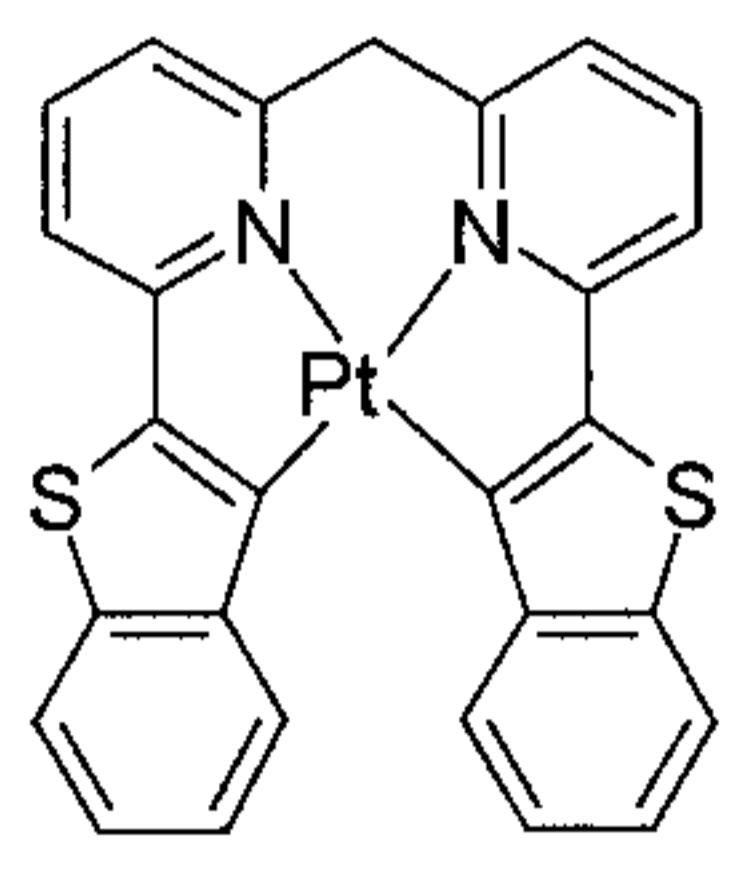
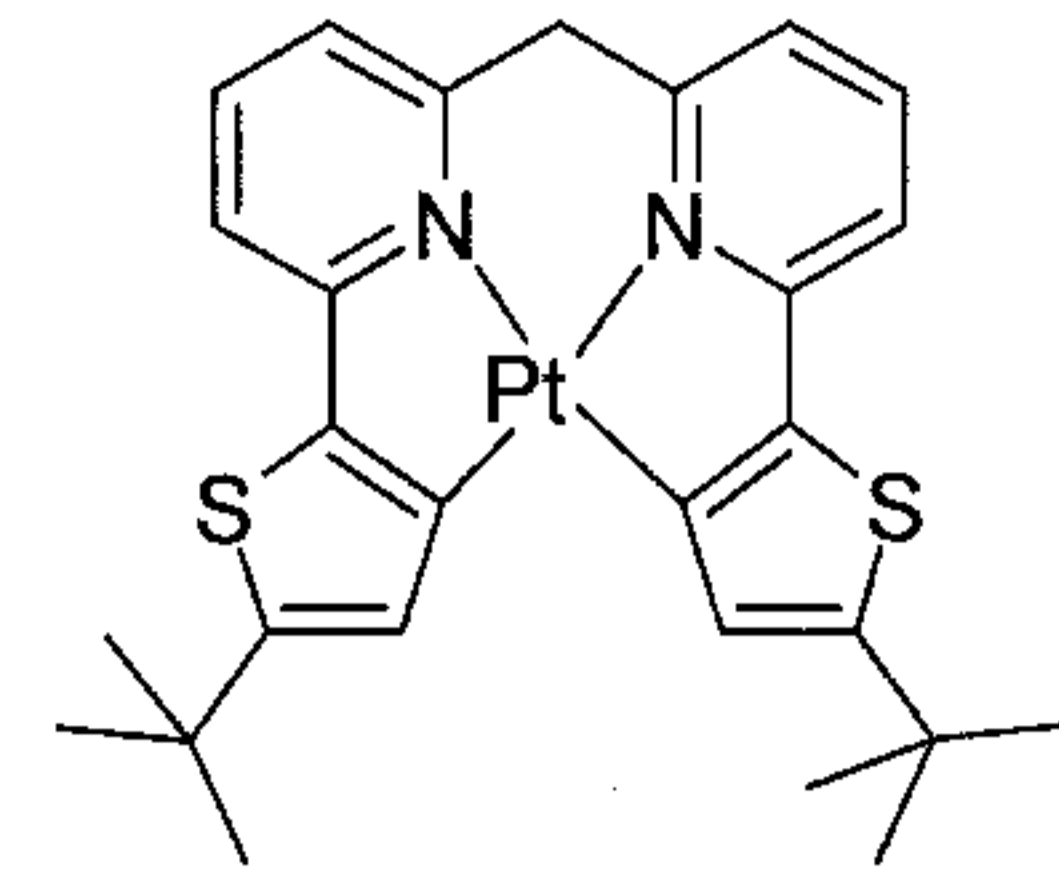
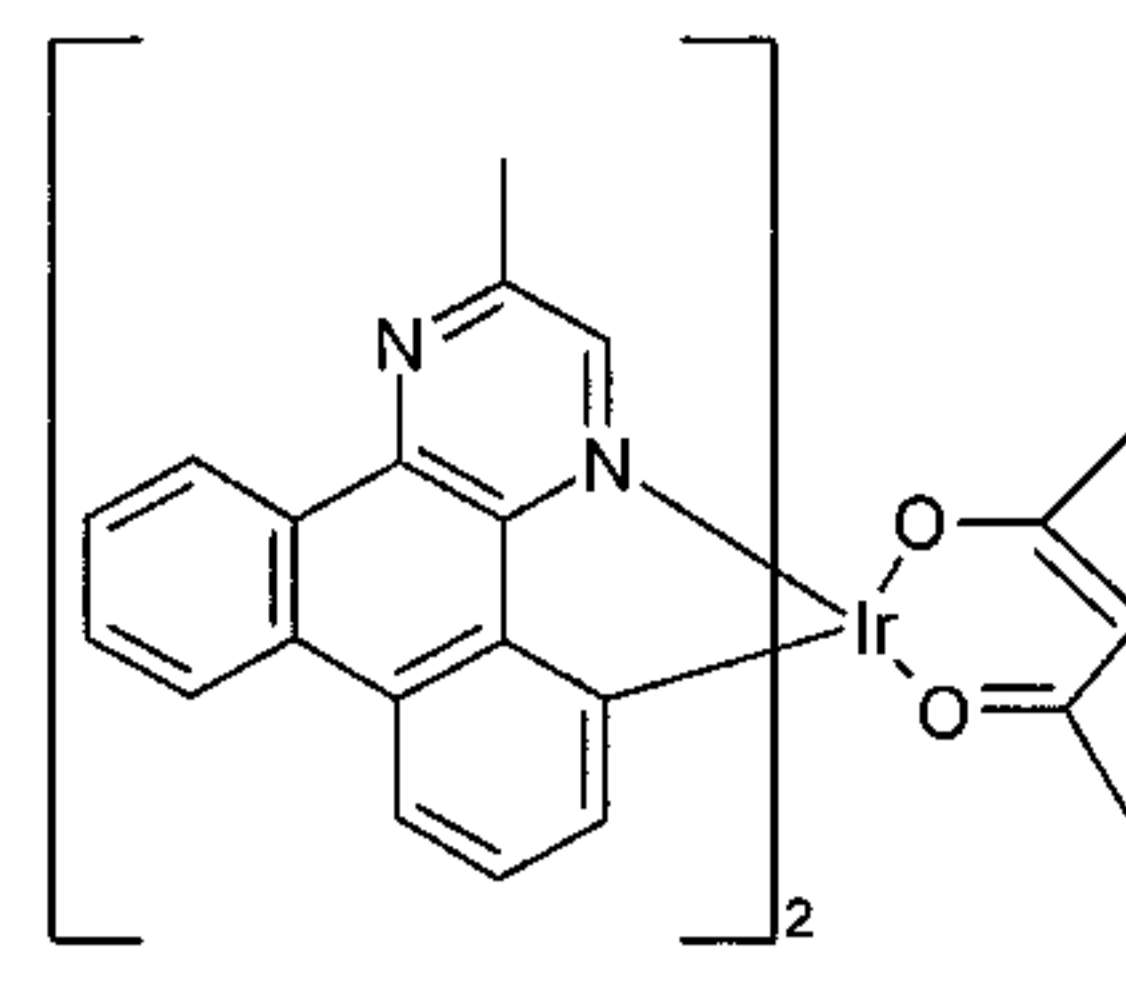
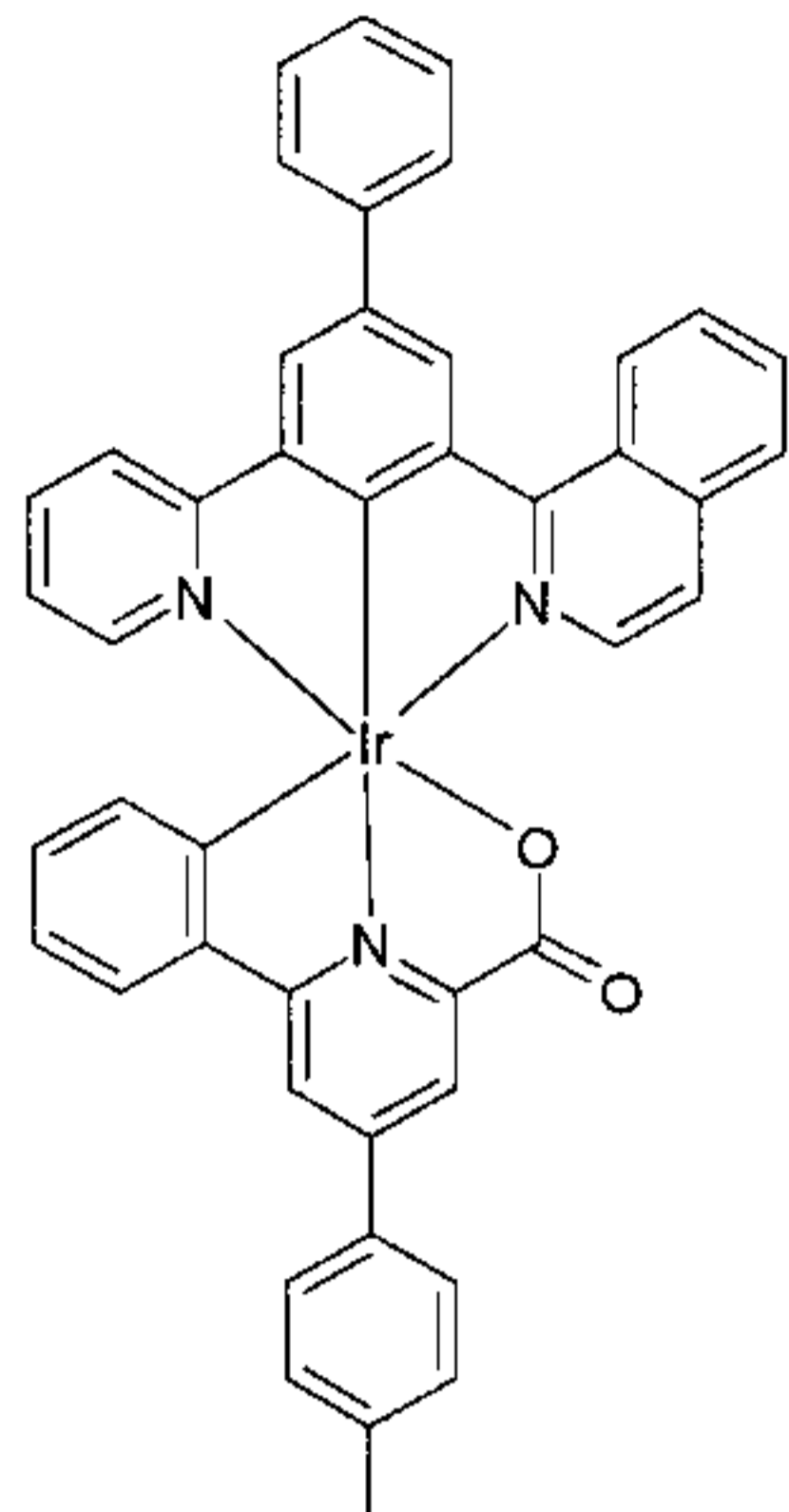




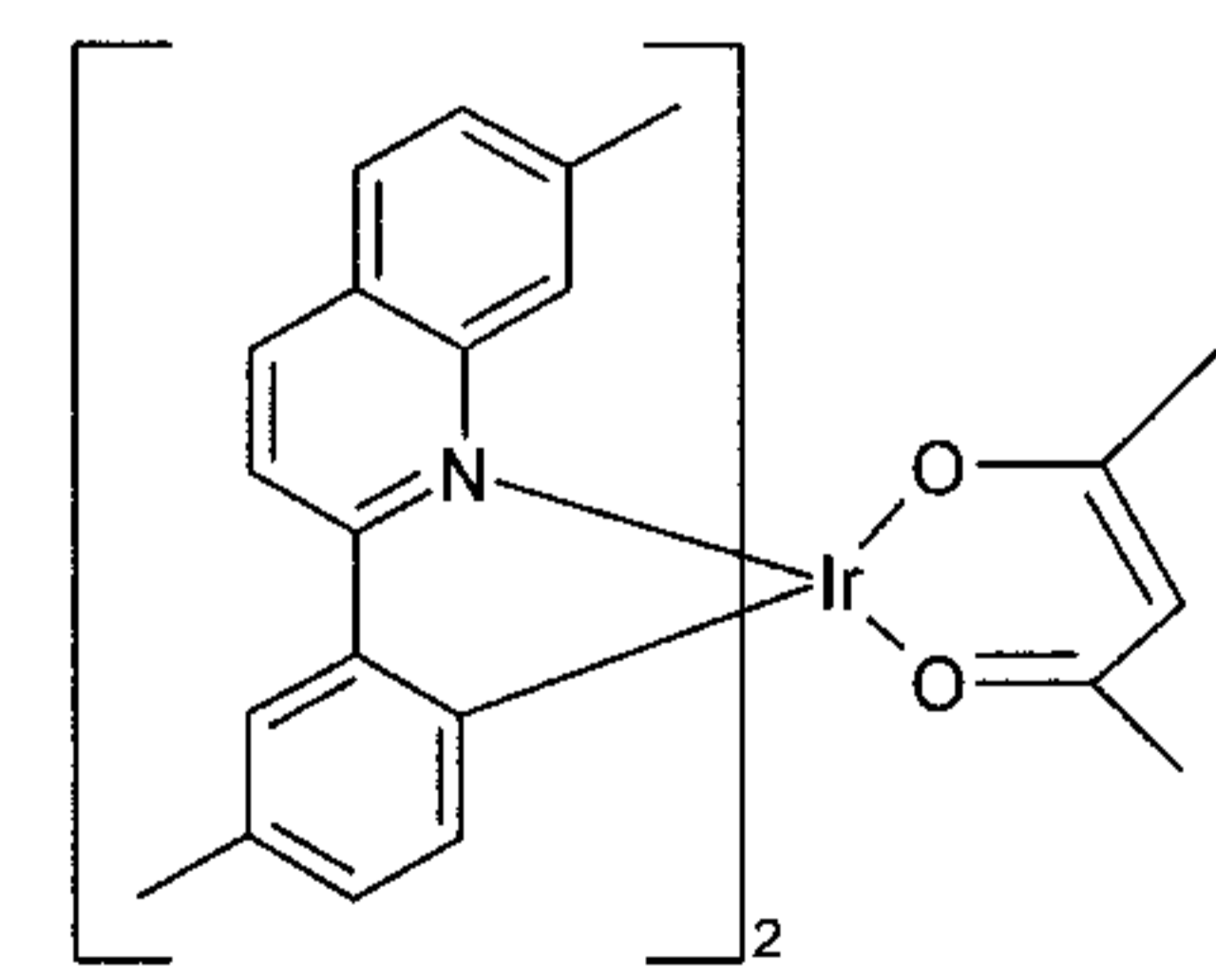
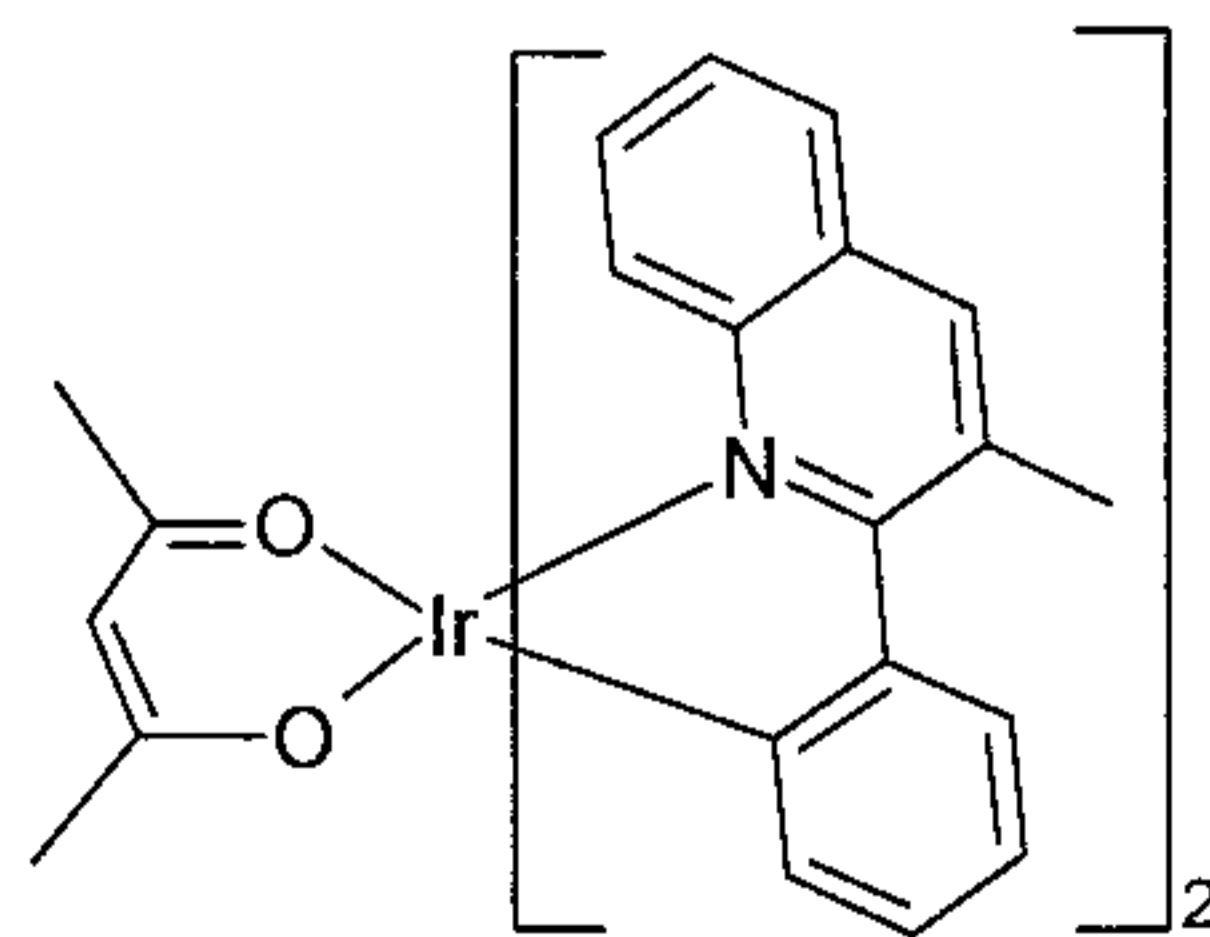
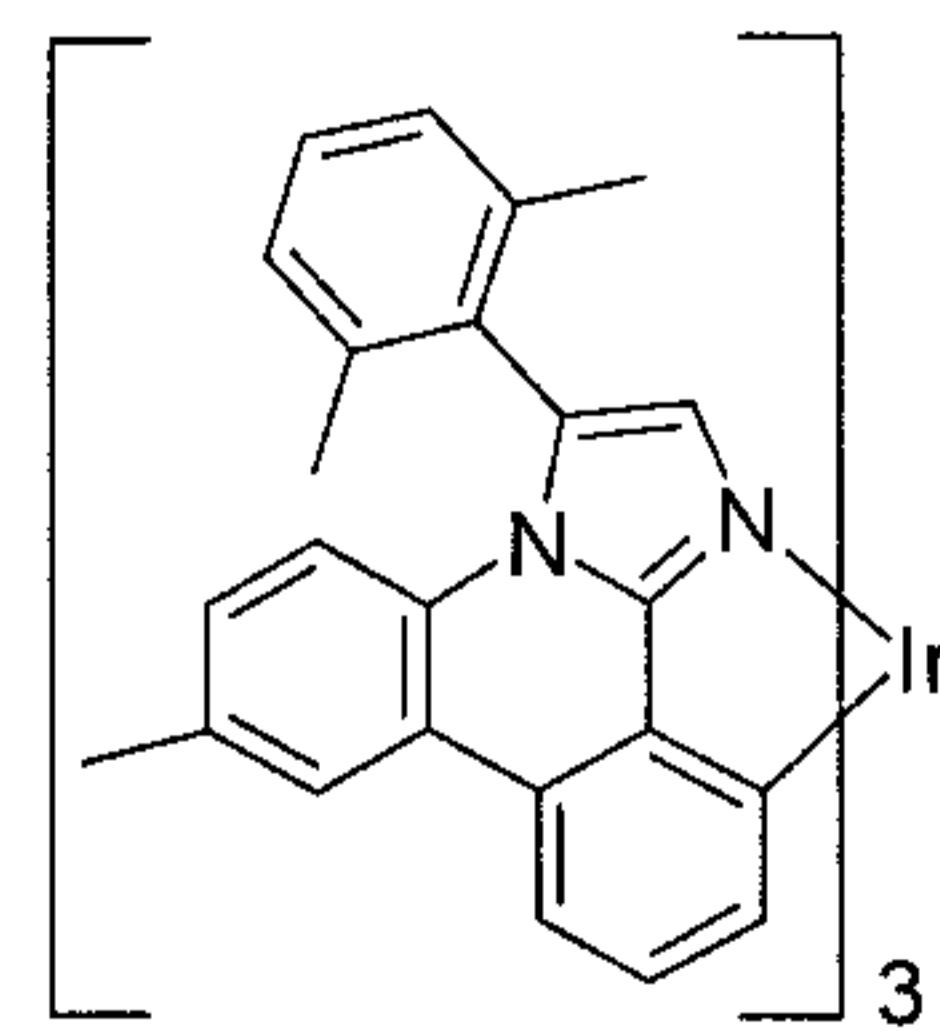
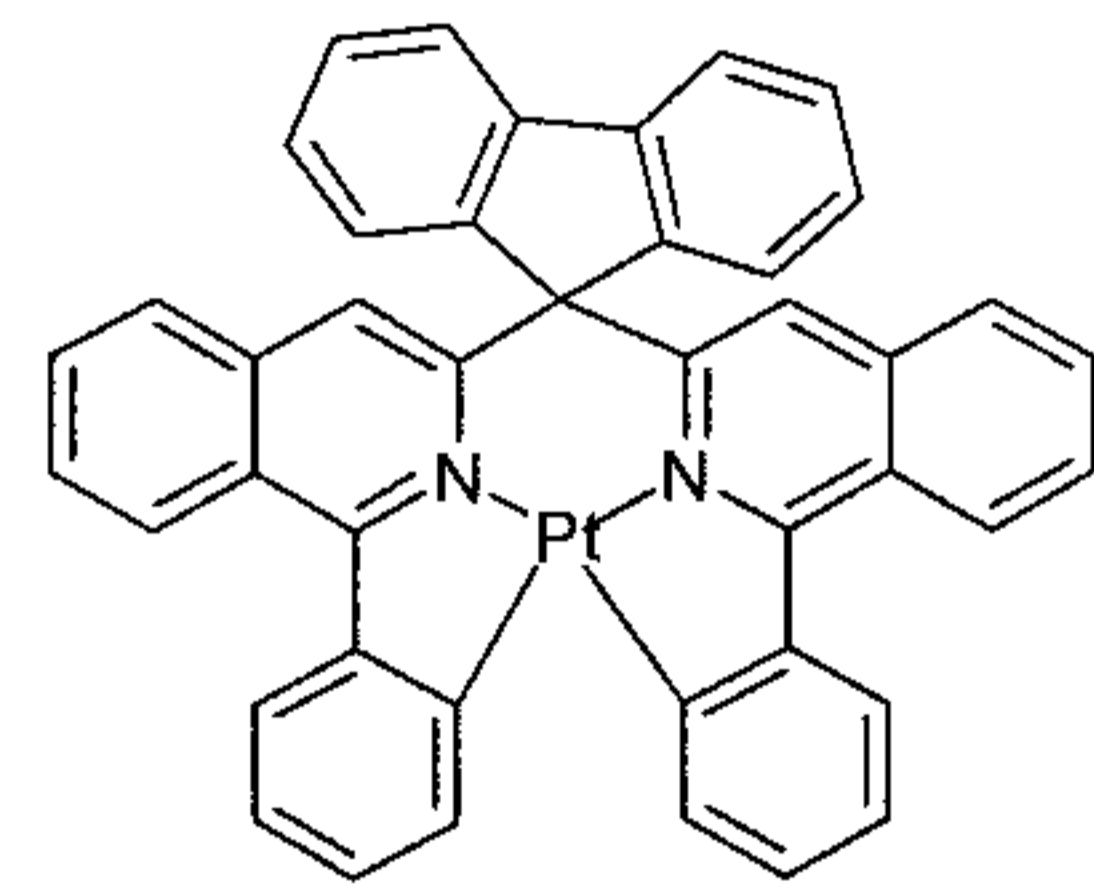
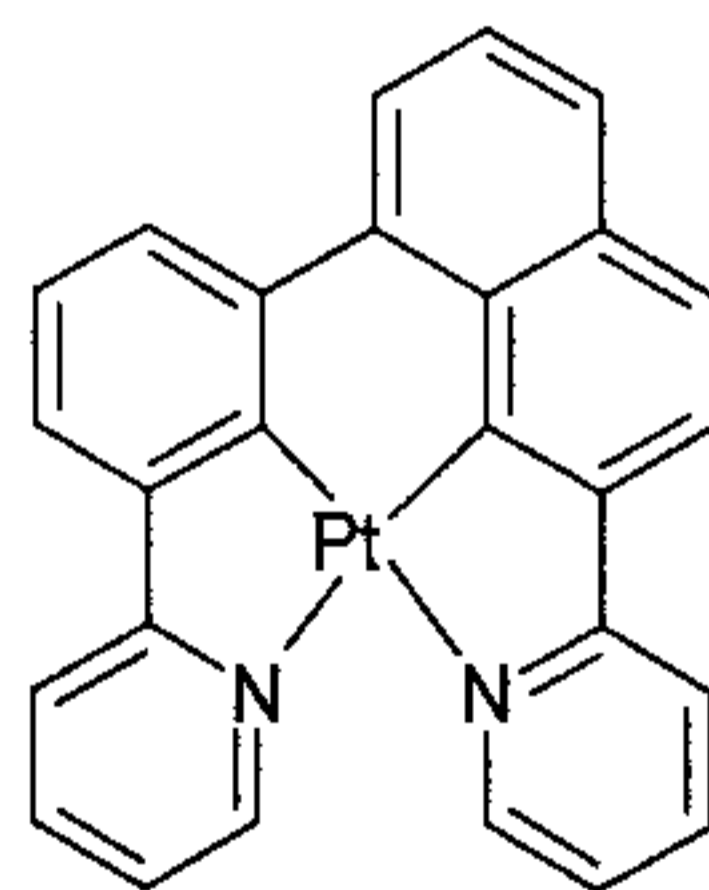
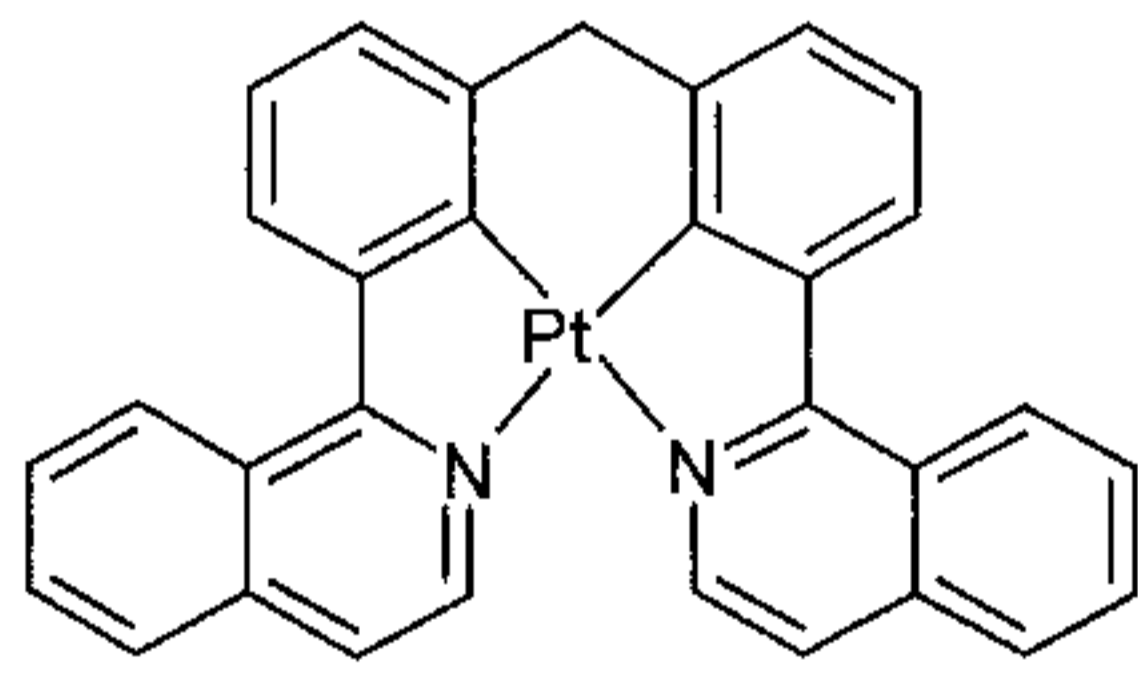
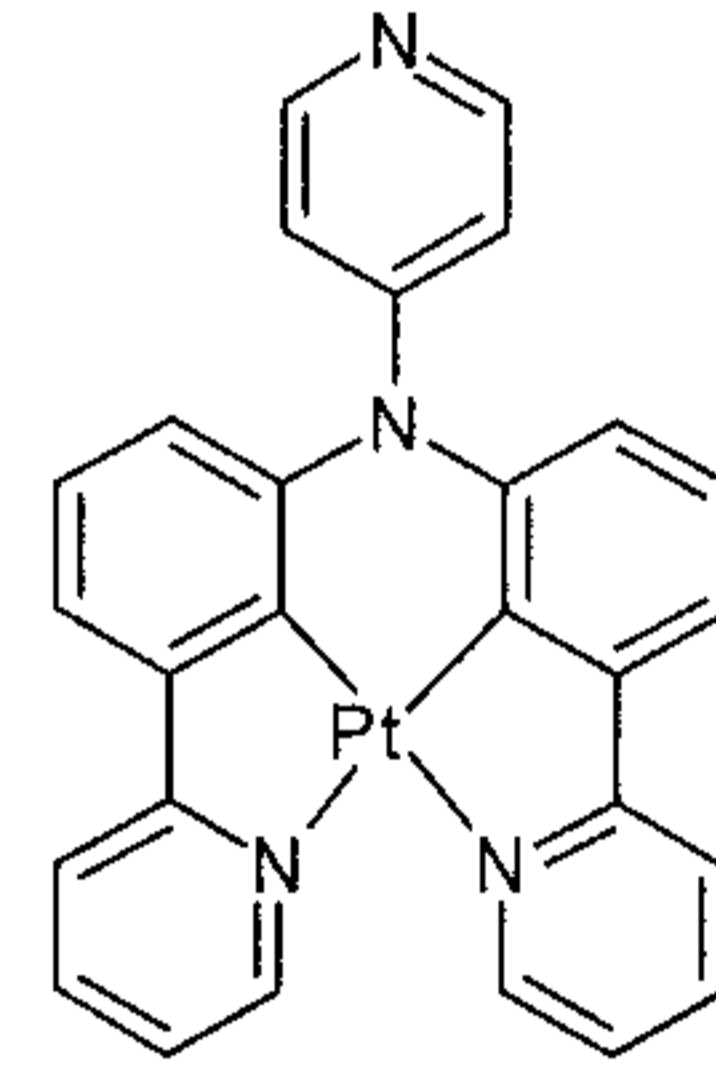
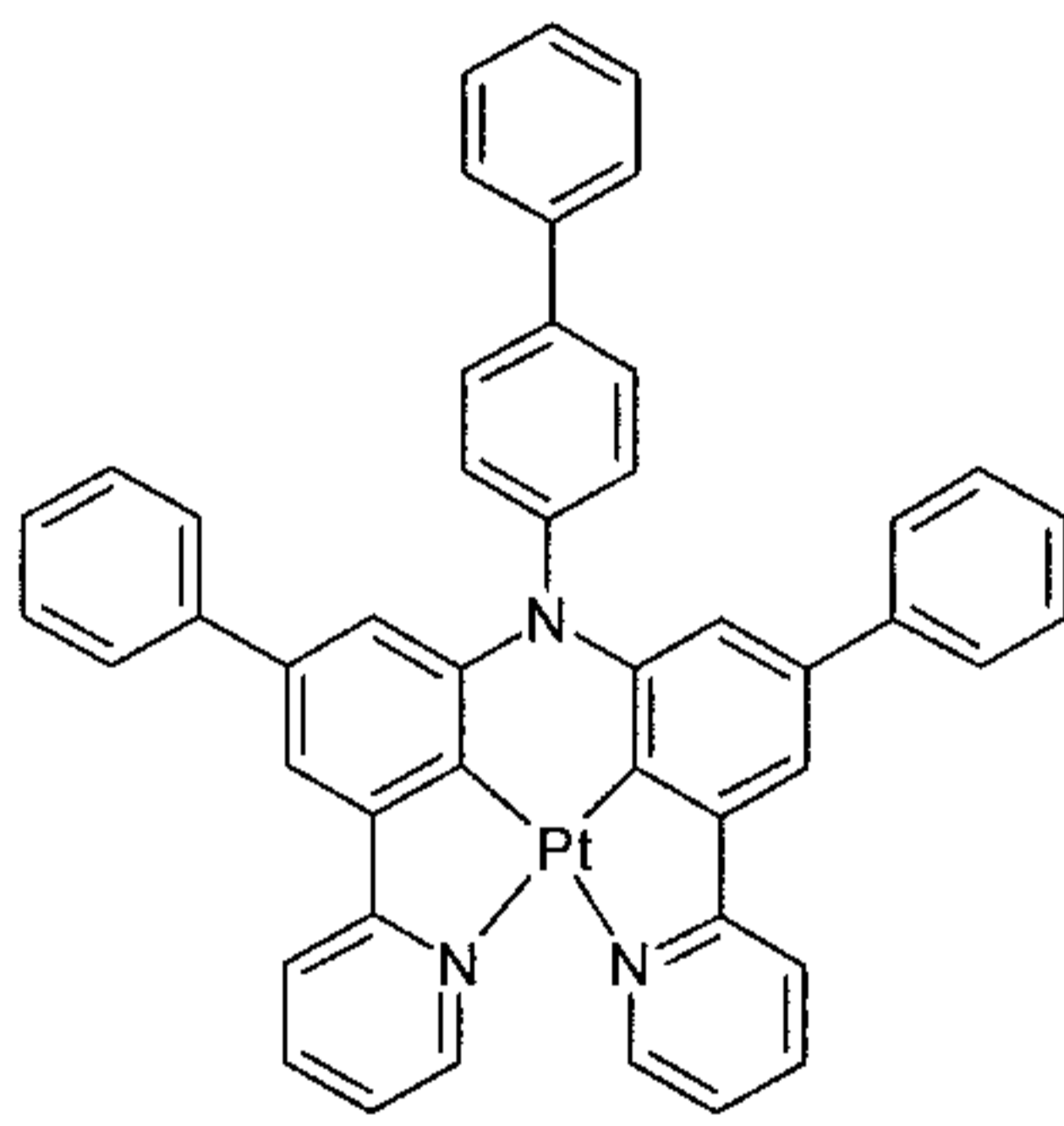
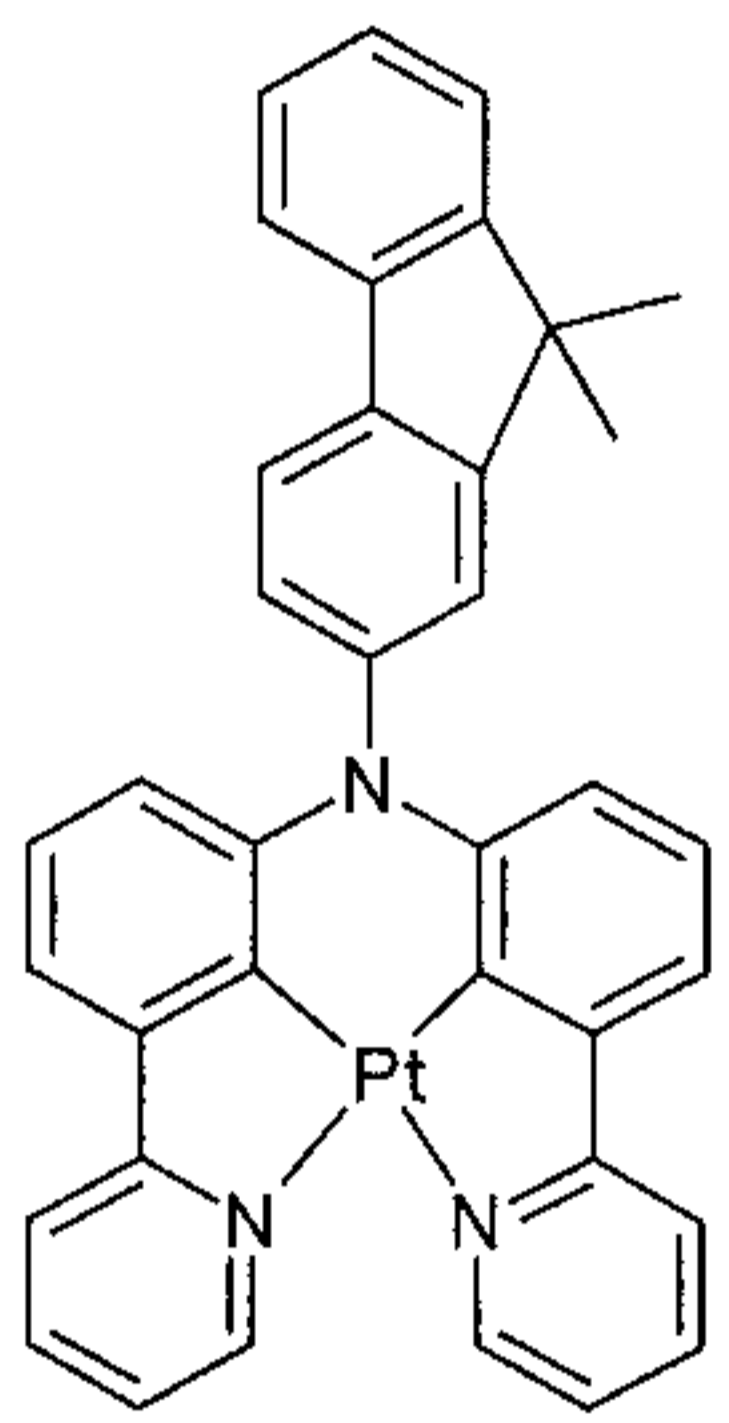
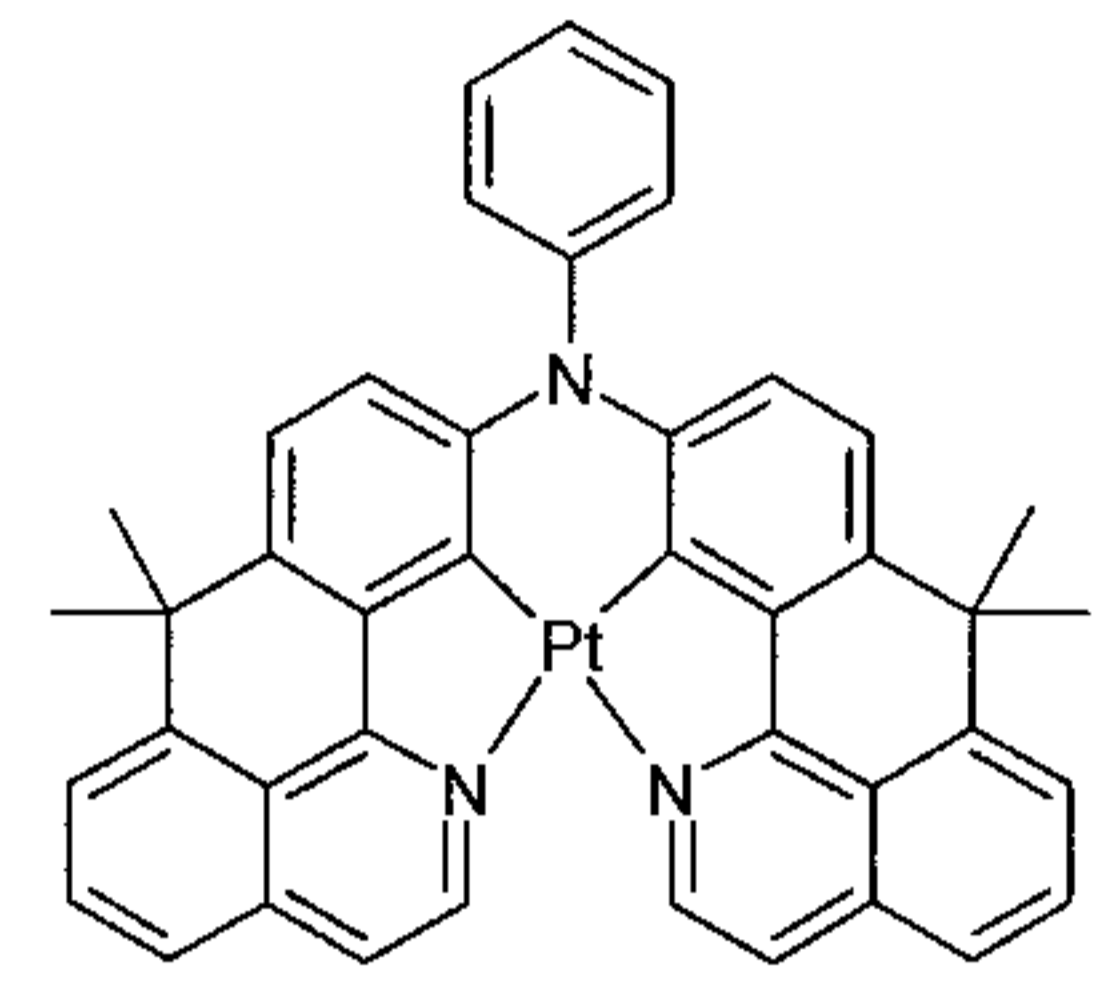
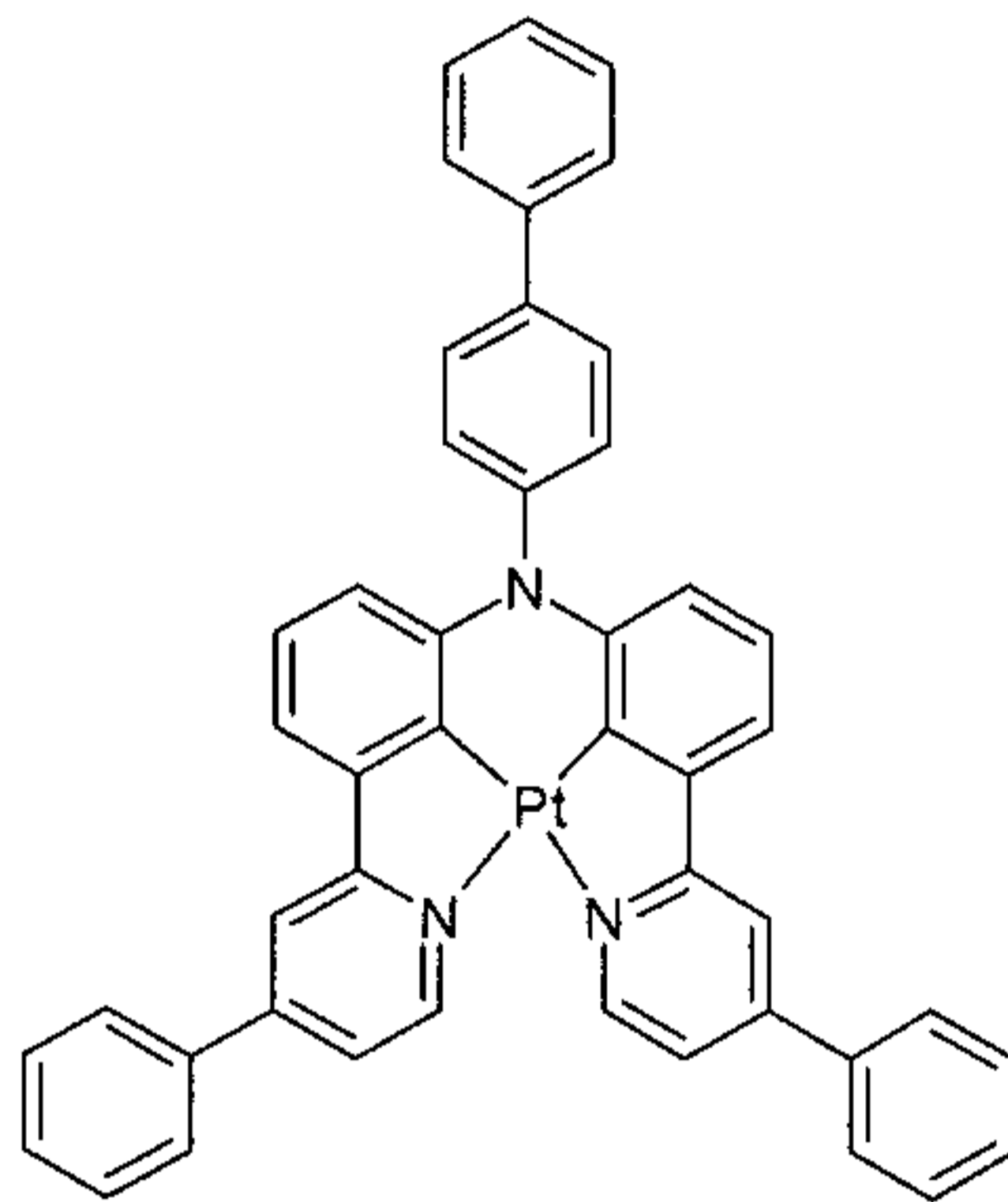
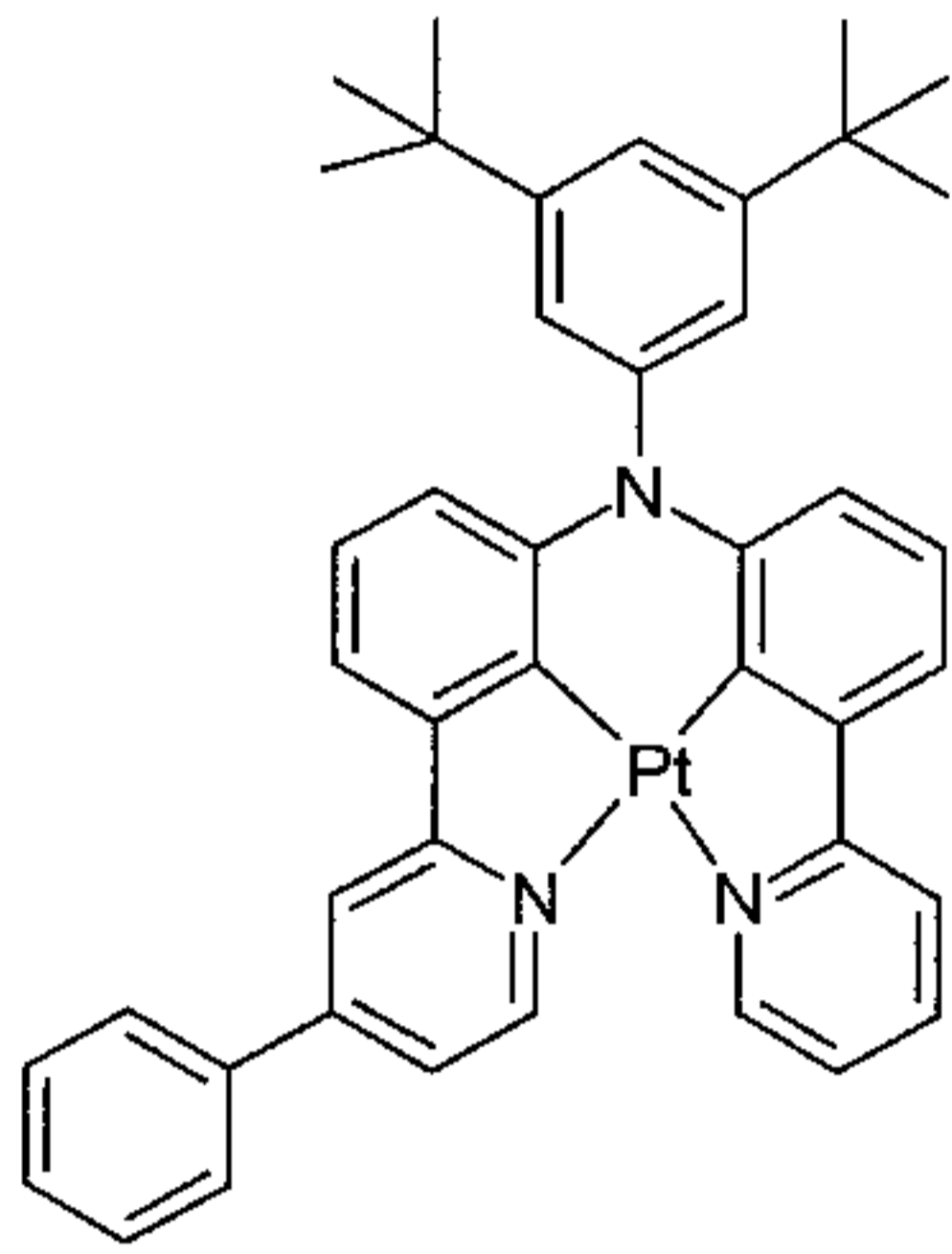
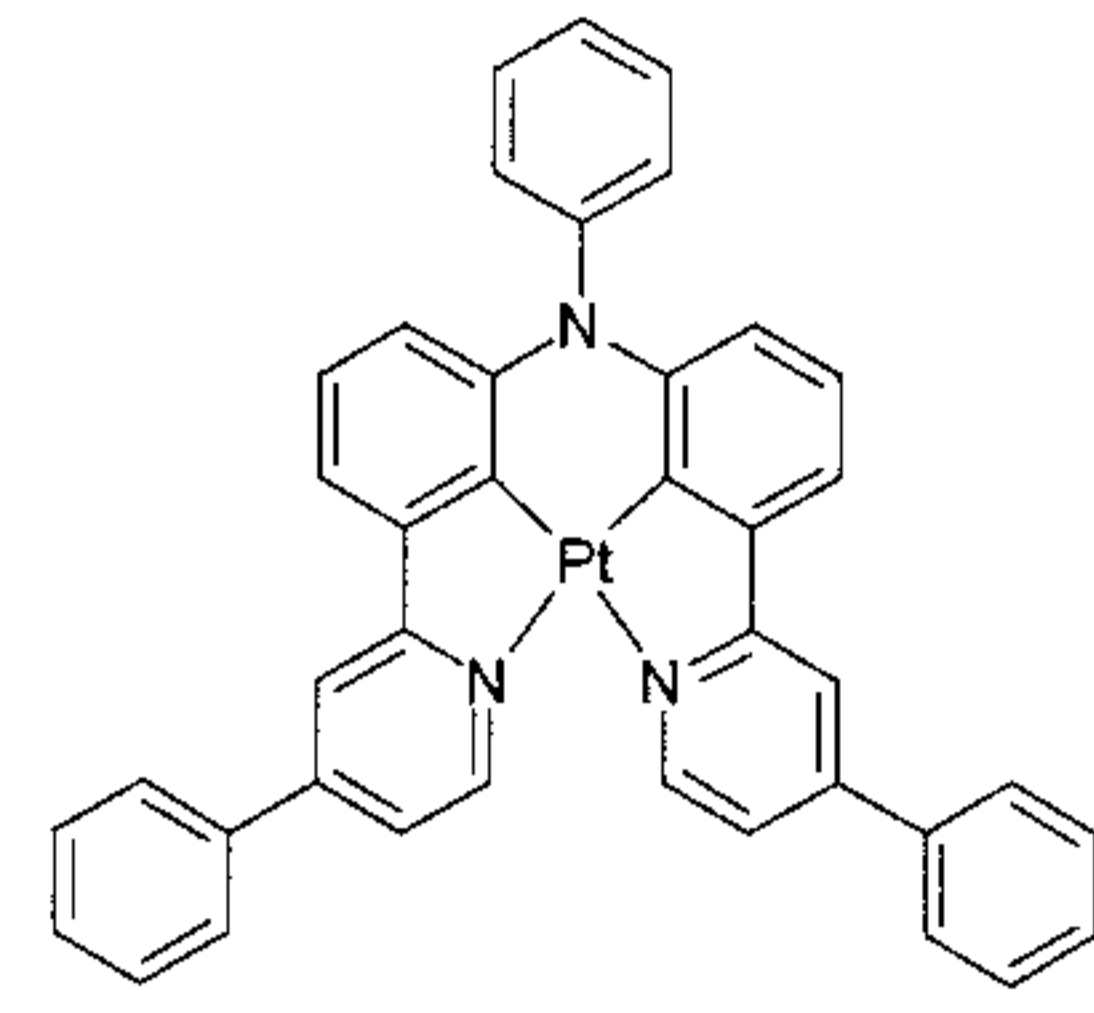
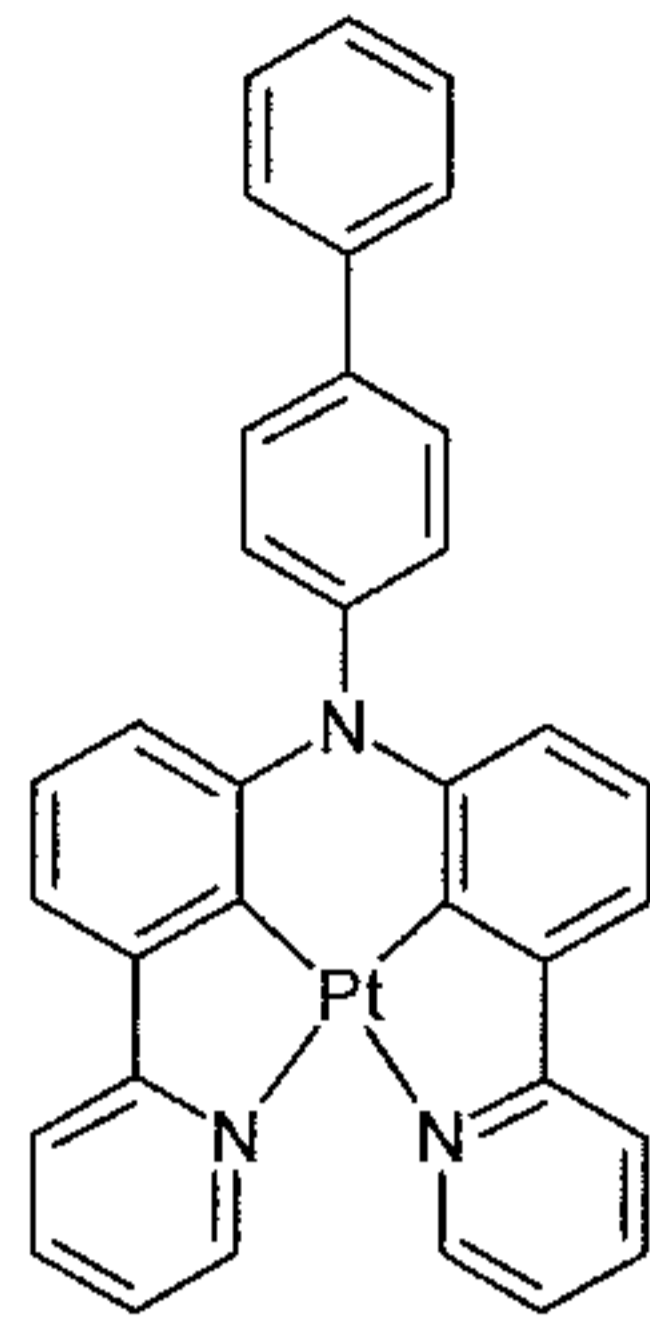
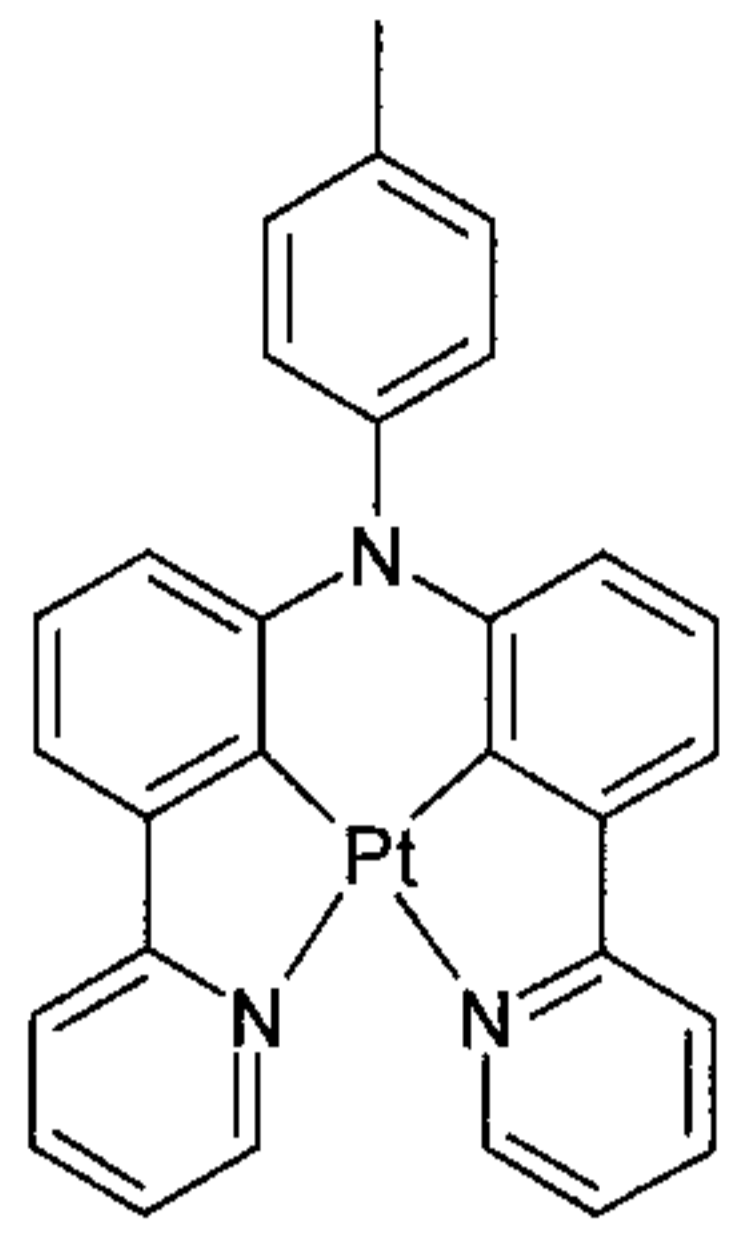




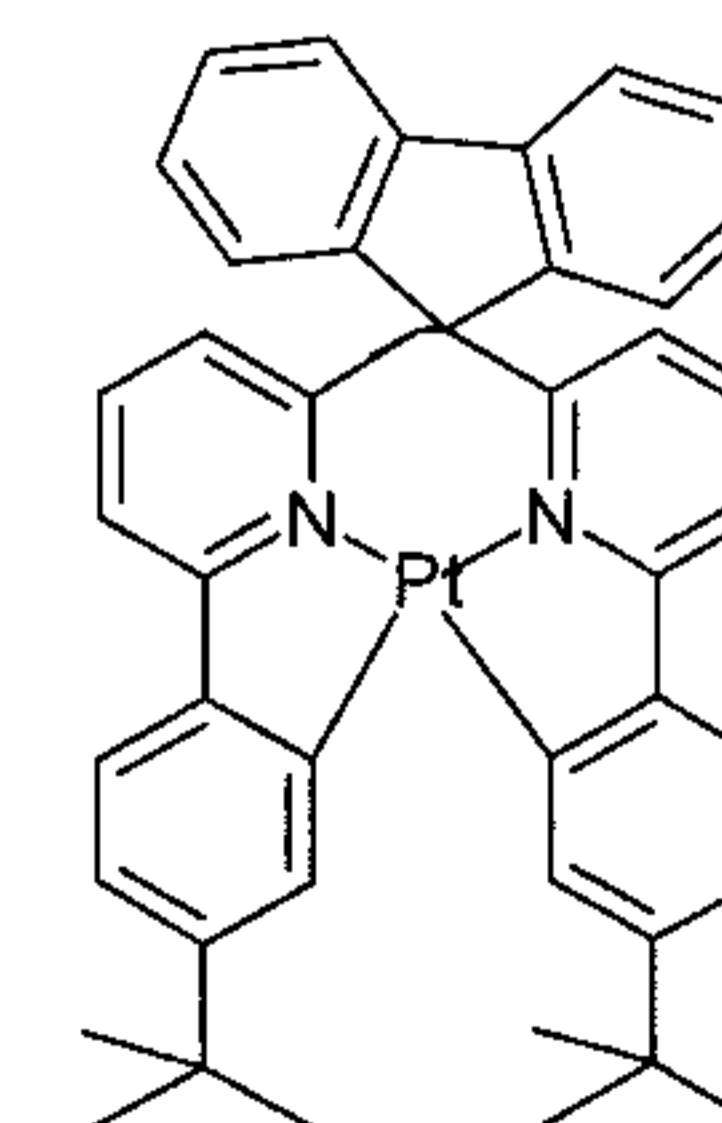
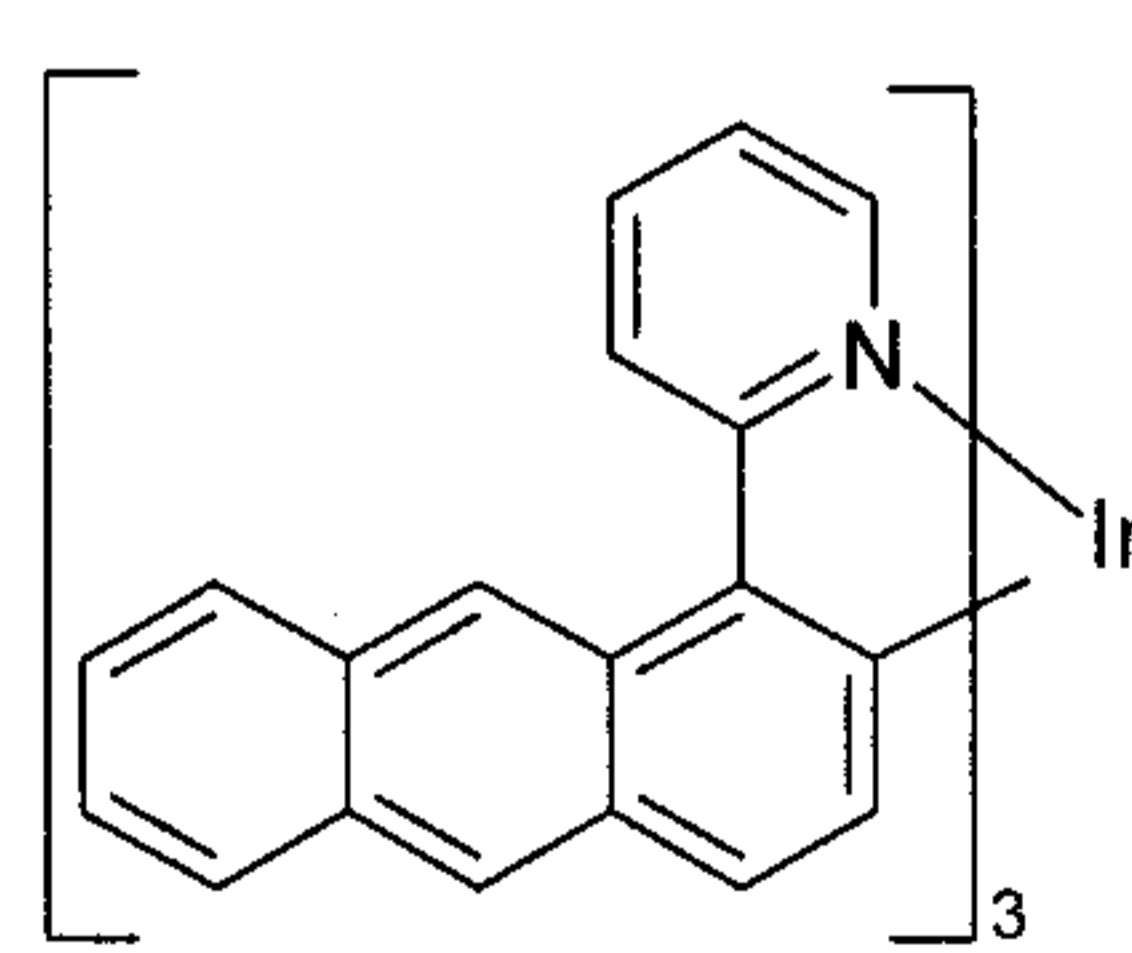
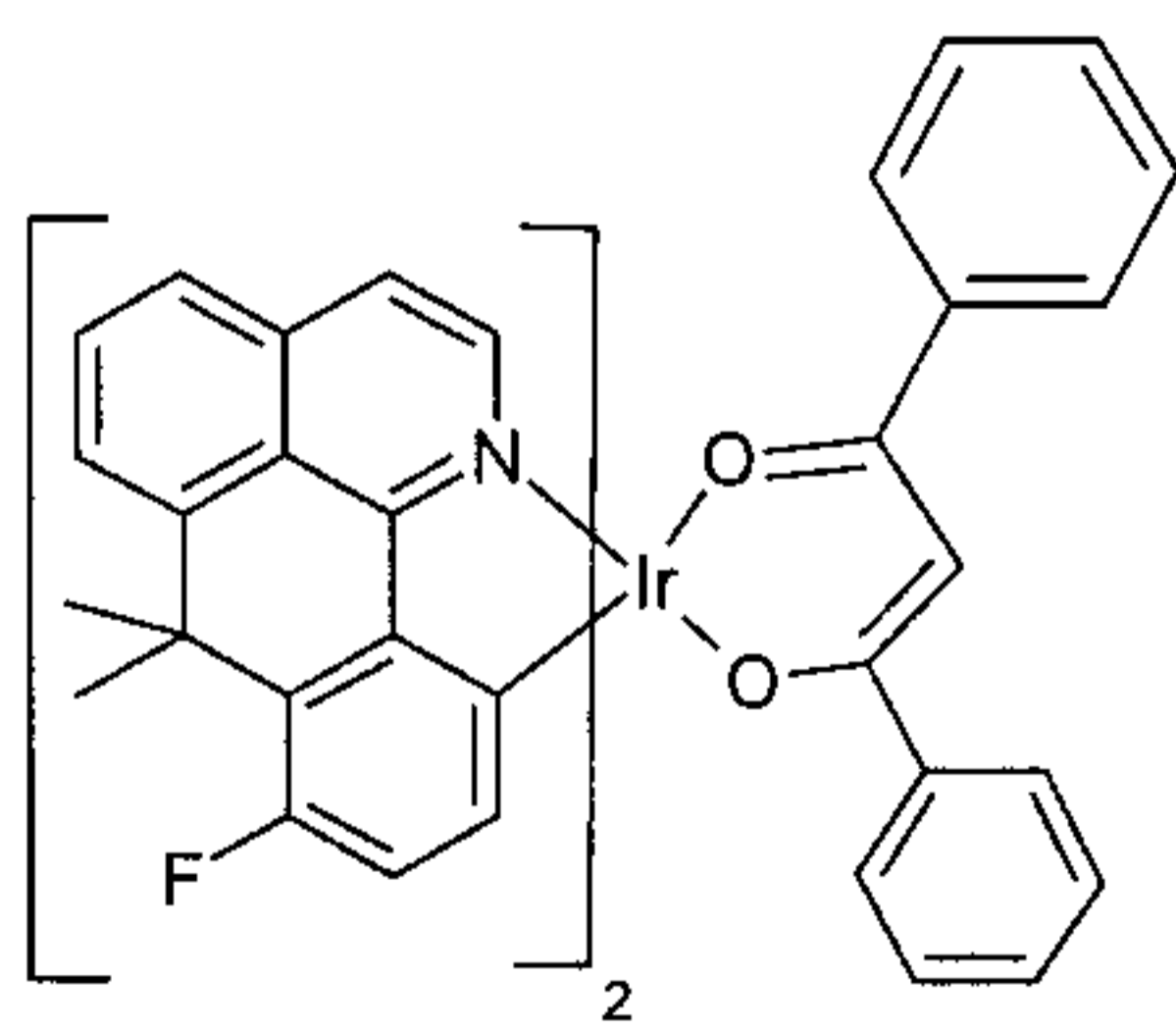
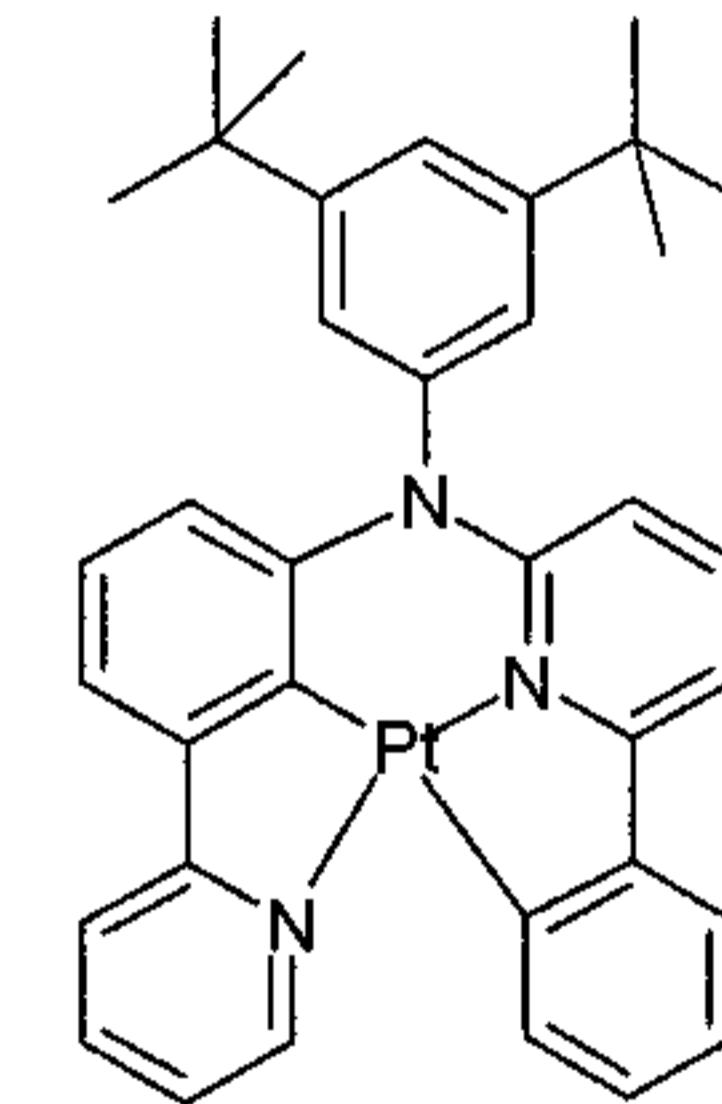
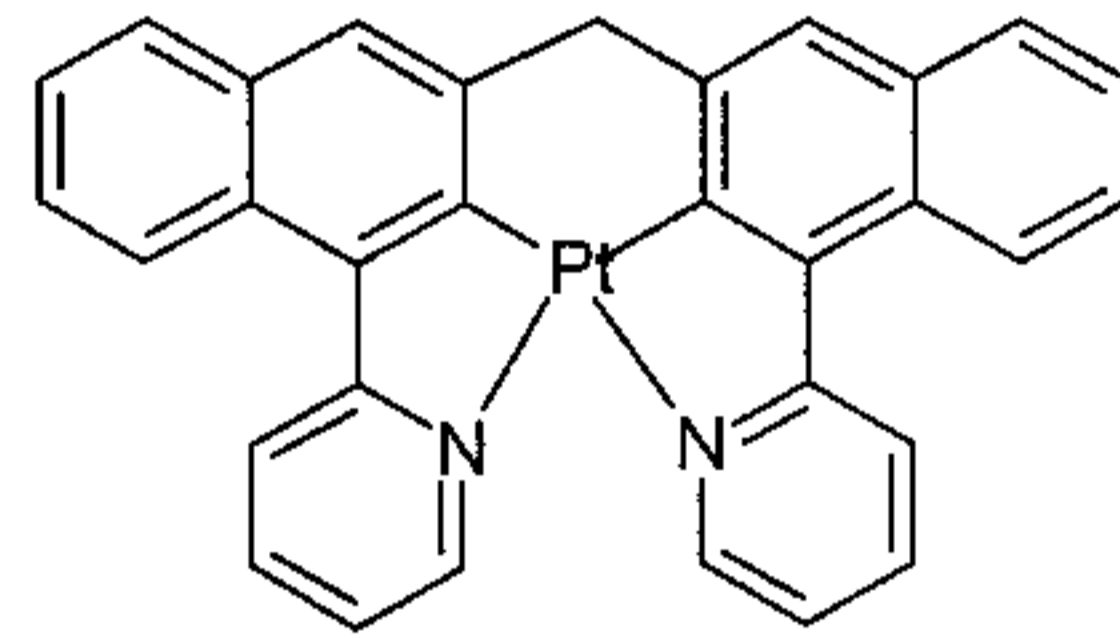
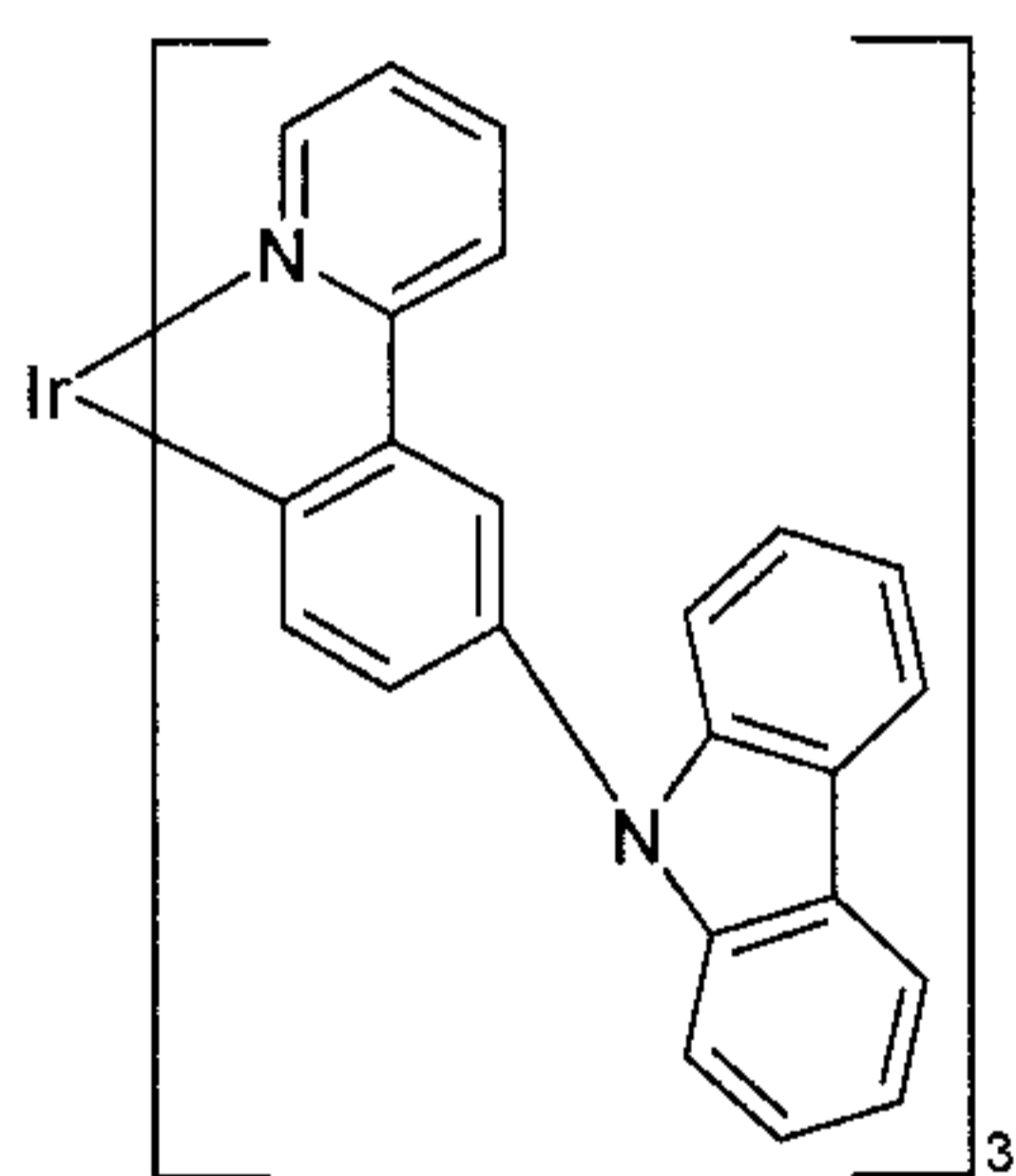
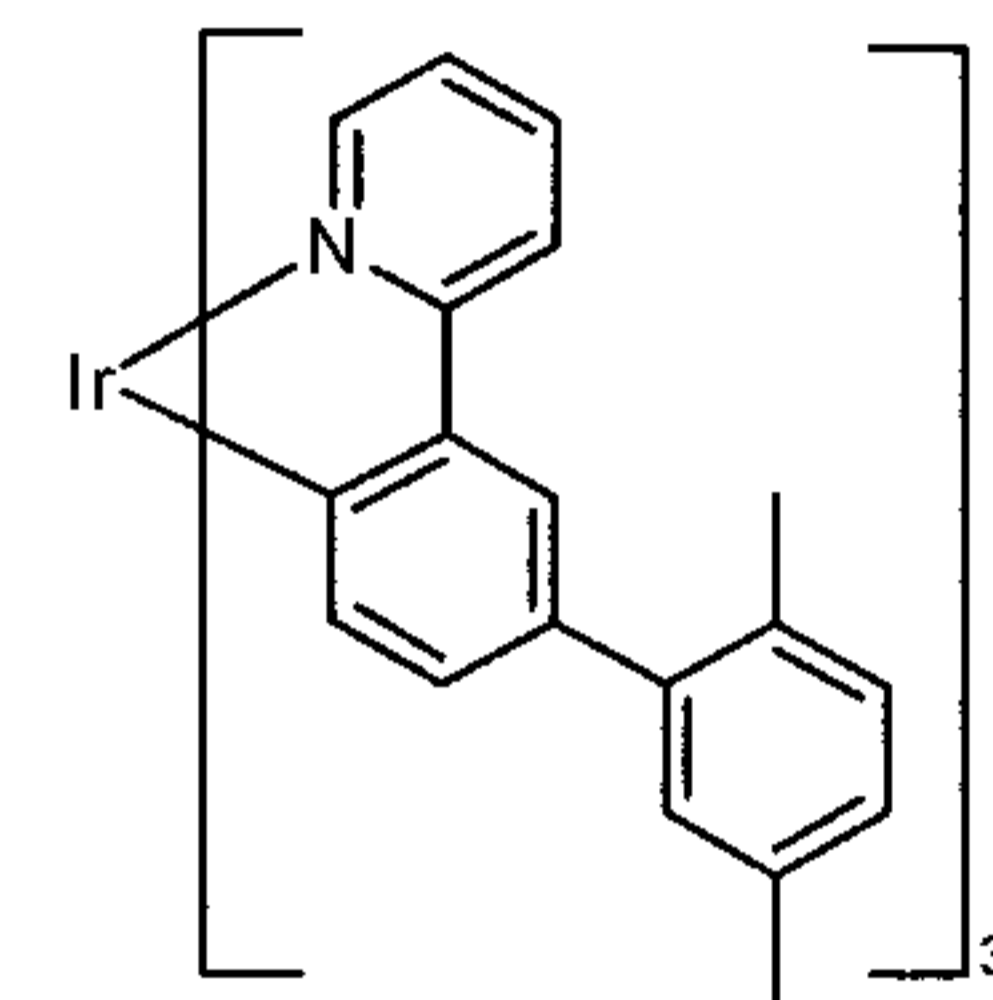
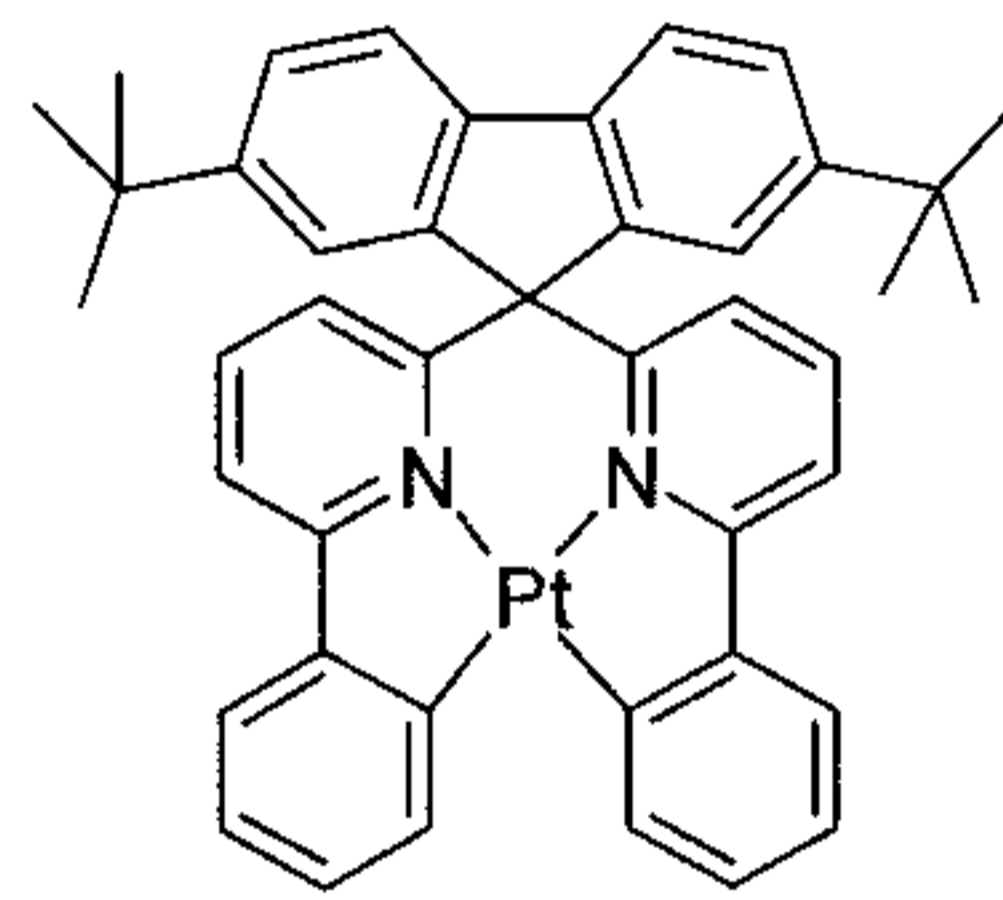
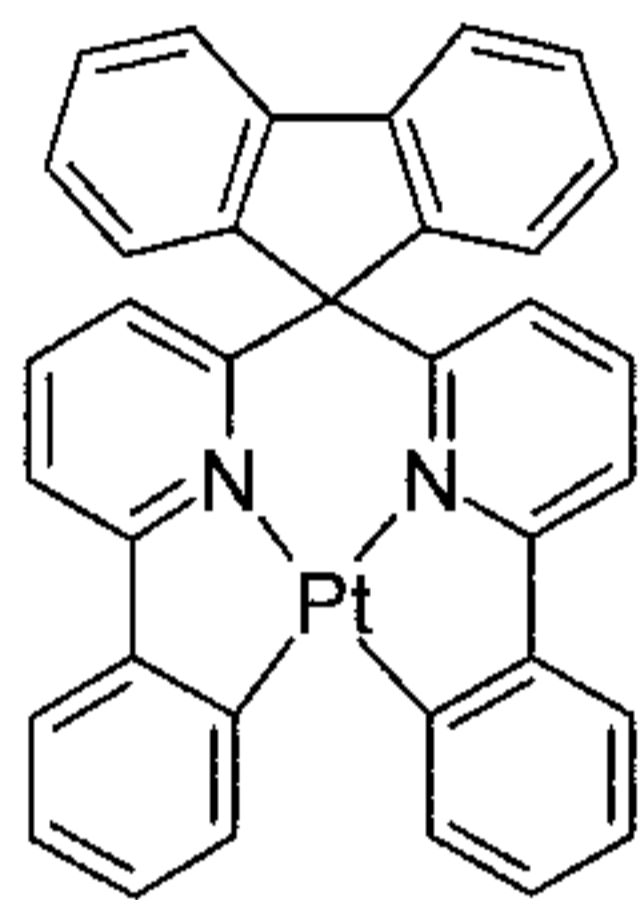
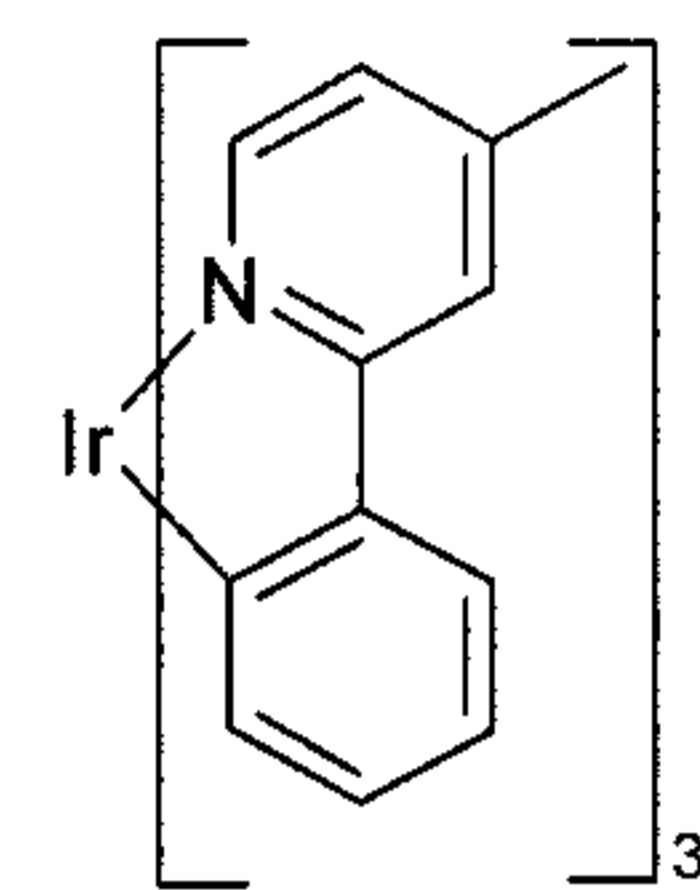
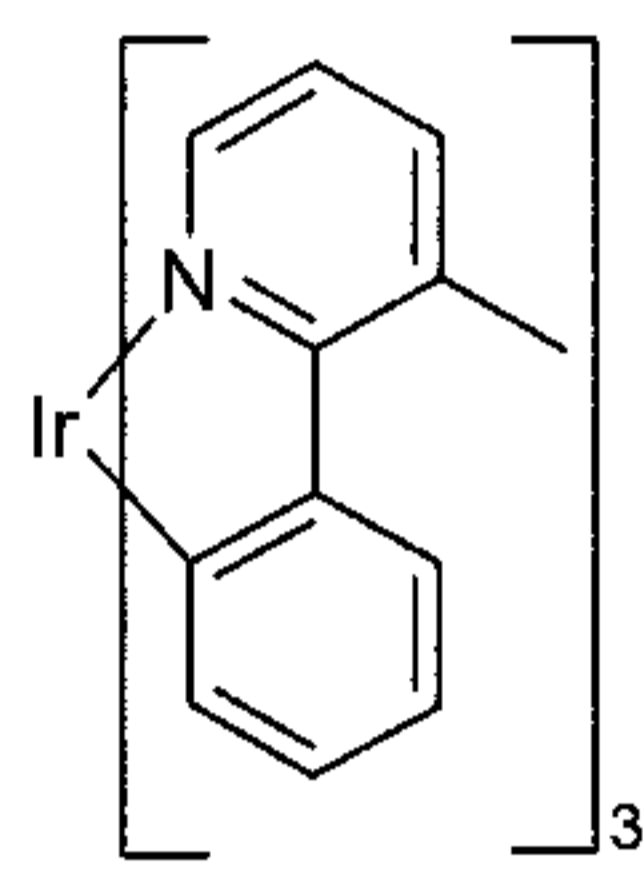
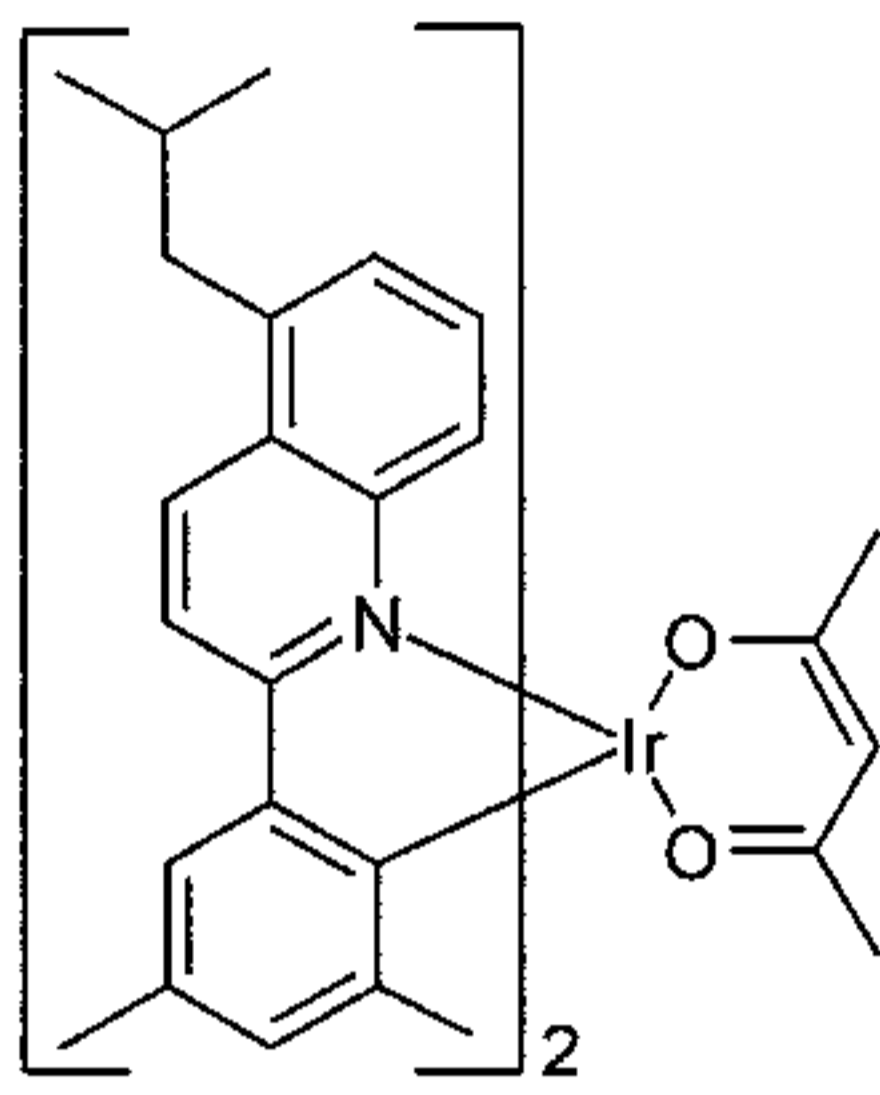
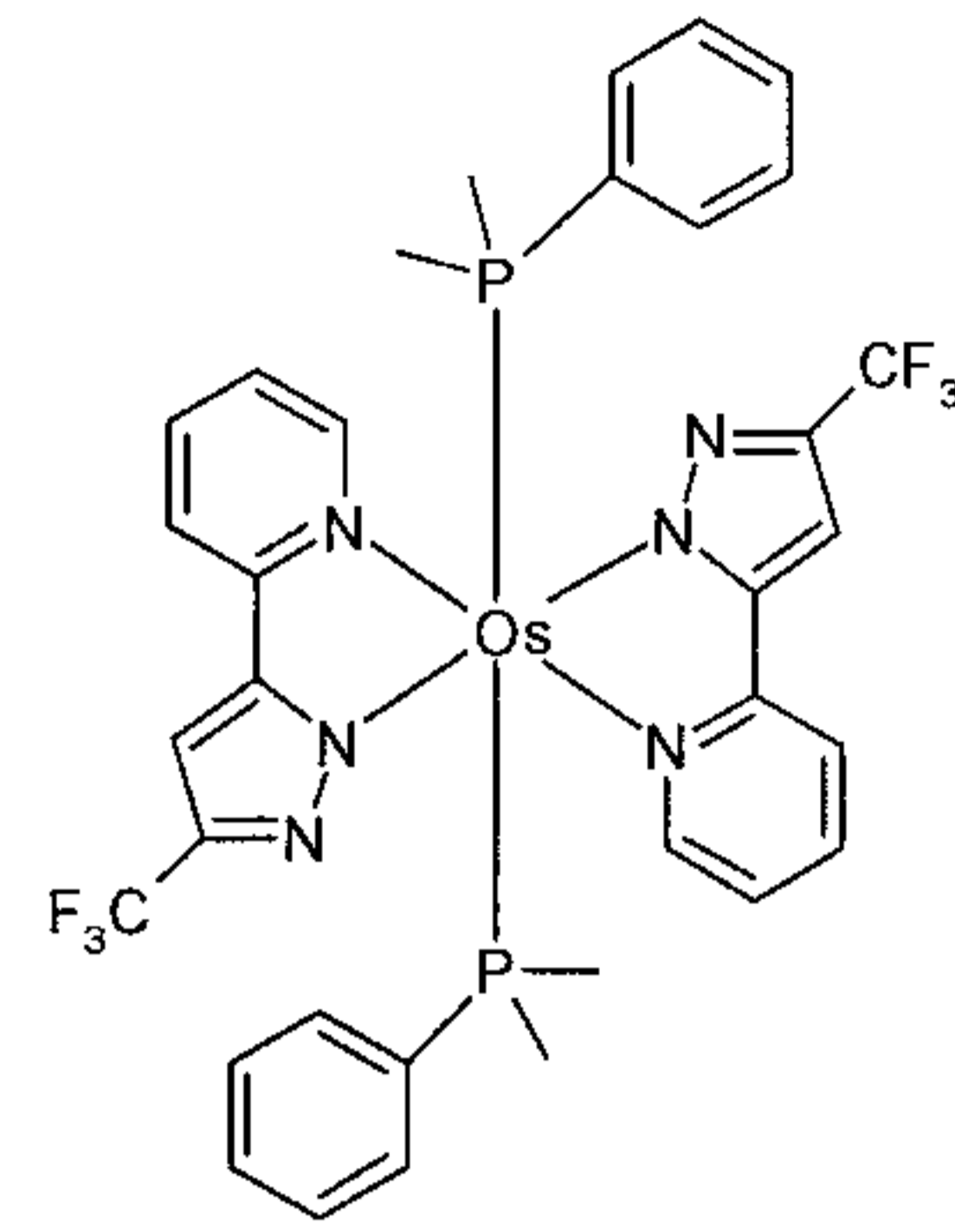
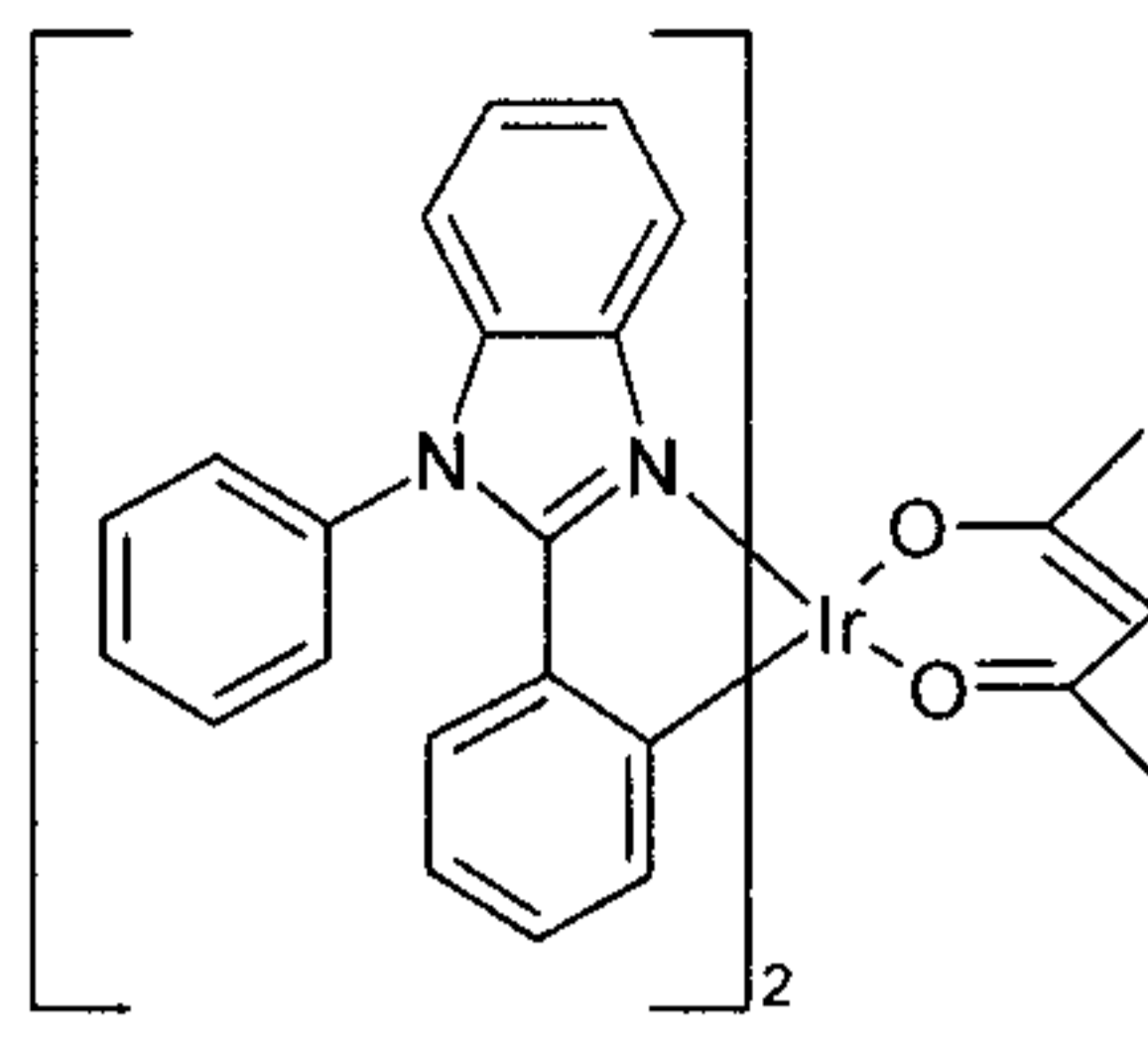
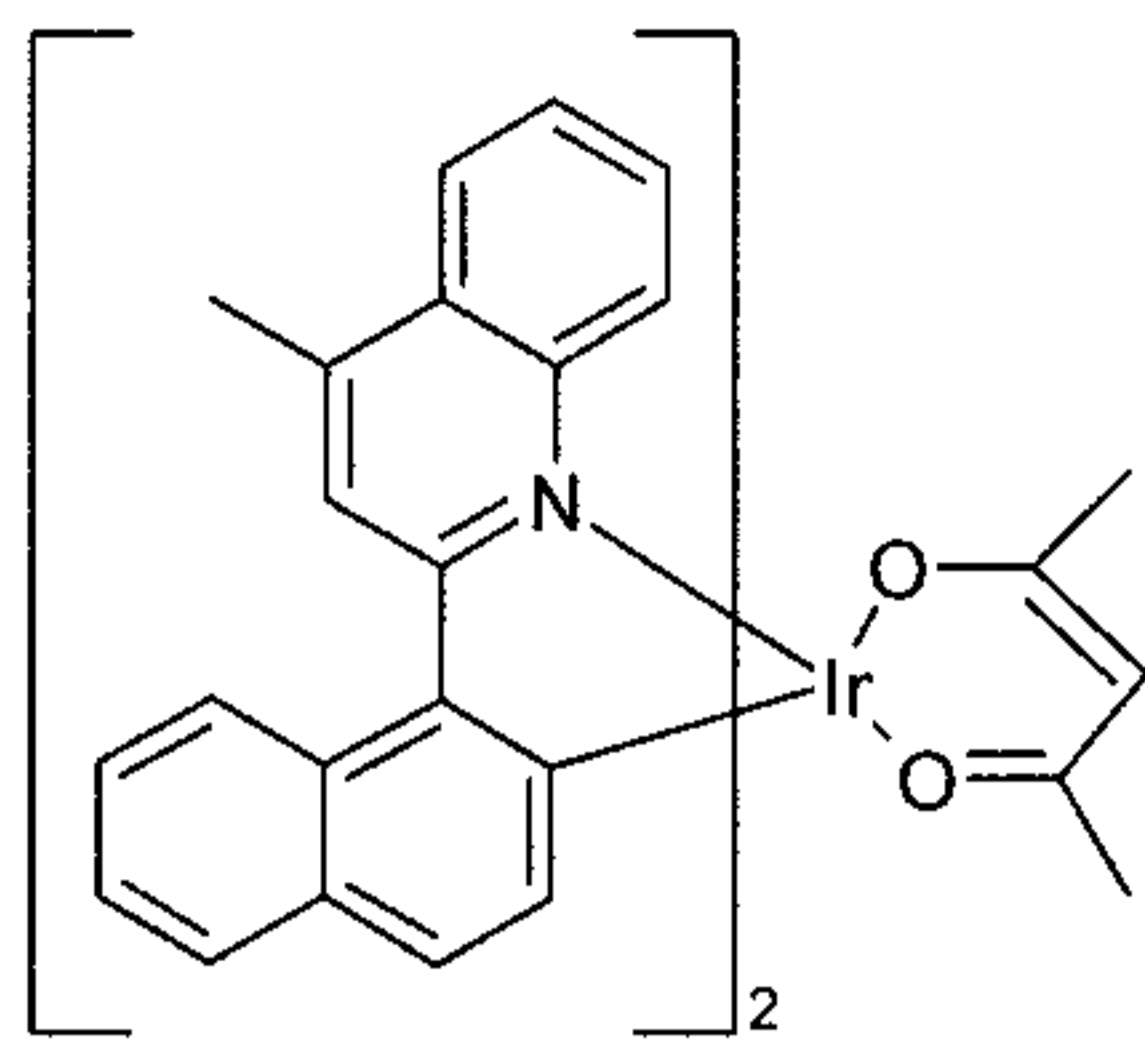




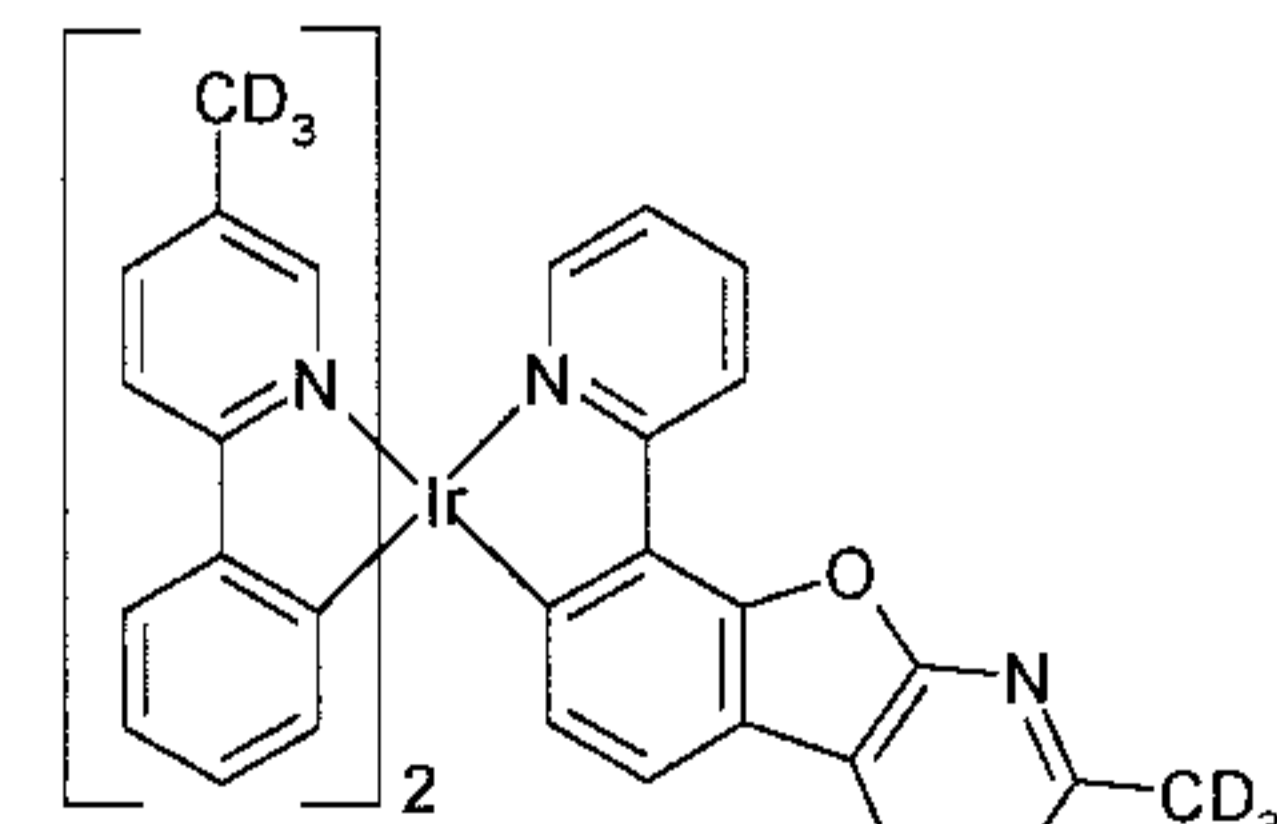
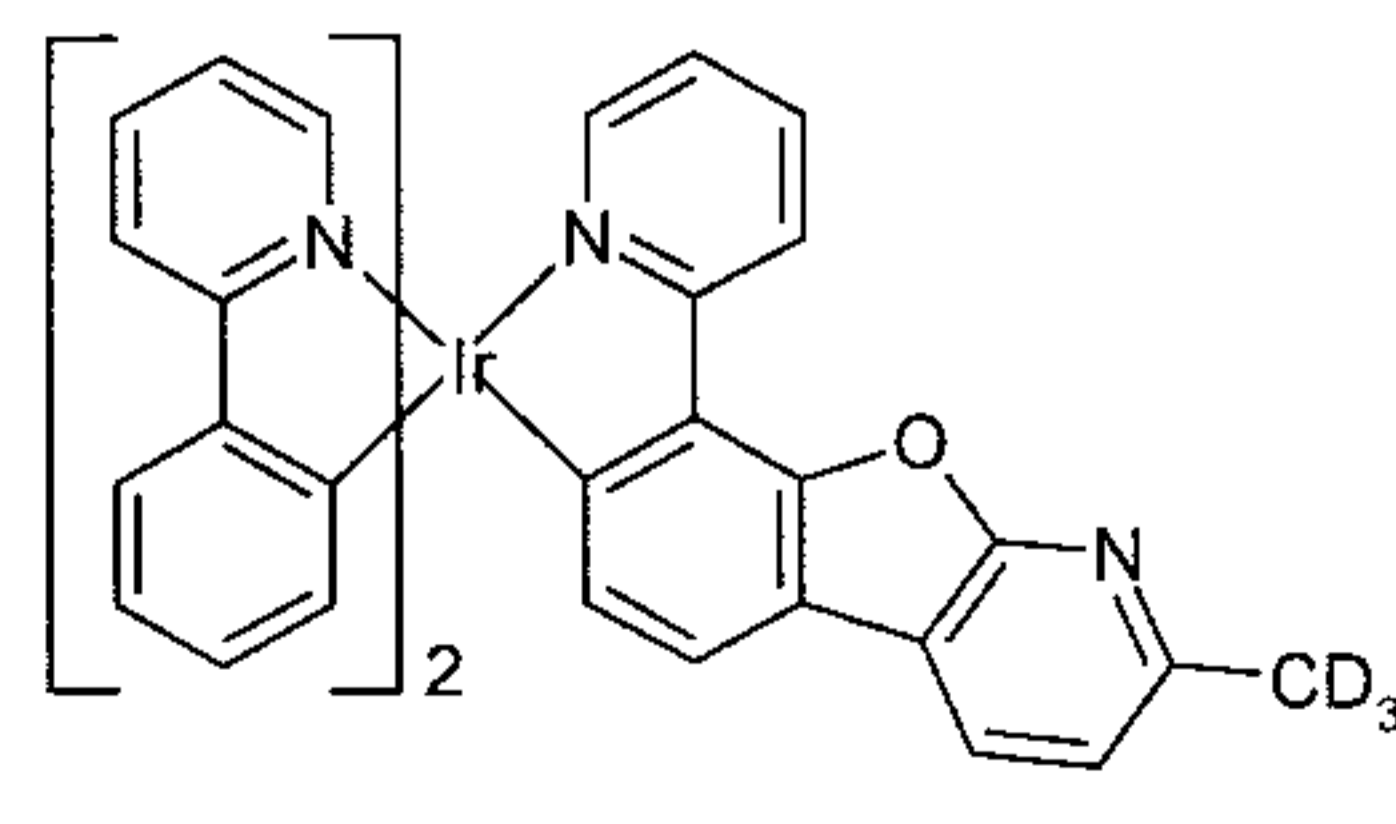
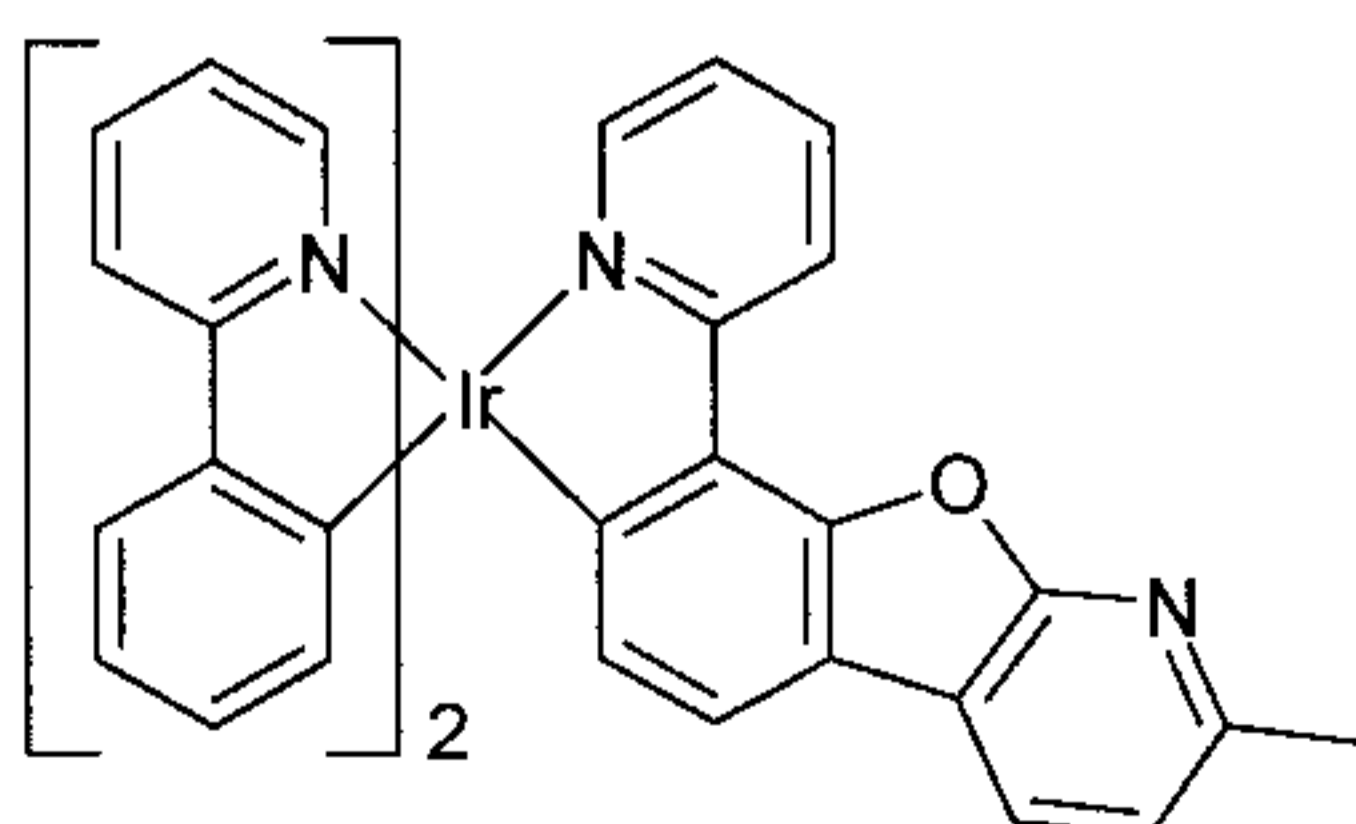
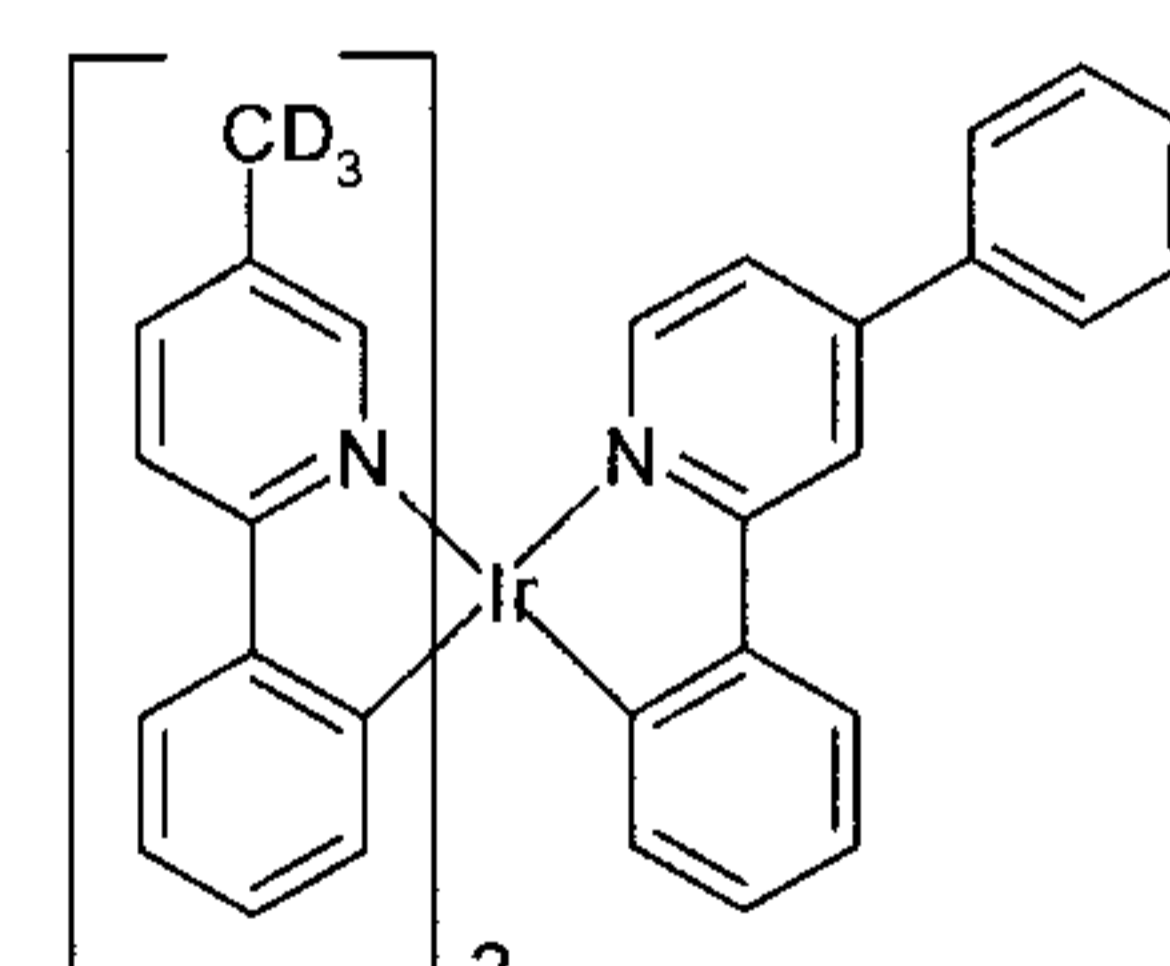
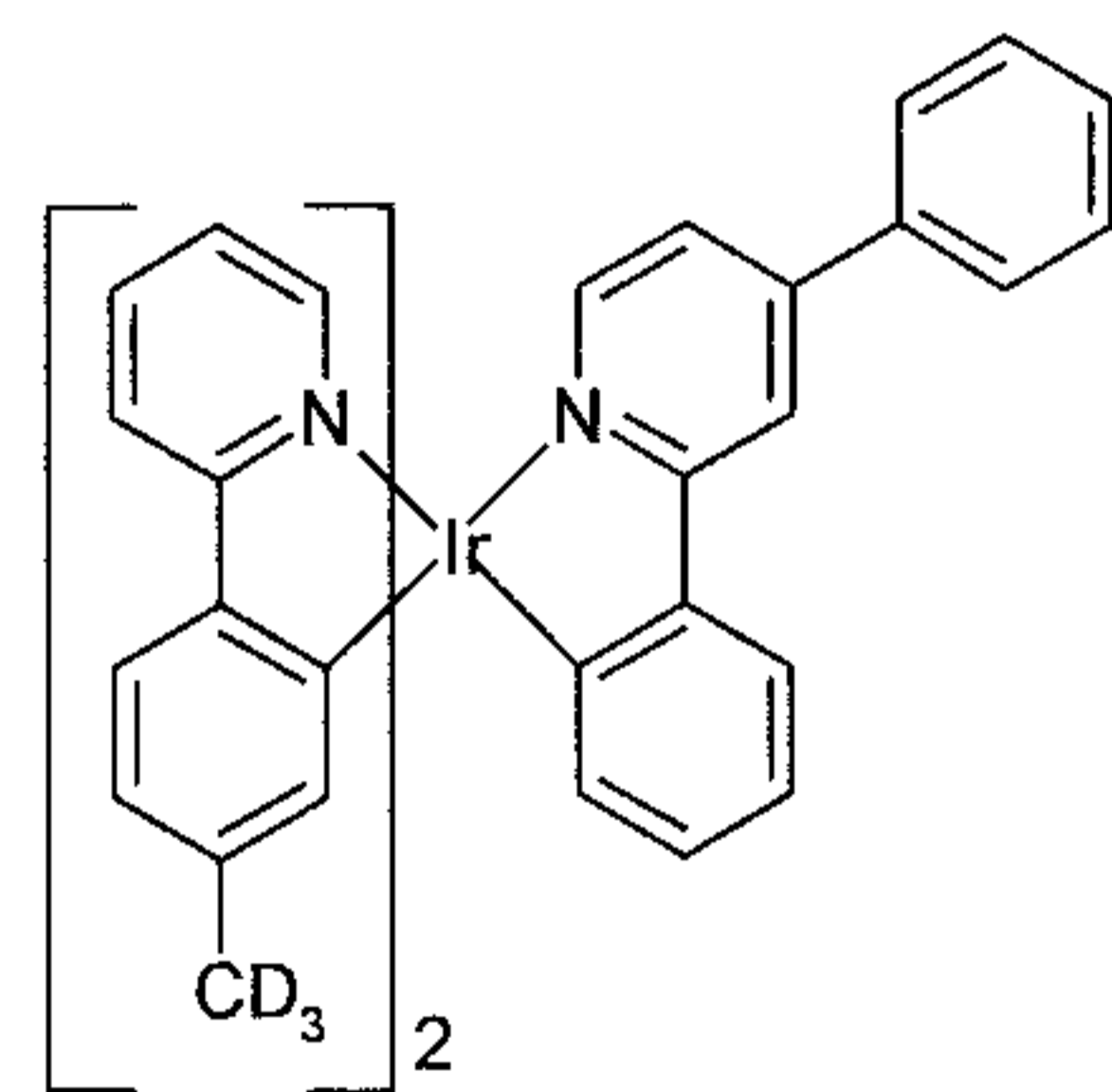
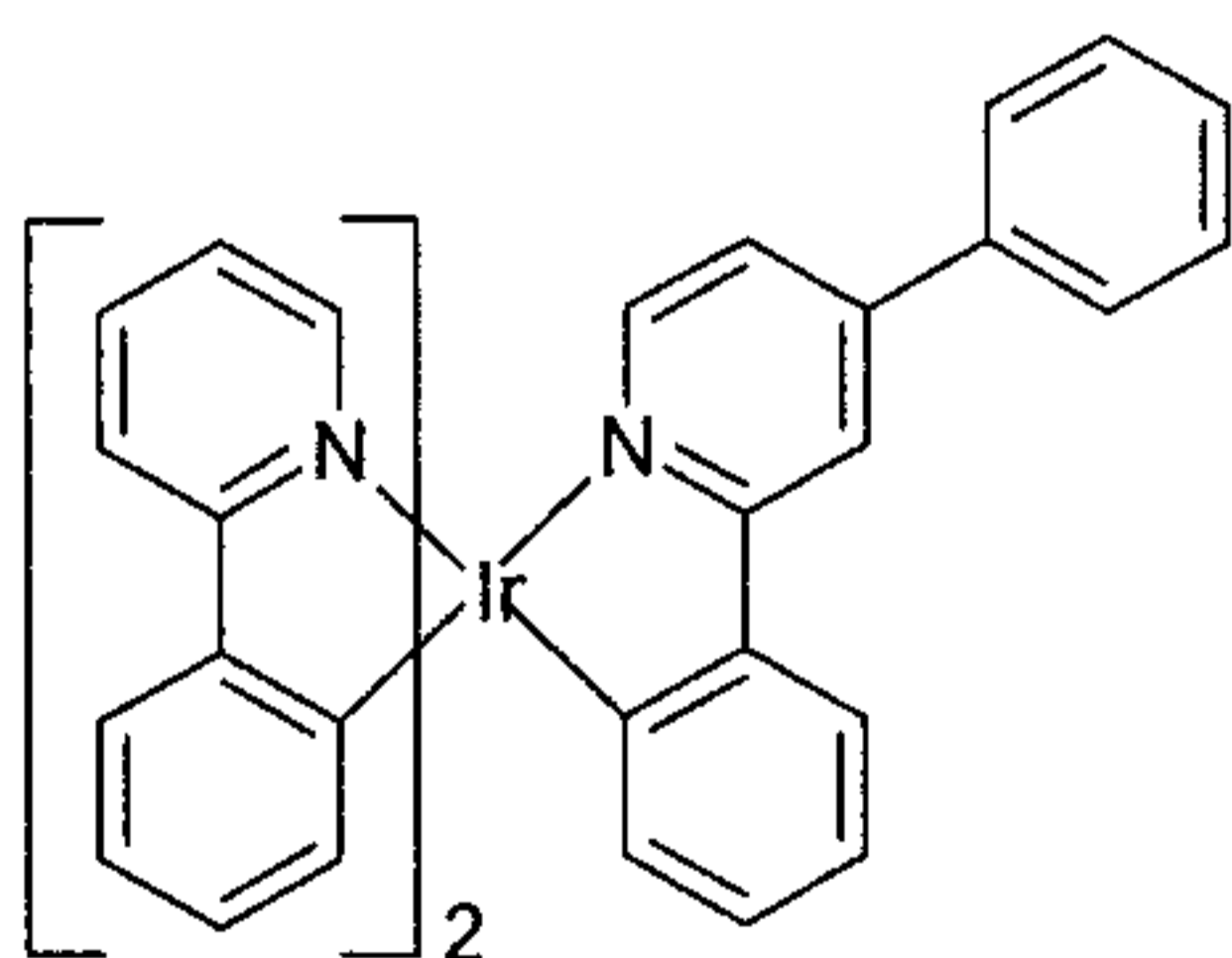
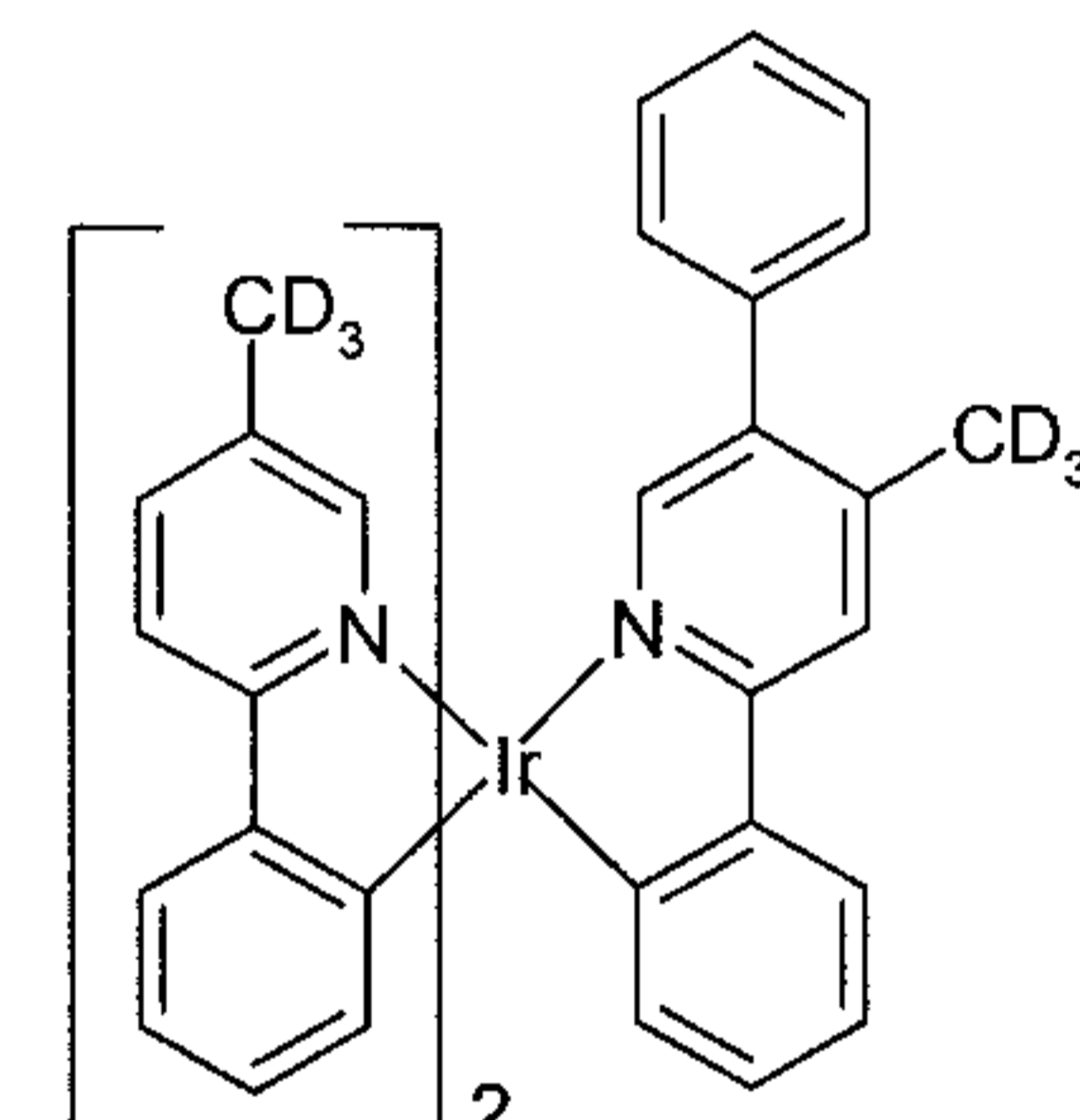
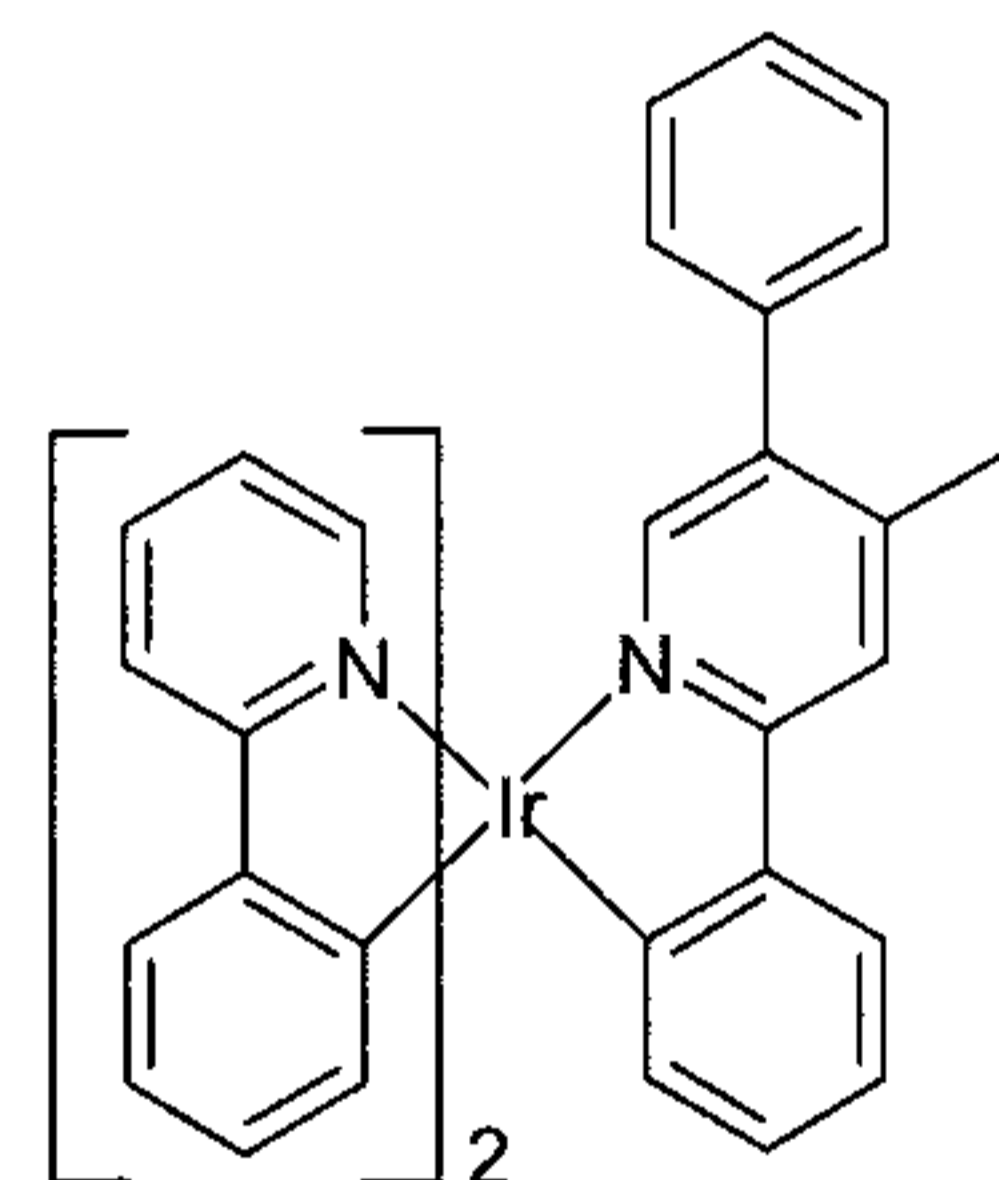
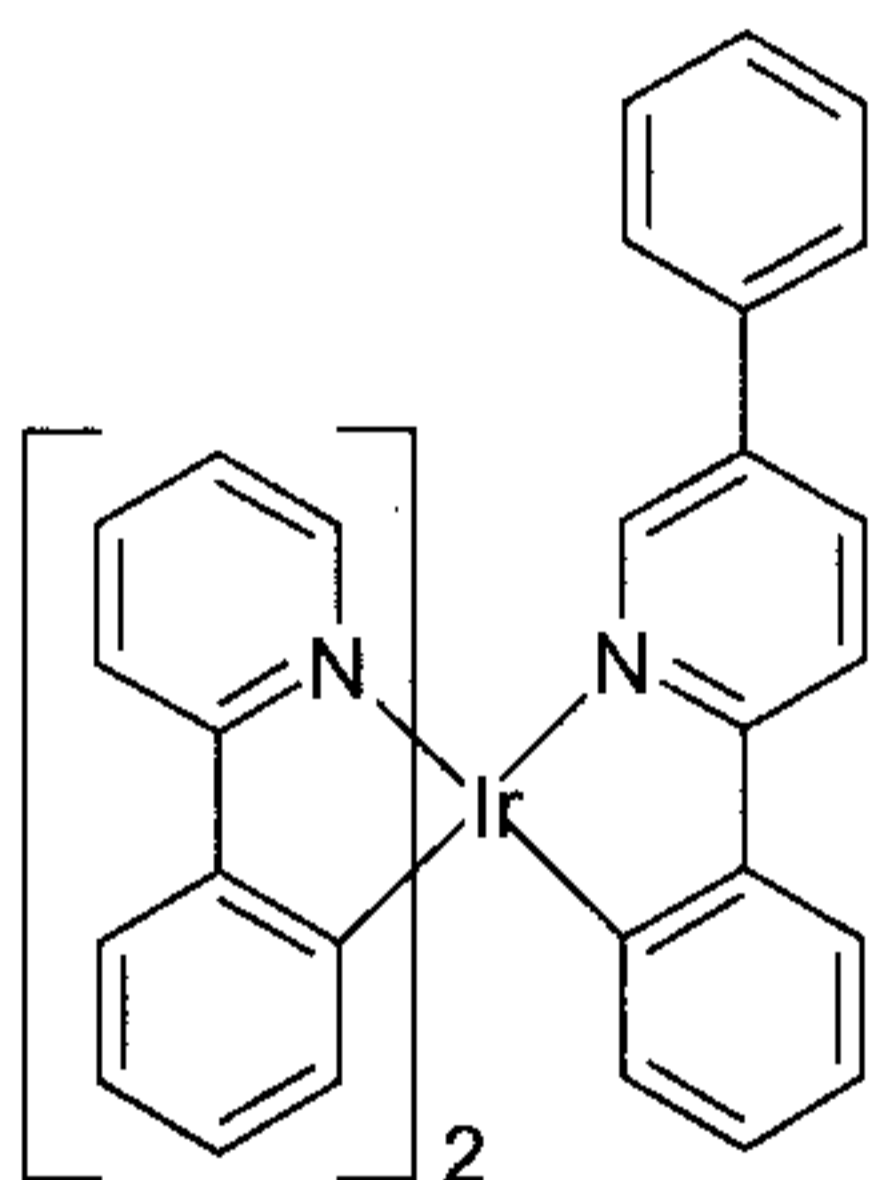
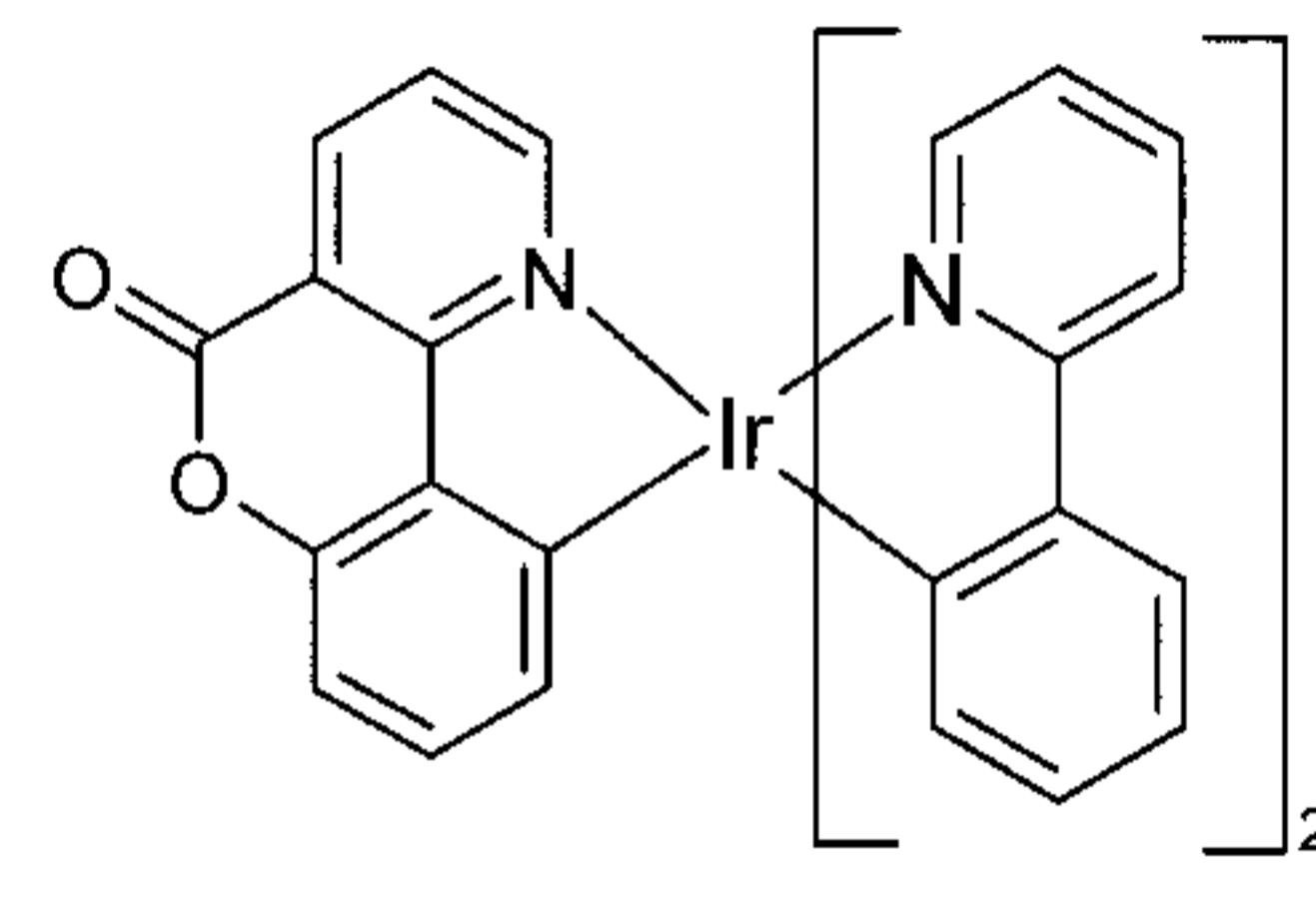
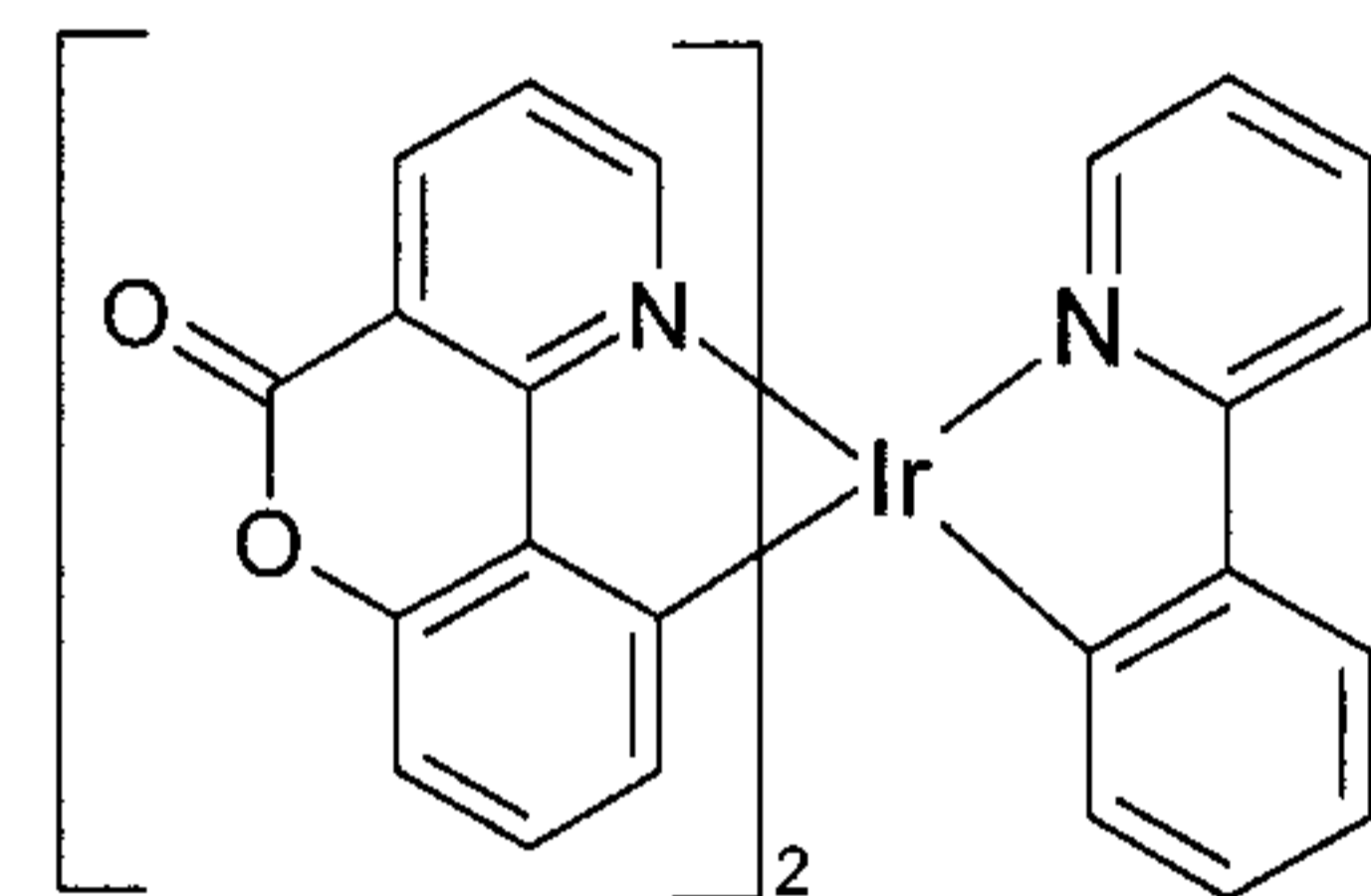
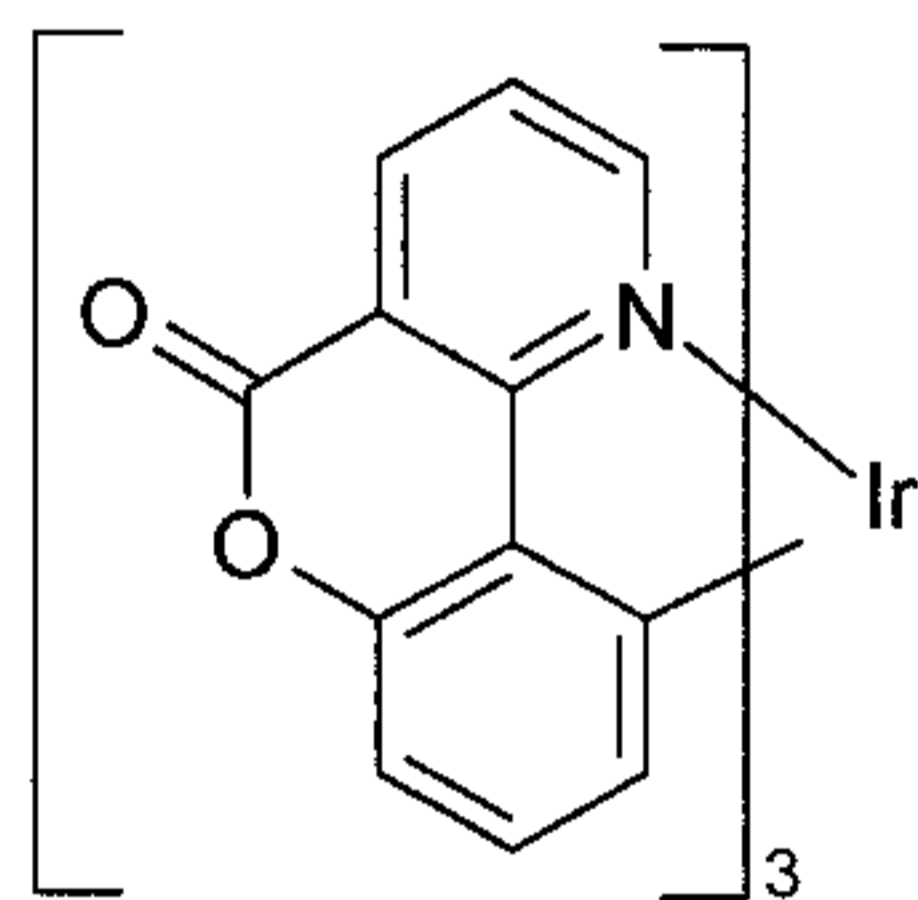
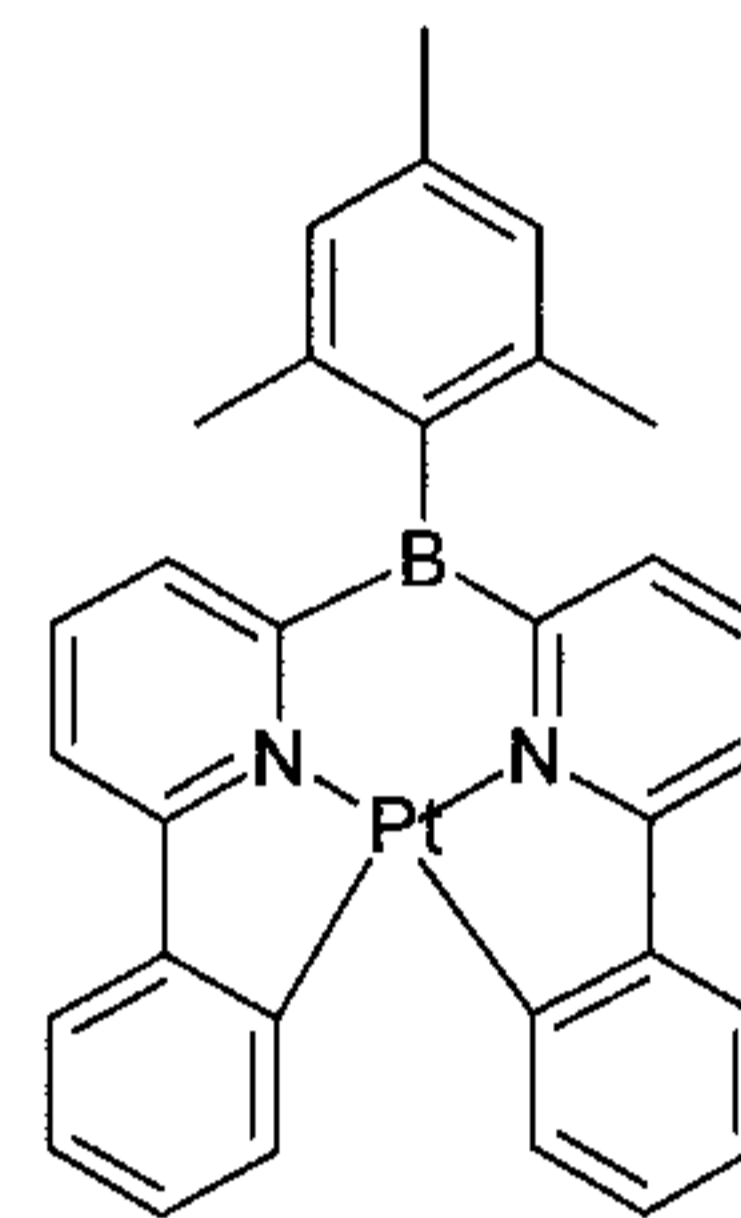
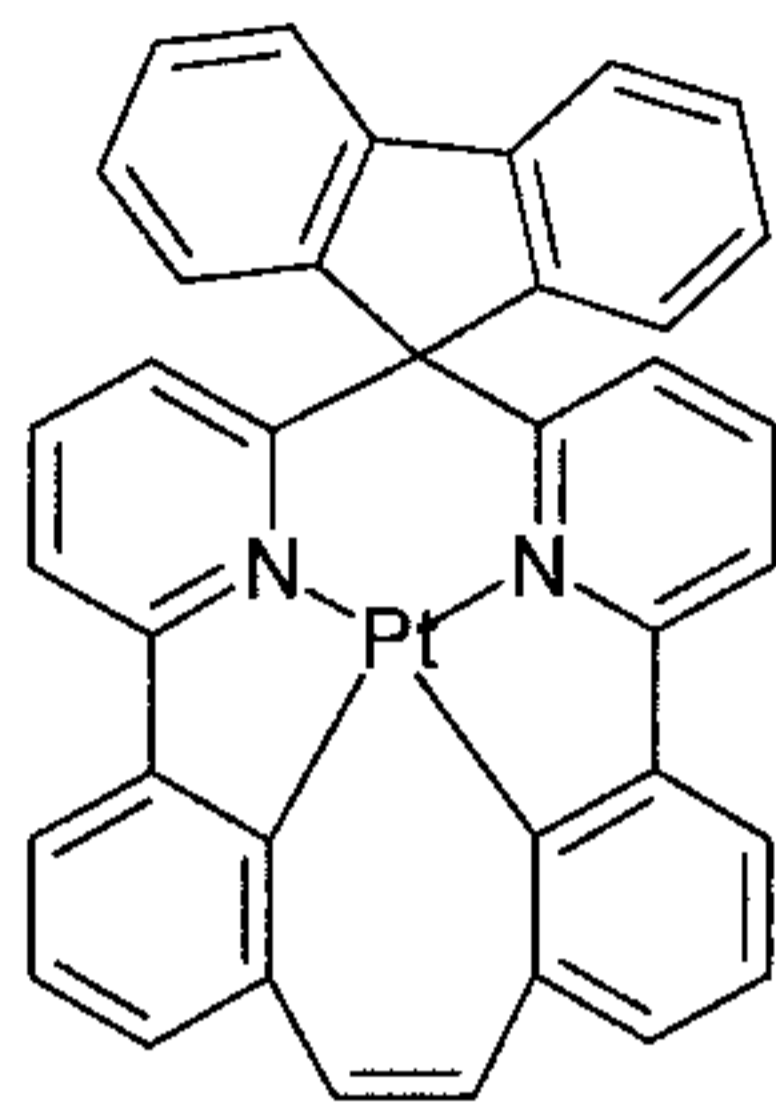
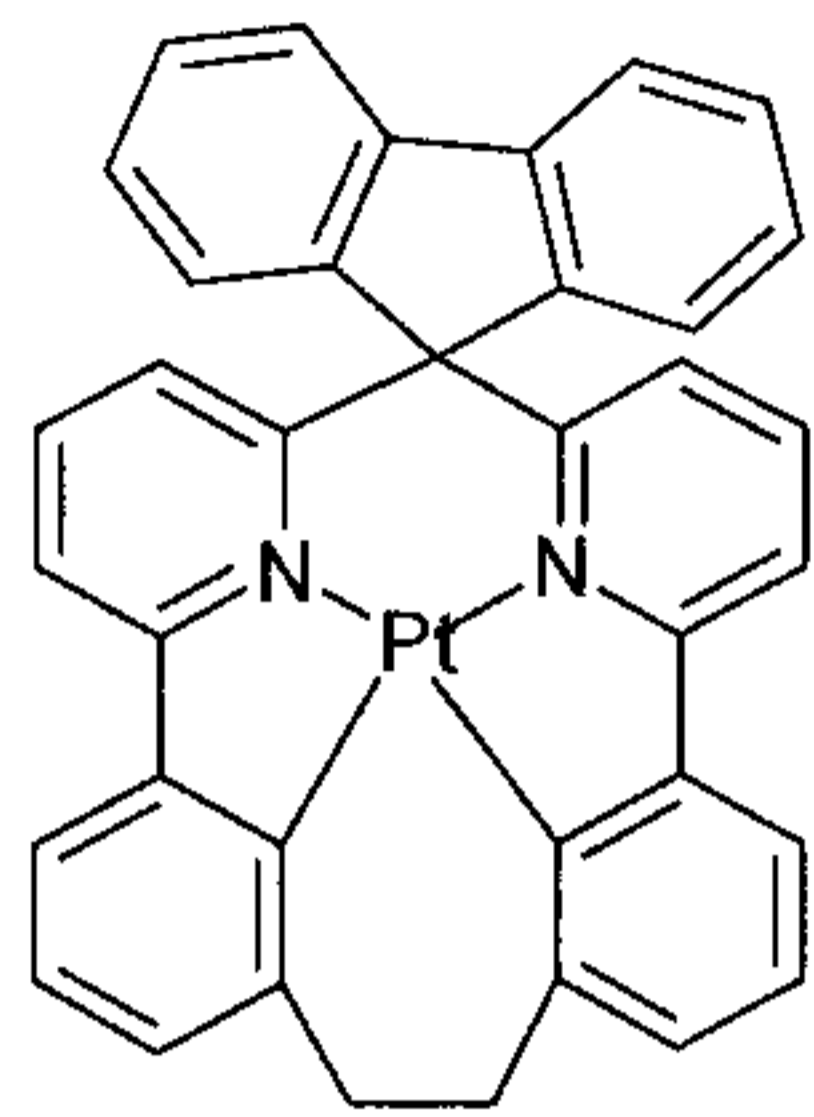
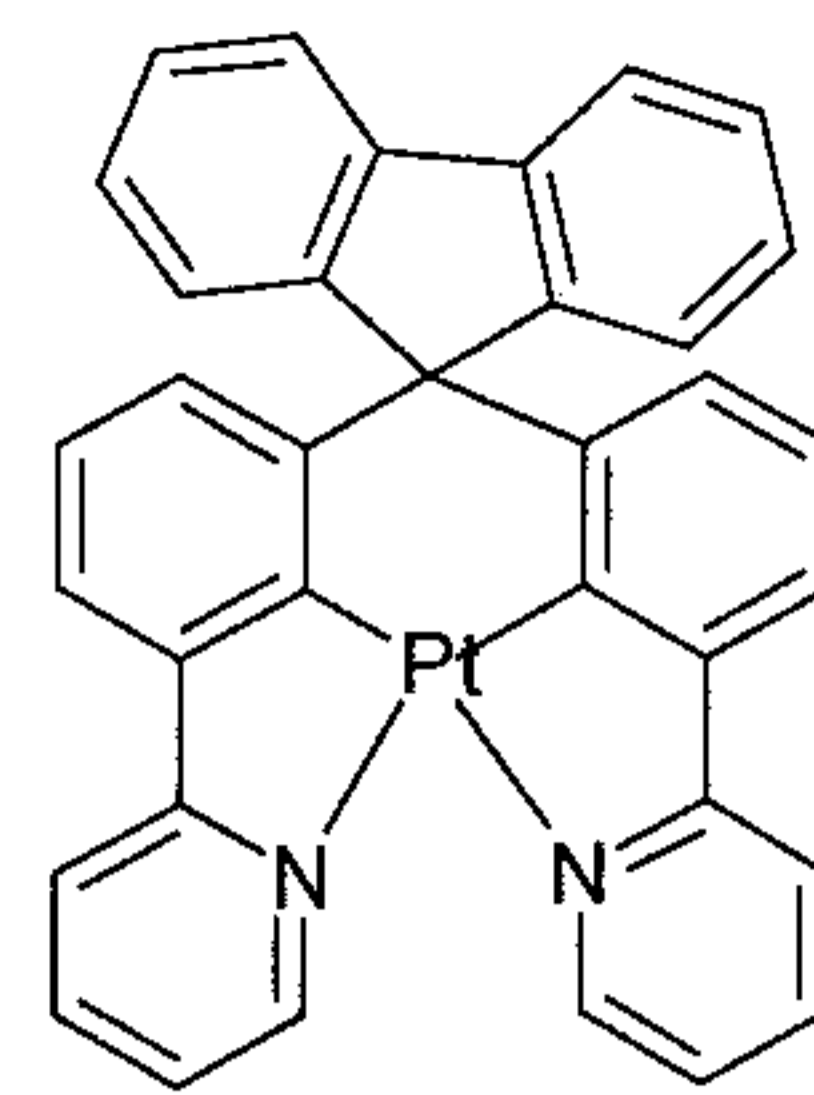
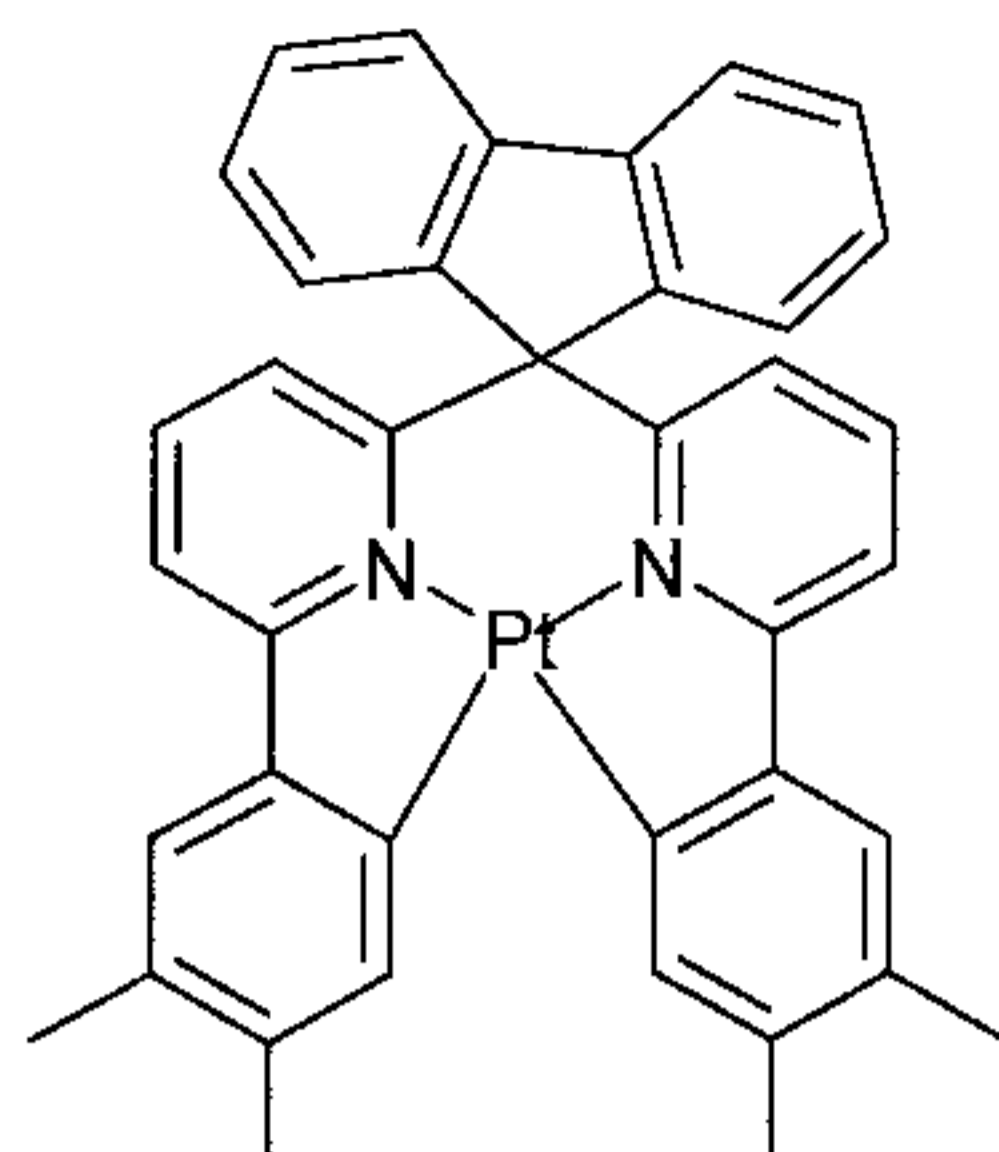
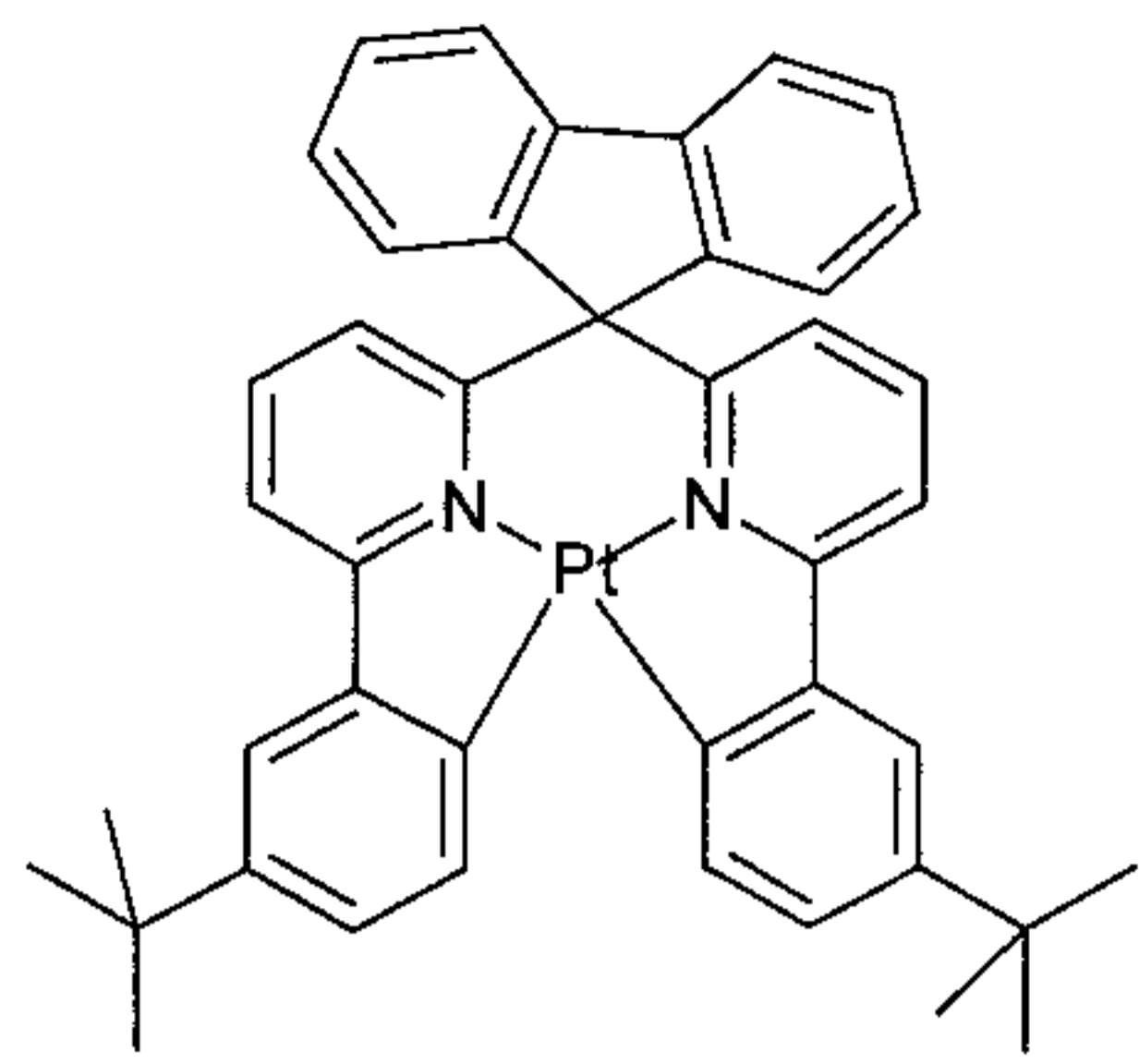




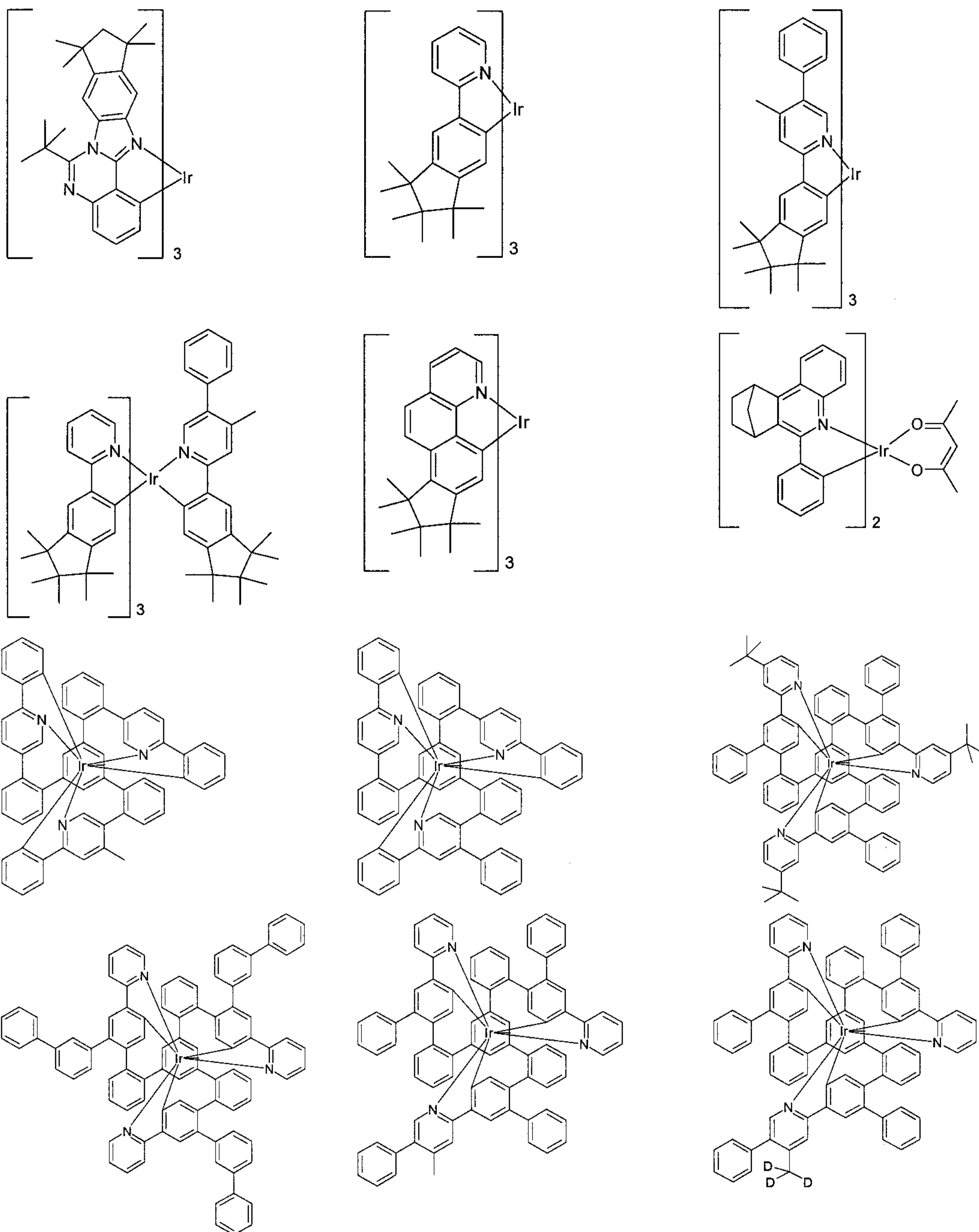






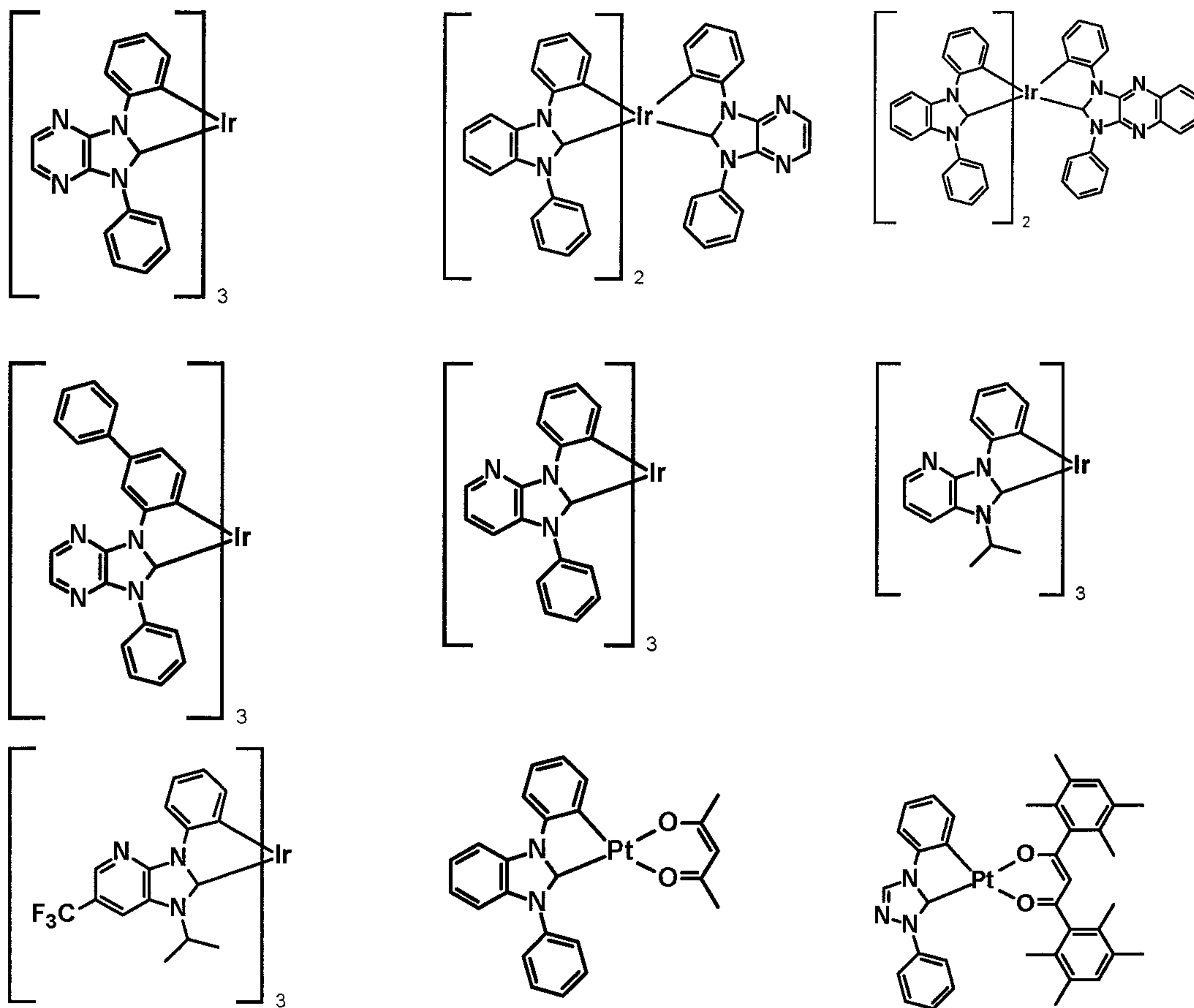




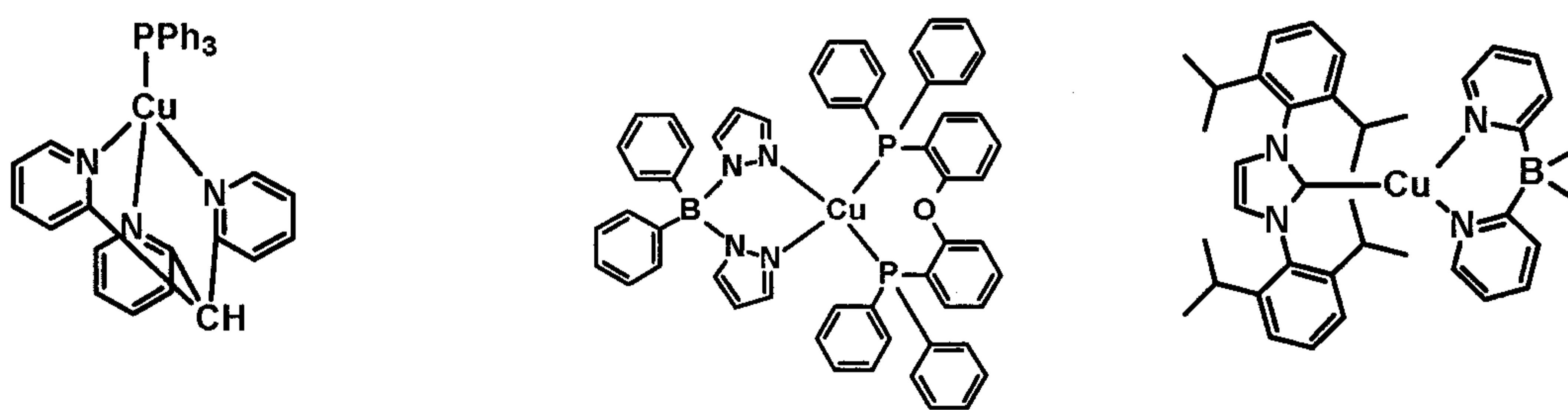


磷光敏化劑之其他明確實例係含有碳烯(carbene)配體及下列結構之銱及鉑錯合物，其中同配位(homoleptic)及異配位(heteroleptic)錯合物以及經式異構物(meridional isomer)及面式異構物(facial isomer)可係合適的：





磷光敏化劑之其他明確實例亦係銅錯合物及下列結構：



除了根據本發明之化合物外，合適的 TADF 化合物係其中在最低三重態 T<sub>1</sub> 與第一激發單重態 S<sub>1</sub> 之間的能隙夠小使得 S<sub>1</sub> 態係可從 T<sub>1</sub> 態以熱方式進入的化合物。較佳地，TADF 化合物在最低的三重態 T<sub>1</sub> 與第一激發單重態 S<sub>1</sub> 之間具有間隙為 ≤ 0.30 eV。更較佳地，S<sub>1</sub> 與 T<sub>1</sub> 之間間隙係



$\leq 0.20$  eV、甚至更佳係 $\leq 0.15$  eV、尤其更佳係 $\leq 0.10$  eV、且甚至尤佳係 $\leq 0.08$  eV。

最低激發單重態 ( $S_1$ ) 及最低三重態 ( $T_1$ ) 的能量以及 HOMO 及 LUMO 值係由量子化學計算來判定。使用 Gaussian09 程式封包 (版本 D 或更高版本)。所有純有機分子的中性基態幾何均在 AM1 理論水平進行最佳化。隨後，B3PW91/6-31G(d) 單點計算包括使用 TD-B3PW91/6-31G(d) 之最低單重態及三重態激發態的計算。在 B3PW91/6-31G(d) 理論水平上，藉由此單點計算取得 HOMO 及 LUMO 值以及  $S_1$  及  $T_1$  激發能。

同樣地，對於金屬有機化合物，在 HF/LANL2MB 理論水平進行中性基態幾何形狀最佳化。隨後使用 B3PW91/6-31G(d)+LANL2DZ (對於所有金屬原子為 LANL2DZ，對於所有低重量元素為 6-31G(d)) 來計算 HOMO 及 LUMO 值以及 TD-DFT 激發能。

來自計算的 HOMO (HEh) 及 LUMO (LEh) 值，以哈崔單位 (Hartree unit) 表示。自其判定參照循環伏安法測量值校準之 HOMO 及 LUMO 能階如下，以電子伏特表示：

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

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

在本發明的意義上，此等值被認為是材料之 HOMO 及 LUMO 能階。

最低三重態  $T_1$  被定義為最低 TD-DFT 三重態激發能的能量。



最低激發單重態  $S_1$  被定義為最低 TD-DFT 單重態激發能的能量。

較佳地，TADF 化合物係有機化合物。在本發明的上下文中，有機化合物係不含任何金屬的碳質化合物 (carbonaceous compound)。更特別地，有機化合物係由元素 C、H、D、B、Si、N、P、O、S、F、Cl、Br 及 I 所形成。

TADF 化合物更佳係具有供體及受體取代基兩者之芳族化合物，該化合物之 LUMO 與 HOMO 之間僅具有些微的空間重疊。供體及受體取代基所理解的原則上係所屬技術領域中具有通常知識者已知的。合適的供體取代基尤其是二芳基-或-雜芳基胺基及咪唑基或咪唑衍生物，其各者較佳地經由 N 鍵結至芳族化合物。此等基團亦可具有其他取代。合適的受體取代基尤其是氰基，但例如還有缺電子的雜芳基，其亦可具有其他取代，例如經取代或未經取代的三吡基。

下文中描述發光層中 TADF 化合物之較佳摻雜劑濃度。由於有機電致發光裝置製造上的差異，摻雜劑濃度在藉由氣相沉積製造發光層的情況下係以體積 % 記述，而在從溶液製造發光層的情況下係以重量 % 記述。以體積 % 及重量 % 表示的摻雜劑濃度通常非常相似。

在本發明之較佳實施例中，TADF 化合物在發光層中存在的摻雜濃度在藉由氣相沉積製造發光層的情況下係 1 體積 % 至 70 體積 %、更佳係 5 體積 % 至 50 % 體積 %、甚至更佳係 5 體積 % 至 30 體積 %。



在本發明之較佳實施例中，TADF化合物在發光層中存在的摻雜濃度在藉由溶液製造發光層的情況下係1重量%至70重量%、更佳係5重量%至50重量%、甚至更佳係5重量%至30重量%。

所屬技術領域中具有通常知識者的通常技術知識包括關於那些大致上適合作為TADF化合物之材料知識。

下列參考文獻以舉例方式揭示潛在地適合用作為TADF化合物之材料：

- Tanaka等人，Chemistry of Materials 25(18), 3766 (2013)。
- Lee等人，Journal of Materials Chemistry C 1(30), 4599 (2013)。
- Zhang 等人，Nature Photonics advance online publication, 1 (2014), doi: 10.1038/ nphoton. 2014.12。
- Serevicius 等人，Physical Chemistry Chemical Physics 15(38), 15850 (2013)。
- Li等人，Advanced Materials 25(24), 3319 (2013)。
- Youn Lee 等人，Applied Physics Letters 101(9), 093306 (2012)。
- Nishimoto等人，Materials Horizons 1, 264 (2014), doi: 10.1039/C3MH00079F。
- Valchanov等人，Organic Electronics, 14(11), 2727 (2013)。

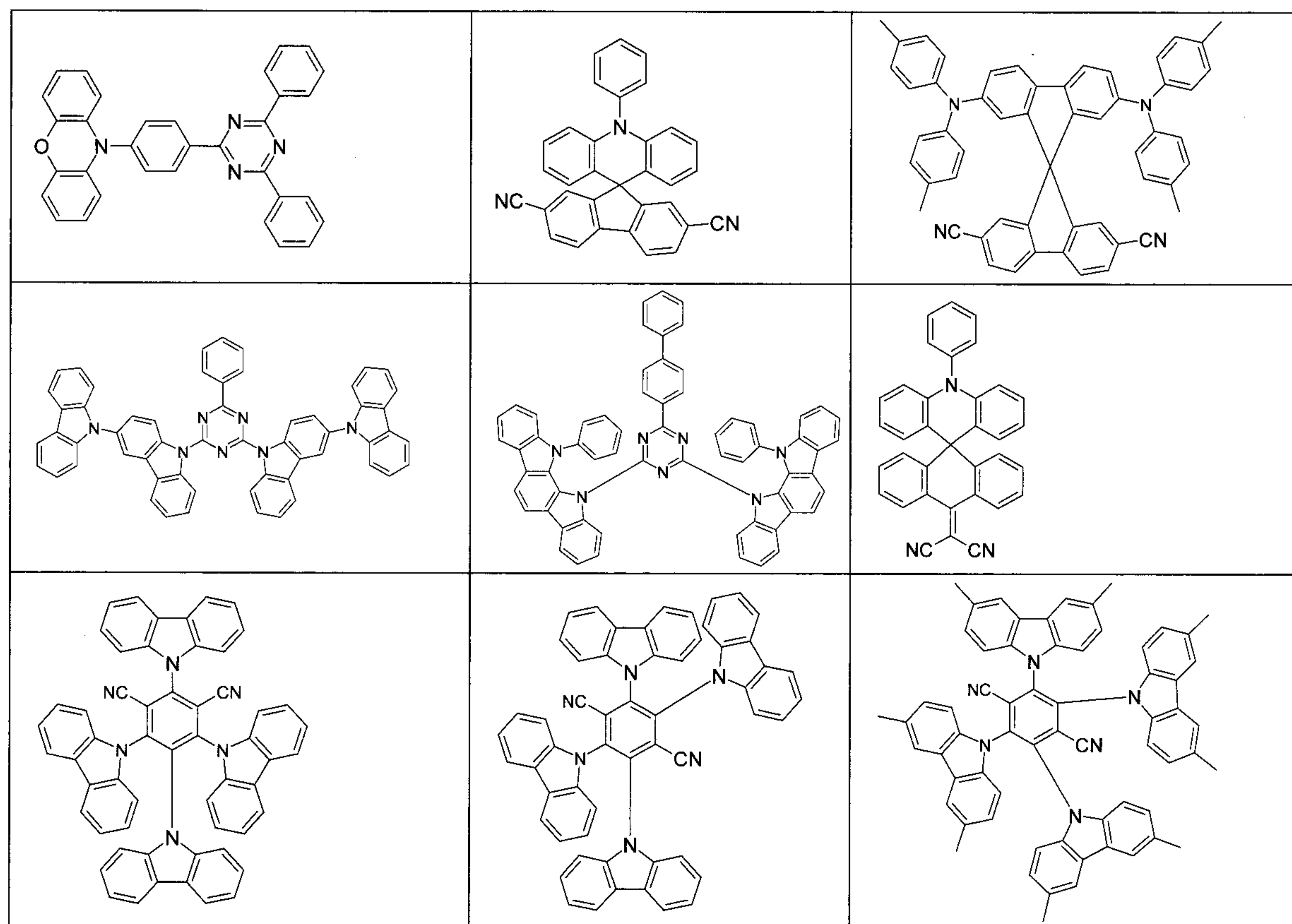


- Nasu等人，ChemComm, 49, 10385 (2013)。

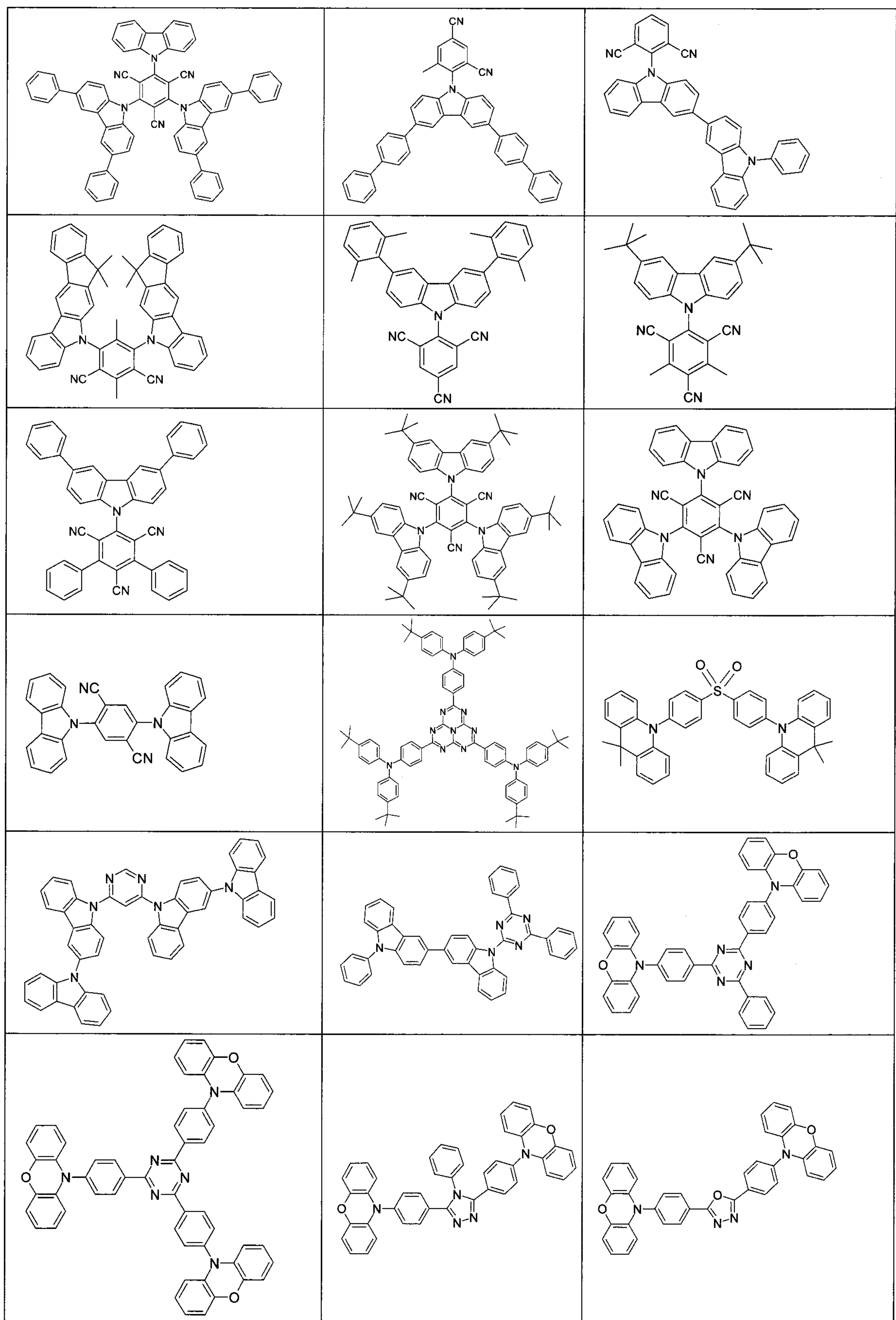
此外，下列專利申請案揭示潛在的TADF化合物：  
 US2019058130、WO18155642、WO18117179A1、  
 US2017047522、US2016372682A、US2015041784、  
 US2014336379、US2014138669、WO 2013/154064、  
 WO 2013/133359、WO 2013/161437、WO 2013/081088、  
 WO 2013/081088、WO 2013/011954、JP 2013/116975及  
 US 2012/0241732。

此外，所屬技術領域中具有通常知識者能夠從這些出版物中推斷出TADF化合物之設計原理。例如，Valchanov等人說明如何調整TADF化合物的顏色。

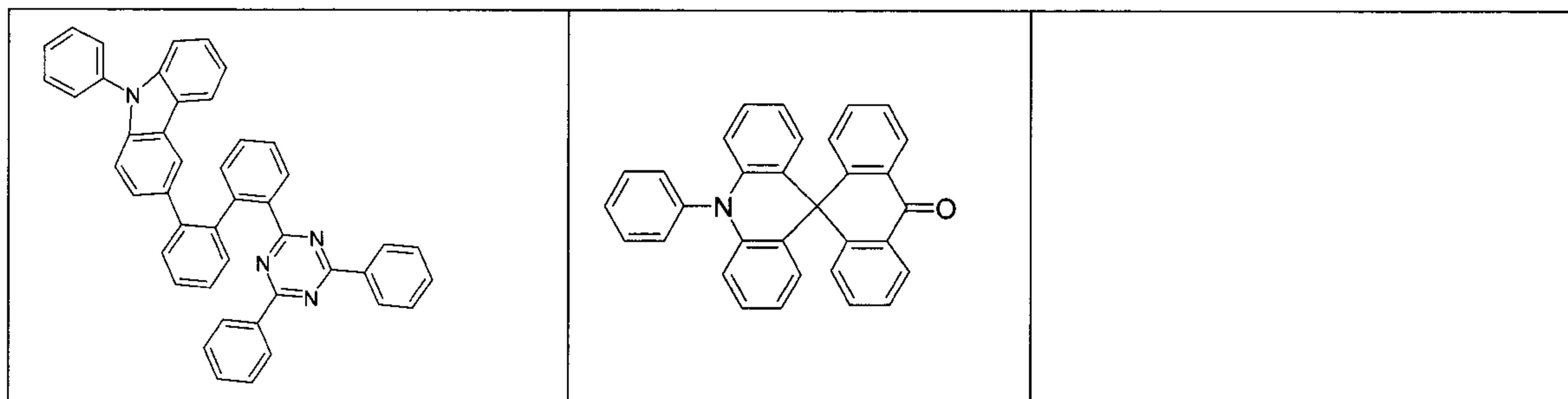
展現TADF的合適分子之實例係下表所示之結構：











如上所述，式(1)或根據較佳實施例之化合物可作為螢光發射體於超螢光或超磷光系統中與敏化劑組合使用。在此情況下，較佳地式(1)之化合物係立體屏蔽的。例如，與式(5)及(6)之化合物、更特別地與(5-1)至(5-3)對應的式(1)之化合物，非常適合作為發光層中與選自TADF化合物及磷光化合物之敏化劑組合的立體屏蔽之螢光發射體。較佳地，發光層進一步包含至少一種選自基質材料的有機功能性材料。

式(1)或根據較佳實施例之化合物亦可與選自下列之其他化合物組合使用：HTM(電洞傳輸材料)、HIM(電洞注入材料)、HBM(電洞阻擋材料)、p摻雜劑、ETM(電子傳輸材料)、EIM(電子注入材料)、EBM(電子阻擋材料)、n摻雜劑、螢光發射體、磷光發射體、延遲螢光發射體、基質材料、主體材料、寬帶隙材料及量子材料，例如量子點及量子棒。

式(1)或根據較佳實施例之化合物亦可在其他層中使用，例如用作為電洞注入或電洞傳輸層或電子阻擋層中之電洞傳輸材料、或用作為發光層中之基質材料。

以下指出在根據本發明之有機電致發光裝置中用作為對應功能材料的一般較佳材料類別。



可在根據本發明之電子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使用的合適的電荷傳輸材料係例如揭示於 Y. Shirota 等人之 Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010 中的化合物或根據先前技術在此等層中使用的其他材料。

可用於電子傳輸層的材料係根據先前技術用作為電子傳輸層中之電子傳輸材料的所有材料。特別合適的係鋁錯合物(例如 Alq<sub>3</sub>)、銦錯合物(例如 Zrq<sub>4</sub>)、鋰錯合物(例如 LiQ)、苯并咪唑衍生物、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、喹二唑衍生物、芳族酮、內醯胺、硼烷、二氮雜磷雜環戊二烯衍生物及氧化磷衍生物。此外，合適的材料係上述化合物之衍生物，如於 JP 2000/053957、WO 2003/060956、WO 2004/028217、WO 2004/080975 及 WO 2010/072300 中所揭示者。

可在根據本發明之電致發光裝置之電洞傳輸、電洞注入或電子阻擋層中使用的較佳電洞傳輸材料係茛苳并萘胺衍生物(例如根據 WO 06/122630 或 WO 06/100896)、在 EP 1661888 中揭示之胺衍生物、六氮雜聯伸三苯衍生物(例如根據 WO 01/049806)、含有縮合芳族環之胺衍生物(例如根據 US 5,061,569)、在 WO 95/09147 中揭示之胺衍生物、單苯并茛苳并萘胺(例如根據 WO 08/006449)、二苯并茛苳并萘胺(例如根據 WO 07/140847)、螺二氟胺(例如根據 WO 2012/034627 或 WO 2013/120577)、氟胺(例如根據申請



案 EP 2875092、EP 2875699及 EP 2875004)、螺二苯并吡喃胺(例如根據 WO 2013/083216)及二氫吡啶衍生物(例如根據 WO 2012/150001)。根據本發明之化合物亦可用作為電洞傳輸材料。

有機電致發光裝置之陰極較佳地包含具有低功函數的金屬、金屬合金或包含各種金屬的多層結構，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)。亦合適者係包含鹼金屬或鹼土金屬與銀的合金，例如包含鎂與銀的合金。在多層結構的情況下，除了該等金屬之外，亦可使用具有相對高功函數的其他金屬，諸如例如 Ag 或 Al，在這種情況下，通常使用金屬的組合，諸如例如 Ca/Ag、Mg/Ag 或 Ag/Ag。亦較佳地在金屬陰極與有機半導體之間引入具有高介電常數的材料之薄中間層(thin interlayer)。適用於此目的的是例如鹼金屬氟化物或鹼土金屬氟化物，但還有對應的氧化物或碳酸鹽(例如 LiF、Li<sub>2</sub>O、BaF<sub>2</sub>、MgO、NaF、CsF、Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>等)。此外，喹啉鋰(LiQ)亦可用於此目的。此層之層厚度較佳地在 0.5 與 5 nm 之間。

陽極較佳地包含具有高功函數的材料。陽極較佳地具有相對於真空大於 4.5 eV 的功函數。一方面，合適於此目的的係具有高氧化還原電位的金屬，例如 Ag、Pt 或 Au。另一方面，金屬/金屬氧化物電極(例如 Al/Ni/NiO<sub>x</sub>、Al/PtO<sub>x</sub>)亦係較佳的。對於某些應用，至少一個電極必須是透明的或部分透明的，以便於有機材料的照射(有機太



陽能電池)或光的耦合輸出(coupling-out)(OLED、O-雷射)。此處較佳的陽極材料係導電混合金屬氧化物。特佳者係氧化銦錫(ITO)或氧化銦鋅(IZO)。進一步較佳者係導電的經摻雜有機材料，特別是導電的經摻雜聚合物。

由於根據本發明之裝置壽命在水及/或空氣存在的情況下會縮短，因此該裝置經適當地(取決於應用)結構化、設置有觸點、且最終經密封。

在較佳實施例中，根據本發明之有機電致發光裝置，其特徵在於一或多層係藉由昇華方法塗覆，其中該等材料係在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，此處的初壓力亦可能甚至更低，例如低於 $10^{-7}$ 毫巴。

同樣較佳者係一種有機電致發光裝置，其特徵在於一或多層係藉由OVPD(有機氣相沈積)法或輔以載體-氣體昇華來塗覆，其中該等材料係在 $10^{-5}$ 毫巴與1巴之間的壓力下施加。此方法之特殊實例係OVJP(有機蒸氣噴墨印刷)方法，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)。

此外較佳者係一種有機電致發光裝置，其特徵在於一或多層係從溶液製造，諸如例如以旋轉塗佈或藉由任何所欲印刷方法(諸如，例如網版印刷、柔版印刷、噴嘴印刷、平版印刷，但特佳地係LITI(光誘導熱成像、熱轉移印刷)或噴墨印刷)。為此目的，式(I)之可溶性化合物係必需的。透過化合物之合適取代可達到高溶解度。



亦可能者係混雜方法，其中例如從溶液施加一或多層及藉由氣相沈積施加一或多個其他層。因此，亦可例如從溶液施加發光層，並藉由氣相沉積來施加電子傳輸層。

此等方法通常係所屬技術領域中具有通常知識者已知的，且可在不具進步性的情況下將其施加至包含根據本發明之化合物的有機電致發光裝置中。

根據本發明，包含一或多種根據本發明之化合物的電子裝置可在顯示器中用作為照明應用中的光源並在醫學及/或化妝品應用(例如光療法)中用作為光源。

### 【圖式簡單說明】

[圖1] 顯示化合物3之發射光譜。

[圖2] 顯示判定X1及X2以用於FWHM計算。

### 【實施方式】

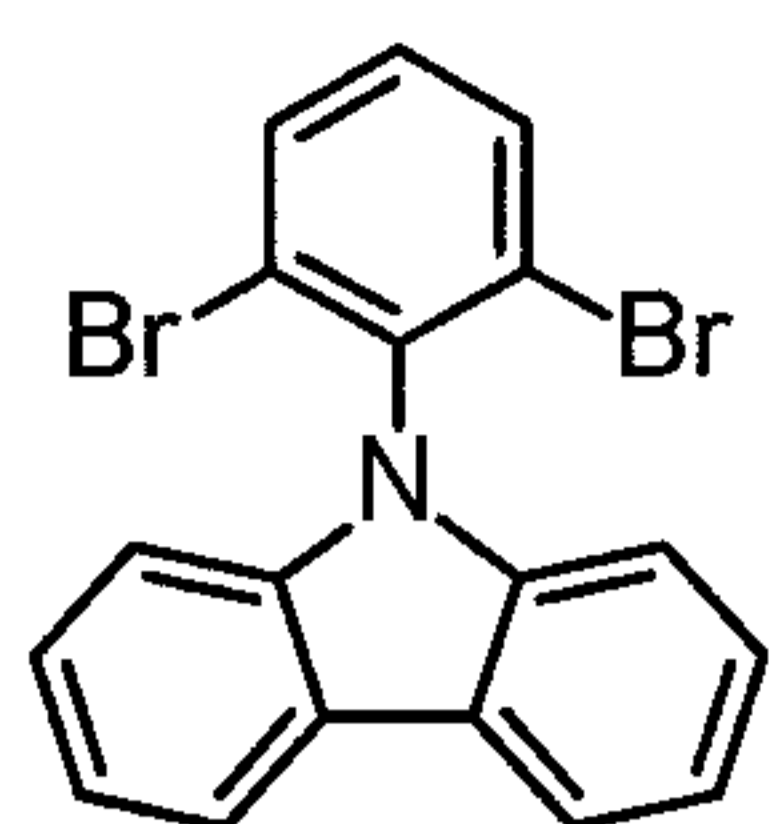
本發明現將以下列實例更詳細地說明，不希望本發明因而受到限制。

#### A)合成實例

##### 實例1：化合物1

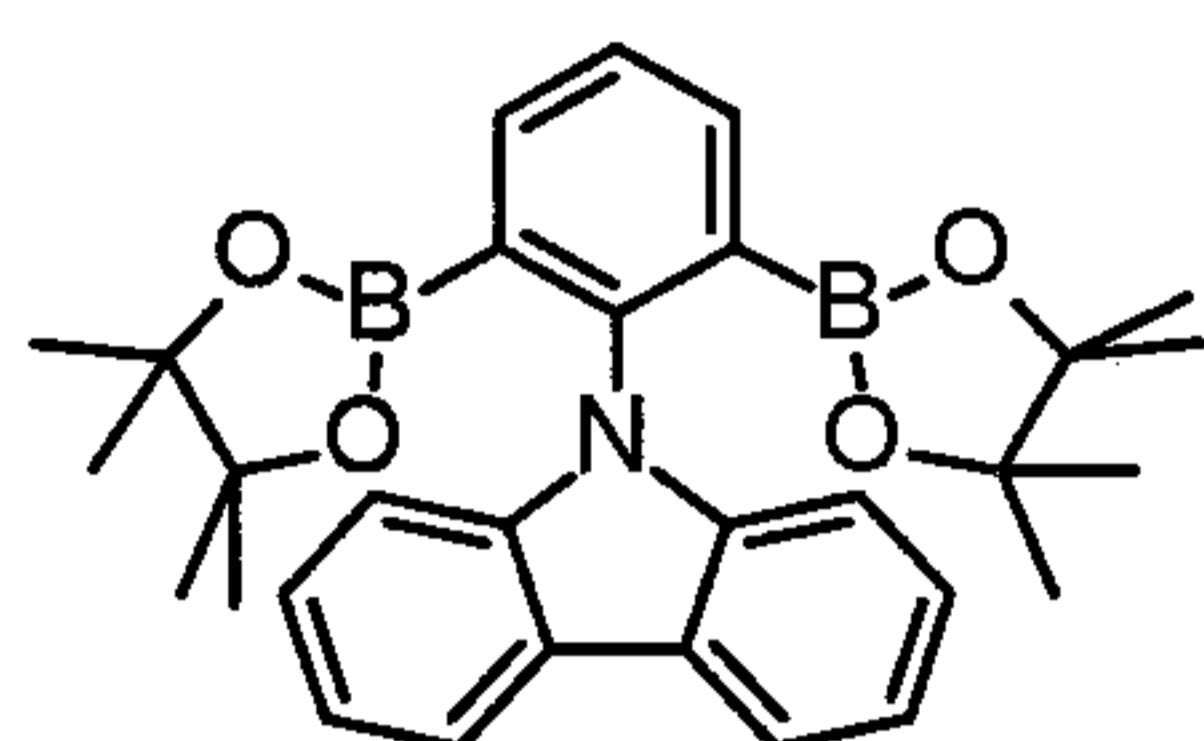
溴化物[1]





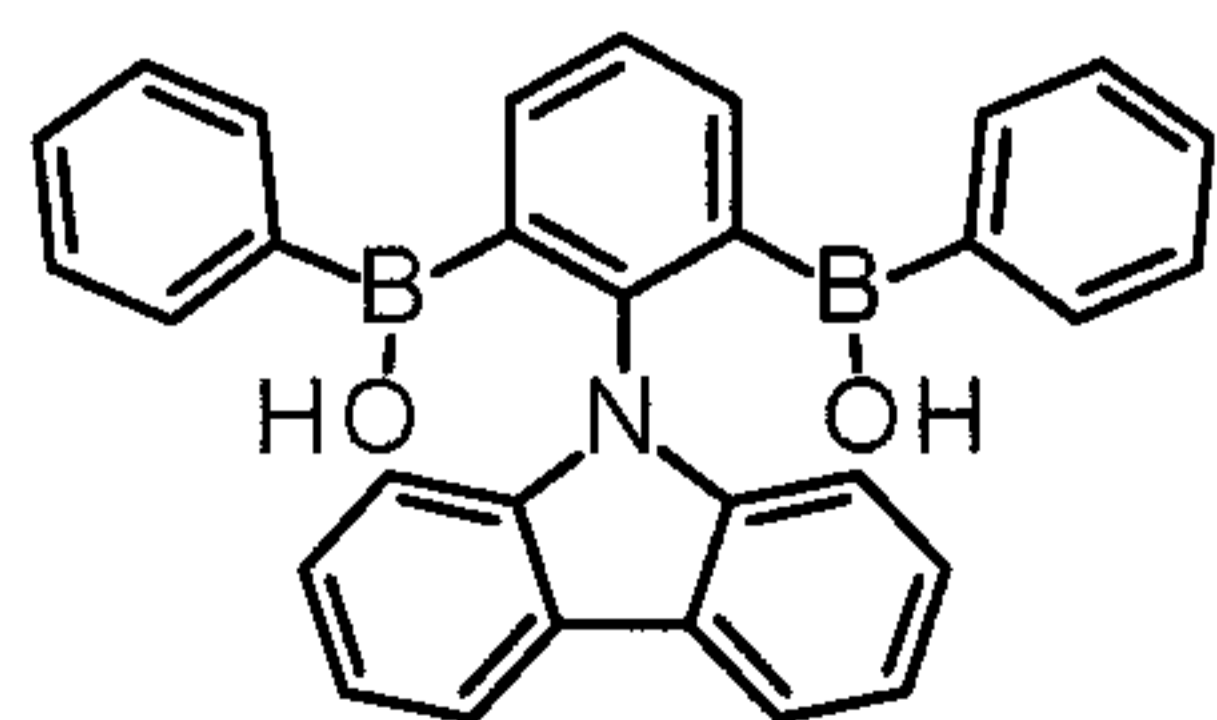
根據文獻合成。 *J. Mater.Chem.C*, 2018, 6, 4300-4307

有機硼酸酯 [2]



在 Ar 氣氛下之燒瓶中裝入溴化物 [1](8.0 g, 20.0 mmol, 1.0當量)及 THF(100 mL)。將混合物冷卻至  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然後添加三級丁基鋰 (1.7 M 於戊烷中, 49.0 mL, 4.2 當量)。1小時後, 添加 2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼烷 (20.0 mL, 18.2 g, 97.8 mmol, 4.9當量)。將反應混合物緩慢溫熱至室溫 (rt)。藉由添加 1 N HCl(50 mL)將反應淬滅, 並用乙酸乙酯 (200 mL)稀釋。分離有機層並在真空中乾燥。將殘餘物用甲醇洗滌。獲得呈白色固體之所欲產物 (4.9 g, 9.9 mmol, 49.6%)。

次硼酸 (borinic acid) [3]

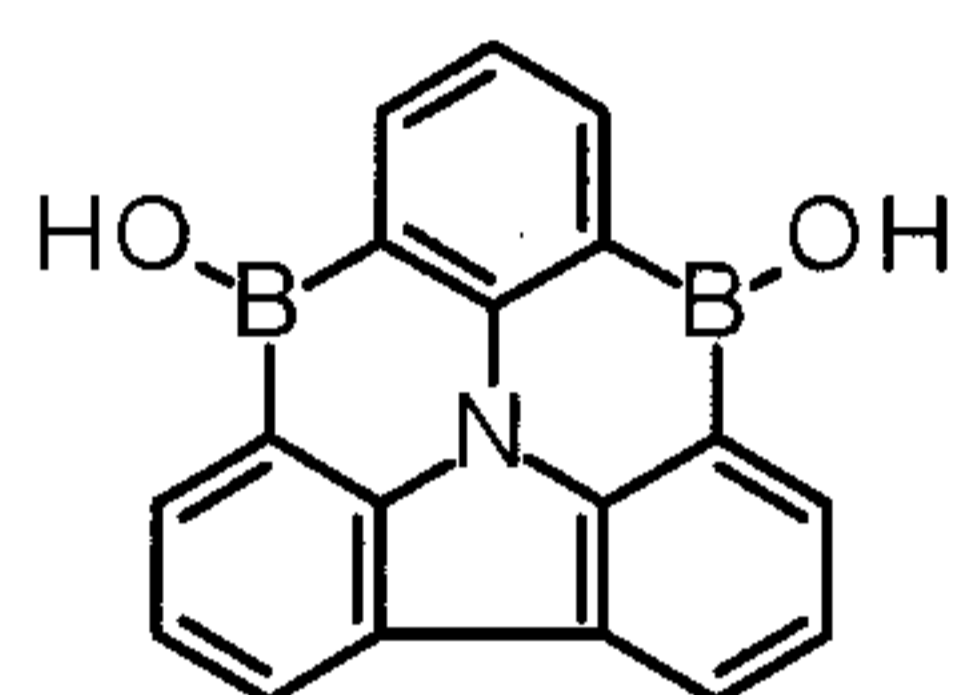


在 Ar 氣氛下之燒瓶中裝入有機硼酸酯 [2](6.8 g, 13.6



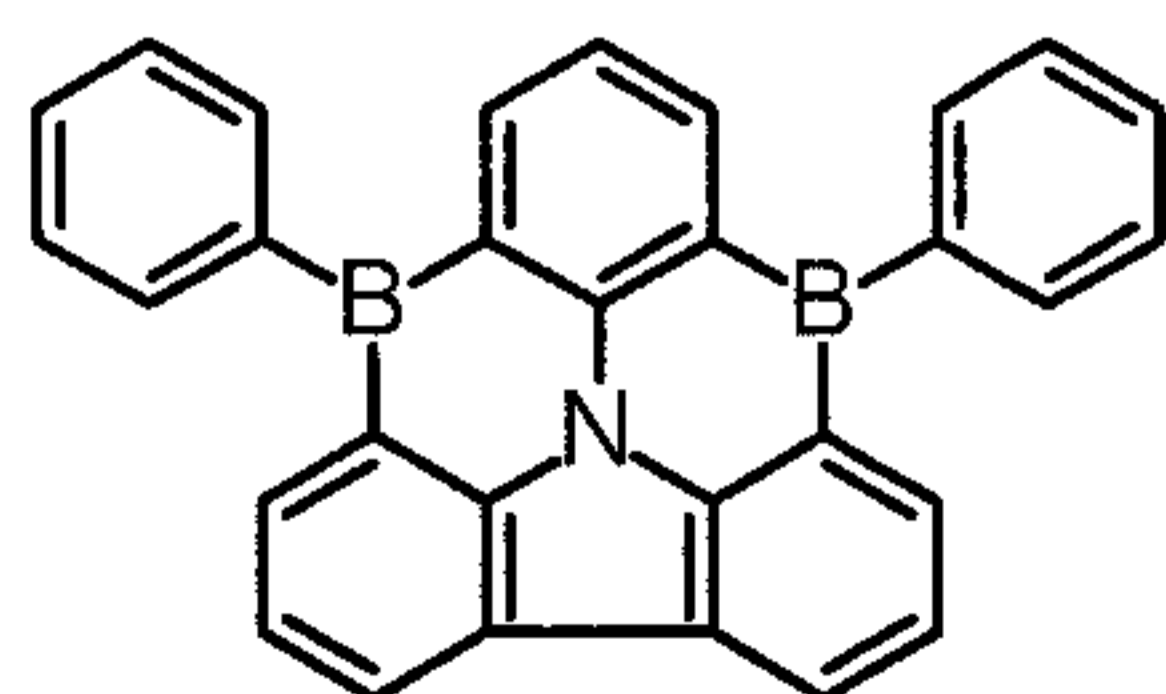
mmol，1.0當量)及乙醚 (50 mL)。將混合物冷卻至  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然後添加苯基鋰 (1.9 M於二丁醚中，28.6 mmol，2.1當量)，並將混合物溫熱至室溫。用 1 N HCl(50 mL)將反應混合物淬滅，並用乙酸乙酯(200 mL)稀釋。分離有機層並在真空中乾燥。獲得呈無色油狀物之所欲產物 (5.5 g，12.2 mmol，89.4%)。

#### 次硼酸 [4]



在 Ar 氣氛下之燒瓶中裝入有機硼酸 [3](3.5 g，7.8 mmol，1.0當量)、N,N-二異丙基乙胺 (5.0 g，6.6 ml，38.8 mmol，5.0當量)、氯化鋁 (10.3 g，77.6 mmol，10.0當量) 及甲苯 (30 mL)。將混合物回流 24 小時。然後藉由添加水 (100 mL)將反應混合物淬滅。將固體濾出，並用庚烷及甲苯洗滌。單離出呈白色固體之所欲產物 (1.5 g，5.1 mmol，65.6%)。

#### 化合物 1 [5]



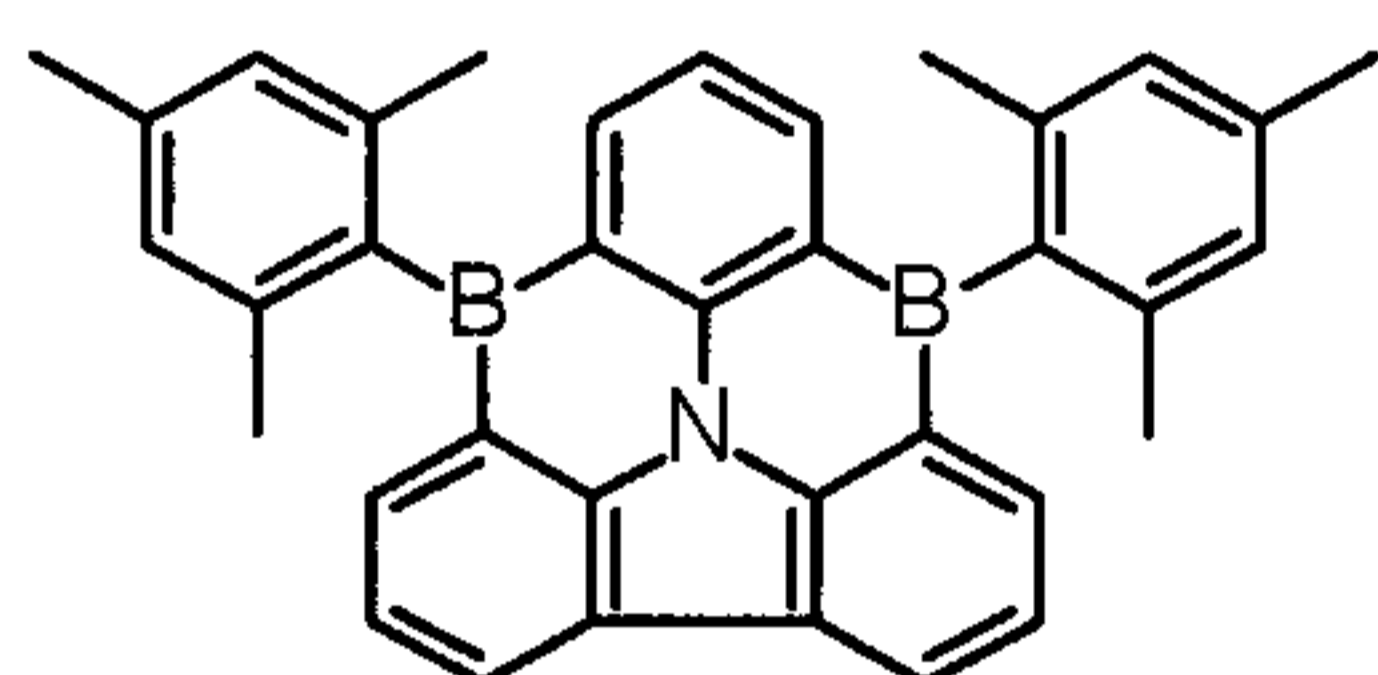
在 Ar 氣氛下之燒瓶中裝入次硼酸 [4](975 mg，3.31



mmol，1.0當量)、2-丙醇(80 mL)及苯(20 mL)。將混合物回流48小時。然後在真空中移除溶劑。將殘餘物溶解於THF(10 mL)中，並冷卻至 $-78^{\circ}\text{C}$ 。然後添加苯基鋰(1.8 M於二丁醚中，3.4 mL，6.45 mmol，2.0當量)。將反應緩慢溫熱至室溫。在真空中移除溶劑。將殘餘物溶解於DCM中，並用矽膠過濾。將粗製產物用乙醇洗滌。獲得呈黃色固體之所欲產物(140 mg，0.34 mmol，10.2%)。

## 實例 2：化合物 2

化合物 2 [6]

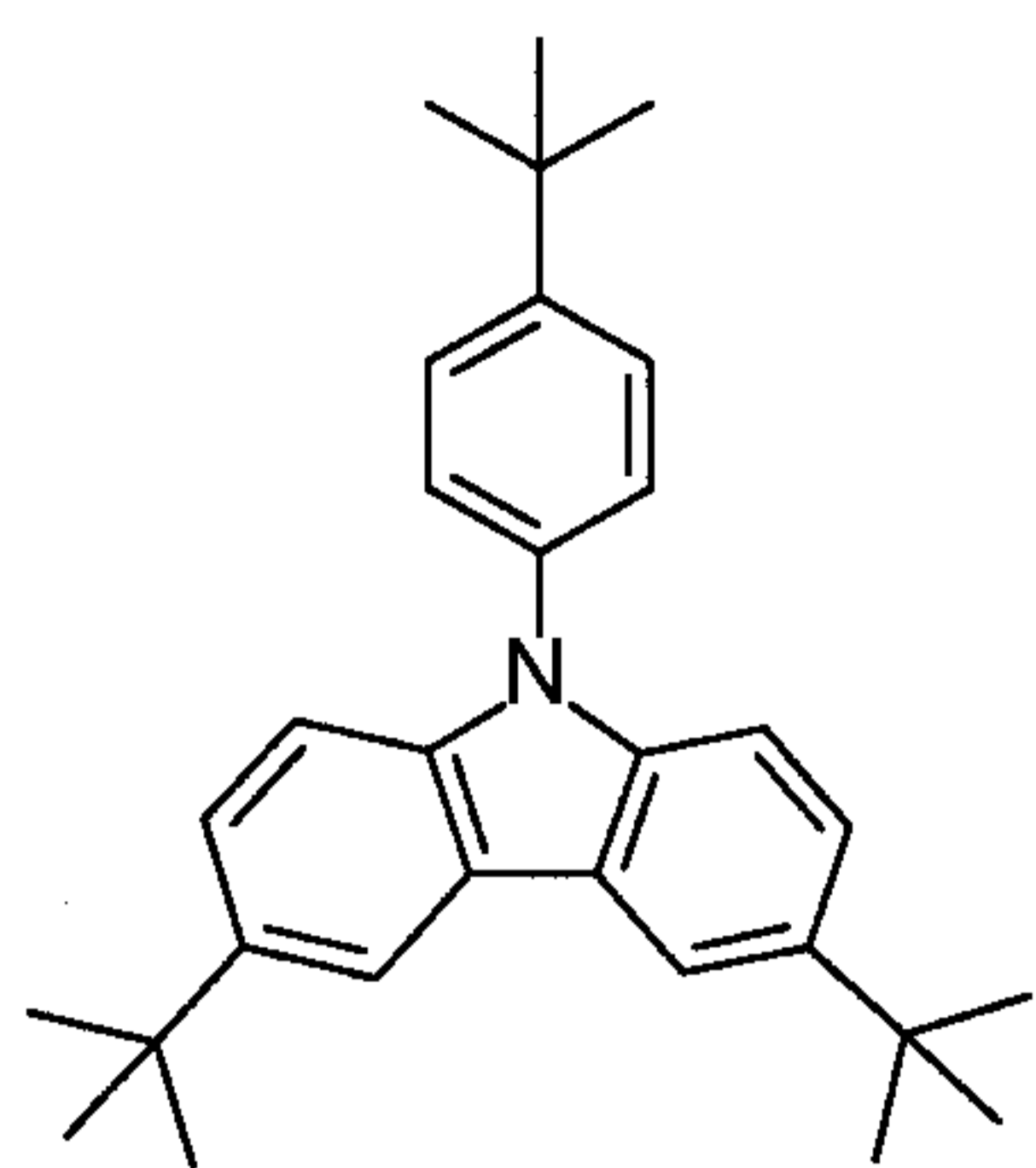


在 Ar 氣氛下之燒瓶中裝入次硼酸 [4](236 mg，0.8 mmol，1.0當量)、2-丙醇(80 mL)及苯(20 mL)。將混合物回流48小時。然後在真空中移除溶劑。將殘餘物溶解於THF (2 mL)中，並冷卻至 $-78^{\circ}\text{C}$ 。然後添加均三甲苯基鋰(200 mg，1.6 mmol，2.0當量)之THF (10 mL)。將反應緩慢溫熱至室溫。在真空中移除溶劑。將殘餘物溶解於DCM中，並用矽膠過濾。將粗製產物用乙醇洗滌。獲得呈黃色固體之所欲產物(240 mg，0.48 mmol，60.7%)。

## 實例 3：化合物 3

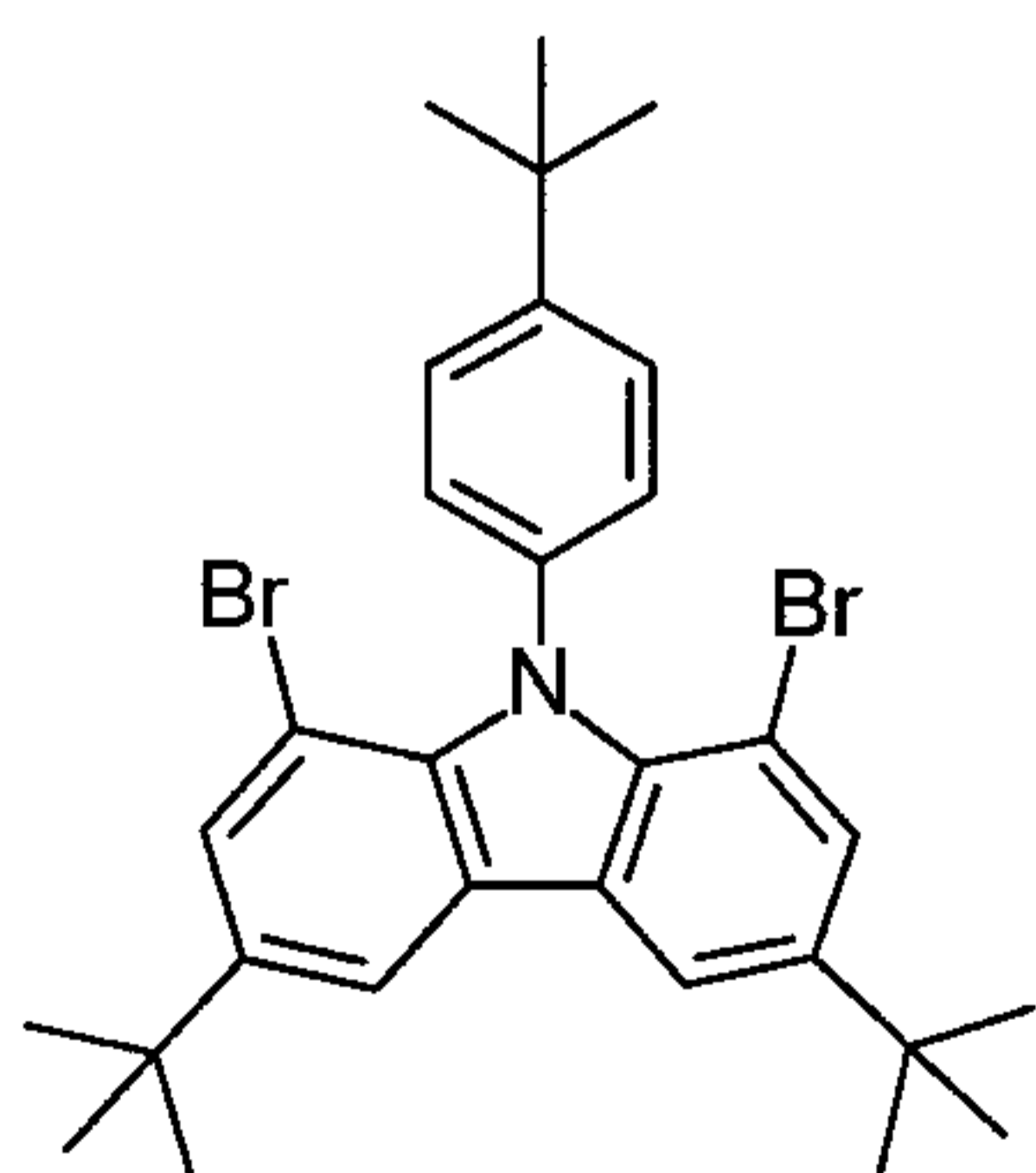
咪唑 [7]





在 Ar 氣氛下之燒瓶中裝入 3,6-二-三級丁基-9H-咔唑 (50.0 g, 179.0 mmol, 1.0當量)、1-溴-4-三級丁基苯 (38.1 g, 31.0 mL, 179.0 mmol, 1.0當量)、三級丁醇鈉 (43.0 g, 447.4 mmol, 2.5當量)、 $P(tBu)_3 Pd G4$  (4.2 g, 7.2 mmol, 0.04當量) 及甲苯 (500 mL)。將反應混合物回流 2 小時，然後冷卻至室溫。藉由添加水 (200 mL) 將反應淬滅。分離有機層並在真空中濃縮。將殘餘物用乙醇洗滌。獲得呈白色固體之所欲產物 (60.0 g, 145.8 mmol, 81.5%)。

#### 溴化物 [8]

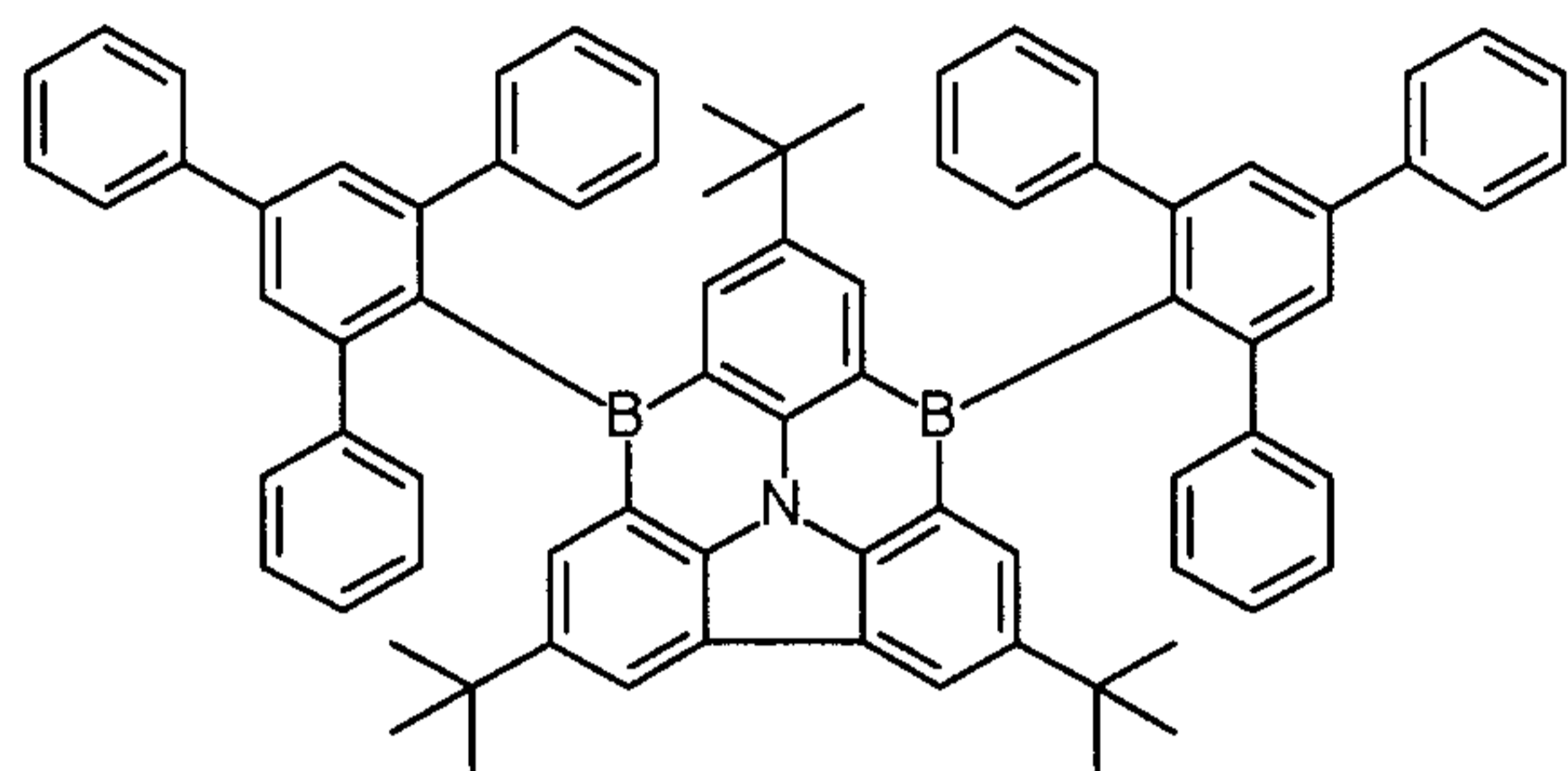


燒瓶裝有咔唑 [7] (55.0 g, 133.6 mmol, 1.0當量)、乙酸 (1000 mL) 及二氯甲烷 (1000 mL)。緩慢添加溴 (14.4 mL, 280.6 mmol, 2.1當量)。將反應混合物攪拌 24 小時。然後藉由添加  $Na_2SO_3$  水溶液 (500 mL) 將反應淬滅。分離有



機層並在真空中乾燥。將殘餘物用乙醇洗滌。獲得呈白色固體之所欲產物(72.0 g, 126.5 mmol, 94.6%)。

### 化合物 3 [9]



在 Ar 氣氛下之燒瓶中裝入溴化物 [8](4.9 g, 8.6 mmol, 1.0當量)及三級丁基苯(150 mL)。將混合物冷卻至  $-41^{\circ}\text{C}$ 。然後添加三級丁基鋰(1.7 M於戊烷中, 21.5 mL, 36.6 mmol, 4.2當量)。使反應混合物溫熱至室溫。然後將反應混合物加熱至  $70^{\circ}\text{C}$  達 2 小時。將反應混合物冷卻回  $-41^{\circ}\text{C}$  並添加  $\text{BBr}_3$ (2.0 mL, 20.7 mmol, 2.4當量)。使反應混合物溫熱至  $0^{\circ}\text{C}$ 。將反應混合物在此溫度下攪拌 1 小時, 然後添加 N,N-二異丙基乙胺(3.0 mL, 17.2 mmol, 2.0當量)。將反應混合物回流 16 小時。然後將反應混合物冷卻至  $-78^{\circ}\text{C}$ , 並添加 1-鋰-2,4,6-三苯基苯(10.8 g, 34.4 mmol, 4.0當量)。使所得混合物溫熱至室溫。移除溶劑, 並藉由管柱層析法純化粗製產物。單離出呈黃色固體之所欲產物(3.6 g, 3.4 mmol, 40%)。

### 實例 4 至 實例 6 :



可使用一般合成路徑 1，採用上述方法合成其他實例，如下：

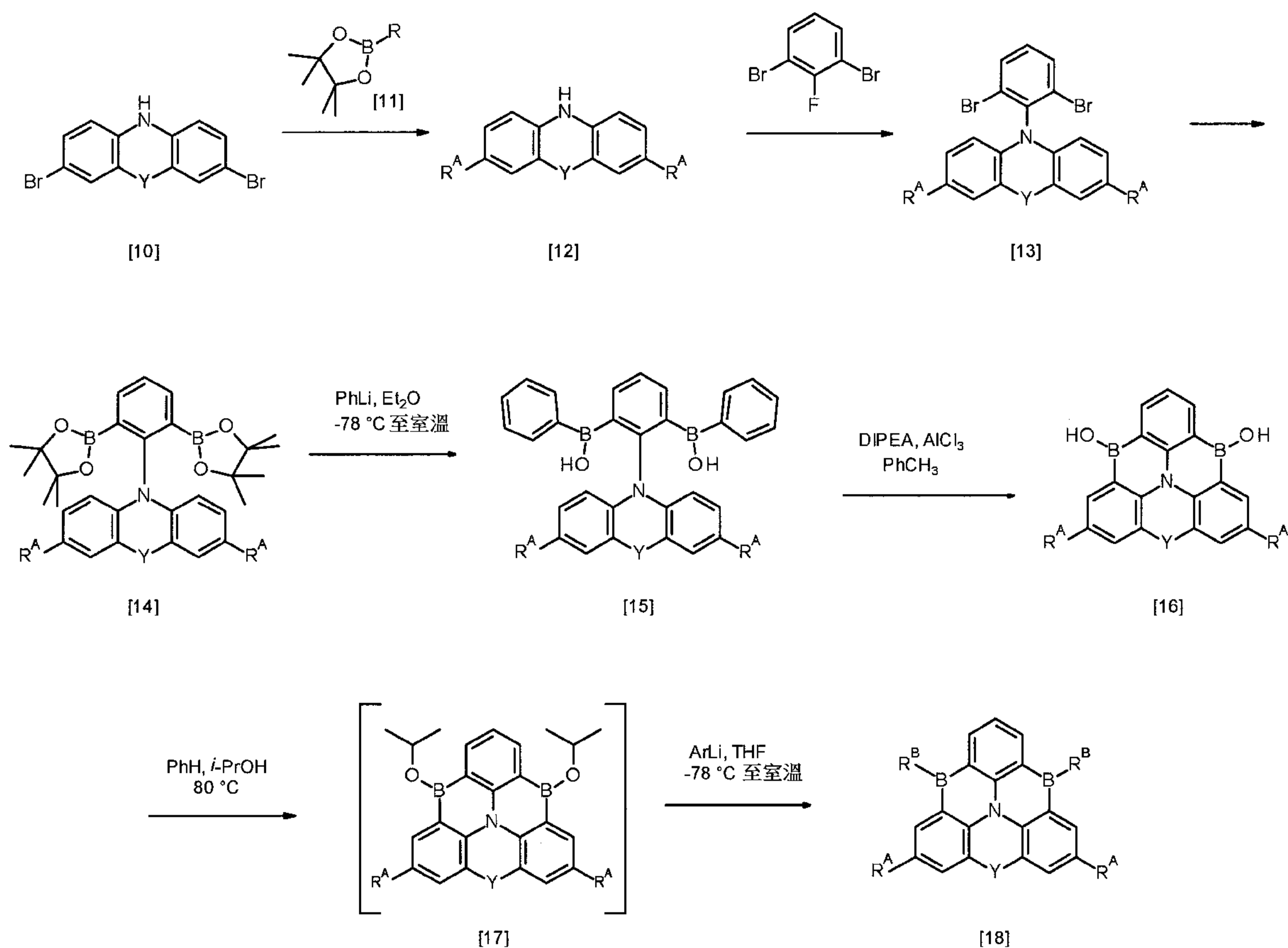
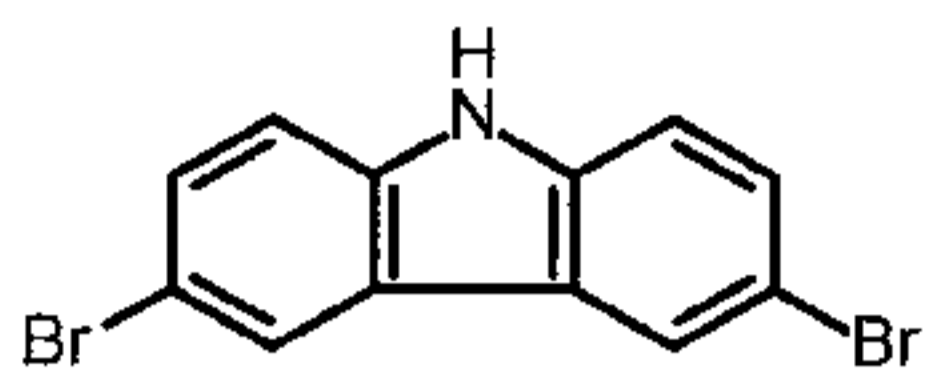
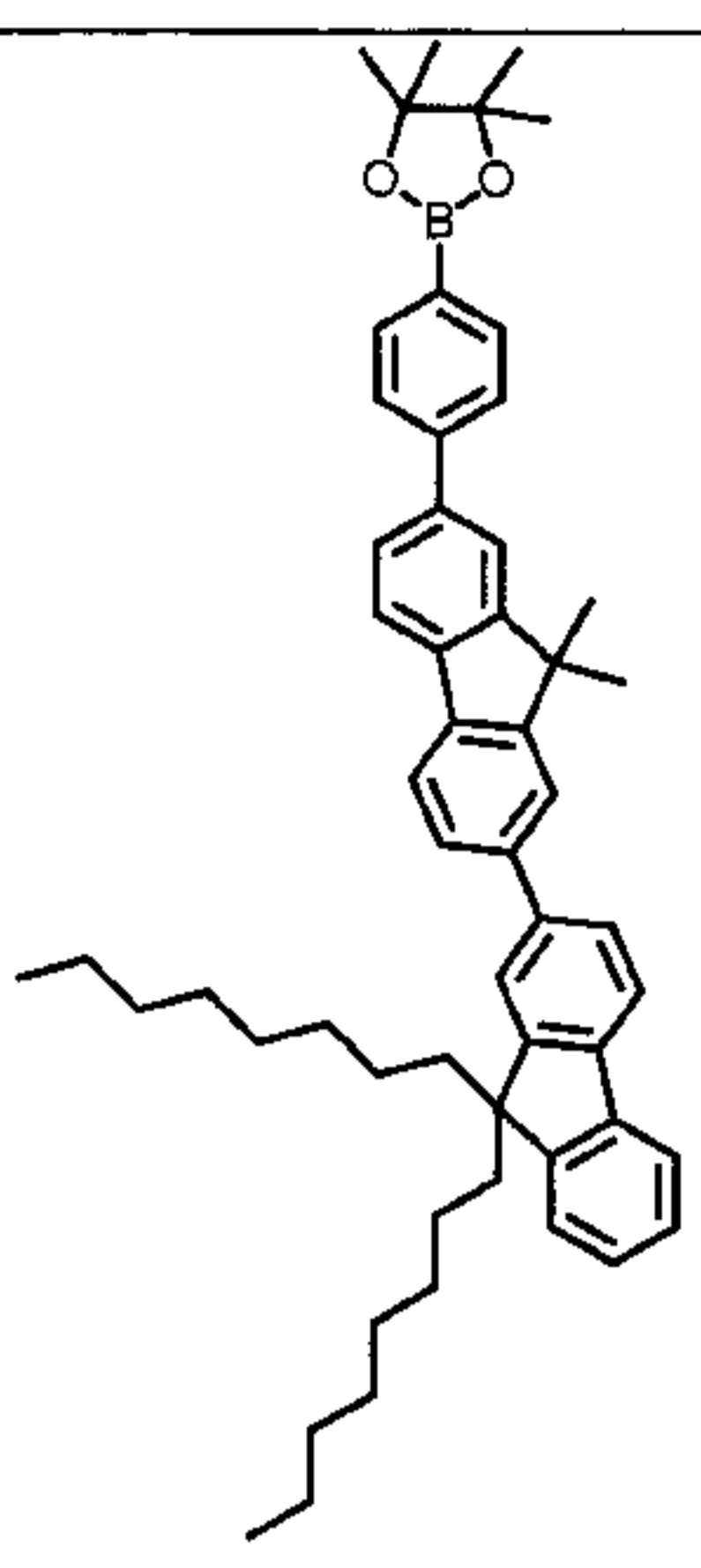
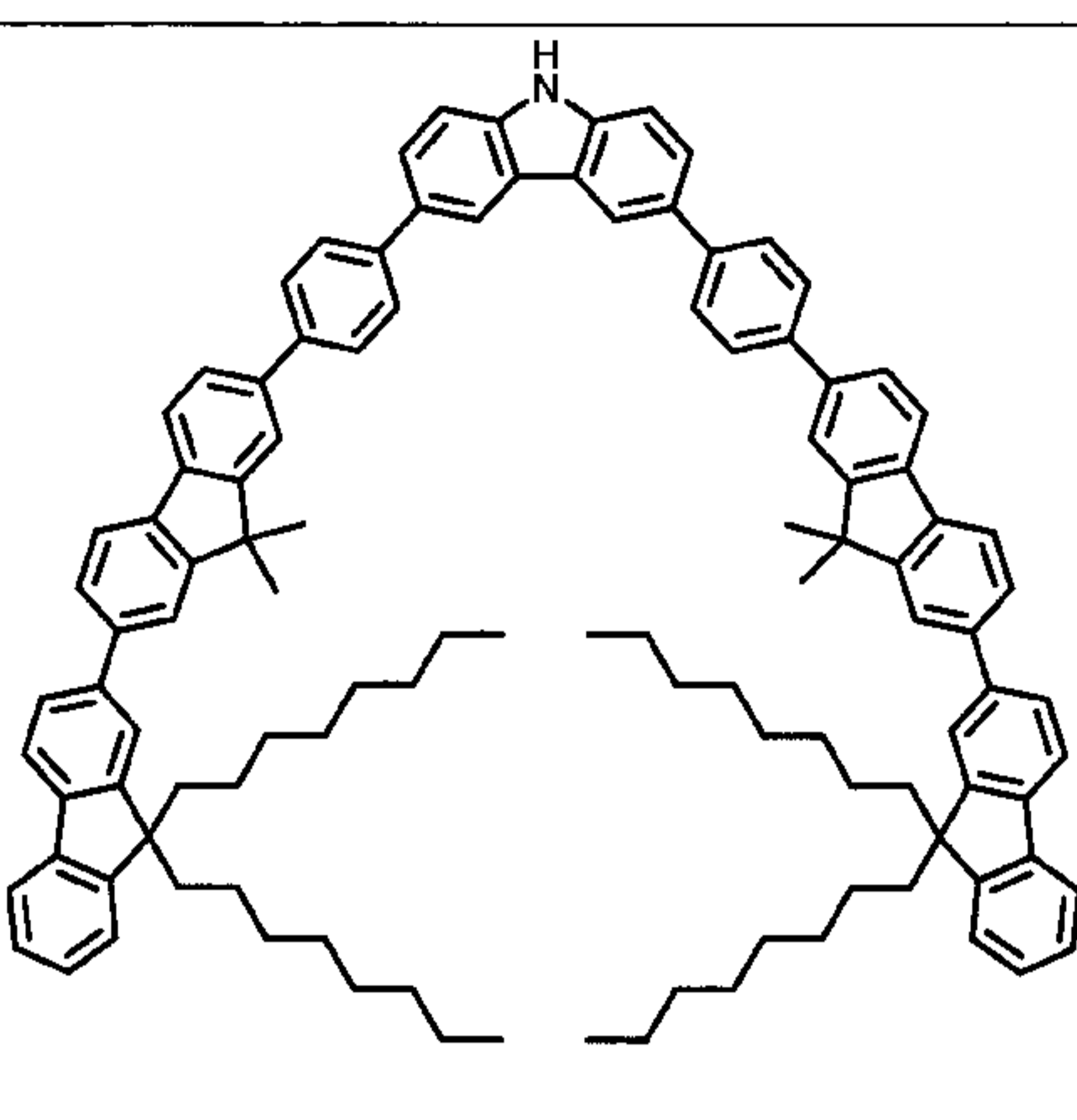
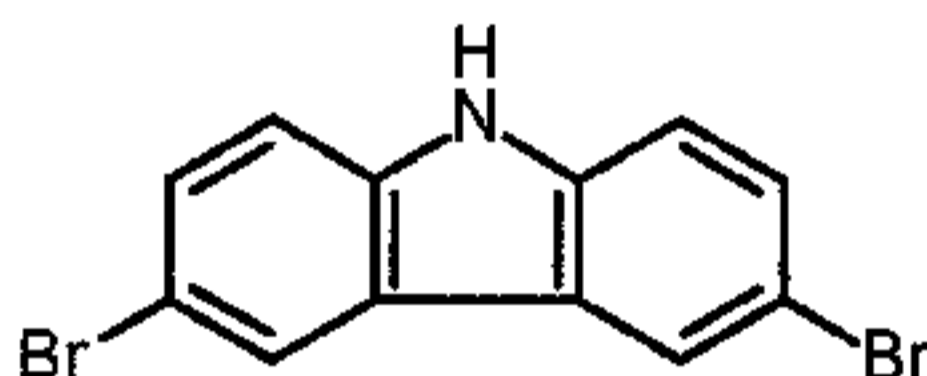
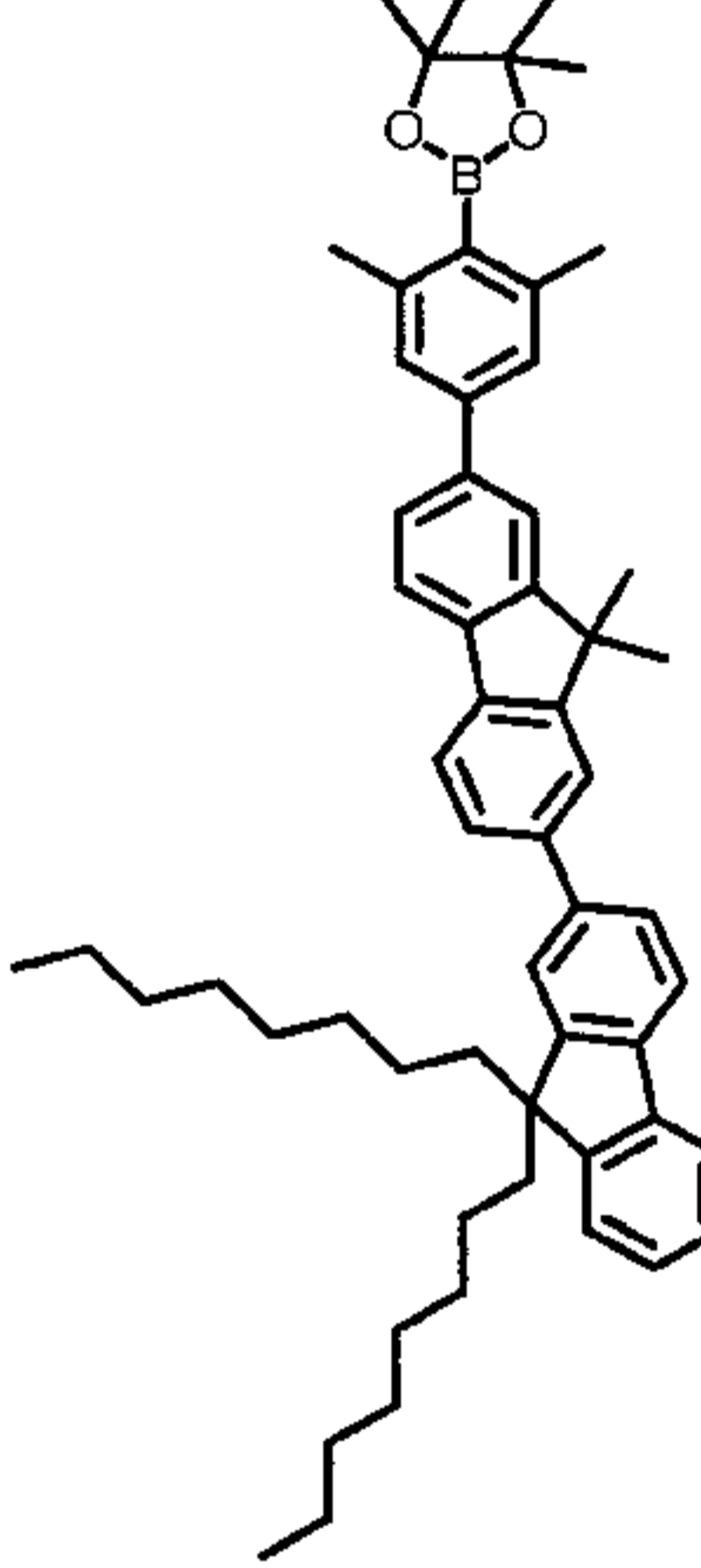
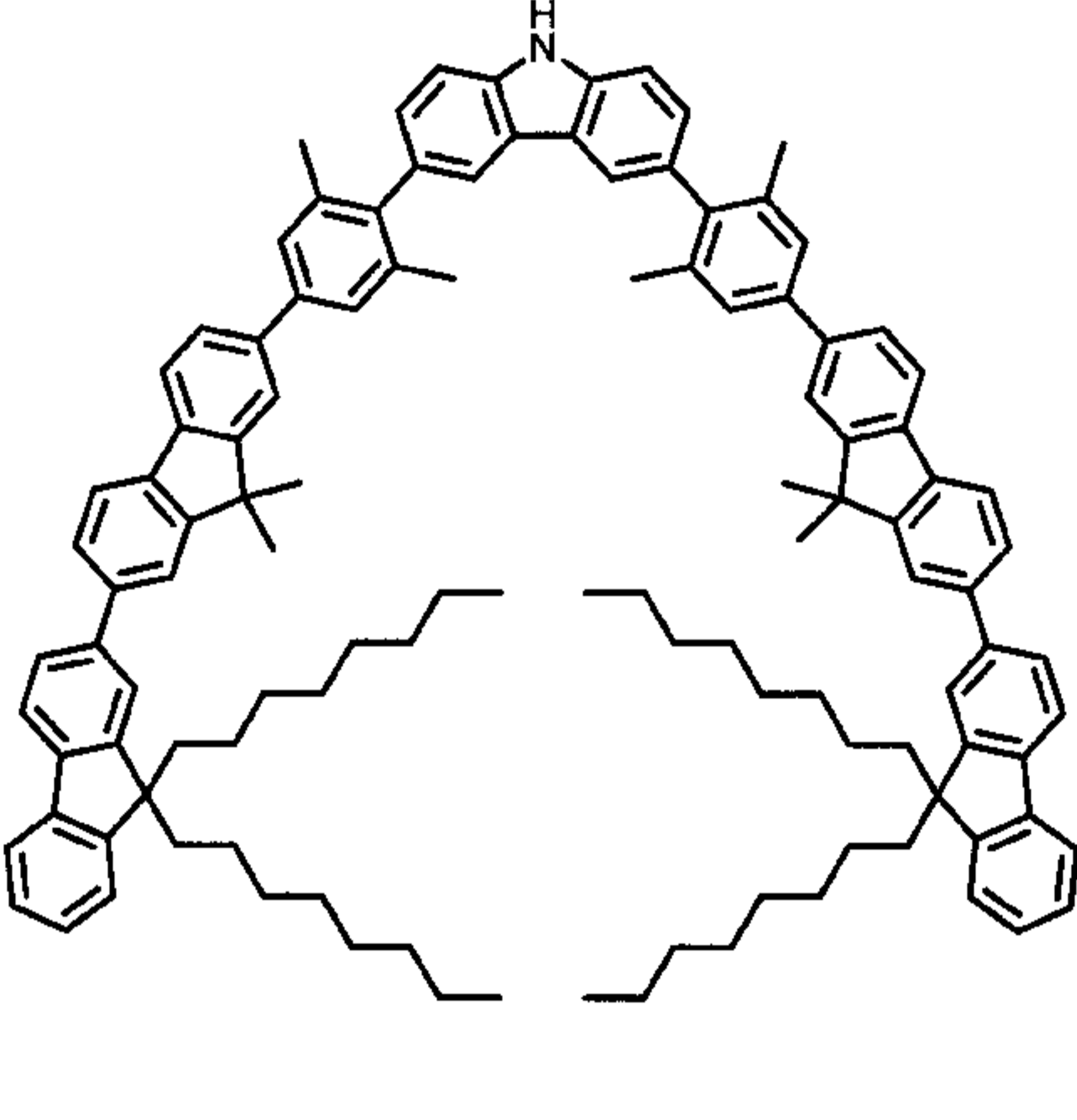


表 1 中所示的產物 [12] 可根據 WO2018/007421 使用個別  
的起始材料 [10] 及 [11] 來獲得。



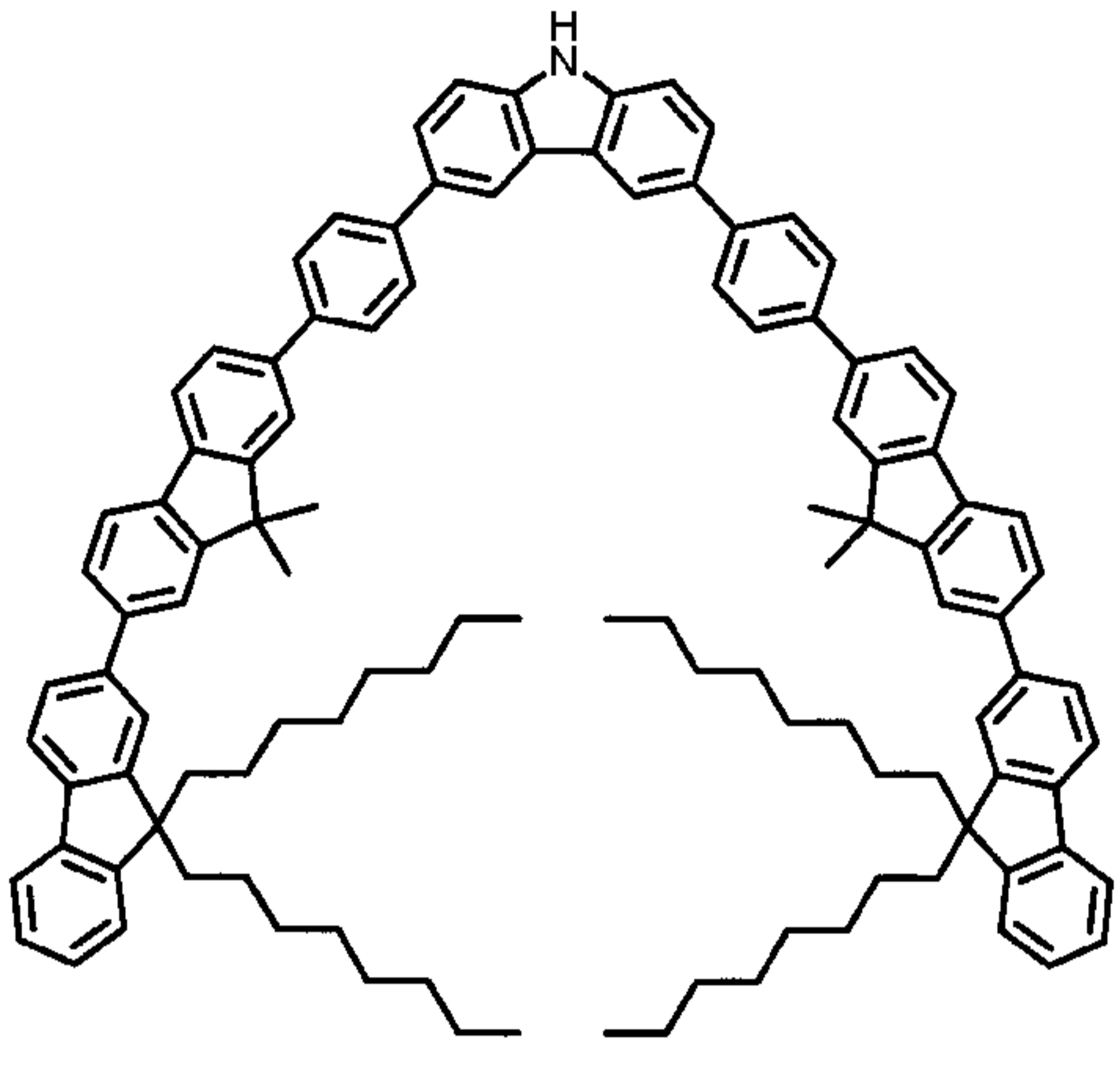
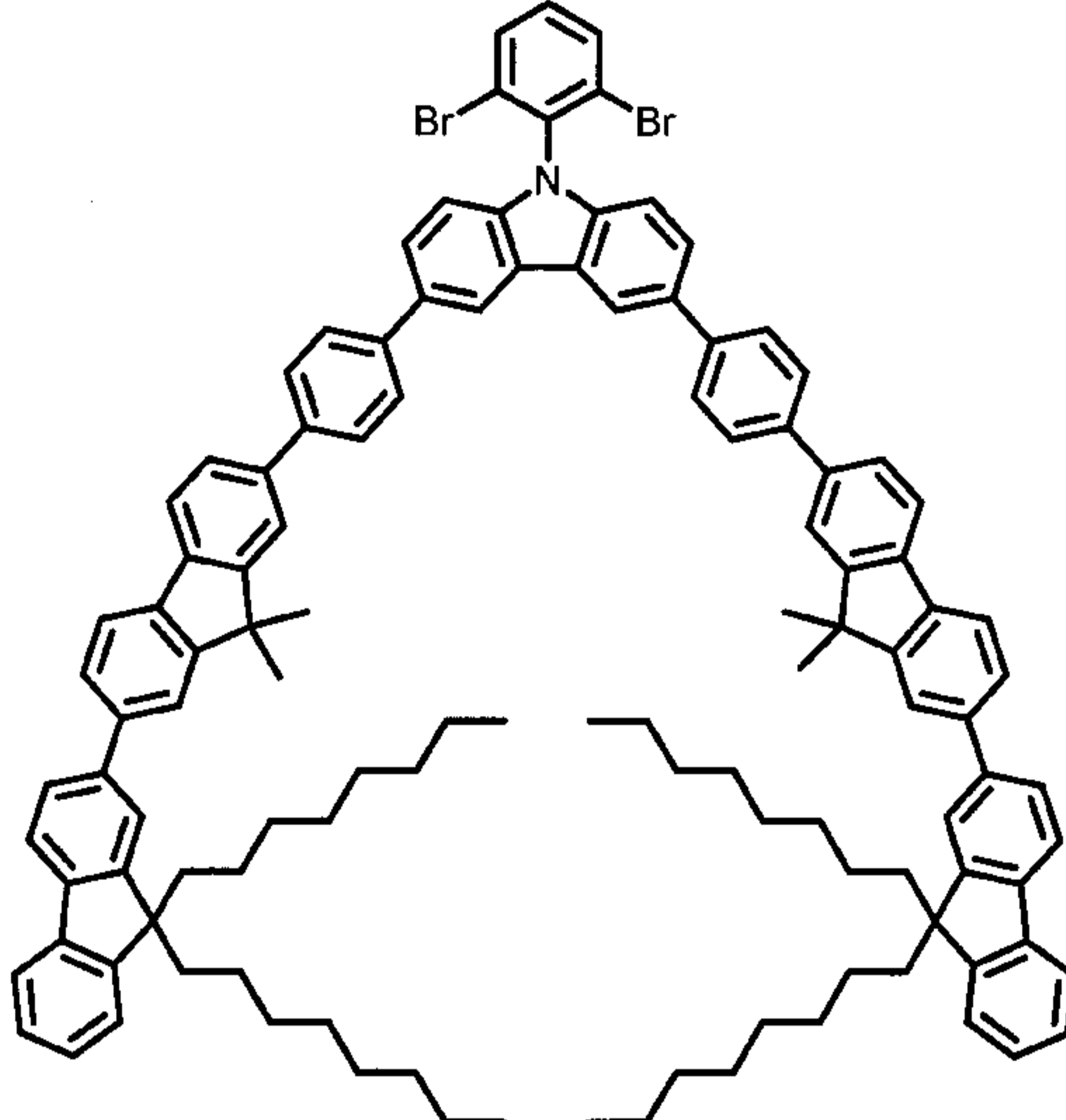
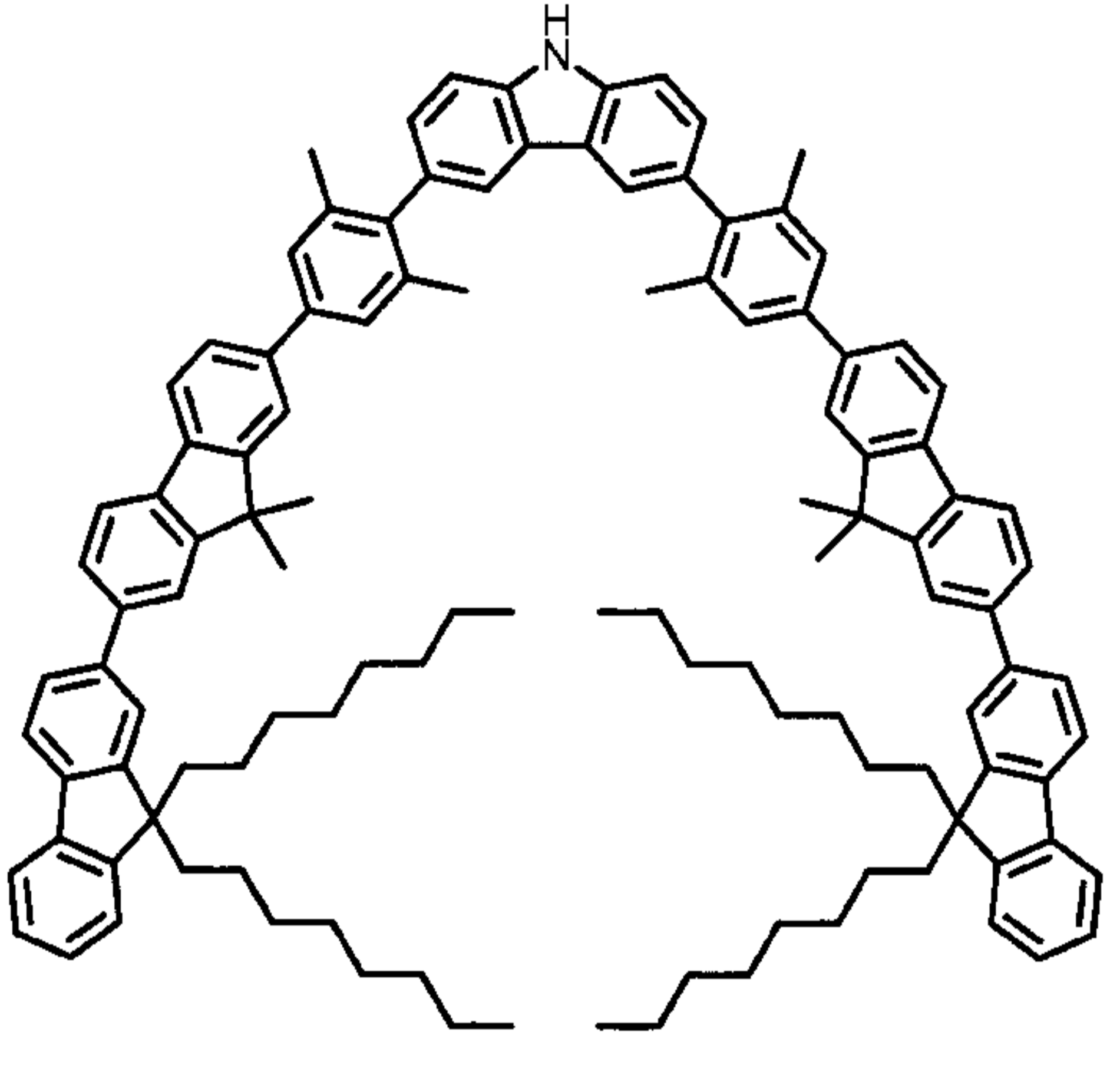
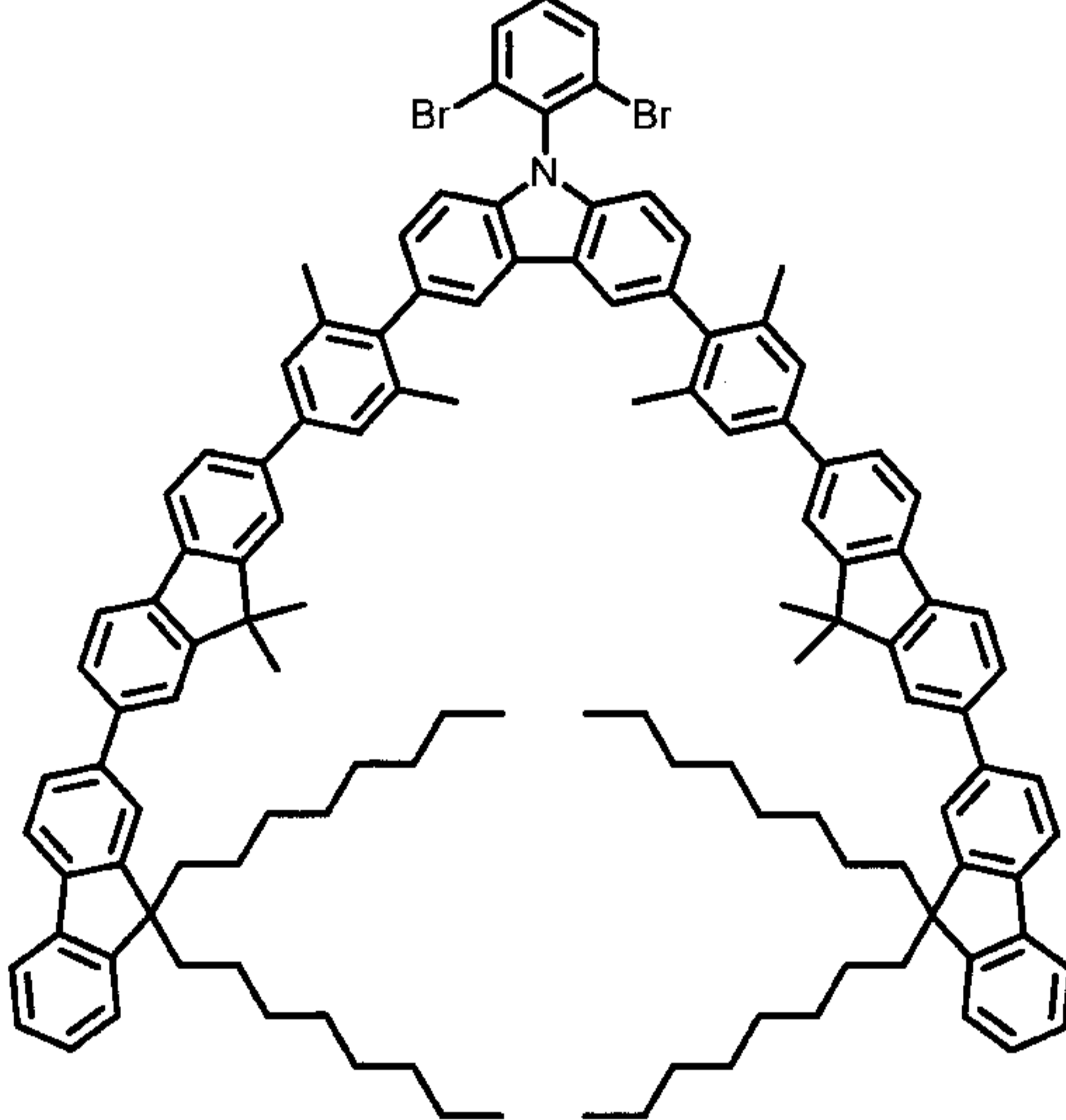
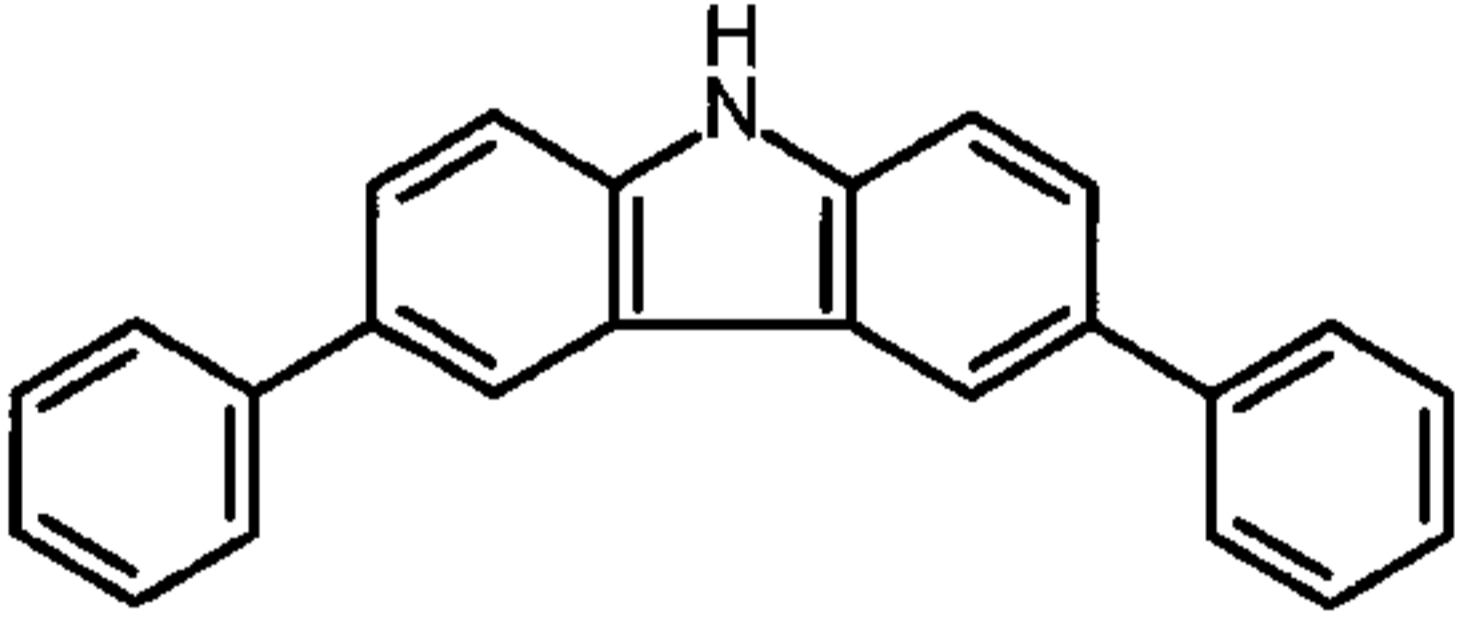
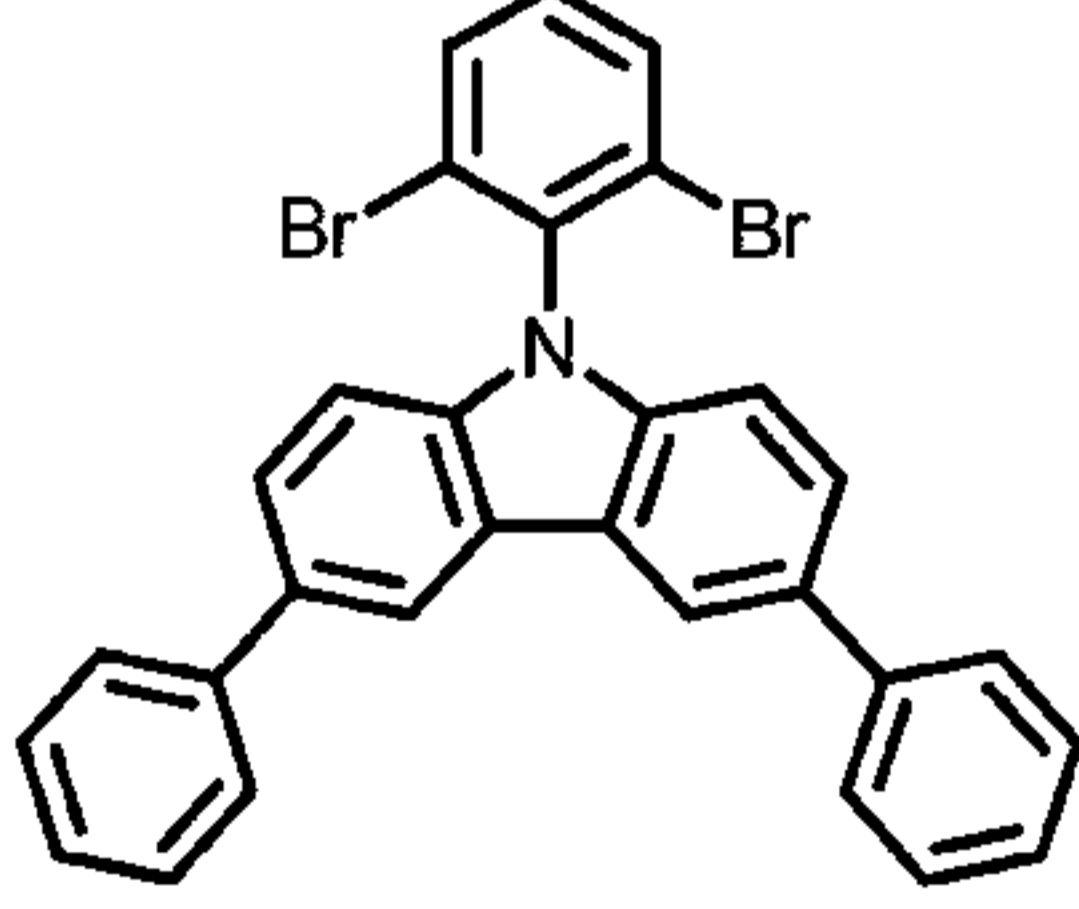
表1：式[12]中所包含的中間體之合成

	起始材料 [10]		起始材料 [11]		產物 [12]
10a	 [6825-20-3]	11a	 [2171483-97-7]	12a	
10b	 [6825-20-3]	11b	 根據 WO2018/ 007421 合成	12b	

以類似於溴化物[1]之合成進行第二步驟。表2中所示的產物[13]可使用個別的起始材料[12]來獲得。



表2：式[13]中所包含的中間體之合成

	起始材料 [12]		產物 [13]
12a		13a	
12b		13b	
12c	 <p data-bbox="409 2122 619 2181">[56525-79-2]</p>	13c	

以類似於有機硼酸酯[2]之合成進行第三步驟。表3中所示的產物[14]可使用個別的起始材料[13]來獲得。



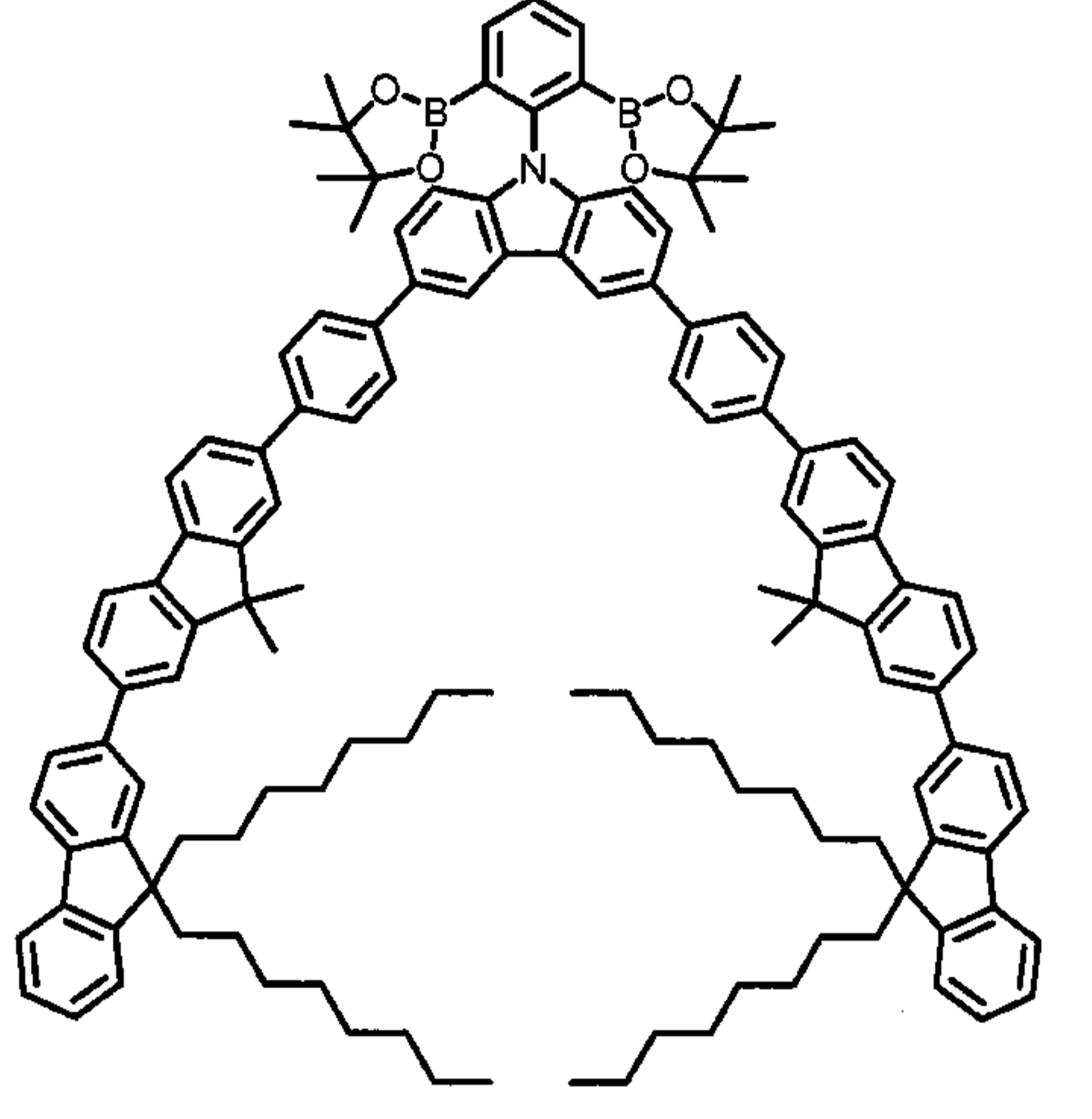
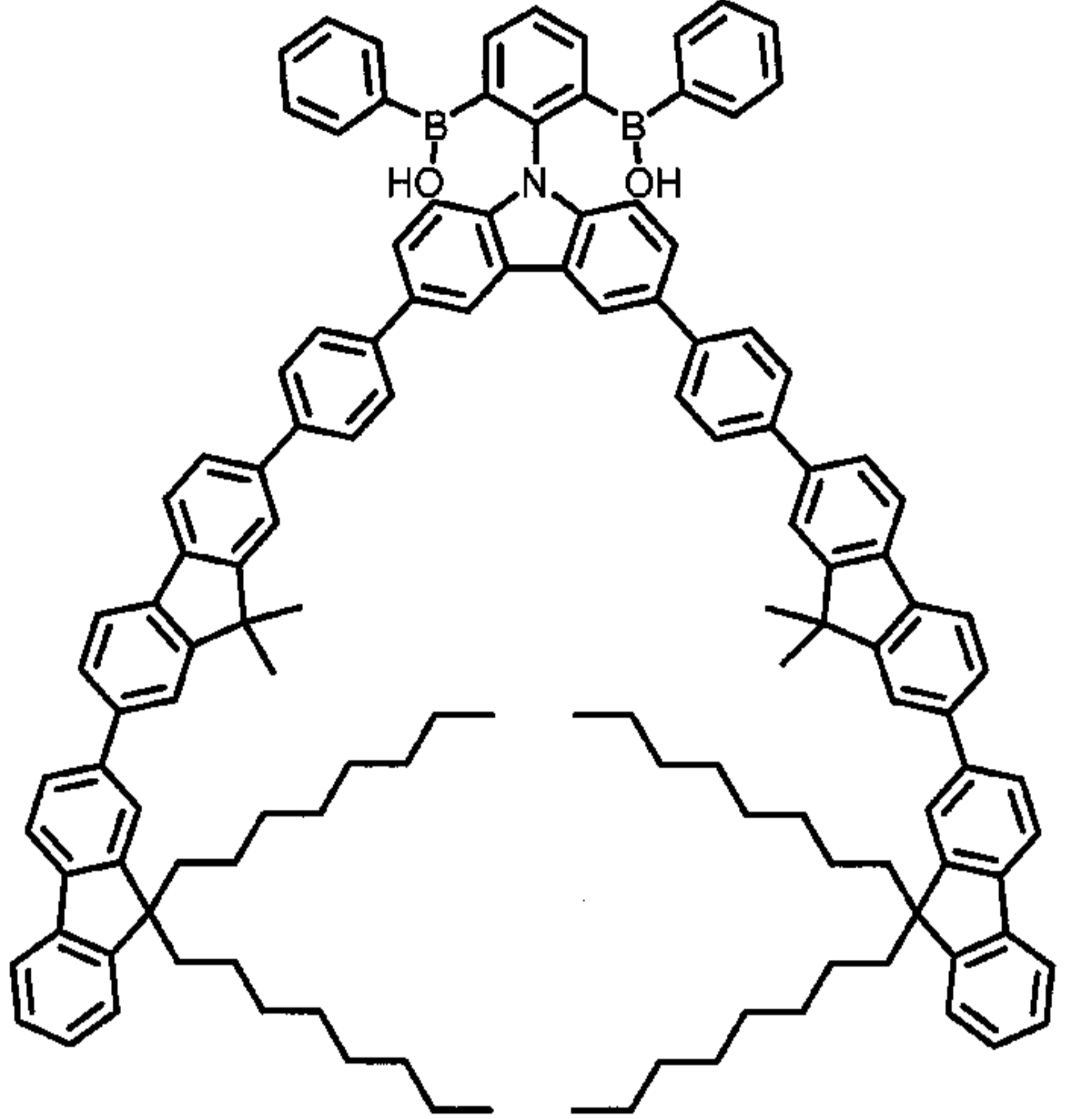
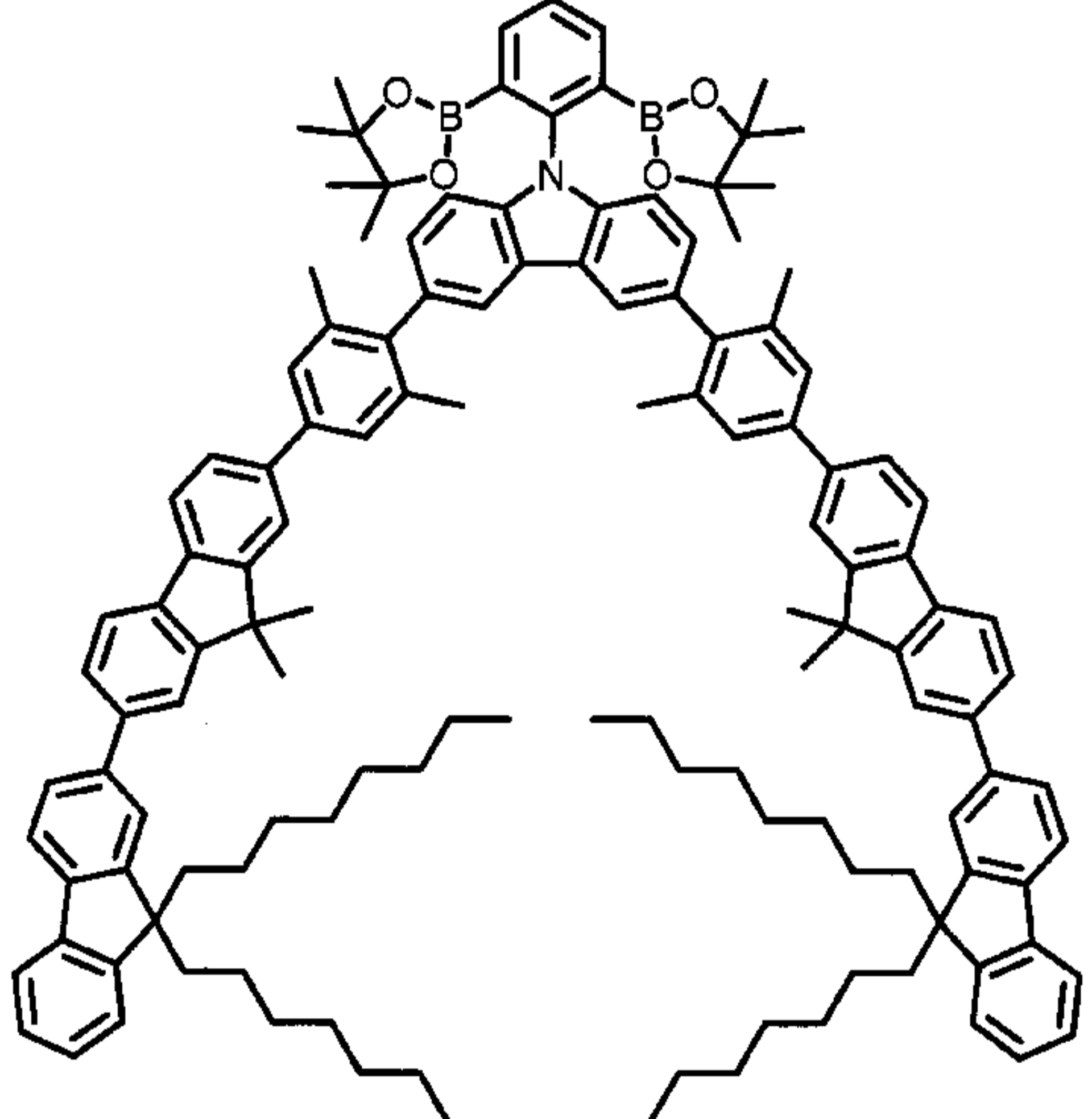
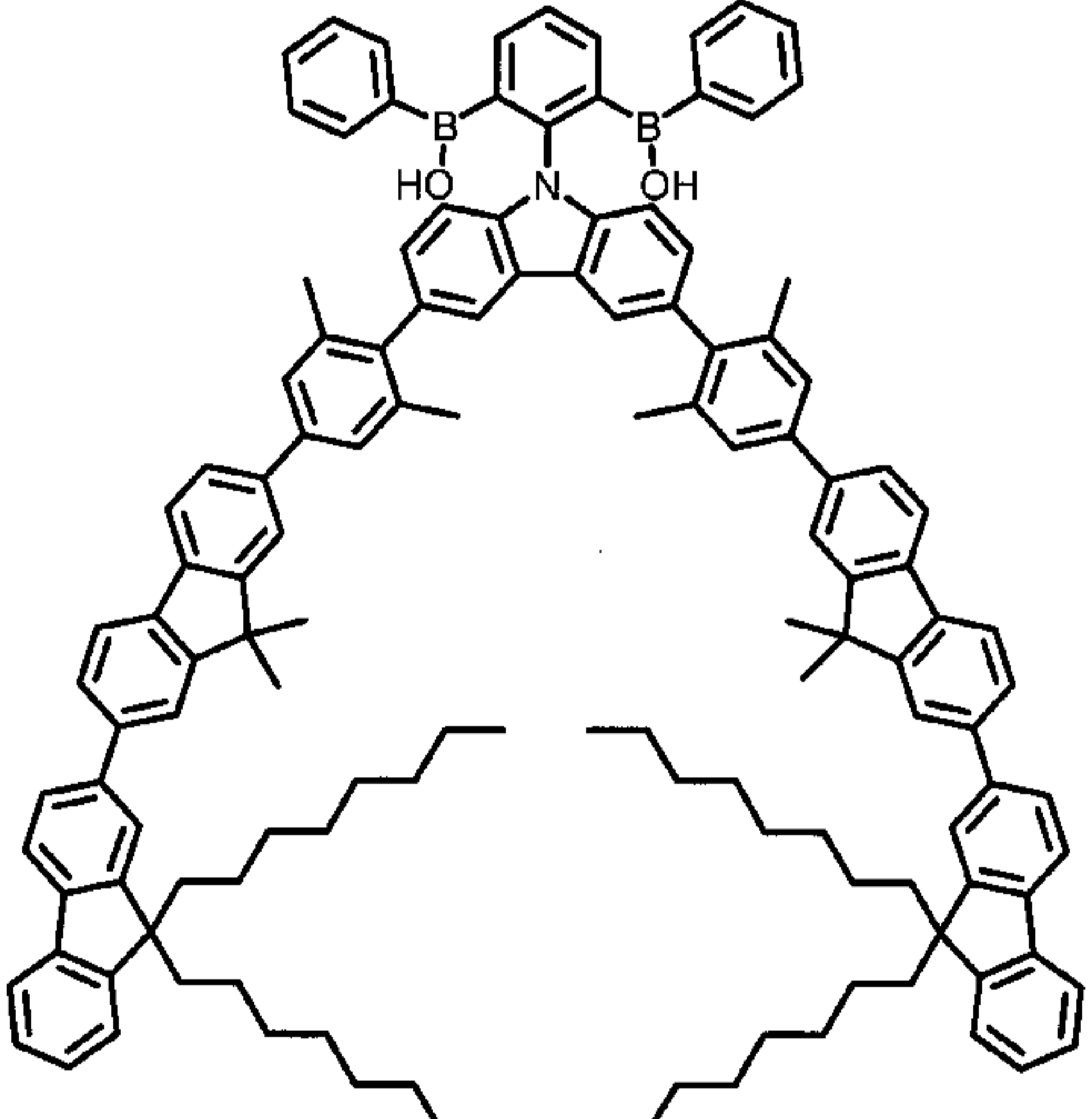
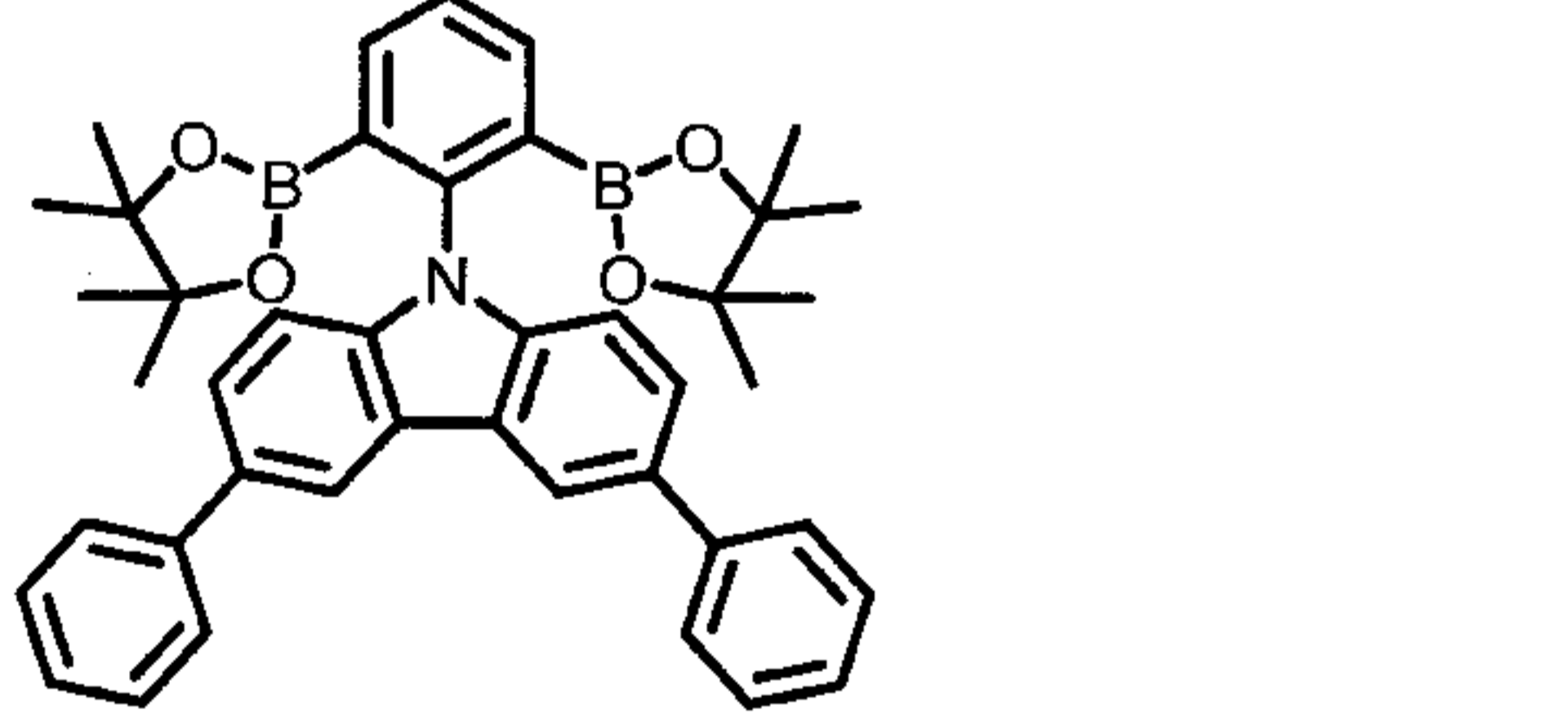
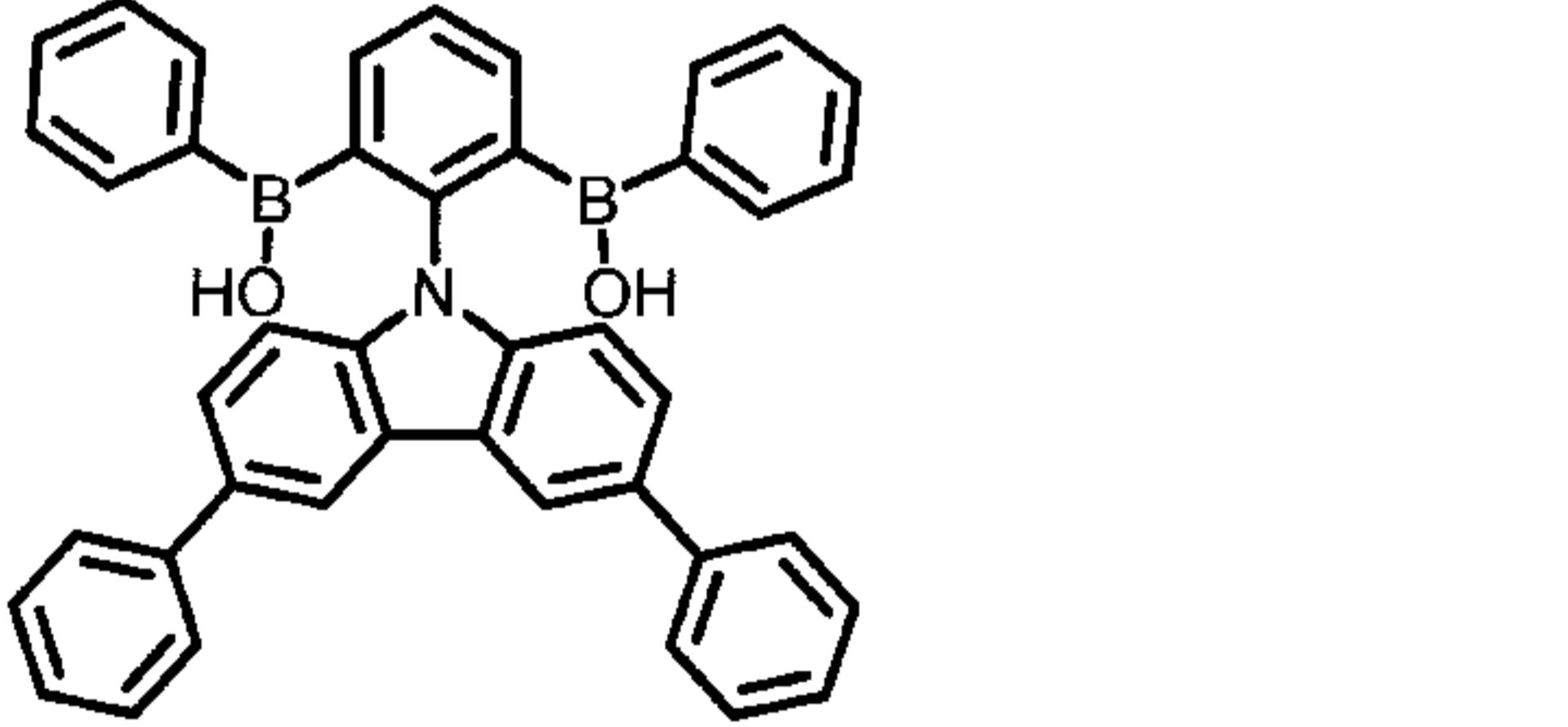
表3：式[14]中所包含的中間體之合成  
以類似於次硼酸[3]之合成進行第四步驟。

	起始材料 [13]		產物 [14]
13a		14a	
13b		14b	
13c		14c	

表4中所示的產物[15]可使用個別的起始材料[14]來獲得。



表4：式[15]中所包含的中間體之合成

	起始材料 [14]		產物 [15]
14a		15a	
14b		15b	
14c		15c	

以類似於次硼酸[4]之合成進行第五步驟。表5中所示的產物[16]可使用個別的起始材料[15]來獲得。



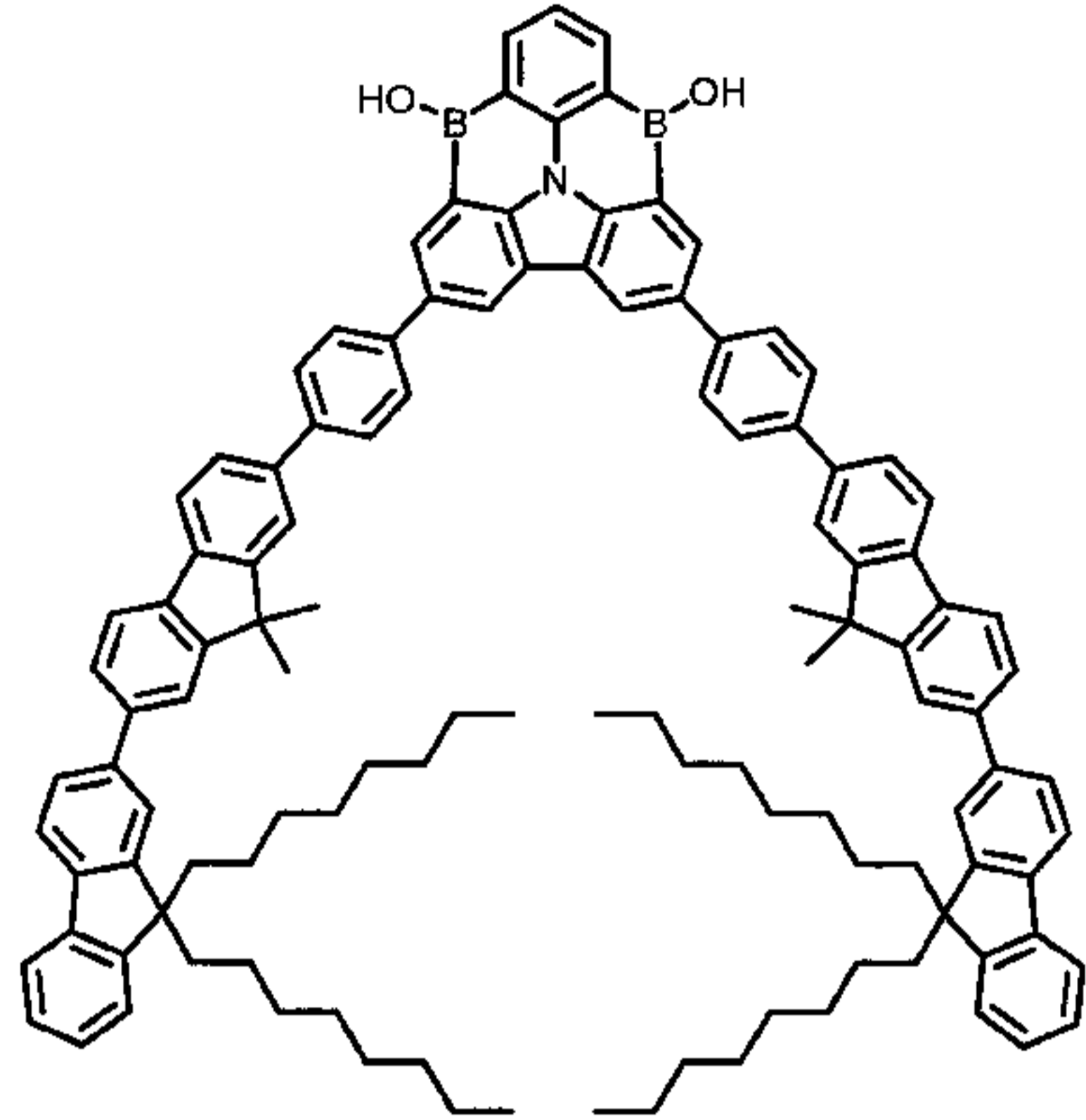
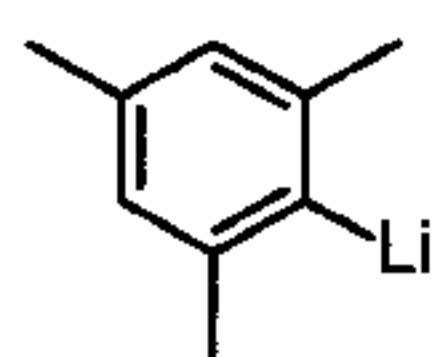
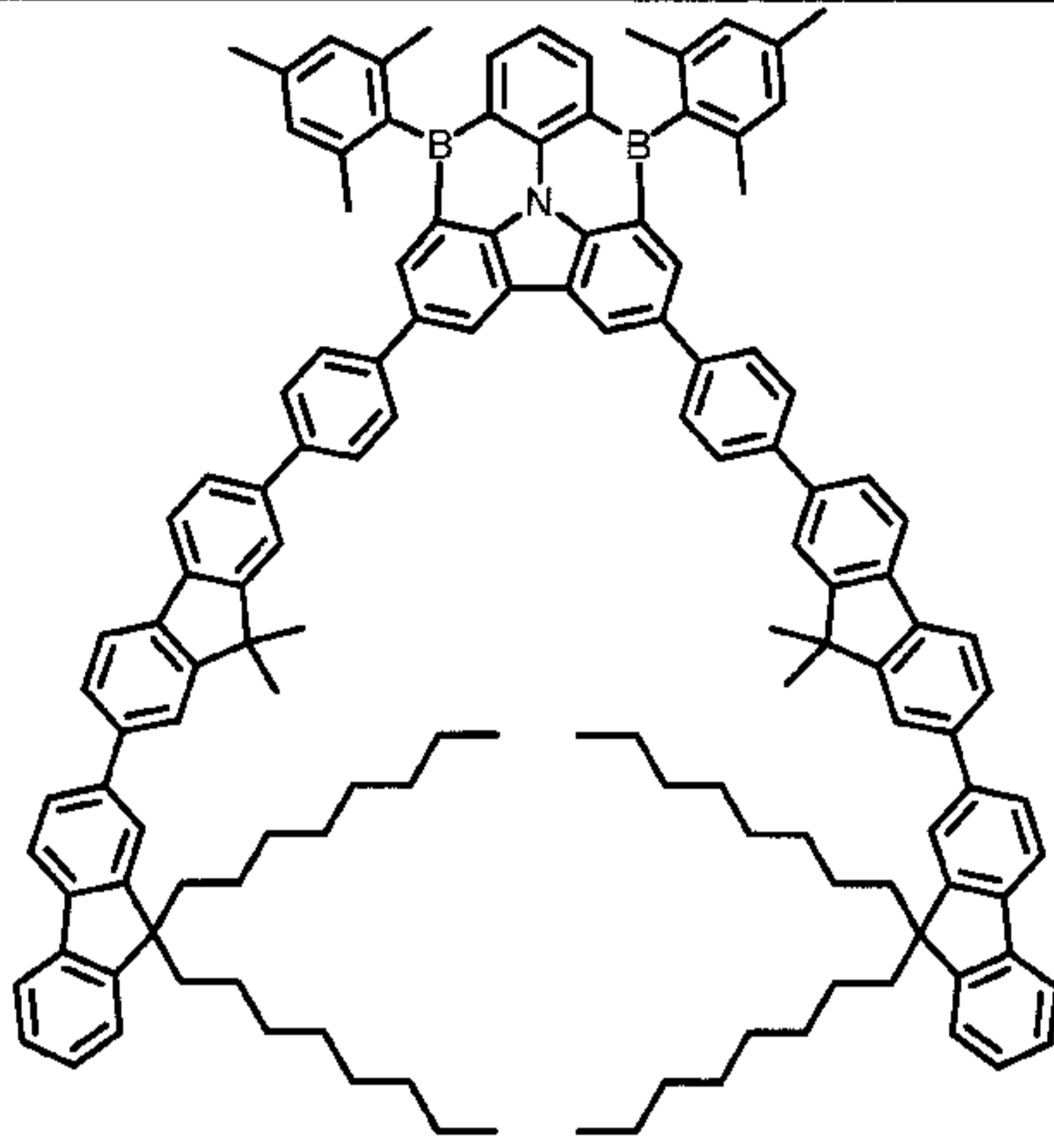
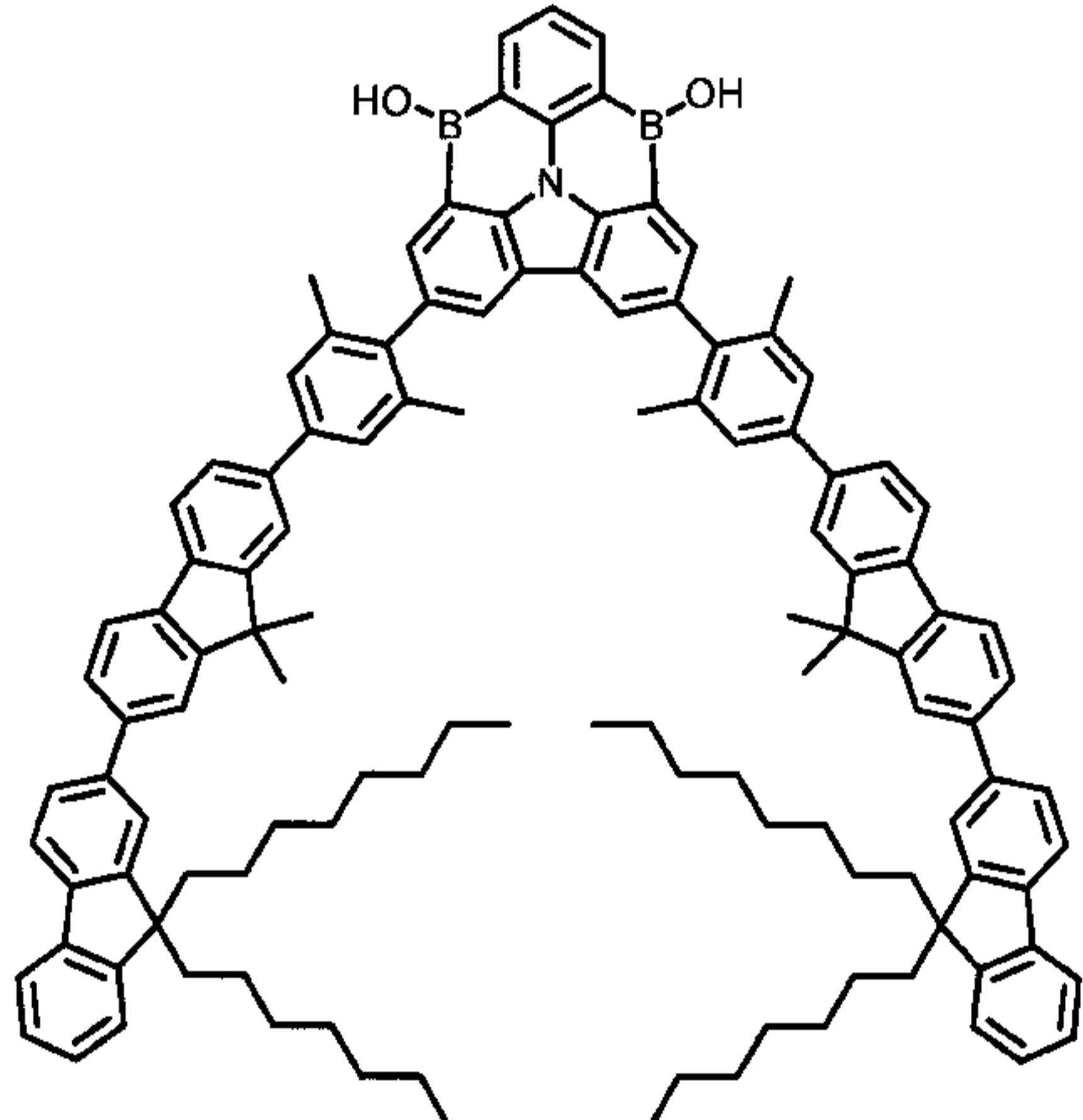
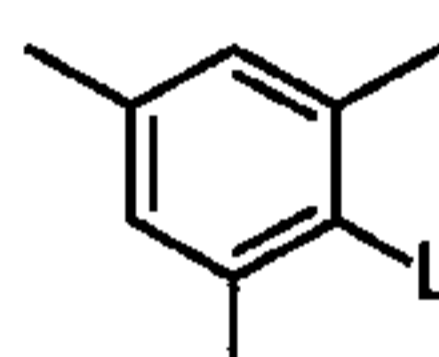
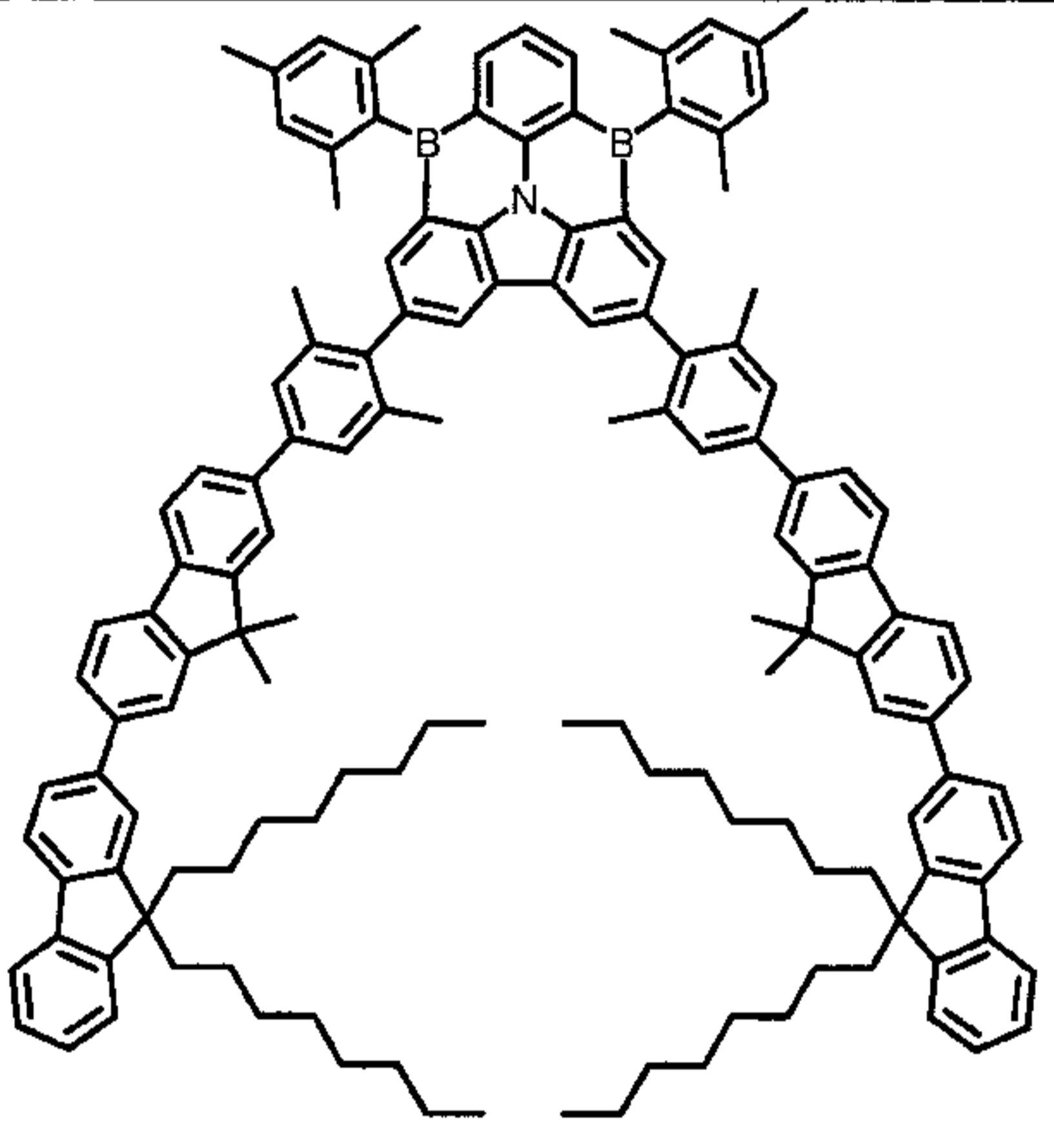
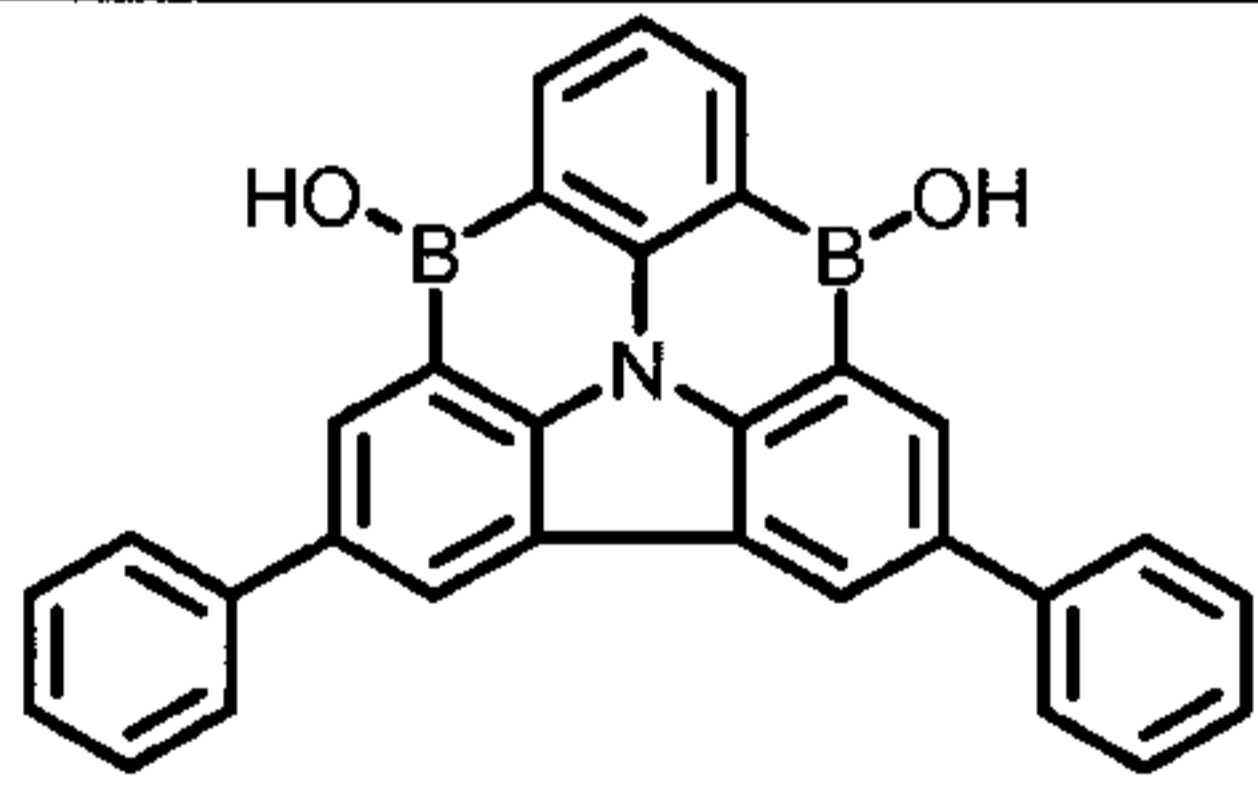
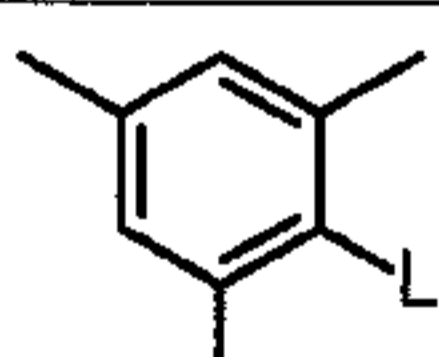
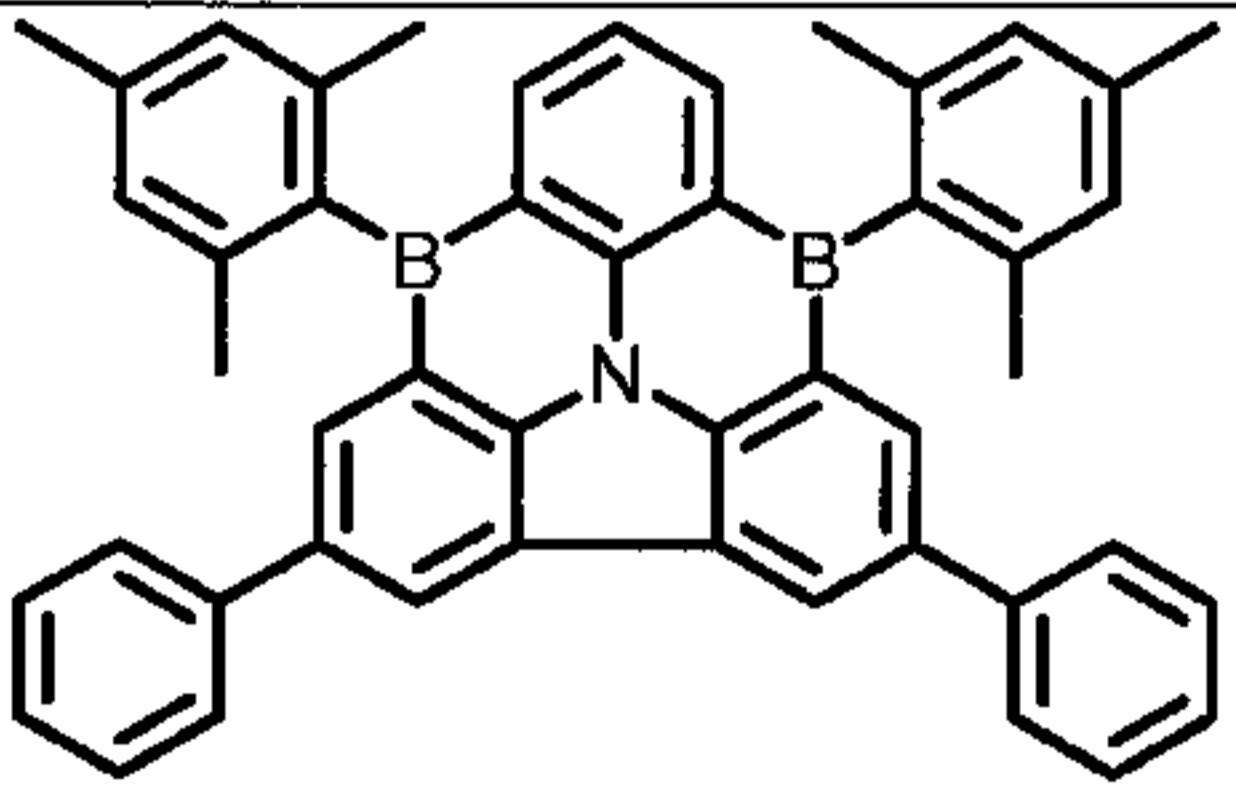
表5：式[16]中所包含的中間體之合成

	起始材料 [15]		產物 [16]
15a		16a	
15b		16b	
15c		16c	

以類似於化合物 1[5]之合成進行第六步驟。表 6 中所  
示的產物 [18]可使用個別的起始材料 [16]及鋰化芳基取代  
基 ArLi 來獲得。



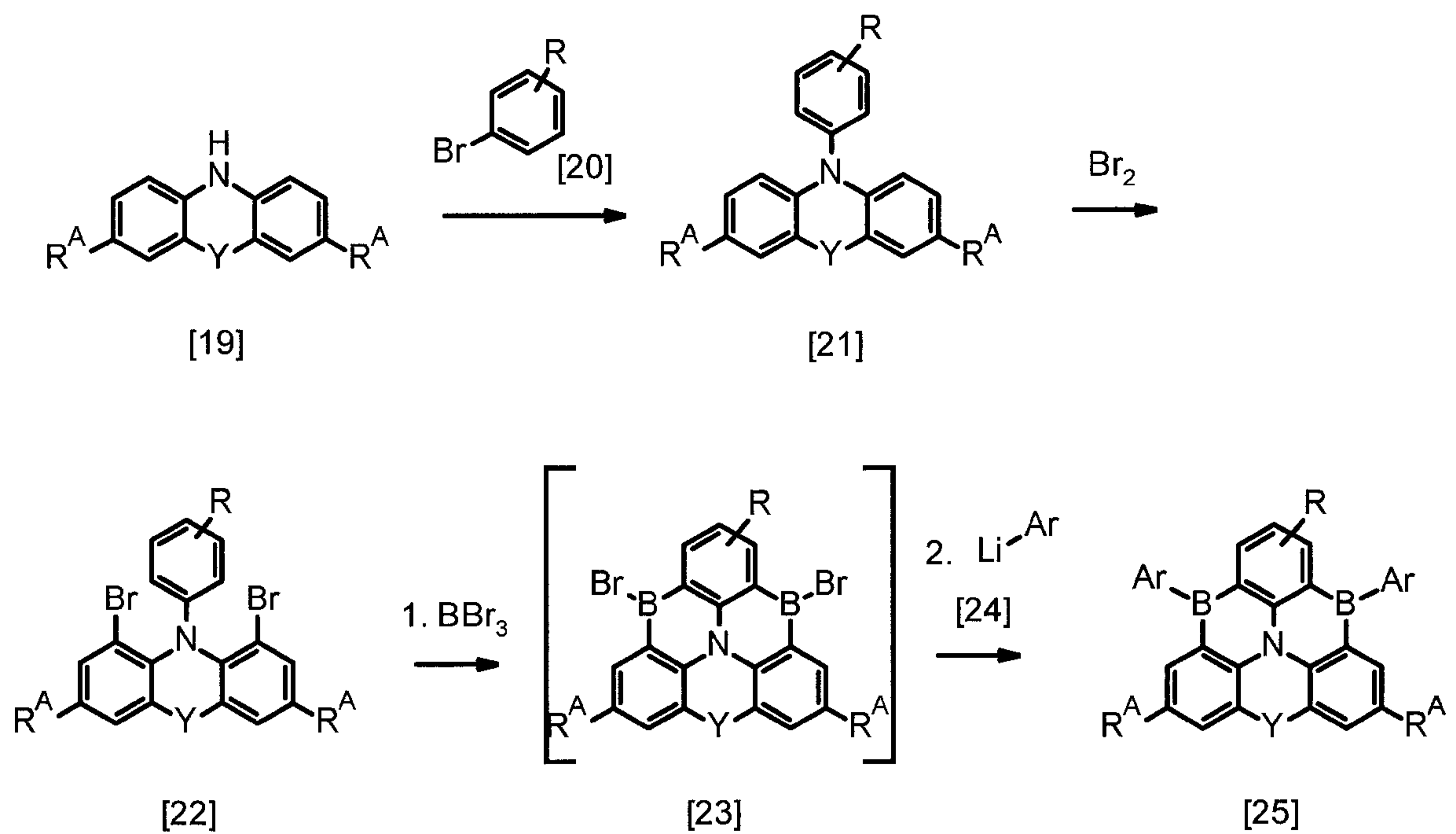
表6：式[18]中所包含的化合物4至6之合成

	起始材料 [16]	ArLi		產物 [18]
16a		 [5806-59-7]	18a	 化合物 4
16b		 [5806-59-7]	18b	 化合物 5
16c		 [5806-59-7]	18c	 化合物 6

## 實例 7 至 實例 9：

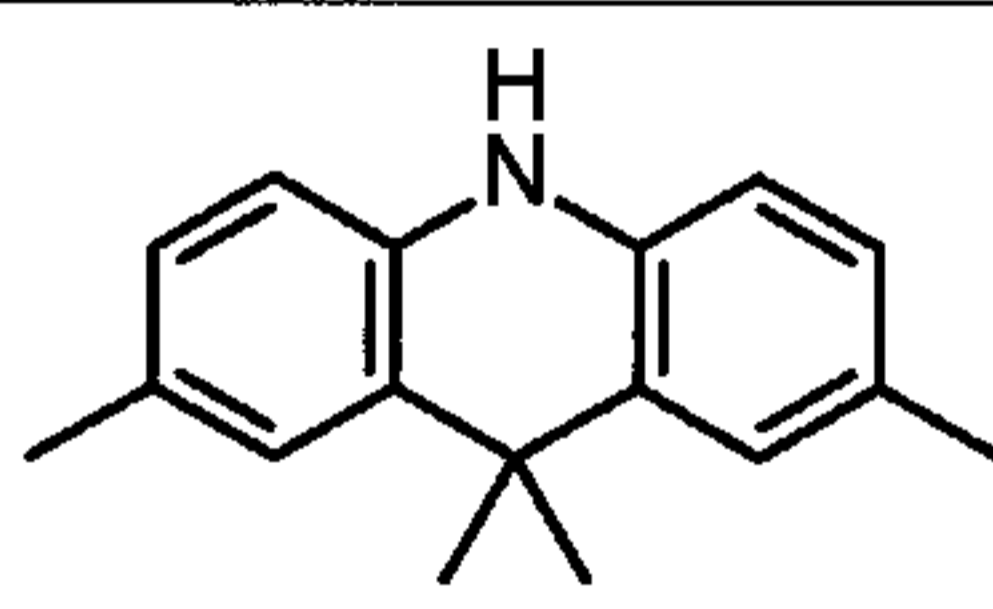
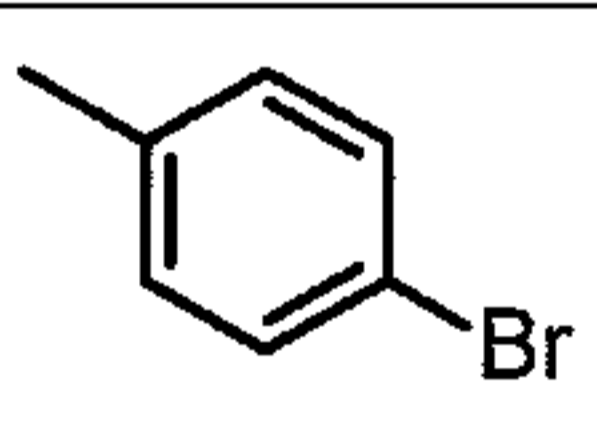
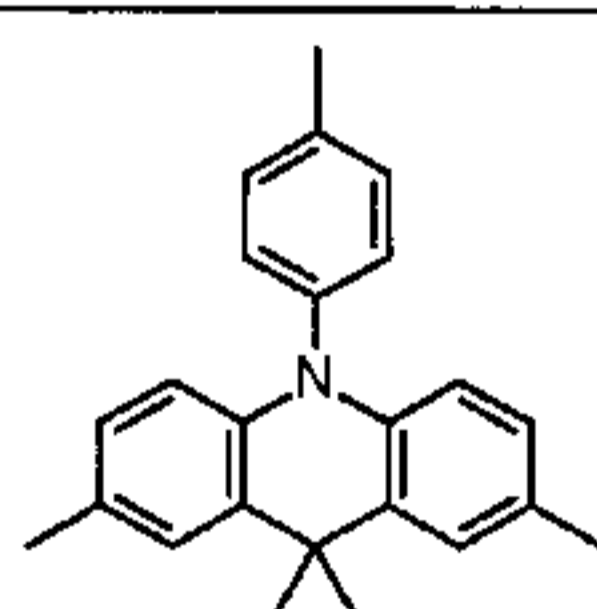
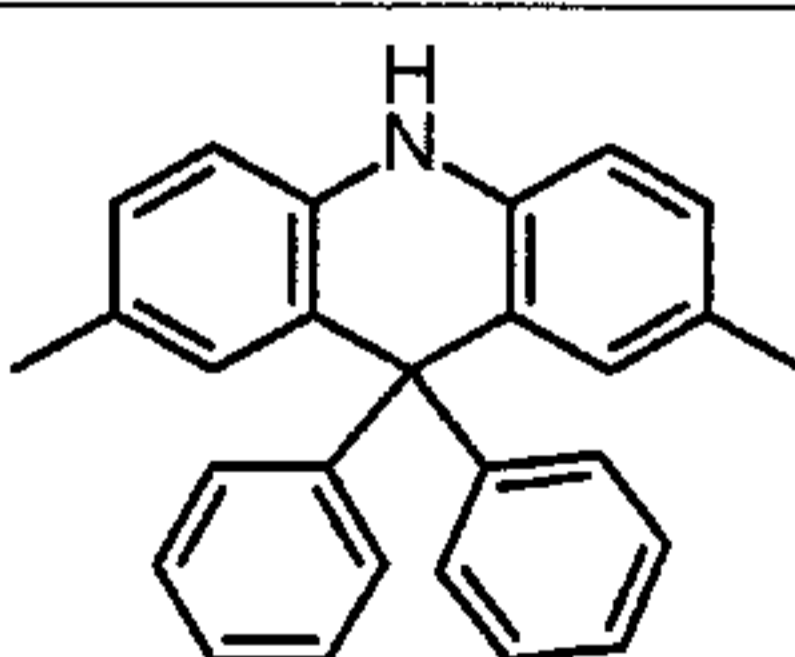
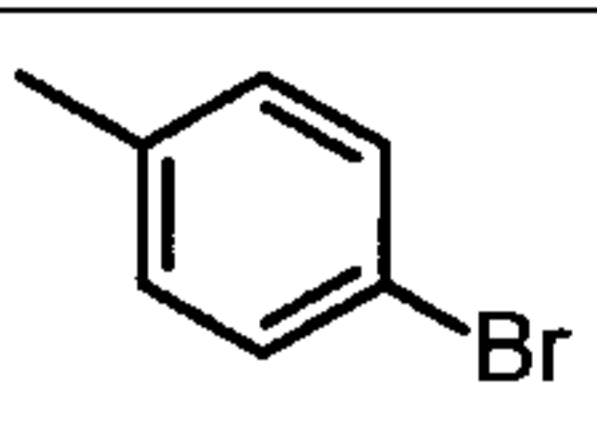
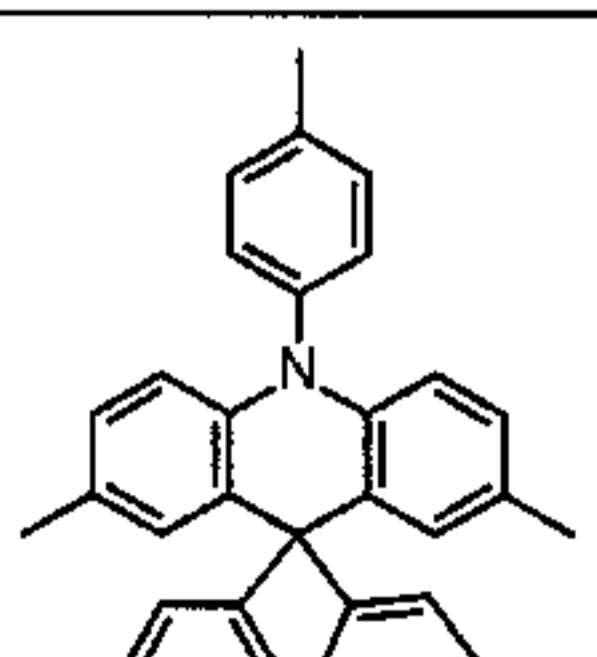
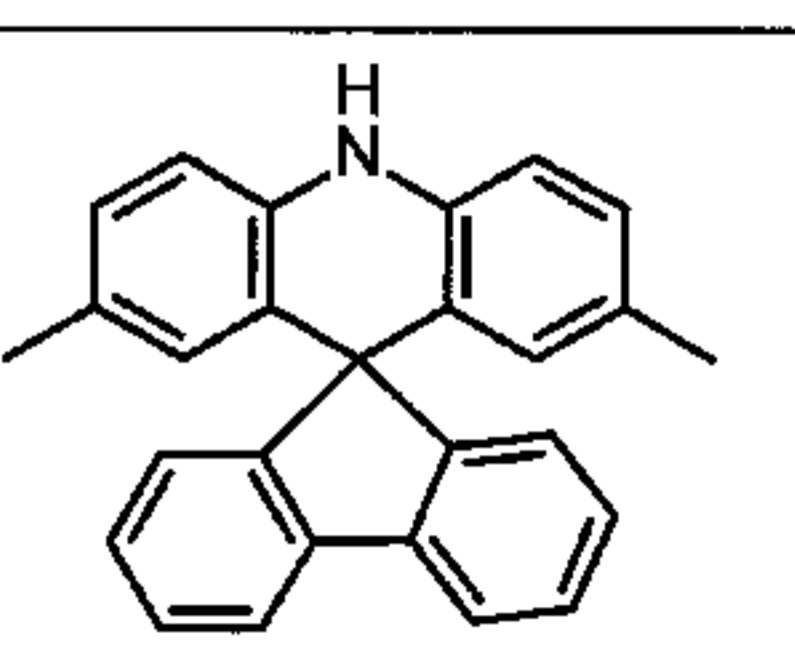
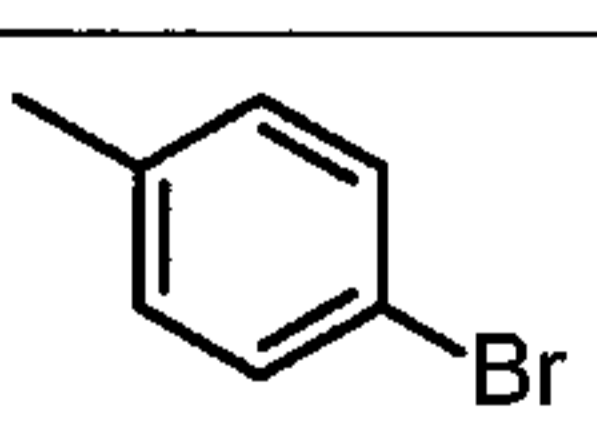
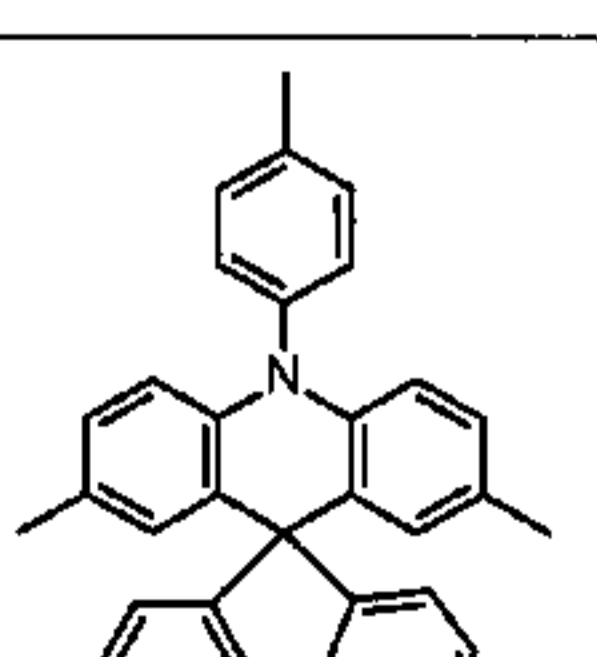
可使用一般合成路徑 2，採用上述方法合成其他實例，如下：





可以類似於如上所述之咪唑[7]合成表7中所列之產物[21]。

表7：式[21]中所包含的中間體之合成

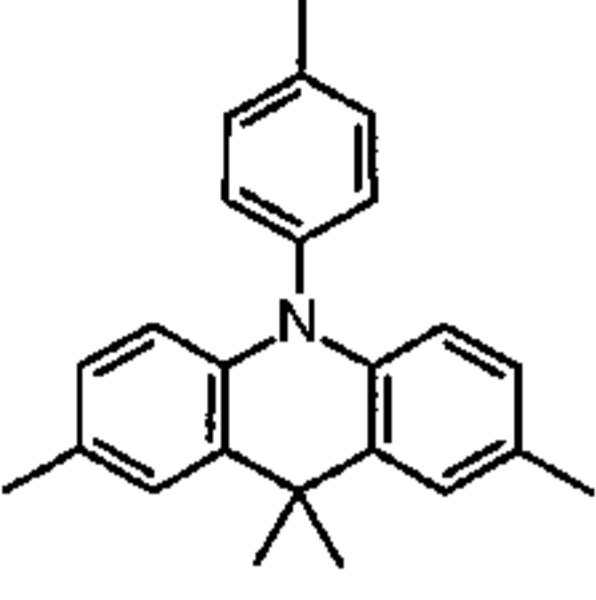
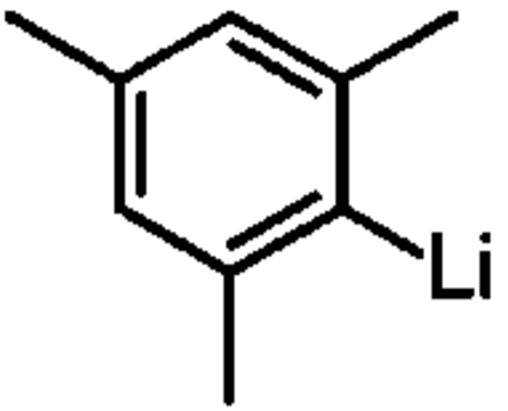
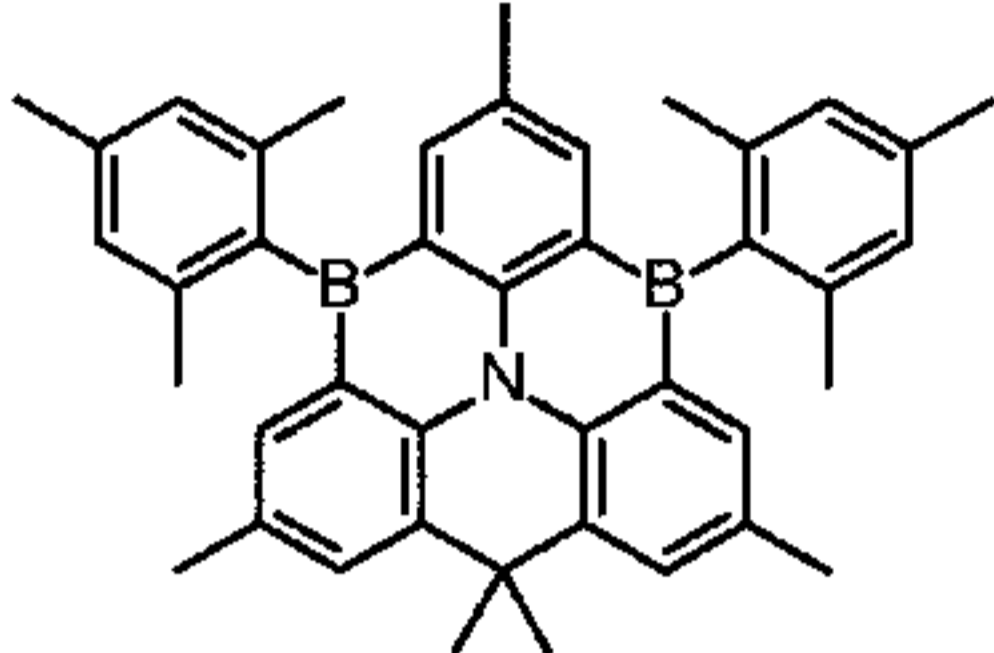
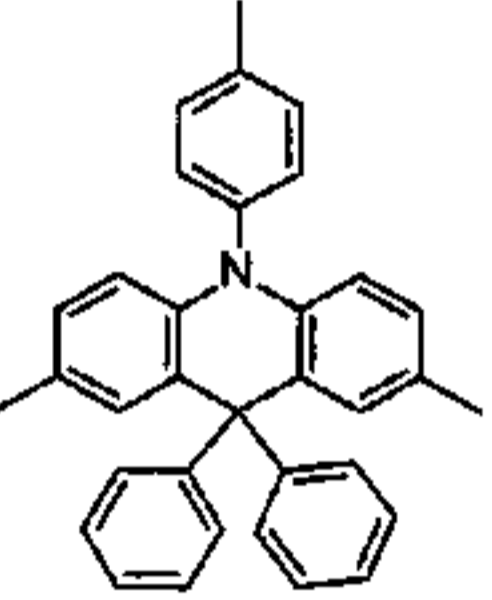
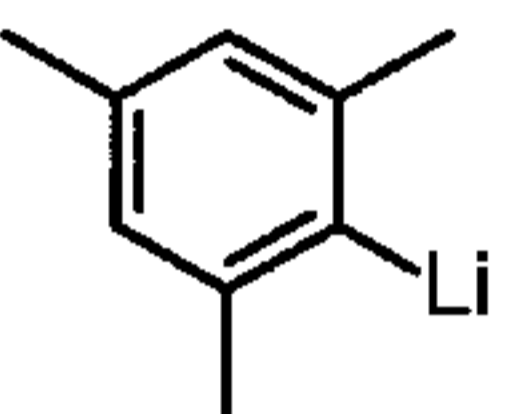
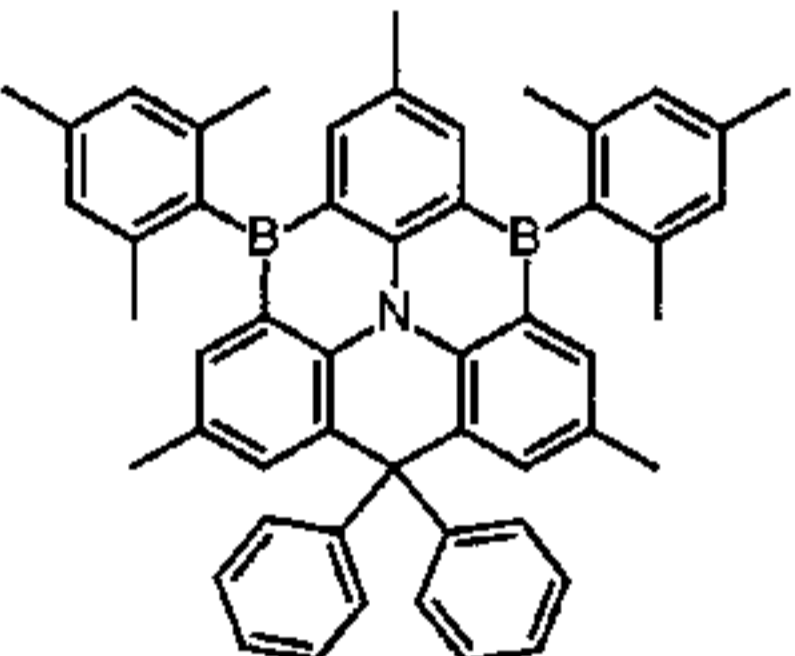
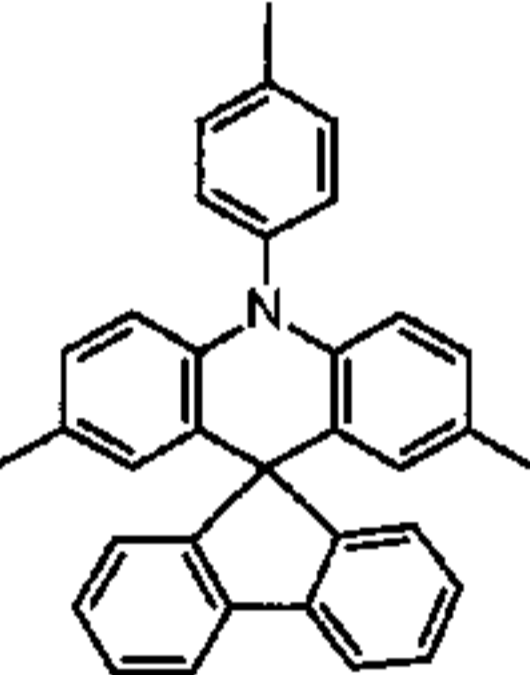
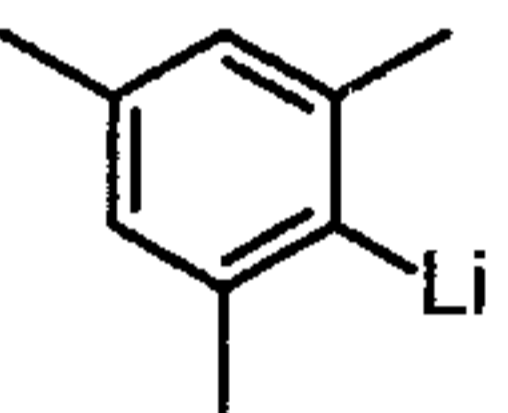
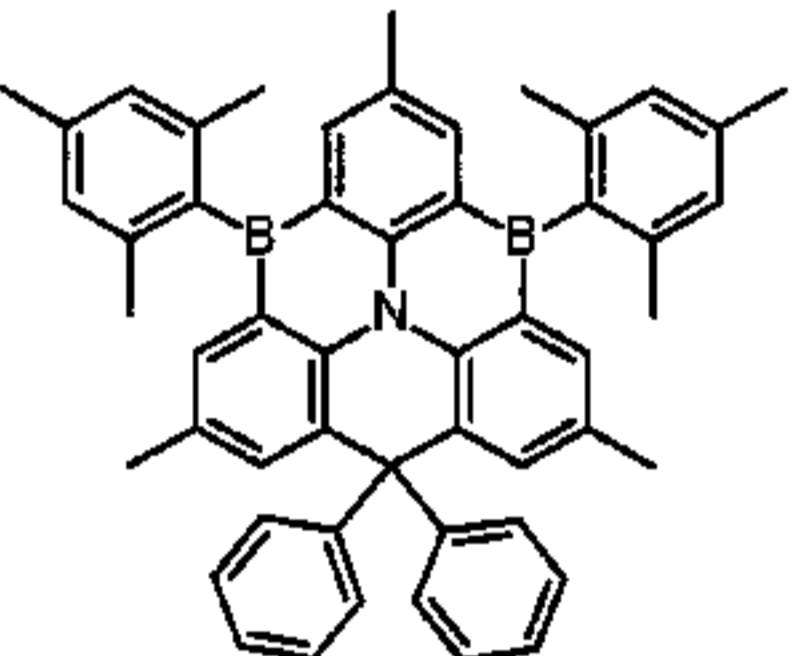
	起始材料 [19]		起始材料 [20]		產物 [21]
19a	 [92638-85-2]	20a	 [106-38-7]	21a	
19b	 [92638-87-4]	20b	 [106-38-7]	21a	
19c	 [92638-88-5]	20c	 [106-38-7]	21c	

可以類似於如上所述之溴化物[8]及化合物3 [9]合成



表 8 中所列之產物 [25]。

表 8：式 [25] 中所包含的化合物 7 至 9 之合成

	起始材料 [21]		起始材料 [24]		產物 [25]
21a		24a	 [5806-59-7]	25a	 化合物 7
21b		24b	 [5806-59-7]	25b	 化合物 8
21c		24c	 [5806-59-7]	25c	 化合物 9

## 實例 10：光物理測量

### 判定峰值發射波長 $\lambda_{\max}$

為了判定螢光發射體的峰值發射波長，將螢光發射體溶解於甲苯中。使用 1 mg/100 mL 之濃度。將溶液在螢光光譜儀 Hitachi F-4500 中以與材料匹配的波長激發。在室溫下進行測量。峰值發射波長  $\lambda_{\max}$  係發射光譜 (圖 1) 第一個最大值的波長。一般而言，第一最大值亦是光譜的全域最大值 (global maximum)。



## 2.) 判定光譜寬度 (半高寬 (full width at half maximum, FWHM))

為了判定螢光發射體的光譜寬度，將在峰值發射波長的最大值 ( $y=0.5$ ) 一半處的波長 ( $X1$ ,  $X2$ ) 之值 (圖 2) 相減。根據式 (1) 計算半高寬：

$$\text{FWHM} = X2 - X1 \quad (1)$$

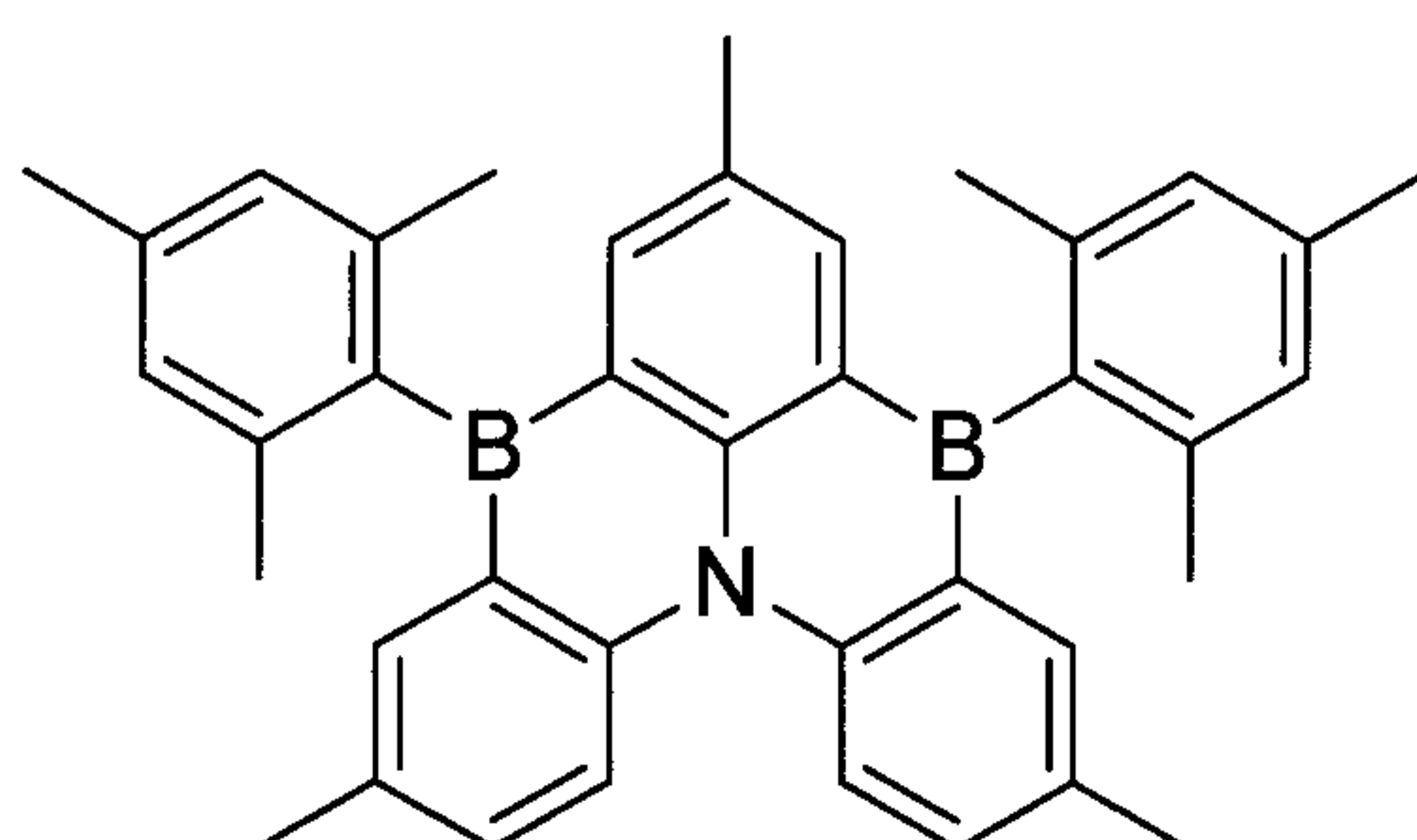
根據所述方法，獲得螢光發射體之下列性質並描述於表 9 中。

表 9：螢光發射體之性質

材料	$\lambda_{\max}$ [nm]	FWHM [nm]	CIE y
化合物 1	422	17	0.03
化合物 2	416	15	0.01
化合物 3	448	14	0.04
實例-1-3-2	478	37	0.19

如下所述之實例 -1-3-2 的性質示於 JNC 之 WO18047639A1 中。所有本發明之化合物均顯示較窄的光譜，並因此具有較高的色純度。

WO18047639A1 中實例 -1-3-2 之化學結構：





### 3.) OLED之製造

將塗覆有結構化ITO(50 nm，氧化銦錫)之玻璃板進行濕洗(洗碗機，Merck Extran清洗劑)。然後將基板在氮氣下在250°C下加熱15分鐘。

將所有材料在真空室內進行熱蒸鍍。在此情況下，發光層總是由兩種材料組成。諸如H-01(95%):C-3(5%)之表示意指在發光層中，材料H-01存在的體積分率為95%，材料化合物3(C-3)存在的體積分率為5%。

OLED由下列層序列組成，該層序列在熱處理後應用於基材：20 nm HTM(95%):p-D(5%)，160 nm HTM，20 nm 發光層，10 nm ETM，20 nm ETM(50%):LiQ(50%)，1 nm LiQ，100 nm鋁。於表10中給出發光層之組成。OLED製造所使用的材料列於表11中。

OLED係以標準方法示性。為此目的，記錄電致發光光譜並測量電流-電壓-發光密度特性(IUL)。(發光密度垂直於基材測量。)假設朗伯發射，計算外部量子效率(EQE)作為發光密度的函數。標記U100表示亮度為100 cd/m<sup>2</sup>所需的電壓。EQE100是指工作亮度為100 cd/m<sup>2</sup>時的外部量子效率。

此外，從電致發光光譜計算出CIE 1931 x和y顏色坐標(CIE x及CIE y)。於表10中給出OLED性能數據。

表10中示出，通過在發光層中使用本發明之化合物3(C-3)作為發射體，獲得了非常好的EQE和低電壓。

OLED顯示深藍色。性能數據僅取決於發光層中發射



體的濃度。結果是處理窗口大，從裝置製造及顯示器應用的角度來看其係一項優點。

表10：單一裝置實驗的發光層的組成及OLED性能結果

編號.	發光層	EQE100 [%]	U100 [V]	CIE x	CIE y
1	H-01(99%):C-3(1%)	9.6	3.2	0.151	0.030
2	H-01(98%):C-3(2%)	9.8	3.2	0.151	0.030
3	H-01(97%):C-3(3%)	10.0	3.2	0.151	0.030
4	H-01(95%):C-3(5%)	9.7	3.1	0.150	0.031
5	H-01(93%):C-3(7%)	9.7	3.1	0.150	0.031
6	H-01(90%):C-3(10%)	9.0	3.1	0.150	0.031
7	H-01(85%):C-3(15%)	8.3	3.0	0.150	0.031
8	H-01(80%):C-3(20%)	7.7	3.0	0.150	0.031



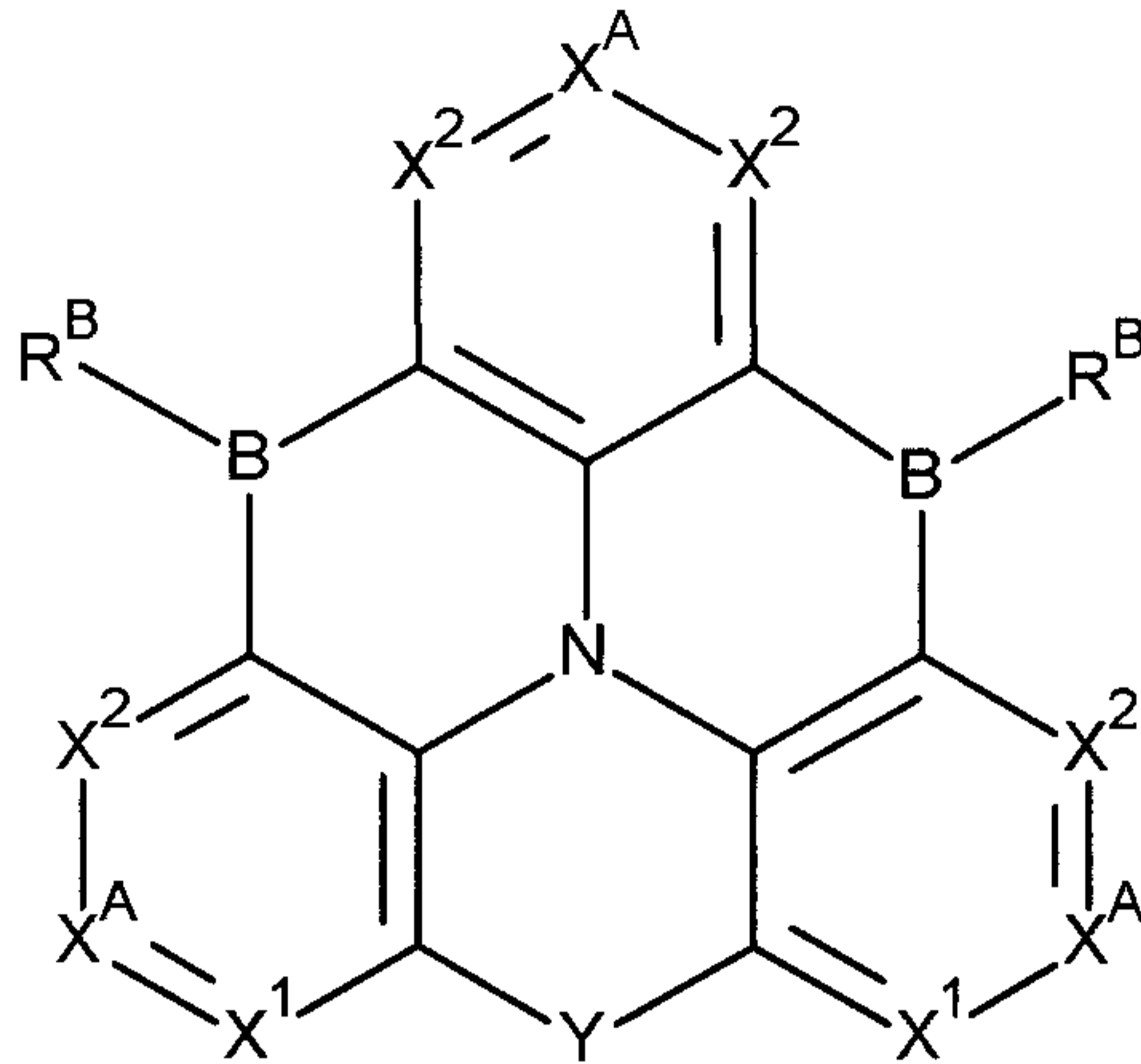
表11：用於OLED製造之材料的結構

<p>HTM</p>	<p>p-D [US2010102709A1; WO2015007729A1]</p>
<p>ETM</p>	<p>LiQ</p>
<p>H-01</p>	<p>C-3</p>



## 【發明申請專利範圍】

【請求項1】一種式(1)之化合物，



式(1)

其中下列適用於所使用之符號及標號：

$X^1$  在每次出現時相同或不同地代表  $CR^1$  或 N ；

$X^2$  在每次出現時相同或不同地代表  $CR^2$  或 N ；

$X^A$  在每次出現時相同或不同地代表  $CR^A$  或 N ；

Y 係單鍵或選自下列之伸烷基： $-C(R^Y)_2-$ 、  
 $-C(R^Y)_2-C(R^Y)_2-$ ；

$R^B$  在每次出現時相同或不同地代表 CN、 $N(Ar)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $S(=O)Ar$ 、 $S(=O)_2Ar$ 、 $N(R)_2$ 、 $Si(R)_3$ 、 $OSO_2R$ 、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基(thioalkoxy)、或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基、或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團 R 取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $CH_2$  基團可經  $RC=CR$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、



$P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 置換，且其中一或多個 $H$ 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基團 $R$ 取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳氧基(其可經一或多個基團 $R$ 取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個 $R$ 基團取代)；

$R^Y$  在每次出現時相同或不同地代表 $H$ 、 $D$ 、 $F$ 、 $Cl$ 、 $Br$ 、 $I$ 、 $CHO$ 、 $CN$ 、 $N(Ar)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $S(=O)Ar$ 、 $S(=O)_2Ar$ 、 $NO_2$ 、 $N(R)_2$ 、 $Si(R)_3$ 、 $B(OR)_2$ 、 $OSO_2R$ 、具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有2至40個碳原子之烯基或炔基、或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團 $R$ 取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰 $CH_2$ 基團可經 $RC=CR$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $Sn(R)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R)$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $O$ 、 $S$ 或 $CONR$ 置換，且其中一或多個 $H$ 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基團 $R$ 取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳氧基(其可經一或多個基團 $R$ 取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳



烷基或雜芳烷基(其可經一或多個R基團取代);  
其中兩個相鄰取代基R<sup>Y</sup>可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團R'取代);

R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>A</sup> 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、Cl、Br、I、CHO、CN、N(Ar)<sub>2</sub>、C(=O)Ar、P(=O)(Ar)<sub>2</sub>、S(=O)Ar、S(=O)<sub>2</sub>Ar、NO<sub>2</sub>、Si(R)<sub>3</sub>、B(OR)<sub>2</sub>、OSO<sub>2</sub>R、具有1至40個C原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有3至40個C原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團R取代,其中在各情況下,一或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基團可經RC=CR、C≡C、Si(R)<sub>2</sub>、Ge(R)<sub>2</sub>、Sn(R)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R)、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR置換,且其中一或多個H原子可經D、F、Cl、Br、I、CN或NO<sub>2</sub>置換)、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基團R取代)、具有5至60個芳族環原子之芳氧基(其可經一或多個基團R取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個基團R取代);其中兩個選自R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>A</sup>之相鄰基團可形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可經一或多個基團R取代);

R 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、Cl、



Br、I、CHO、CN、N(Ar)<sub>2</sub>、C(=O)Ar、  
P(=O)(Ar)<sub>2</sub>、S(=O)Ar、S(=O)<sub>2</sub>Ar、NO<sub>2</sub>、Si(R')<sub>3</sub>  
、B(OR')<sub>2</sub>、OSO<sub>2</sub>R'、具有1至40個C原子之直鏈  
烷基、烷氧基或烷硫基、或具有3至40個C原子之  
支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經  
一或多個基團R'取代，其中在各情況下，一或多  
個非相鄰CH<sub>2</sub>基團可經R'C=CR'、C≡C、Si(R')<sub>2</sub>  
、Ge(R')<sub>2</sub>、Sn(R')<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、  
P(=O)(R')、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR'置換，且其  
中一或多個H原子可經D、F、Cl、Br、I、CN或  
NO<sub>2</sub>置換)、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基團R'  
取代)、或具有5至60個芳族環原子之芳氧基(其可  
經一或多個基團R'取代)；其中兩個相鄰基團R可  
形成單環或多環脂族環系統或芳族環系統(其可  
經一或多個基團R'取代)；

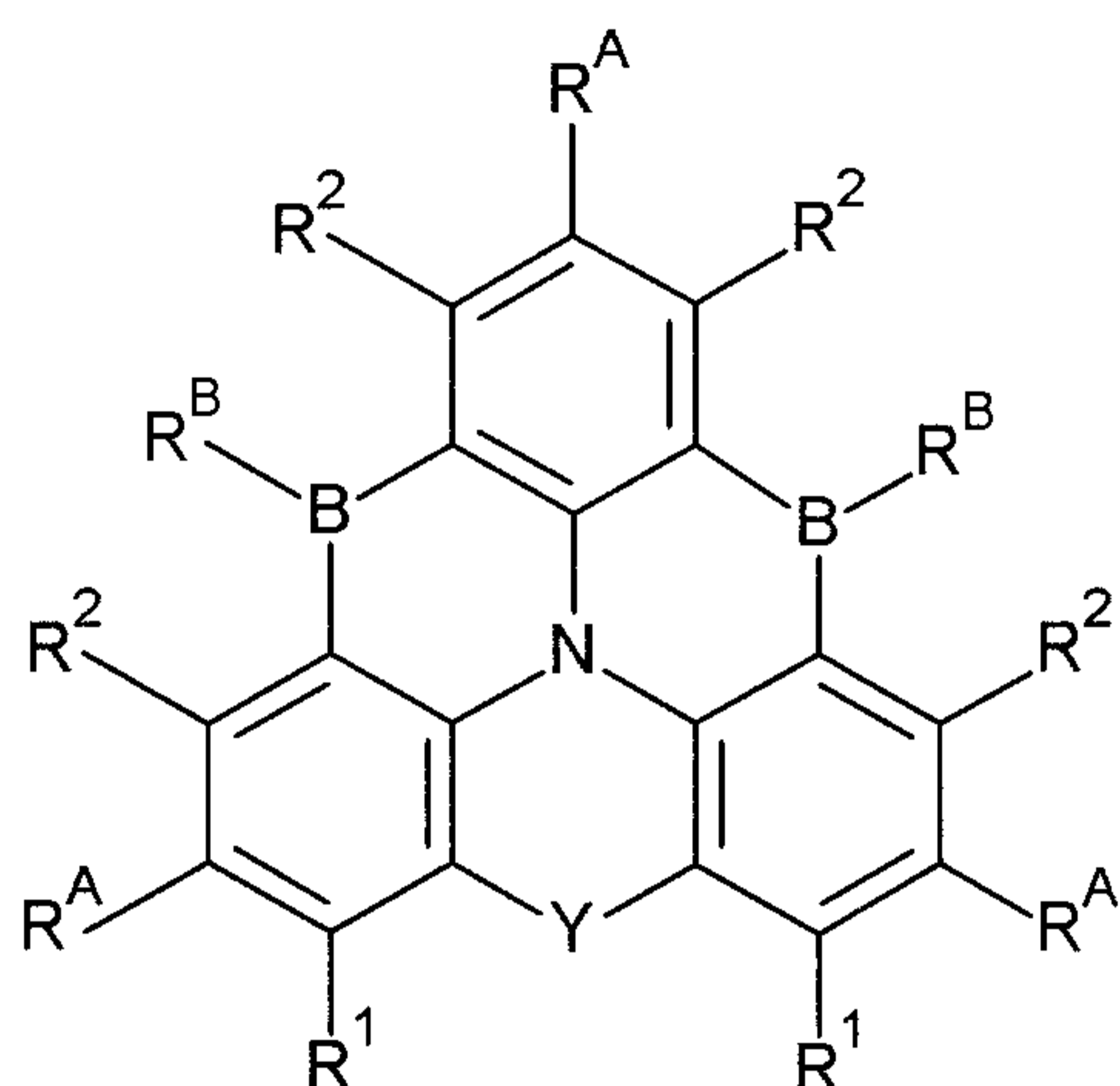
**Ar** 在每次出現時相同或不同地係具有5至24個芳族  
環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下亦  
可經一或多個基團R'取代；

**R'** 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、Cl、  
Br、I、CN、具有1至20個C原子之直鏈烷基、烷  
氧基或烷硫基、或具有3至20個C原子之支鏈或環  
狀烷基、烷氧基或烷硫基(其中在各情況下，一  
或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基團可經SO、SO<sub>2</sub>、O、S置



換，且其中一或多個H原子可經D、F、Cl、Br或I置換)、或具有5至24個C原子之芳族或雜芳族環系統。

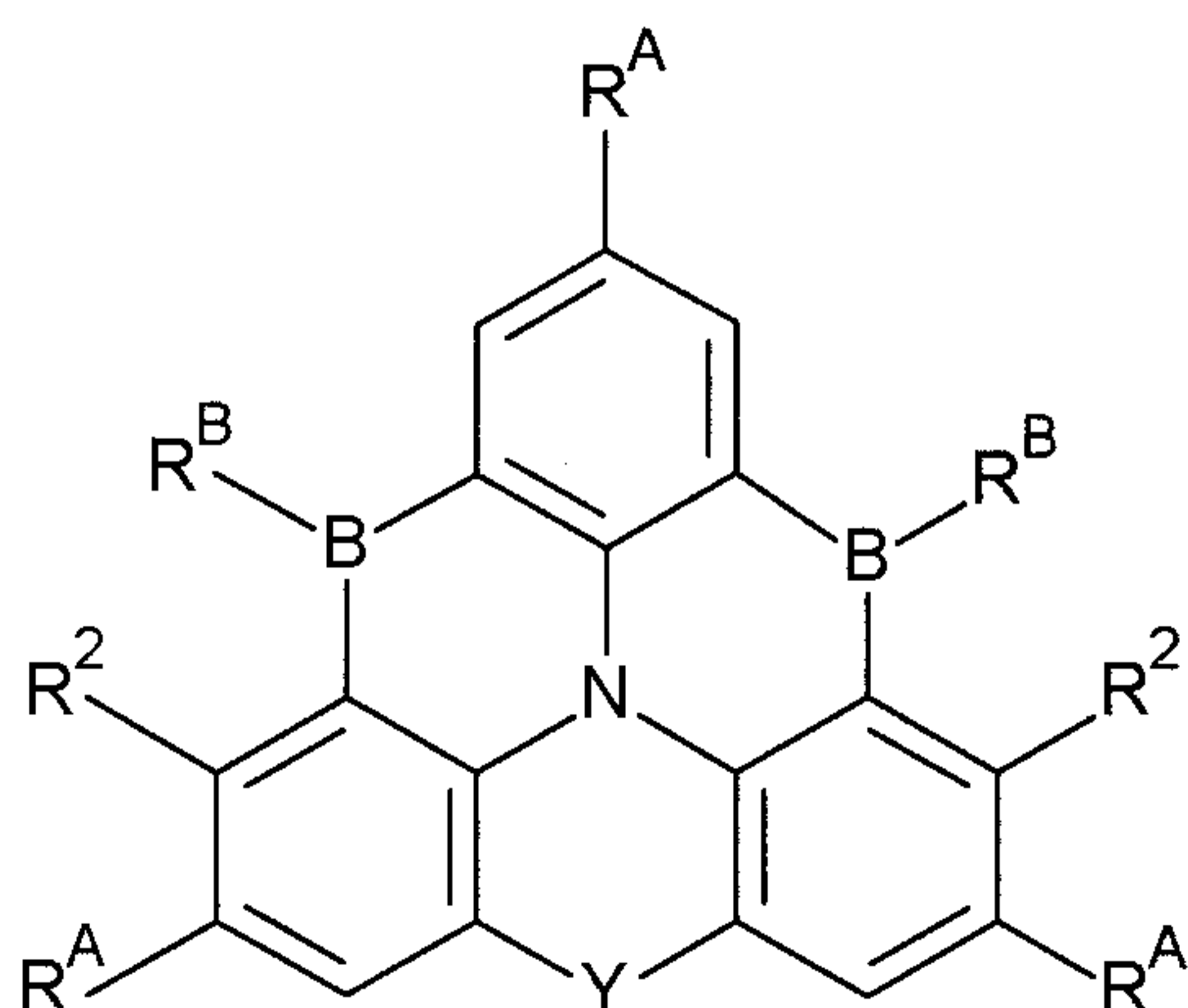
【請求項2】如請求項1之化合物，其中該化合物係選自式(2)之化合物，



式(2)

其中該等符號具有如請求項1中之相同含意。

【請求項3】如請求項1或2之化合物，其中該化合物係選自式(3)之化合物，



式(3)

其中該等符號具有如請求項1中之相同含意。

【請求項4】如請求項1或2之化合物，其中R<sup>B</sup>在每次



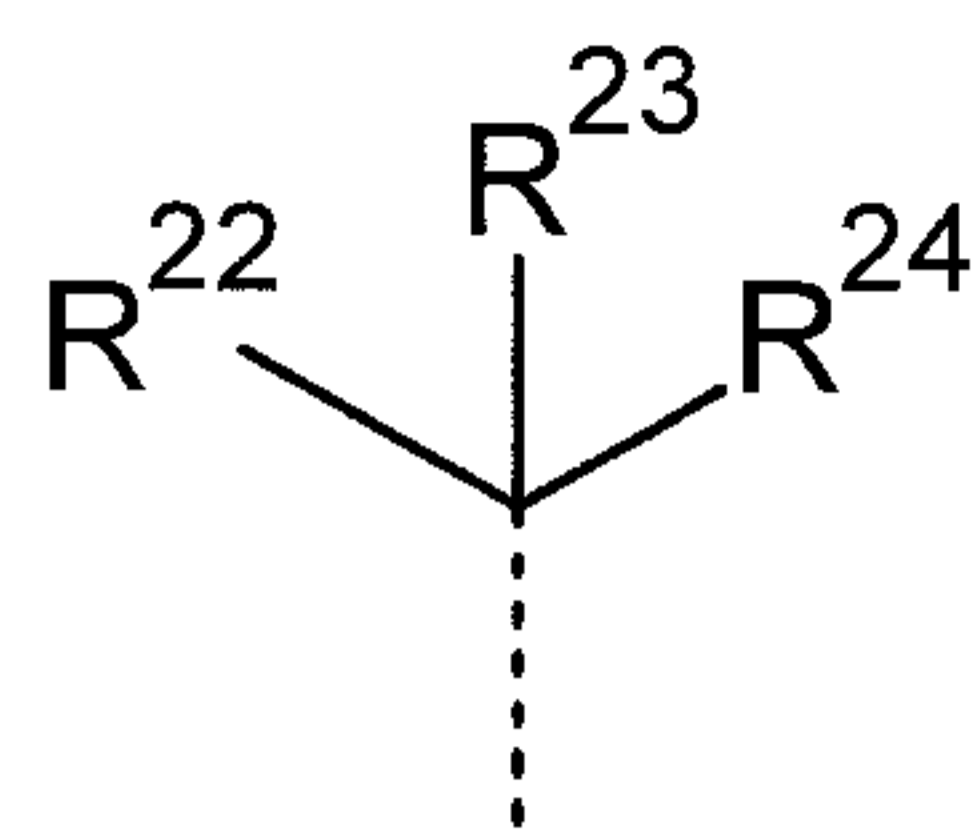
出現時相同或不同地代表具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基、或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團 R 取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $\text{CH}_2$  基團可經  $\text{RC}=\text{CR}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R})_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R})_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R})_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R})$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$  或  $\text{CONR}$  置換，且其中一或多個 H 原子可經  $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{Cl}$ 、 $\text{Br}$ 、 $\text{I}$ 、 $\text{CN}$  或  $\text{NO}_2$  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基團 R 取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個基團 R 取代)。

【請求項 5】如請求項 1 或 2 之化合物，其中基團  $\text{R}^{\text{B}}$  在每次出現時相同或不同地代表具有 1 至 20 個碳原子之直鏈烷基或烷氧基、或具有 2 至 20 個碳原子之烯基或炔基、或具有 3 至 20 個碳原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基(其各者可經一或多個基團 R 取代，其中一或多個 H 原子可經  $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{Cl}$  或  $\text{CN}$  置換)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 R 取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個 R 基團取代)。

【請求項 6】如請求項 1 或 2 之化合物，其中  $\text{R}^{\text{B}}$  在每次出現時相同或不同地選自：

由下列通式 (RS-a) 所表示之支鏈或環狀烷基：





(RS-a)

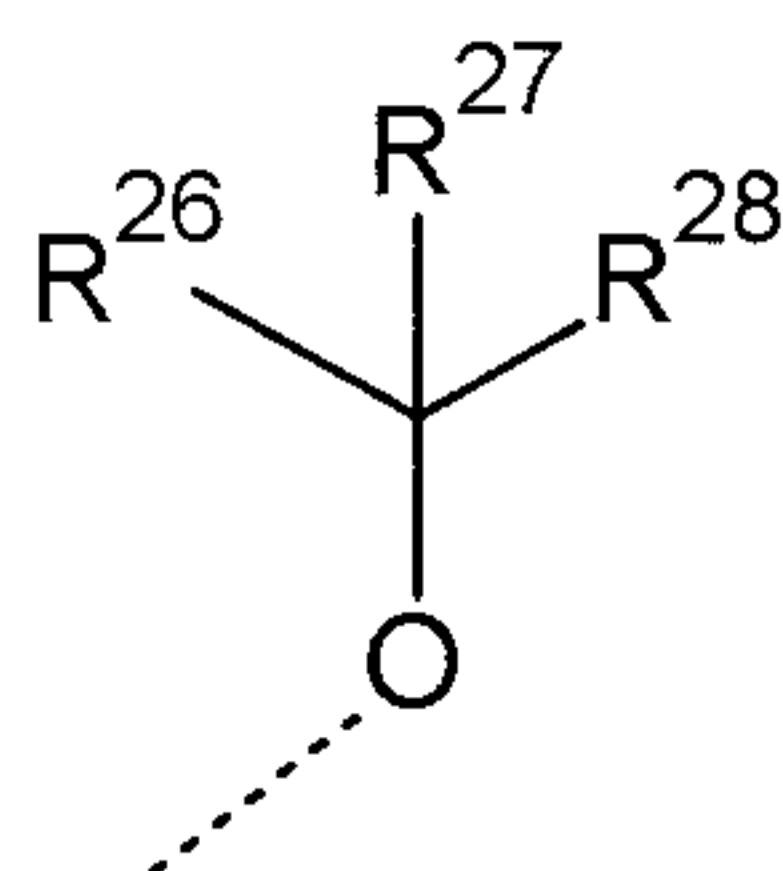
其中

$R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基，其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{25}$ 取代，且其中基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 中之二者或所有基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 可連接而形成(多)環狀烷基(其可經一或多個基團 $R^{25}$ 取代)；

$R^{25}$ 在每次出現時相同或不同地選自具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基；

其先決條件為在每次出現時，基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 及 $R^{24}$ 中之至少一者係非H，其先決條件為在每次出現時，所有基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 及 $R^{24}$ 一起具有至少4個碳原子，以及先決條件為在每次出現時，若基團 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 中之二者係H，則餘留的基團係非直鏈；

或由下列通式(RS-b)所表示之支鏈或環狀烷氧基：



(RS-b)

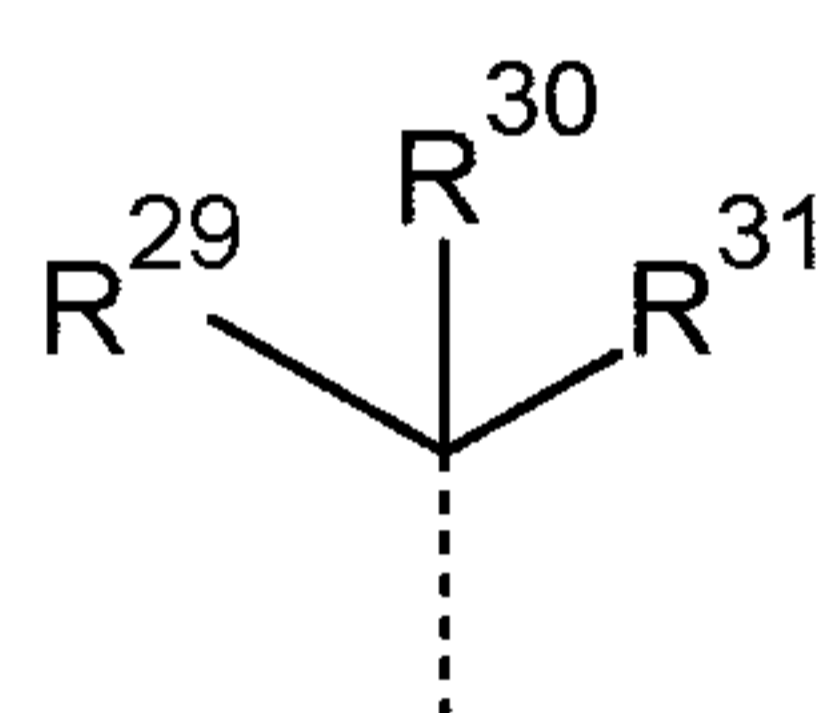


其中

$R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基，其中上述基團可各自經一或多個如上文所定義之基團 $R^{25}$ 取代，且其中基團 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ 中之二者或所有基團 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ 可連接而形成(多)環狀烷基(其可經一或多個如上文所定義之基團 $R^{25}$ 取代)；

其先決條件為在每次出現時，基團 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 及 $R^{28}$ 中僅一者可係H；

或由下列通式(RS-c)所表示之芳烷基：



(RS-c)

其中

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)，且其中二或所有基團 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$ 可連接而形成(多)環狀烷基或芳族環系統(其各者可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)；

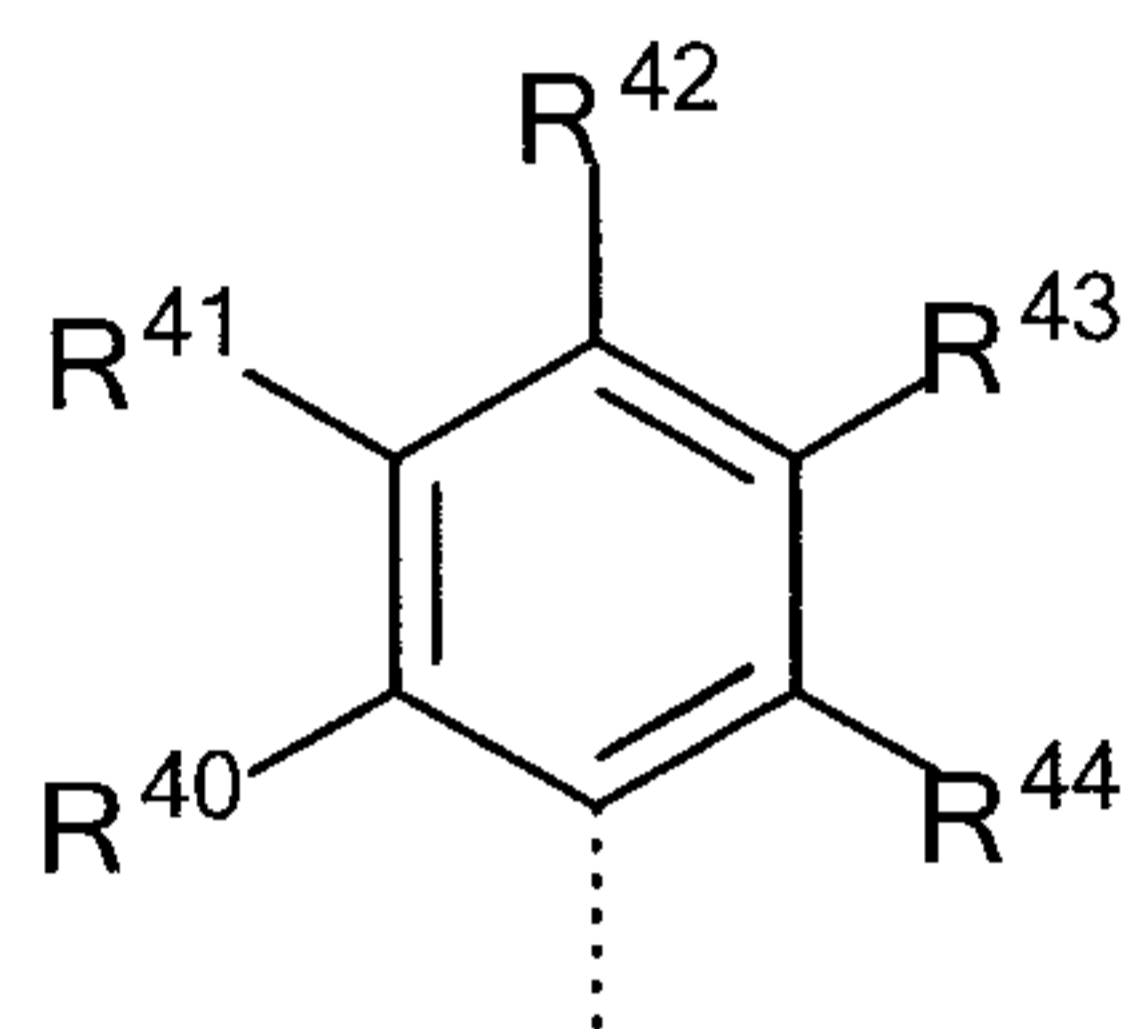
$R^{32}$ 在每次出現時相同或不同地選自具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷



基、或具有6至24個芳族環原子之芳族環系統；

其先決條件為在每次出現時，基團 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 及 $R^{31}$ 中之至少一者係非H，並且在每次出現時，基團 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 及 $R^{31}$ 中之至少一者係或含有具有至少6個芳族環原子之芳族環系統；

或由下列通式(RS-d)所表示之芳族環系統：



(RS-d)

其中

$R^{40}$ 至 $R^{44}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)，且其中二或更多個基團 $R^{40}$ 至 $R^{44}$ 可連接而形成(多)環狀烷基或芳族環系統(其各者可經一或多個如上文所定義之基團 $R^{32}$ 取代)。

【請求項7】如請求項1或2之化合物，其中 $R^2$ 及 $R^A$ 在每次出現時相同或不同地代表H、D、F、Cl、Br、I、CN、 $N(Ar)_2$ 、具有1至40個C原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有3至40個C原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團R取代，其中在各情況



下，一或多個非相鄰  $\text{CH}_2$  基團可經  $\text{RC}=\text{CR}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R})_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R})_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R})_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R})$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$  或  $\text{CONR}$  置換，且其中一或多個  $\text{H}$  原子可經  $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{Cl}$ 、 $\text{Br}$ 、 $\text{I}$ 、 $\text{CN}$  或  $\text{NO}_2$  置換)，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基團  $\text{R}$  取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個基團  $\text{R}$  取代)。

【請求項 8】如請求項 1 或 2 之化合物，其中  $\text{R}^2$  及  $\text{R}^A$  在每次出現時相同或不同地代表  $\text{H}$ 、 $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{CN}$ 、具有 1 至 40 個  $\text{C}$  原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基、或具有 3 至 40 個  $\text{C}$  原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基(其各者可經一或多個基團  $\text{R}$  取代，其中在各情況下，一或多個非相鄰  $\text{CH}_2$  基團可經  $\text{RC}=\text{CR}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{O}$  或  $\text{S}$  置換，且其中一或多個  $\text{H}$  原子可經  $\text{D}$ 、 $\text{F}$  置換)、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基團  $\text{R}$  取代)、或具有 5 至 60 個芳族環原子之芳烷基或雜芳烷基(其可經一或多個  $\text{R}$  基團取代)。

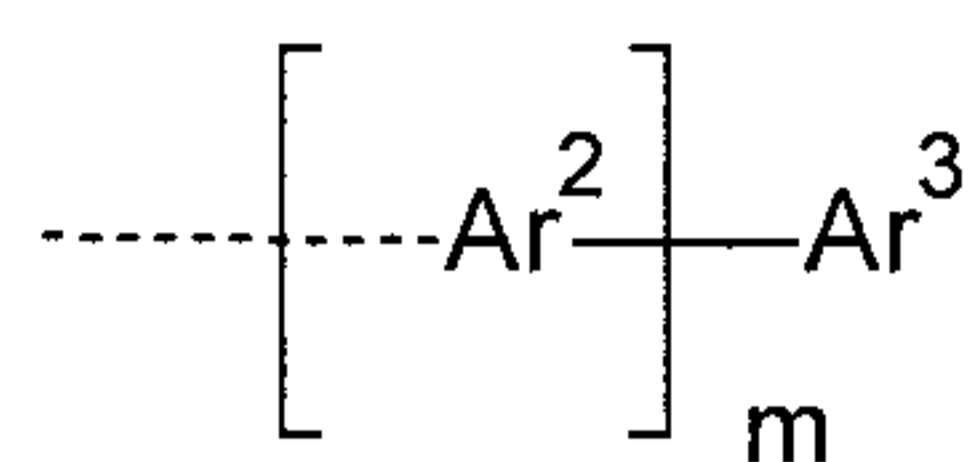
【請求項 9】如請求項 1 或 2 之化合物，其中  $\text{R}^2$  及  $\text{R}^A$  在每次出現時相同或不同地代表：

$\text{H}$ 、 $\text{D}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{CN}$ ；或

式 (RS-a) 之基團、式 (RS-b) 之基團、式 (RS-c) 之基團或式 (RS-d) 之基團，其中式 (RS-a)、(RS-b)、(RS-c) 及 (RS-d) 之基團具有如請求項 6 之相同定義；或

式 (ArL-1) 之基團，

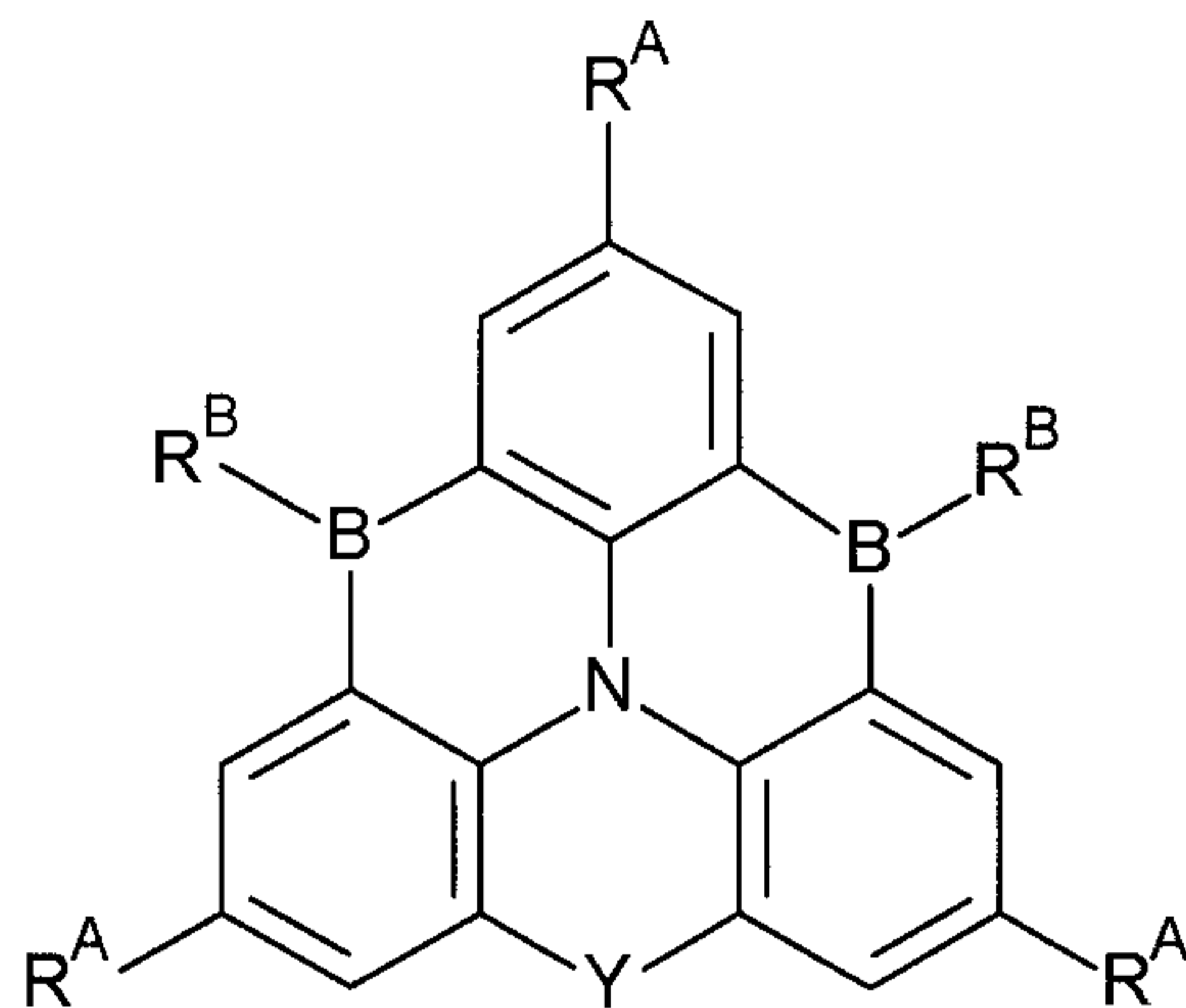




式 (ArL-1)

其中式 (ArL-1) 中之虛線鍵表示至式 (1) 結構之鍵結，其中  $\text{Ar}^2$ 、 $\text{Ar}^3$  在每次出現時相同或不同地代表具有 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基團  $\text{R}$  取代)；且其中  $m$  係選自 1 至 10 之整數。

【請求項 10】如請求項 1 或 2 之化合物，其中該化合物係選自式 (4) 之化合物，



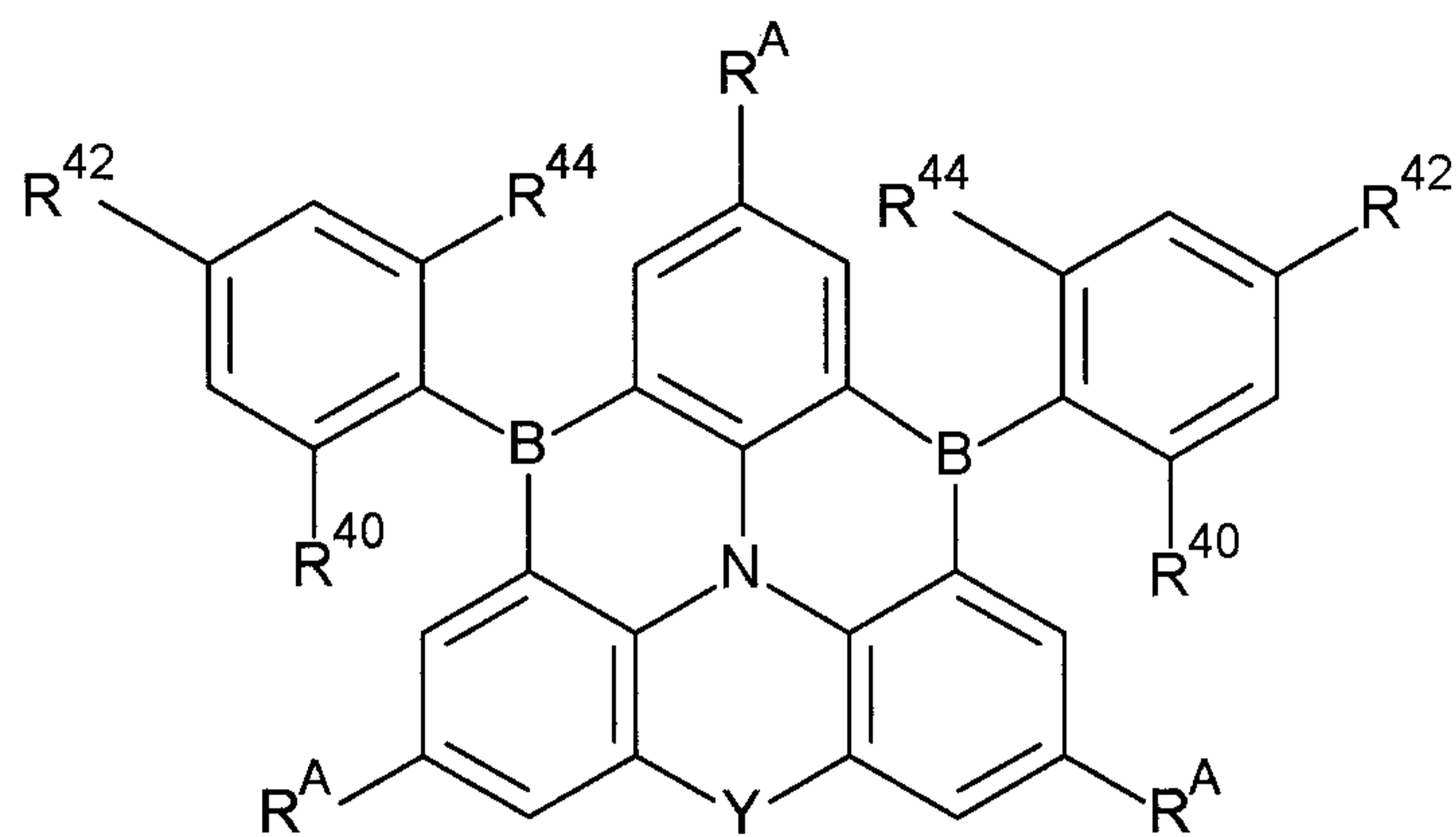
式 (4)

其中該等符號具有如請求項 1 中之相同含意。

【請求項 11】如請求項 1 或 2 之化合物，其中  $\text{R}^B$  及  $\text{R}^A$  在每次出現時相同或不同地選自式 (RS-a)、(RS-b)、(RS-c) 及 (RS-d) 之基團，其中式 (RS-a)、(RS-b)、(RS-c) 及 (RS-d) 之基團具有如請求項 6 之相同定義。

【請求項 12】如請求項 1 或 2 之化合物，其中該化合物係選自式 (5) 或 (6) 之化合物，





式 (5)

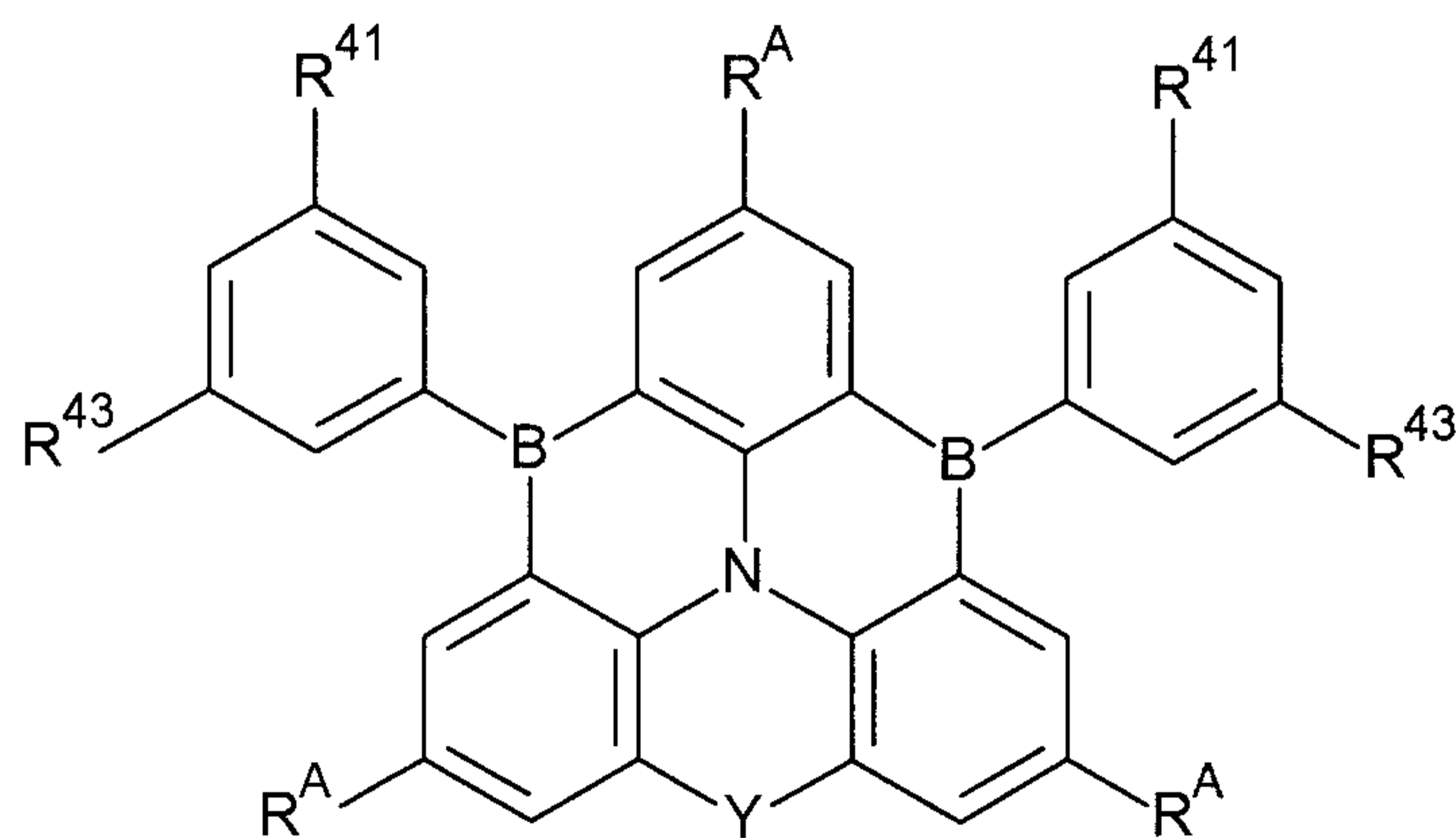
其中基團  $R^A$  具有如請求項 1 中之相同含意，且

其中，在式 (5) 中，

$R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自 H、具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基 (其中上述基團可各自經一或多個基團  $R^{32}$  取代)、或具有 6 至 30 個芳族環原子之芳族環系統 (其在各情況下可經一或多個基團  $R^{32}$  取代)；其中  $R^{32}$  係如請求項 6 中所定義；

其先決條件為  $R^{40}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{44}$  中之至少一者係非 H；

或



式 (6)

其中，在式 (6) 中，



$R^{41}$ 、 $R^{43}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代);其中 $R^{32}$ 係如請求項6中所定義;

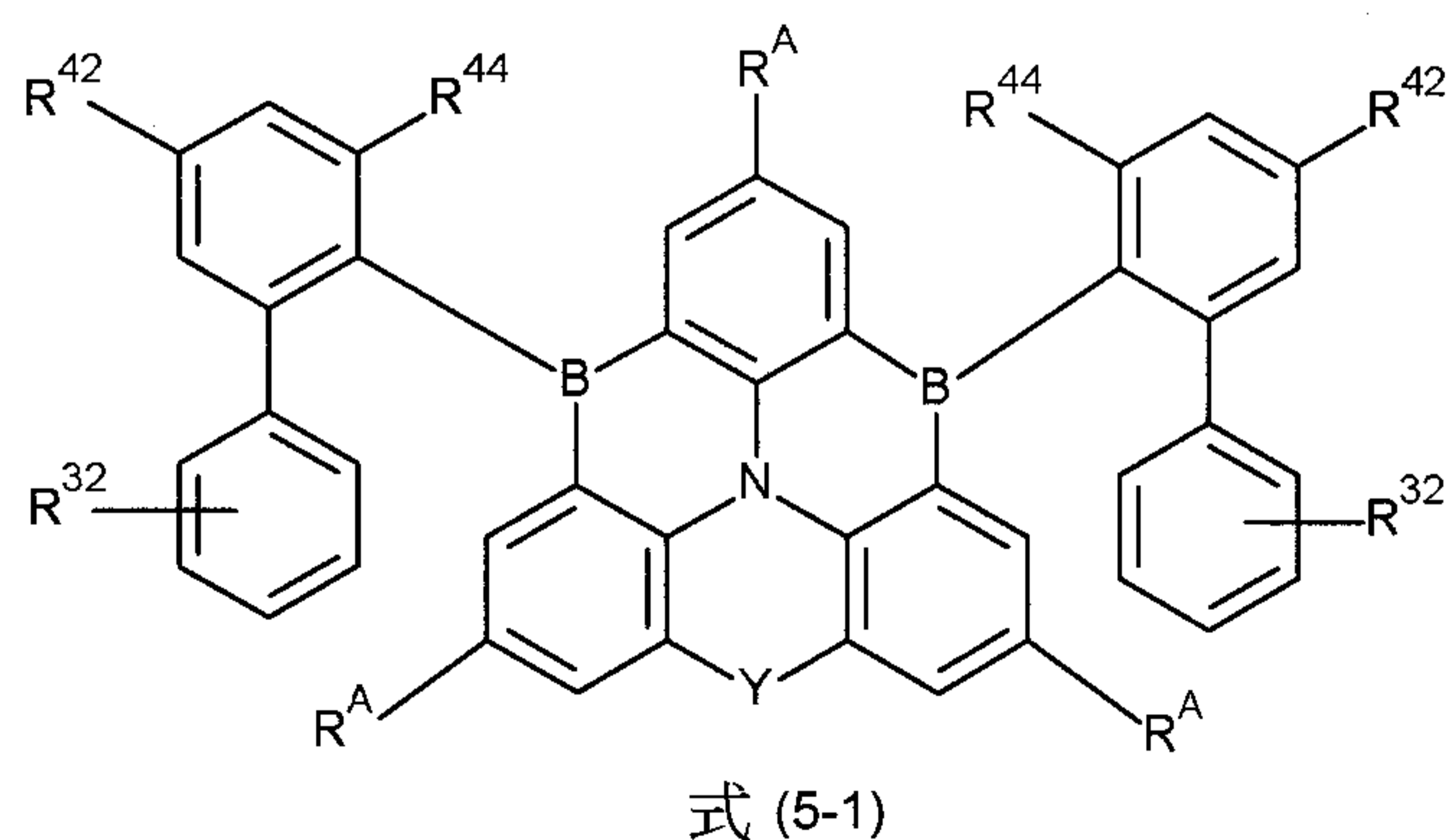
其先決條件為 $R^{41}$ 、 $R^{43}$ 中之至少一者係非H。

【請求項13】如請求項12之化合物，其中

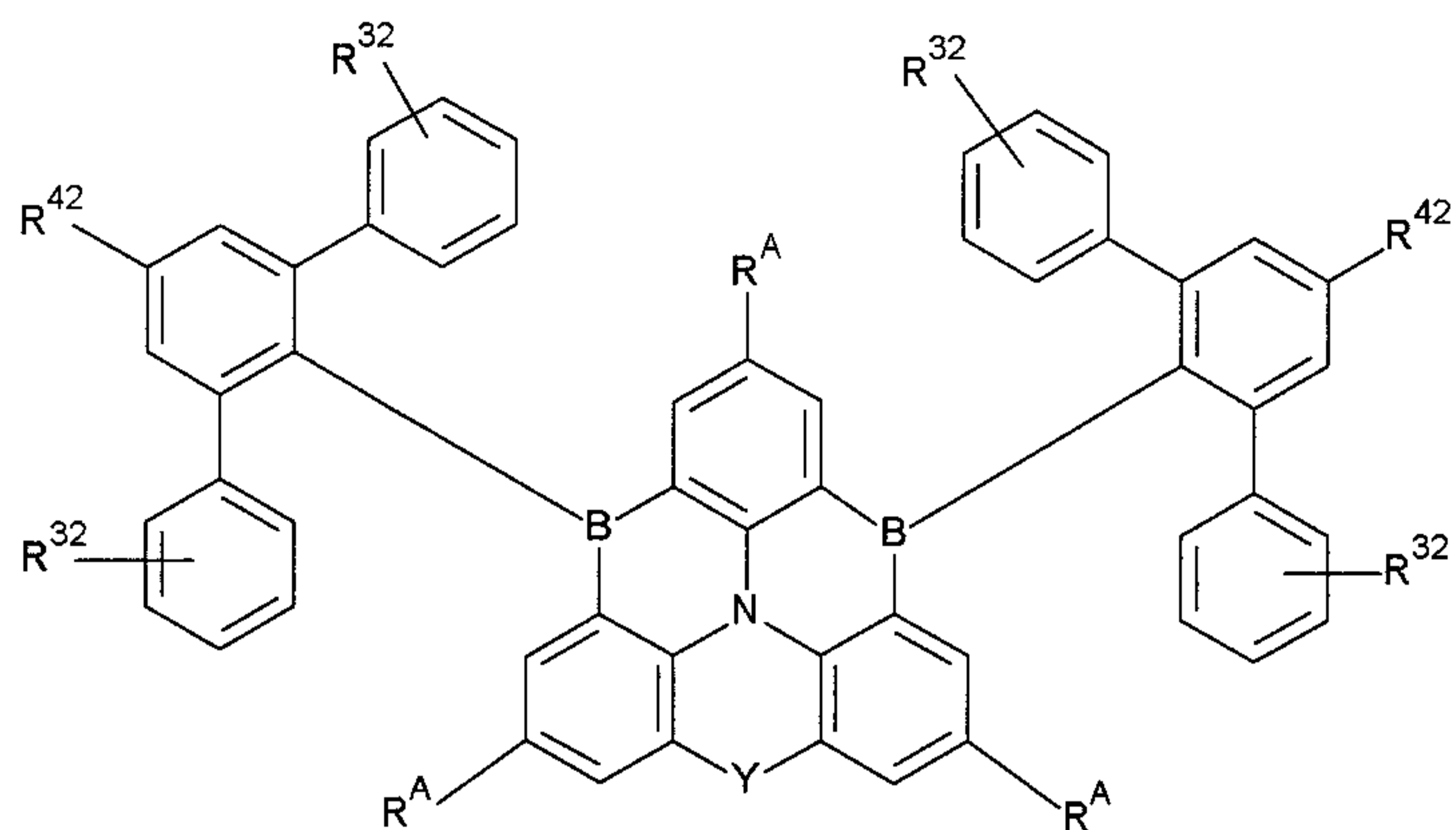
$R^{42}$ 在每次出現時相同或不同地選自H、具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基(其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)、或具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代)，其中 $R^{32}$ 係如請求項6中所定義;

$R^{40}$ 、 $R^{44}$ 在每次出現時相同或不同地選自具有6至30個芳族環原子之芳族環系統(其在各情況下可經一或多個基團 $R^{32}$ 取代);其中 $R^{32}$ 係如請求項6中所定義。

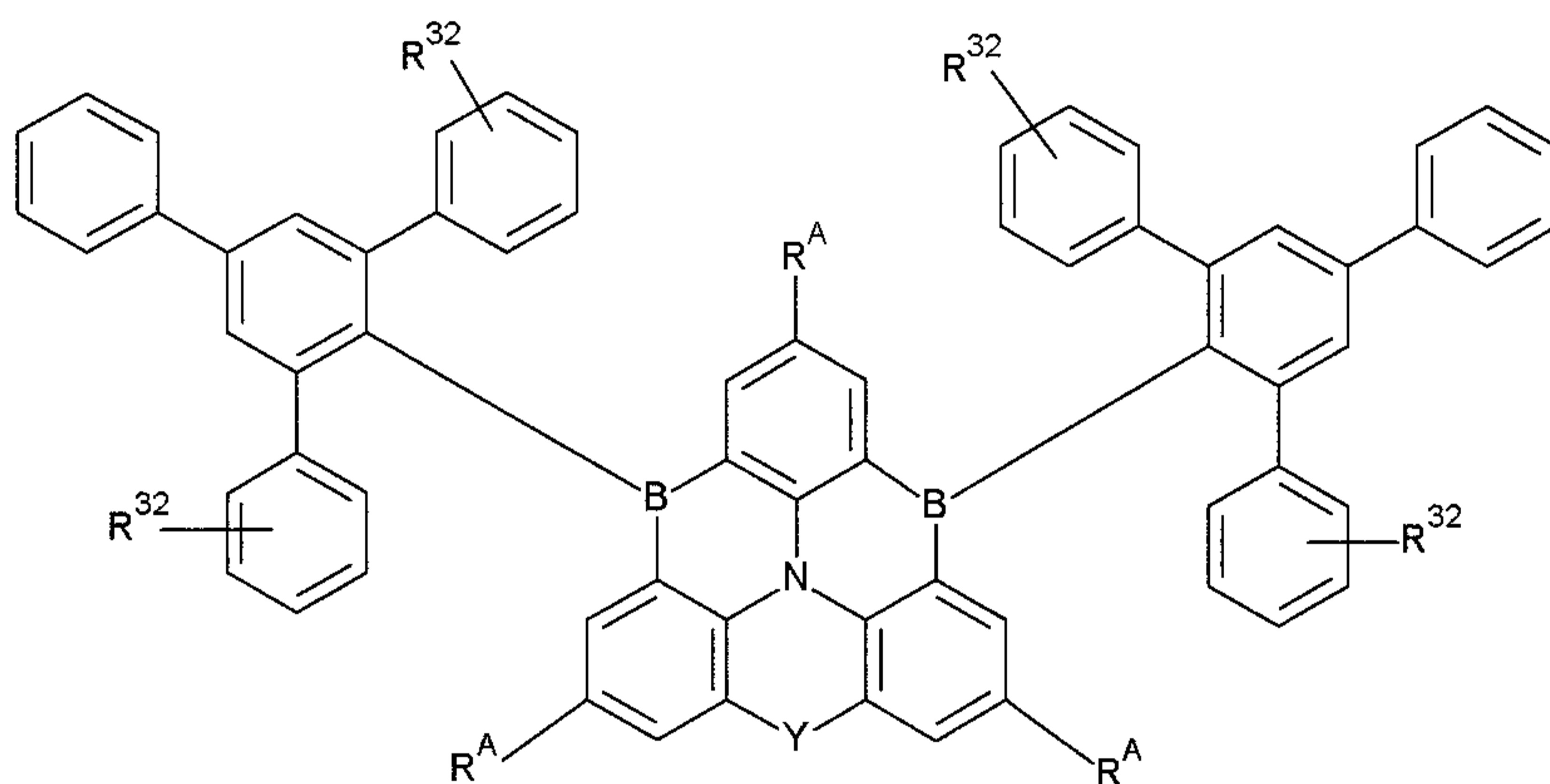
【請求項14】如請求項1或2之化合物，其中該化合物係選自式(5-1)、(5-2)及(5-3)之化合物，







式 (5-2)



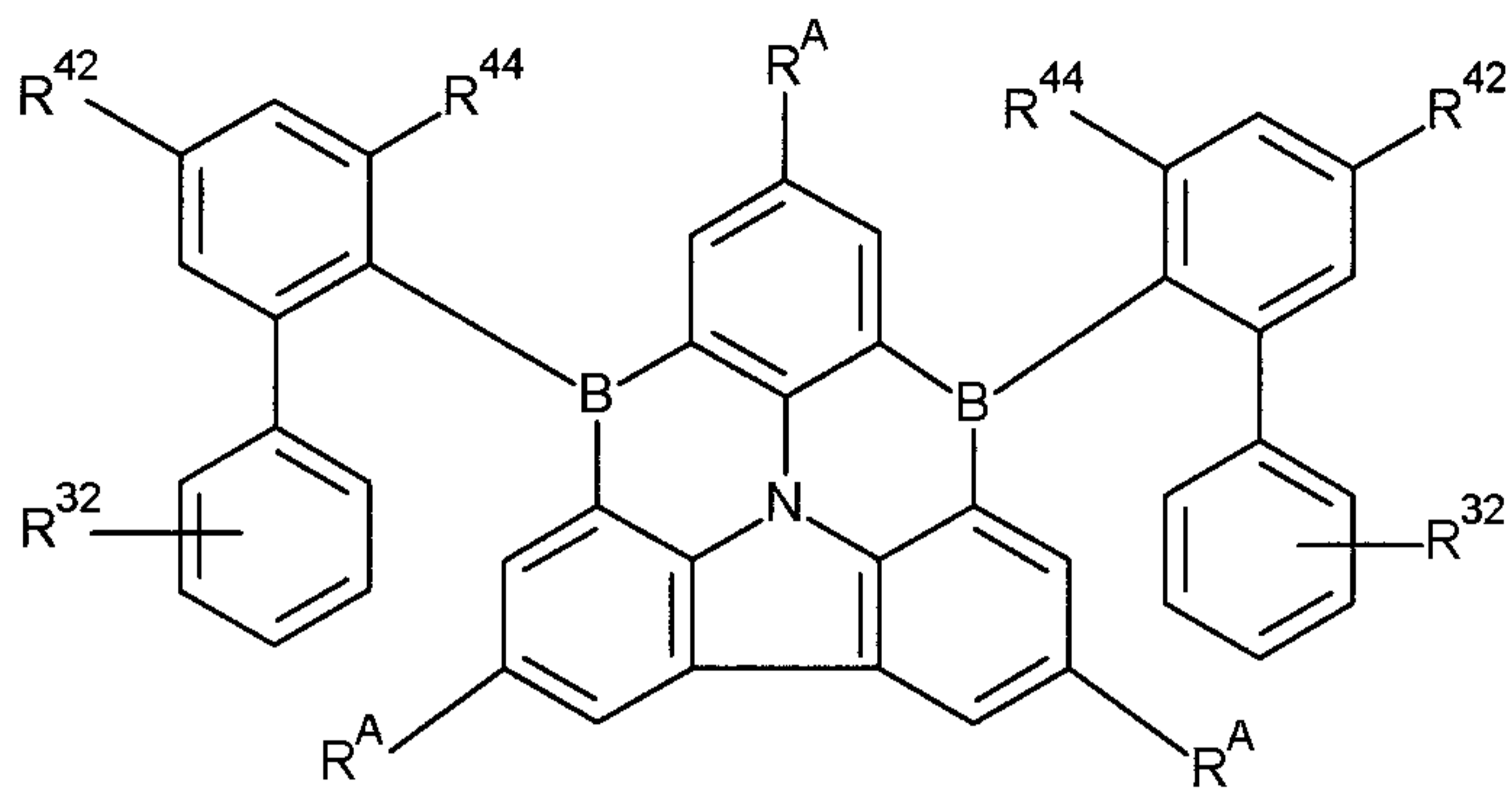
式 (5-3)

其中基團  $R^A$  具有如請求項 1 中之相同含意，且其中在式 (5-1)、(5-2) 及 (5-3) 之各者中，標示有  $-R^{32}$  之苯基係未經取代或經一或多個基團  $R^{32}$  取代；

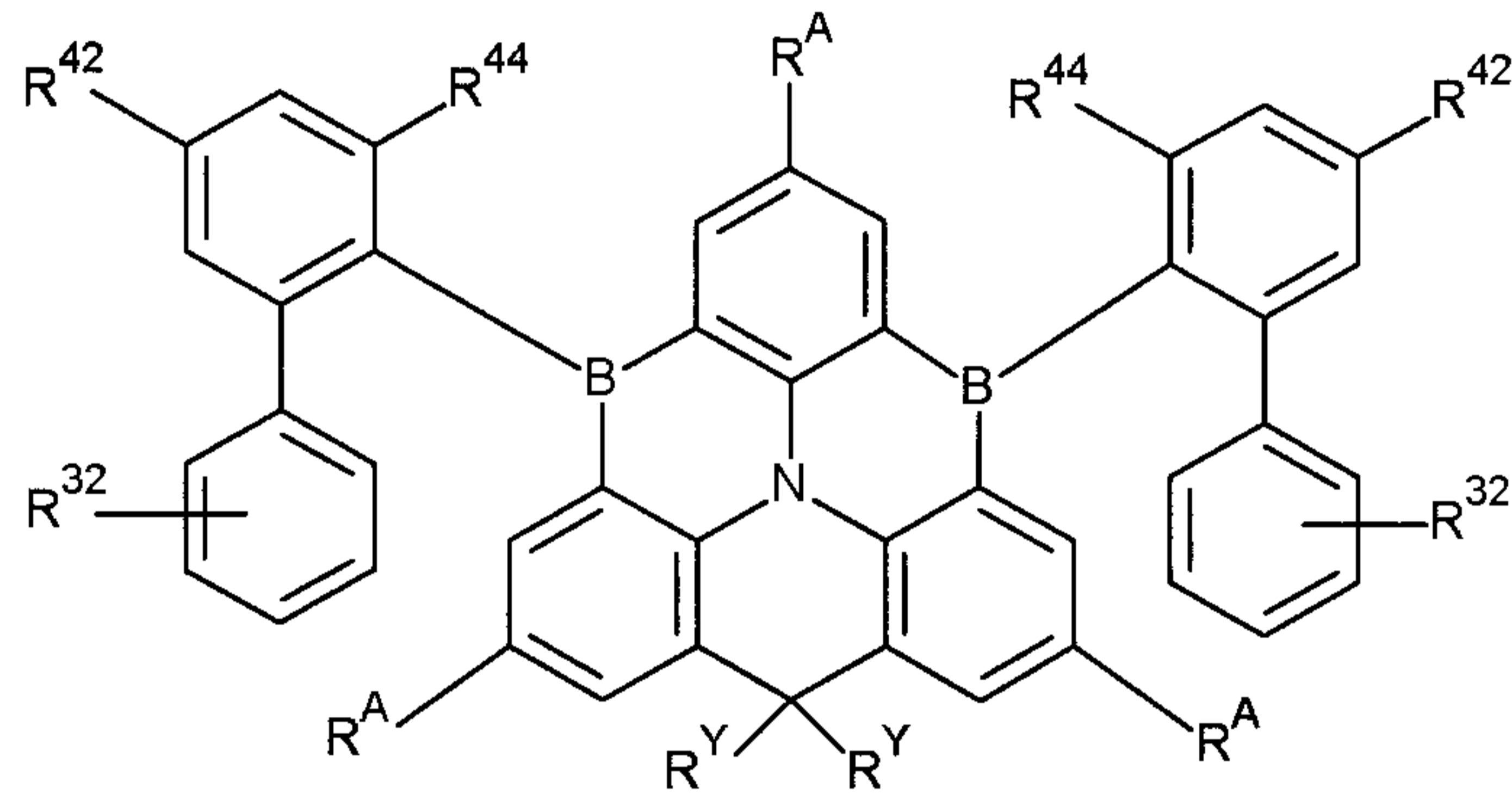
$R^{42}$  及  $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自 H、具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基 (其中上述基團可各自經一或多個基團  $R^{32}$  取代)；其中  $R^{32}$  係如請求項 6 中所定義。

【請求項 15】如請求項 1 或 2 之化合物，其中該化合物係選自式 (5-1-1Y) 至 (5-3-Y3) 之化合物，

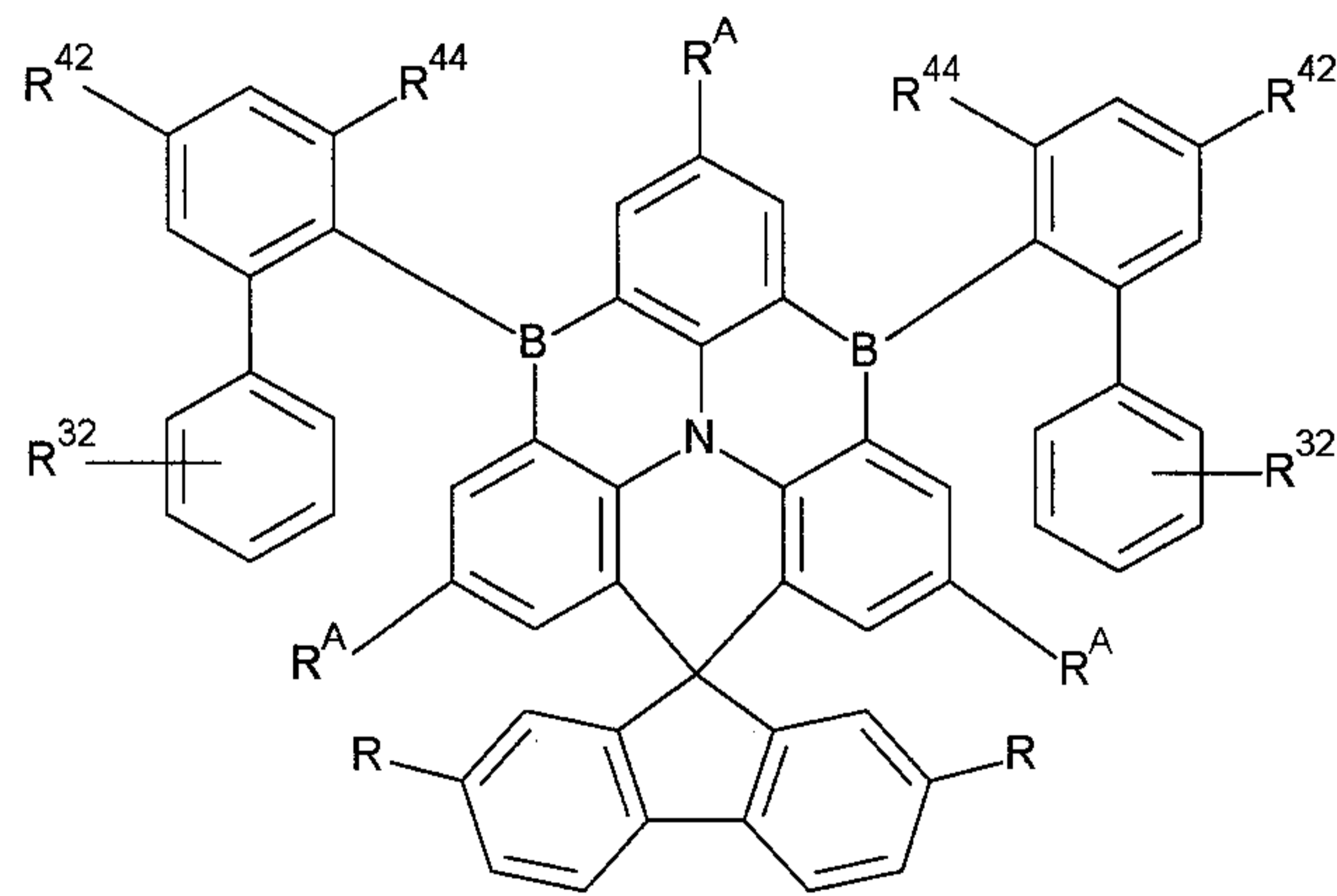




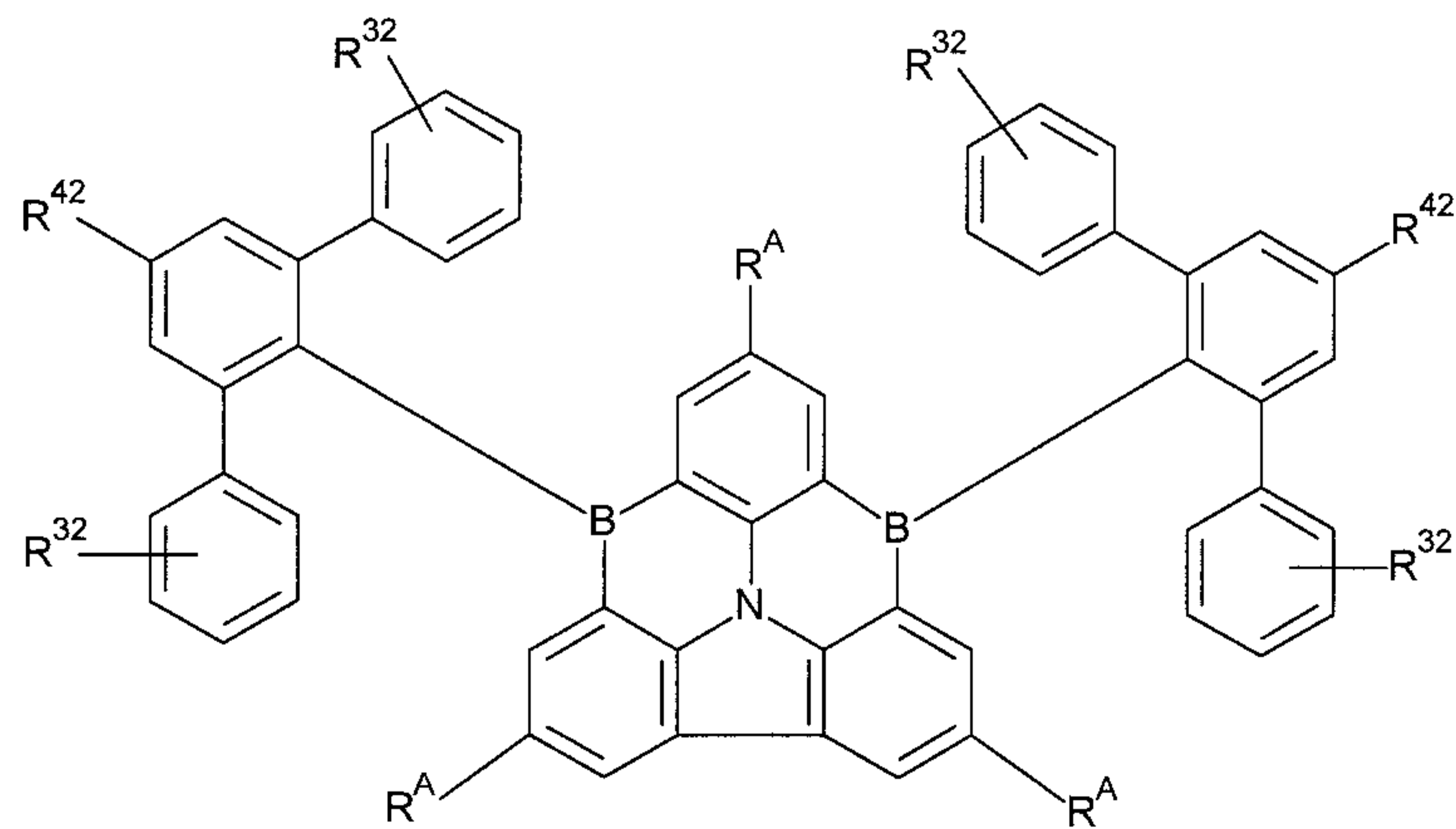
式 (5-1-Y1)



式 (5-1-Y2)

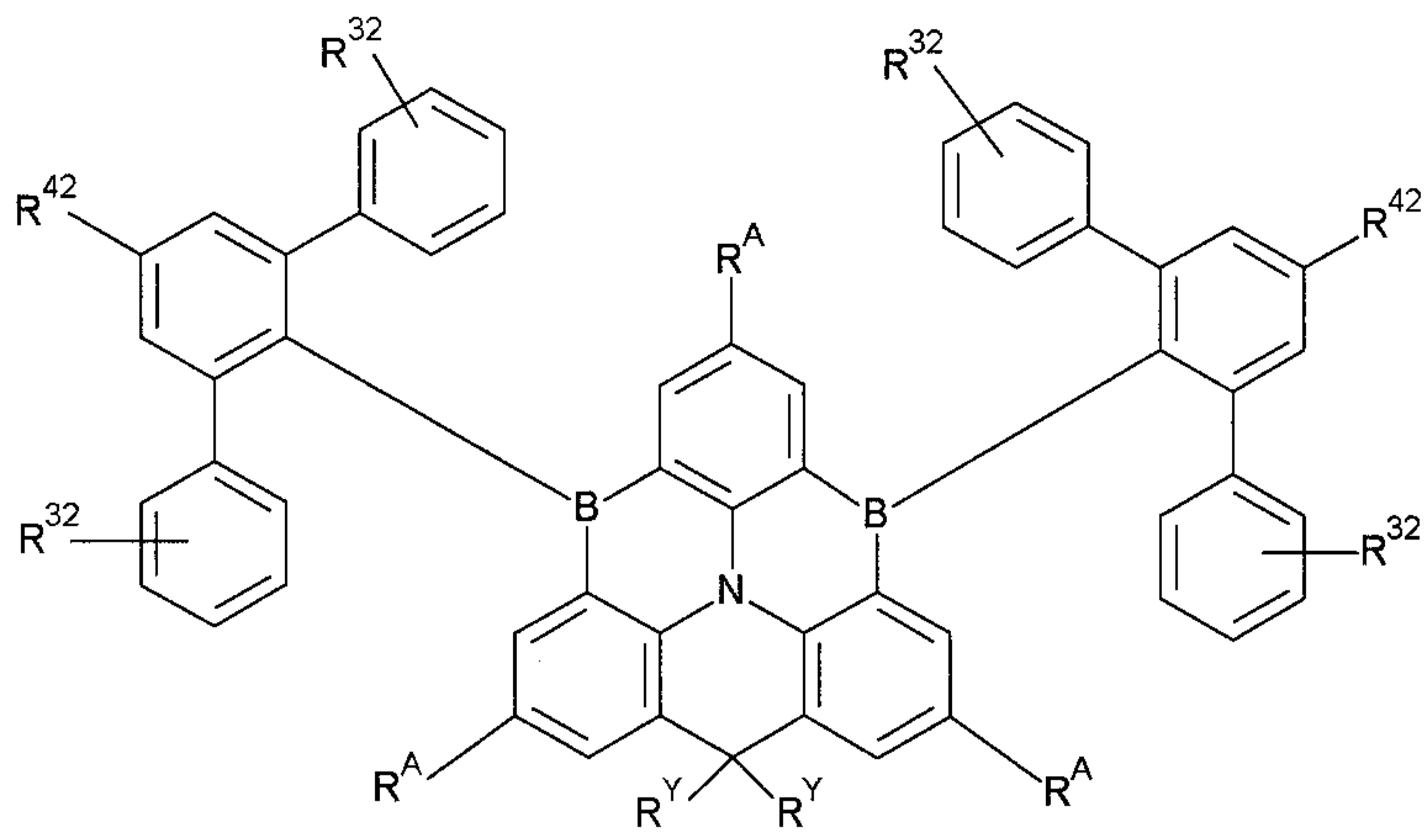


式 (5-1-Y3)

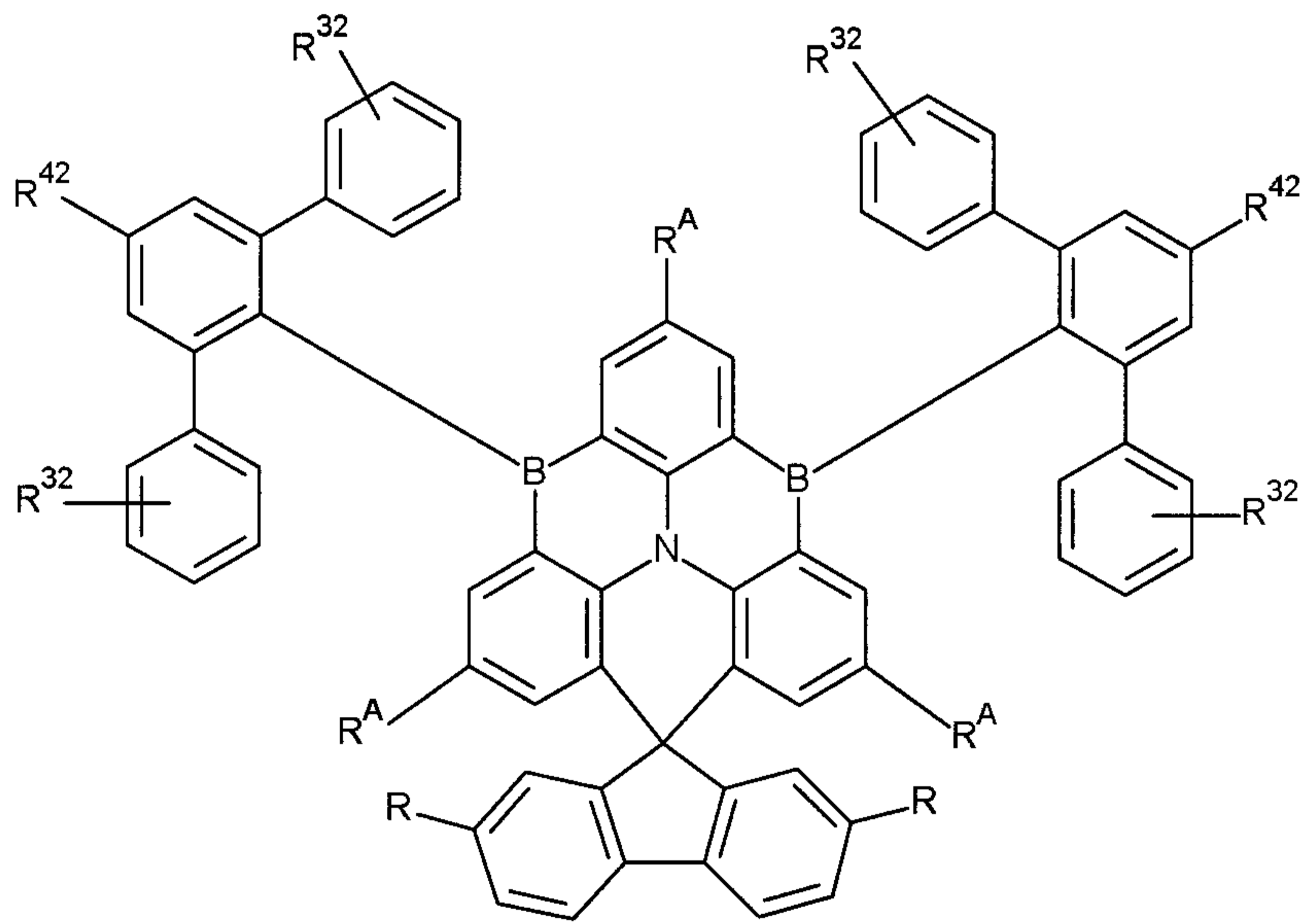


式 (5-2-Y1)

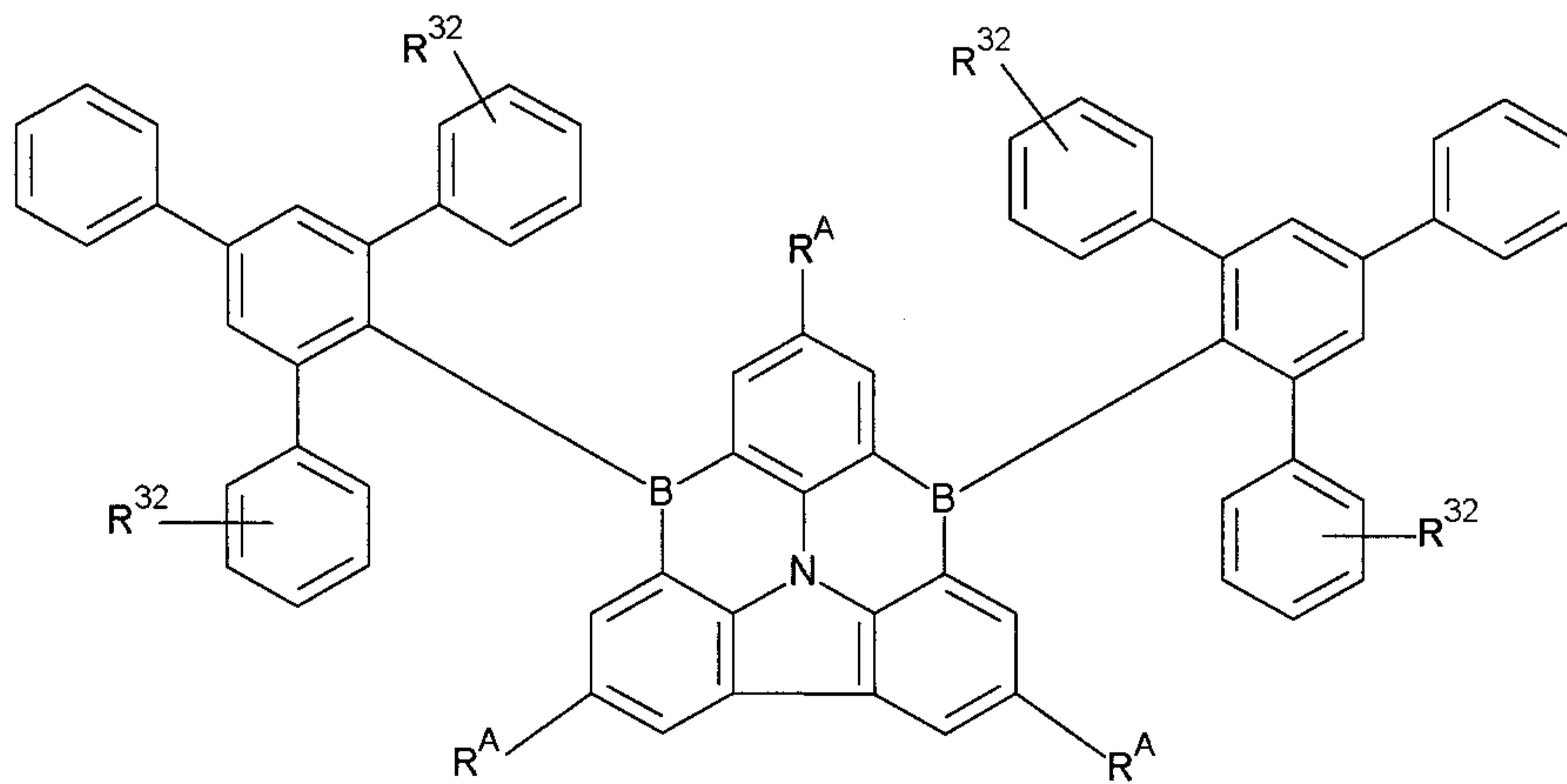




式 (5-2-Y2)

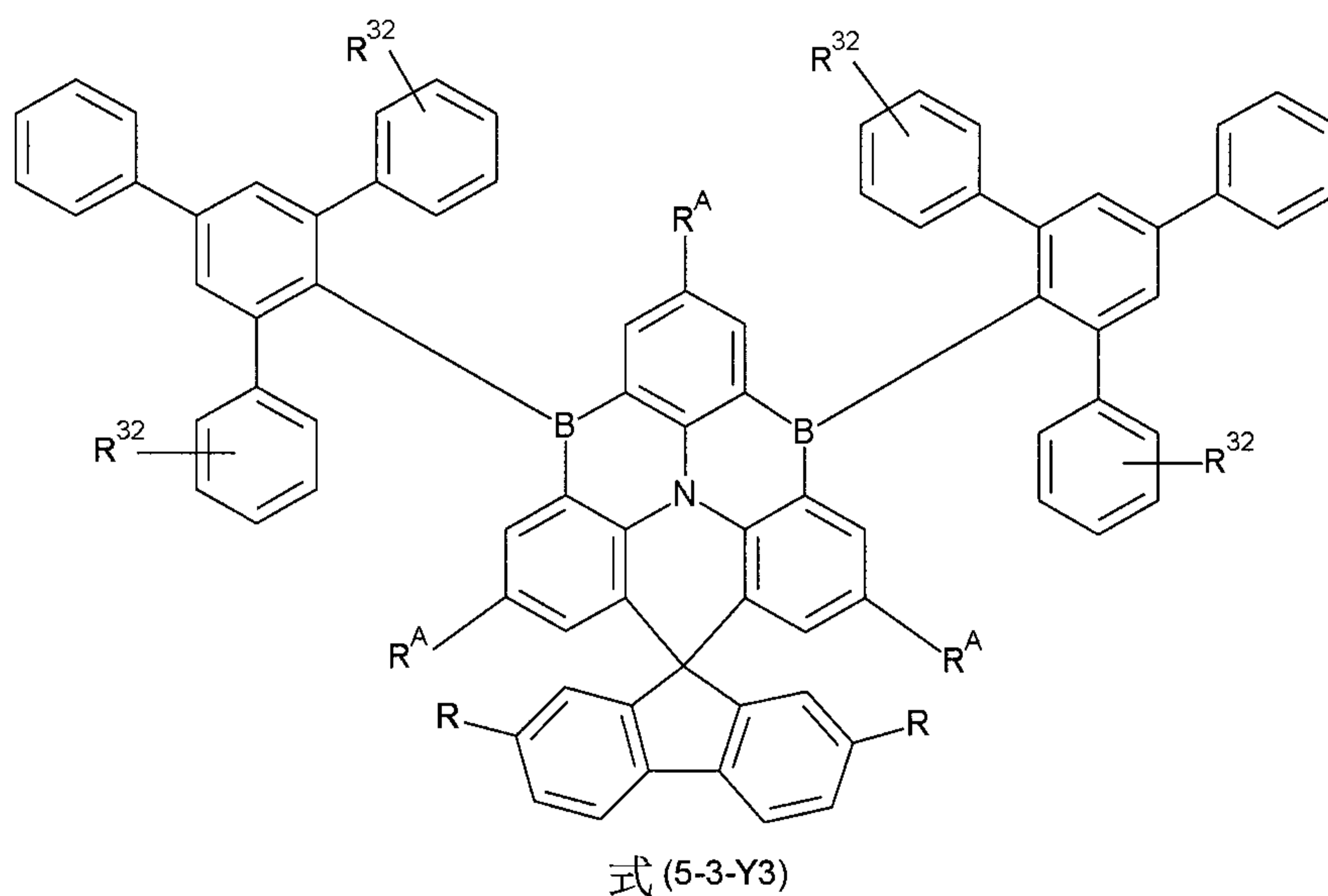
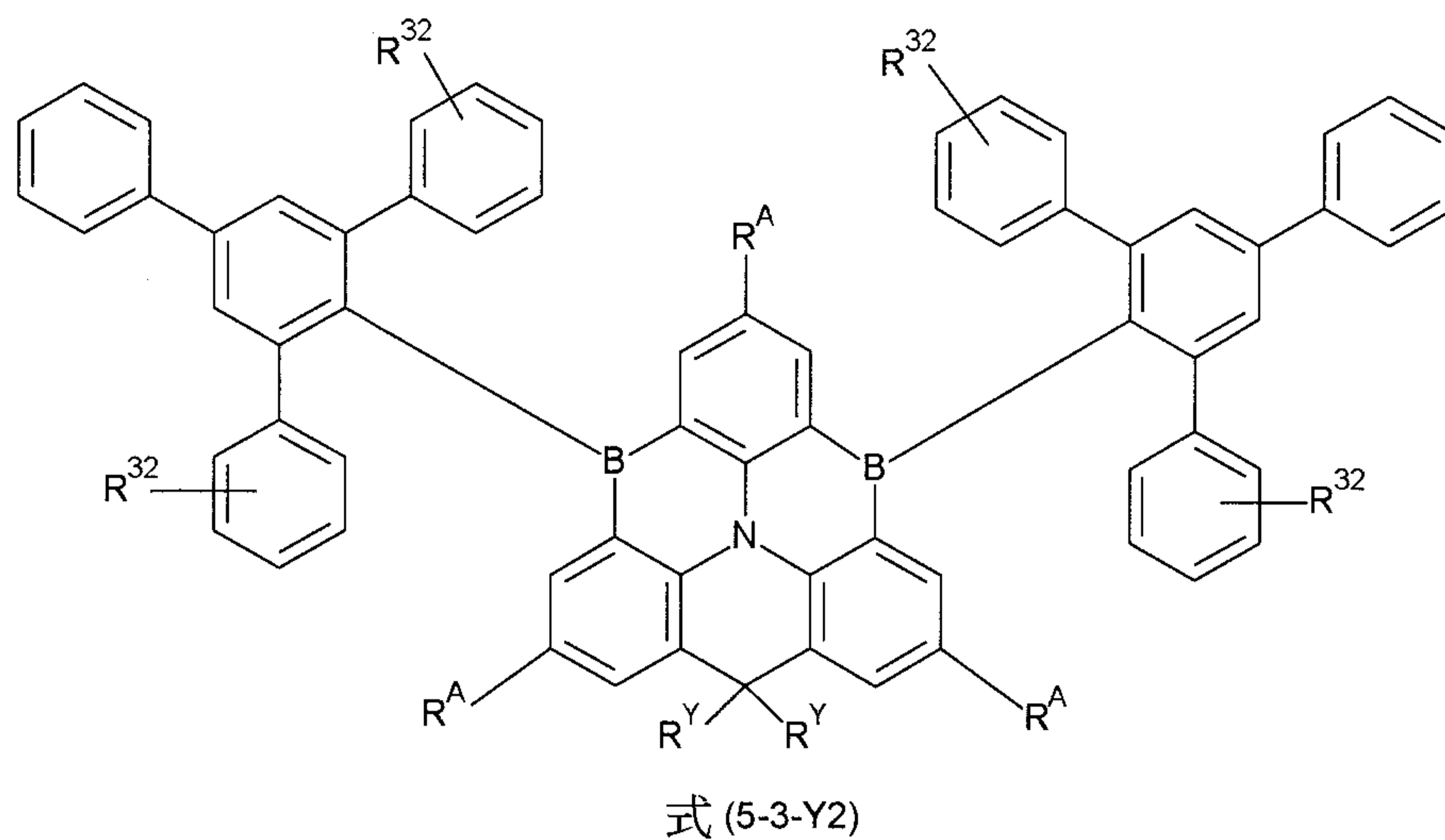


式 (5-2-Y3)



式 (5-3-Y1)





其中基團  $R^A$ 、 $R^Y$  及  $R$  具有如請求項 1 中之相同含意，且

其中在式 (5-1-Y1) 至 (5-3-Y3) 之各者中，標示有  $-R^{32}$  之苯基係未經取代或經一或多個基團  $R^{32}$  取代；

$R^{42}$  及  $R^{44}$  在每次出現時相同或不同地選自  $H$ 、具有 1 至 10 個碳原子之直鏈烷基、或具有 3 至 10 個碳原子之支鏈或環狀烷基 (其中上述基團可各自經一或多個基團  $R^{32}$  取代)；其中  $R^{32}$  係如請求項 6 中所定義。

【請求項 16】如請求項 12 之化合物，其中基團  $R^{40}$ 、



$R^{42}$ 、 $R^{44}$ 在每次出現時相同或不同地選自具有1至10個碳原子之直鏈烷基、或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基，其中上述基團可各自經一或多個基團 $R^{32}$ 取代，其中 $R^{32}$ 係如請求項6中所定義。

【請求項17】一種聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物，其包含一或多種如請求項1之化合物，其中至該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物之鍵可位於式(1)中經 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^A$ 、 $R^B$ 或 $R$ 取代之任何位置處。

【請求項18】一種調配物，其包含至少一種如請求項1至16中之一或多項之化合物或至少一種如請求項17之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物以及至少一種溶劑。

【請求項19】一種電子裝置，其包含至少一種如請求項1至16中之一或多項之化合物或至少一種如請求項17之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物，其係選自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置、有機積體電路、有機場效電晶體、有機薄膜電晶體、有機發光電晶體、有機太陽能電池、染料敏化之有機太陽能電池、有機光學偵測器、有機感光器、有機場淬滅裝置、發光電化學電池、有機雷射二極體及有機電漿子發光裝置。

【請求項20】一種有機電致發光裝置，其包含至少一種如請求項1至16中之一或多項之化合物或至少一種如請求項17之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物，其特徵在於，如請求項1至16中之一或多項之化合物或如請求項17之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物係用作為發光層中之發射



體。

【請求項 21】如請求項 20 之有機電致發光裝置，其中將如請求項 1 至 16 中之一或多項之化合物或至少一種如請求項 17 之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物用作為發光層中之螢光發射體，其中該發光層包含至少一種選自基質材料之其他組分。

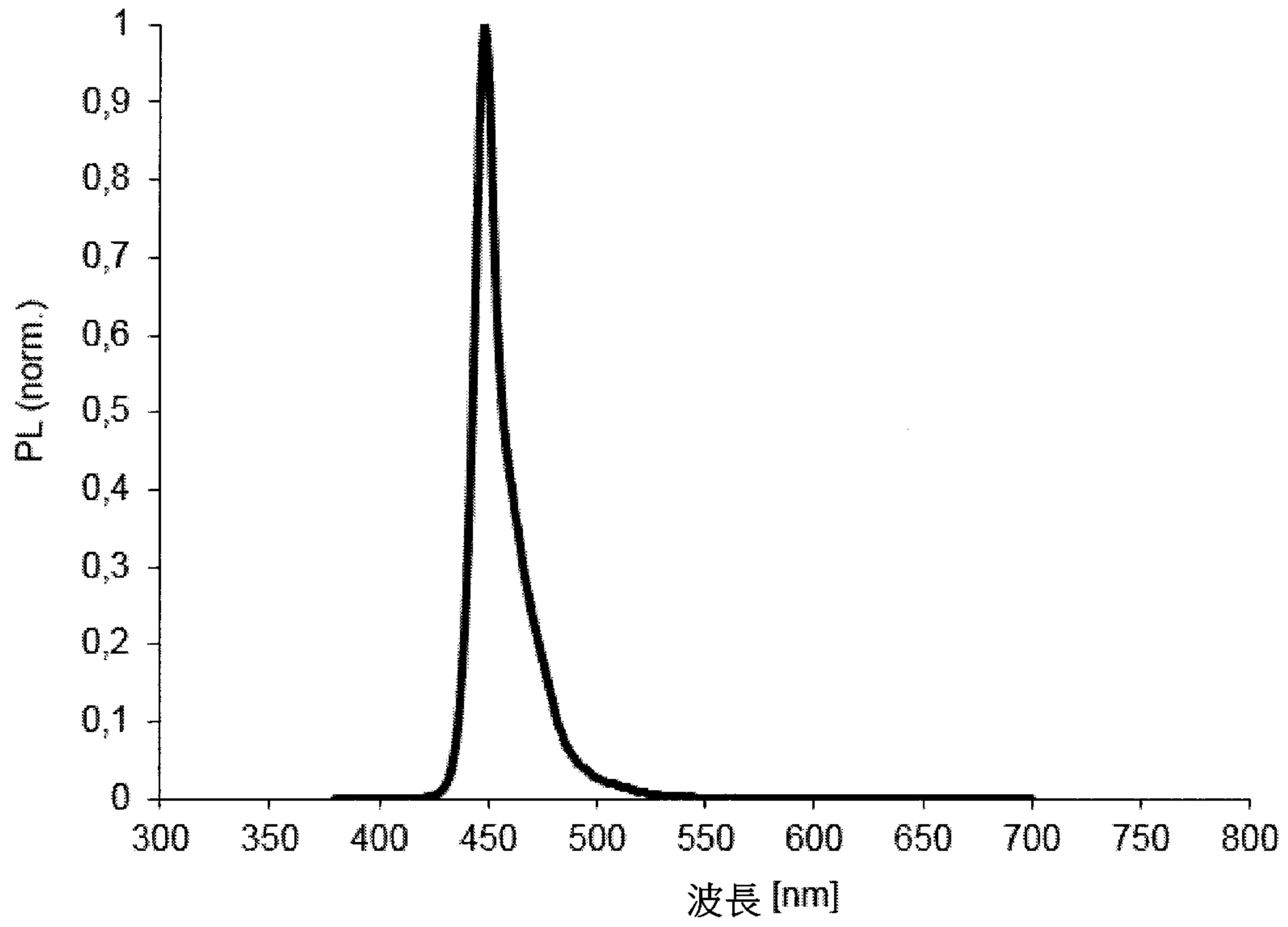
【請求項 22】如請求項 20 之有機電致發光裝置，其中將如請求項 1 至 16 中之一或多項之化合物或至少一種如請求項 17 之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物用作為發光層中顯示熱活化延遲螢光之發射體，其中該發光層包含至少一種選自基質材料之其他組分。

【請求項 23】如請求項 20 之有機電致發光裝置，其中將如請求項 1 至 16 中之一或多項之化合物或至少一種如請求項 17 之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物用作為發光層中之螢光發射體，其中該發光層包含至少一種選自磷光化合物及熱活化延遲螢光化合物之敏化劑。

【請求項 24】如請求項 23 之有機電致發光裝置，其中該發光層進一步包含至少一種選自基質材料之有機功能性材料。

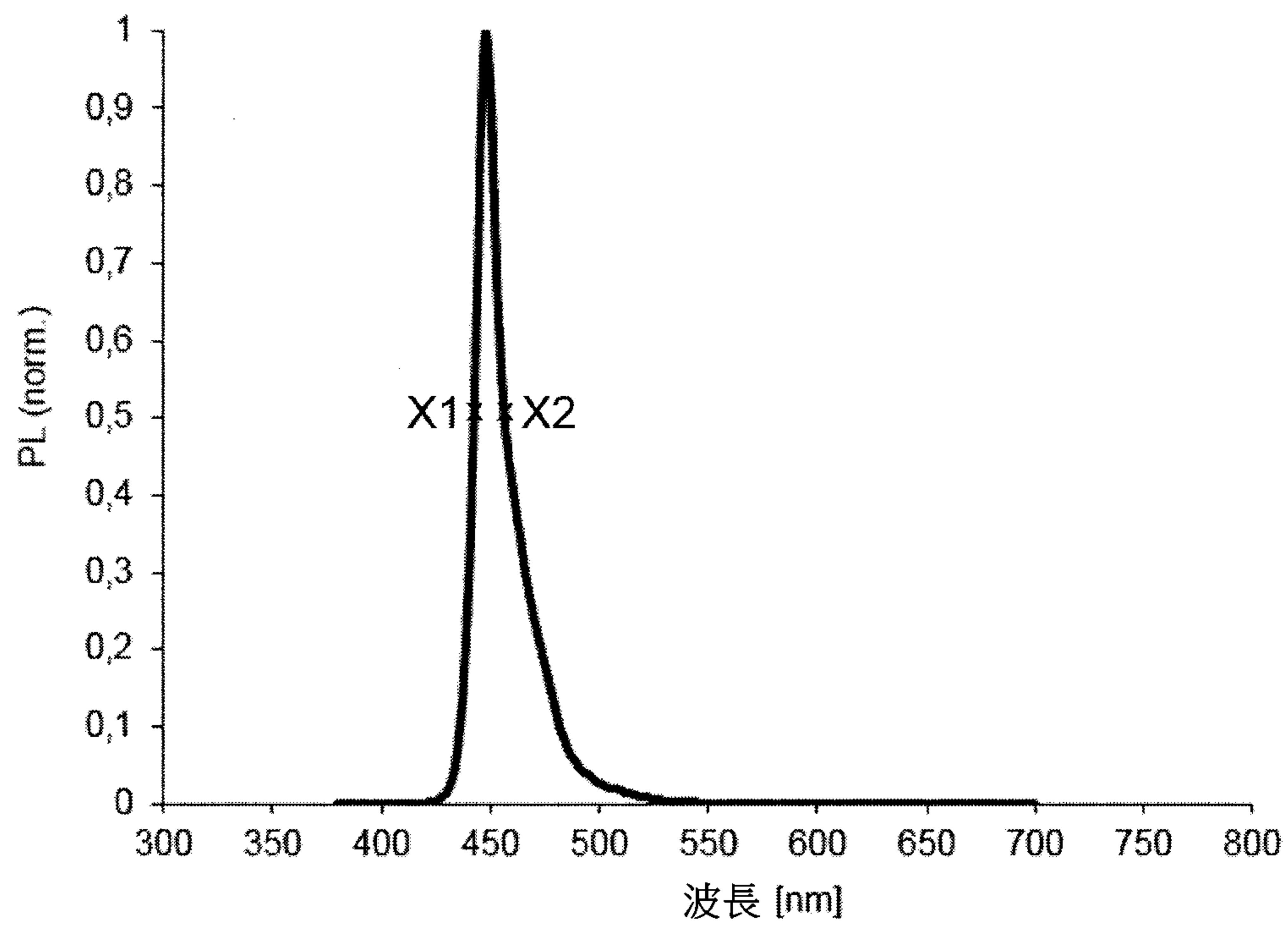


【發明圖式】



【圖 1】





【圖 2】