



(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 201815734 A

(43)公開日：中華民國 107 (2018) 年 05 月 01 日

(21)申請案號：106122575

(51)Int. Cl. :      *C07C13/62 (2006.01)*  
*C07D307/91 (2006.01)*  
*C07D307/92 (2006.01)*  
*C07D239/26 (2006.01)*  
*H05B33/12 (2006.01)*

(22)申請日：中華民國 106 (2017) 年 07 月 05 日  

*C07D333/76 (2006.01)*  
*C07D311/96 (2006.01)*  
*C07D409/14 (2006.01)*  
*C09K11/06 (2006.01)*  
*H01L51/50 (2006.01)*

(30)優先權：2016/07/08      歐洲專利局      16178596.9

(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：凌吉 盧分 LINGE, ROUVEN (DE)；羅瑞蓋茲 雷拉依沙貝爾 RODRIGUEZ,  
 LARA-ISABEL (ES)；梅爾 賽巴斯汀 MEYER, SEBASTIAN (DE)；海爾 荷葛  
 HEIL, HOLGER (DE)；恩格爾 米瑞姆 ENGEL, MIRIAM (DE)；雷克納 艾倫  
 LACKNER, AARON (US)

(74)代理人：林志剛

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：18 項 圖式數：0 共 165 頁

(54)名稱

有機電致發光裝置用之材料

MATERIALS FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICES

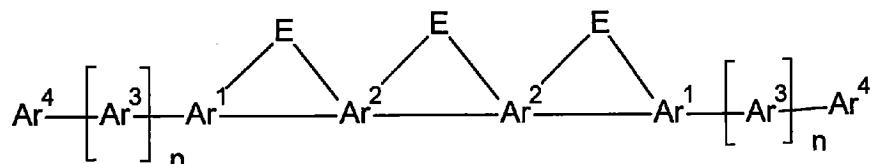
(57)摘要

本發明關於式(1)化合物，其係適用於電子裝置中，特別是有機電致發光裝置中；及關於電子裝置，其包含這些化合物。

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.

特徵化學式：

式(1)



式(1)

## 【發明說明書】

### 【中文發明名稱】

有機電致發光裝置用之材料

### 【英文發明名稱】

Materials for organic electroluminescent devices

### 【技術領域】

本發明關於式(1)化合物，關於該化合物於電子裝置中之用途，及關於包含式(1)化合物之電子裝置。本發明又關於式(1)化合物之製備方法及關於包含一或多種式(1)化合物之製劑。

### 【先前技術】

開發用於電子裝置中之功能化合物為目前大量研究之標的。特別地，目標為開發可達成具有其之電子裝置的性質在一或多種相關點改善之化合物，諸如例如功率效率；壽命或發射光之顏色座標。

根據本發明，用語電子裝置意指，尤其是，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)、有機光學偵檢器、有機光接收器、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)。

特別感興趣的是提供用於最後提及之稱為 OLED 的電子裝置之化合物。OLED 的一般結構及功能原理為所屬技術領域中具有通常知識者已知且描述於例如 US 4539507 中。

仍需要對於 OLED 性能數據的進一步改善，特別是考慮到廣泛的商業用途，例如在顯示器裝置中或作為光源。在這方面特別重要的是 OLED 的壽命、效率及操作電壓及所達成之顏色值。特別是在藍色發光 OLED 的情況下，對於裝置壽命有改善潛力。

達成該等改善的重要起點是選擇電子裝置中所使用的發光體化合物。

從先前技術所知藍色螢光發光體為多重化合物，特別是含有一或多種縮合芳基及/或茚并茀基的芳基胺。其之實例為苯并茚并茀胺，例如根據 WO 2008/006449，以及二苯并茚并茀胺，例如根據 WO 2007/140847。

也可使用苯并茚并茀衍生物及二苯并茚并茀衍生物作為 OLED 中及其他電子裝置中之基質材料，例如根據 WO 2008/006449 及 WO 2007/140847。

再者，可使用茚并茀衍生物作為 OLED 中及其他電子裝置中之電洞傳輸材料，例如根據 WO 2006/108497。

## 【發明內容】

因此，過去幾年中，已成功將基於茚并茀衍生物、苯并茚并茀衍生物及二苯并茚并茀衍生物之化合物用作為

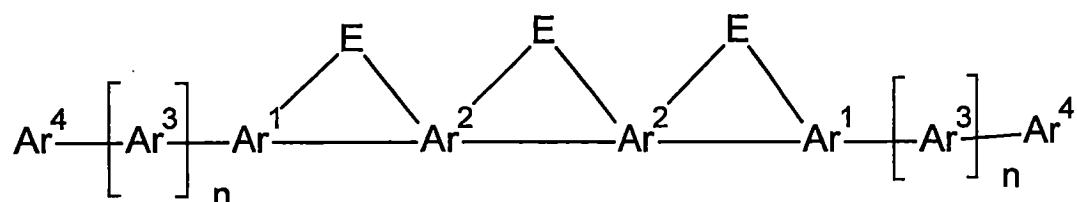
OLED中之材料。

然而，在藍色發光OLED之情況下，關於此類型化合物仍需要對於所達成壽命、效率及顏色值的進一步改善。更特別地，有需要OLED之深藍色螢光發光體，其展現就顏色深度及窄發光帶而言有非常良好顏色性質且同時仍展現就OLED壽命、效率及操作電壓而言有良好性質。再者，有需要適合溶液加工之化合物，尤其是在藍色發光OLED之情況下。

本發明因此基於提供其係適合用於電子裝置(諸如OLED)中、其係可使用來作為藍色發光體、作為基質材料及/或電洞傳輸材料以及其係適合溶液加工之化合物之技術課題。

在搜尋用於電子裝置之新穎化合物中，現已意外地發現如下所定義之式(1)化合物係極度適合用於電子裝置中。特別是，它們達成上述提供具有深藍色座標之發射光的OLED、提供具有長壽命之OLED及提供具有良好有機溶劑中溶解度之化合物的技術課題之一或多或少者，較佳所有者。

本發明因此關於式(1)化合物，



式(1)

其中下列係應用到所用符號及標號：

$\text{Ar}^1$ 每次出現時相同或不同地表示具有6至18個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個 $\text{R}^1$ 基取代，其中式(1)中 $\text{Ar}^1$ 基之至少一者具有10或更多個芳族環原子；

$\text{Ar}^2$ 每次出現時相同或不同地表示具有6個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個 $\text{R}^1$ 基取代；

$\text{Ar}^3$ 、 $\text{Ar}^4$ 每次出現時相同或不同地表示具有5至25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 $\text{R}^1$ 基取代；

$\text{E}$ 每次出現時相同或不同地選自 $-\text{BR}^0-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-\text{C}(\text{R}^0)_2-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-\text{O}-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-\text{S}-$ 、 $-\text{R}^0\text{C}=\text{CR}^0-$ 、 $-\text{R}^0\text{C}=\text{N}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^0)_2$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^0)_2-\text{Si}(\text{R}^0)_2-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})-$ 、 $-\text{C}(=\text{NR}^0)-$ 、 $-\text{C}(=\text{C}(\text{R}^0)_2)-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{S}(=\text{O})-$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、 $-\text{N}(\text{R}^0)-$ 、 $-\text{P}(\text{R}^0)-$ 及 $-\text{P}(=\text{O})\text{R}^0-$ ，且兩個 $\text{E}$ 基可相對於彼此在順式或反式位置；

$\text{R}^0$ 、 $\text{R}^1$ 每次出現時相同或不同地表示 $\text{H}$ ； $\text{D}$ ； $\text{F}$ ； $\text{Cl}$ ； $\text{Br}$ ； $\text{I}$ ； $\text{CHO}$ ； $\text{CN}$ ； $\text{N}(\text{Ar}^5)_2$ ； $\text{C}(=\text{O})\text{Ar}^5$ ； $\text{P}(=\text{O})(\text{Ar}^5)_2$ ； $\text{S}(=\text{O})\text{Ar}^5$ ； $\text{S}(=\text{O})_2\text{Ar}^5$ ； $\text{NO}_2$ ； $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ ； $\text{B}(\text{OR}^2)_2$ ； $\text{OSO}_2\text{R}^2$ ；具有1至40個C原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基、烷氧基或硫烷基，其之各者可經一或多個 $\text{R}^2$ 基取代，其中在各情況下一或多個非相鄰 $\text{CH}_2$ 基可經 $\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^2)$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$ 或 $\text{CONR}^2$ 置換且其中一或多個H原子可經 $\text{D}$ 、

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R<sup>2</sup>基取代；或具有5至40個芳族環原子之芳氧基，其可經一或多個R<sup>2</sup>基取代，其中兩個相鄰R<sup>0</sup>取代基及/或兩個相鄰R<sup>1</sup>取代基可形成單環或環之脂族環系統或芳族環系統，其可經一或多個R<sup>2</sup>基取代；

R<sup>2</sup>每次出現時相同或不同地表示H；D；F；Cl；Br；I；CHO；CN；N(Ar<sup>5</sup>)<sub>2</sub>；C(=O)Ar<sup>5</sup>；P(=O)(Ar<sup>5</sup>)<sub>2</sub>；S(=O)Ar<sup>5</sup>；S(=O)<sub>2</sub>Ar<sup>5</sup>；NO<sub>2</sub>；Si(R<sup>3</sup>)<sub>3</sub>；B(OR<sup>3</sup>)<sub>2</sub>；OSO<sub>2</sub>R<sup>3</sup>；具有1至40個C原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基、烷氧基或硫烷基，其之各者可經一或多個R<sup>3</sup>基取代，其中在各情況下一或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基可經R<sup>3</sup>C=CR<sup>3</sup>、C≡C、Si(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>3</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R<sup>3</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、O、S或CONR<sup>3</sup>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R<sup>3</sup>基取代；或具有5至60個芳族環原子之芳氧基，其可經一或多個R<sup>3</sup>基取代，其中兩個相鄰R<sup>2</sup>取代基可形成單環或多環之脂族環系統或芳族環系統，其可經一或多個R<sup>3</sup>基取代；

R<sup>3</sup>每次出現時相同或不同地表示H；D；F；Cl；Br；I；CN；具有1至20個C原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至20個C原子之分支或環狀烷基、烷氧基或硫烷基，其中在各情況下一或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基可經SO、

$\text{SO}_2$ 、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；

$\text{Ar}^5$ 為具有5至24個芳族環原子(較佳5至18個芳族環原子)之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下也可經一或多個 $\text{R}^3$ 基取代；

n為1至20之整數；

其中若n等於1且 $\text{Ar}^3$ 或 $\text{Ar}^4$ 之至少一者表示苯基，則式(1)化合物帶有至少一個 $\text{R}^0$ 或 $\text{R}^1$ 基，該至少一個 $\text{R}^0$ 或 $\text{R}^1$ 基表示具有2至40個C原子之直鏈烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基，其之各者可經一或多個 $\text{R}^2$ 基取代。

關於式(1)，E基與相鄰於此E基之 $\text{Ar}^1$ 及 $\text{Ar}^2$ 基間的鍵結可在該等相鄰基 $\text{Ar}^1$ 及 $\text{Ar}^2$ 的各有空位置發生。以相同方式，E基與相鄰於此E基之兩個 $\text{Ar}^2$ 基間的鍵結可在這兩個相鄰基 $\text{Ar}^2$ 的各有空位置發生。因此，咸理解該等E基可相對於彼此在順式或反式位置，如上面E基之定義中所提及般。

相鄰取代基本發明的意義而言為鍵結至彼此直接連接之原子或鍵結至相同原子的取代基。

再者，為了本申請案，沿用下列化學基之定義：

芳基就本發明的意義而言含有6至60個芳族環原子，較佳6至40個芳族環原子，更佳6至20個芳族環原子；雜芳基就本發明的意義而言含有5至60個芳族環原子，較佳5至40個芳族環原子，更佳5至20個芳族環原子，其之至少一者為雜原子。雜原子較佳選自N、O及S。此代表基本定

義。若本發明之描述中指出其他偏好，例如對於芳族環原子的數目或出現之雜原子，則沿用彼等。

芳基或雜芳基在此意指簡單芳族環，也就是苯，或簡單雜芳族環，例如吡啶、嘧啶或噻吩；或縮合(稠并)芳族或雜芳族多環，例如萘、菲、喹啉或咔唑。縮合(稠并)芳族或雜芳族多環就本發明的意義而言係由二或更多個彼此縮合之簡單芳族或雜芳族環所構成。

芳基或雜芳基(其在各例中可經上述基取代且可經由任何所欲位置連接到芳族或雜芳族環系統)意指特別是衍生自下列者之基：苯、萘、蒽、菲、芘、二氫芘、蒄、芘、丙二烯合茀、苯并蒽、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、吲哚、異吲哚、咔唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻嗪、啡噁嗪、吡噁嗪、吲噁嗪、咪噁嗪、苯并咪噁嗪、萘并咪噁嗪、菲并咪噁嗪、吡啶并咪噁嗪、吡噁嗪并咪噁嗪、喹噁啉并咪噁嗪、噁噁嗪、苯并噁噁嗪、萘并噁噁嗪、蒽并噁噁嗪、菲并噁噁嗪、異噁噁嗪、1,2-噁噁嗪、1,3-噁噁嗪、苯并噁噁嗪、嗒噁嗪、苯并嗒噁嗪、嘧啶、苯并嘧啶、喹噁啉、吡噁嗪、啡噁嗪、哚啶、氮雜咔唑、苯并咔唑、啡唑、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯并三唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,3,5-三噁、1,2,4-三噁、1,2,3-三噁、四唑、1,2,4,5-四

嗦、1,2,3,4-四嗦、1,2,3,5-四嗦、嘌呤、喋啶、吲咜及苯并噁二唑。

根據本發明定義之芳基意指，如上所定義之芳基係經由氧原子鍵結。類似定義沿用到雜芳基。

芳族環系統就本發明的意義而言在該環系統中含有6至60個C原子，較佳6至40個C原子，更佳6至20個C原子。雜芳族環系統就本發明的意義而言含有5至60個芳族環原子，較佳5至40個芳族環原子，更佳5至20個芳族環原子，其之至少一者為雜原子。雜原子較佳選自N、O及/或S。芳族或雜芳族環系統就本發明的意義而言係意圖意指下述系統：其不是必須僅含有芳基或雜芳基，而是此外，其中複數個芳基或雜芳基可藉由非芳族單元(較佳地少於除氫以外之原子的10%)，諸如例如sp<sup>3</sup>-混成(sp<sup>3</sup>-hybridised)C、Si、N或O原子；sp<sup>2</sup>-混成C或N原子或sp-混成C原子連結。因此，例如諸如9,9'-螺二茀、9,9'-二芳基茀、三芳基胺、二芳基醚、二苯乙烯、等之系統也意圖被視為就本發明的意義而言的芳族環系統，因為其中兩個或更多個芳基係藉由例如直鏈或環狀烷基、烯基或炔基、或藉由矽基所連結之系統。再者，其中兩個或是更多個芳基或雜芳基經由單鍵彼此連接之系統也被視為就本發明的意義而言的芳族或雜芳族環系統，諸如例如，諸如聯苯、聯三苯或二苯基三嗦之系統。

具有5-60個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統(其在各情況下也可經如上定義之基取代且其可經由任何所欲位

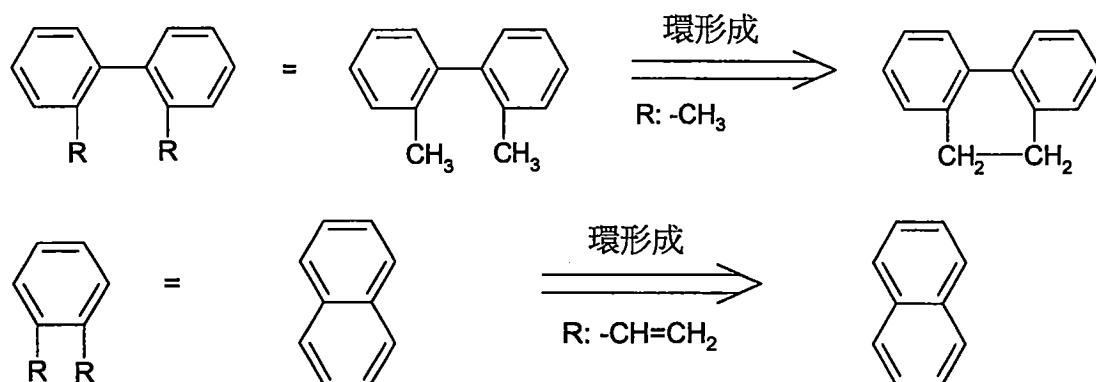
置連接到芳族或雜芳族基)意指，特別是，衍生自下列者之基：苯、萘、蒽、苯并蒽、菲、苯并菲、芘、薁、苊、丙二烯合茀、稠四苯、稠五苯、苯并芘、聯苯、聯伸二苯、聯三苯、聯伸三苯、聯四苯、茀、螺二茀、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順式-或反式-茚并茀、參茚并苯(truxene)、異參茚并苯(isotruxene)、螺三聚茚(spirotruxene)、螺異三聚茚(spiroisotruxene)、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吲哚、異吲哚、咔唑、吲哚并咔唑、茚并咔唑、吡啶、喹啉、異喹啉、吖啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻嗪、啡噁嗪、吡唑、吲唑、咪唑、苯并咪唑、萘并咪唑、菲并咪唑、吡啶并咪唑、吡嗪并咪唑、喹噁啉并咪唑、噁唑、苯并噁唑、萘并噁唑、蒽并噁唑、菲并噁唑、異噁唑、1,2-噁唑、1,3-噁唑、苯并噁唑、嗒嗪、苯并嗒嗪、嘧啶、苯并嘧啶、喹噁啉、1,5-二氮雜蒽、2,7-二氮雜芘、2,3-二氮雜芘、1,6-二氮雜芘、1,8-二氮雜芘、4,5-二氮雜芘、4,5,9,10-四氮雜芘、吡嗪、啡嗪、啡噁嗪、啡噻嗪、螢紅素(fluorubin)、柰啶、氮雜咔唑、苯并咔啉、啡啉、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯并三唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,3,5-三嗪、1,2,4-三嗪、1,2,3-三嗪、四唑、1,2,4,5-四嗪、1,2,3,4-四嗪、1,2,3,5-四嗪、嘌呤、喋啶、吲呻及苯并噁二唑、或

彼等基之組合。

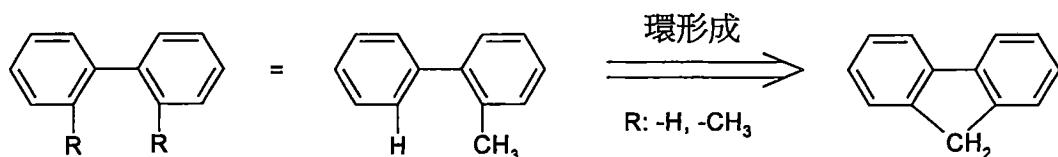
為了本發明，具有1至40個C原子之直鏈烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基或具有2至40個C原子之烯基或炔基(此外，其中個別H原子或CH<sub>2</sub>基可經上述基取代)，在基之定義下，較佳意指下列基：甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、2-甲基丁基、正戊基、第二戊基、環戊基、新戊基、正己基、環己基、新己基、正庚基、環庚基、正辛基、環辛基、2-乙基己基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、庚烯基、環庚烯基、辛烯基、環辛烯基、乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基或辛炔基。具有1至40個C原子之烷氧基或硫烷基較佳意指甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、異丁氧基、第二丁氧基、第三丁氧基、正戊氧基、第二戊氧基、2-甲基丁氧基、正己氧基、環己氧基、正庚氧基、環庚氧基、正辛氧基、環辛氧基、2-乙基己氧基、五氟乙氧基、2,2,2-三氟乙氧基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、異丙硫基、正丁硫基、異丁硫基、第二丁硫基、第三丁硫基、正戊硫基、第二戊硫基、正己硫基、環己硫基、正庚硫基、環庚硫基、正辛硫基、環辛硫基、2-乙基己硫基、三氟甲硫基、五氟乙硫基、2,2,2-三氟乙硫基、乙烯硫基、丙烯硫基、丁烯硫基、戊烯硫基、環戊烯硫基、己烯硫基、環己烯硫基、庚烯硫基、環庚烯硫基、辛烯硫基、

環辛烯硫基、乙炔硫基、丙炔硫基、丁炔硫基、戊炔硫基、己炔硫基、庚炔硫基或辛炔硫基。

為了本申請案，兩個或更多個基可彼此形成環的簡述係意圖意指，尤其是，兩個基係藉由化學鍵彼此連接。此係藉由下列方案例示說明：



再者，然而，上述簡述也意圖意指，在兩個基之一者表示氫之情況下，則第二個基鍵結在該氫原子所鍵結之位置，而形成環。此係藉由下列方案例示說明：



根據較佳具體實施例，在兩個相鄰  $\text{Ar}^2$  及  $\text{Ar}^1$  基間的鍵與在兩個相鄰  $\text{Ar}^2$  基間的鍵係在對位。

根據較佳具體實施例，n為1至10，更佳2至8，特佳2至4之整數。

根據本發明之較佳具體實施例，式(1)化合物帶有至少一個  $\text{R}^0$  或  $\text{R}^1$  基，其表示具有2至40個C原子，較佳3至20個C原子，非常佳6至10個C原子之直鏈烷基、或具有3至40個C原子，較佳4至20個C原子，非常佳6至10個C原子之

分支或環狀烷基，其之各者可經一或多個R<sup>2</sup>基取代。

非常佳的是，式(1)化合物含有兩個相鄰R<sup>0</sup>基，其係相同或不同地選自具有2至40個C原子，較佳3至20個C原子，非常佳6至10個C原子之直鏈烷基、及具有3至40個C原子，較佳4至20個C原子，非常佳6至10個C原子之分支或環狀烷基，其之各者可經一或多個R<sup>2</sup>基取代。

更佳的是，Ar<sup>1</sup>每次出現時相同或不同地表示具有6至14個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個R<sup>1</sup>基取代，其中式(1)中Ar<sup>1</sup>基之至少一者具有10或更多個芳族環原子。

更佳的是，Ar<sup>2</sup>表示苯基，其在各情況下可經一或多個R<sup>1</sup>基取代；

根據較佳具體實施例，式(1)中Ar<sup>1</sup>基二者每次出現時相同或不同地表示具有10至14個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個R<sup>1</sup>基取代。

更佳地，式(1)中Ar<sup>1</sup>基二者表示具有10個芳族環原子之芳基，其在各情況下可經一或多個R<sup>1</sup>基取代。

特佳地，Ar<sup>1</sup>基二者表示萘基，其可經一或多個R<sup>1</sup>基取代，及Ar<sup>2</sup>表示苯基，其可經一或多個R<sup>1</sup>基取代。

根據更佳具體實施例，式(1)中一個Ar<sup>1</sup>基表示具有10個芳族環原子之芳基或雜芳基及一個Ar<sup>1</sup>基表示具有6個芳族環之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個R<sup>1</sup>基取代。

特佳地，一個Ar<sup>1</sup>基表示萘基及一個Ar<sup>1</sup>基表示苯基，

其在各情況下可經一或多個R<sup>1</sup>基取代，及Ar<sup>2</sup>基表示苯基，其可經一或多個R<sup>1</sup>基取代。

較佳的是，E基每次出現時相同或不同地選自-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-、-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-、-R<sup>0</sup>C=CR<sup>0</sup>-、-Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-、-C(=O)-、-O-、-S-、-S(O<sub>2</sub>)-及N(R<sup>0</sup>)，更佳選自-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-、-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-、-O-、-S-及N(R<sup>0</sup>)。特佳的是，E表示-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-。

較佳地，R<sup>0</sup>每次出現時相同或不同地選自下列所組成群組：H；D；F；CN；Si(R<sup>2</sup>)<sub>3</sub>；具有1至10個C原子之直鏈烷基或具有3至10個C原子之分支或環狀烷基，其之各者可經一或多個R<sup>2</sup>基取代，其中在各情況下一或多個H原子可經F置換；或具有5至40個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個R<sup>2</sup>基取代，其中兩個相鄰R<sup>0</sup>取代基可形成單環或雙環之脂族環系統或芳族環系統，其可經一或多個R<sup>2</sup>基取代。

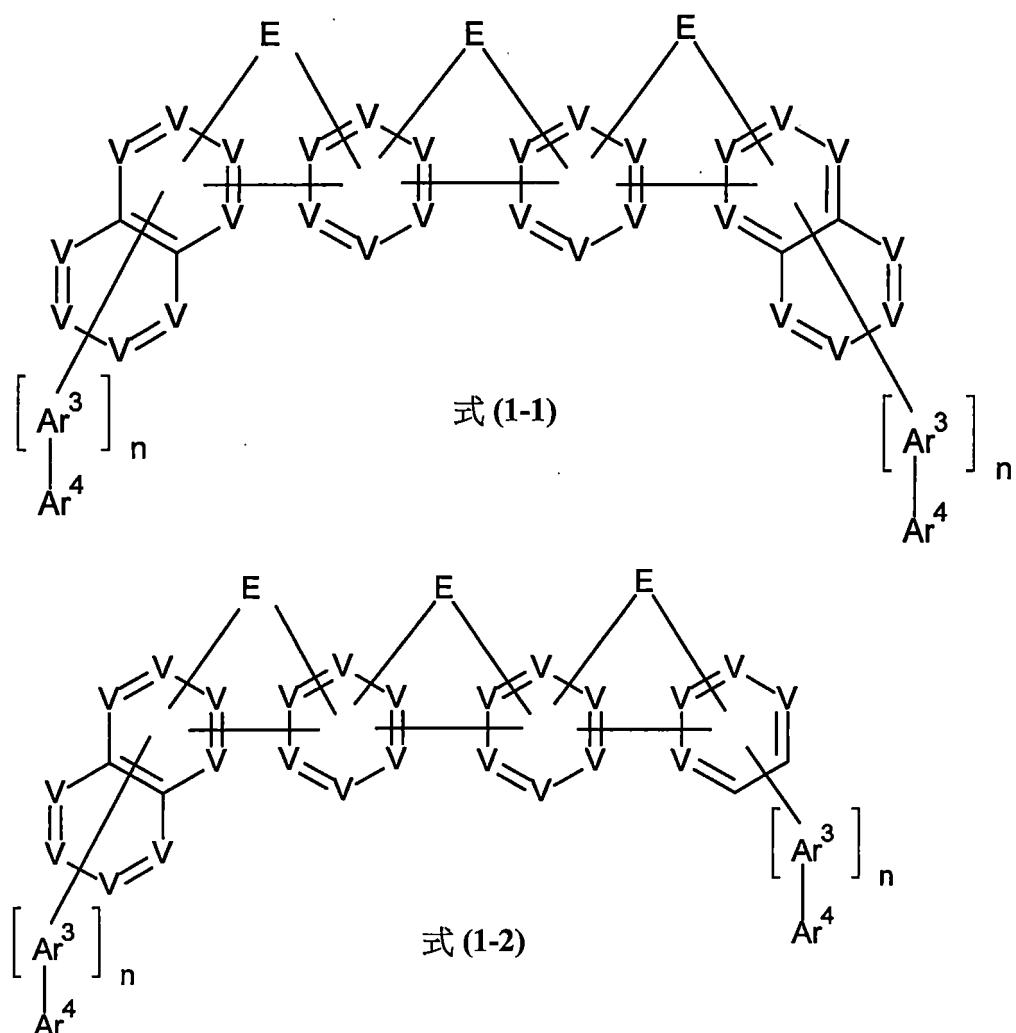
根據本發明之較佳具體實施例，E表示-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>且-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-基的兩個相鄰R<sup>0</sup>取代基形成單環系統，以致形成螺基。更佳地，兩個相鄰R<sup>0</sup>取代基形成螺-環己烷環或螺-環戊烷環。

更佳的是，R<sup>1</sup>每次出現時相同或不同地選自由下列所組成群組：H；D；F；CN；具有1至10個C原子之直鏈烷基或烷氧基或具有3至10個C原子之分支或環狀烷基或烷氧基，其之各者可經一或多個R<sup>2</sup>基取代，其中一或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基可經O置換以及其中一或多個H原子可經F置換；具有5至24個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各

情況下可經一或多個 R<sup>2</sup>基取代。

更佳的是，R<sup>2</sup>每次出現時相同或不同地選自由下列所組成群組：H；D；F；CN；具有1至10個C原子之直鏈烷基或烷氧基或具有3至10個C原子之分支或環狀烷基或烷氧基，其之各者可經一或多個R<sup>3</sup>基取代，其中一或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基可經O置換以及其中一或多個H原子可經F置換；具有5至24個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下可經一或多個R<sup>3</sup>基取代。

式(1)化合物較佳選自式(1-1)及式(1-2)化合物，



其中符號E、Ar<sup>3</sup>、Ar<sup>4</sup>及標號n具有如上之相同意義且

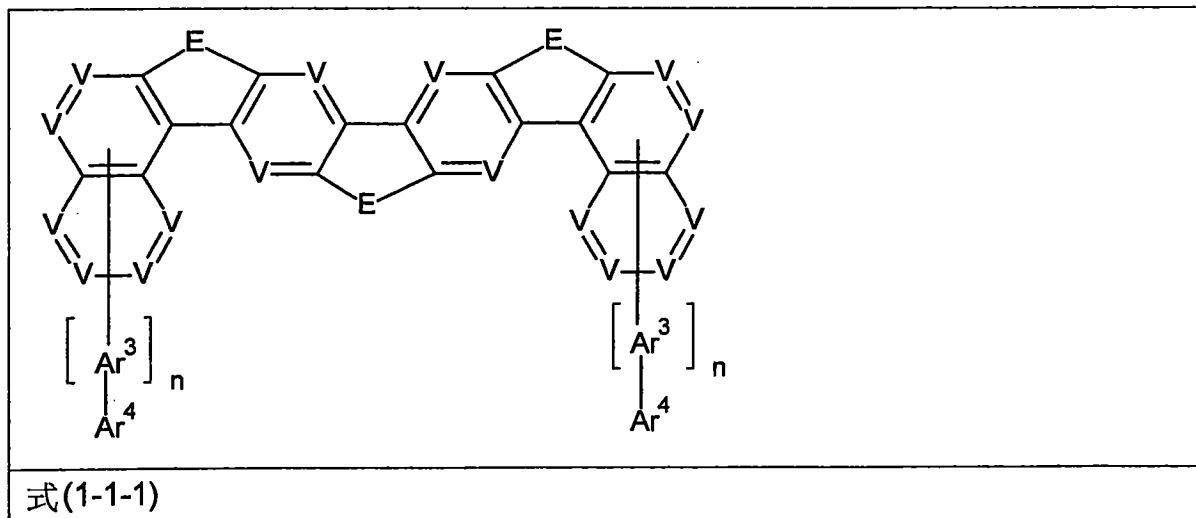
其中：

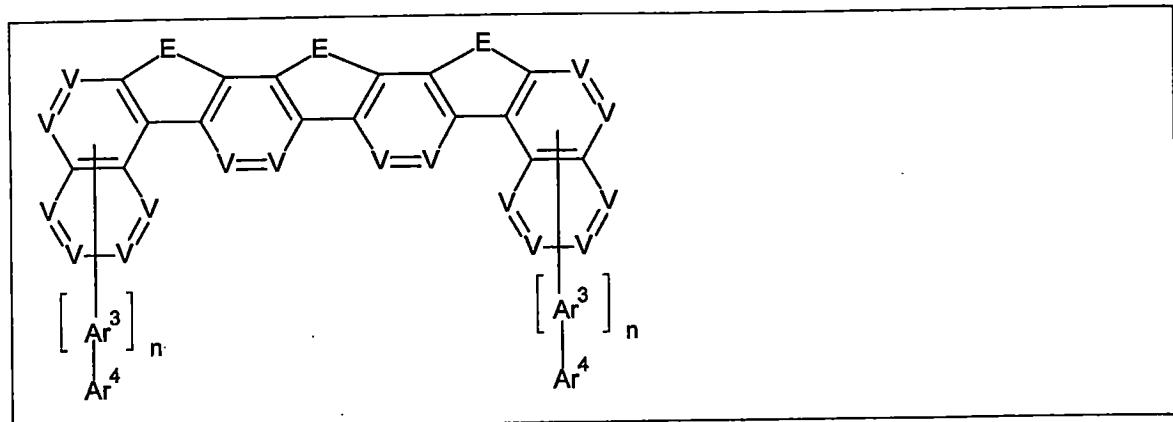
V 每次出現時相同或不同地為 CR<sup>1</sup>或 N，其中當 V 鍵結至 Ar<sup>3</sup>基或至 E 基時，V 為 C。

關於式(1-1)及(1-2)，E 基與含有 X 之相鄰 6-員環或含有 E 之相鄰 10-員環間的鍵結可在各有空位置發生。因此，咸理解該等 E 基可相對於彼此在順式或反式位置，如上面 E 基之定義中所提及般。

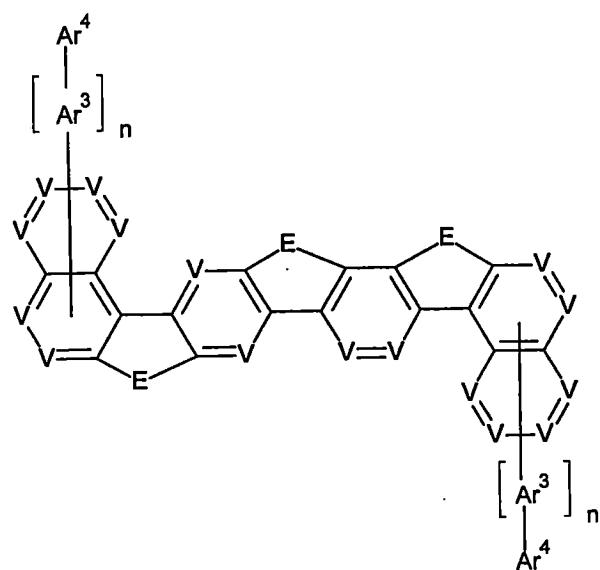
較佳的是，每 6-員環有最大兩個 V 基等於 N。更佳地，V 每次出現時表示 CR<sup>1</sup>。

根據本發明較佳具體實施例，式(1)、(1-1)及(1-2)化合物係選自下式(1-1-1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)化合物，

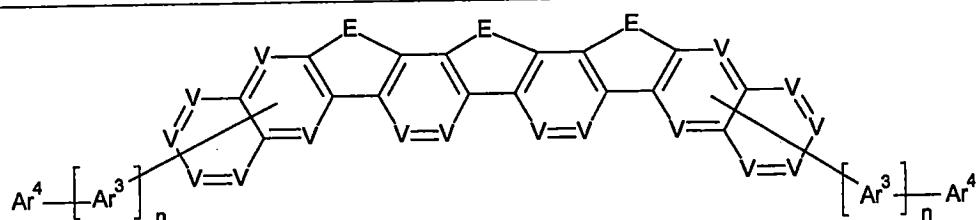




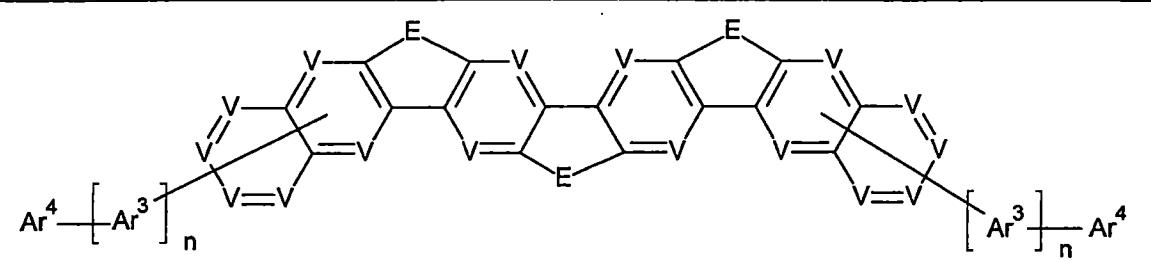
式(1-1-2)



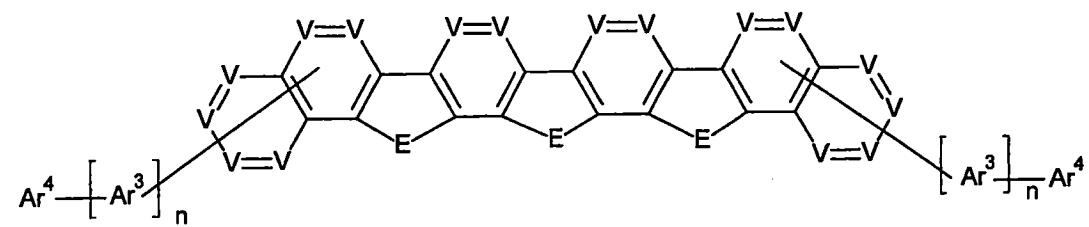
式(1-1-3)



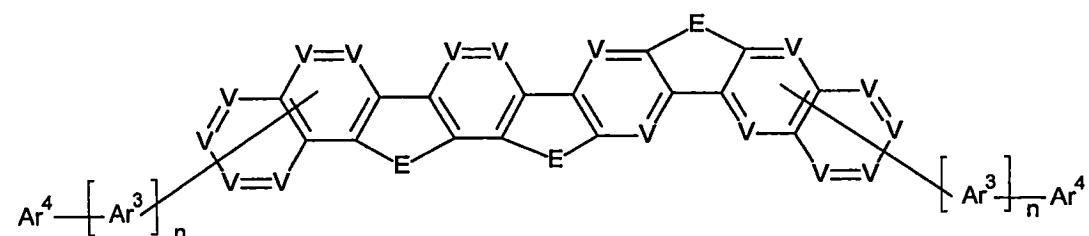
式(1-1-4)



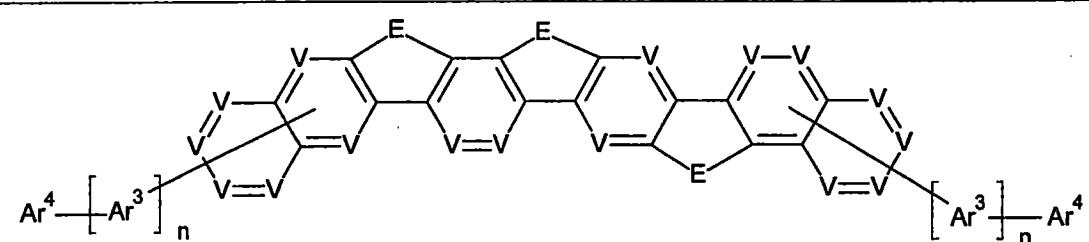
式(1-1-5)



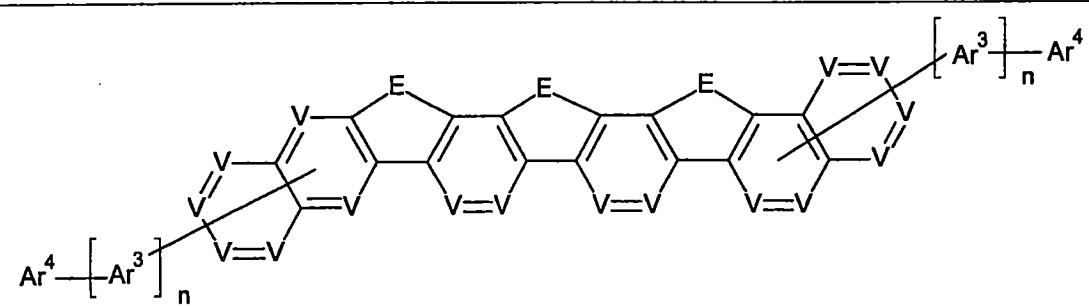
式(1-1-6)



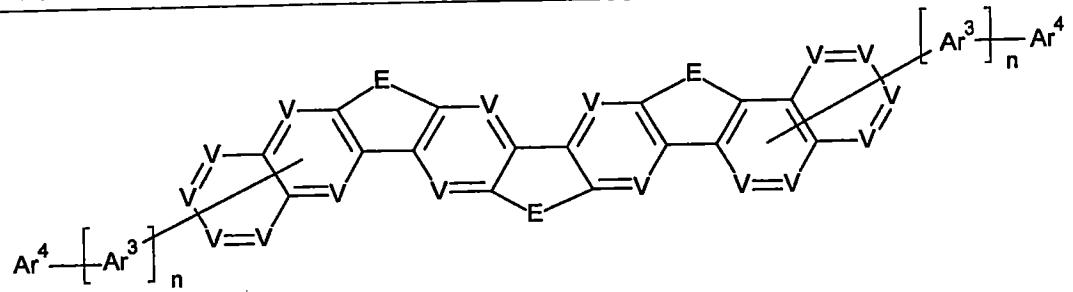
式(1-1-7)



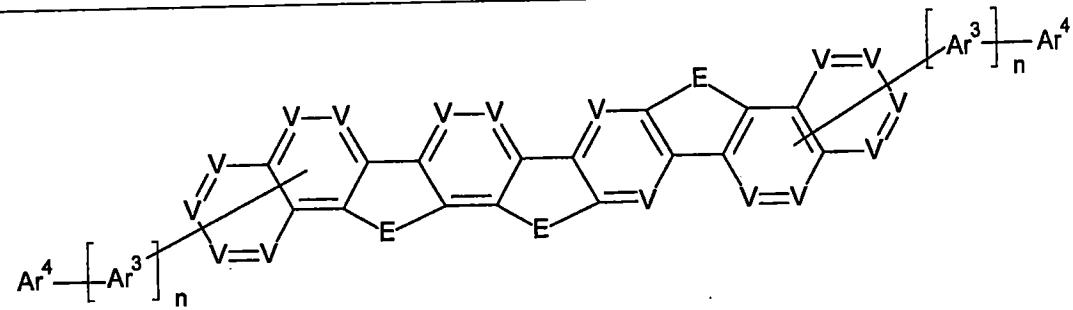
式(1-1-8)



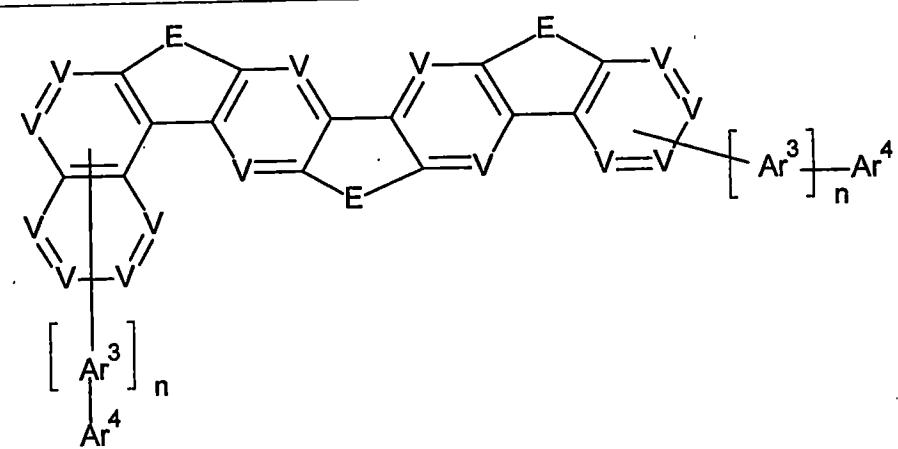
式(1-1-9)



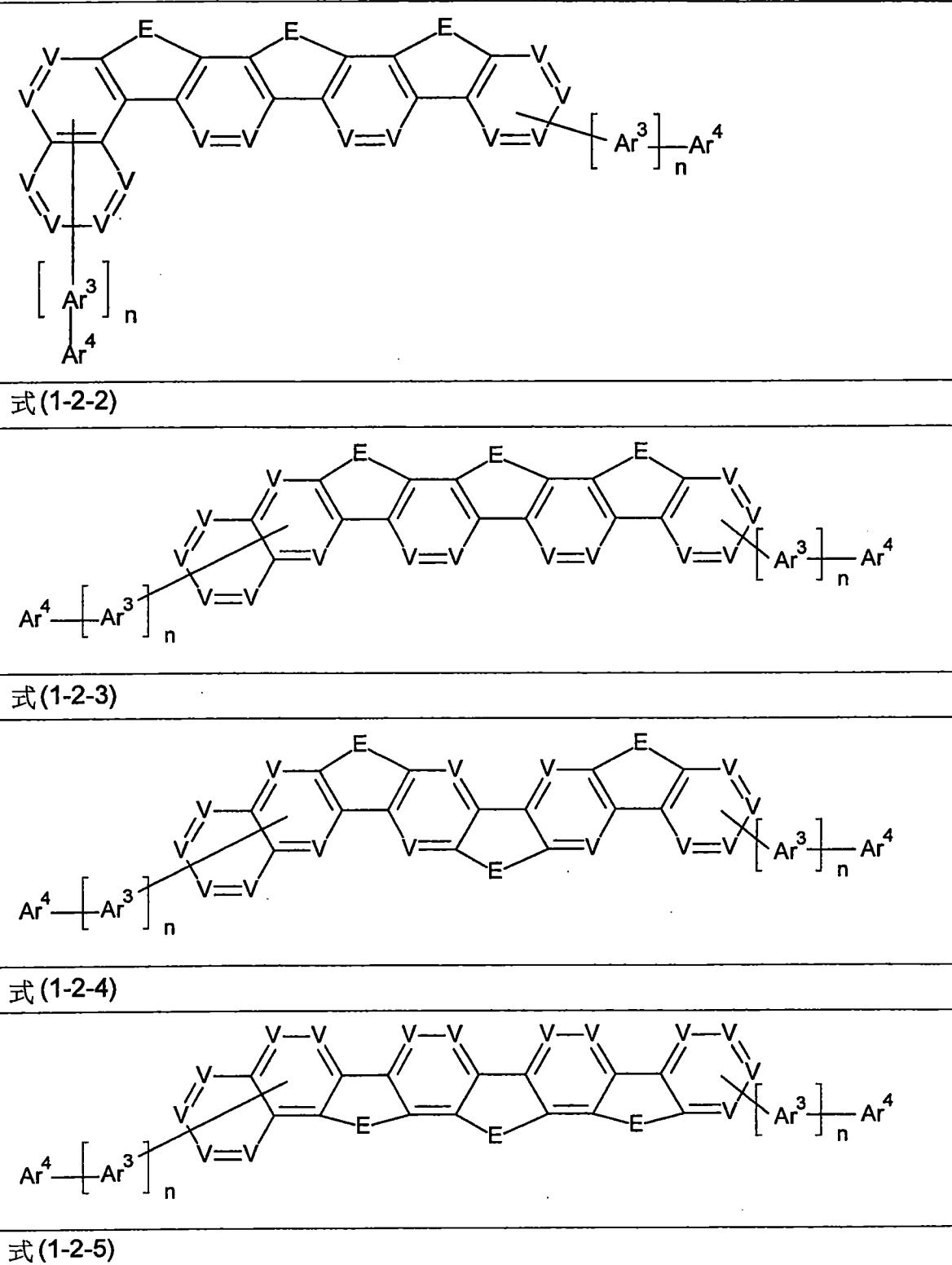
式(1-1-10)

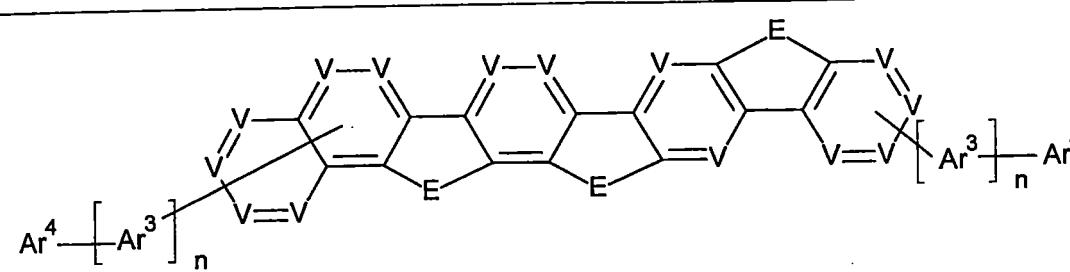


式(1-1-11)

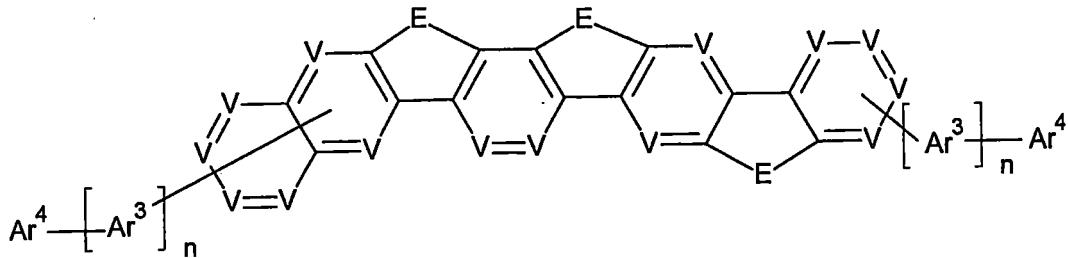


式(1-2-1)





式(1-2-6)

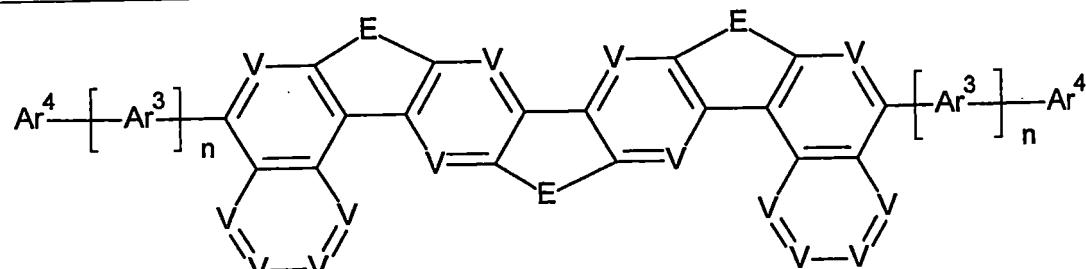


式(1-2-7)

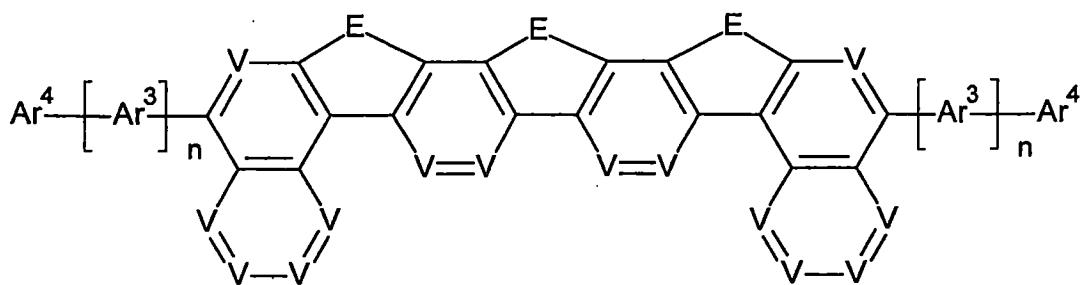
其中符號 V、E、 $\text{Ar}^3$ 、 $\text{Ar}^4$ 及標號 n 具有如上之相同意義。

於式(1-1-1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)中，式(1-1-1)至(1-1-11)為較佳者。式(1-1-1)及(1-1-2)為特佳者。式(1-1-1)為尤佳者。

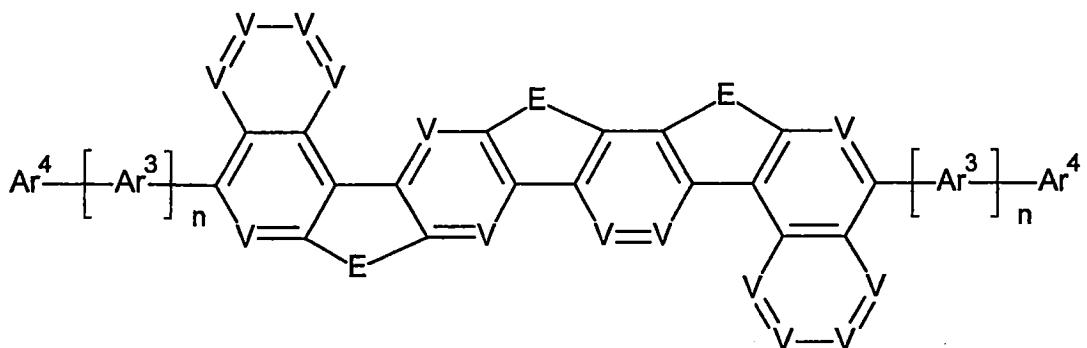
根據本發明非常佳具體實施例，式(1)、(1-1)及(1-2)、(1-1-1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)化合物係選自式(1-1-1-a)至(1-1-11-a)及式(1-2-1-a)至(1-2-7-a)化合物，



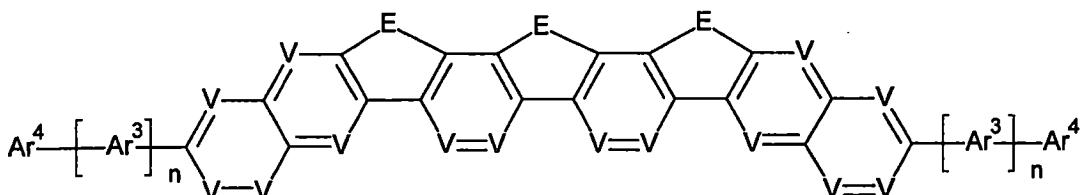
式(1-1-1-a)



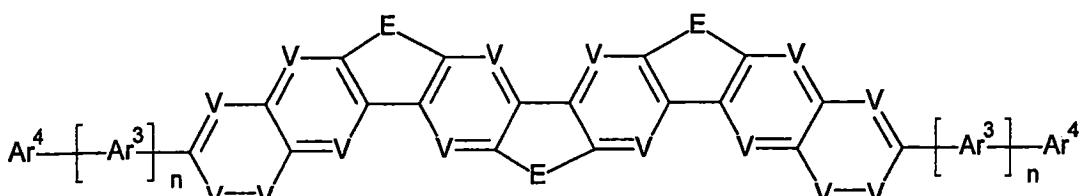
式(1-1-2-a)



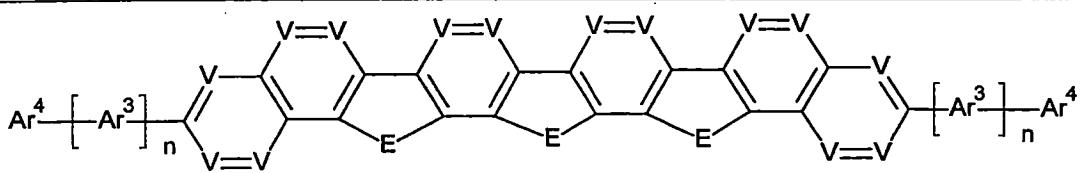
式(1-1-3-a)



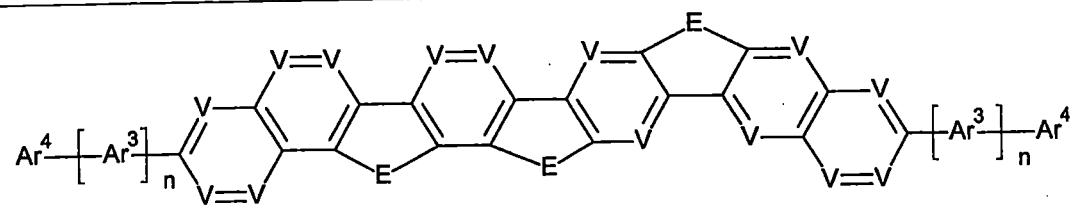
式(1-1-4-a)



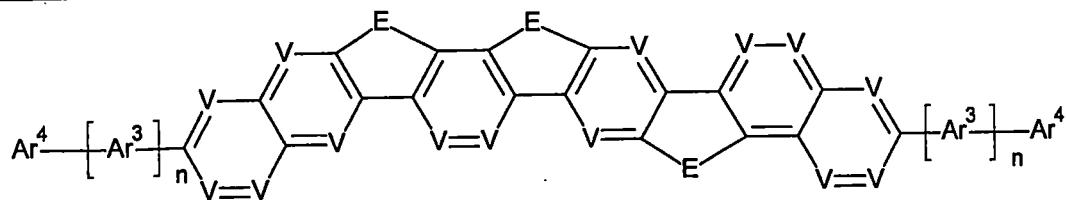
式(1-1-5-a)



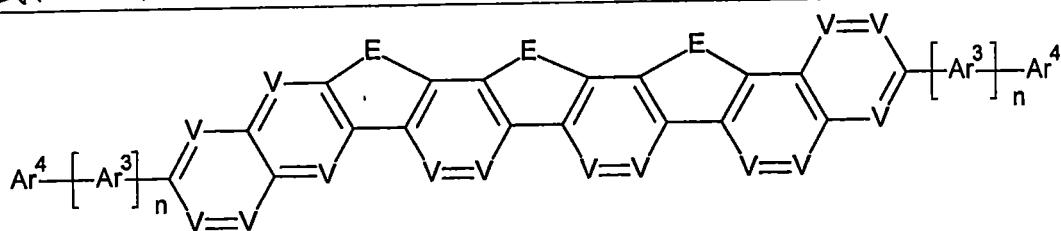
式(1-1-6-a)



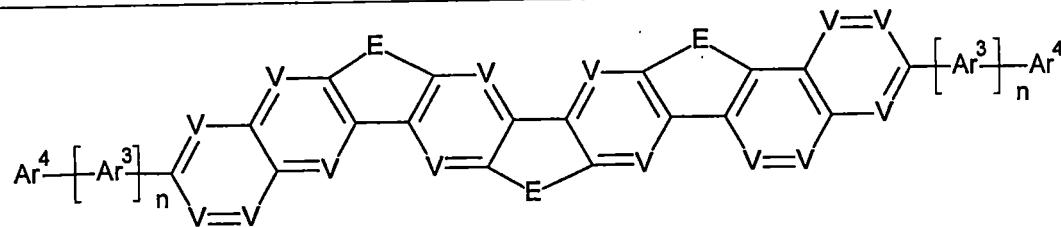
式(1-1-7-a)



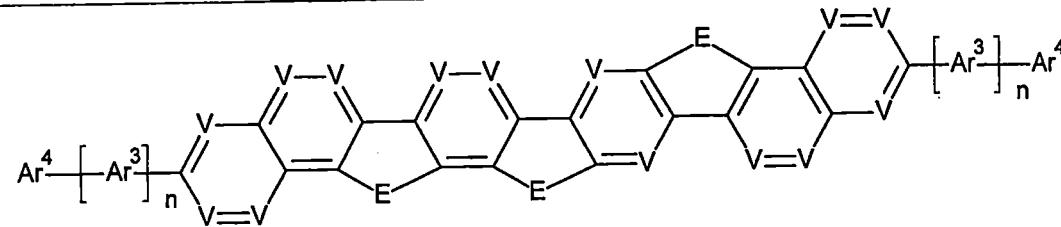
式(1-1-8-a)



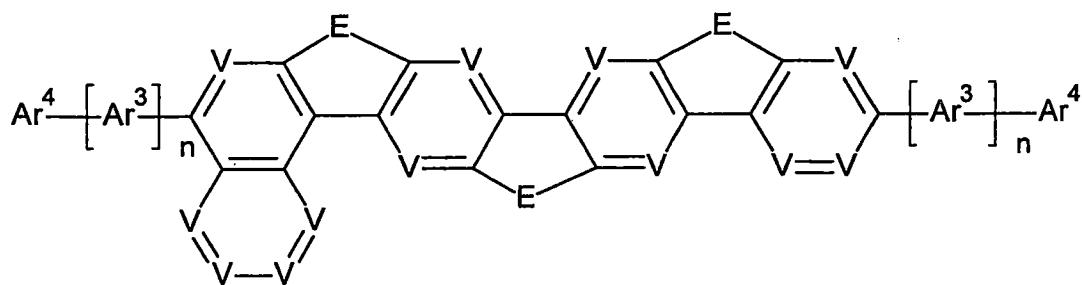
式(1-1-9-a)



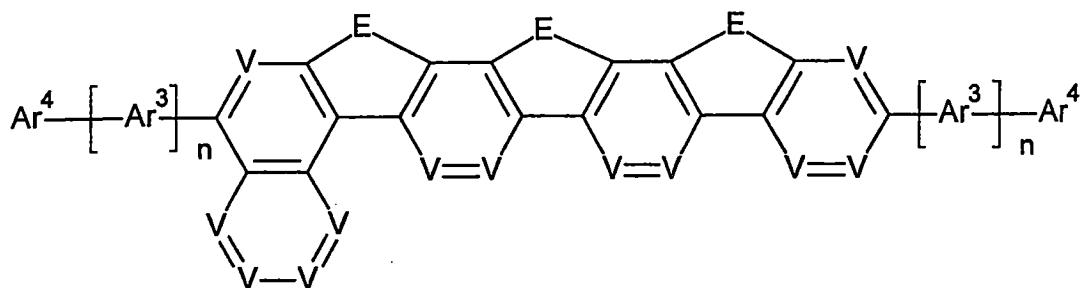
式(1-1-10-a)



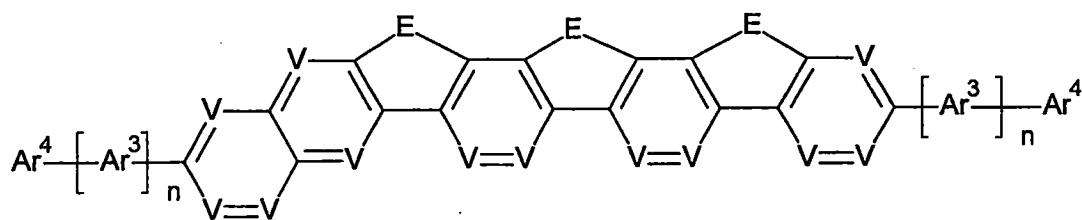
式(1-1-11-a)



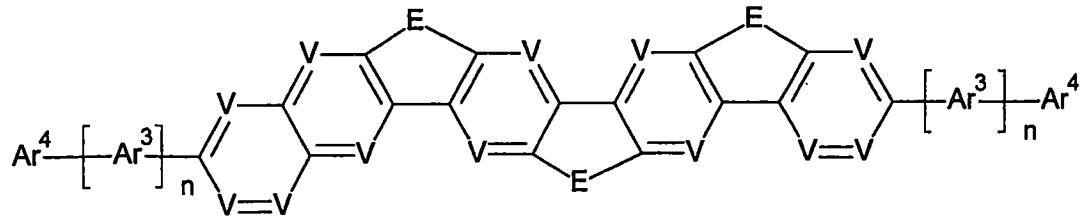
式(1-2-1-a)



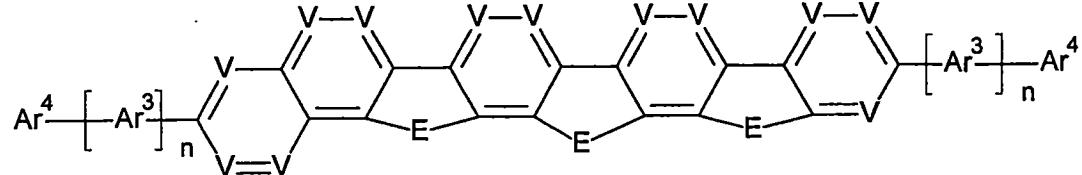
式(1-2-2-a)



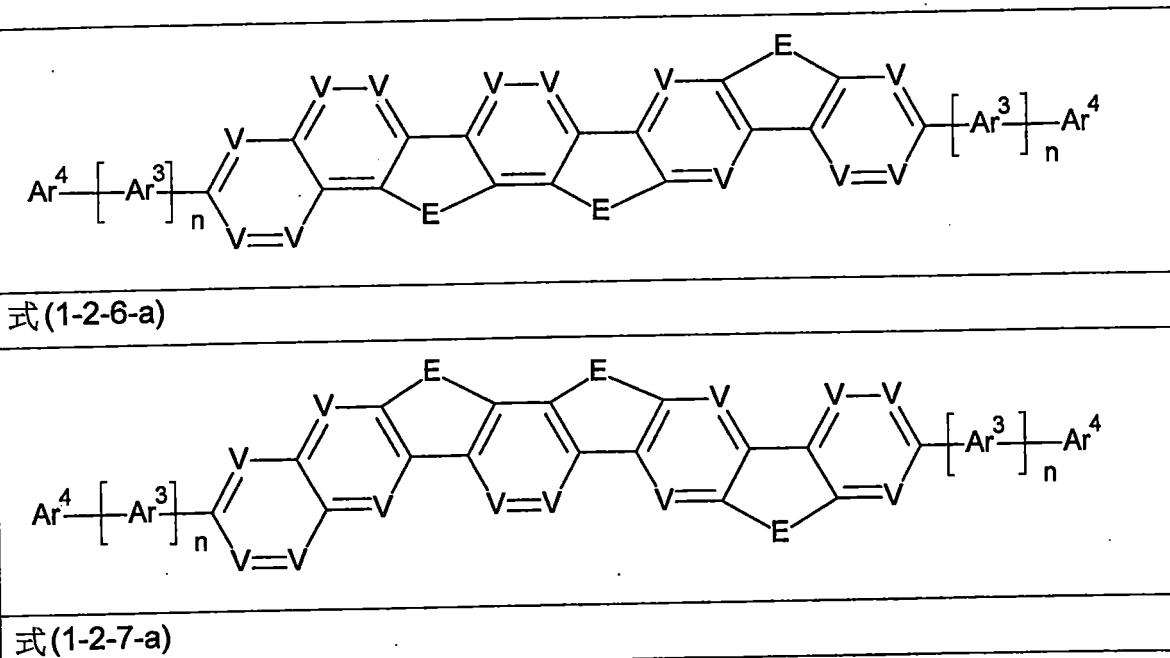
式(1-2-3-a)



式(1-2-4-a)



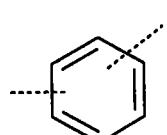
式(1-2-5-a)



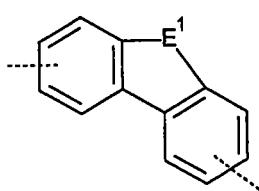
其中符號 V、E、Ar<sup>3</sup>、Ar<sup>4</sup>及標號 n 具有如上之相同意義。

於式(1-1-1-a)至(1-1-11-a)及式(1-2-1-a)至(1-2-7-a)中，式(1-1-1-a)至(1-1-11-a)為較佳者。式(1-1-1-a)及(1-1-2-a)為特佳者。式(1-1-1-a)為尤佳者。

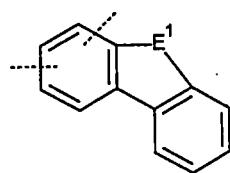
根據較佳具體實施例，Ar<sup>3</sup>係選自式(Ar3-1)至(Ar3-25)之一者，



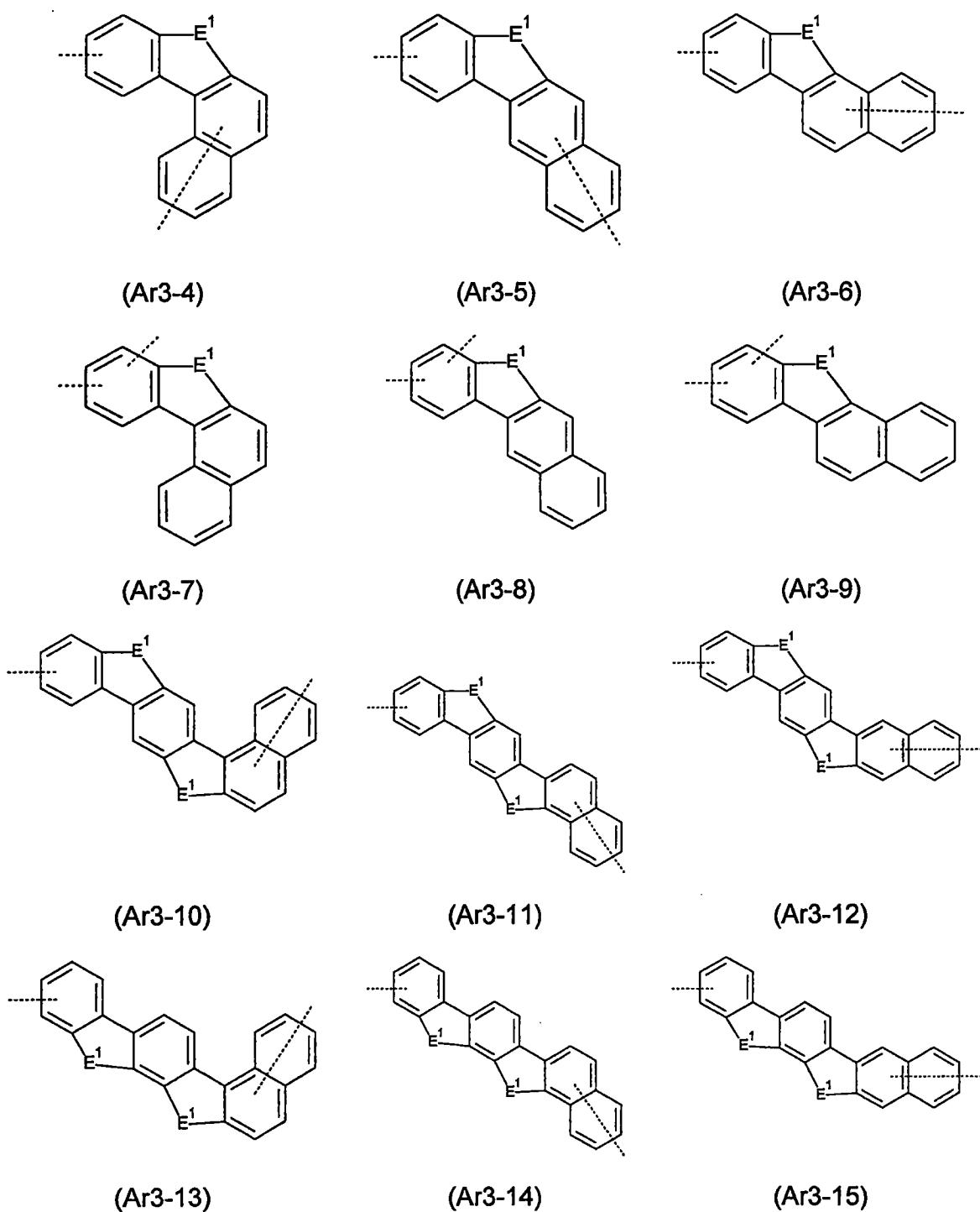
(Ar3-1)

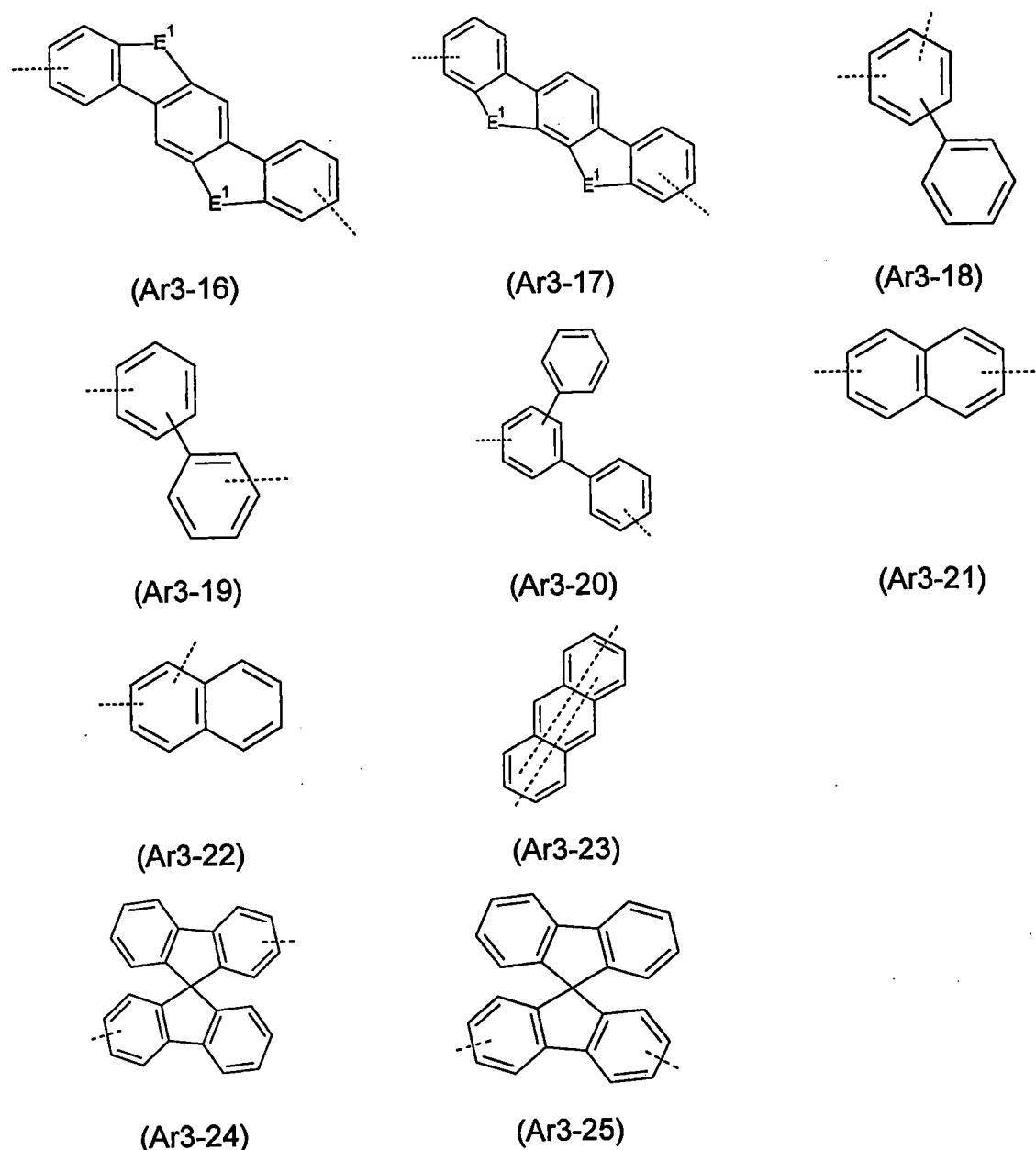


(Ar3-2)



(Ar3-3)





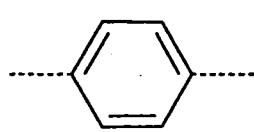
其中虛線鍵指出與 Ar<sup>1</sup> 及與 Ar<sup>3</sup> 或 Ar<sup>4</sup> 基之鍵結且式 (Ar3-1)至(Ar3-25)之基可在各有空位置經 R<sup>1</sup>基取代，R<sup>1</sup>具有如上之相同意義且其中

E<sup>1</sup> 係選自 -B(R<sup>0</sup>)<sup>-</sup>、-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub><sup>-</sup>、-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub><sup>-</sup>、-Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub><sup>-</sup>、-C(=O)-、-C(=NR<sup>0</sup>)-、-C=(C(R<sup>0</sup>))<sub>2</sub><sup>-</sup>、-O-、-S-、-S(=O)-、-SO<sub>2</sub>-、-N(R<sup>0</sup>)-、-P(R<sup>0</sup>)-及-P((=O)R<sup>0</sup>)-，其中 R<sup>0</sup>取代基具有如上之相同意義。

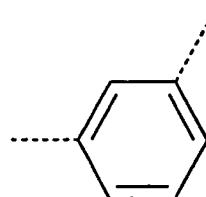
較佳地， $E^1$ 係選自 $-C(R^0)_2-$ 、 $-C(R^0)_2-C(R^0)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 及 $-N(R^0)-$ ，其中 $R^0$ 取代基具有如上之相同意義。非常佳地， $E^1$ 表示 $-C(R^0)_2-$ 。

於式(Ar3-1)至(Ar3-25)中，式(Ar3-1)、(Ar3-2)、(Ar3-4)、(Ar3-10)、(Ar3-13)、(Ar3-16)、(Ar3-19)及(Ar3-22)為較佳者。式(Ar3-1)、(Ar3-2)、(Ar3-4)及(Ar3-19)為特佳者。

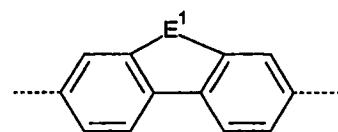
根據非常佳具體實施例， $Ar^3$ 係選自式(Ar3-1-1)至(Ar3-25-3)之一者，



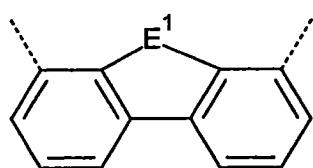
(Ar3-1-1)



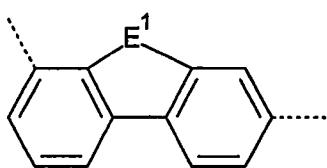
(Ar3-1-2)



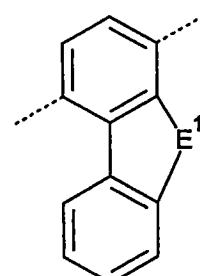
(Ar3-2-1)



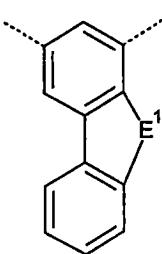
(Ar3-2-2)



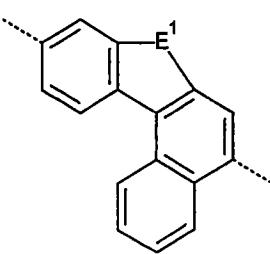
(Ar3-2-3)



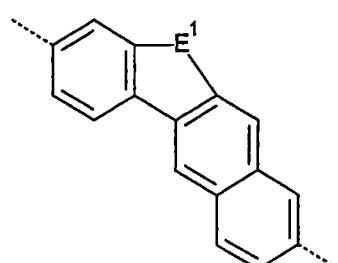
(Ar3-3-1)



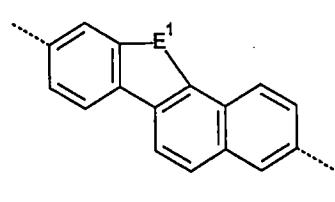
(Ar3-3-2)



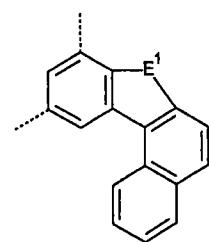
(Ar3-4-1)



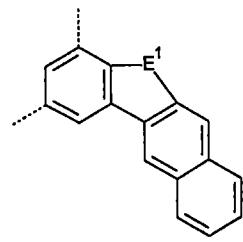
(Ar3-5-1)



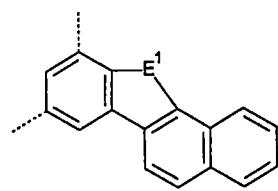
(Ar3-6-1)



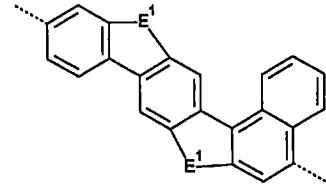
(Ar3-7-1)



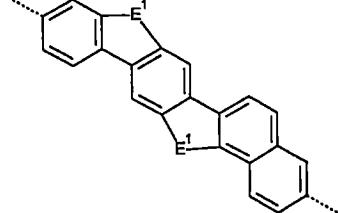
(Ar3-8-1)



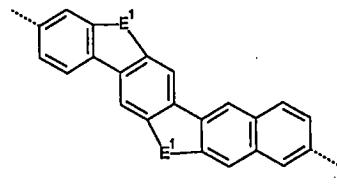
(Ar3-9-1)



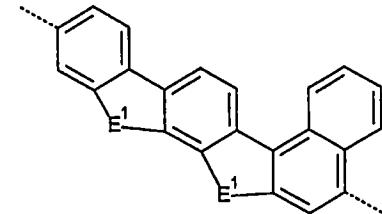
(Ar3-10-1)



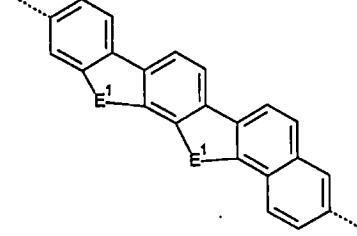
(Ar3-11-1)



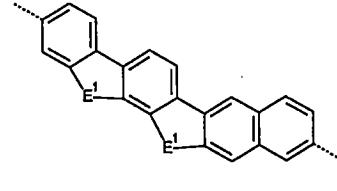
(Ar3-12-1)



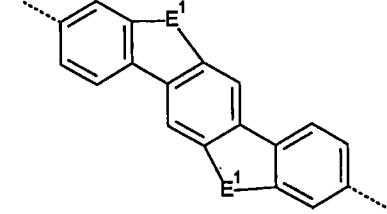
(Ar3-13-1)



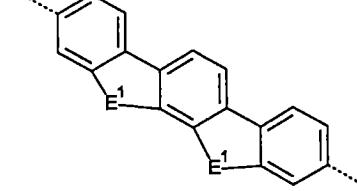
(Ar3-14-1)



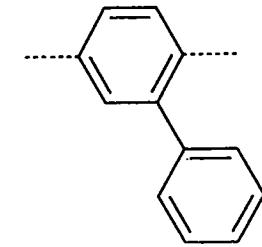
(Ar3-15-1)



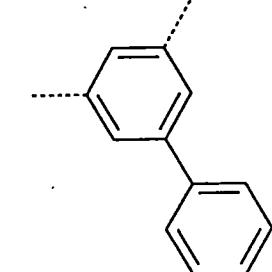
(Ar3-16-1)



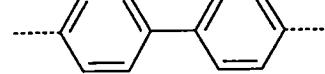
(Ar3-17-1)



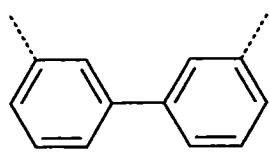
(Ar3-18-1)



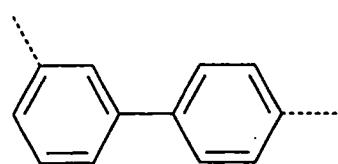
(Ar3-18-2)



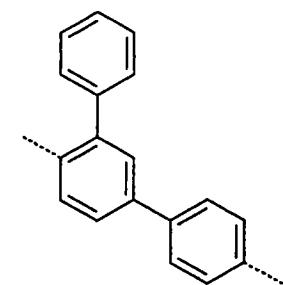
(Ar3-19-1)



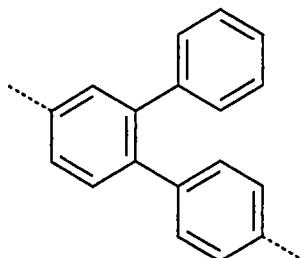
(Ar3-19-2)



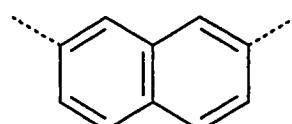
(Ar3-19-3)



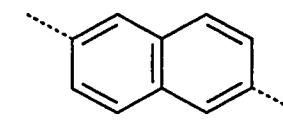
(Ar3-20-1)



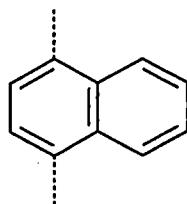
(Ar3-20-2)



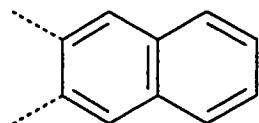
(Ar3-21-1)



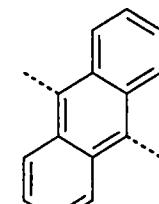
(Ar3-21-2)



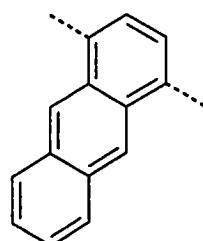
(Ar3-22-1)



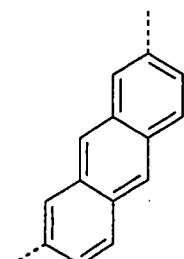
(Ar3-22-2)



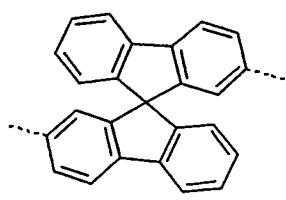
(Ar3-23-1)



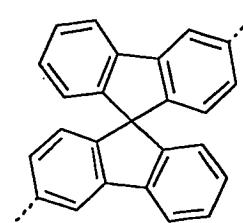
(Ar3-23-2)



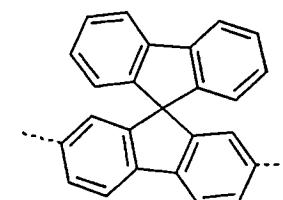
(Ar3-23-3)



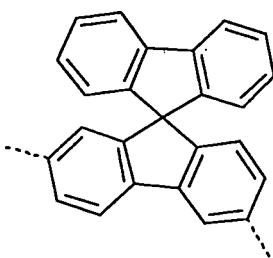
(Ar3-24-1)



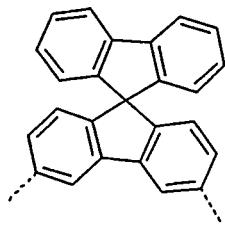
(Ar3-24-2)



(Ar3-25-1)



(Ar3-25-2)

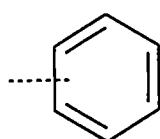


(Ar3-25-3)

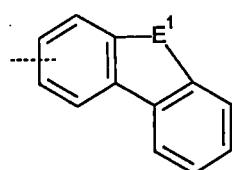
其中虛線鍵指出與  $\text{Ar}^1$  及與  $\text{Ar}^3$  或  $\text{Ar}^4$  基之鍵結且式 (Ar3-1-1) 至 (Ar3-25-3) 之基可在各有空位置經  $\text{R}^1$  基取代， $\text{R}^1$  具有如上之相同意義且其中  $\text{E}^1$  具有如上之相同意義。

於式 (Ar3-1-1) 至 (Ar3-25-3) 中，式 (Ar3-1-1)、(Ar3-2-1)、(Ar3-4-1)、(Ar3-10-1)、(Ar3-13-1)、(Ar3-16-1)、(Ar3-19-1) 及 (Ar3-22-1) 為較佳者。式 (Ar3-1-1)、(Ar3-2-1)、(Ar3-4-1) 及 (Ar3-19-1) 為特佳者。

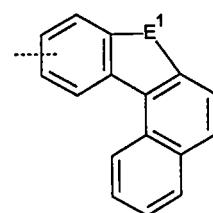
根據較佳具體實施例， $\text{Ar}^4$  係選自式 (Ar4-1) 至 (Ar4-27) 之一者，



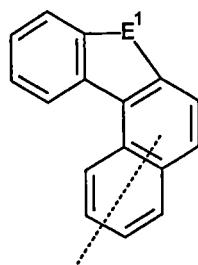
(Ar4-1)



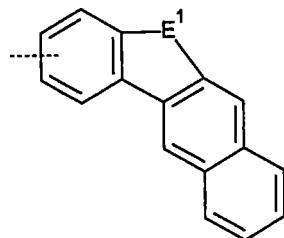
(Ar4-2)



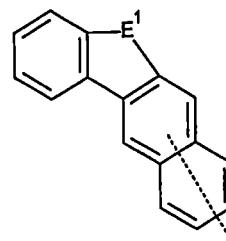
(Ar4-3)



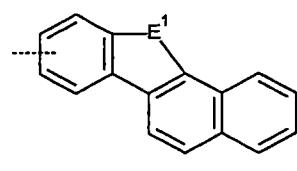
(Ar4-4)



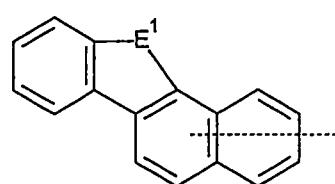
(Ar4-5)



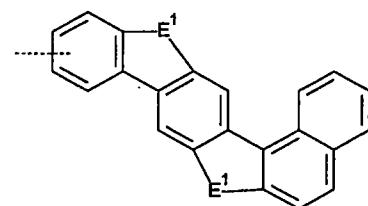
(Ar4-6)



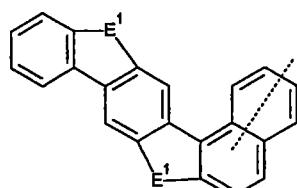
(Ar4-7)



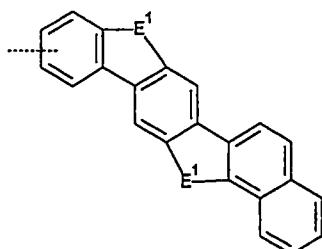
(Ar4-8)



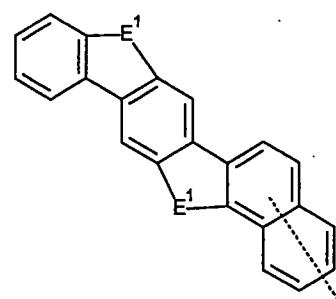
(Ar4-9)



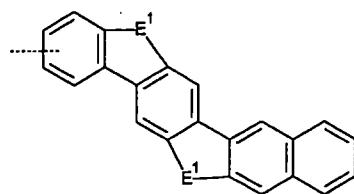
(Ar4-10)



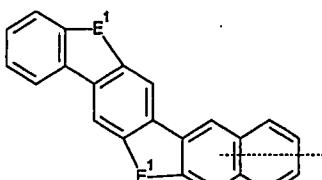
(Ar4-11)



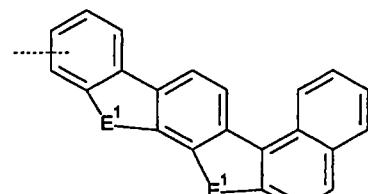
(Ar4-12)



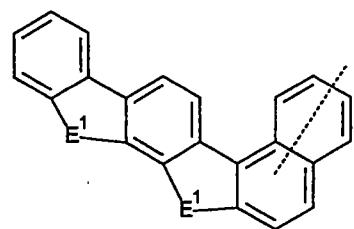
(Ar4-13)



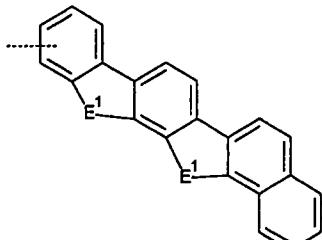
(Ar4-14)



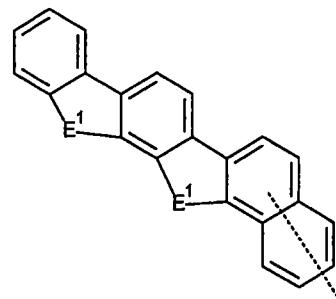
(Ar4-15)



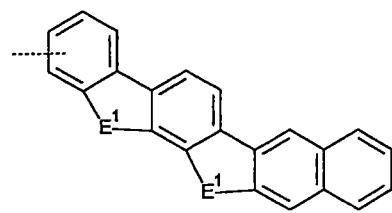
(Ar4-16)



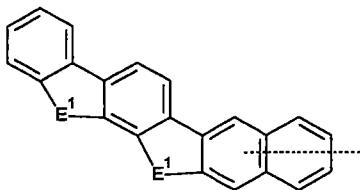
(Ar4-17)



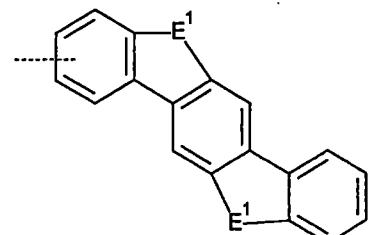
(Ar4-18)



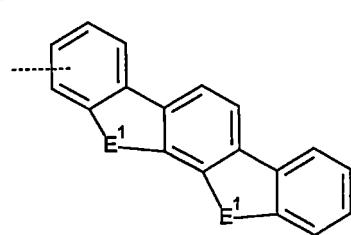
(Ar4-19)



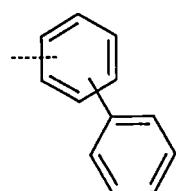
(Ar4-20)



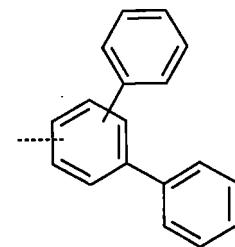
(Ar4-21)



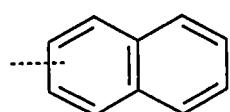
(Ar4-22)



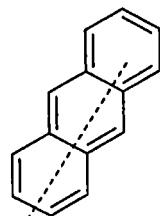
(Ar4-23)



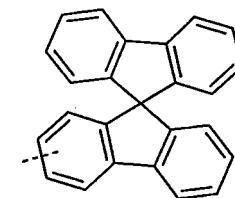
(Ar4-24)



(Ar4-25)



(Ar4-26)

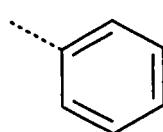


(Ar4-27)

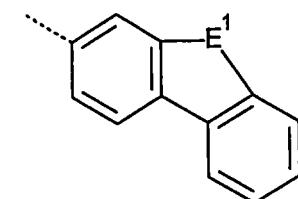
其中虛線鍵指出與  $\text{Ar}^3$  之鍵結且其中  $\text{E}^1$  具有如上之相同意義，及式 (Ar4-1) 至 (Ar4-27) 之基可在各有空位置經  $\text{R}^1$  基取代， $\text{R}^1$  具有如上之相同意義。

於式 (Ar4-1) 至 (Ar4-27) 中，式 (Ar4-1)、(Ar4-2)、(Ar4-3)、(Ar4-9)、(Ar4-15)、(Ar4-23) 及 (Ar4-25) 為較佳者。式 (Ar4-1)、(Ar4-2) 及 (Ar4-3) 為特佳者。

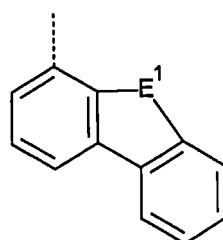
根據非常佳具體實施例， $\text{Ar}^4$  係選自式 (Ar4-1-1) 至 (Ar4-27-3) 之一者，



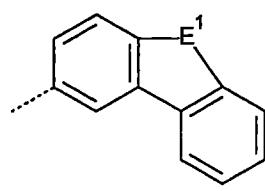
(Ar4-1-1)



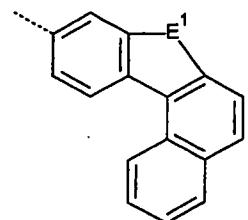
(Ar4-2-1)



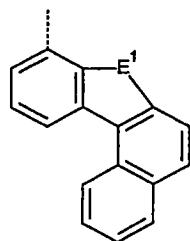
(Ar4-2-2)



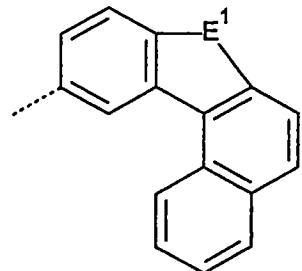
(Ar4-2-3)



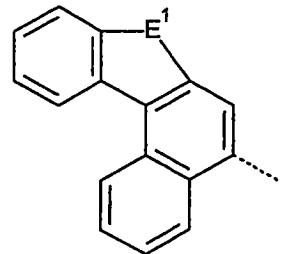
(Ar4-3-1)



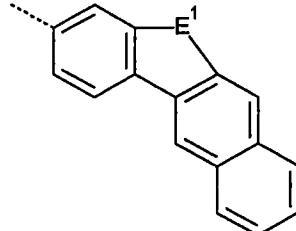
(Ar4-3-2)



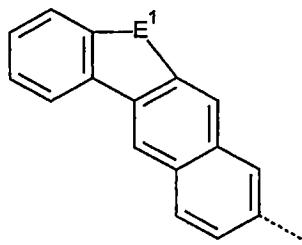
(Ar4-3-3)



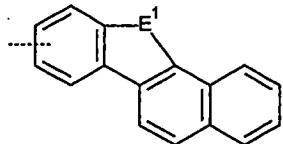
(Ar4-4-1)



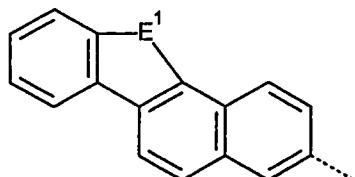
(Ar4-5-1)



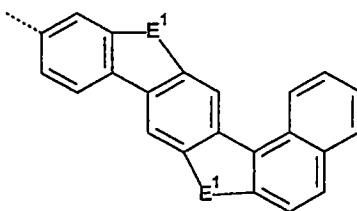
(Ar4-6-1)



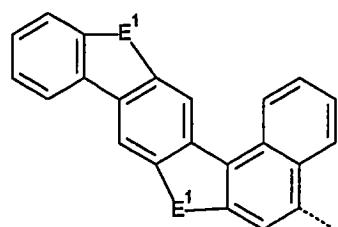
(Ar4-7-1)



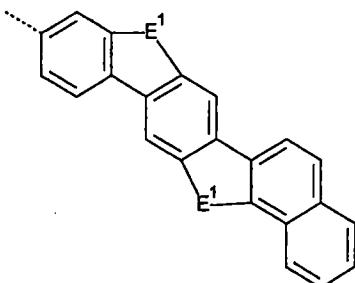
(Ar4-8-1)



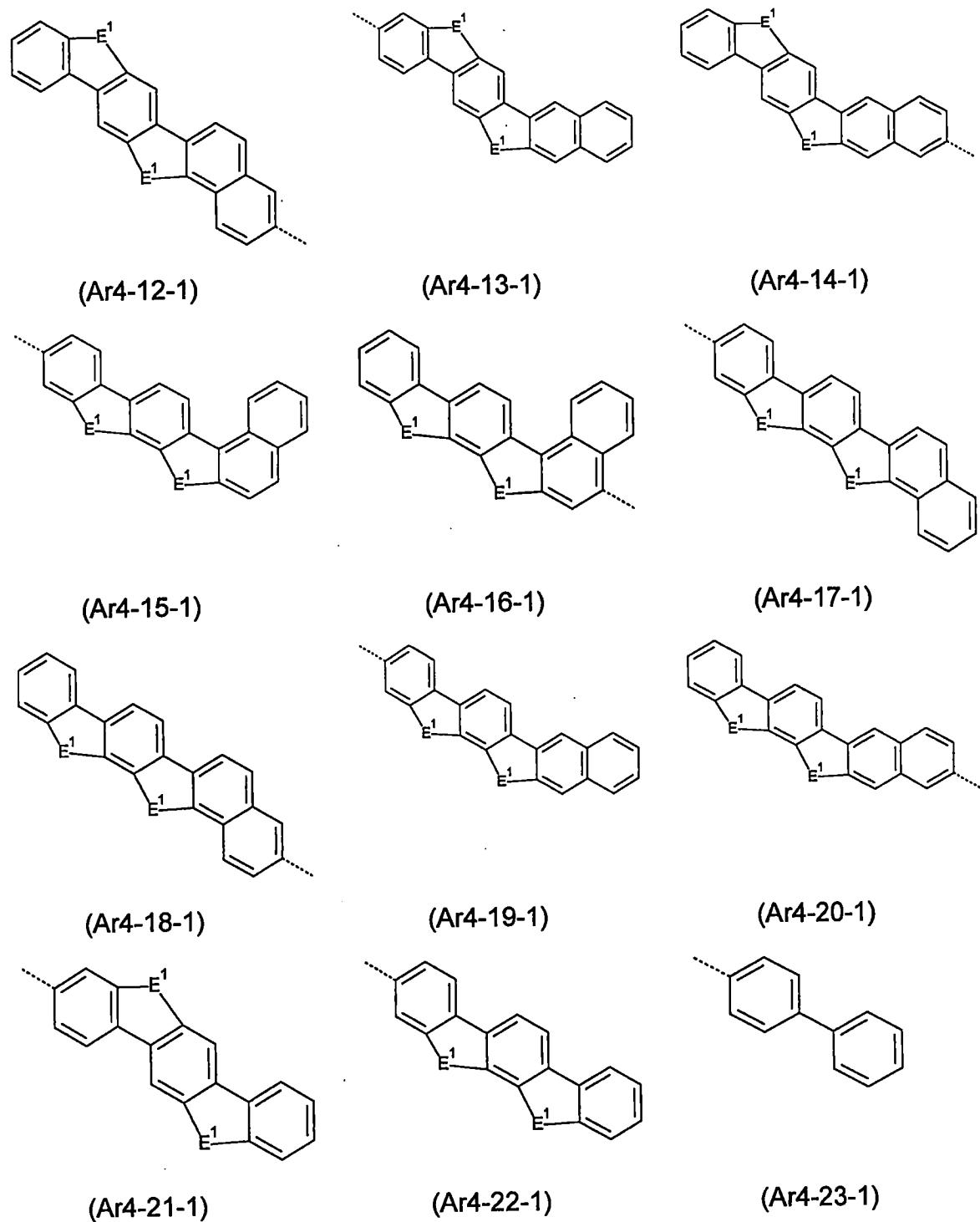
(Ar4-9-1)

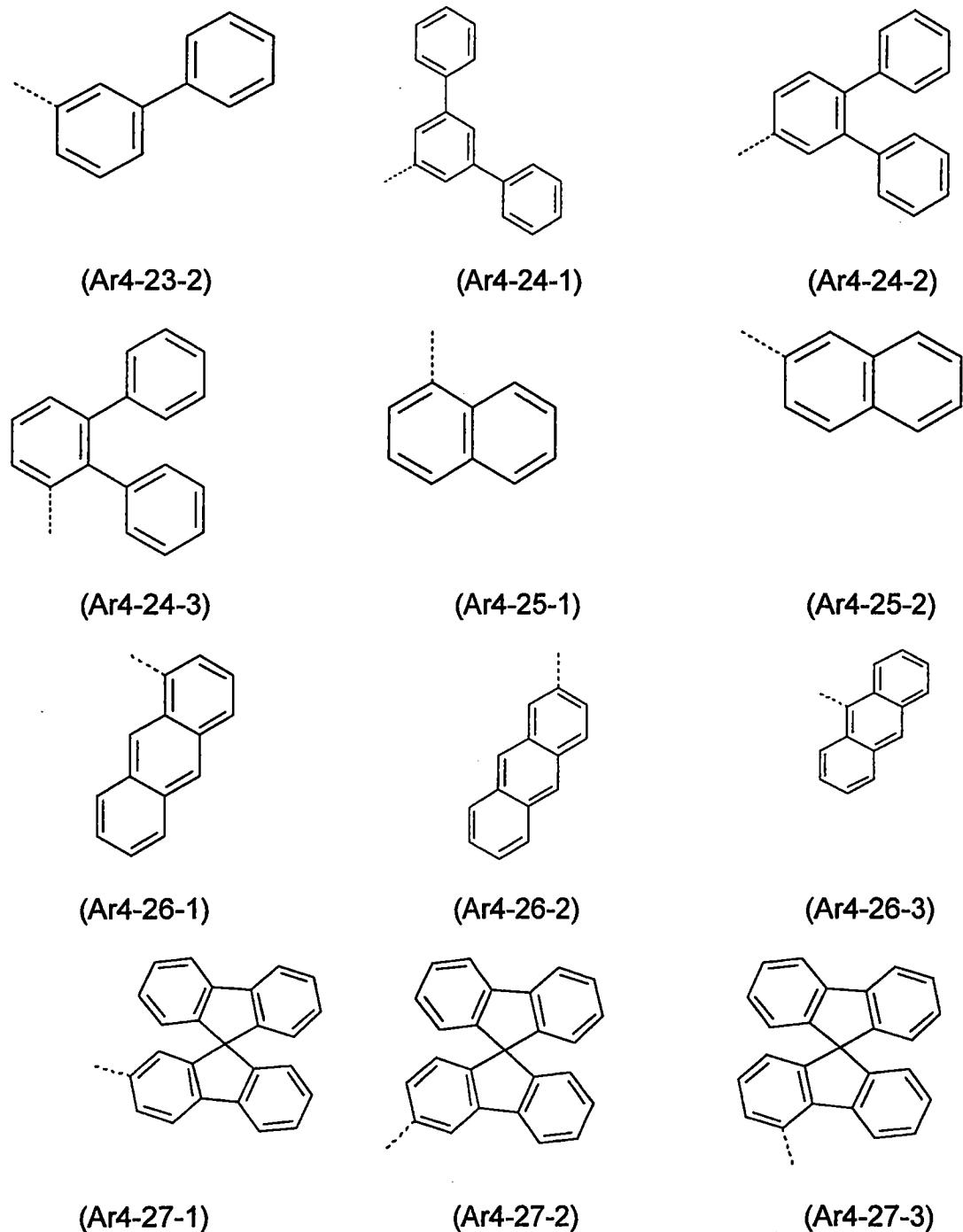


(Ar4-10-1)



(Ar4-11-1)



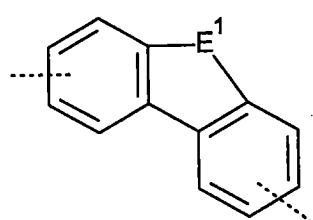


其中虛線鍵指出與  $\text{Ar}^3$  之鍵結且其中  $\text{E}^1$  具有如上之相同意義，及式 (Ar4-1-1) 至 (Ar4-27-3) 之基可在各有空位置經  $\text{R}^1$  基取代， $\text{R}^1$  具有如上之相同意義。

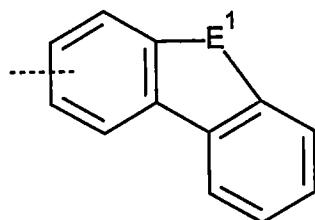
於式 (Ar4-1-1) 至 (Ar4-27-3) 中，式 (Ar4-1-1)、(Ar4-2-1)、(Ar4-3-1)、(Ar4-9-1)、(Ar4-15-1)、(Ar4-23-1)

及 (Ar4-25-1) 為較佳者。式 (Ar4-1-1)、(Ar4-2-1) 及 (Ar4-3-1) 為特佳者。

根據較佳具體實施例，式 (1)、(1-1) 及 (1-2)、(1-1-1) 至 (1-1-11) 及 (1-2-1) 至 (1-2-7) 以及 (1-1-1-a) 至 (1-1-11-a) 及 (1-2-1-a) 至 (1-2-7-a) 化合物含有至少一個 Ar<sup>3</sup> 基，其表示式 (Ar3-2) 基及 / 或至少一個 Ar<sup>4</sup> 基，其表示式 (Ar4-2) 基，



(Ar3-2)



(Ar4-2)

其中

- 式 (Ar3-2) 中之虛線鍵指出與 Ar<sup>1</sup> 及與 Ar<sup>3</sup> 或 Ar<sup>4</sup> 基之鍵結；

- 式 (Ar4-2) 中之虛線鍵指出與 Ar<sup>3</sup> 之鍵結；

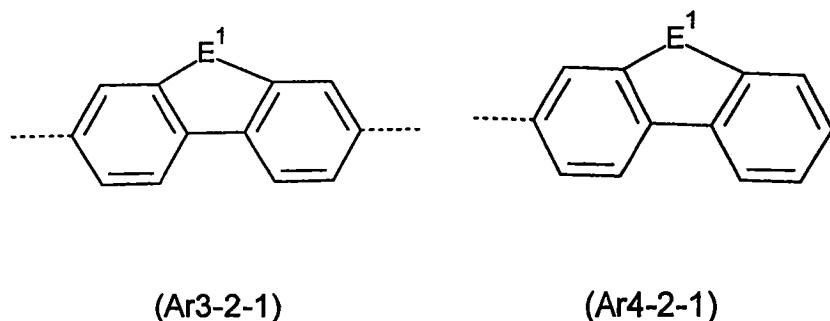
- E<sup>1</sup> 具有如上之相同意義；及

- 式 (Ar3-2) 及 (Ar4-2) 之基可在各有空位置經 R<sup>1</sup> 基取代，R<sup>1</sup> 具有如上之相同意義。

尤佳的是，在式 (1)、(1-1) 及 (1-2)、(1-1-1) 至 (1-1-11) 及 (1-2-1) 至 (1-2-7) 以及 (1-1-1-a) 至 (1-1-11-a) 及 (1-2-1-a) 至 (1-2-7-a) 中表示之 “Ar<sup>4</sup>-(Ar<sup>3</sup>)<sub>n</sub>---” 鏈二者中，式 (1) 化合物及對應於較佳具體實施例之式 (1) 化合物含有至少一個含有至少一個 Ar<sup>3</sup> 基，其表示式 (Ar3-2) 基及 / 或至少一個 Ar<sup>4</sup> 基，其表示式 (Ar4-2) 基。

根據非常佳具體實施例，式 (1)、(1-1) 及 (1-2)、(1-1-

1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)以及(1-1-1-a)至(1-1-11-a)及(1-2-1-a)至(1-2-7-a)化合物含有至少一個 $\text{Ar}^3$ 基，其表示式(Ar3-2-1)基及/或至少一個 $\text{Ar}^4$ 基，其表示式(Ar4-2-1)基，



其中

-式(Ar3-2-1)中之虛線鍵指出與 $\text{Ar}^1$ 及與 $\text{Ar}^3$ 或 $\text{Ar}^4$ 基之鍵結；

-式(Ar4-2-1)中之虛線鍵指出與 $\text{Ar}^3$ 之鍵結；

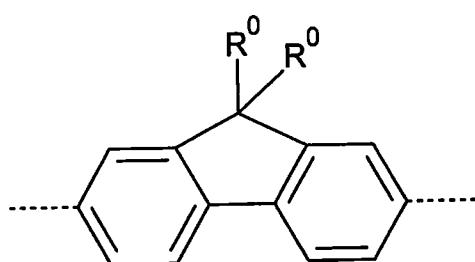
- $\text{E}^1$ 具有如上之相同意義；及

-式(Ar3-2-1)及(Ar4-2-1)之基可在各有空位置經 $\text{R}^1$ 基取代， $\text{R}^1$ 具有如上之相同意義。

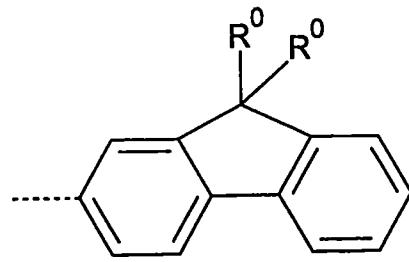
特佳的是，在式(1)、(1-1)及(1-2)、(1-1-1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)以及(1-1-1-a)至(1-1-11-a)及(1-2-1-a)至(1-2-7-a)中表示之“ $\text{Ar}^4-(\text{Ar}^3)_n---$ ”鏈二者中，式(1)化合物及對應於較佳具體實施例之式(1)化合物含有至少一個含有至少一個 $\text{Ar}^3$ 基，其表示式(Ar3-2-1)基及/或至少一個 $\text{Ar}^4$ 基，其表示式(Ar4-2-1)基。

根據較佳具體實施例，式(1)、(1-1)及(1-2)、(1-1-1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)以及(1-1-1-a)至(1-1-11-a)及

(1-2-1-a)至(1-2-7-a)化合物含有至少一個 $\text{Ar}^3$ 基，其表示式(Ar3-2-1b)基及/或至少一個 $\text{Ar}^4$ 基，其表示式(Ar4-2-1b)基，



式 (Ar3-2-1b)



式 (Ar4-2-1b)

其中

-式(Ar3-2-1b)中之虛線鍵指出與 $\text{Ar}^1$ 及與 $\text{Ar}^3$ 或 $\text{Ar}^4$ 基之鍵結；

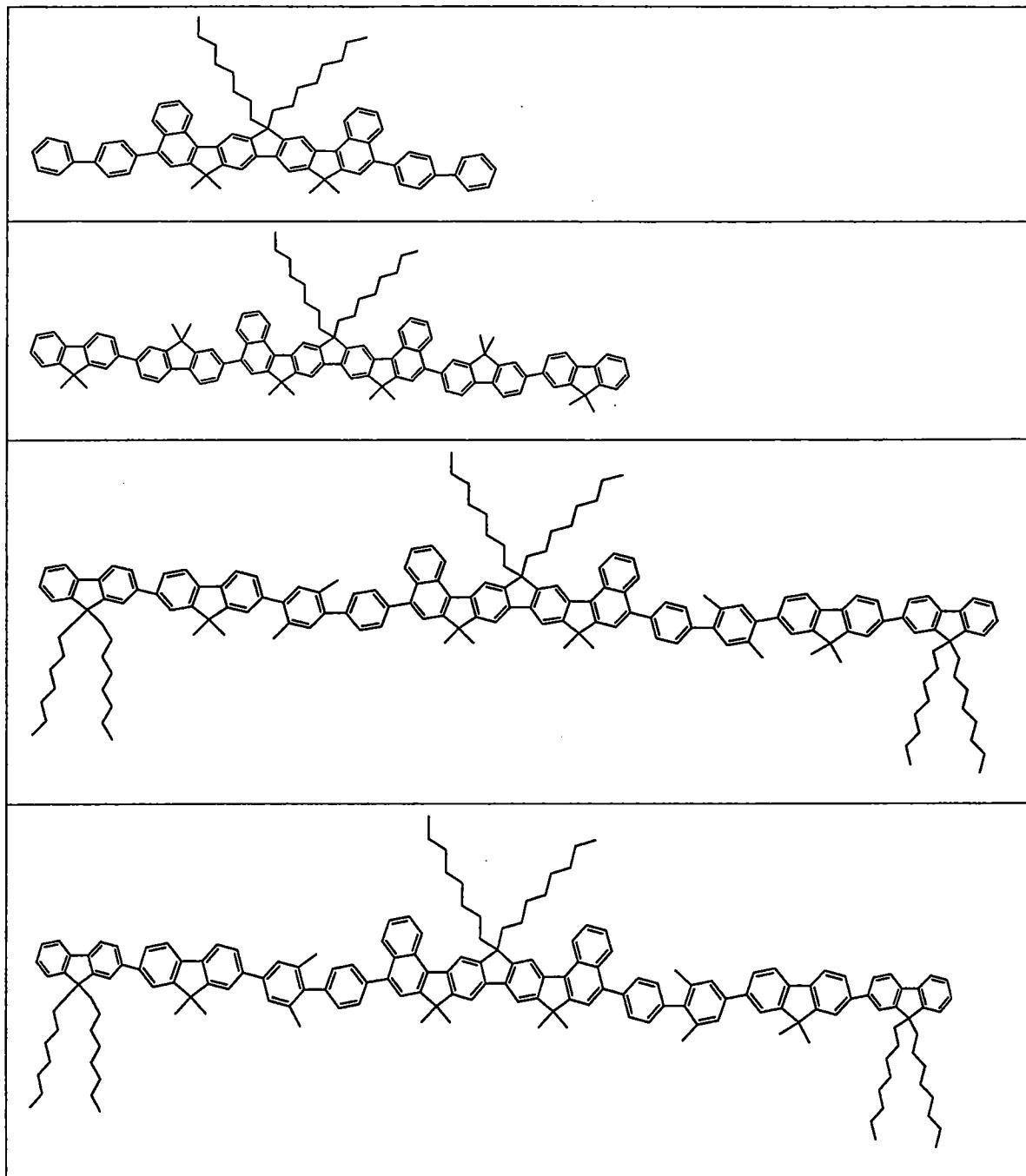
-式(Ar4-2-1b)中之虛線鍵指出與 $\text{Ar}^3$ 之鍵結；

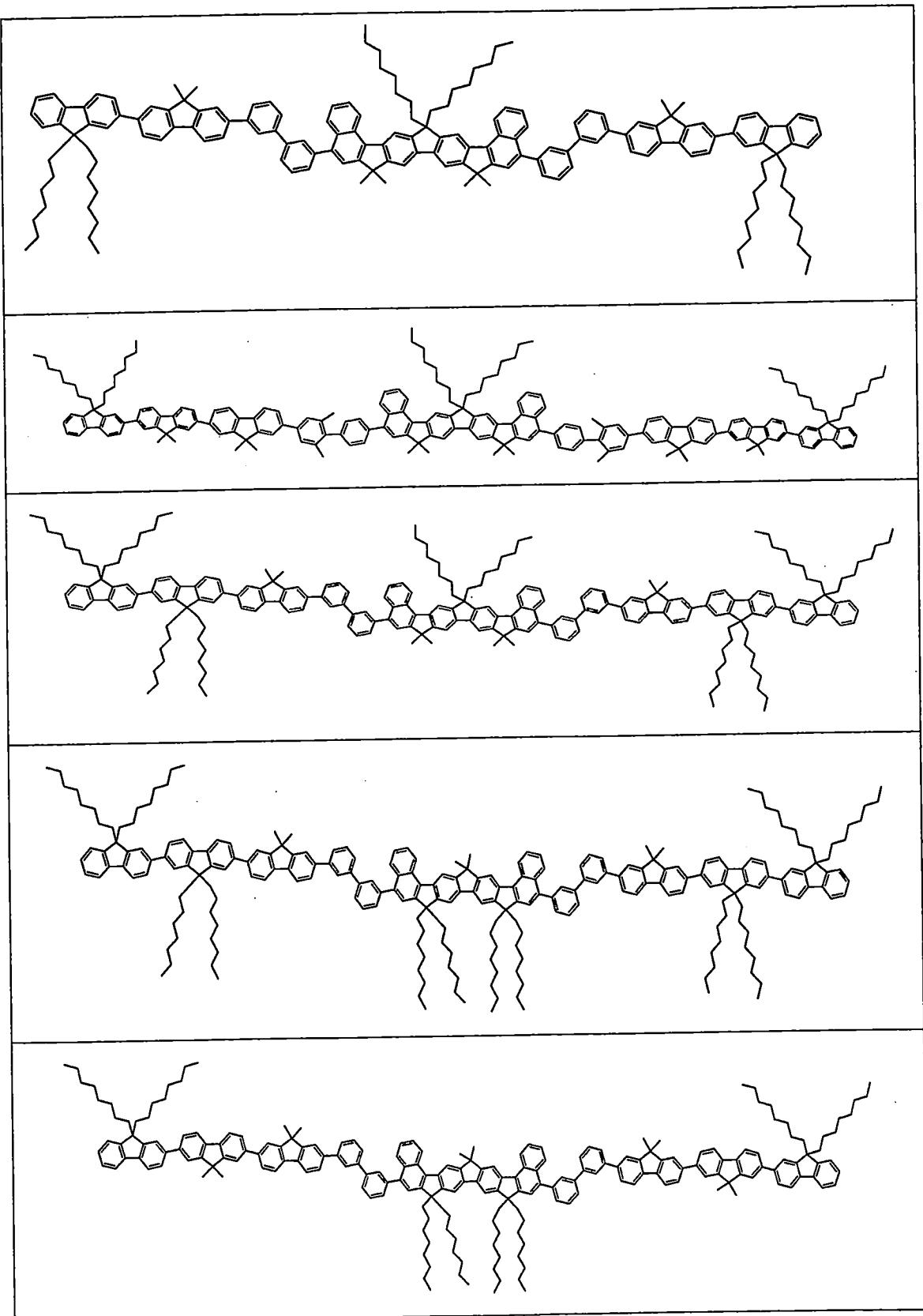
- $\text{R}^0$ 具有如請求項1中之相同意義；及

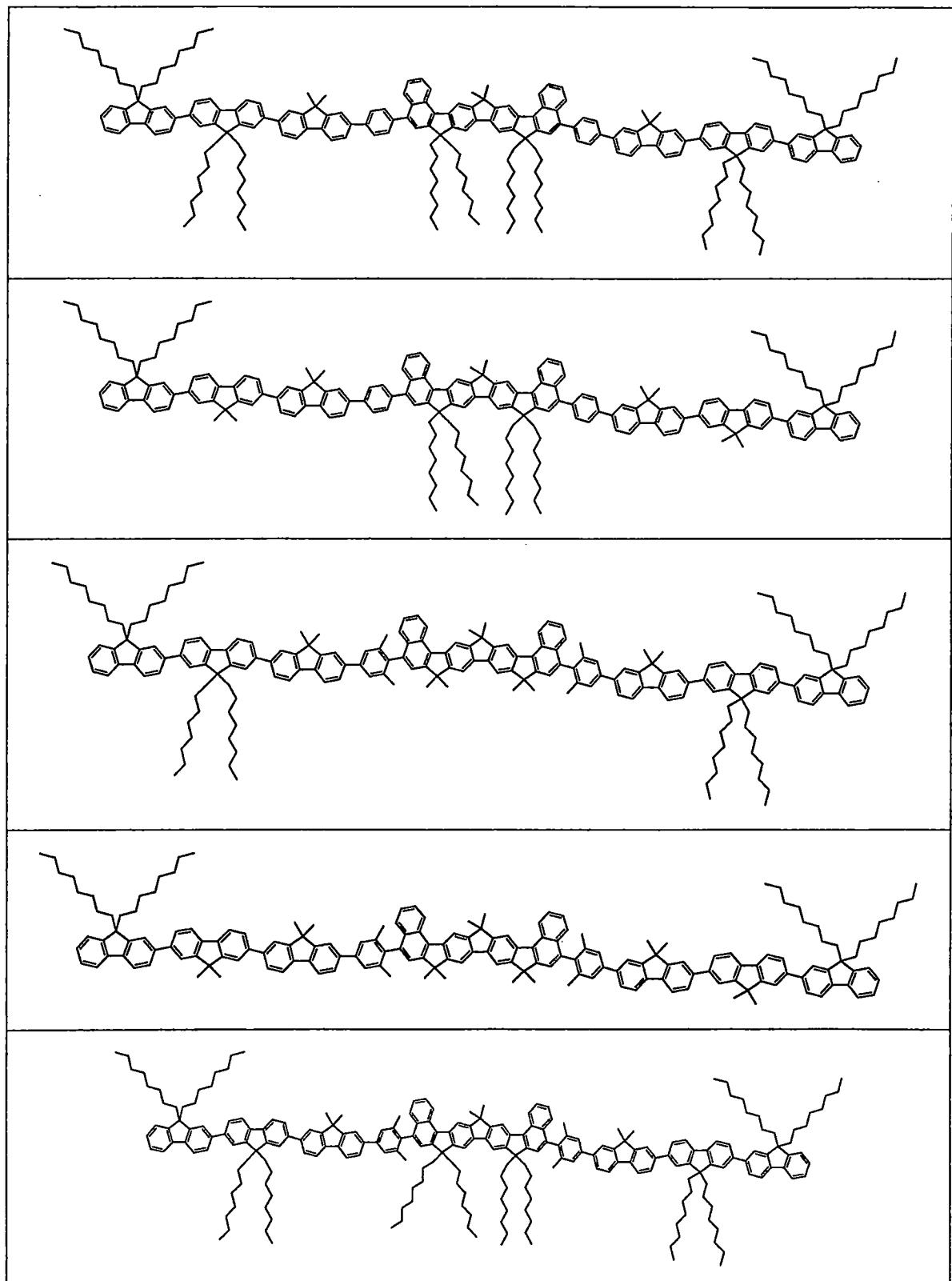
-式(Ar3-2-1b)及(Ar4-2-1b)之基可在各有空位置經 $\text{R}^1$ 基取代， $\text{R}^1$ 具有如請求項1中之相同意義。

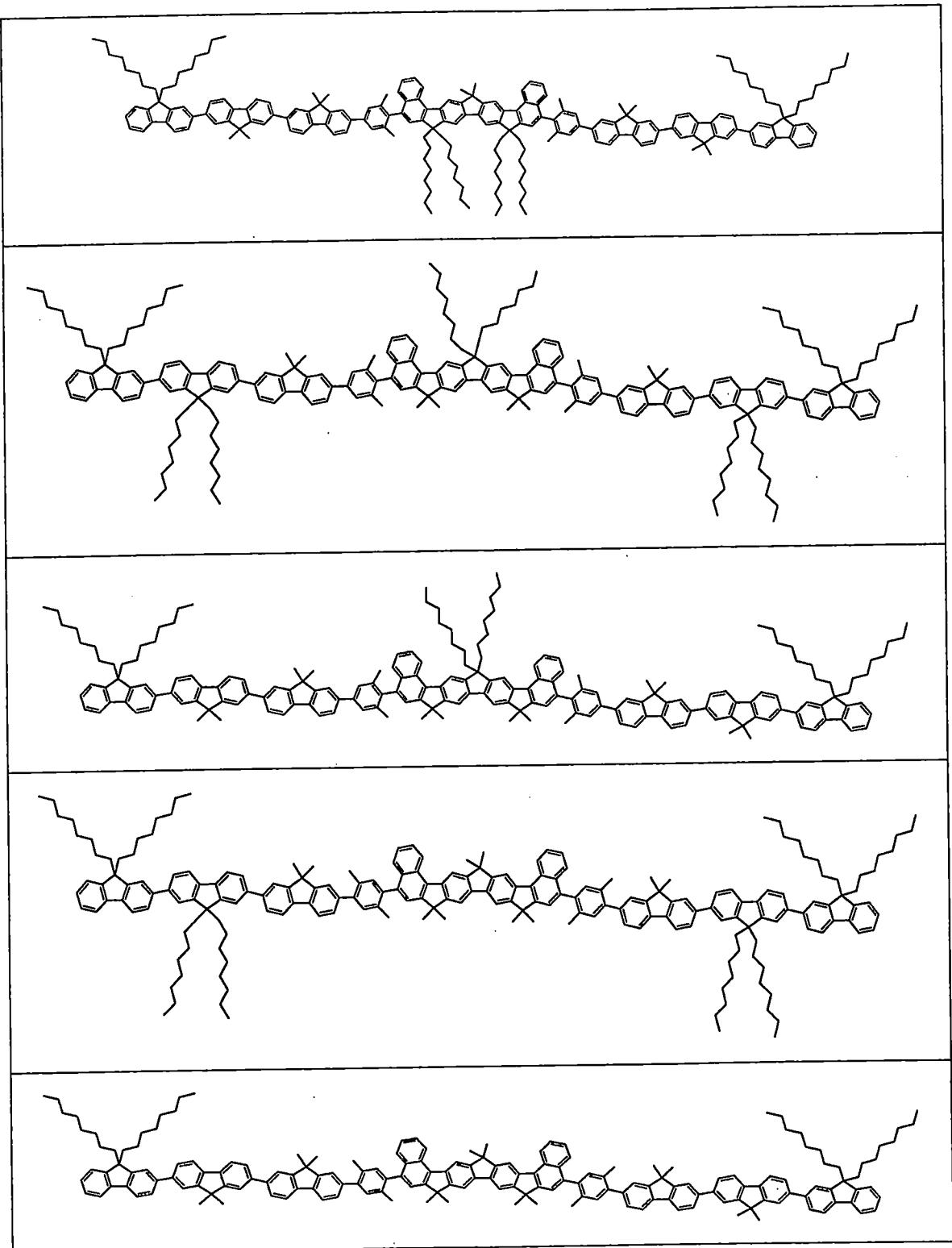
尤佳的是，在式(1)、(1-1)及(1-2)、(1-1-1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)以及(1-1-1-a)至(1-1-11-a)及(1-2-1-a)至(1-2-7-a)中表示之“ $\text{Ar}^4-(\text{Ar}^3)_n---$ ”鏈二者中，式(1)化合物及對應於較佳具體實施例之式(1)化合物含有至少一個含有至少一個 $\text{Ar}^3$ 基，其表示式(Ar3-2-1b)基及/或至少一個 $\text{Ar}^4$ 基，其表示式(Ar4-2-1b)基。

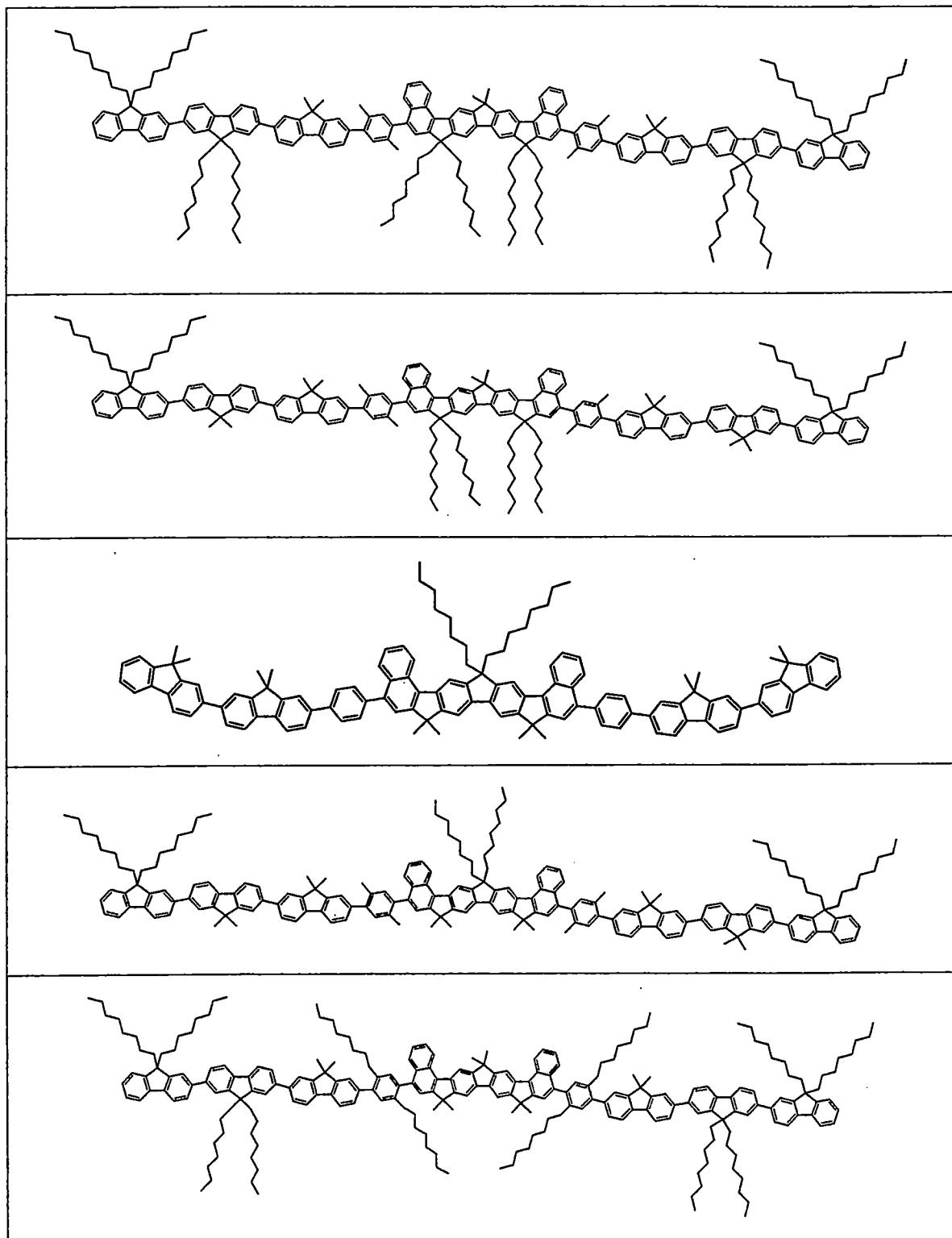
下列化合物為式(1)化合物之實例：

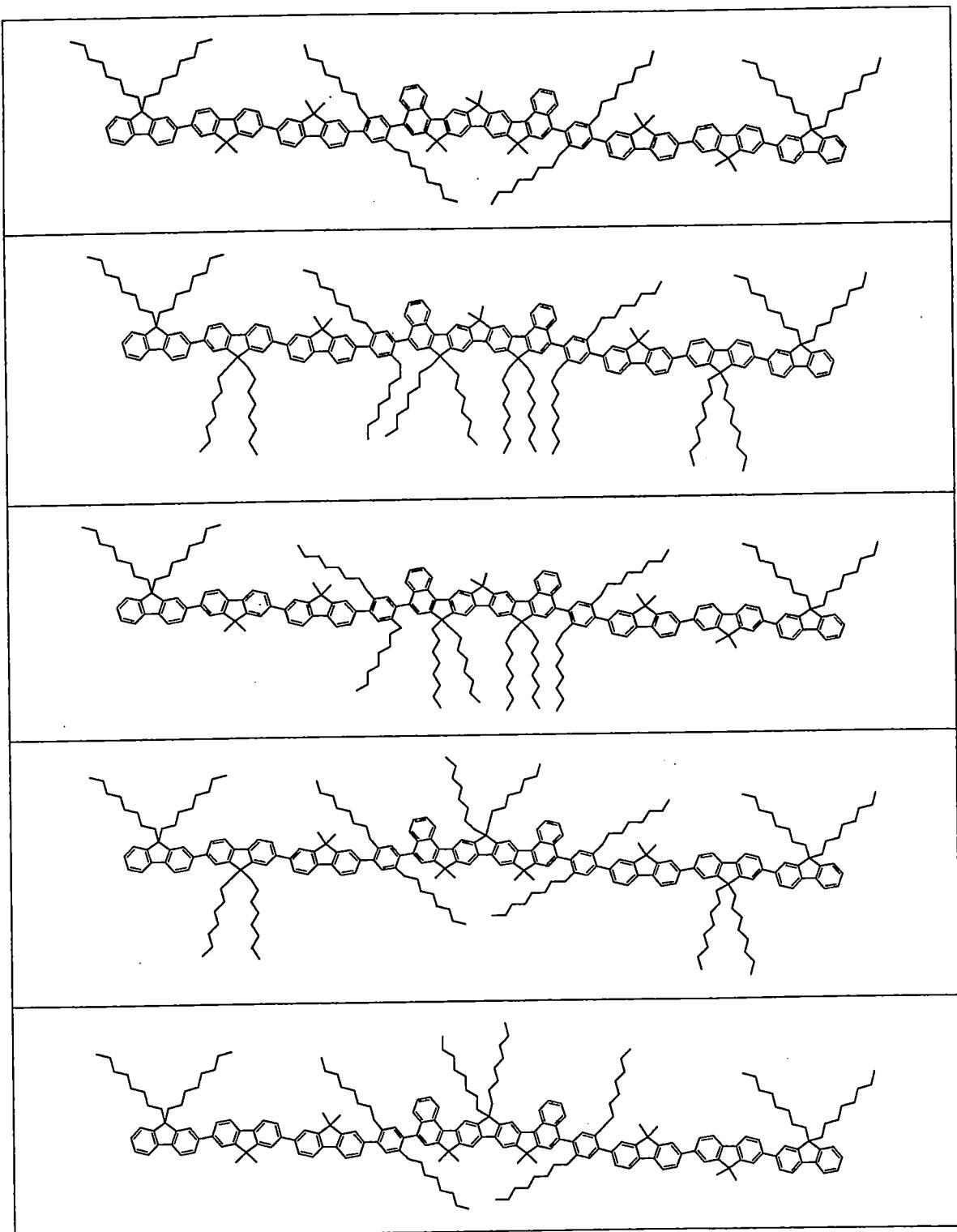


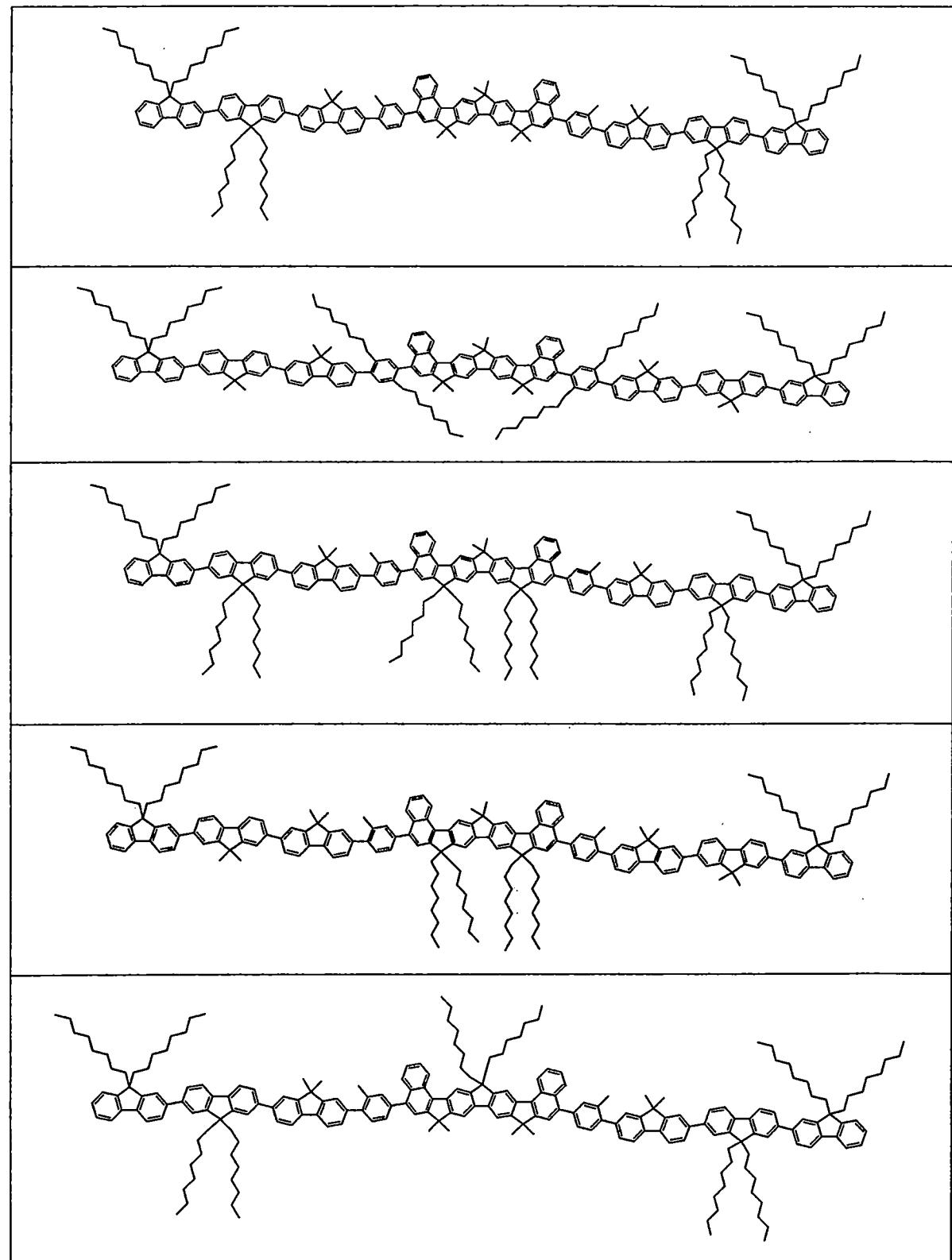


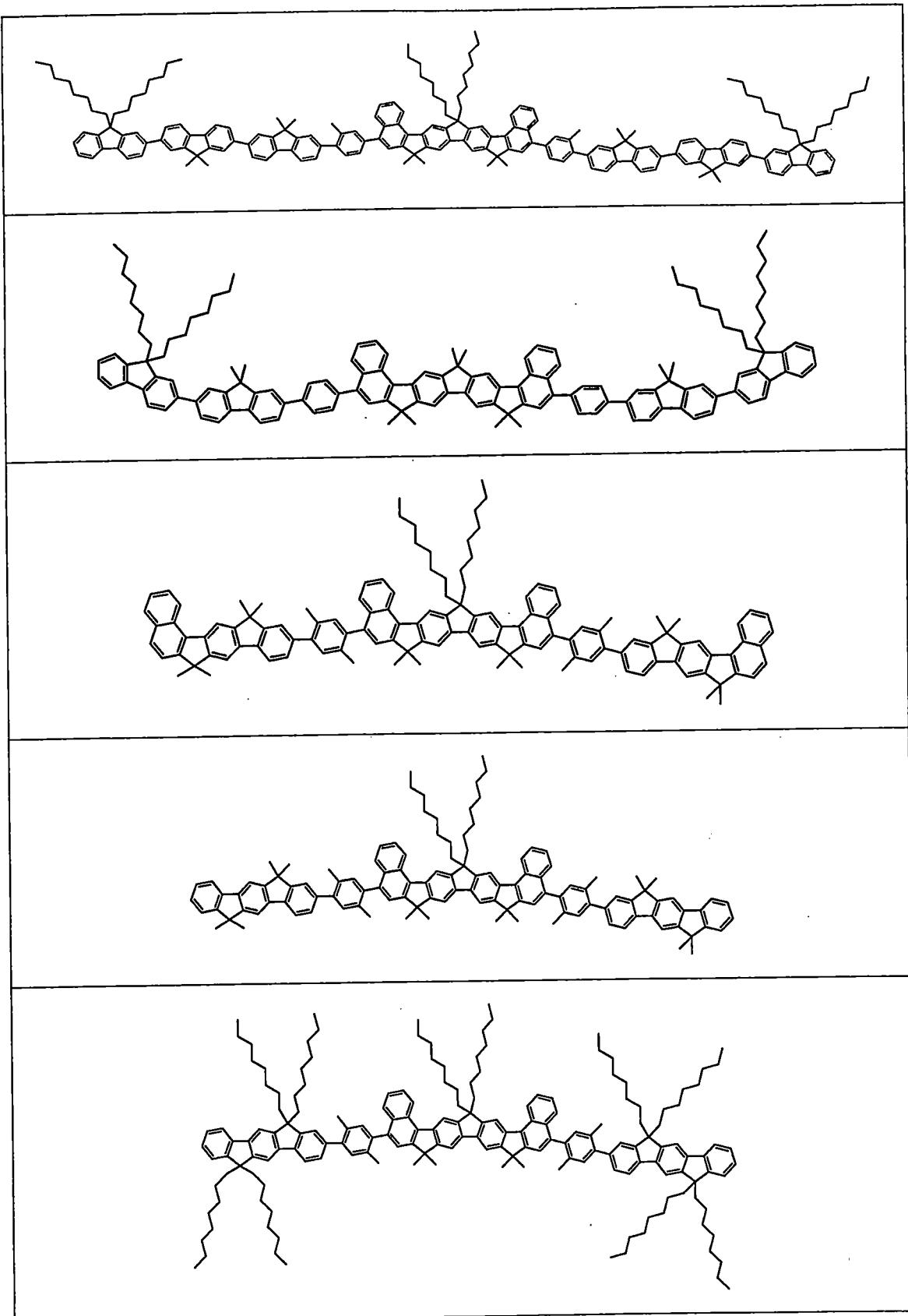


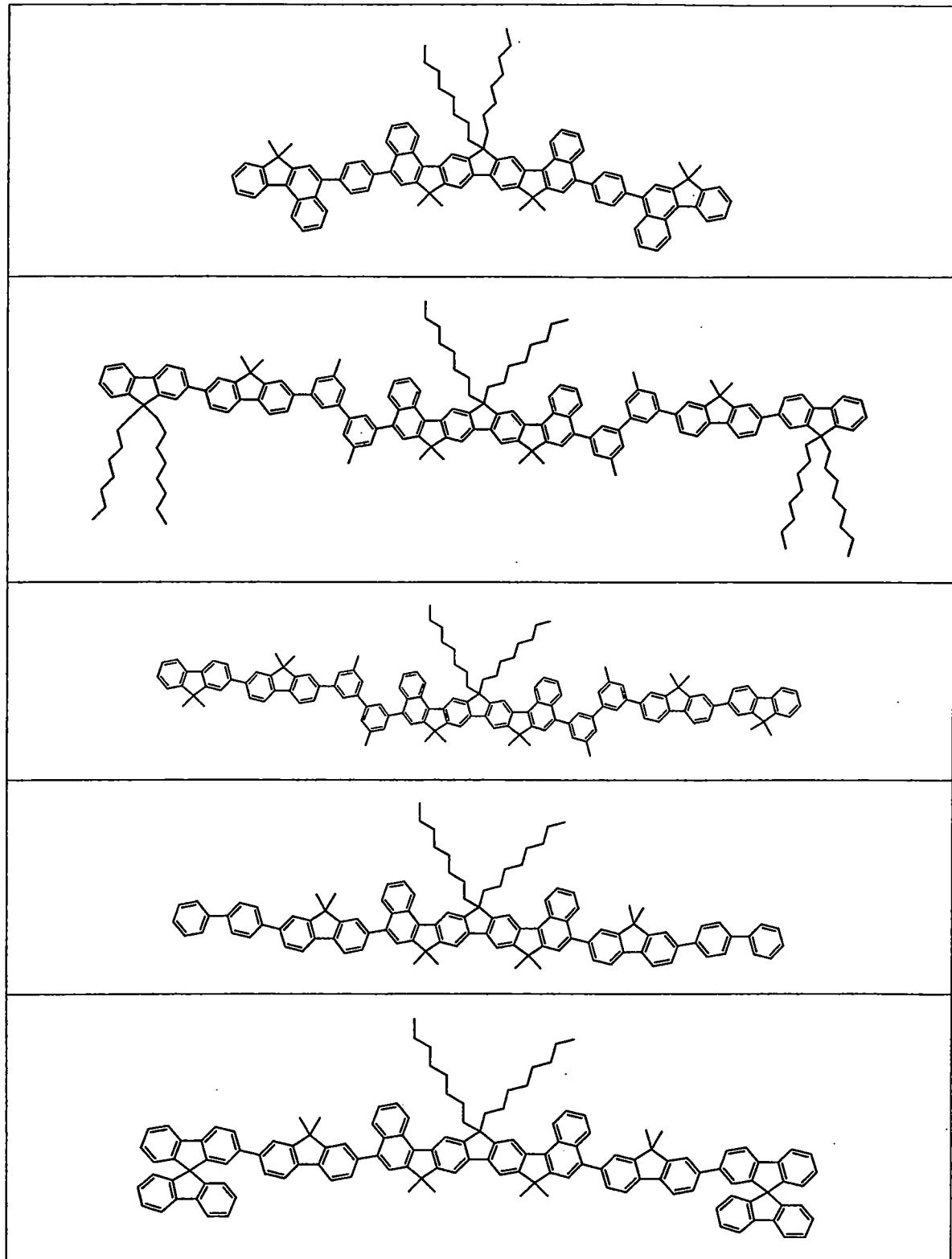


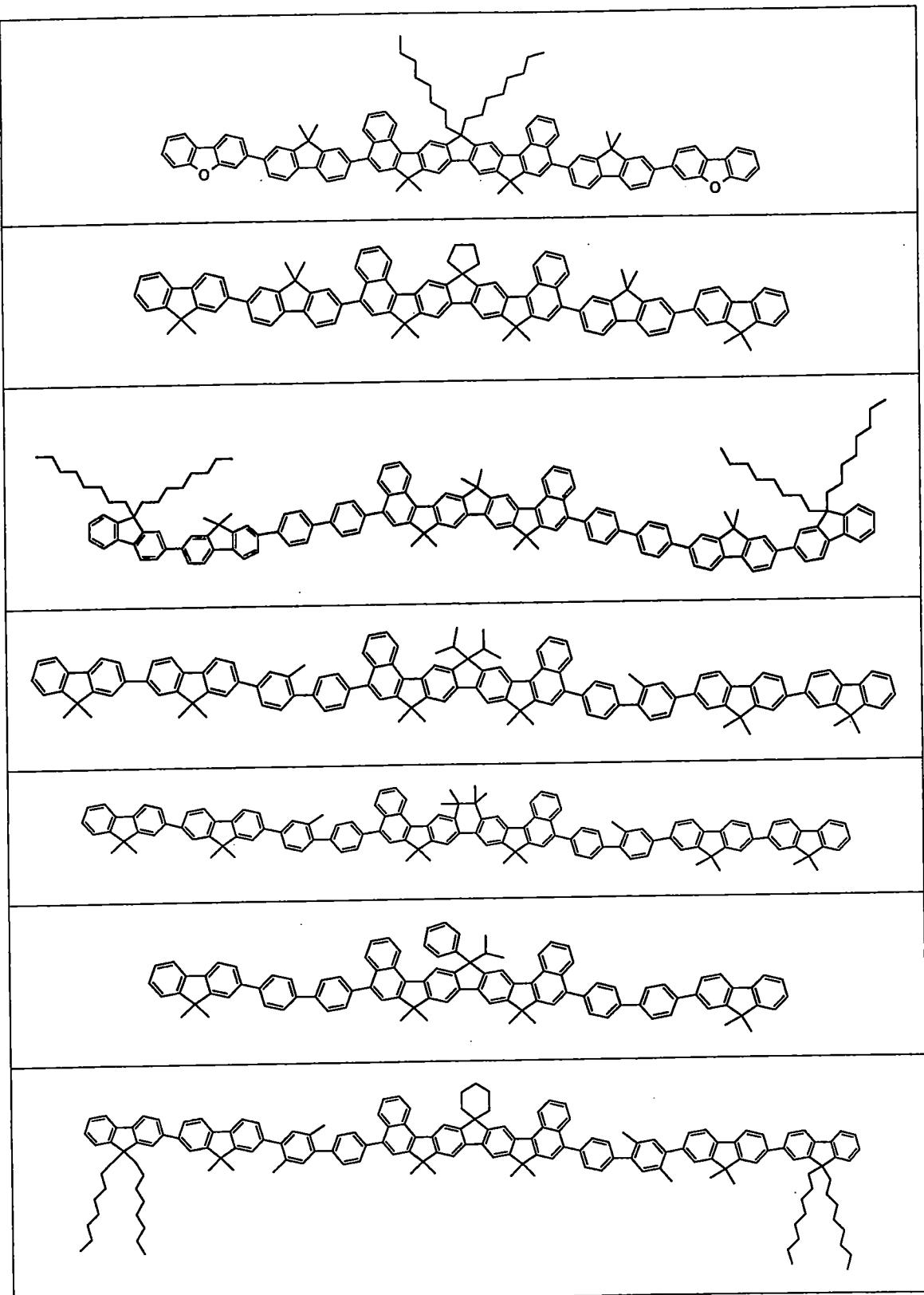


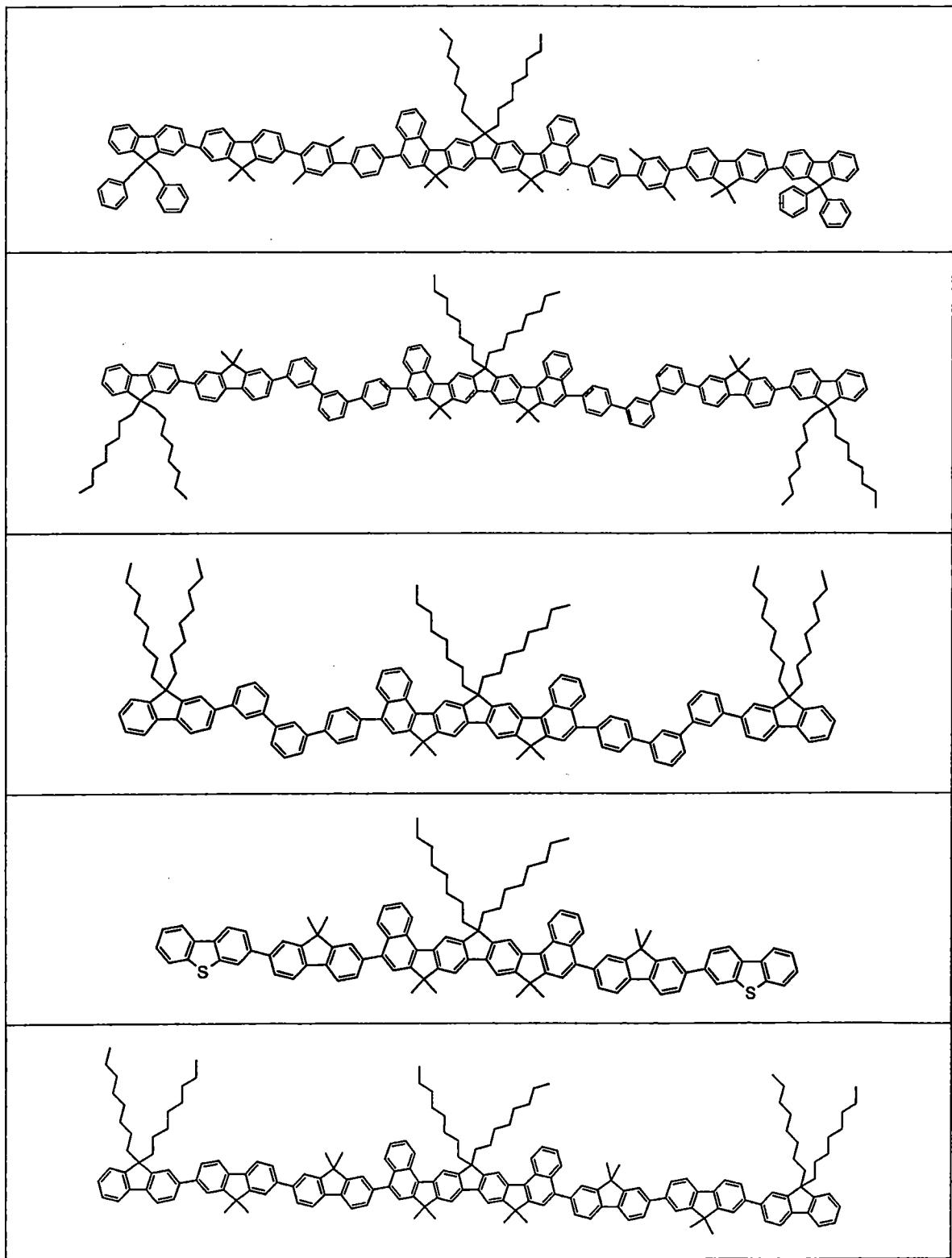


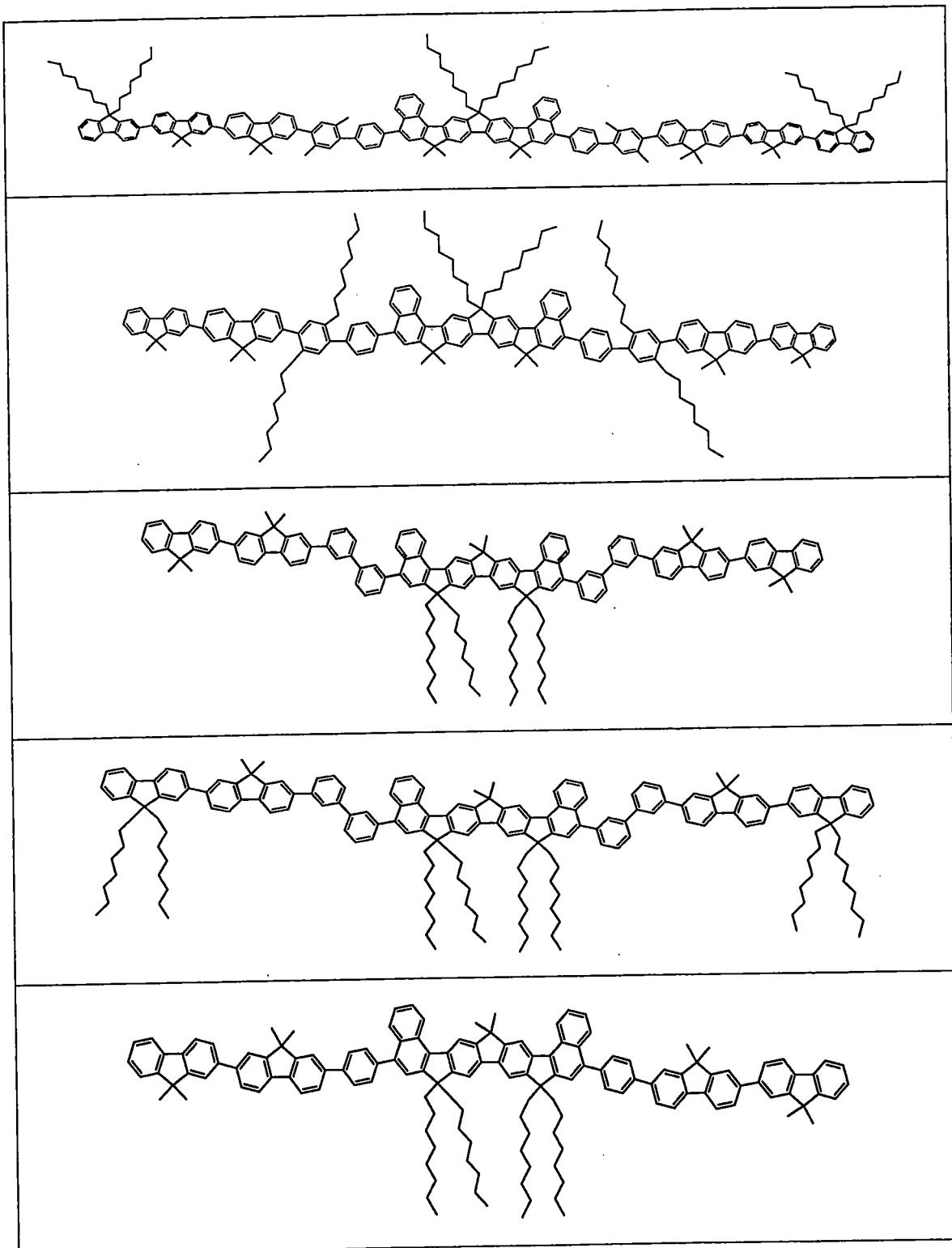


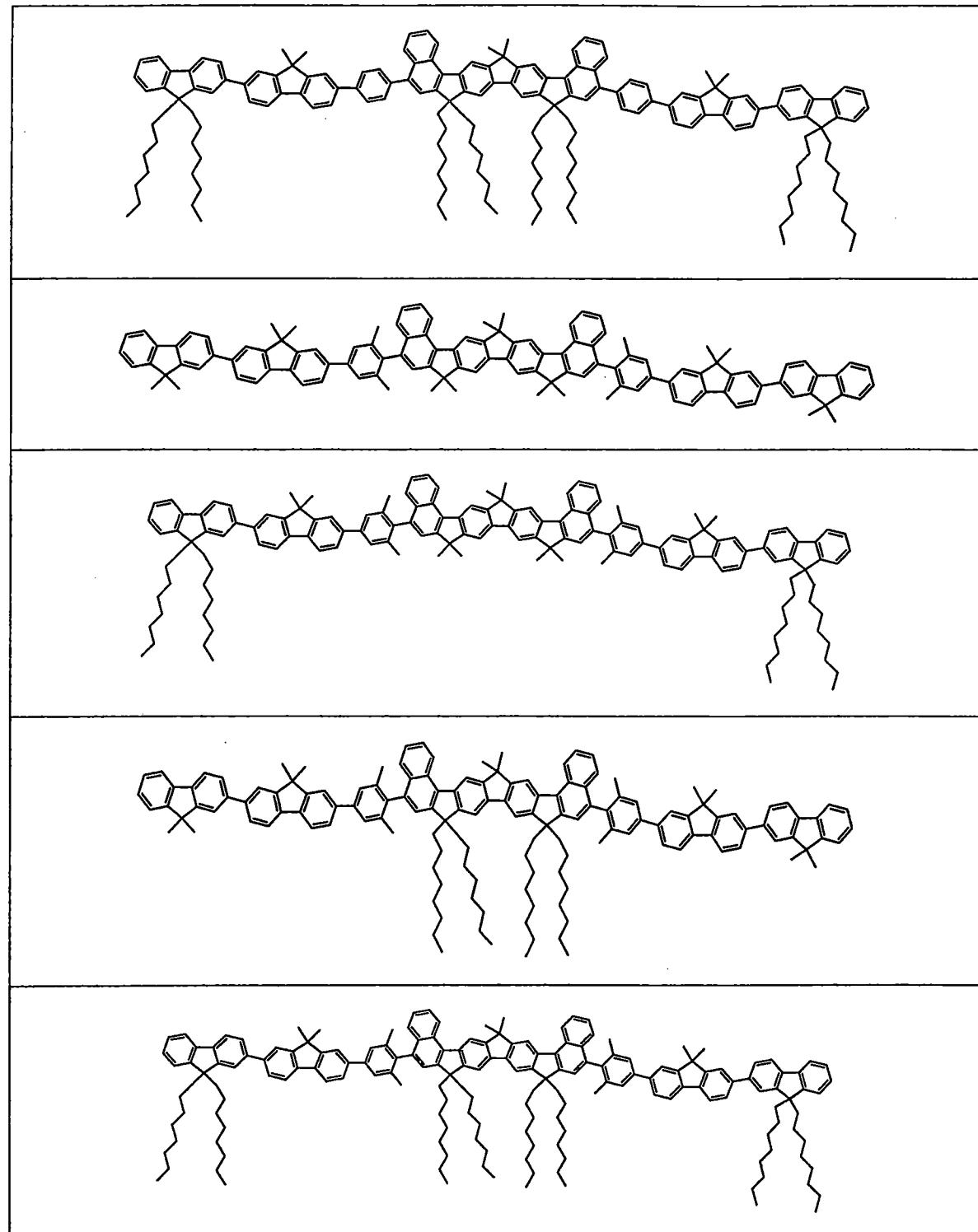


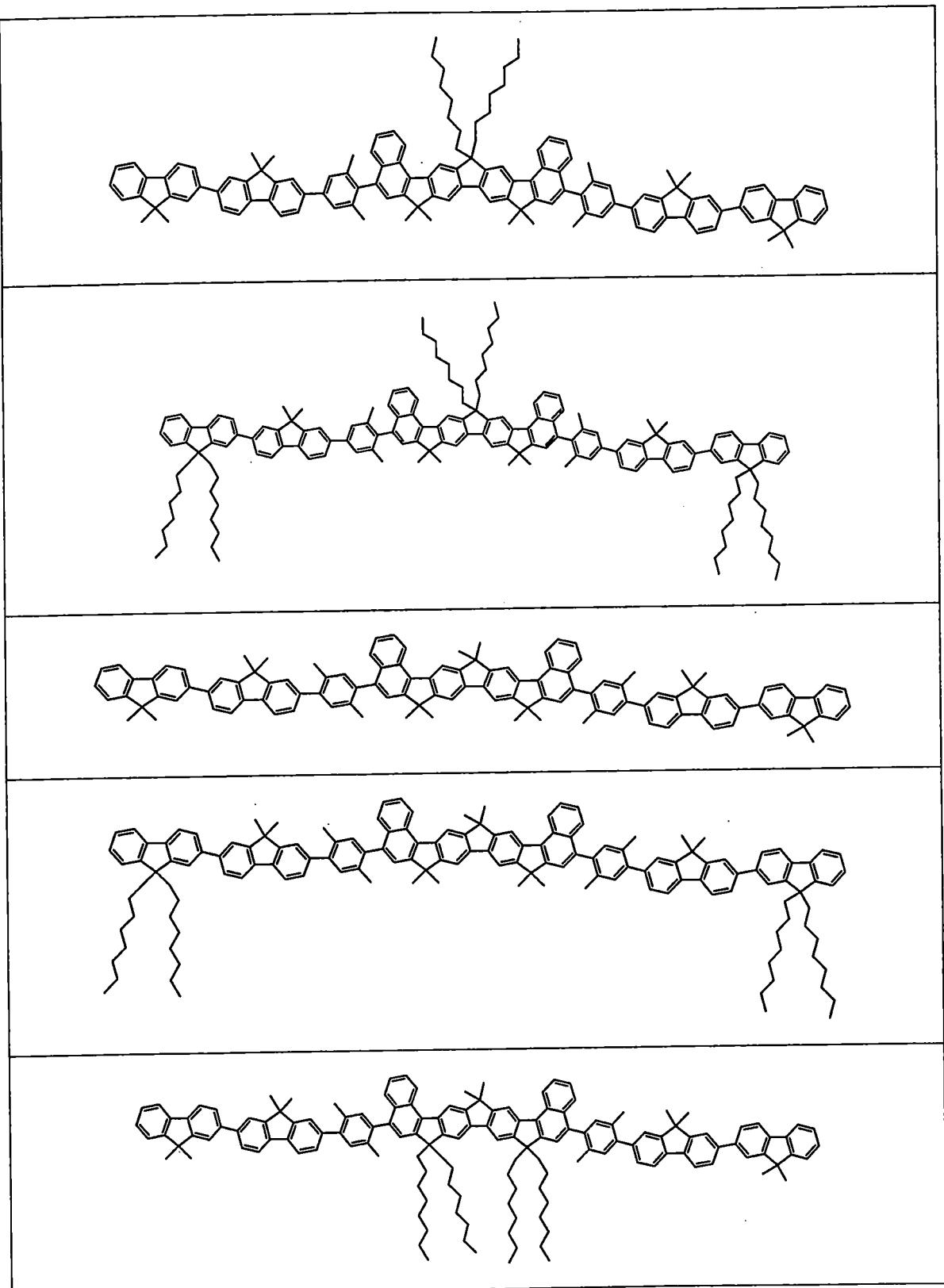


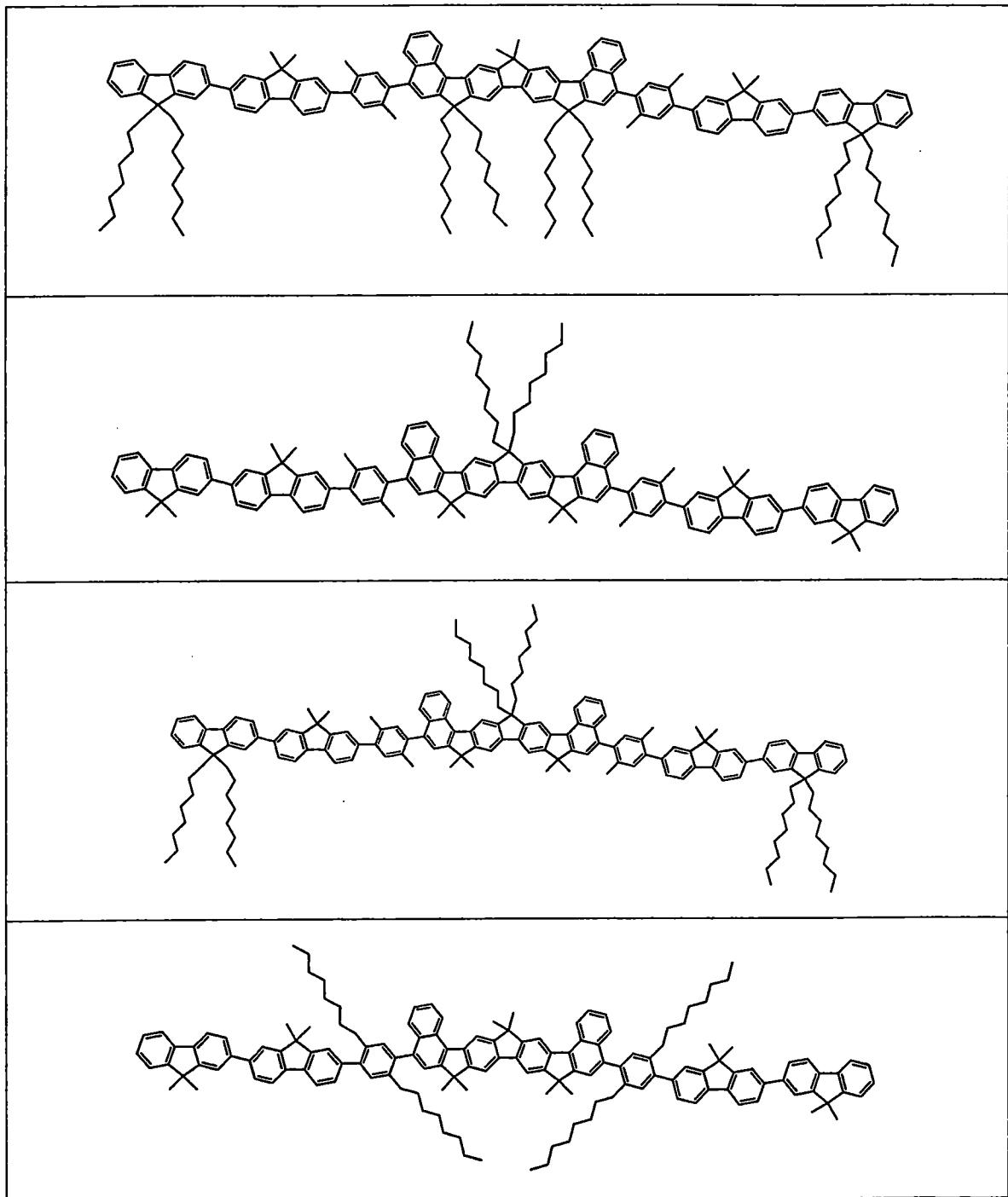


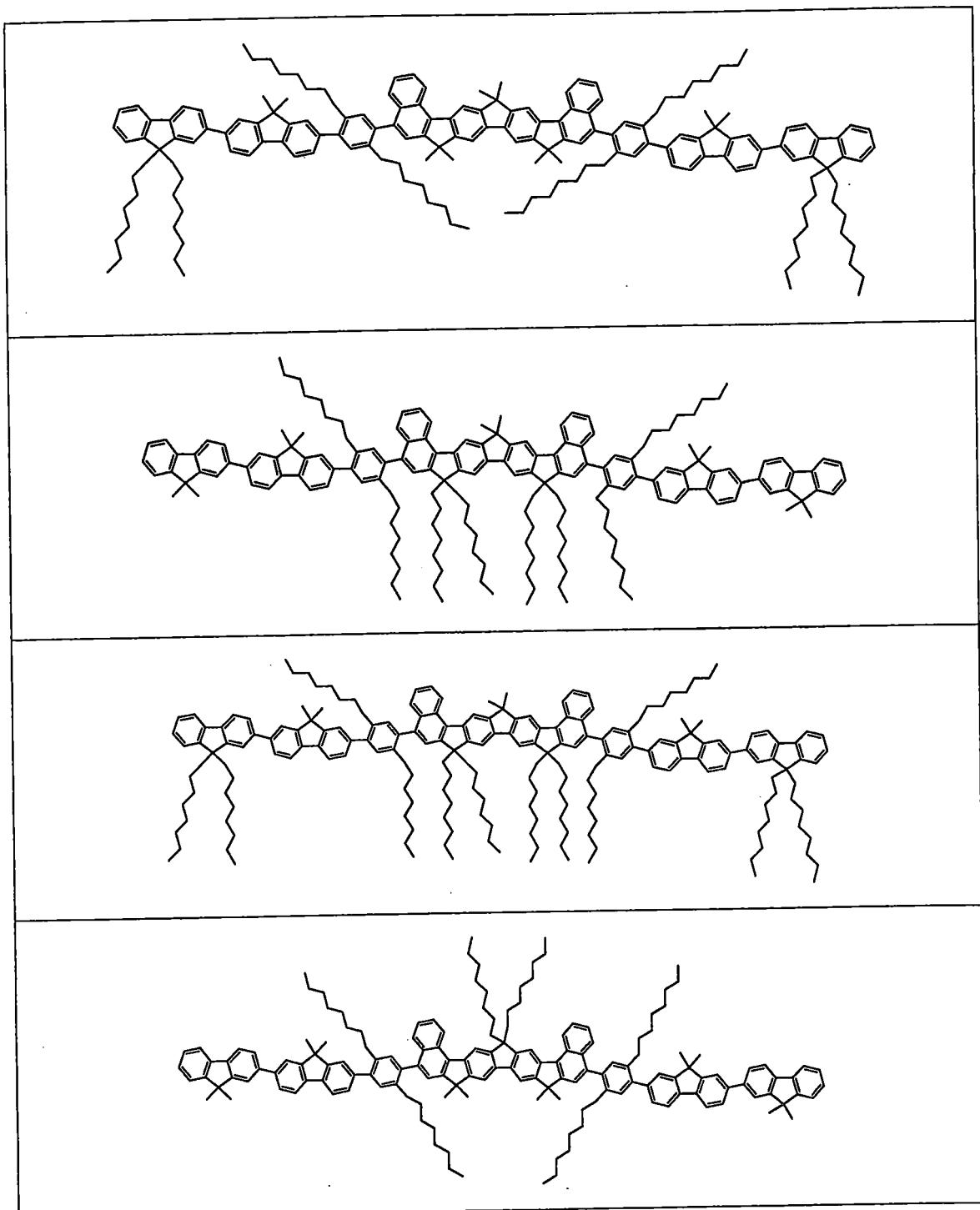


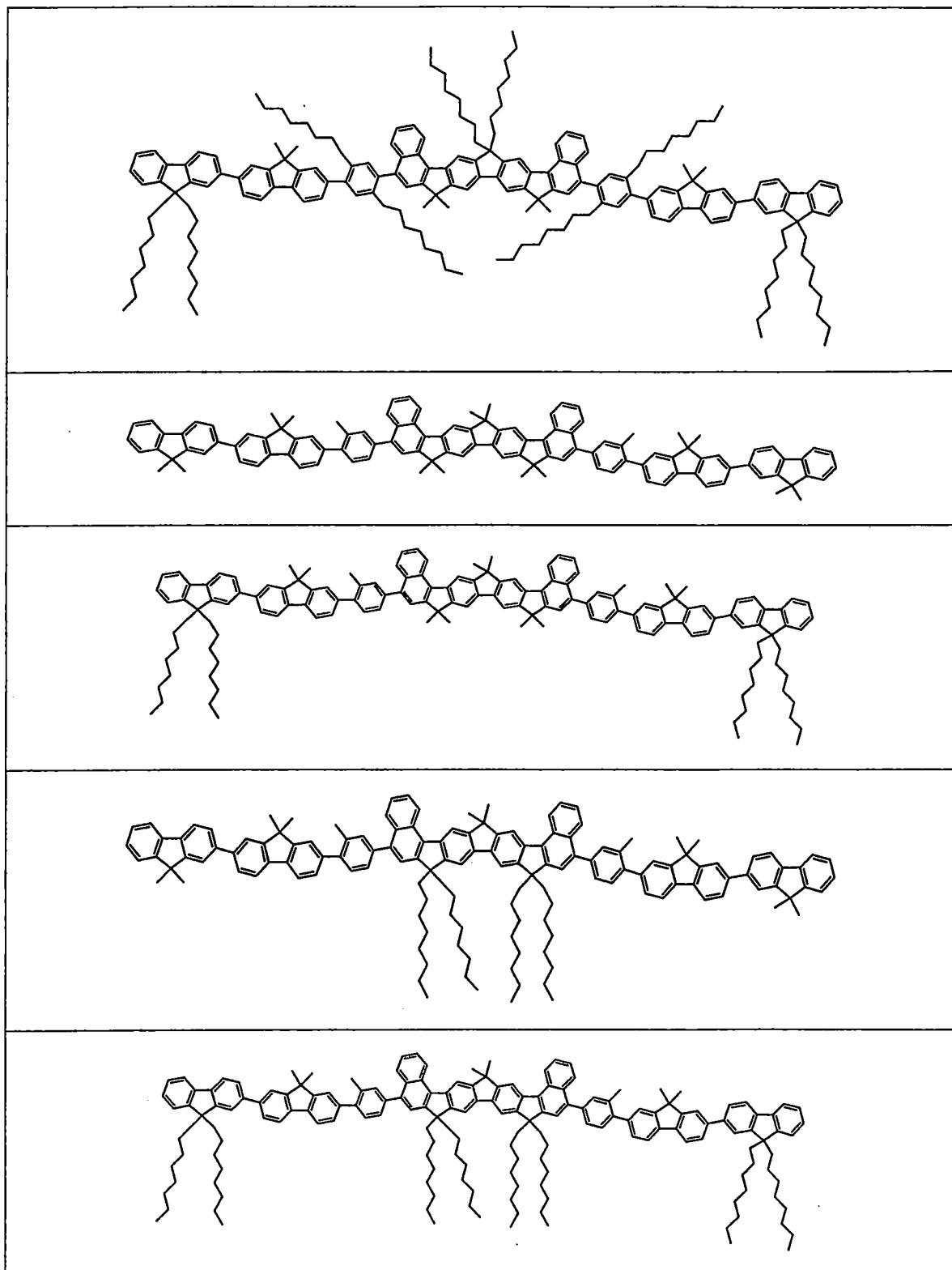


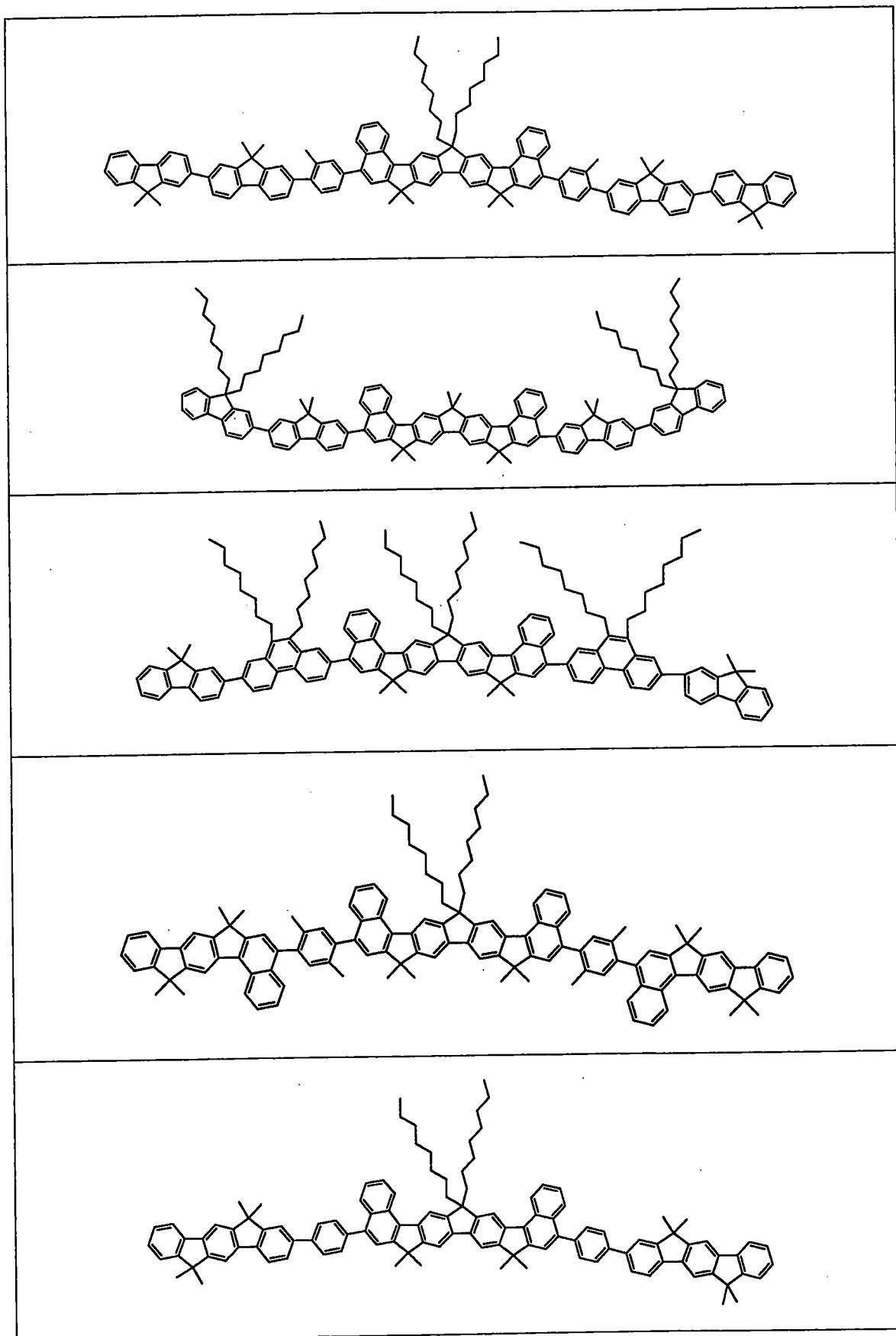


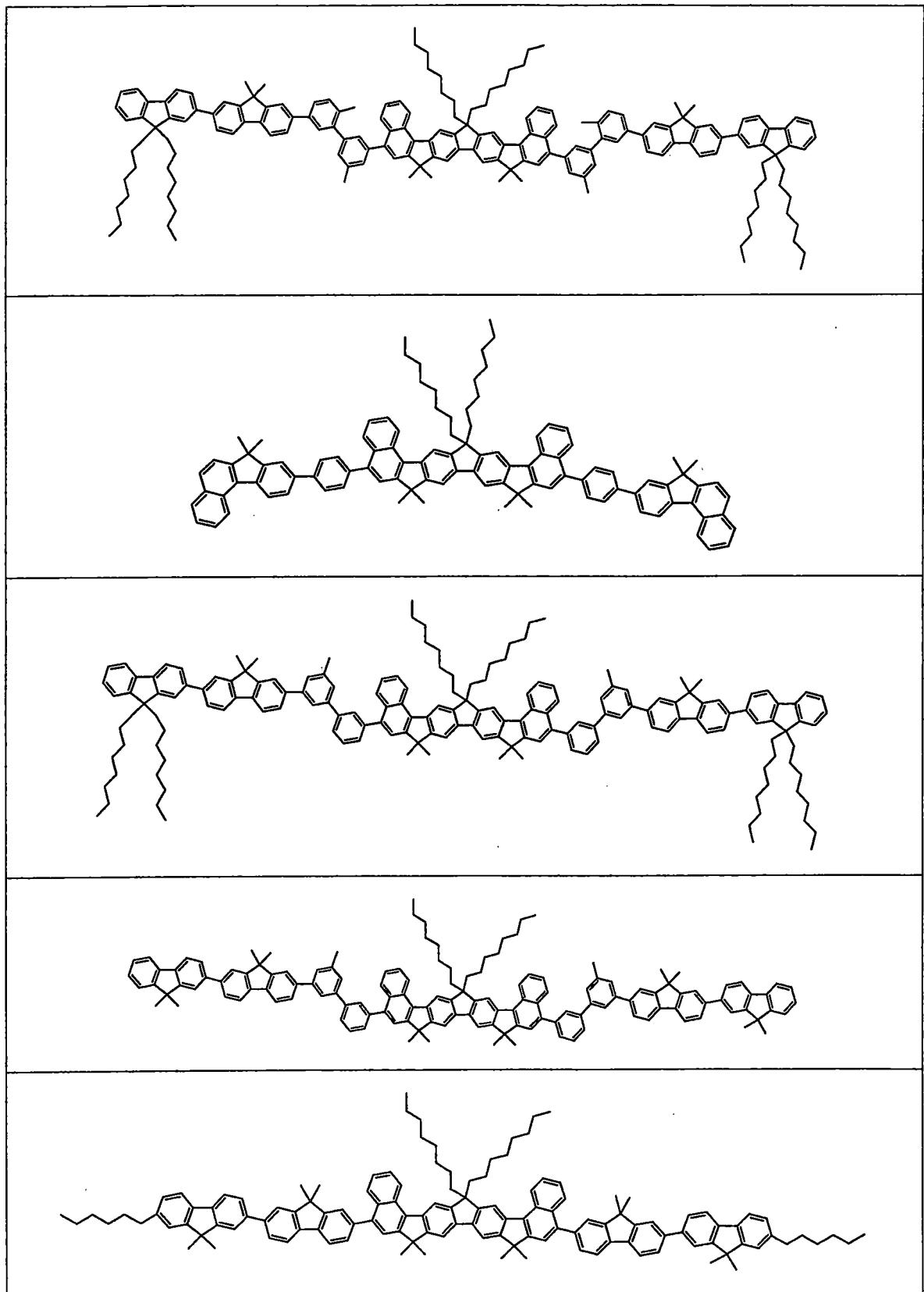


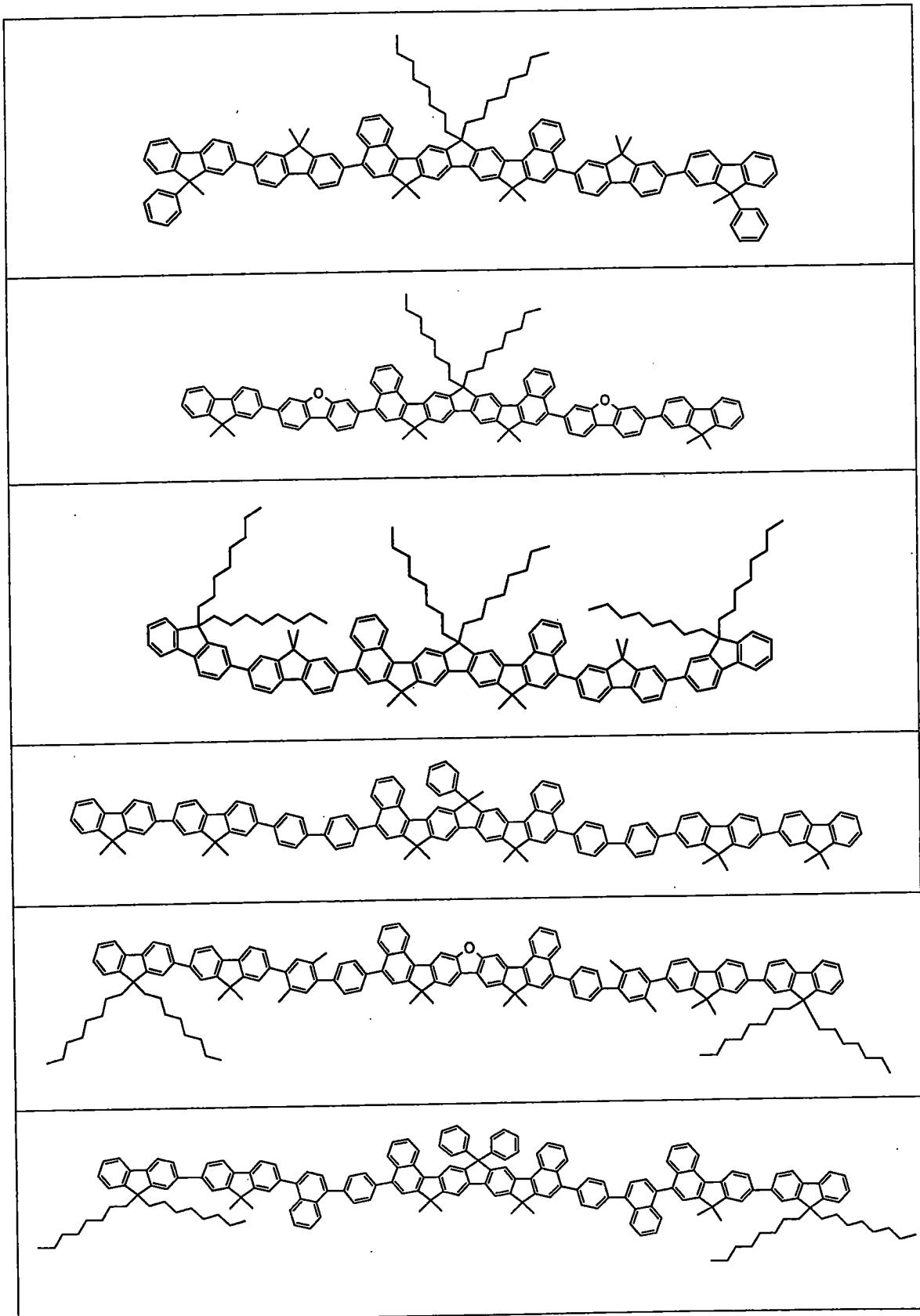


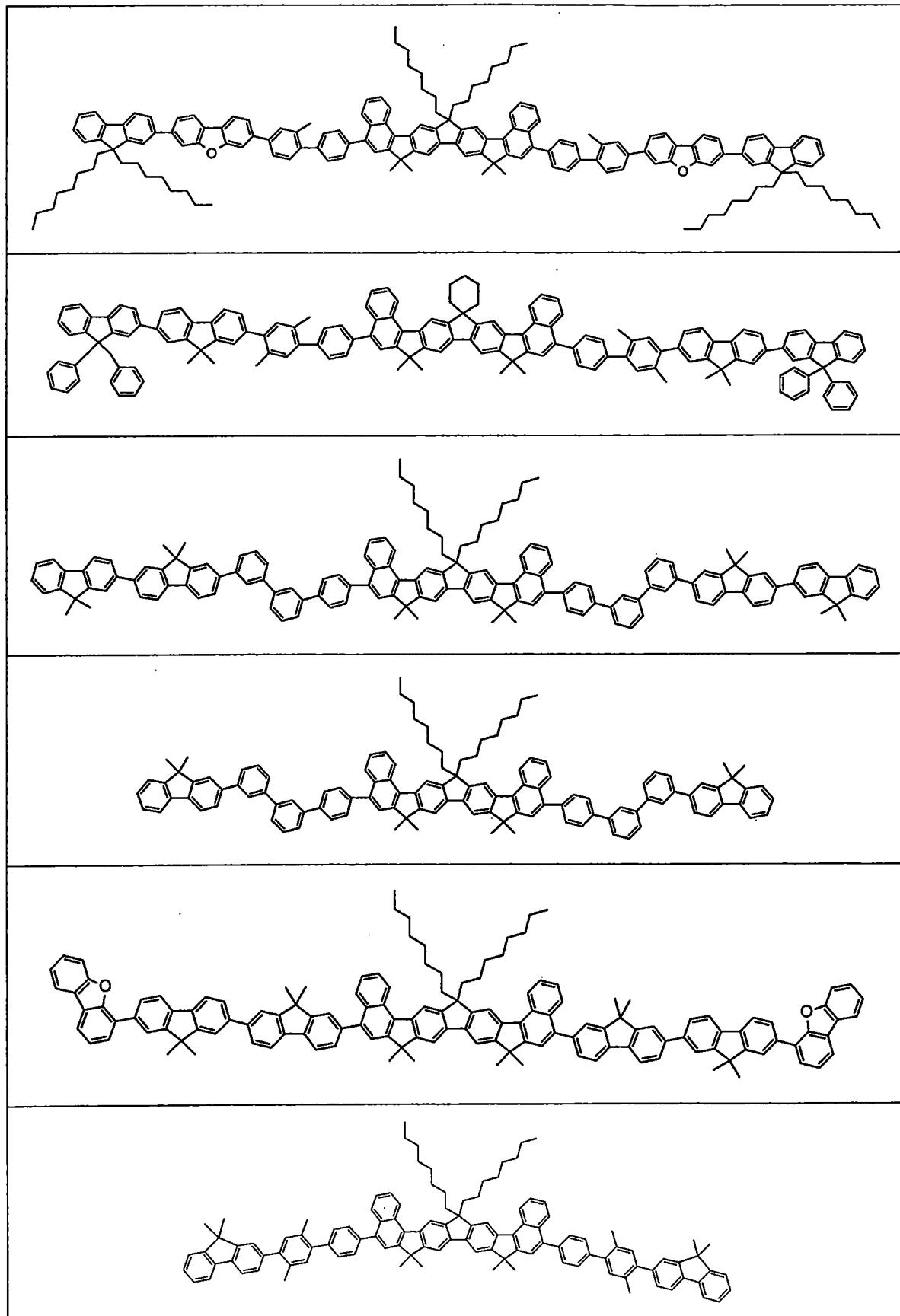


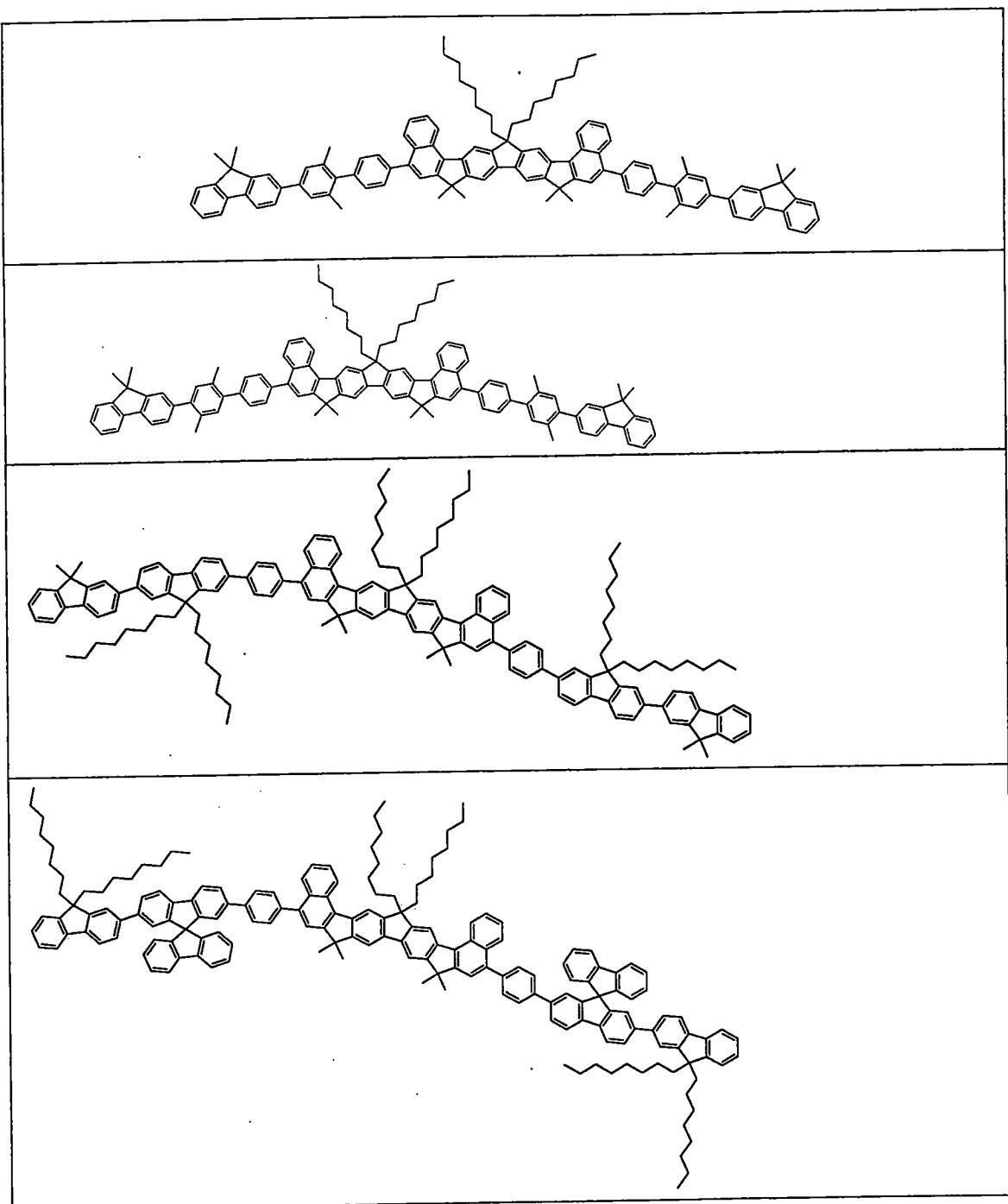


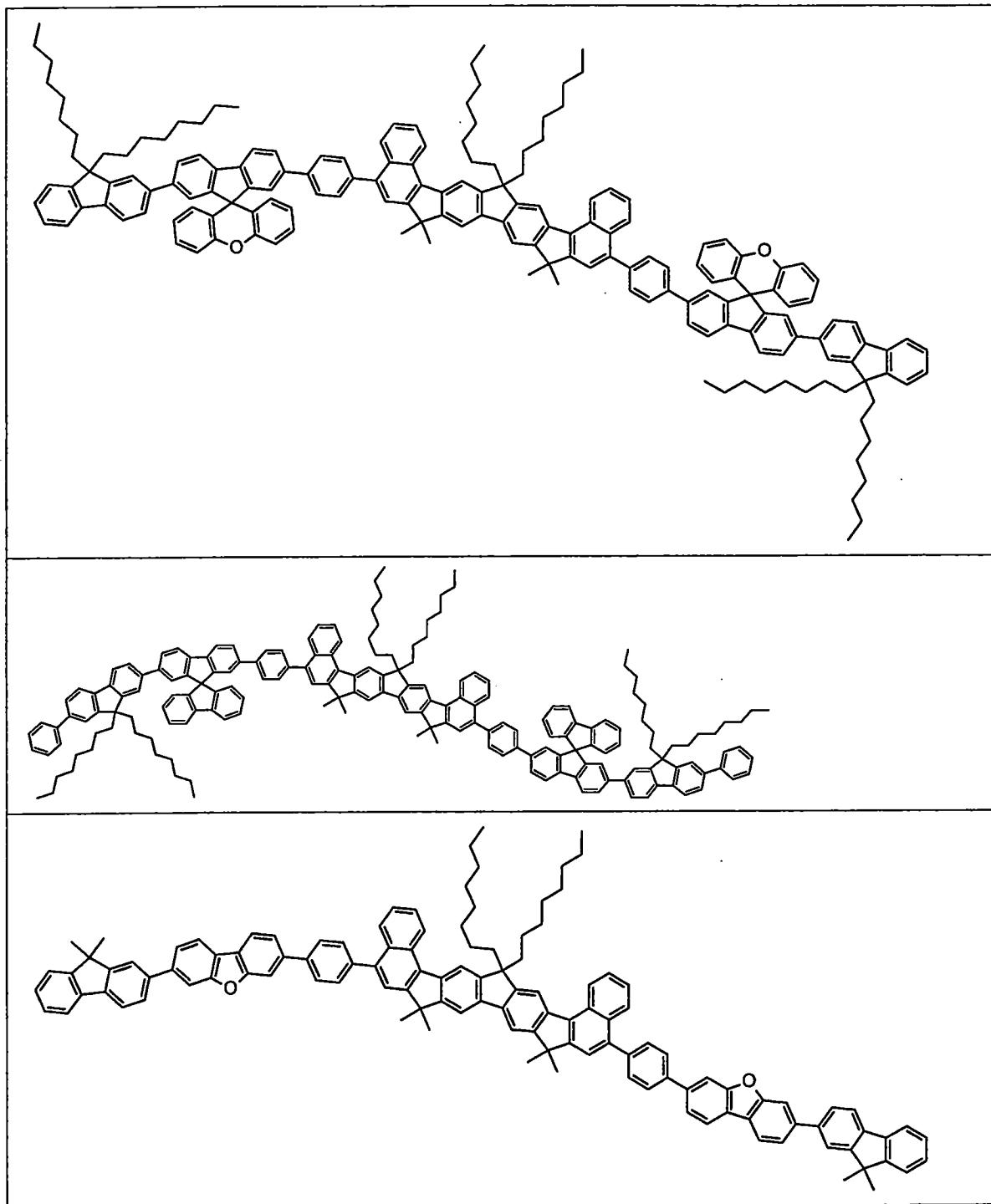


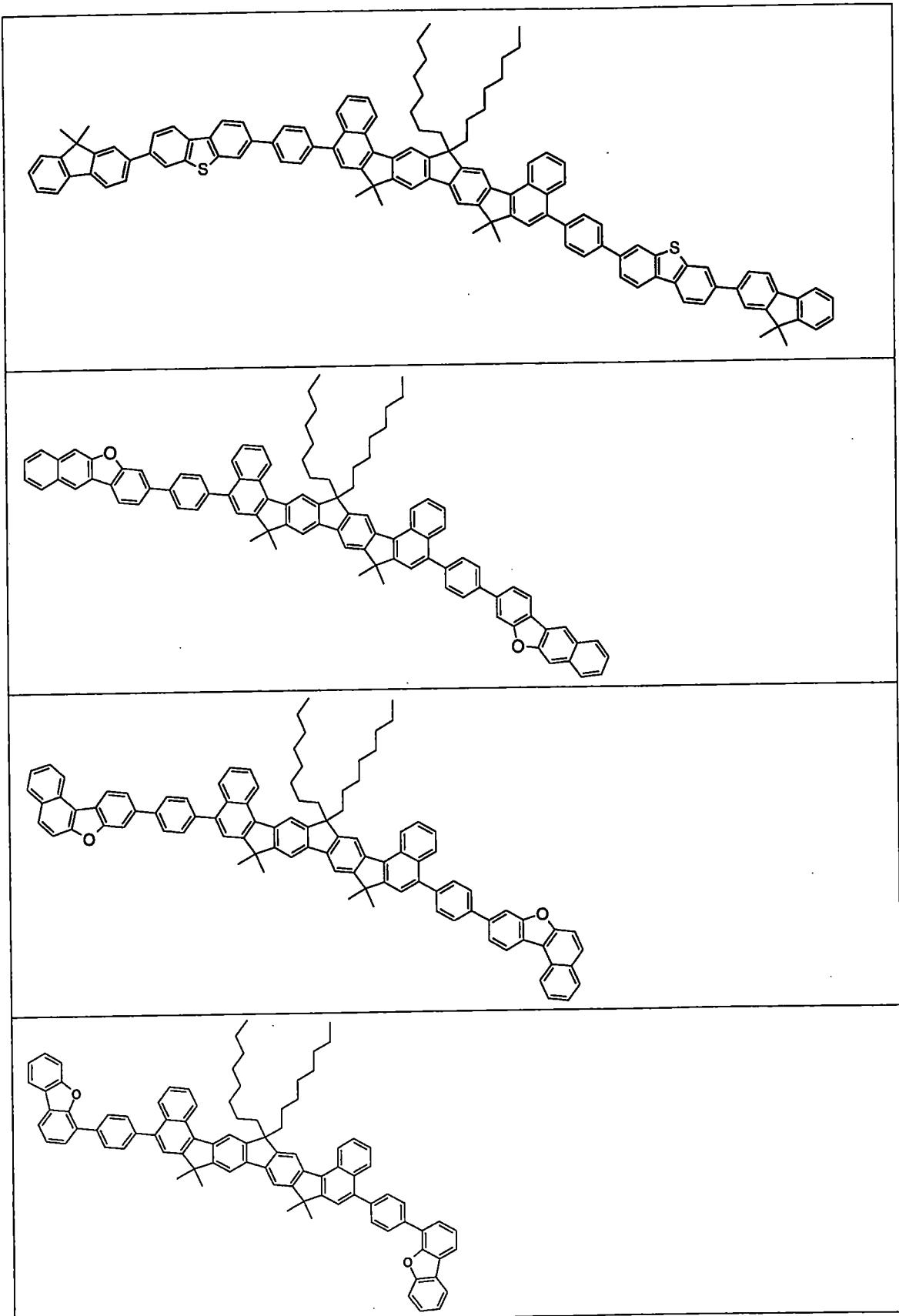


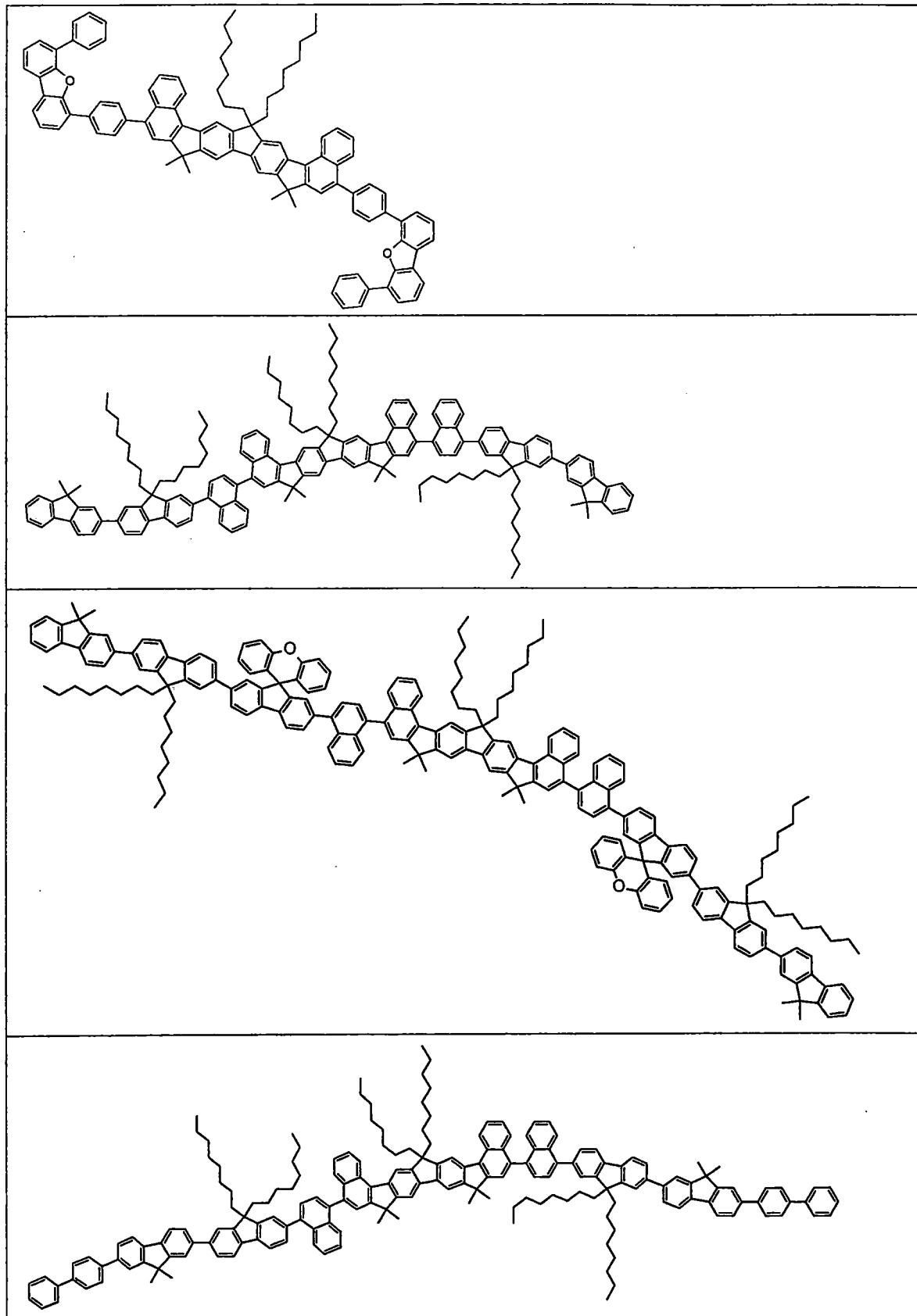


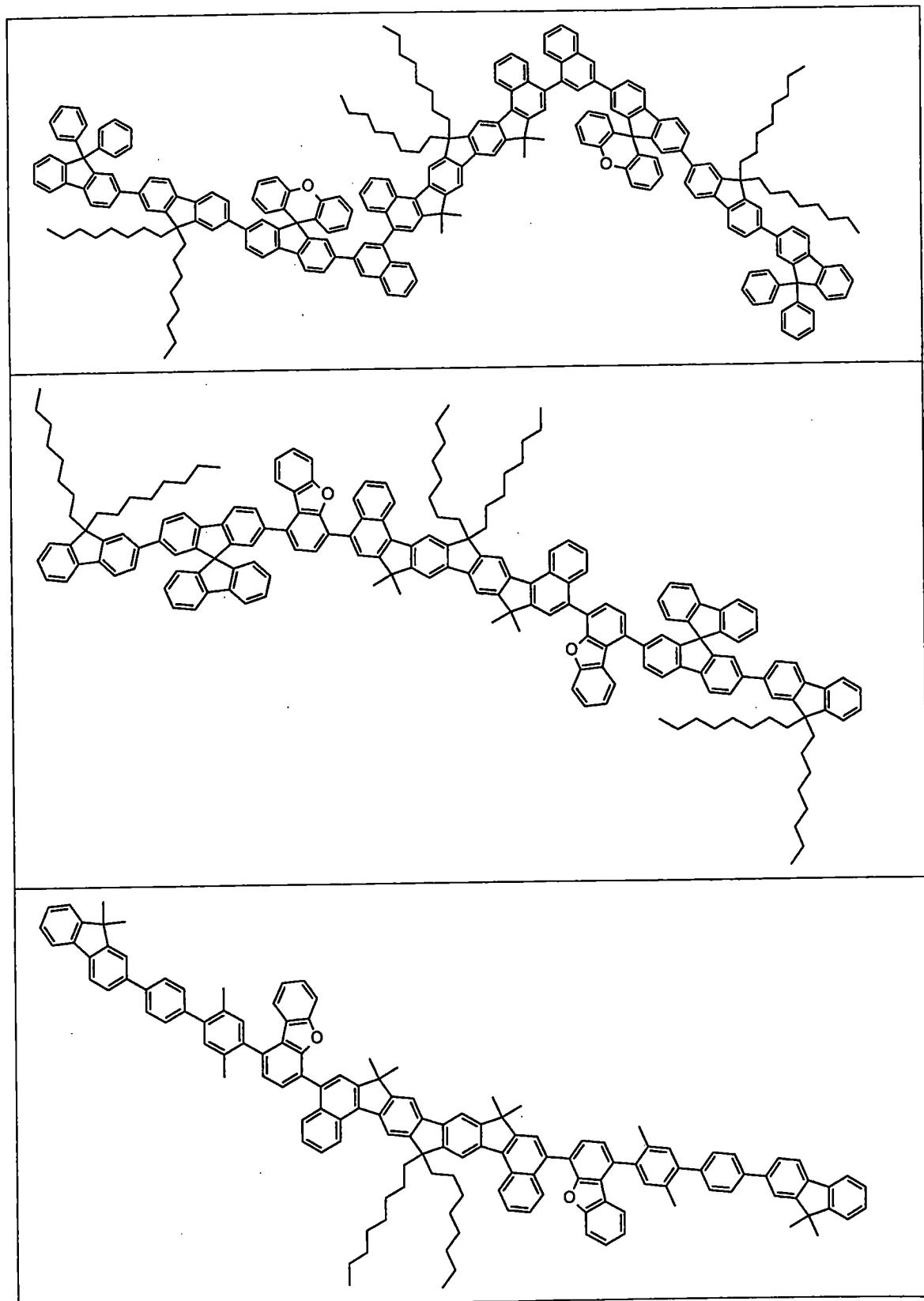


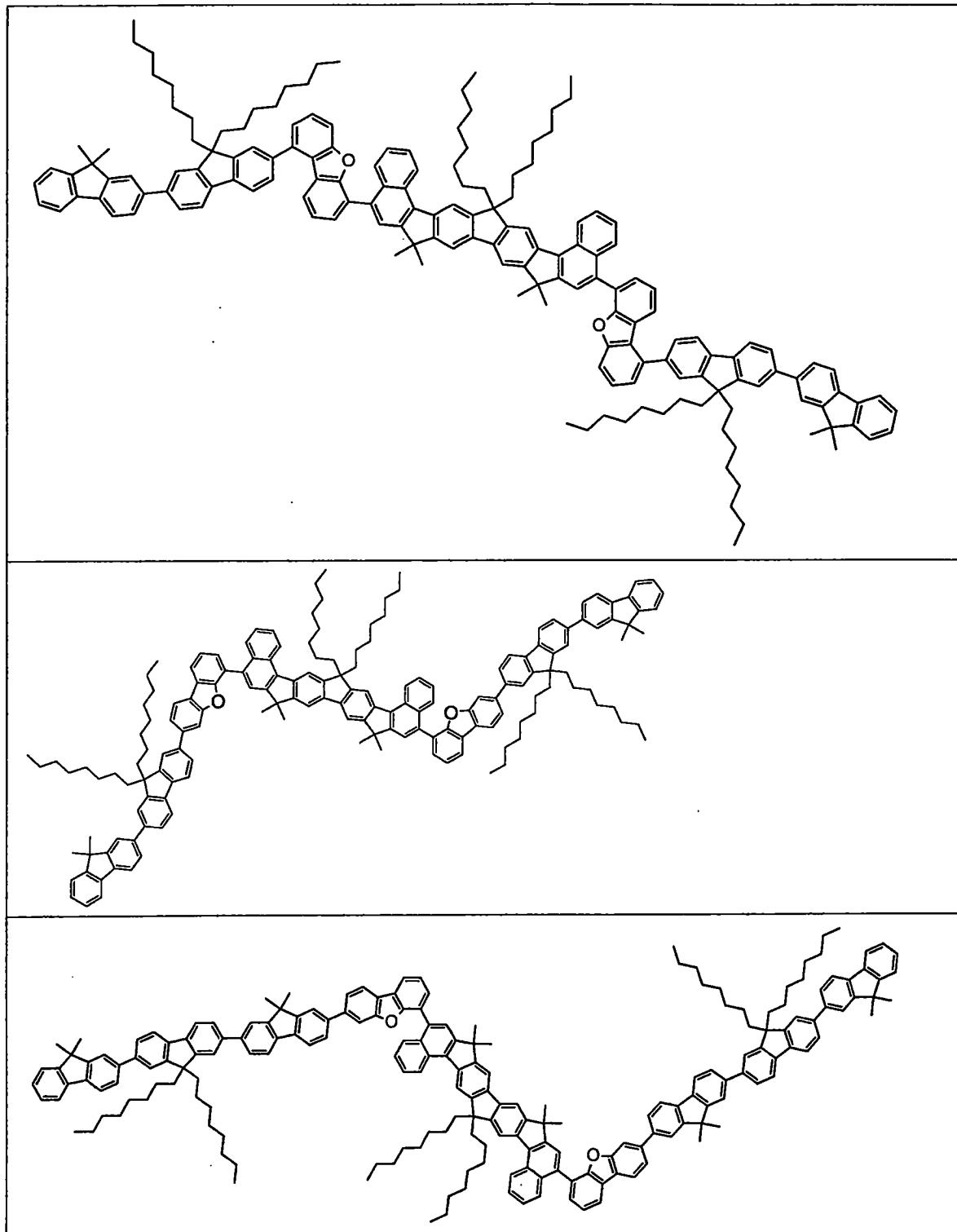


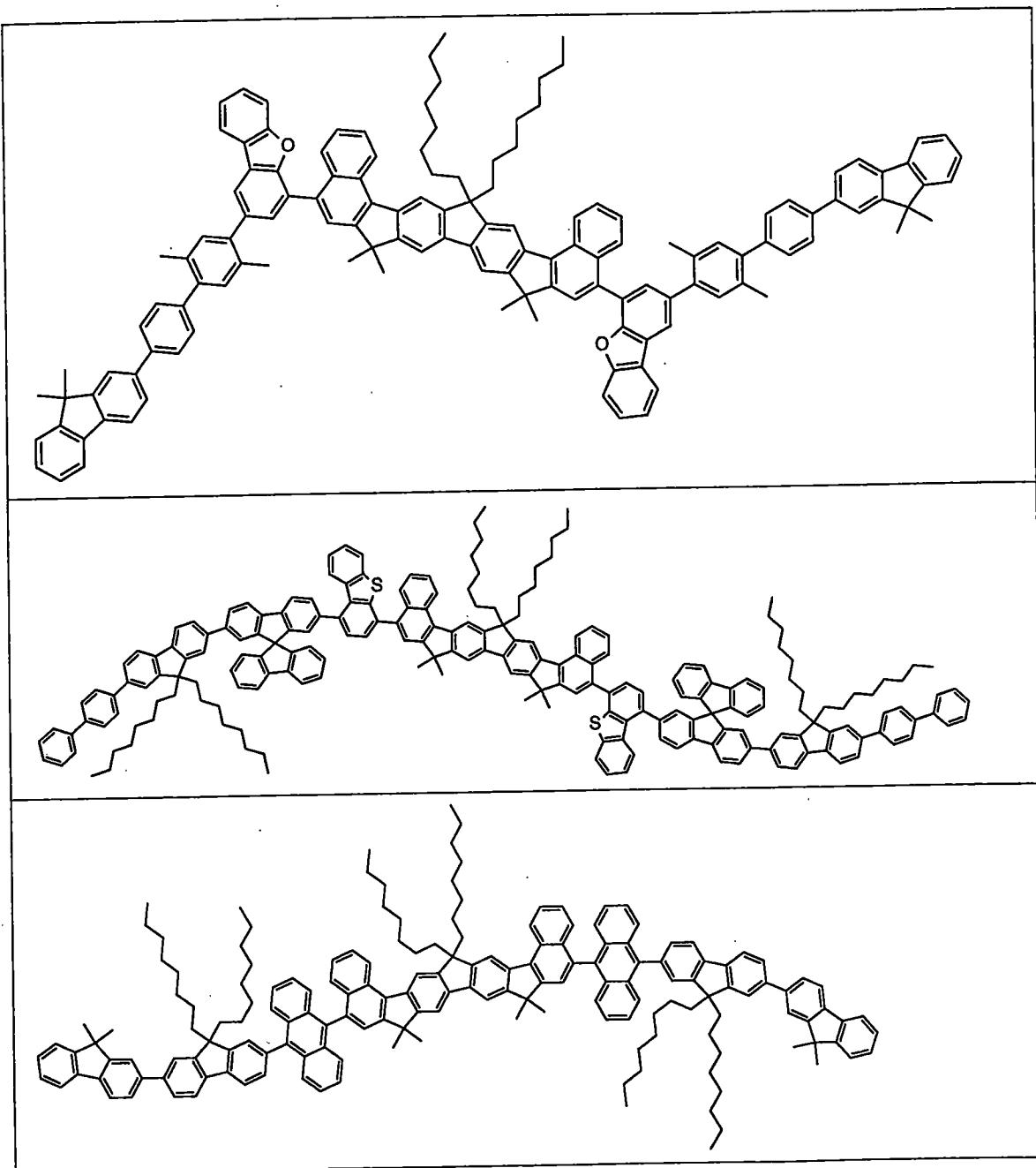


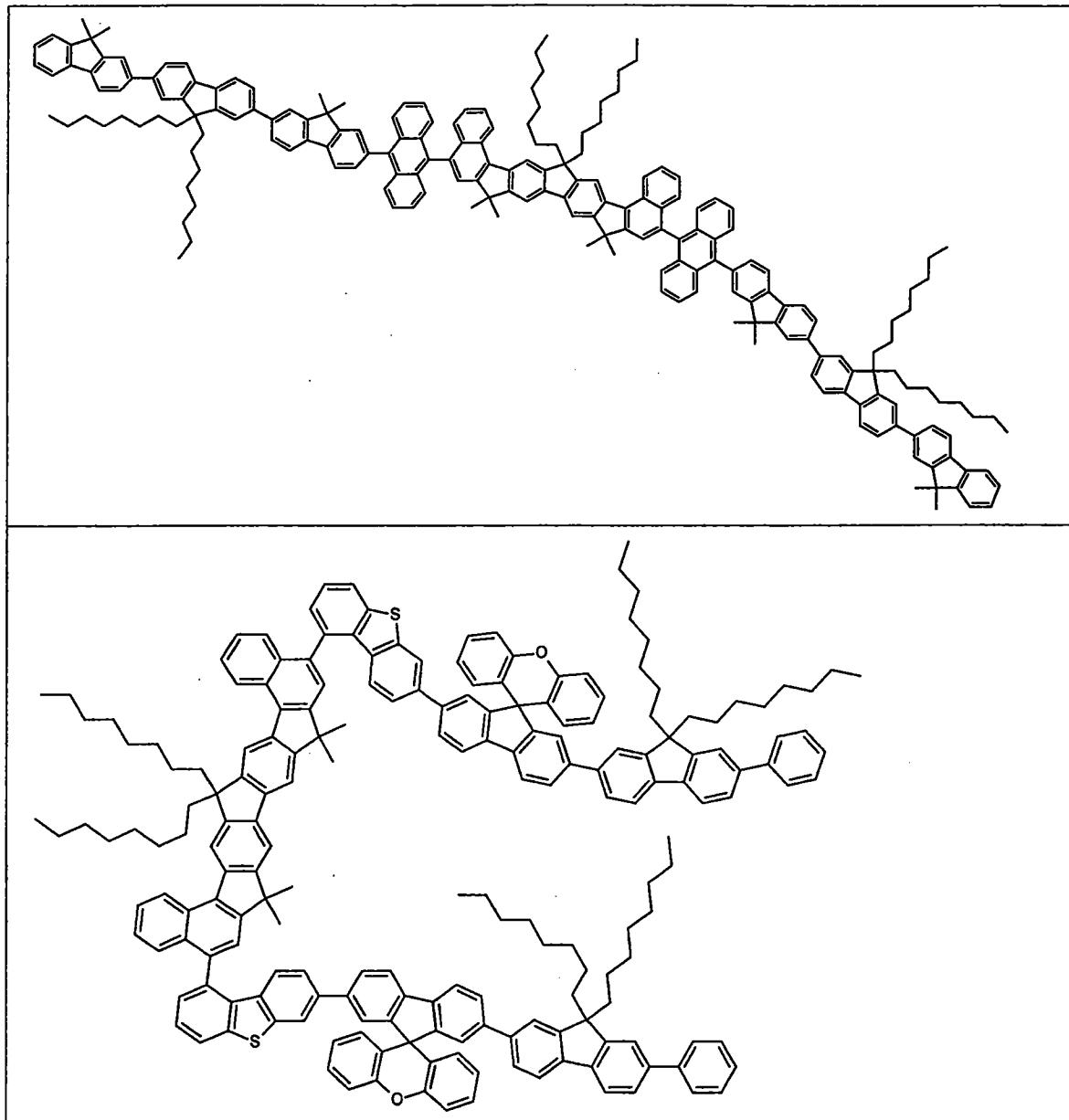


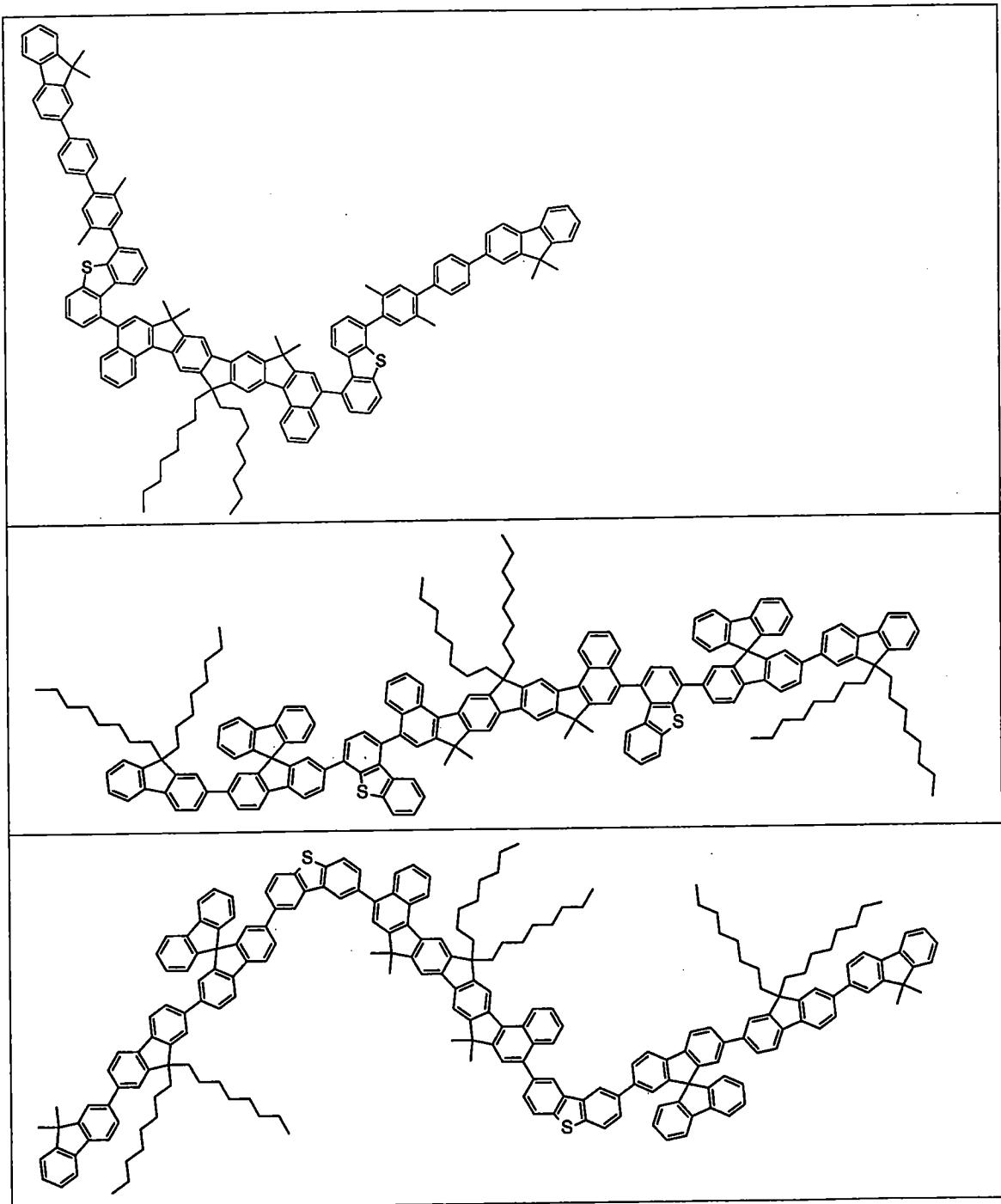


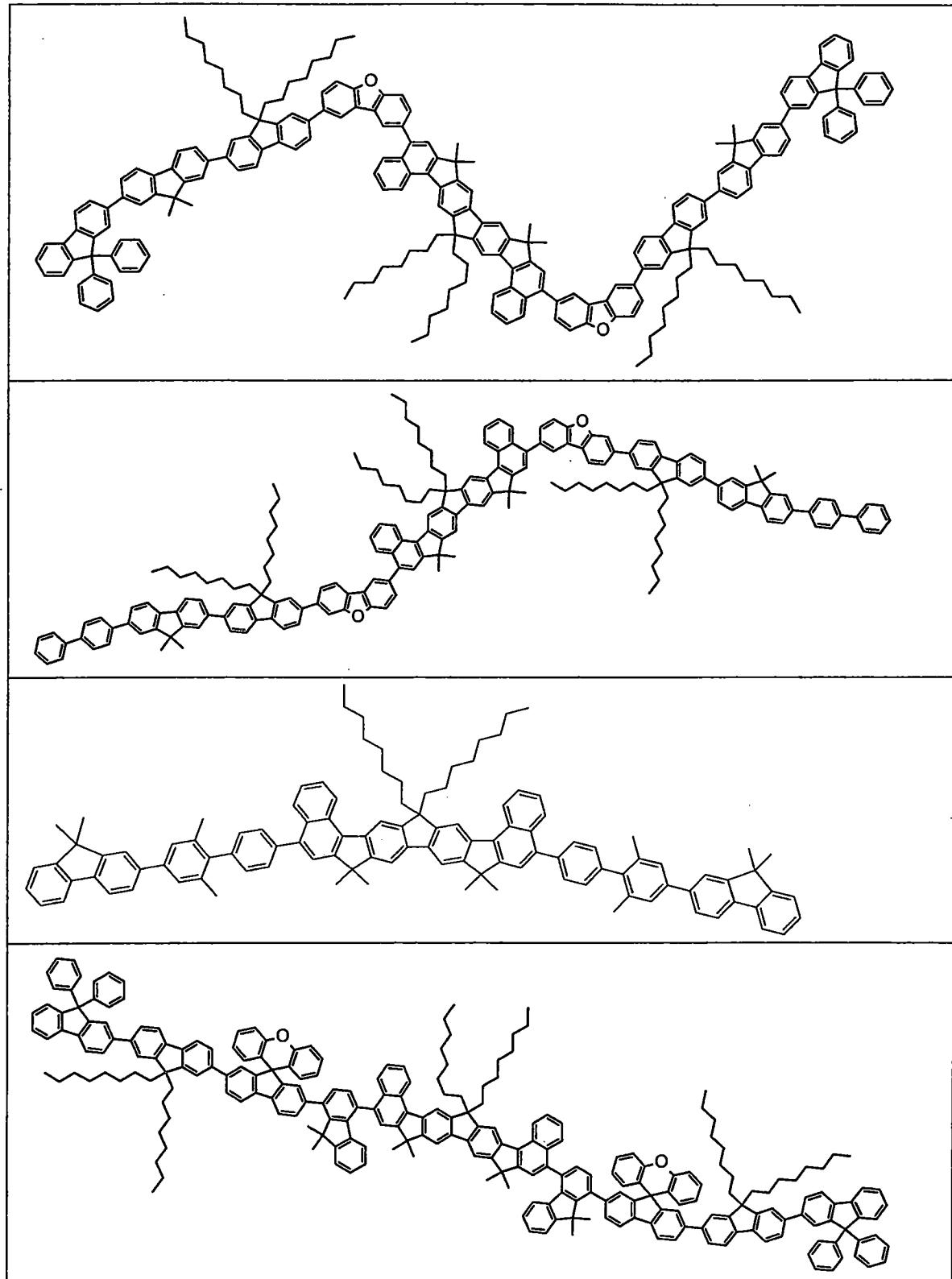


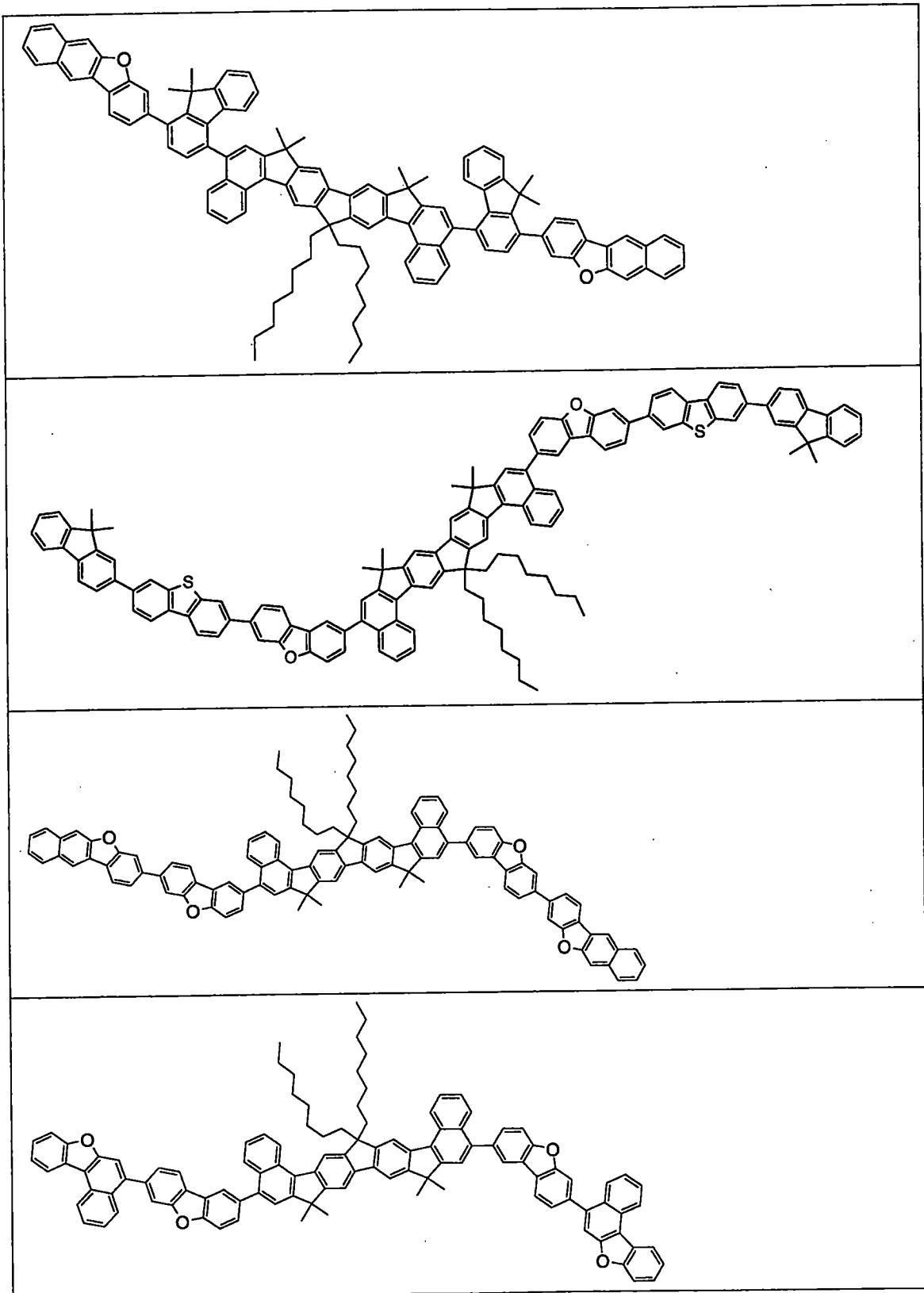


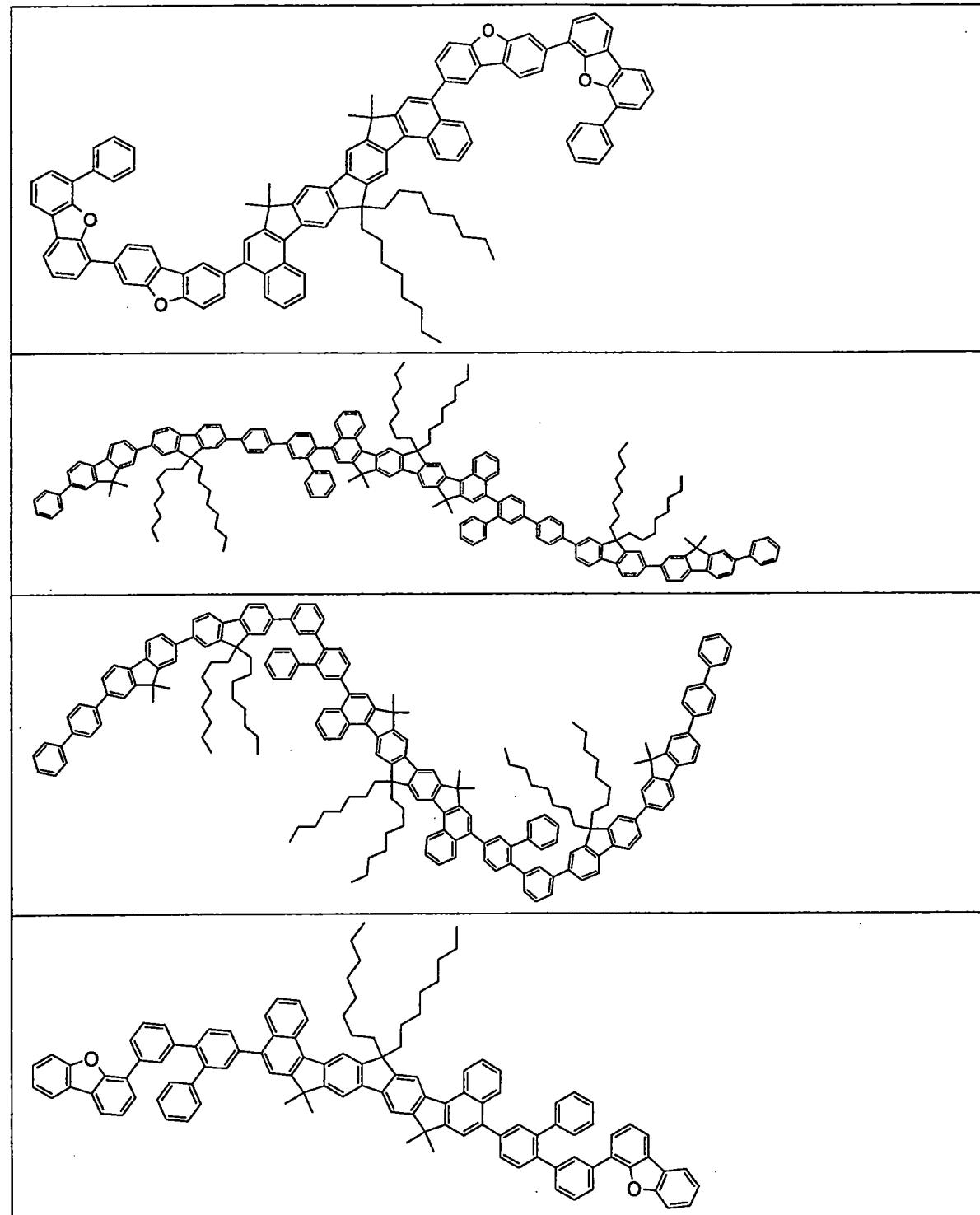


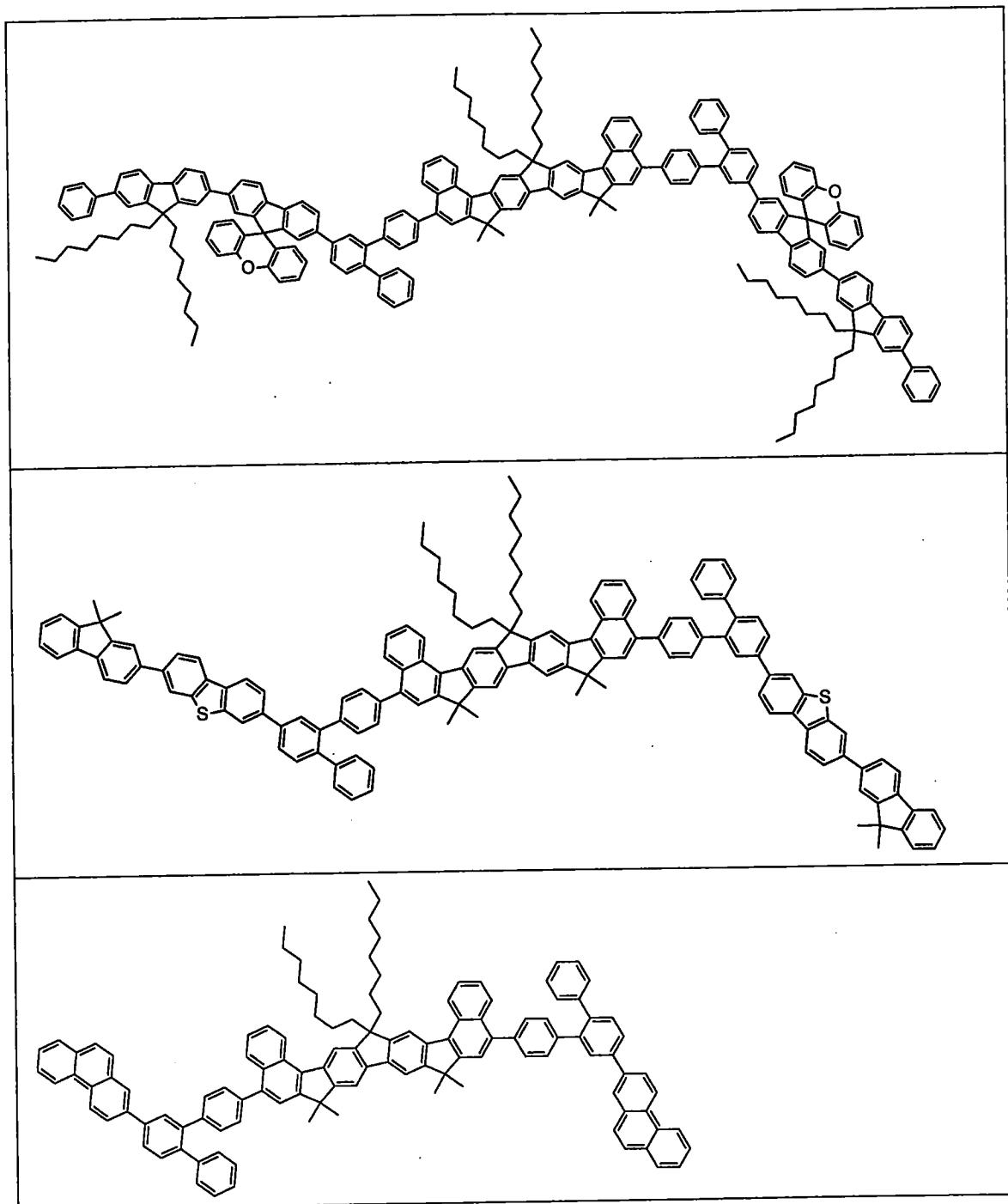


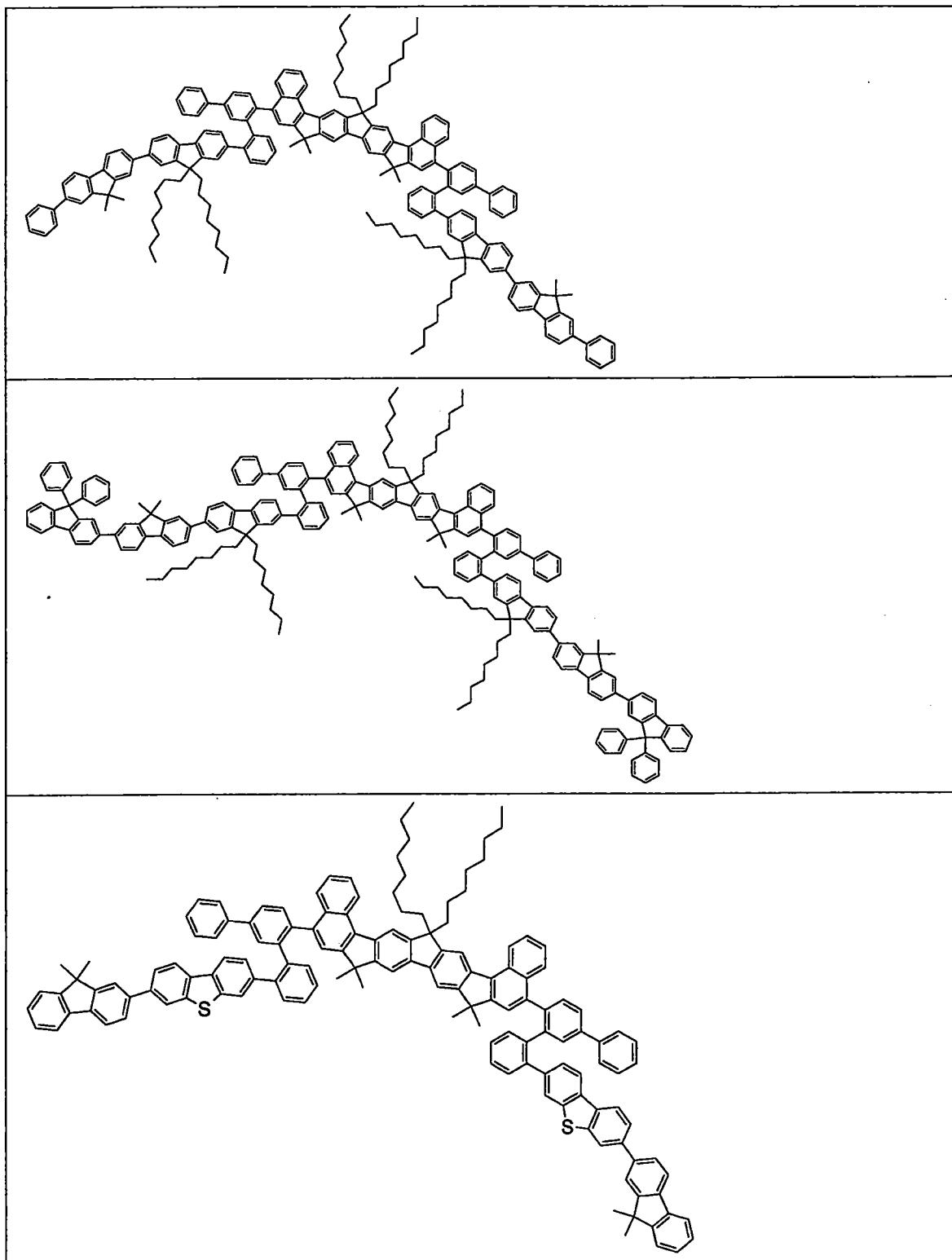


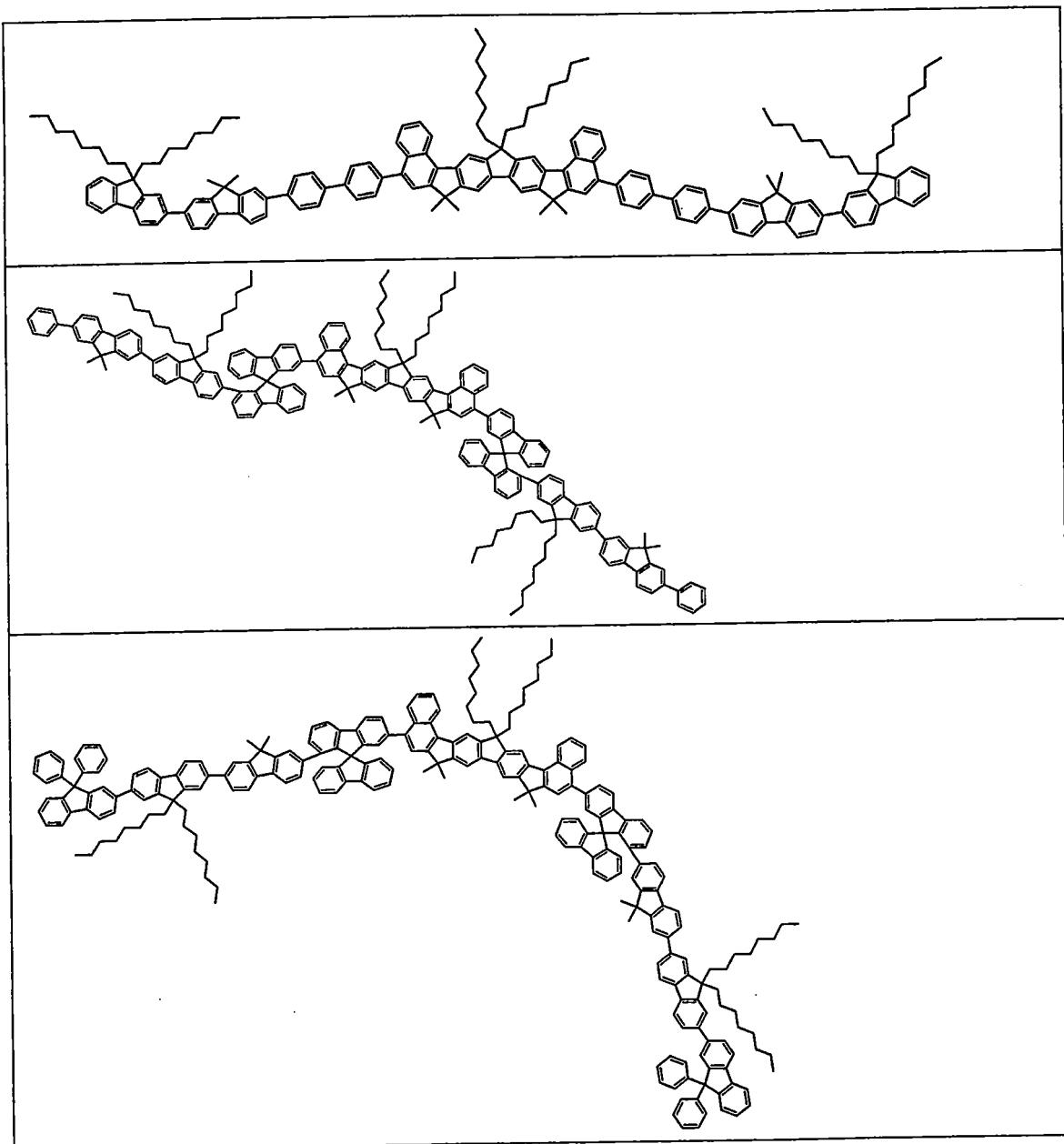


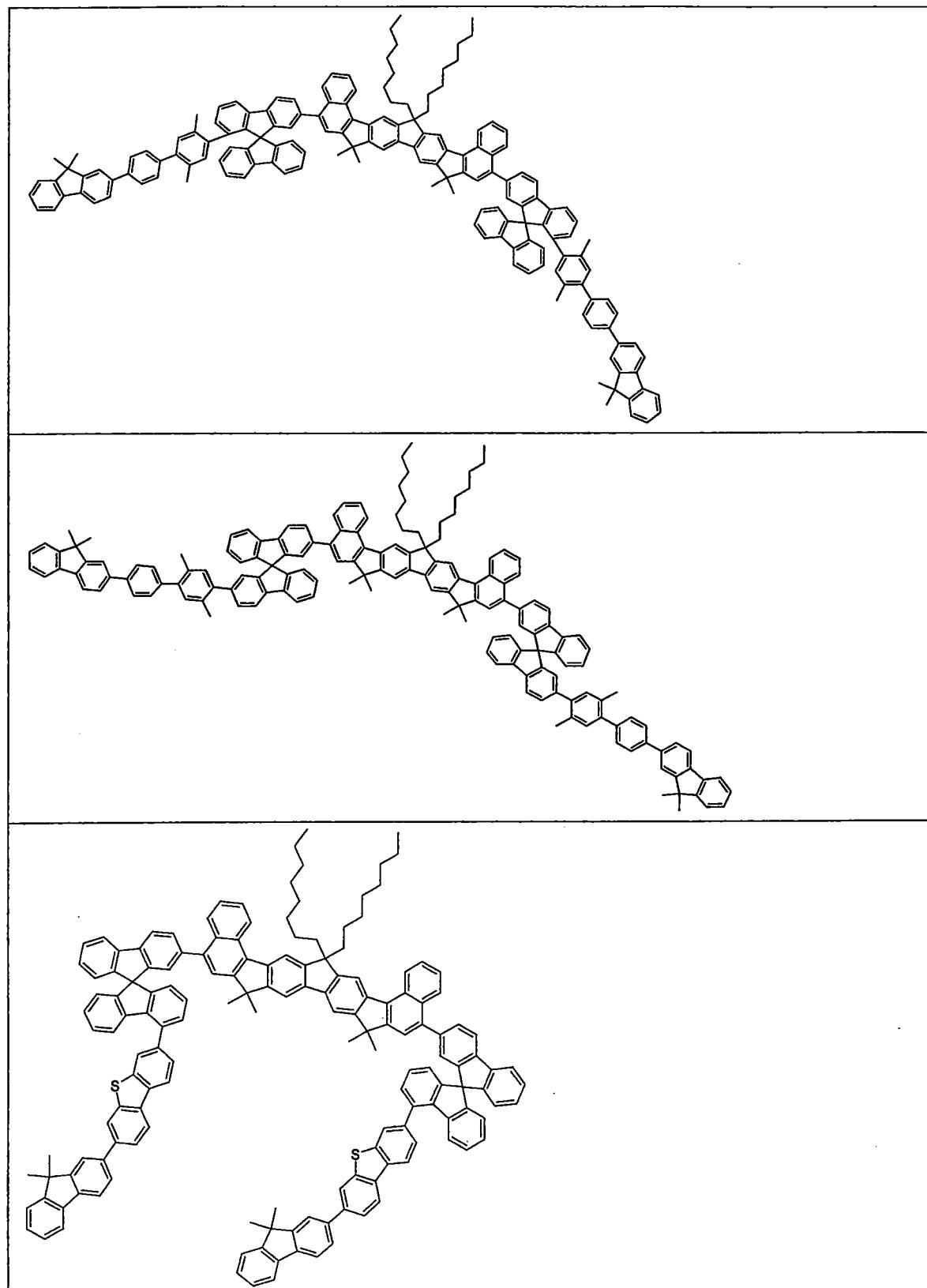


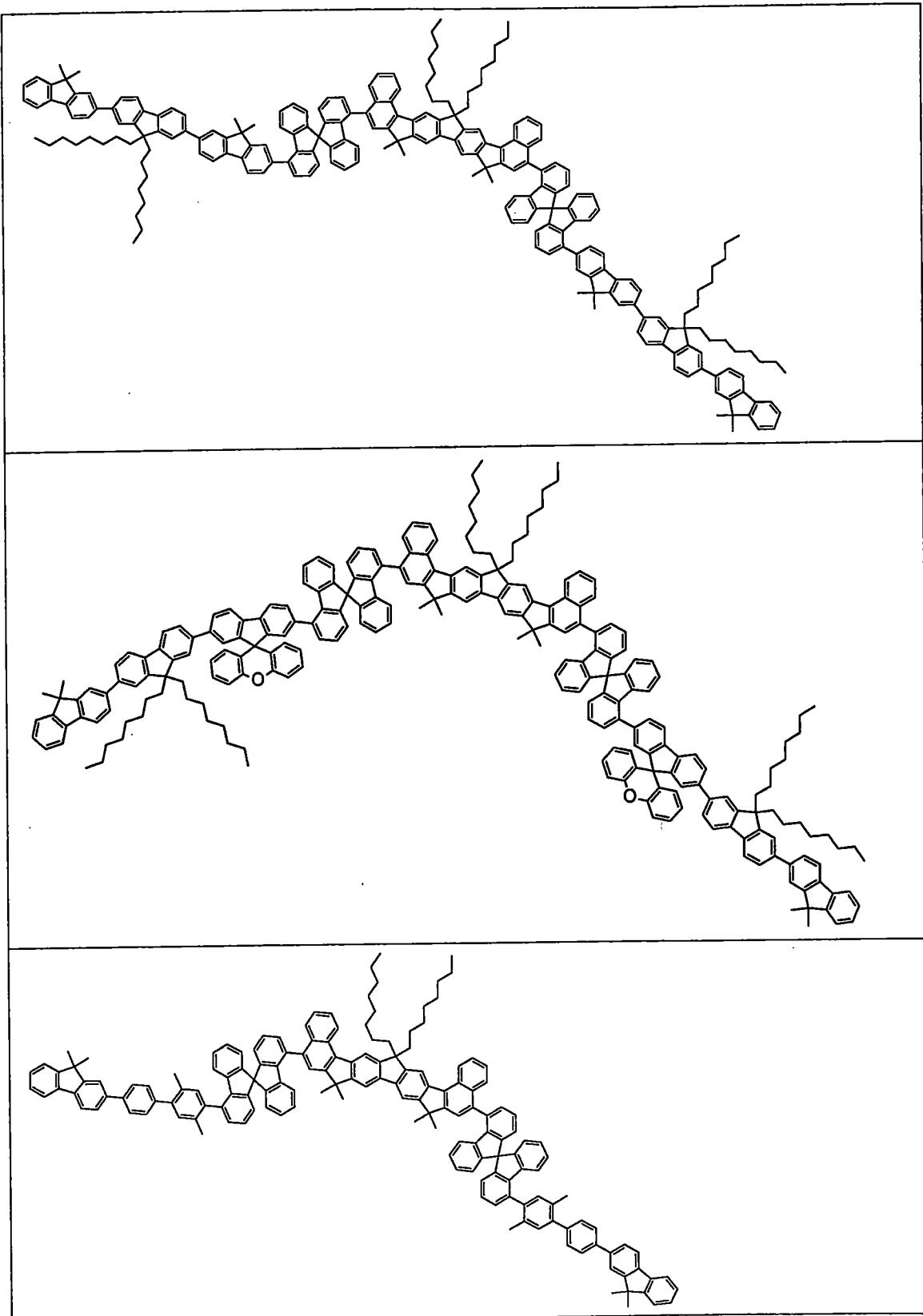


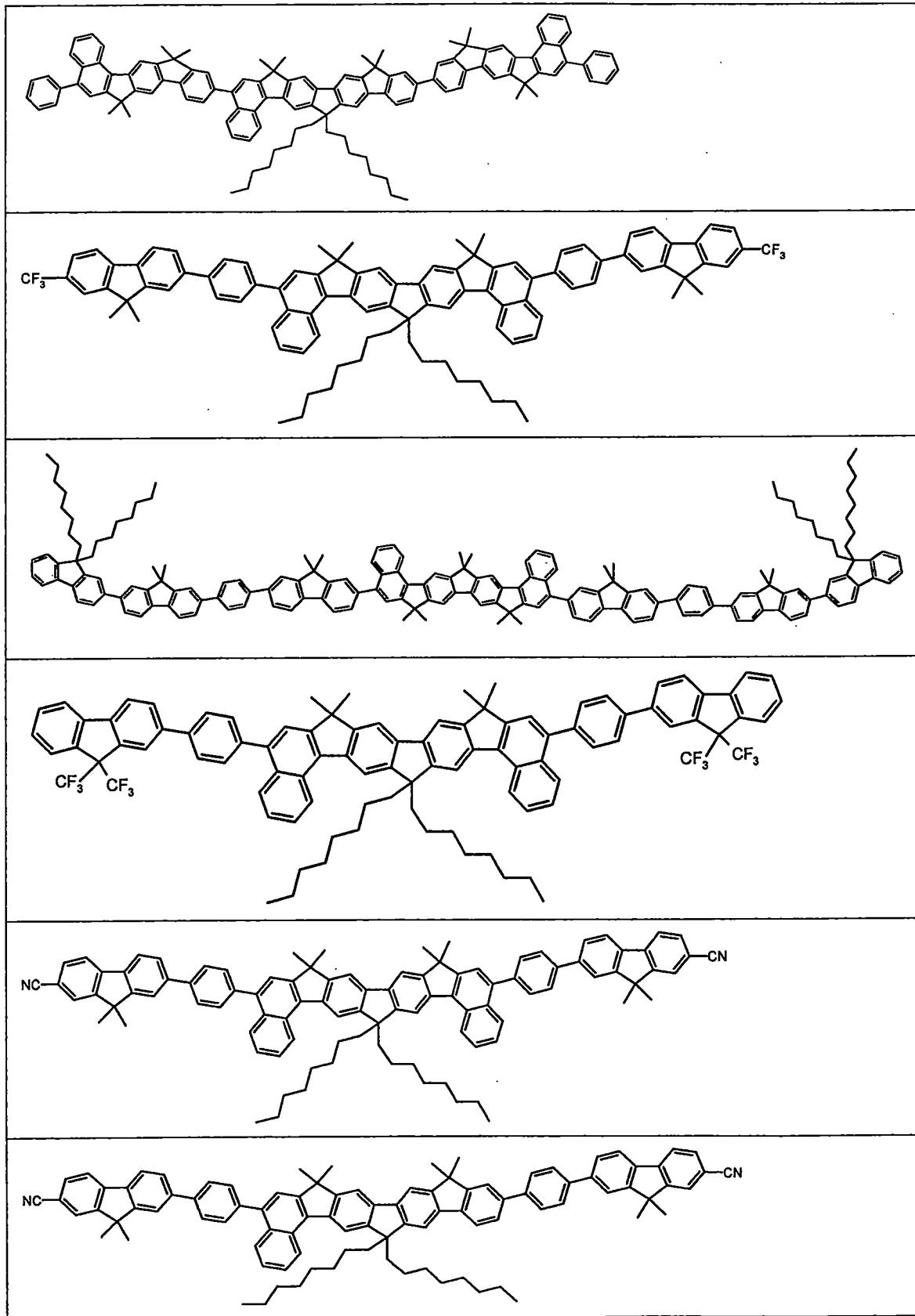


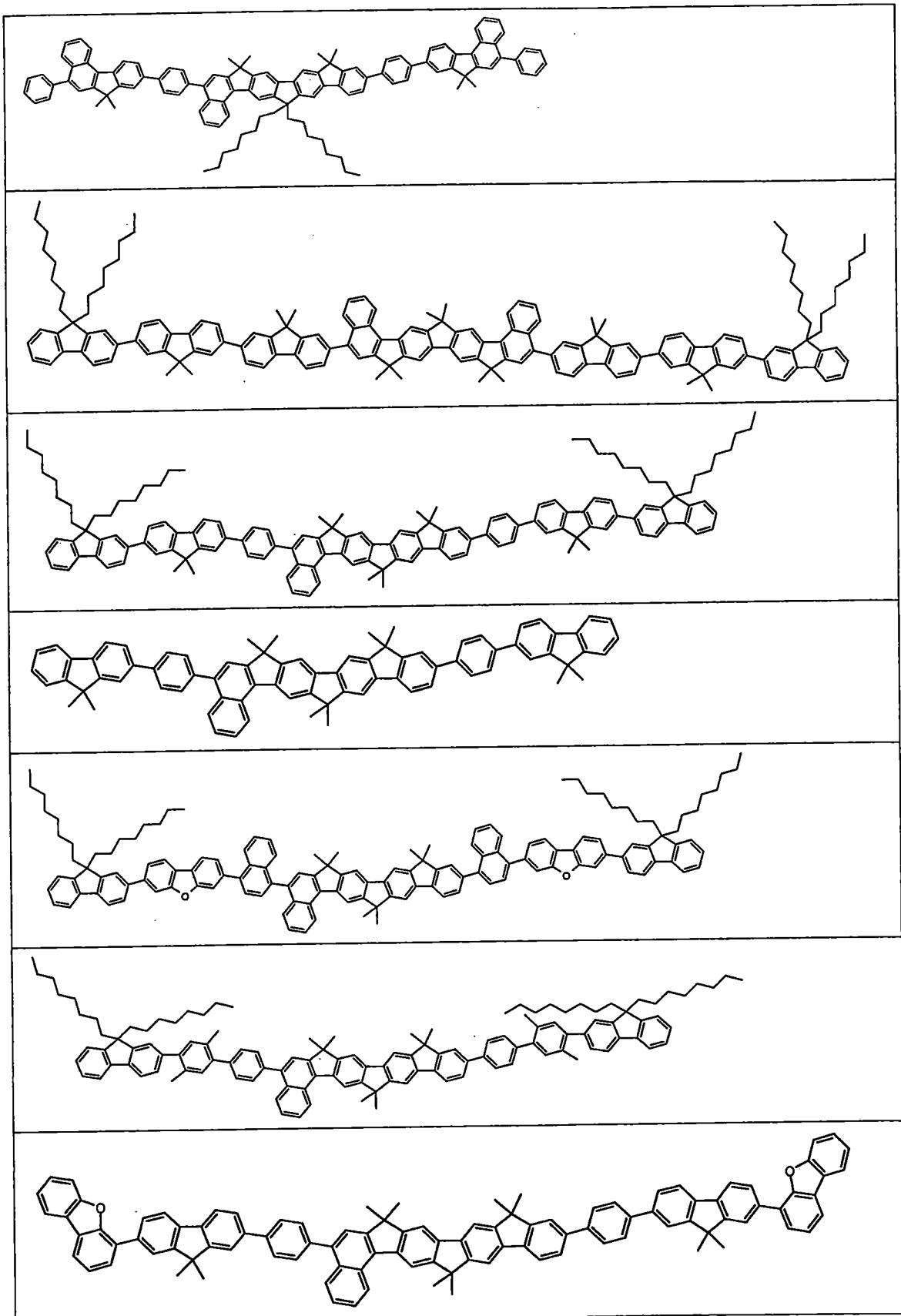


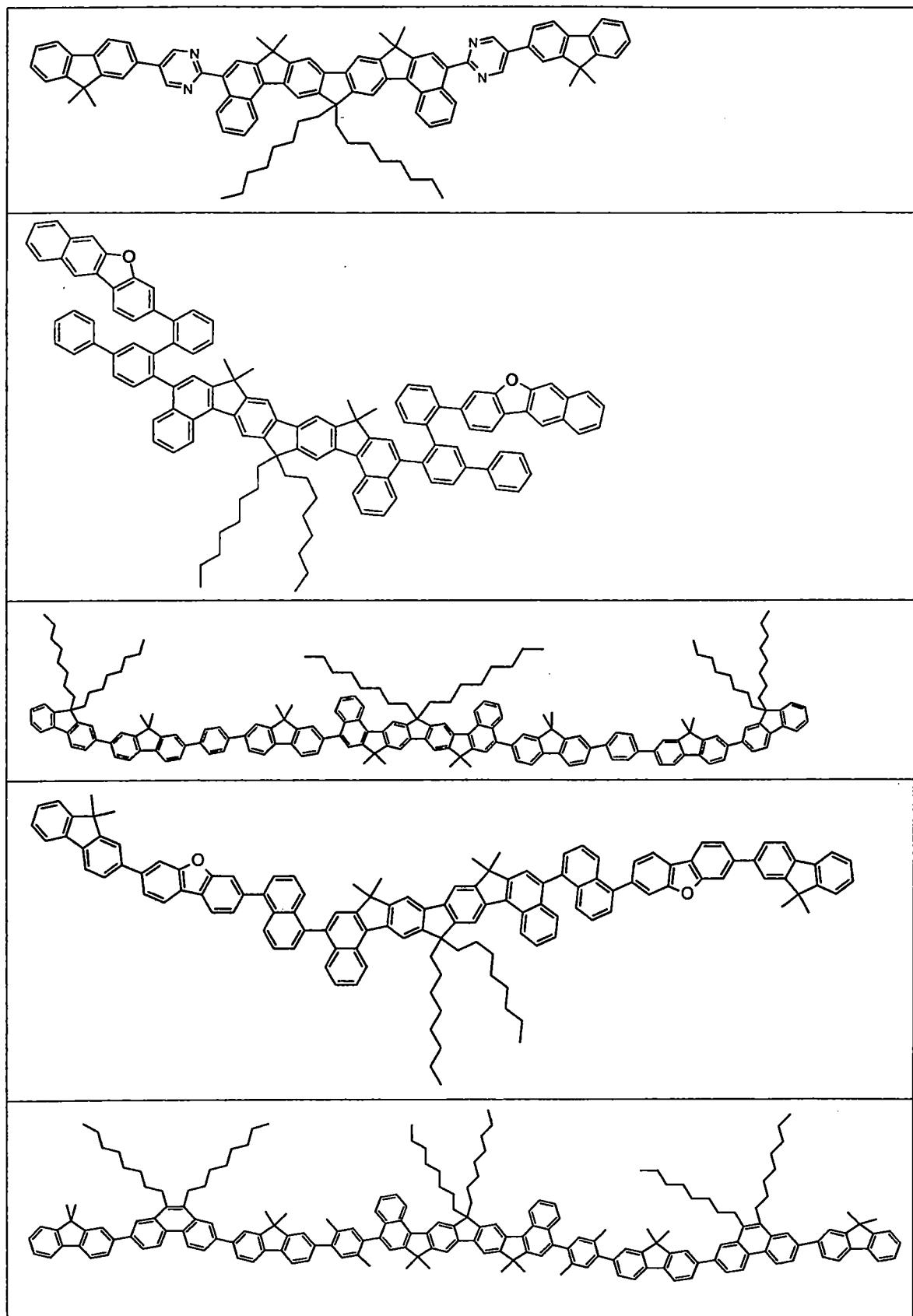


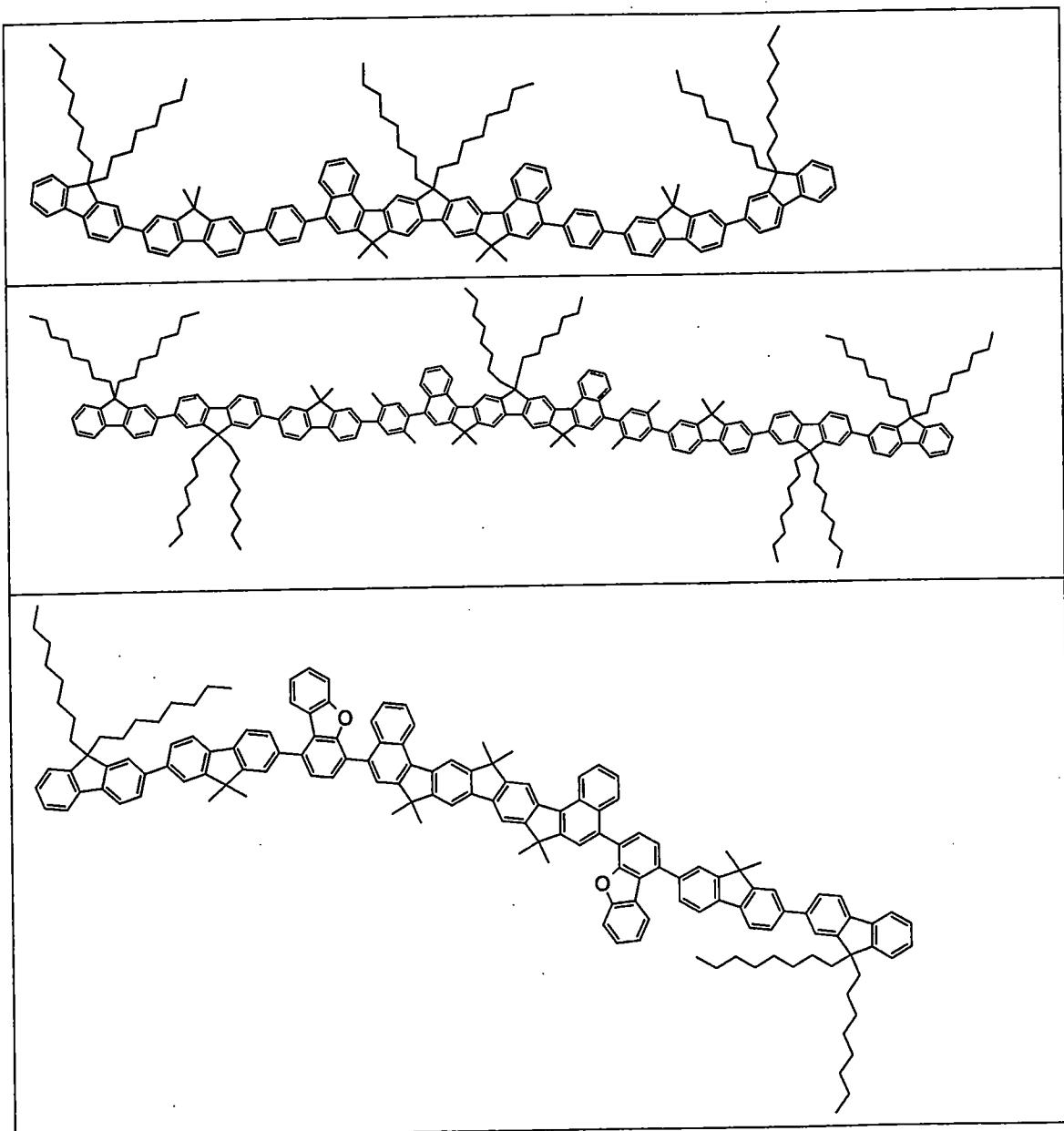


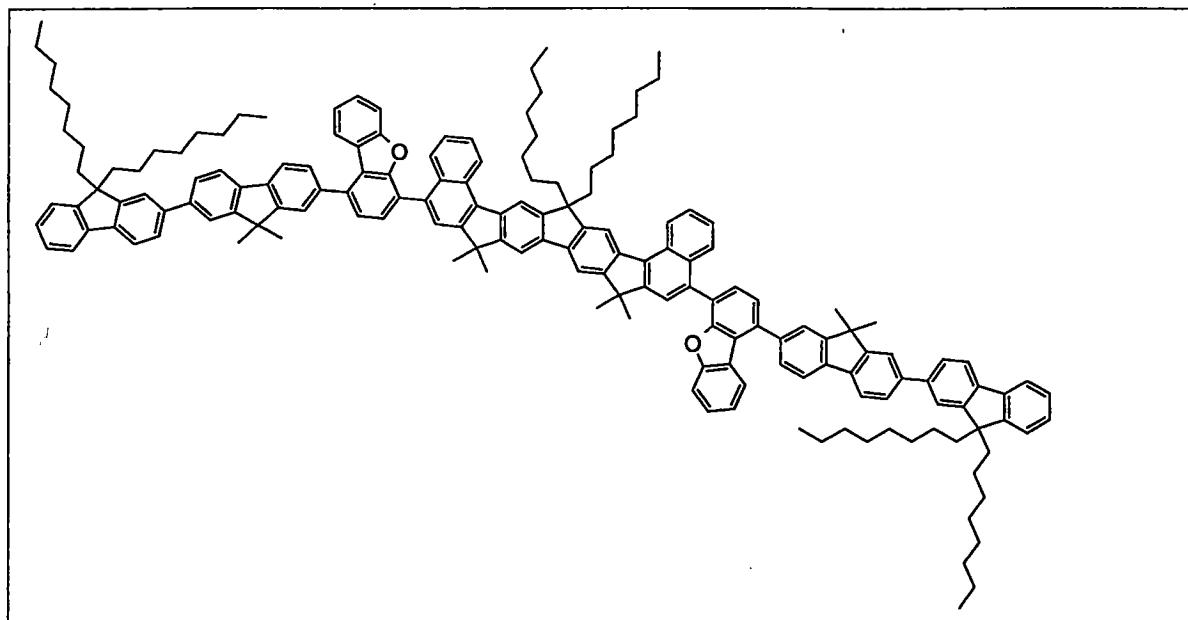








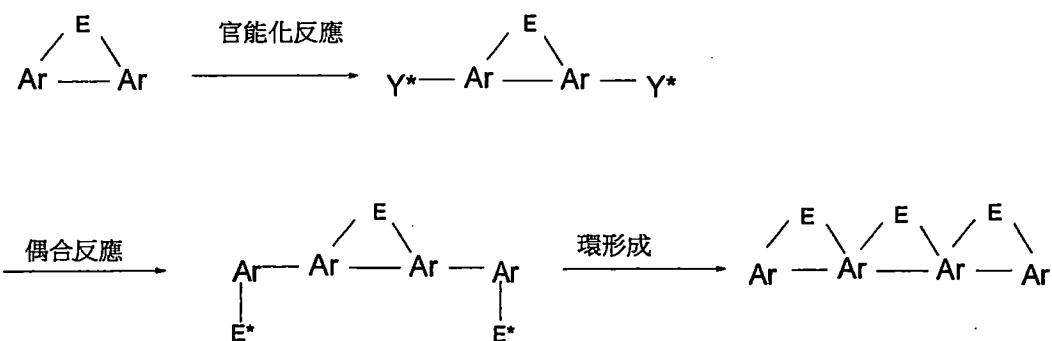




根據本發明之化合物可例如根據下列反應方案製備：

1) 根據方案1或方案2之第一步驟

方案1



Ar: 芳族或雜芳族基

E: 橋接基

E\*: 橋接基之前驅物

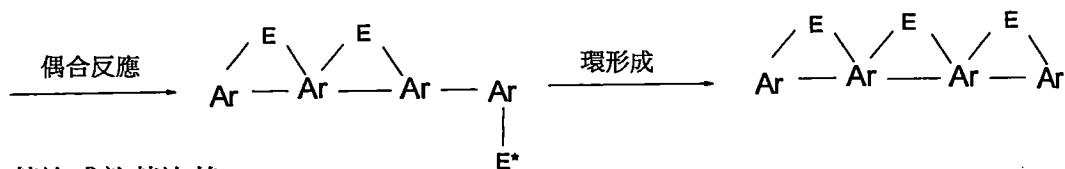
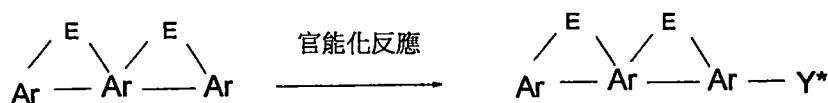
Y\*: 反應性基像是Cl、Br、I

將反應性基引入到起始化合物(在許多情況下為市售可購得)中，例如藉由溴化、或藉由溴化及之後硼化。之後，經由雙重偶合反應，例如鈴木偶合(Suzuki coupling)

反應將兩個其他芳族基引入。這些其他芳族基含有官能基  $E^*$ ，其可形成包含橋接基  $E$  之環。

或者，如方案 2 所示，吾人可從已含有兩個橋接基  $E$  之化合物開始。製備此類化合物之製程為所屬技術領域中具有通常知識者已知，例如從 WO 2008/006449。之後的步驟與方案 1 者相同。

### 方案 2



Ar: 芳族或雜芳族基

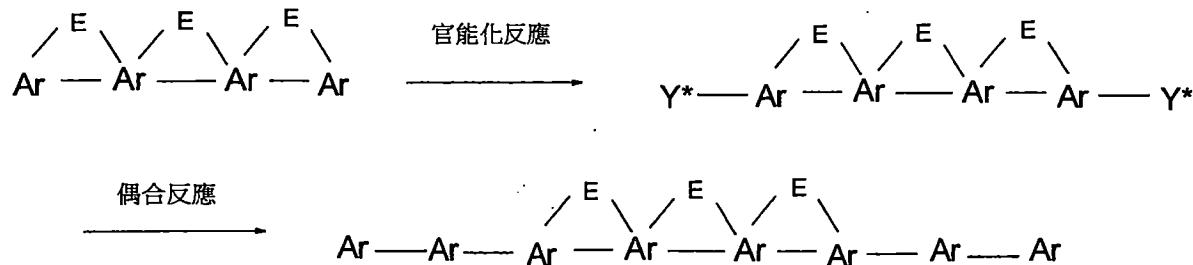
E: 橋接基

$E^*$ : 橋接基之前驅物

$Y^*$ : 反應性基像是 Cl、Br、I

### 2) 根據方案 3 之第二步驟

## 方案 3



Ar: 芳族或雜芳族基

E: 橋接基

E\*: 橋接基之前驅物

Y\*: 反應性基像是Cl、Br、I

將步驟1中獲得的化合物進一步官能化(經由溴化、或經由溴化及之後硼化引入反應性基)，以致經由雙重偶合反應，例如鈴木偶合反應將兩個其他芳族基引入。

本發明因此關於一種製備式1化合物之製程，其特徵在於，

- 發生至少一個偶合反應，較佳地經由過渡金屬催化之偶合反應，更佳地經由鈴木偶合反應；
- 發生環形成反應；
- 發生另外至少二個偶合反應，較佳地經由過渡金屬催化之偶合反應，更佳地經由鈴木偶合反應。

上述根據本發明之化合物，特別是經反應性離去基(諸如溴、碘、氯、硼酸或硼酸酯)取代之化合物可用作為產製相應寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物之單體。合適之反應性離去基例如為溴、碘、氯、硼酸或硼酸酯、胺、具

有端 C-C 雙鍵或 C-C 三鍵之烯基或炔基、氧呌、氧雜呌、經歷環加成例如 1,3-偶極環加成之基(諸如例如二烯或疊氮化物)、羧酸衍生物、醇及矽烷。

本發明因此進一步關於含有一或多種式(1)化合物之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中與該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物之鍵結可位在經 R<sup>1</sup>取代之式(1)中的任何所欲位置。取決於式(1)化合物之連接(linking)，化合物為寡聚物或樹枝狀聚合物之側鏈的構成分或主鏈的構成分。寡聚物就本發明的意義而言意指自至少三個單體單元建構之化合物。聚合物就本發明的意義而言意指自至少十個單體單元建構之化合物。根據本發明之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物可為共軛、部分共軛或非共軛。根據本發明之寡聚物或聚合物可為直鏈、分支或樹枝狀。在以直鏈方式連接之結構中，式(1)單元可直接彼此連接或彼等可經由二價基彼此連接，例如經由經取代或未經取代之伸烷基、經由雜原子或經由二價芳族或雜芳族基。在分支或樹枝狀結構中，例如三或更多個式(1)單元可經由三價或多價基連接，例如經由三價或多價芳族或雜芳族基，以形成分支或樹枝狀寡聚物或聚合物。

如上所述對式(1)化合物之偏好也沿用到寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物中重複出現之式(1)單元。

對於寡聚物或聚合物之製備而言，根據本發明之單體係均聚或與進一步之單體共聚合。合適且較佳的共單體係選自茀(例如根據 EP 842208 或 WO 00/22026)、螺二茀(例如

根據 EP 707020、EP 894107或WO 06/061181)、對-伸苯基(例如根據 WO 1992/18552)、咔唑(例如根據 WO 04/070772 或 WO 2004/113468)、噻吩(例如根據 EP 1028136)、二氫菲(例如根據 WO 2005/014689或WO 2007/006383)、順式-及反式-茚并茀(例如根據 WO 2004/041901 或 WO 2004/113412)、酮(例如根據 WO 2005/040302)、菲(例如根據 WO 2005/104264或 WO 2007/017066)或也選自複數種這些單元。聚合物、寡聚物及樹枝狀聚合物經常也含有進一步之單元，例如發光(螢光或磷光)單元，諸如例如乙烯基三芳基胺(例如根據 WO 2007/068325)或磷光金屬錯合物(例如根據 WO 2006/003000)、及/或電荷傳輸單元，特別是那些基於三芳基胺者。

根據本發明之聚合物及寡聚物一般藉由聚合一或多種單體製備，該等單體中之至少一種單體在聚合物中產生重複出現之式(1)單元。合適的聚合反應為所屬技術領域中具有通常知識者已知且描述於文獻中。產生 C-C或C-N連接之特別合適且較佳的聚合反應為下列者：

- (A) 鈴木聚合；
- (B) 山本(YAMAMOTO)聚合；
- (C) 施蒂爾(STILLE)聚合；及
- (D) 哈特威-布赫瓦爾德(HARTWIG-BUCHWALD)聚合。

藉由這些方法可進行聚合之方式以及聚合物可接著從反應介質分離出並純化之方式為所屬技術領域中具有通常

知識者已知且詳細描述於文獻中，例如於 WO 2003/048225、WO 2004/037887 及 WO 2004/037887 中。

對於從液相，例如藉由旋轉塗佈或藉由印刷製程來加工根據本發明之化合物而言，需要根據本發明之化合物的製劑。這些製劑可為，例如溶液、分散液或乳液。為了此目的，可能較佳的是使用二或更多種溶劑的混合物。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(mesitylene)；四氫萘；藜蘆醚；THF；甲基-THF；THP；氯苯；二噁烷；苯氧基甲苯，特別是3-苯氧基甲苯；(-)-葑酮；1,2,3,5-四甲基苯；1,2,4,5-四甲基苯；1-甲基萘；2-甲基苯并噁唑；2-苯氧基乙醇；2-吡咯啶酮；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； $\alpha$ -萜品醇；苯并噁唑；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；苯乙醚；1,4-二異丙基苯；二苄基醚；二乙二醇丁基甲基醚；三乙二醇丁基甲基醚；二乙二醇二丁基醚；三乙二醇二甲基醚；二乙二醇單丁基醚；三丙二醇二甲基醚；四乙二醇二甲基醚；2-異丙基萘；戊基苯；己基苯；庚基苯；辛基苯；1,1-雙(3,4-二甲基苯基)乙烷或此等溶劑的混合物。

本發明因此進一步關於一種製劑，特別是溶液、分散液或乳液，其包含至少一種式(1)化合物或至少一種含有至少一種式(1)單元之聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物，

及至少一種溶劑，較佳有機溶劑。可製備此種溶液之方式為所屬技術領域中具有通常知識者已知且描述於，例如WO 2002/072714、WO 2003/019694及彼等中所引用之文獻。

根據本發明之化合物係適用於電子裝置中，特別是有機電致發光裝置(OLED)中。取決於取代，化合物以不同功能及在不同層中使用。

根據本發明之化合物可以任何功能在有機電致發光裝置中使用，例如作為發光材料、作為基質材料、作為電洞傳輸材料、或作為電子傳輸材料。偏好的是在有機電致發光裝置之發光層中作為發光材料，較佳作為螢光發光材料之用途，以及在發光層中，較佳在螢光發光層中作為基質材料之用途。

本發明因此進一步關於一種式(1)化合物於電子裝置中之用途。電子裝置在此較佳選自下列所組成群組：有機積體電路(OIC)、有機場效電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機發光電晶體(OLET)、有機太陽能電池(OSC)、有機光學偵檢器、有機光接收器、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)及特佳地有機電致發光裝置(OLED)。

本發明進一步關於一種包含至少一種式(1)化合物之電子裝置。電子裝置在此較佳選自上述所指裝置。特別偏好的是包含陽極、陰極及至少一層發光層之有機電致發光裝置，其特徵在於至少一層有機層包含至少一種式(1)化

合物。尤佳偏好的是包含陽極、陰極及至少一層發光層之有機電致發光裝置，該至少一層發光層包含至少一種式(1)化合物。

除了包含陰極、陽極及發光層外，有機電致發光裝置也可包含其他層。例如，彼等在各情況下係選自一或多個電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、電子傳輸層、電子注入層、電子阻擋層、激子阻擋層、中間層、電荷產生層 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer) 及 / 或有機或無機 p/n 接面。

有機電致發光裝置之該等層的順序較佳為下列者：

陽極 - 電洞注入層 - 電洞傳輸層 - 發光層 - 電子傳輸層 - 電子注入層 - 陰極。不是有必要在此出現所有該等層，此外可出現其他層，例如在陽極側上相鄰於發光層之電子阻擋層、或在陰極側上相鄰於發光層之電洞阻擋層。

根據本發明之有機電致發光裝置可包含複數層發光層。在此情況下，這些發光層特佳地總體具有在 380nm 與 750nm 之間的複數個發光最大值，並整體上導致白色發光，也就是在發光層中使用能發螢光或磷光及發射藍色或黃色或橘色或紅色光之各種發光化合物。特偏好的是三層系統，也就是具有三層發光層之系統，其中這些層的至少一者較佳包含至少一種式(1)化合物及其中這三層呈現藍色、綠色及橘色或紅色發光(對於基礎結構，參見例如 WO

2005/011013)。應注意，對於產生白色光，與其使用發射色光之複數個發光體化合物，也可能適合的是個別使用於廣波長範圍發射之發光體化合物。根據本發明之化合物也可替代地及/或額外地出現在此種有機電致發光裝置之電洞傳輸層或另一種層中。

根據本發明之化合物特別適合用於作為發光體化合物(較佳藍色發光體化合物)之基質化合物，或作為發光體化合物(較佳藍色發光體化合物)。

根據本發明之化合物較佳係在發光層作為發光體化合物使用。在此情況下，較佳與一或多種基質材料組合使用。在此發光化合物與基質材料之較佳性質比例係如於下面指出者。

根據本發明之化合物也可用作為發光體化合物之基質化合物。偏好的是作為螢光發光體化合物之基質化合物之用途。然而，根據本發明之化合物也可用作為展現熱活化型延遲螢光(TADF)之發光體化合物之基質化合物。TADF中發光機制的基礎原理揭示於H. Uoyama等人之Nature 2012, 492, 234中。

若根據本發明之化合物係作為基質材料使用，其可與所屬技術領域中具有通常知識者已知之任何所欲發光化合物組合使用。較佳與下面所指之較佳發光化合物(特別是下面所指之較佳螢光發光化合物)組合使用。

在有機電致發光裝置之發光層包含發光化合物與基質化合物之混合物的情況下，則沿用下列：

在發光層之混合物中，發光化合物的比例較佳於 0.1 與 50.0% 之間，特佳於 0.5 與 20.0% 之間，及尤佳於 1.0 與 10.0% 之間。據此，一或多種基質材料的比例較佳於 50.0 與 99.9% 之間，特佳於 80.0 與 99.5% 之間，及尤佳於 90.0 與 99.0% 之間。

在本申請案的內容中，若自氣體相施加化合物，以 % 指示之比例意指體積 %；而若自溶液施加化合物，以 % 指示之比例意指重量 %。

根據本發明之化合物也可進一步在電子傳輸層、電洞阻擋層或電子注入層中作為電子傳輸化合物使用。為此目的，較佳根據本發明之化合物含有一或多種選自貧電子雜芳基之取代基，諸如例如三嗪、嘧啶或苯并嘧唑。

於下面指出一般在根據本發明之有機電致發光裝置中用作為相應功能材料的較佳材料類別。

合適的磷光發光化合物特別是在適當激發發光(較佳在可見區域發光)，此外含有具有原子序大於 20，較佳大於 38 且小於 84，特佳大於 56 且小於 80 的至少一種原子之化合物。所用磷光發光化合物較佳係含有銅、鉬、鎢、鍊、釤、鐵、銠、鋐、鉻、鈀、鉑、銀、金或鎘之化合物，特別是含有鉻、鉑或銅之化合物。

為了本發明，所有發光鉻、鉑或銅錯合物被視為磷光化合物。

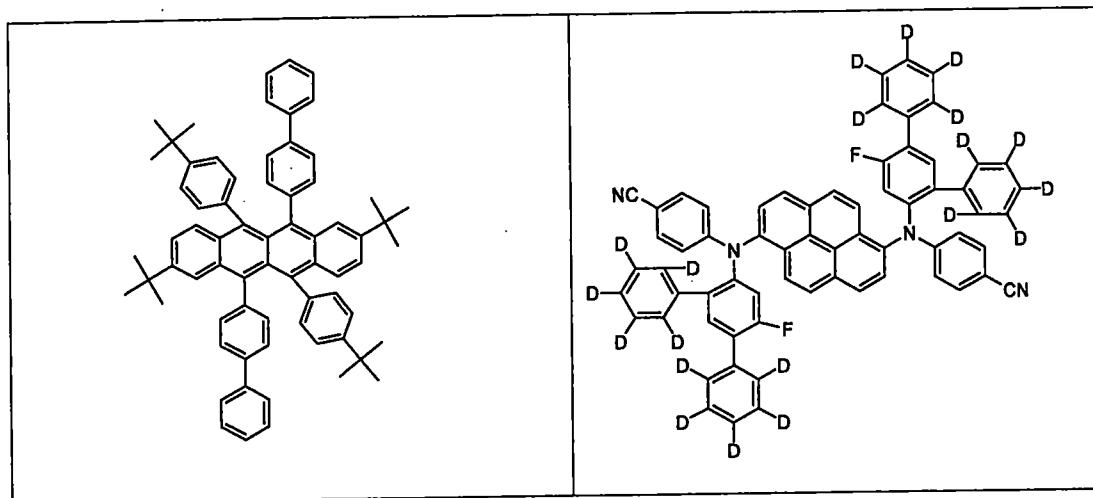
上述磷光發光化合物之實例係揭示於申請案 WO 2000/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO

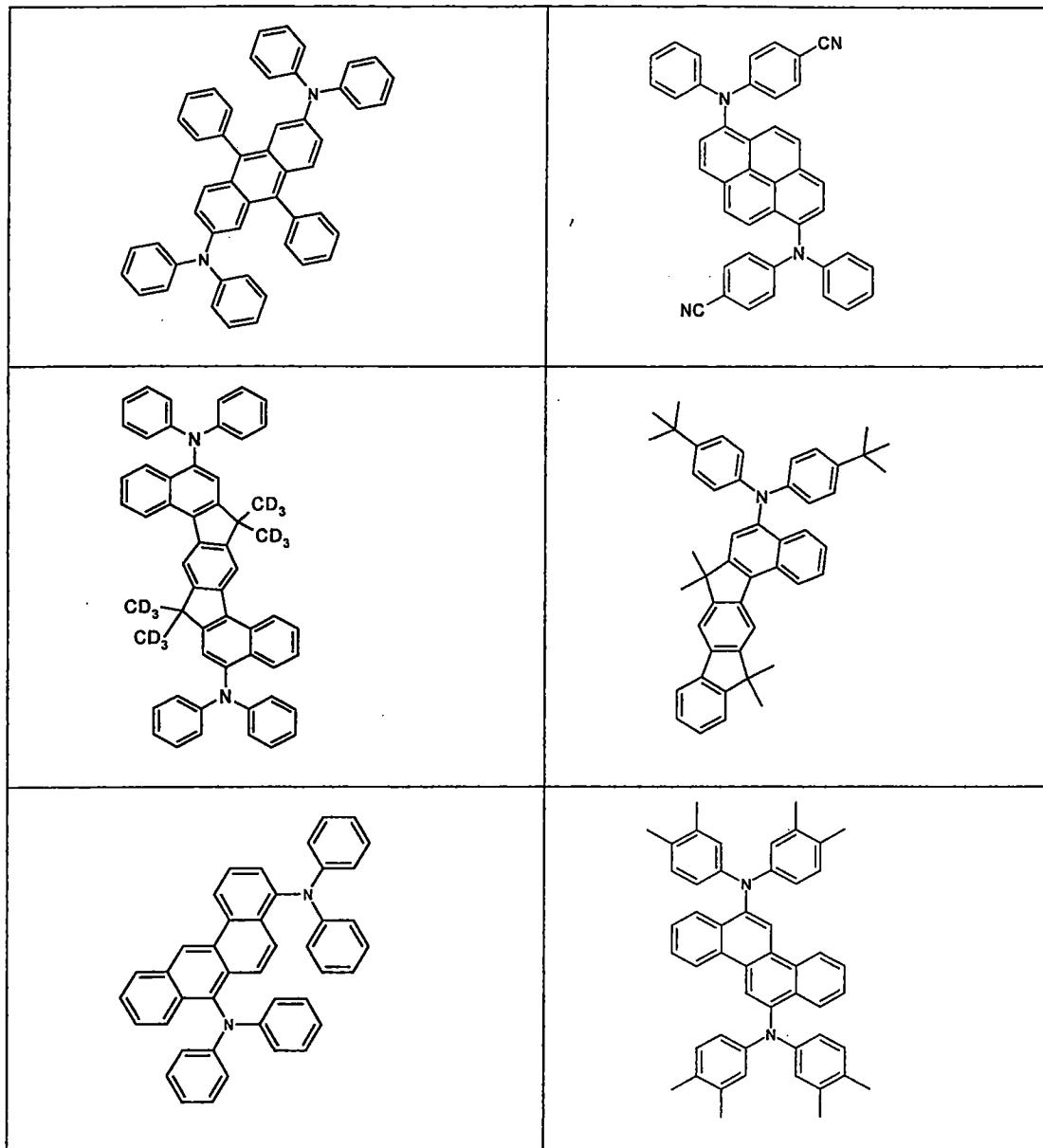
2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 2005/033244、WO 2005/019373及US 2005/0258742中。一般來說，如根據先前技術磷光OLED所用及如為有機電致發光裝置之技術領域中具有通常知識者已知的所有磷光錯合物係適合用於根據本發明之裝置中。在不需發明性步驟下，所屬技術領域中具有通常知識者也將能夠在OLED中使用進一步磷光錯合物組合上根據本發明之化合物。

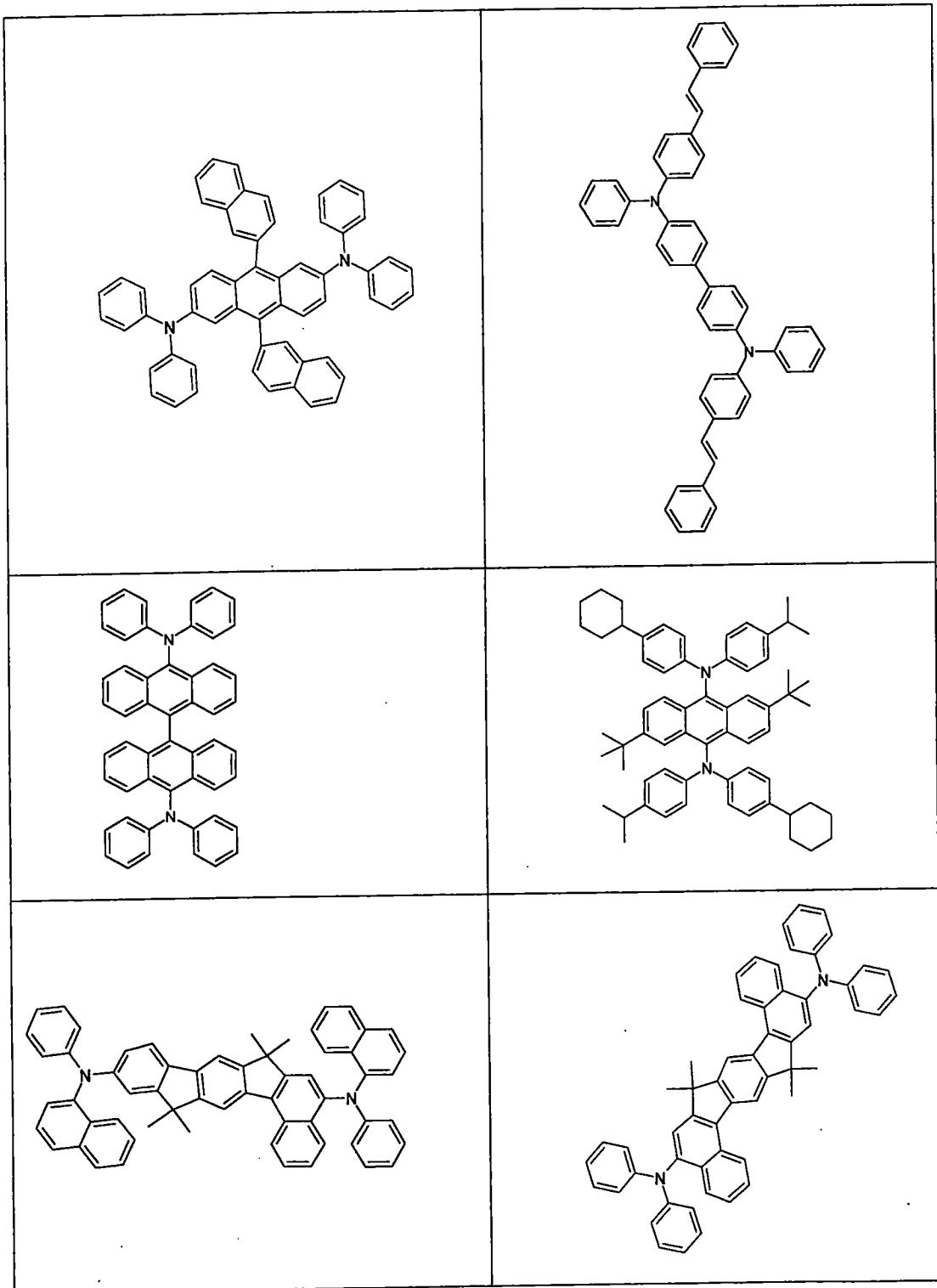
除根據本發明之化合物外，較佳螢光發光體還選自芳基胺類別。芳基胺就本發明的意義而言意指含有三個經取代或未經取代之芳族或雜芳族環系統直接鍵結於氮之化合物。這些芳族或雜芳族環系統之至少一者較佳為縮合環系統，特佳地具有至少14個芳族環原子。彼等之較佳實例為芳族蒽胺、芳族蒽二胺、芳族茈胺、芳族茈二胺、芳族茋胺或芳族茋二胺。芳族蒽胺意指其中一個二芳基胺基直接鍵結到蒽基之化合物，較佳地在9-位置上。芳族蒽胺意指其中兩個二芳基胺基直接鍵結到蒽基之化合物，較佳地在9,10-位置上。芳族茈胺、茈二胺、茋胺及茋二胺係與彼等類似地定義，其中二芳基胺基較佳地在1-位置或1,6-位置上鍵結至茈。更佳的發光體為茚并苶胺或茚并苶二胺，例如根據WO 2006/108497或WO 2006/122630；苯并茚并苶胺或苯并茚并苶二胺，例如根據WO 2008/006449；及二苯并茚并苶胺或二苯并茚并苶二胺，例如根據WO 2007/140847；及含有縮合芳基之茚并苶衍生物，其係揭示於WO 2010/012328。同樣地偏好的是揭示於WO

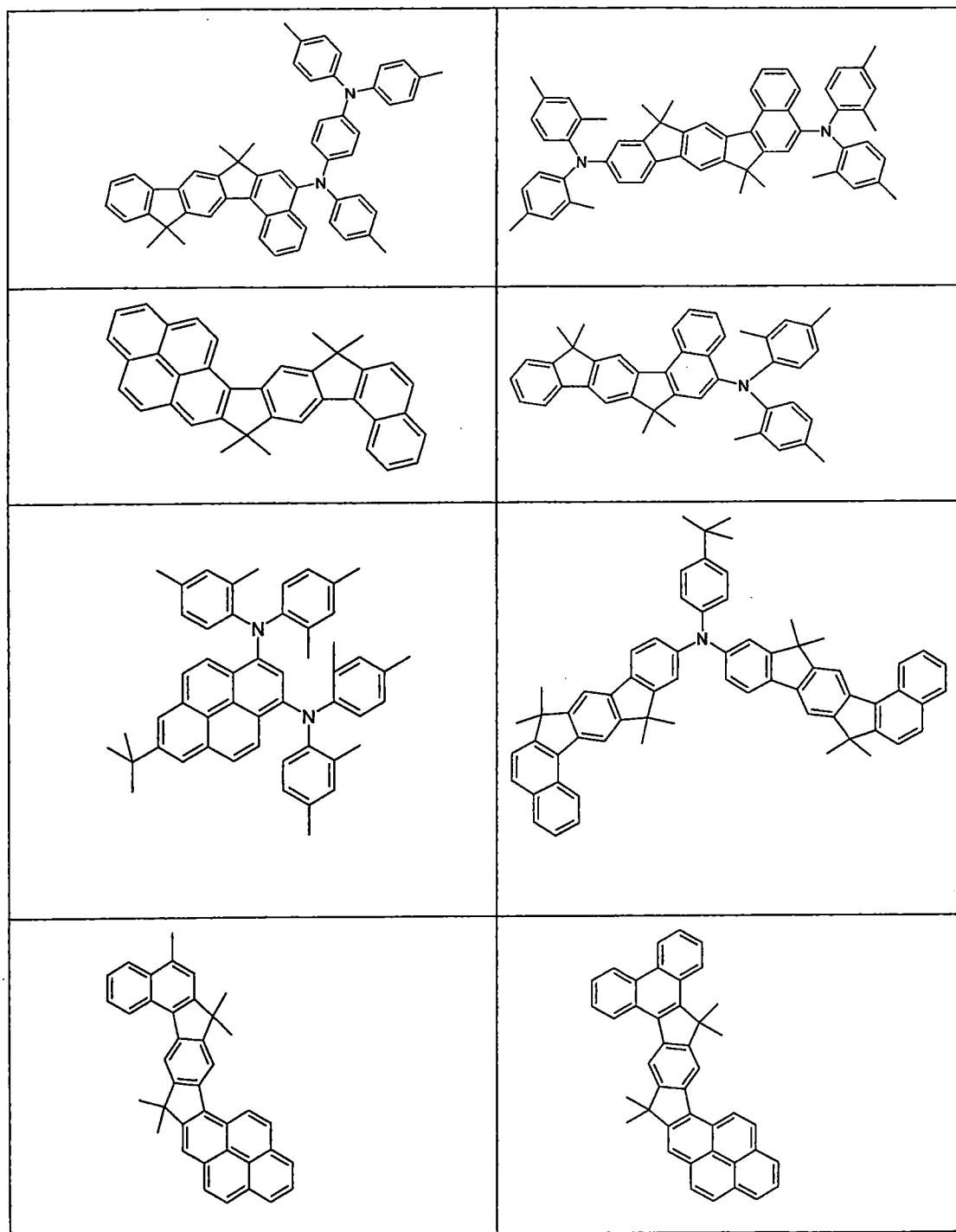
2012/048780及WO 2013/185871之茈芳胺。同樣地偏好的是揭示於WO 2014/037077之苯并茚并茀胺、揭示於WO 2014/106522之苯并茀-胺及揭示於WO 2014/111269之延伸之茚并茀。

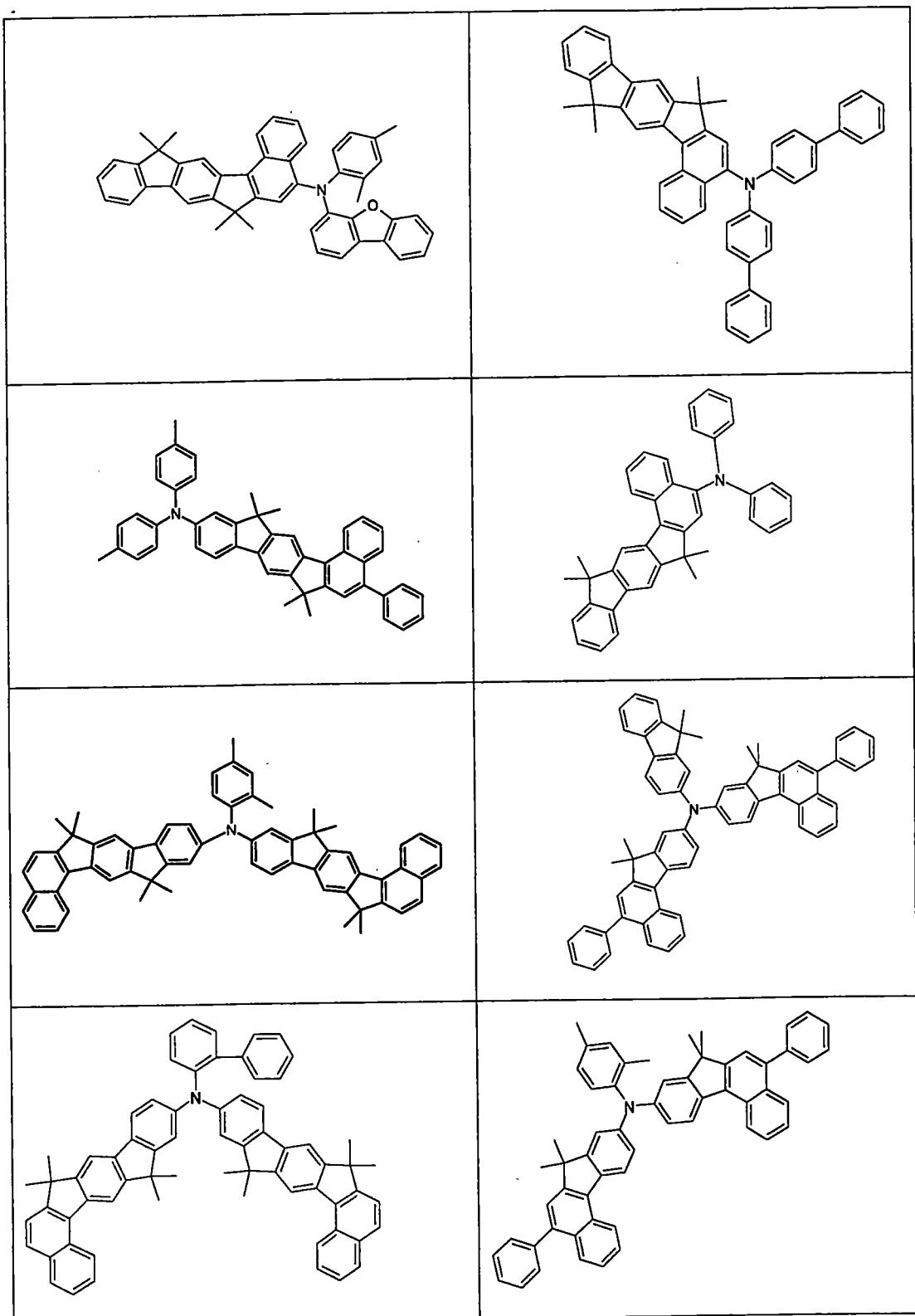
除根據本發明之化合物外，較佳螢光發光化合物還繪示於下表中：

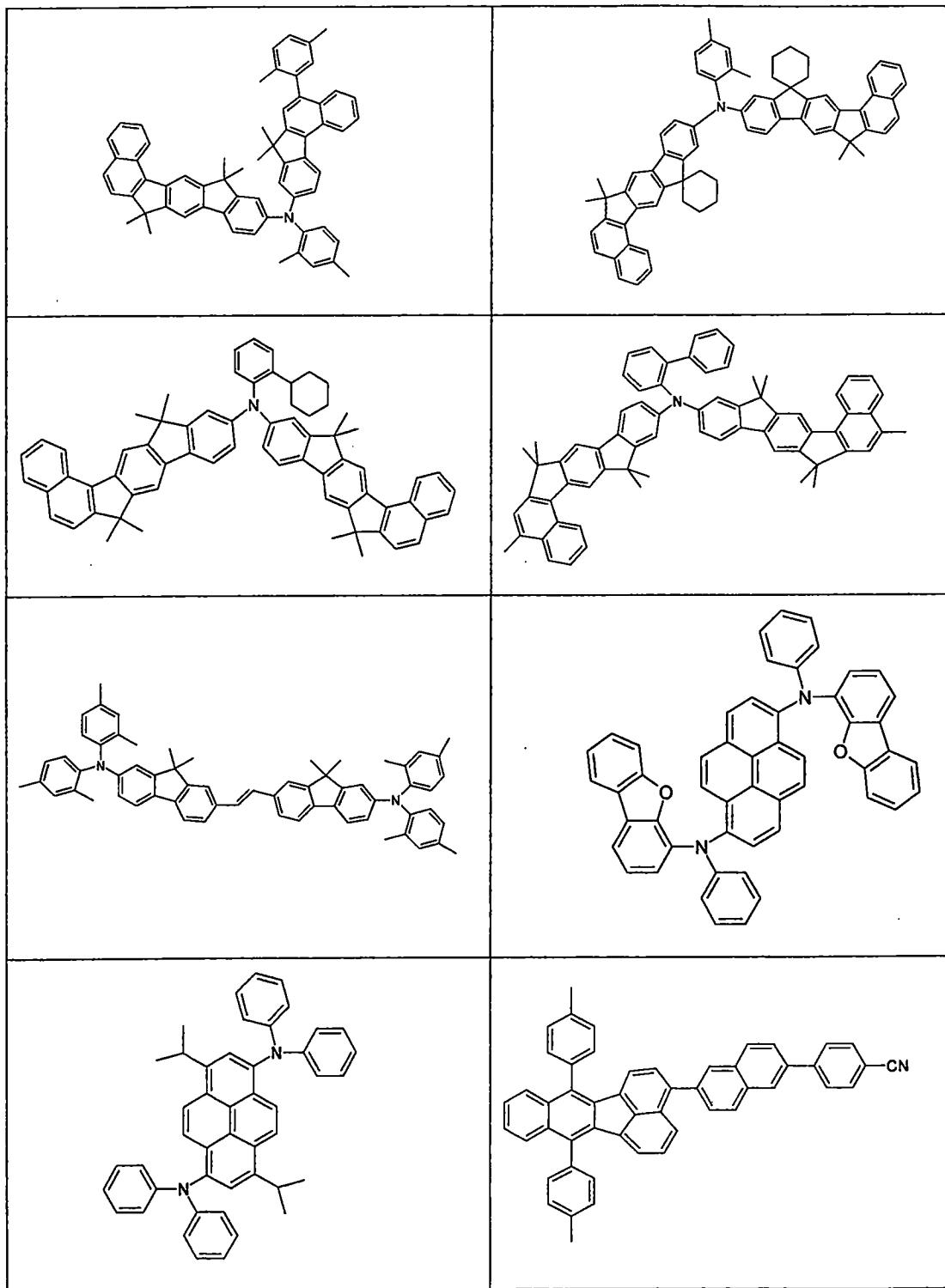


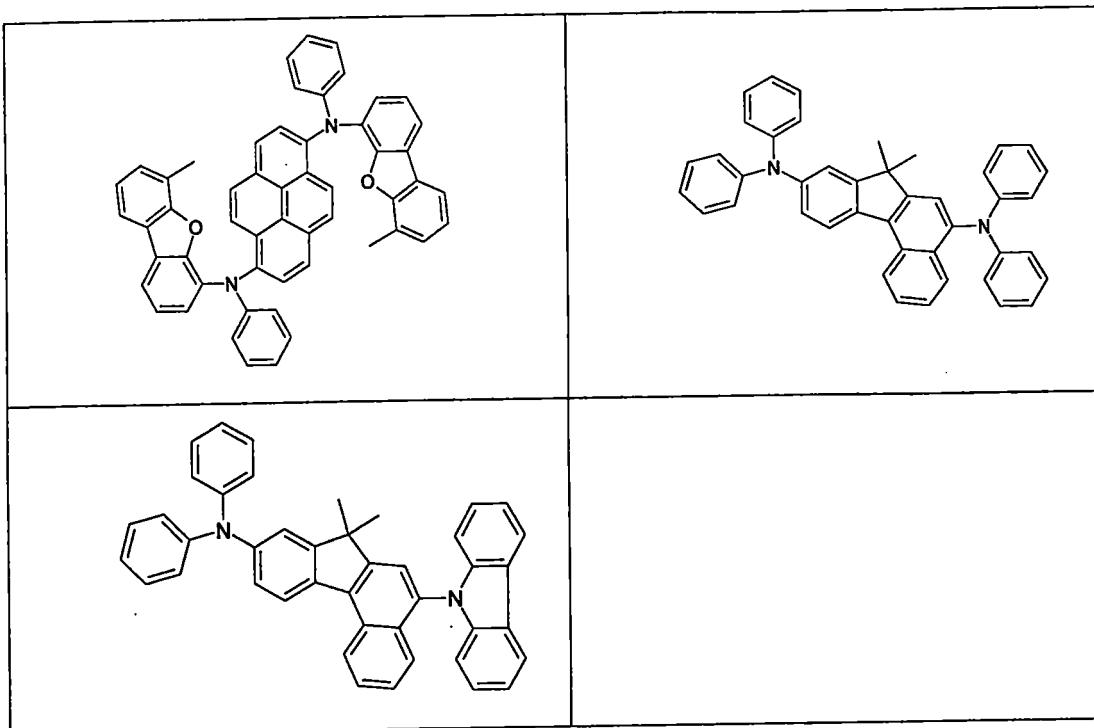












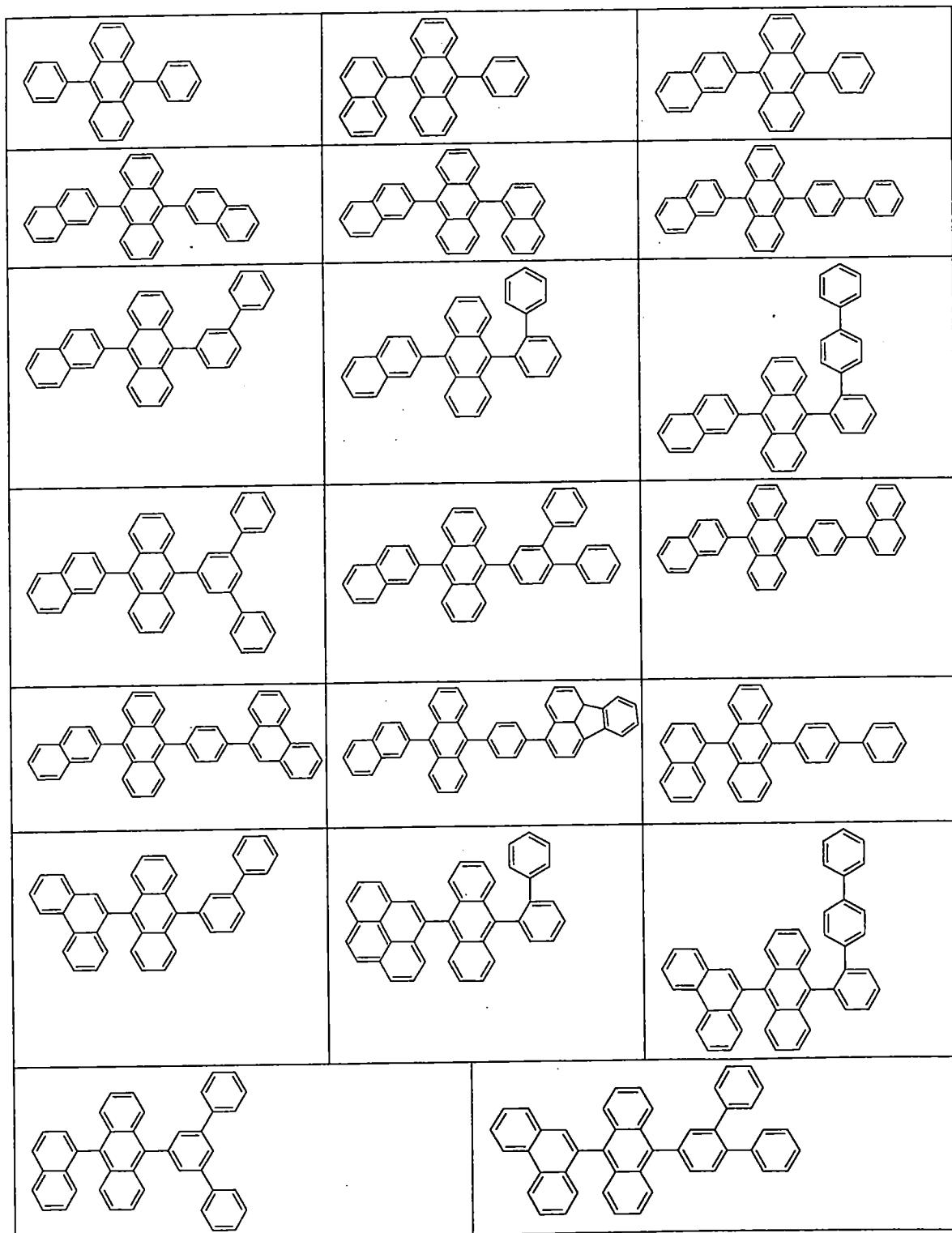
較佳磷光發光化合物之基質材料為芳族胺，特別是三芳基胺，例如根據 US 2005/0069729；咔唑衍生物(例如 CBP、N,N-雙咔唑基聯苯)或根據 WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527或WO 2008/086851之化合物；橋接咔唑衍生物，例如根據 WO 2011/088877及WO 2011/128017；茚并咔唑衍生物，例如根據 WO 2010/136109及WO 2011/000455；氮雜咔唑衍生物，例如根據 EP 1617710、EP 1617711、EP1731584、JP 2005/347160；吲哚并咔唑衍生物，例如根據 WO 2007/063754或WO 2008/056746；酮，例如根據 WO 2004/093207或WO 2010/006680；氧化隸、亞隸及隸，例如根據 WO 2005/003253；寡聚伸苯基；雙極性基質材料，例如根據 WO 2007/137725；矽烷，例如根據 WO 2005/111172；氮雜硼雜唑(azaborole)或硼酸酯，例如根據 WO 2006/117052；三

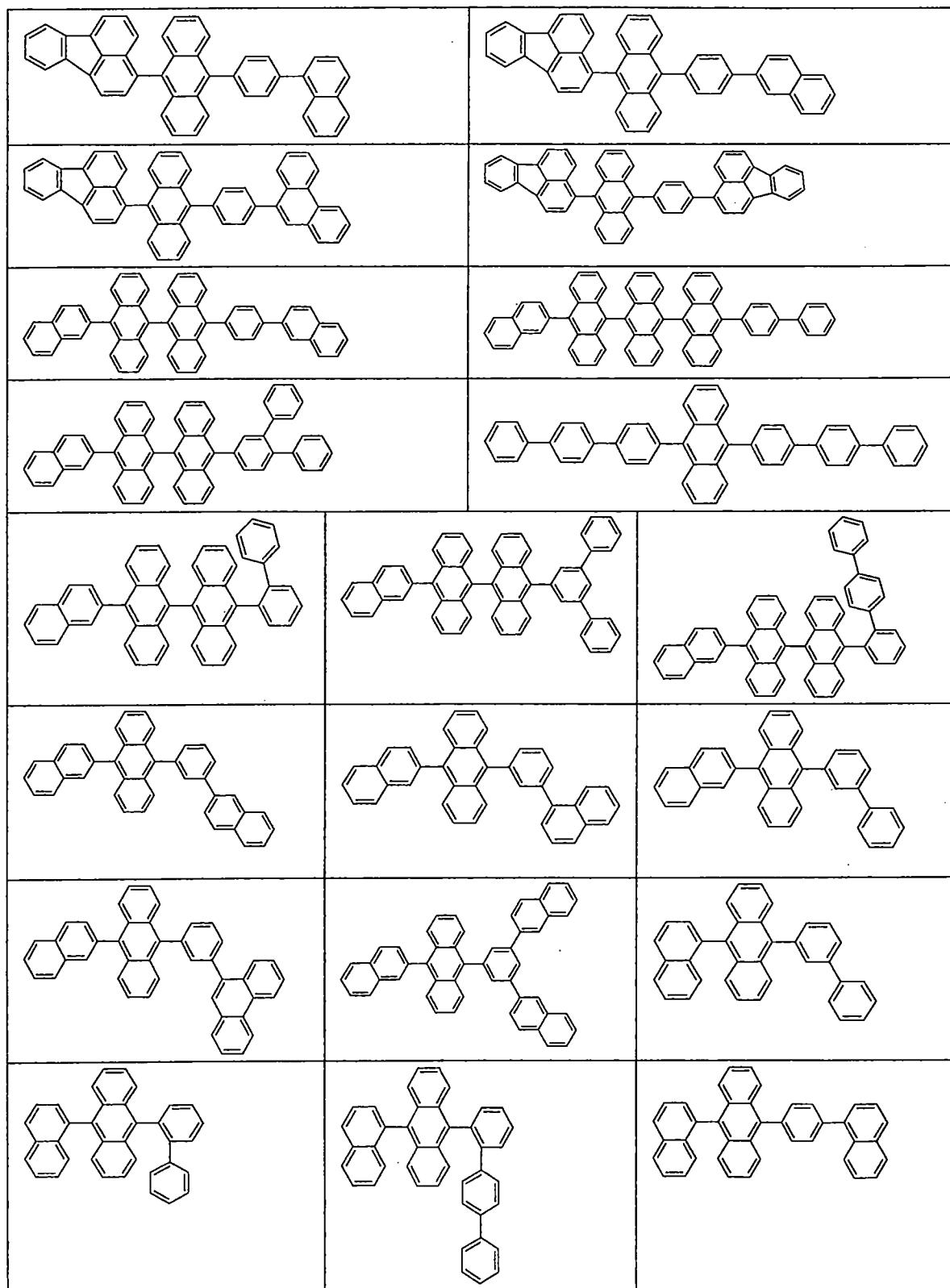
嗪衍生物，例如根據 WO 2010/015306、WO 2007/063754 或 WO 2008/056746；鋅錯合物，例如根據 EP 652273 或 WO 2009/062578；鋁錯合物，例如 BA1q；二氮雜矽雜唑及四氮雜矽雜唑衍生物，例如根據 WO 2010/054729；及二氮雜磷雜唑衍生物，例如根據 WO 2010/054730。

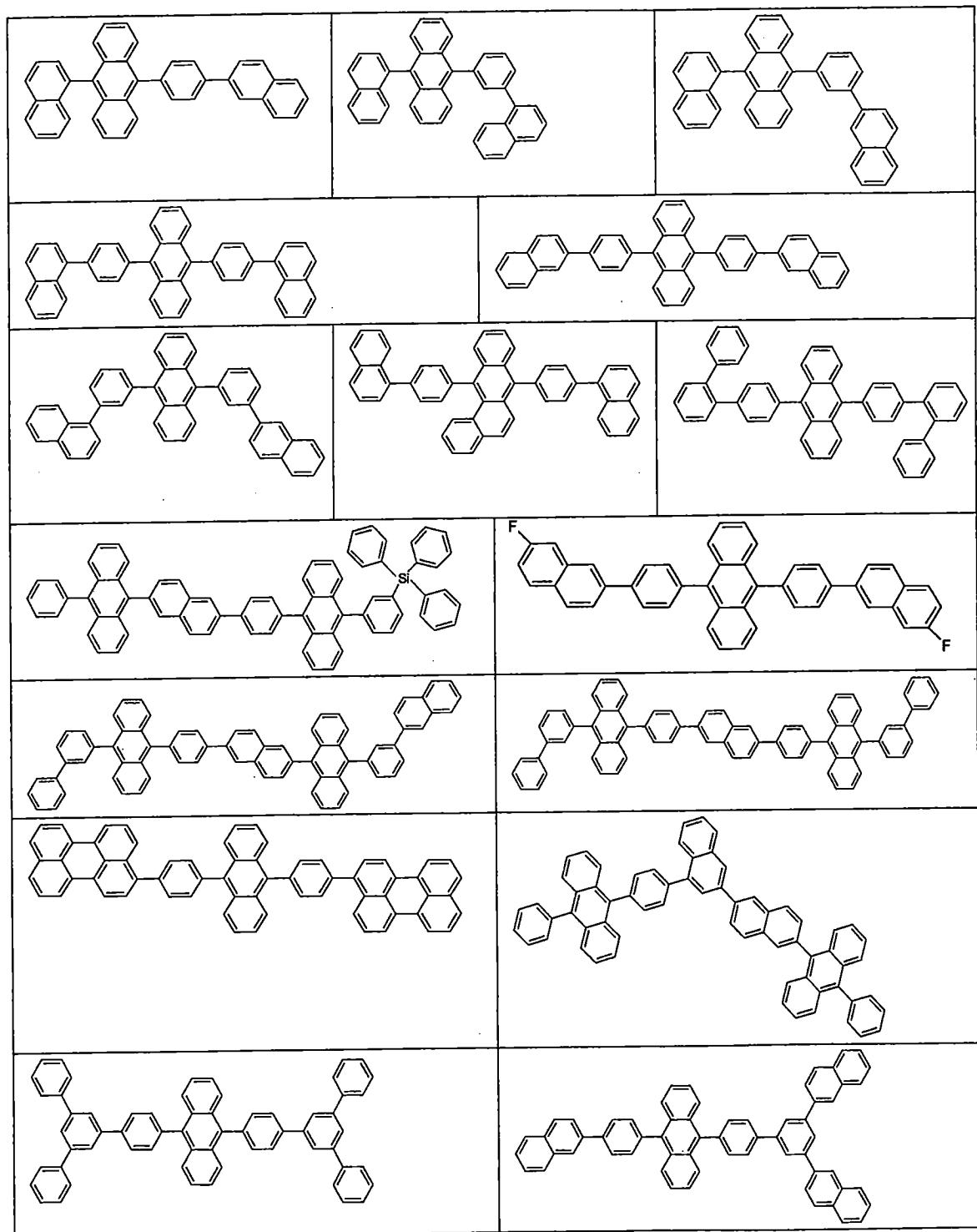
除根據本發明之化合物外，與螢光發光化合物組合使用之較佳基質材料還選自下列類別：寡聚伸芳基(例如根據 EP 676461 之 2,2',7,7'-肆苯基螺二茀或二萘基蒽)，特別是含有稠合芳族基團之寡聚伸芳基，寡聚伸芳基伸乙烯基(oligoarylenevinylene)(例如根據 EP 676461 之 DPVBi 或螺-DPVBi)；多牙(polypodal)金屬錯合物(例如根據 WO 2004/081017)；電洞傳導化合物(例如根據 WO 2004/058911)；電子傳導化合物，特別是酮、氧化隣、亞碸、等等(例如根據 WO 2005/084081 及 WO 2005/084082)；阻轉異構物(例如根據 WO 2006/048268)；硼酸衍生物(例如根據 WO 2006/117052)或苯并蒽(例如根據 WO 2008/145239)。特佳基質材料係選自下列類別：寡聚伸芳基，包含萘、蒽、苯并蒽及/或芘、或這些化合物之阻轉異構物；寡聚伸芳基伸乙烯基；酮；氧化隣及亞碸。尤佳基質材料係選自下列類別：寡聚伸芳基，包含蒽、苯并蒽、苯并菲及/或芘、或這些化合物之阻轉異構物。寡聚伸芳基就本發明的意義而言意圖意指其中至少三個芳基或伸芳基基團彼此鍵結之化合物。

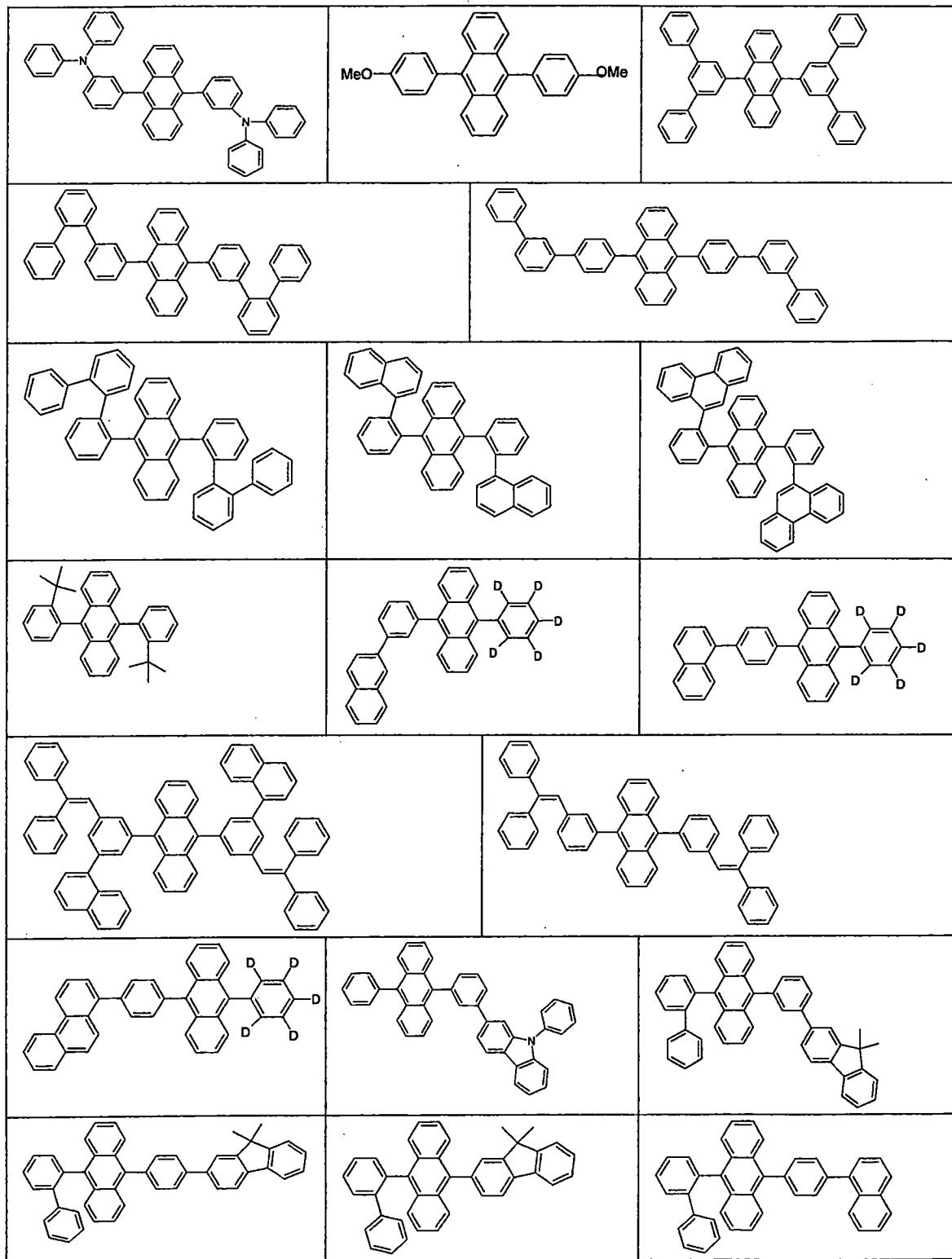
除根據本發明之化合物外，與螢光發光化合物組合使

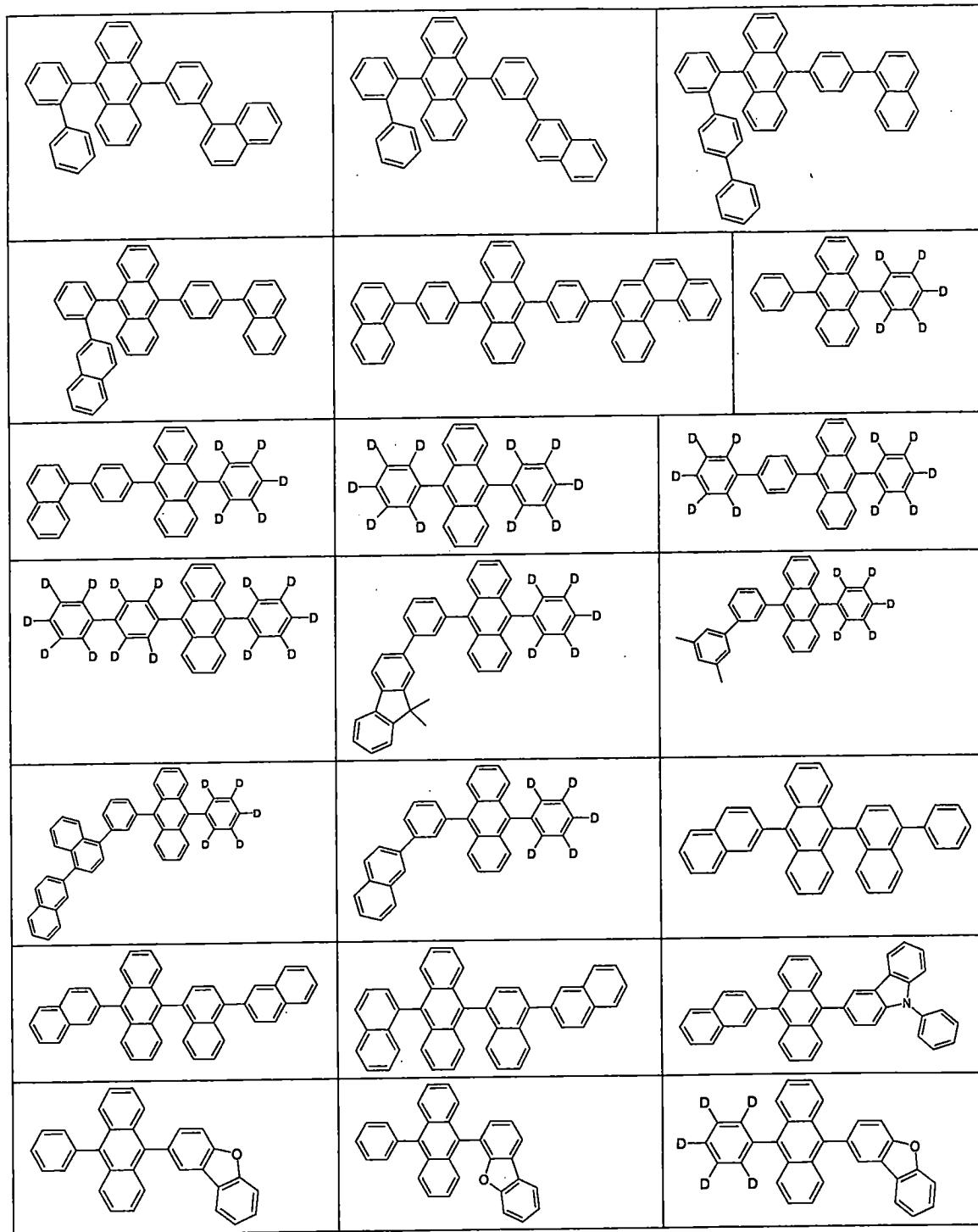
用之較佳基質材料之實例係於下表表示：

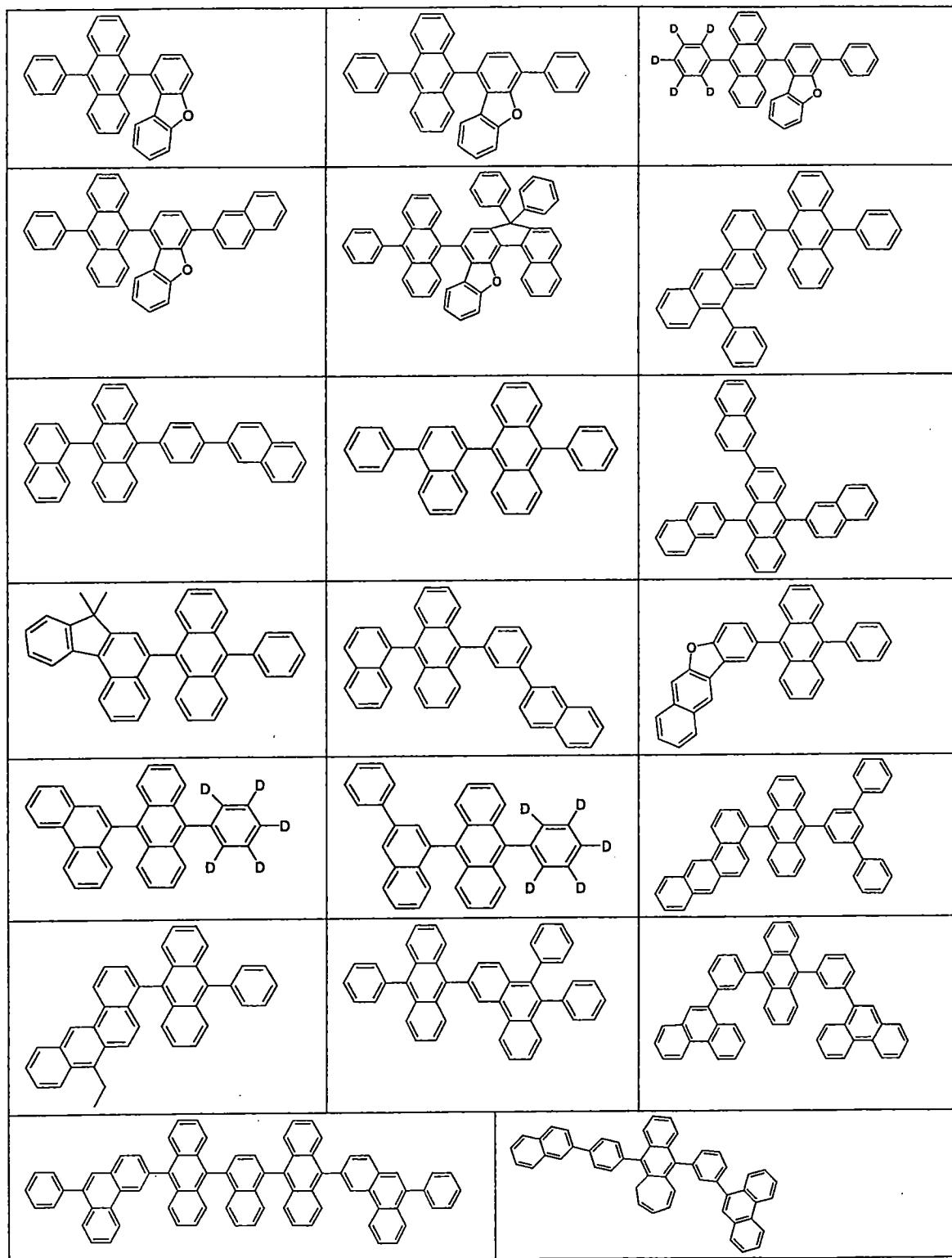


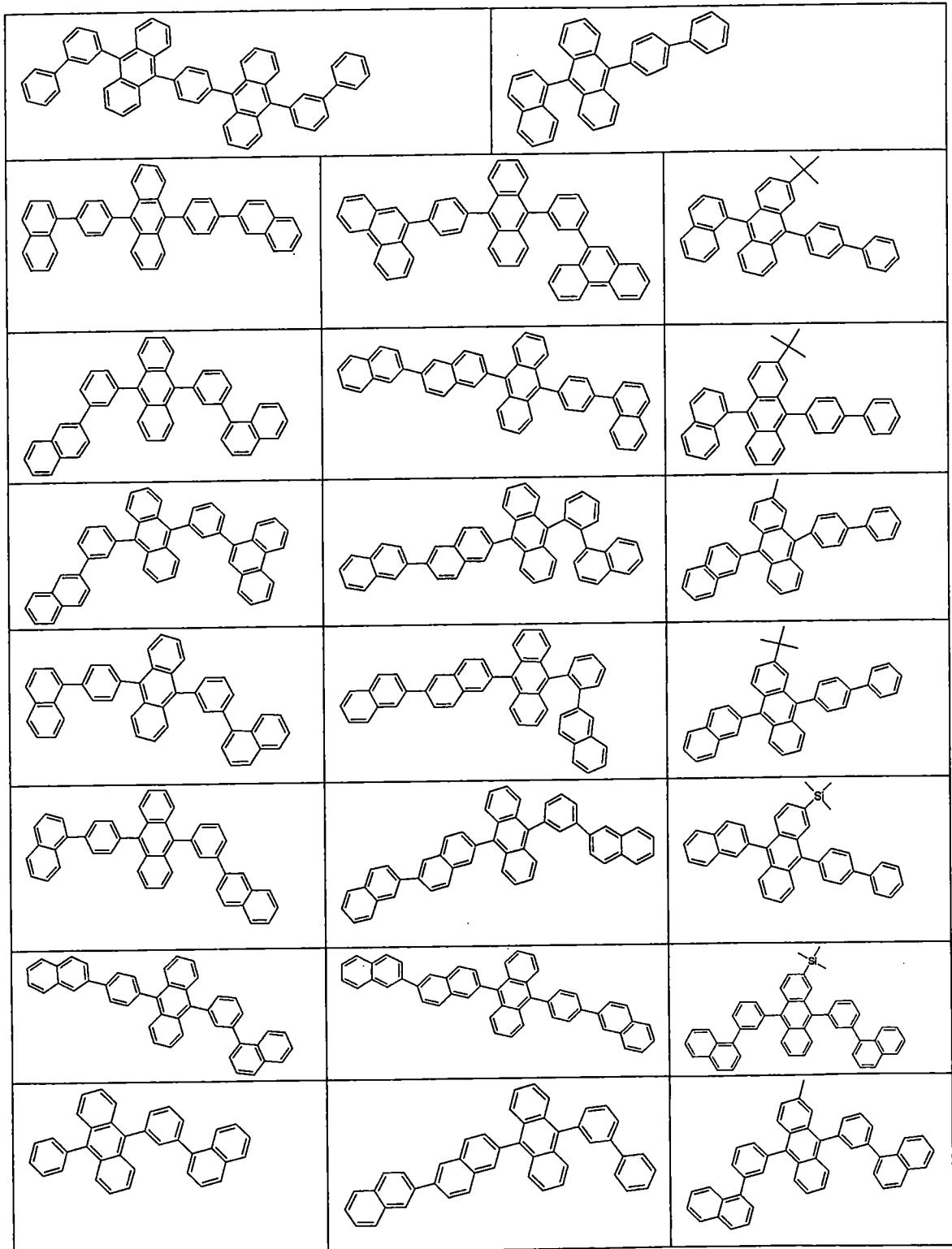


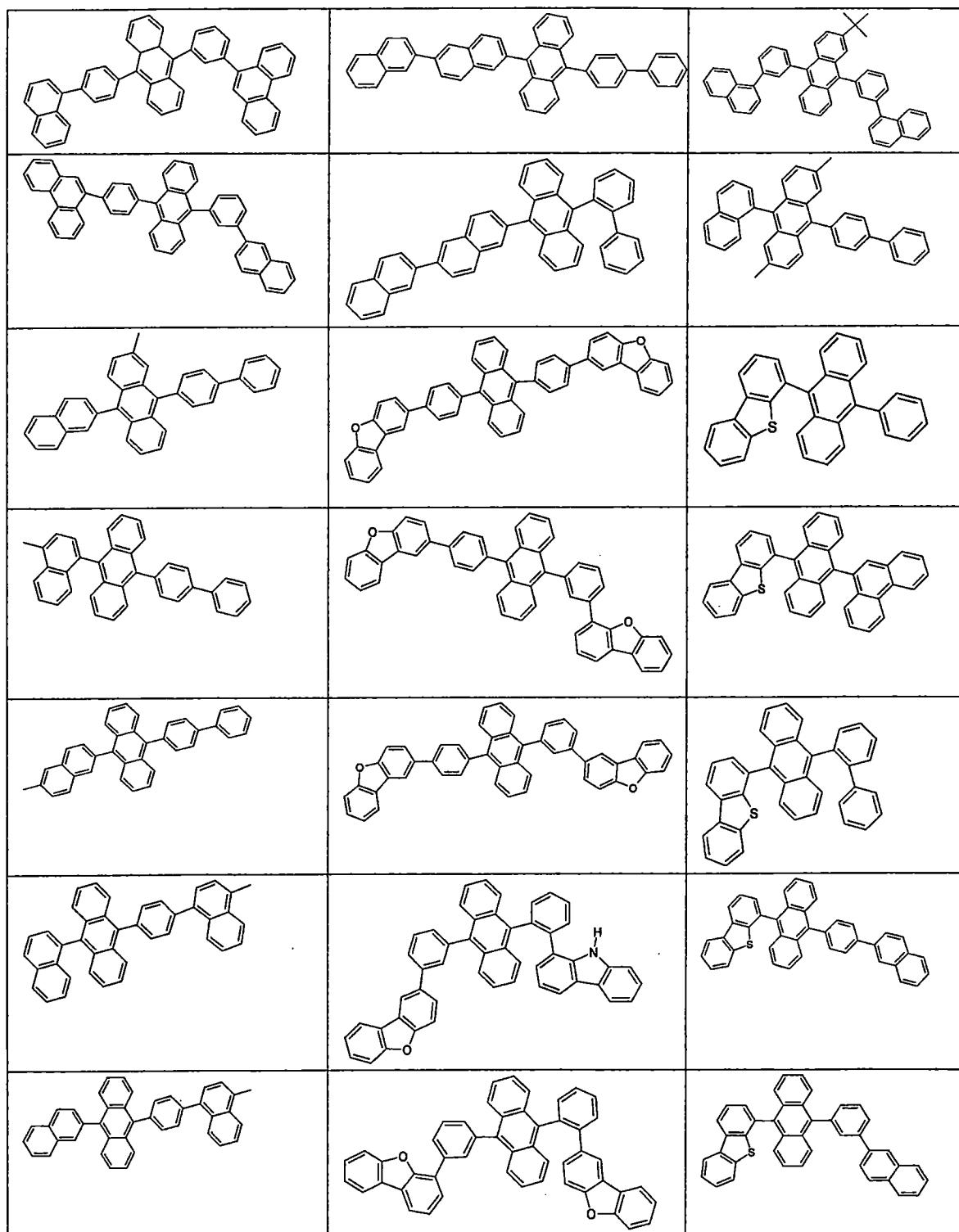


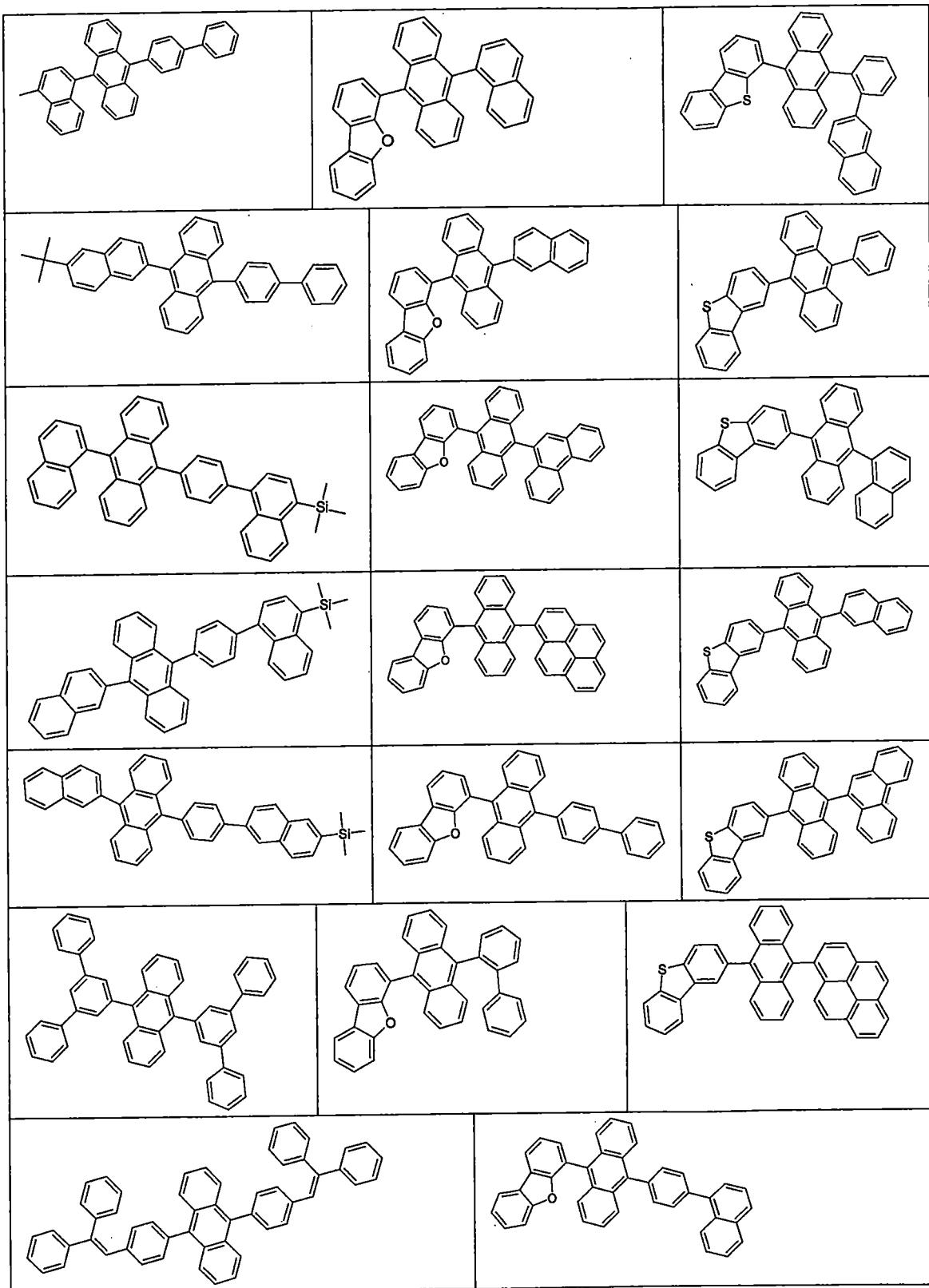


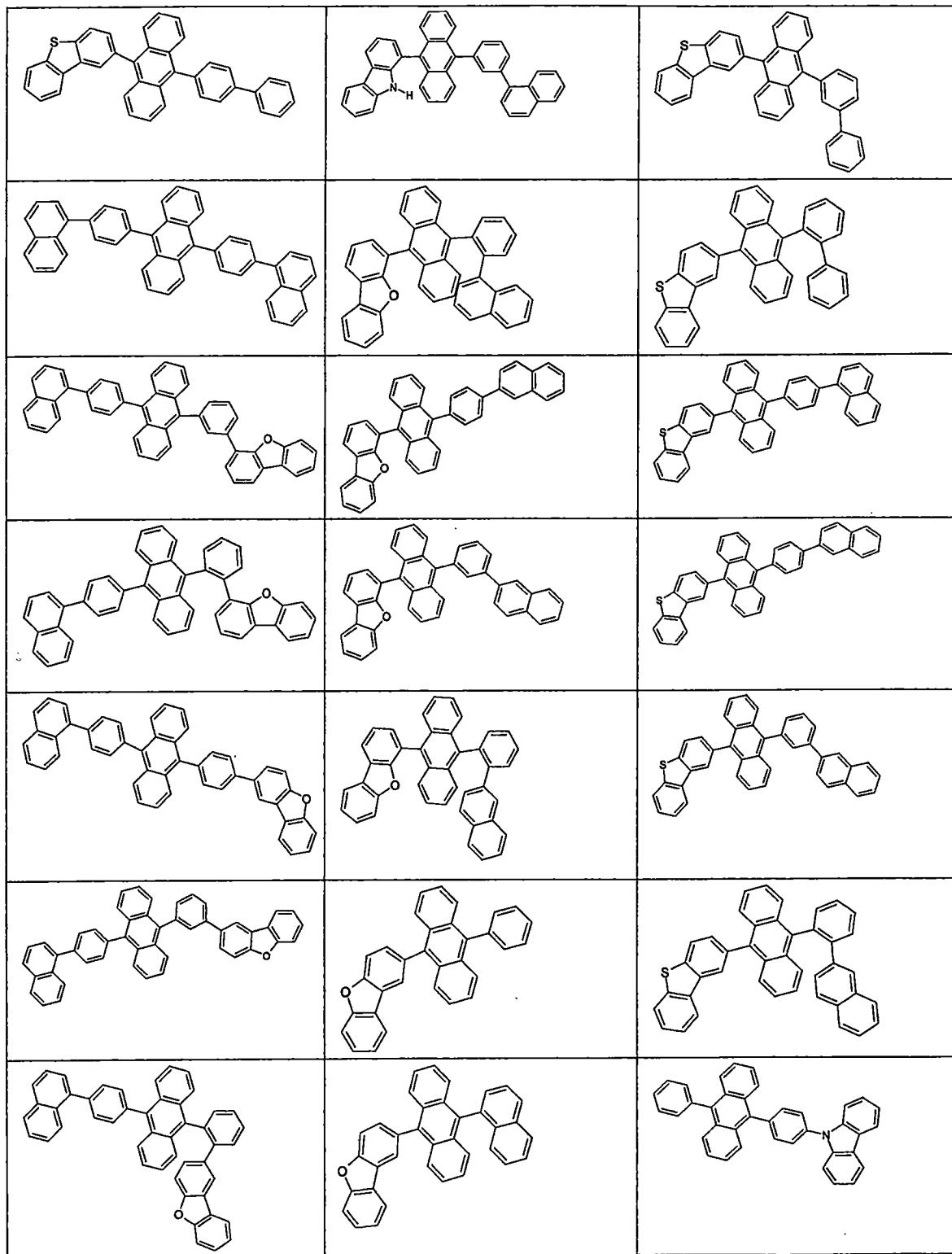


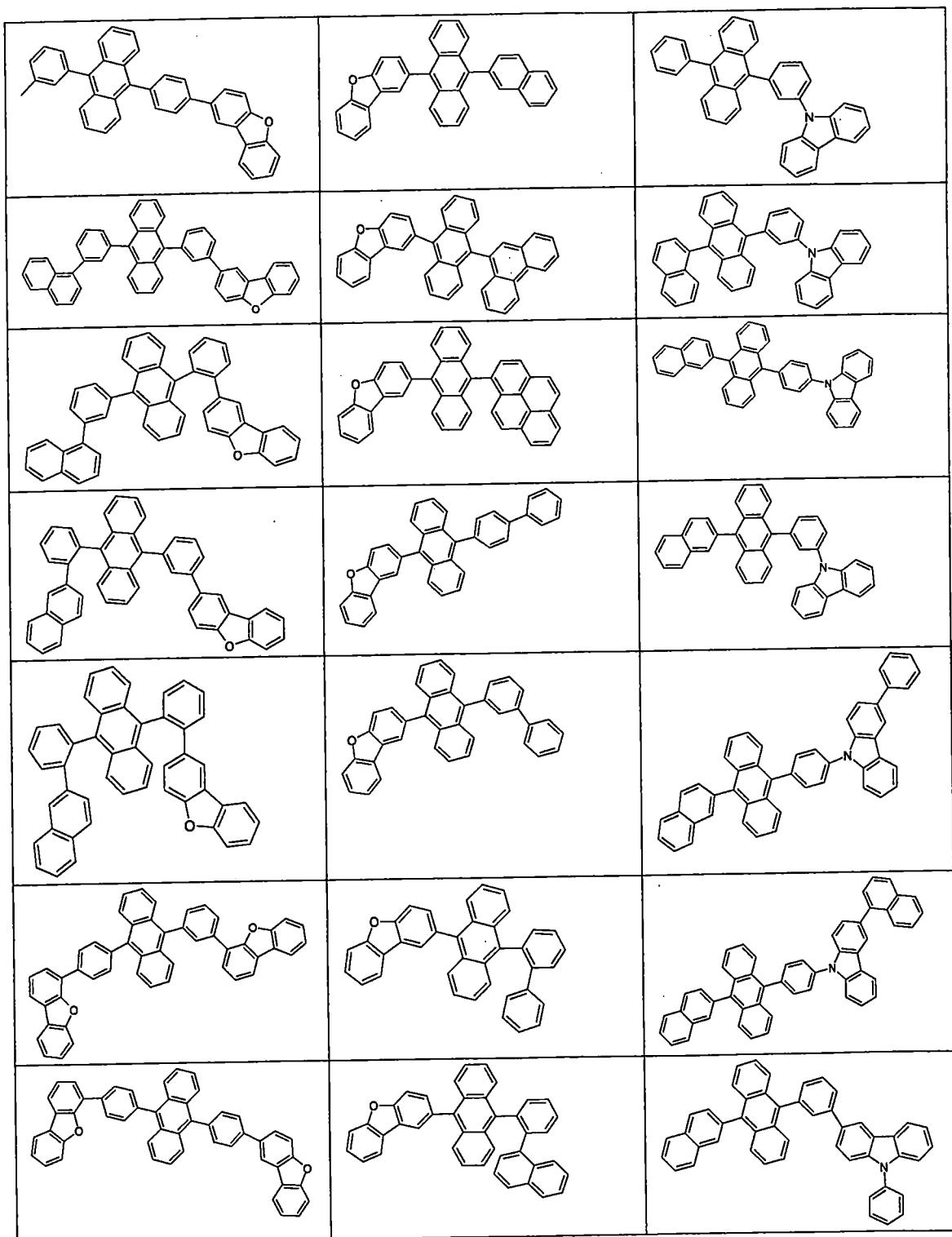


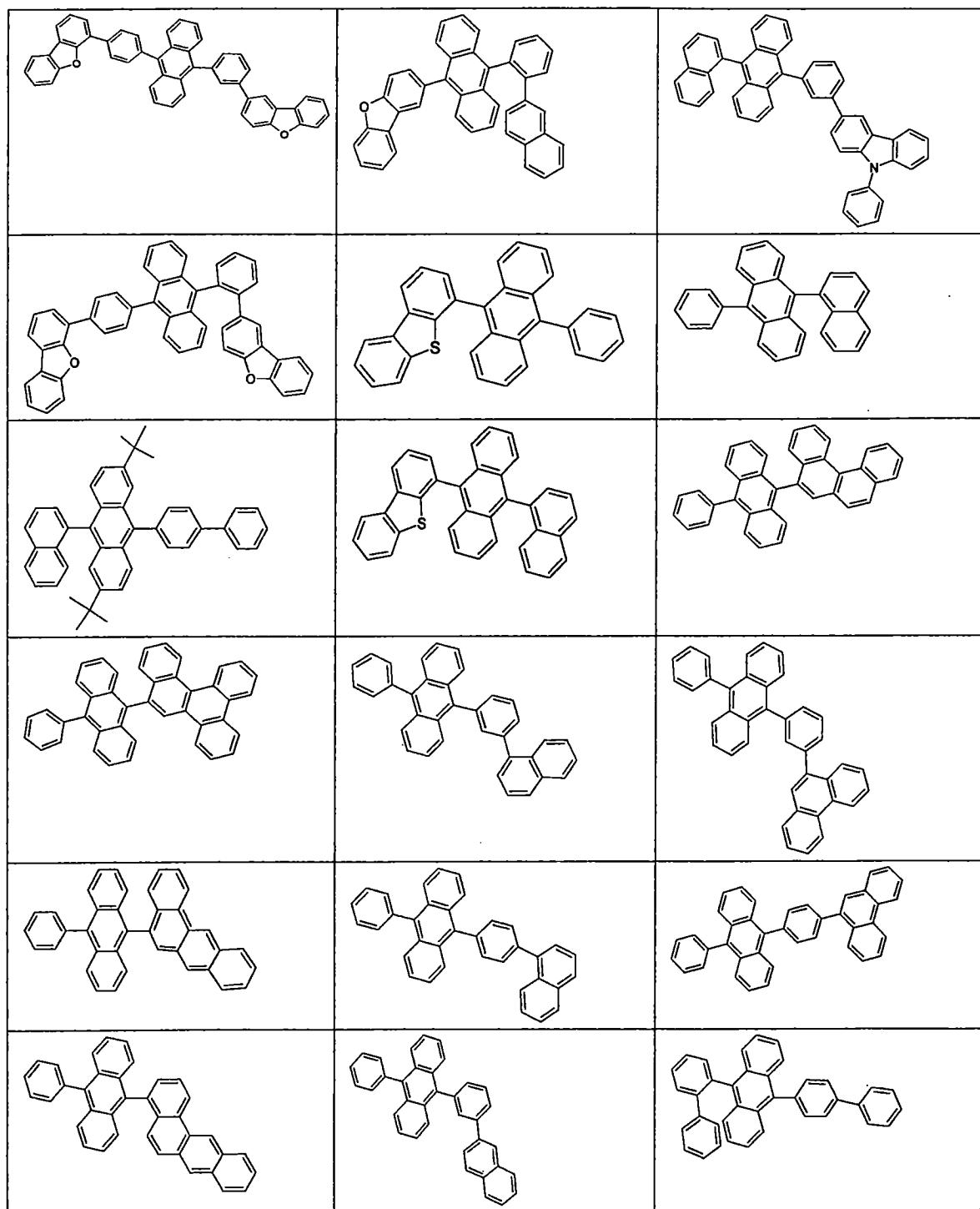


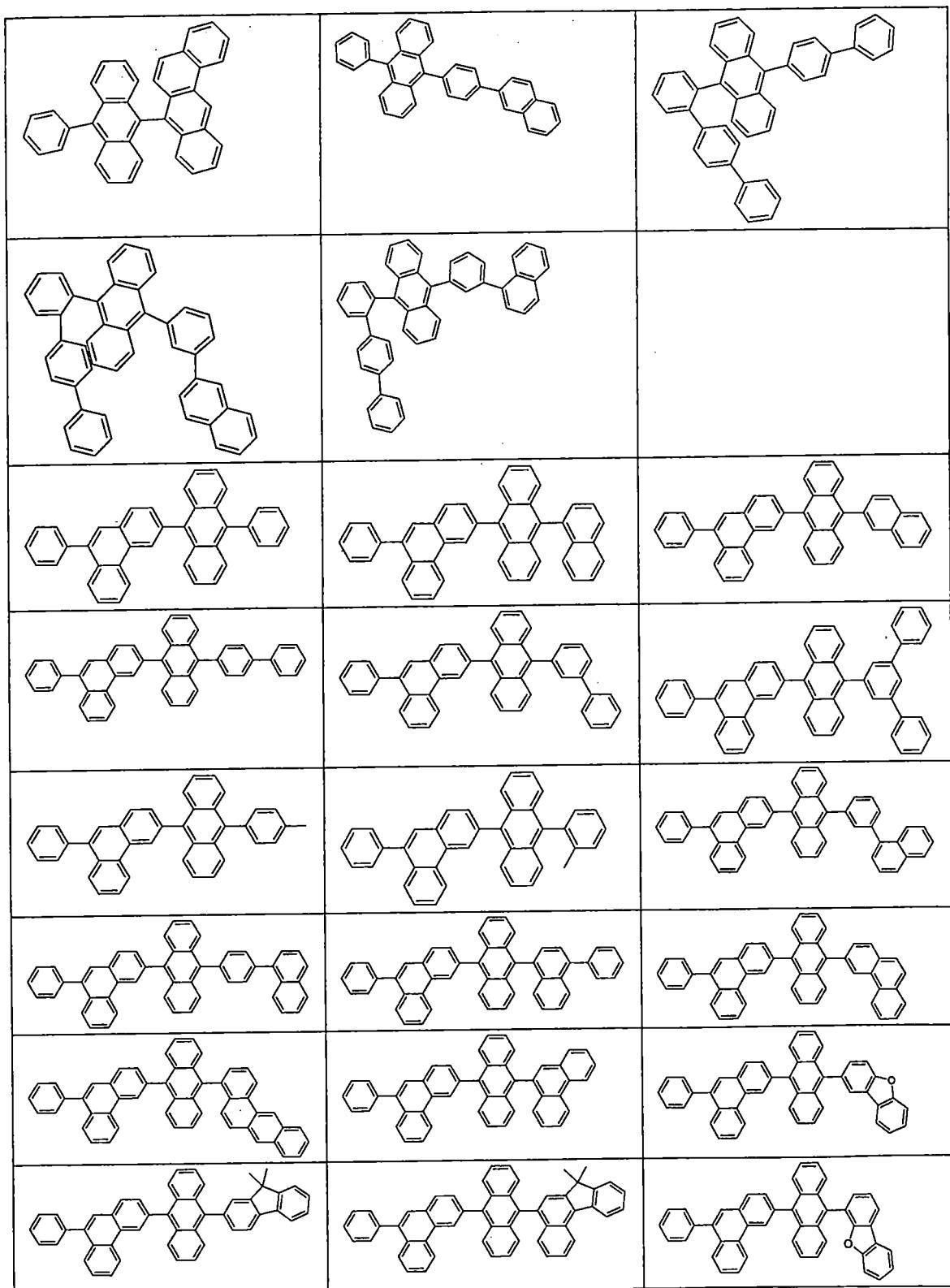


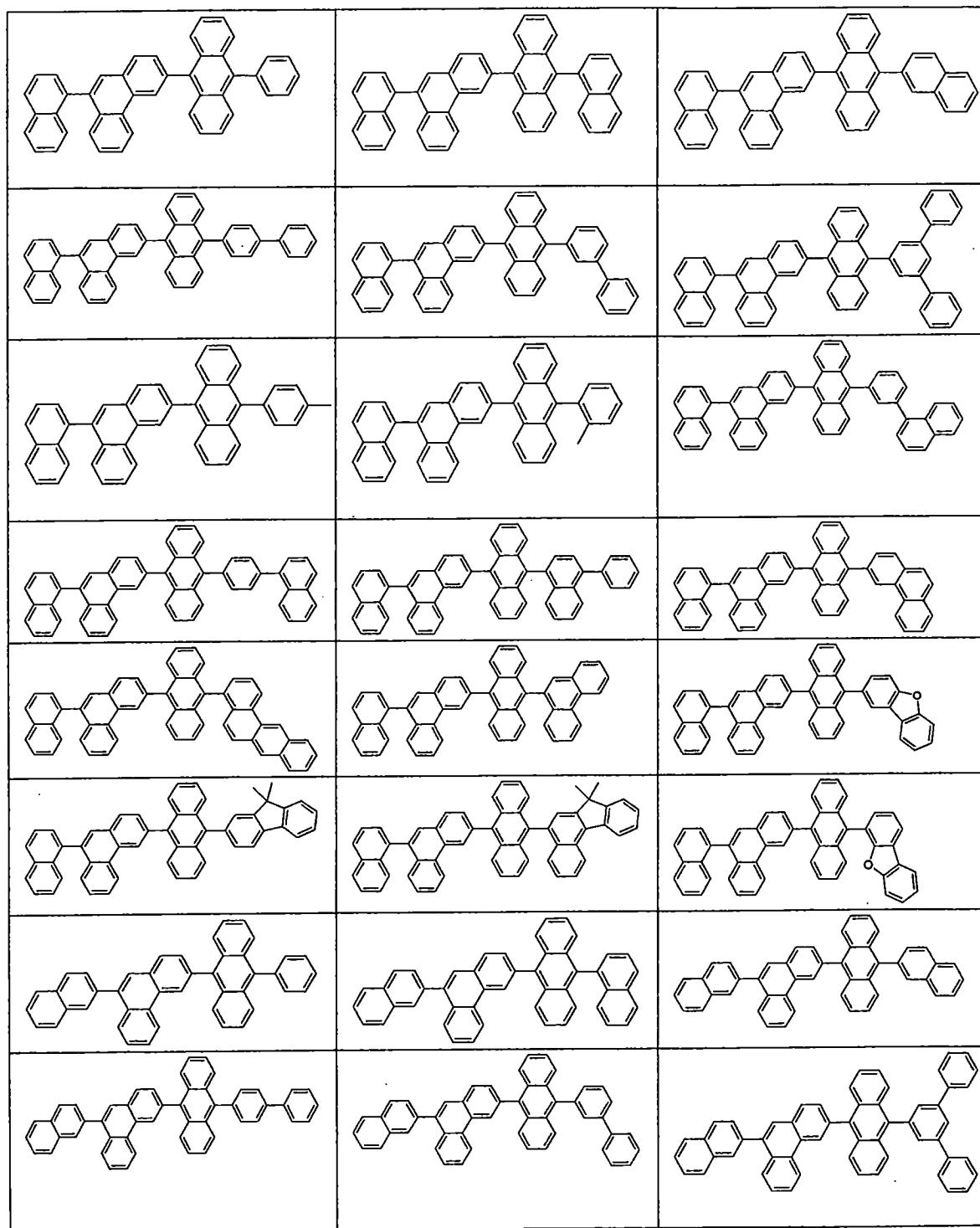


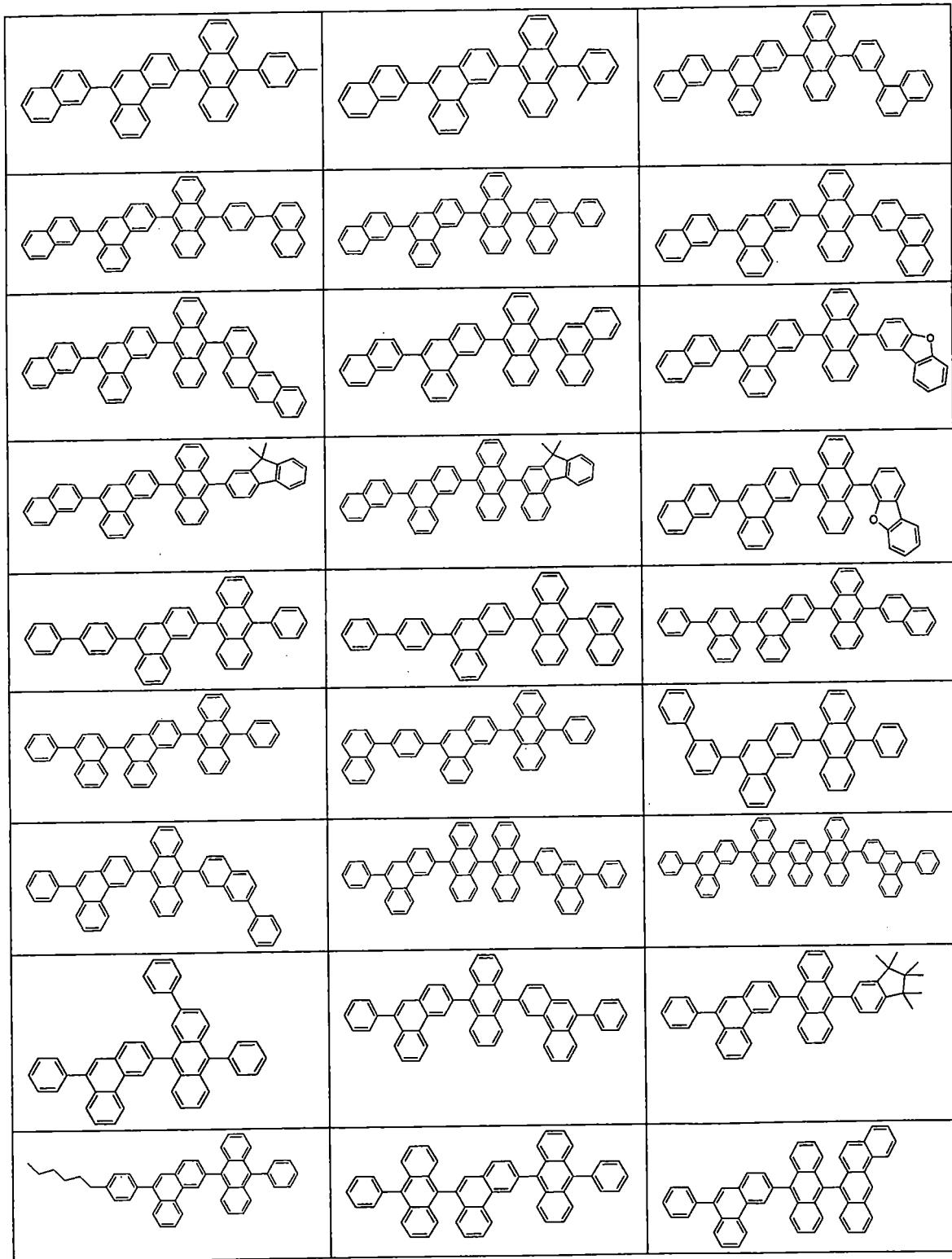


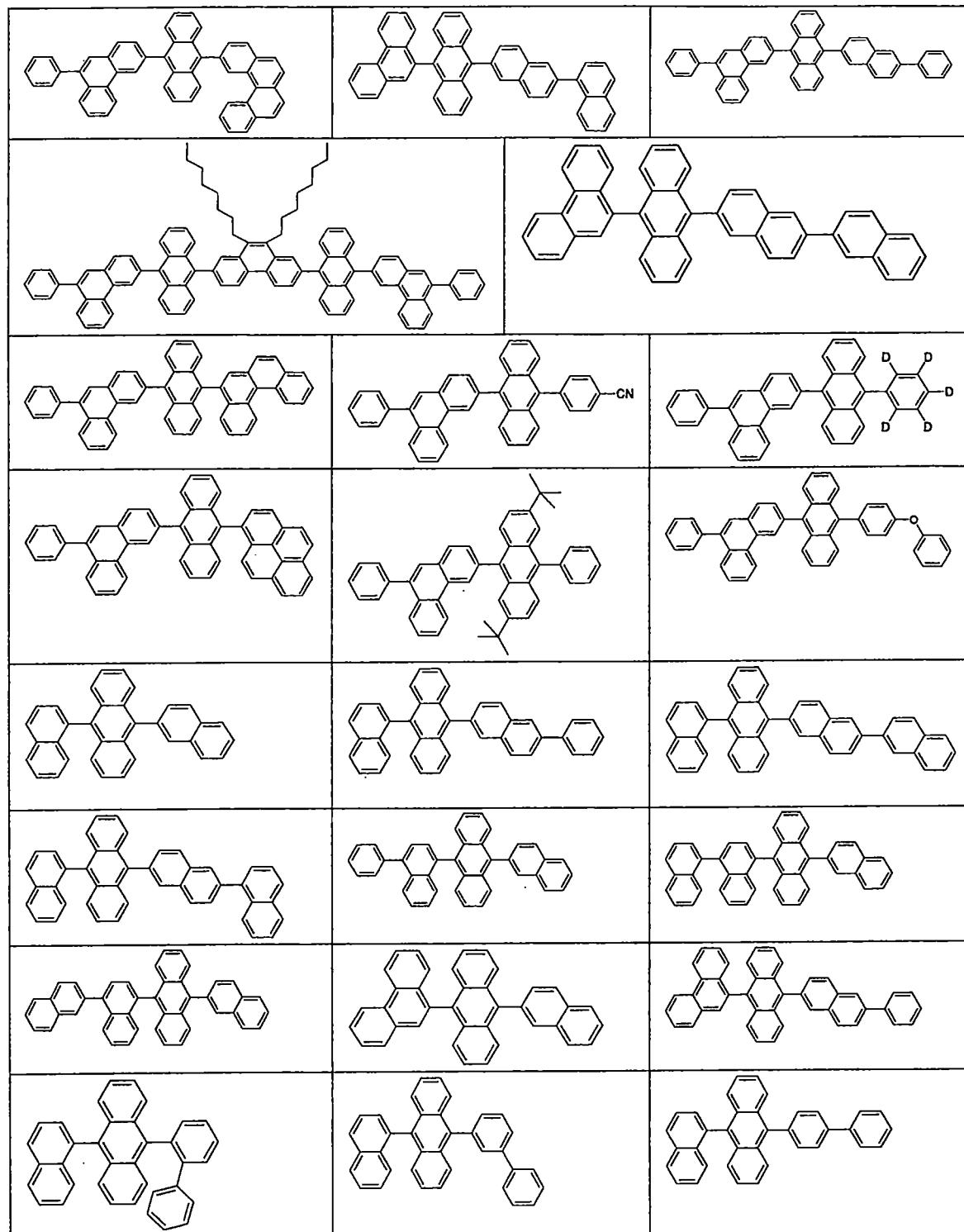


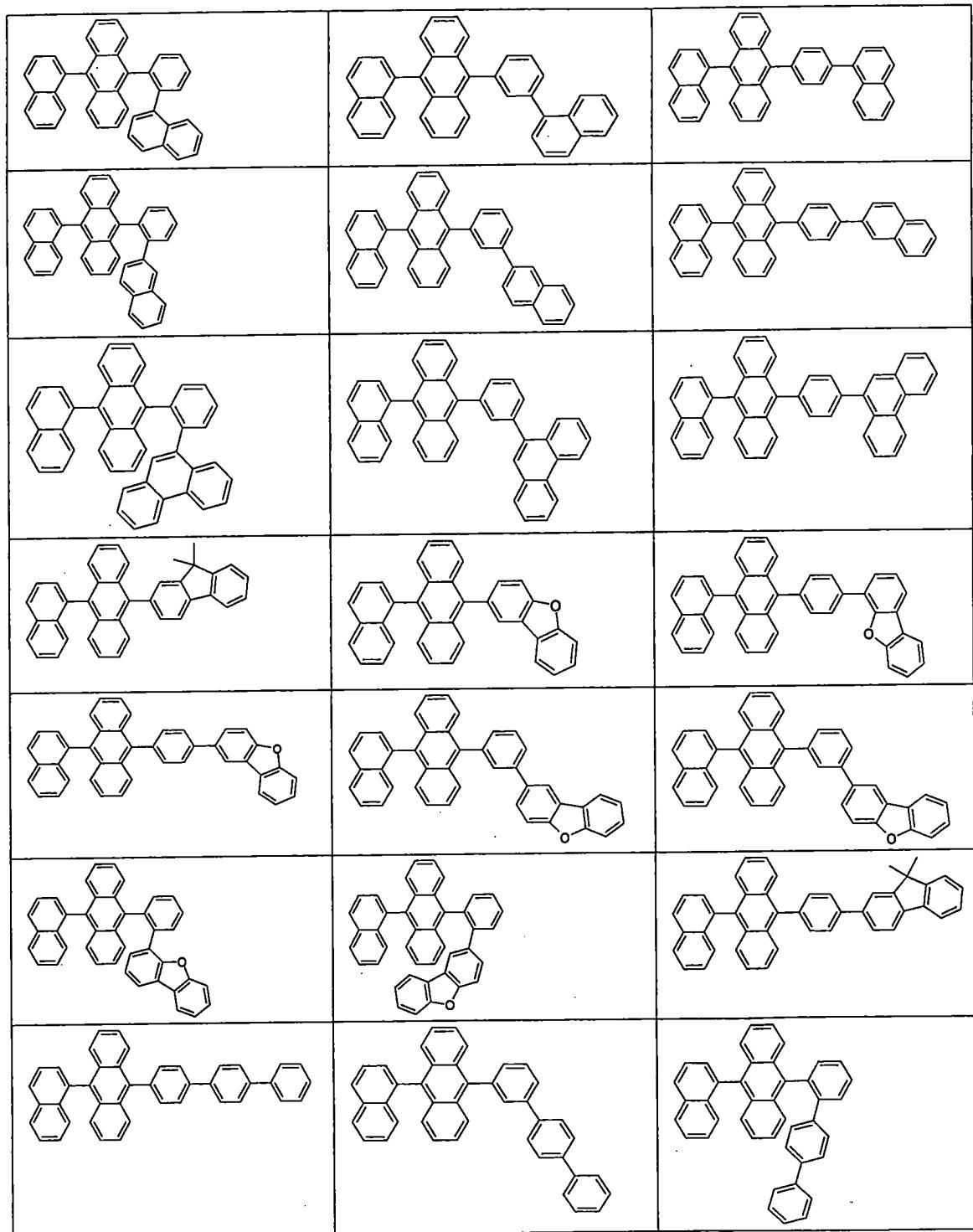


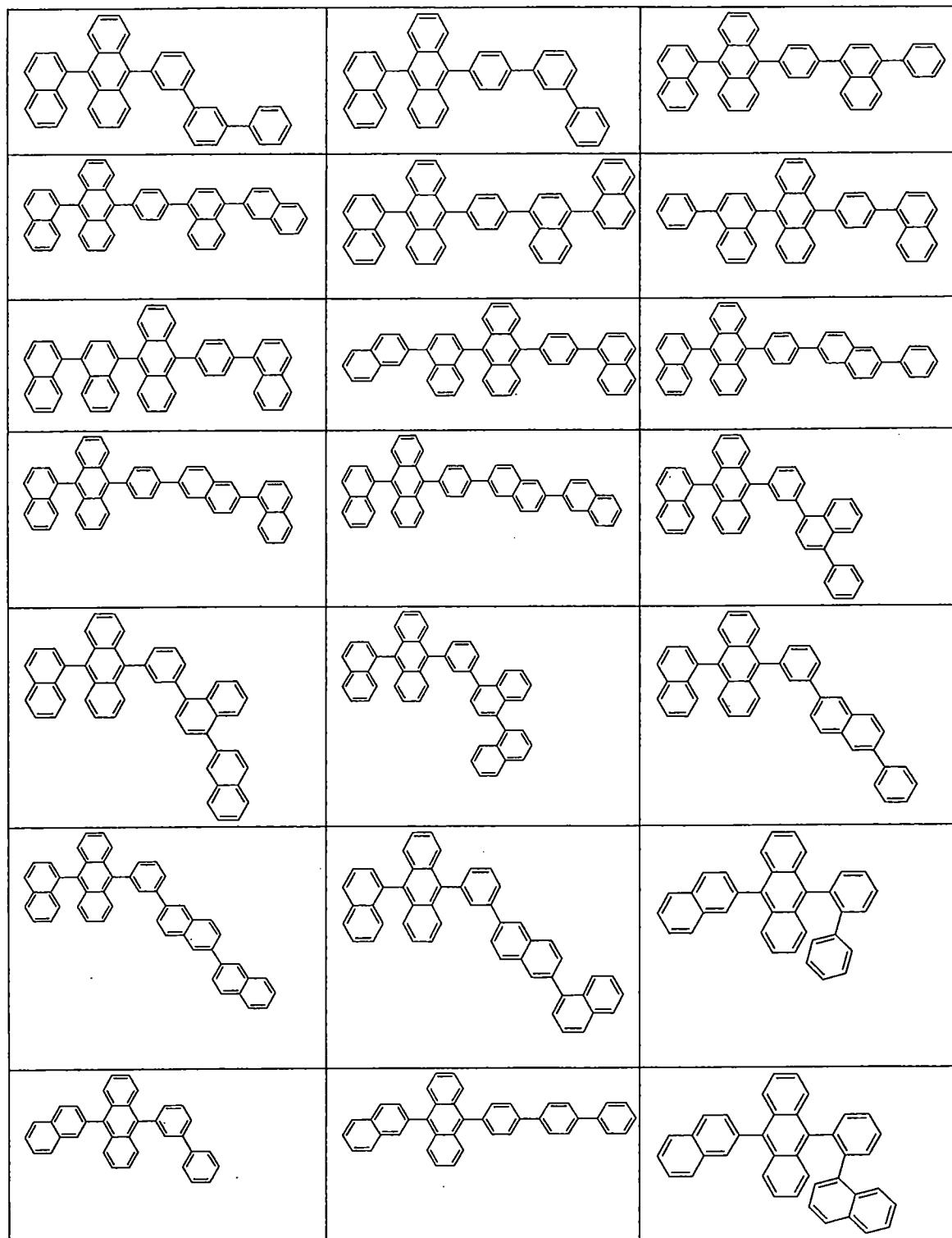


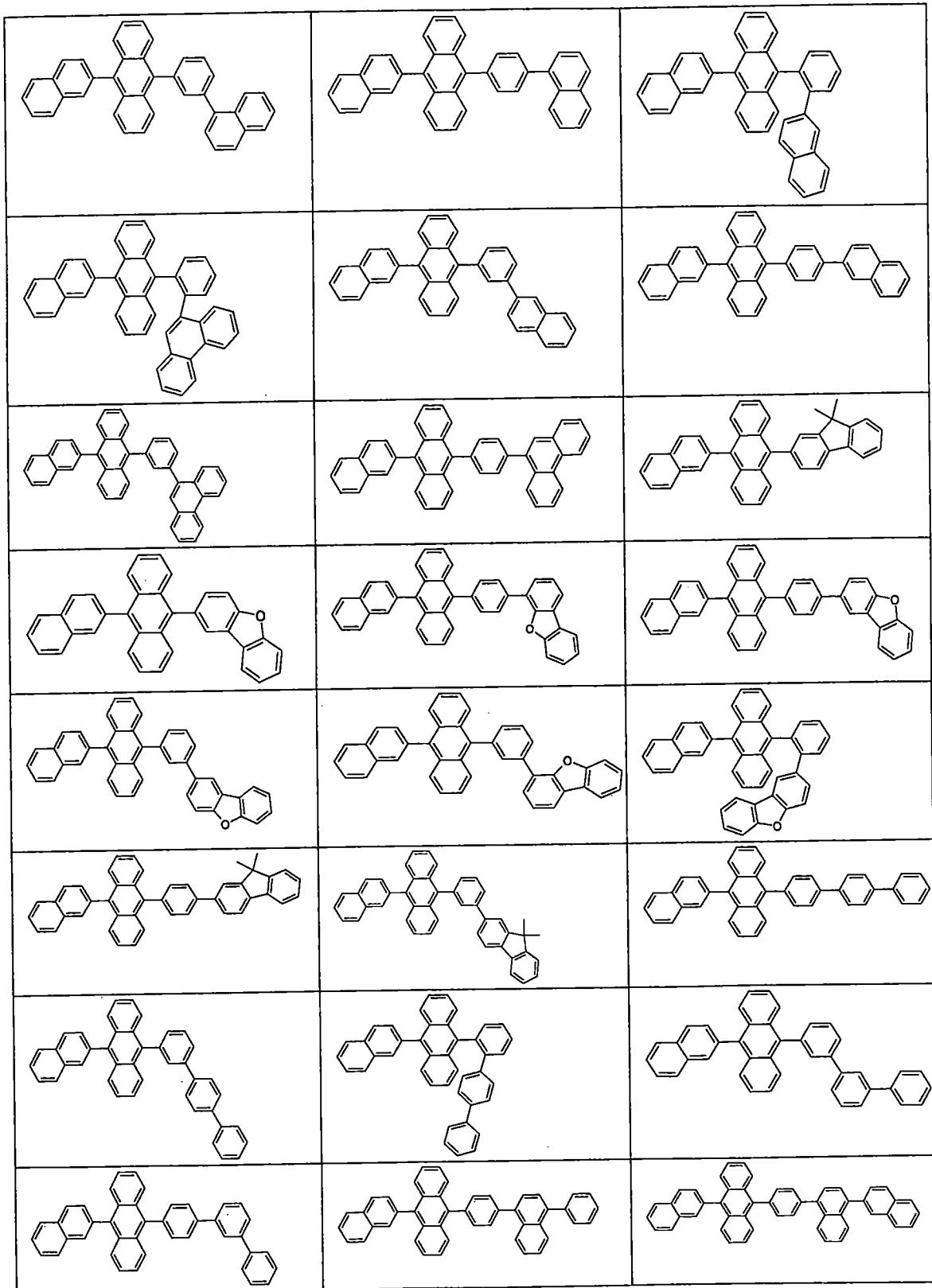


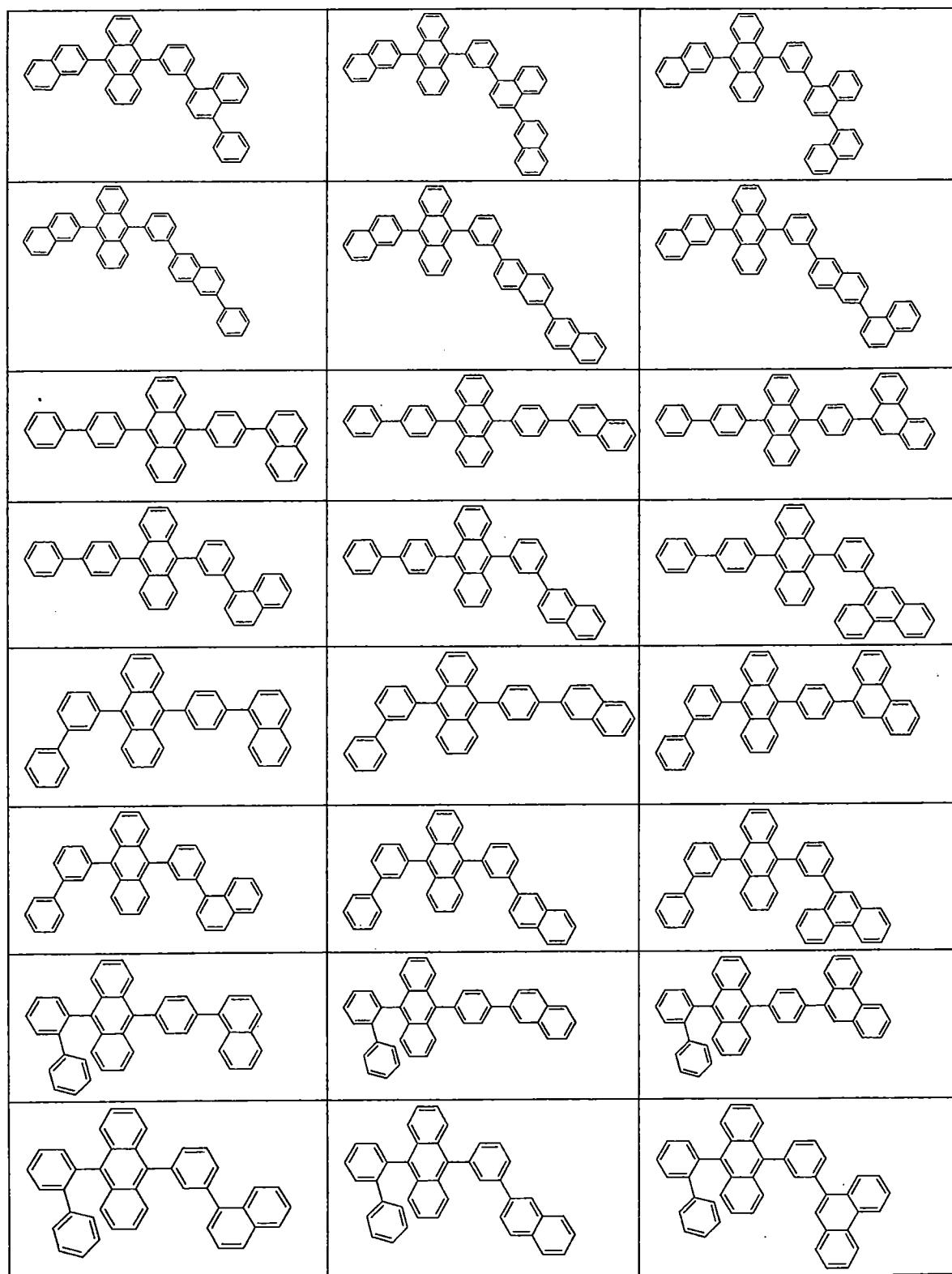


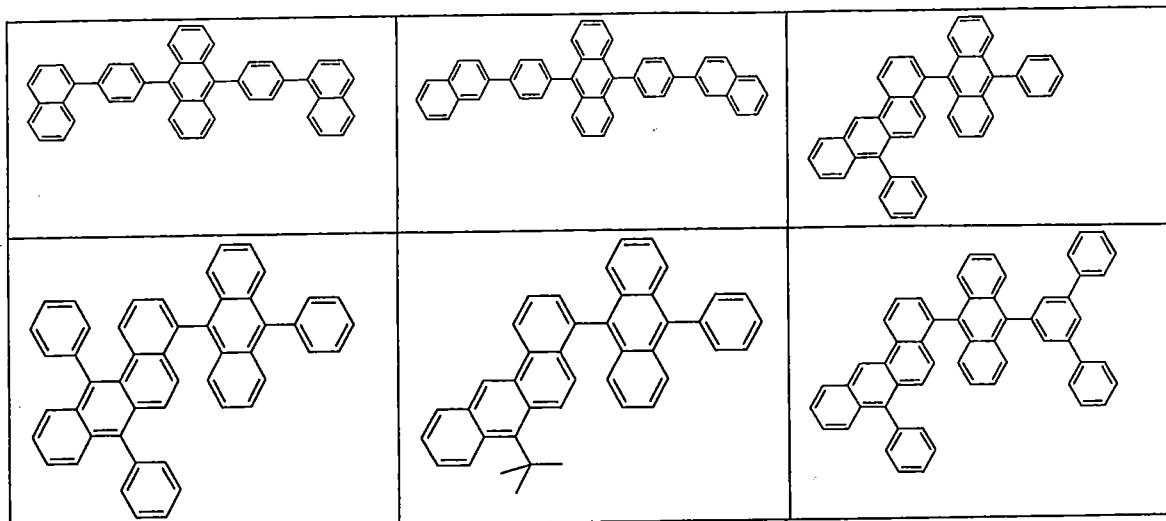












合適的電荷傳輸材料，如可用在根據本發明之有機電致發光裝置之電洞注入或電洞傳輸層或電子阻擋層中或電子傳輸層中，為例如揭示於 Y. Shirota 等人之 Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010 之化合物、或如先前技術使用在這些層中的其他材料。

除式(1)化合物外，可用在根據本發明之有機電致發光裝置之電洞傳輸、電洞注入或電子阻擋層中之較佳電洞傳輸材料之實例還能是茚并茀胺衍生物(例如根據 WO 06/122630 或 WO 06/100896)；揭示於 EP 1661888 之胺衍生物；六氮雜聯伸三苯基衍生物(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)；揭示於 WO 95/09147 之胺衍生物；單苯并茚并茀胺(例如根據 WO 08/006449)；二苯并茚并茀胺(例如根據 WO 07/140847)；螺二茀胺(例如根據 WO 2012/034627 或 WO 2013/120577)；茀胺(例如根據 WO 2014/015937、WO 2014/015938 及 WO 2014/015935)；螺二苯并哌喃胺(例如根據 WO 2013/083216)及二氫吖啶衍生物(例如根據 WO

2012/150001)。

有機電致發光裝置之陰極較佳包含具有低功函數之金屬、包含各種金屬之金屬合金或多層結構，諸如例如，鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑭系元素(例如 Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等等)。也合適者為包含鹼金屬或鹼土金屬及銀之合金，例如包含鎂及銀之合金。在多層結構之情況下，除了該等金屬外，也可使用具有相對較高功函數之進一步金屬，諸如例如 Ag或Al，在該情況下，一般使用諸如例如 Ca/Ag、Mg/Ag或Ag/Ag之金屬組合。也可能較佳的是將具有高介電常數之材料的薄中間層引入金屬陰極與有機半導體之間。適合此目的者為，例如鹼金屬氟化物或鹼土金屬氟化物，也為其相應氧化物或碳酸鹽(例如 LiF、Li<sub>2</sub>O、BaF<sub>2</sub>、MgO、NaF、CsF、Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>等等)。再者，喹啉鋰(LiQ)也可用於此目的。此層之層厚度較佳在0.5與5nm之間。

陽極較佳包含具有高功函數之材料。陽極較佳具有對於真空大於4.5 eV之功函數。適合此目的者一方面為具有高氧化還原電位之金屬，諸如例如 Ag、Pt或Au。另一方面，金屬/金屬氧化物電極(例如 Al/Ni/NiO<sub>x</sub>、Al/PtO<sub>x</sub>)也為較佳。對於一些應用，為了促進有機材料之放射(有機太陽能電池)或偶合出光(OLED、O-雷射)，電極的至少一者必須透明或部分透明。在此較佳陽極材料為導電之混合金屬氧化物。特別偏好的是銦錫氧化物(ITO)或銦鋅氧化物(IZO)。更偏好的是導電之經摻雜有機材料，特別是導電

之經摻雜聚合物。

將裝置適當地(取決於應用)結構化，而配備接點並最終密封，因為在水及/或空氣存在下根據本發明裝置之壽命會縮短。

在較佳具體實施例中，根據本發明之有機電致發光裝置之特徵在於，一或多層係藉由昇華製程之手段施加，其中材料係藉由於真空昇華單元中以少於  $10^{-5}$  mbar(較佳少於  $10^{-6}$  mbar)初始壓力氣相沉積施加。然而，在此初始壓力也可以是甚至更低，例如少於  $10^{-7}$  mbar。

同樣偏好的是一種有機電致發光裝置，其特徵在於一或多層係藉由OVPD(有機氣相沉積)製程施加或在載體氣體昇華的輔助之下施加，其中材料係在  $10^{-5}$  mbar與1 bar之間之壓力施加。此製程的特別情況係OVJP(有機氣相噴射印刷)製程，其中材料係直接透過噴嘴施加且因而結構化(例如，M. S. Arnold等人之Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301)。

更偏好的是一種有機電致發光裝置，其特徵在於一或多層係從溶液產製，諸如例如藉由旋轉塗佈、或藉由任何所欲印刷製程之手段，諸如例如網版印刷、柔版印刷、噴嘴印刷或膠版印刷，但是特佳為LITI(光誘導熱成像、熱轉印印刷)或噴墨印刷。

為了產製根據本發明之有機電致發光裝置，更佳的是一或多層係從溶液施加及一或多個層係藉由昇華製程施加。

歸因於式(1)化合物之良好溶解度，較佳為包含一或多種式(1)化合物之層將從溶液施加。此較佳是有機電致發光裝置之發光層。

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使用，於發光應用中作為光源及於醫療及/或化妝品應用(例如光療法)中作為光源。

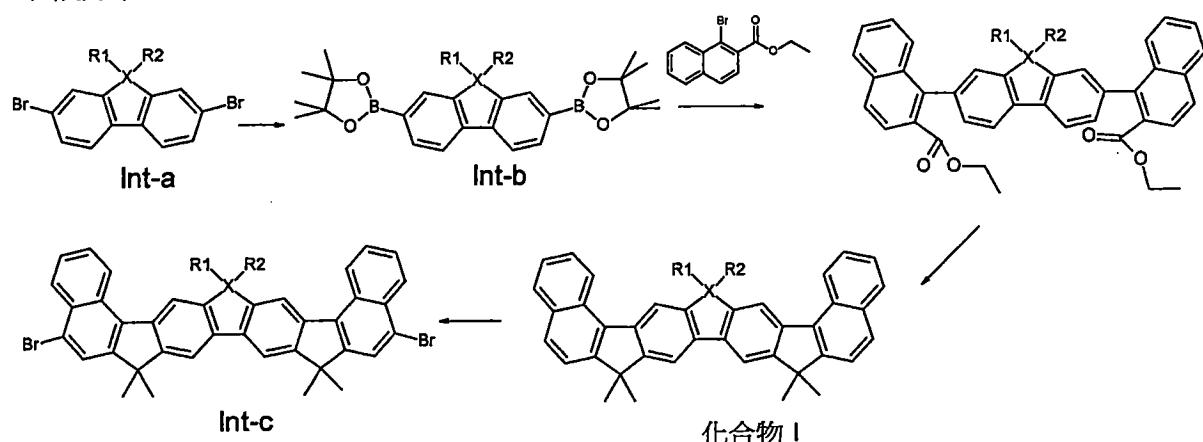
## 【實施方式】

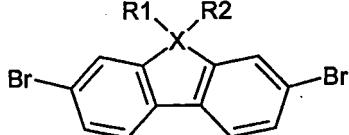
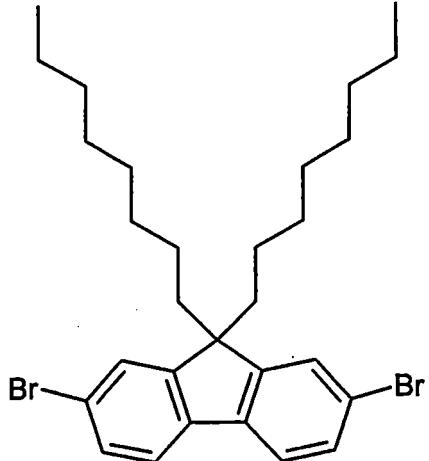
### 工作例

#### A)合成例

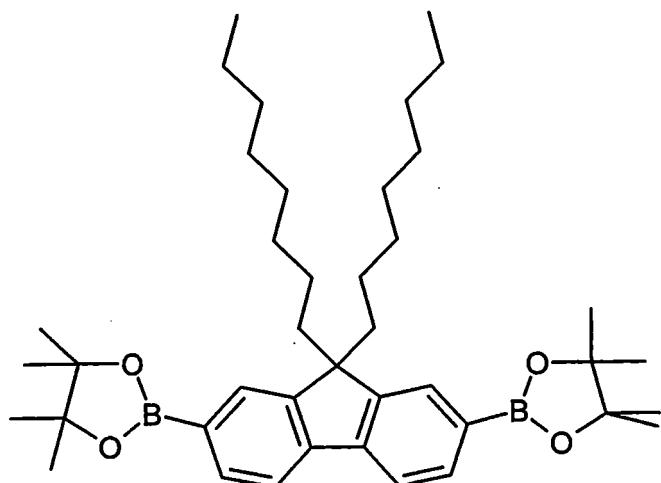
##### A-1)

合成方案：



化合物		合成/ 產率
Int-a1		市售可得 CAS 198964-46-4

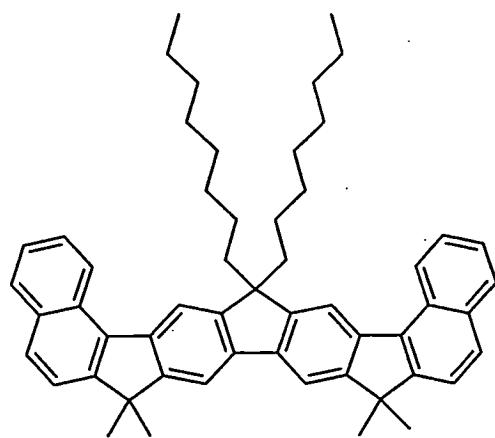
化合物 Int-b



將 2,7-二溴-9,9-二辛基-9H-苷 (100 g, 0.17 mol)、聯硼酸 頻那醇 酯 (bis(pinacolato)-diboron)(94.9 g, 0.37 mol) 及 乙酸鉀 (50 g, 0.51 mol) 懸浮在 1.4 L 二噁烷 中。溶液以氫飽和。添加  $\text{PdCl}_2(\text{dpff})\text{-CH}_2\text{Cl}_2$  (4.2 g, 0.01 mol)。將反應混合物回流 16 小時並接著冷卻至室溫。添加乙酸乙酯及水。以水清洗 (3x500 mL) 有機相。於減壓下濃縮有機相且藉由

從乙醇再結晶來純化殘質。產率：98 g (90 %)。純度>95 % (NMR於 $\text{CDCl}_3$ 中)。

### 化合物 I



步驟 1：將 2,7-雙頻那醇基 -9,9-二辛基 -9H- 萍 (94 g, 0.146 mol)、1-溴 -萘 -2-乙酯 (104 g, 0.37 mmol) 及 碳酸鈉 (56 g, 0.5 mol) 添加到水/甲苯/二噁烷 (1:1:1, 1.5 L)。溶液以氫飽和。添加肆(三苯基膦)-鈀(0) (15.2 g, 0.01 mol) 且將反應混合物回流 6 小時。於冷卻至室溫後，添加甲苯 (500 mL) 及以水清洗 (3x500 mL) 有機相，並接著於減壓下濃縮。殘質藉由從乙醇再結晶而純化。產率：115 g (0.145 mol; 99 %)。純度> 95 % (NMR,  $\text{CDCl}_3$ )

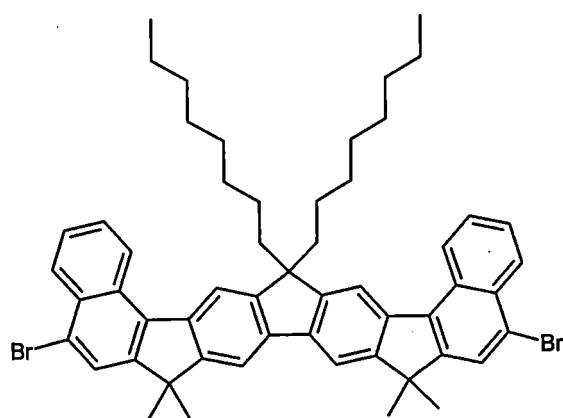
步驟 2：對 115 g (0.145 mol) 稀釋於 1 L THF 中之中間產物 (步驟 1) 添加 145 g (0.60 mol) 的氯化鈰 (III) 及 500 mL THF，及攪拌混合物 30 分鐘並冷卻至 0 °C。在 0 °C，將 390 mL (1.17 mol) 的甲基氯化鎂 (3M 於 THF 中) 滴加至反應混合物。允許反應混合物回溫至室溫。16 小時後，在 0 °C，添加 800 mL 的氯化銨飽和水溶液。添加乙酸乙酯 (2x500 mL)，以水清洗 (2x500 mL) 組合之有機相並於減壓

下濃縮。殘質藉由從乙醇再結晶而純化。產率：103 g (0.146 mol, 93%)。

步驟3：將103 g (0.14 mol)的中間產物(步驟2)溶解於1.5 L甲苯中並添加 275 g的amberlyst 15。使用Dean-Stark設備將反應混合物回流16小時。於冷卻至室溫後，藉由過濾移除amberlyst，並於減壓下濃縮有機相。殘質藉由從乙醇或庚烷/甲苯數次再結晶而純化。

產率：73 g (0.101 mol; 75 %)。

#### 化合物 Int-c

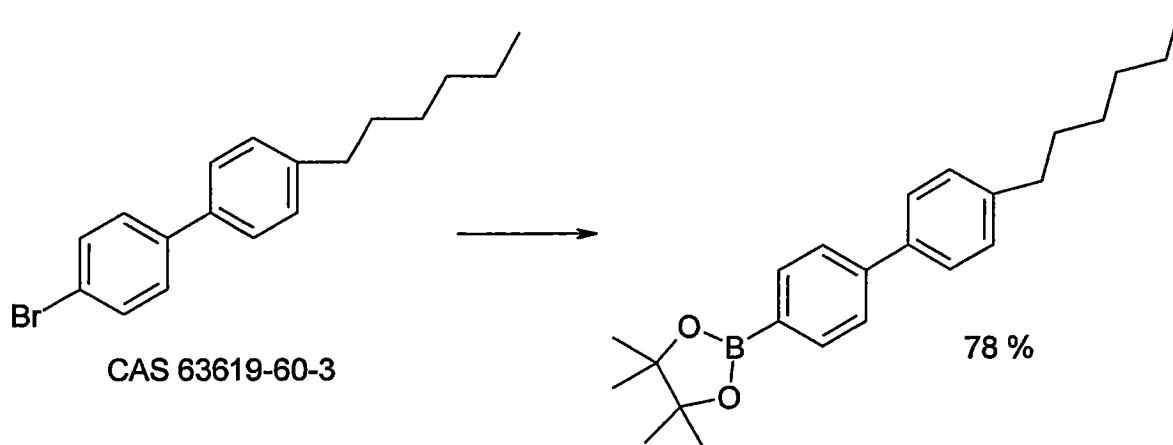


將Ia (73 g, 101 mmol)溶解於1 L DCM中並冷卻至-10 °C。滴加於500 ml DCM中之Br<sub>2</sub> (33.1 g, 207 mmol)。反應混合物在0 °C攪拌1小時並接著允許回溫至室溫。16小時後，添加20 ml的飽和硫代硫酸鈉水溶液並將混合物攪拌15分鐘。添加水(1 L)，以水清洗(3x500 mL)有機相並將組合之有機相於減壓下濃縮。殘質藉由從乙醇或庚烷/甲苯數次再結晶而純化。

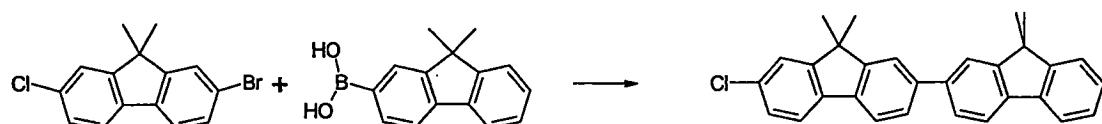
產率：66.4 g (75 mmol; 74%)

## 化合物 B 之合成

可以類似於 Int-B 之方式合成化合物 B：



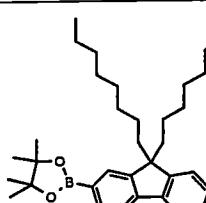
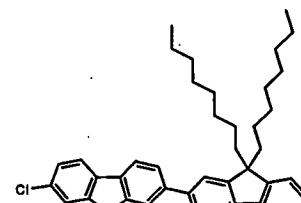
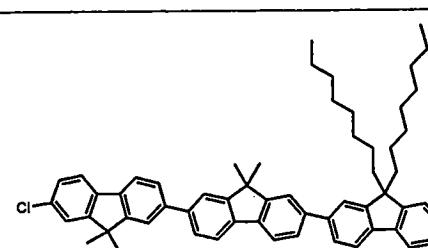
## 化合物 C1 之合成



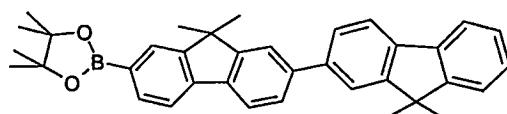
將 30 g (97.5 mmol) 的 2-溴 -7-氯 -9,9-二甲基 -9H- 萊 (參見 JP 2003277305 A)、25.5 g (107.3 mmol) 的 (9,9-二甲基 萊 -2-基) 硼酸 90 g (390 mmol)、0.9 g (4 mmol) 的 乙酸 鈀 (II) 及 3.6 g (11.7 mmol) 的 參(鄰甲苯基)-膦 溶解於 1 L 之 甲苯、二噁烷、水 (1:1:1) 中並於回流攪拌過夜。於冷卻至室溫後，添加 200 ml 甲苯及分離有機相並以水清洗 (2x200 ml)，並將組合之有機相於減壓下濃縮。殘質藉由從甲苯 / 庚烷再結晶而純化。

產率：39.1 g (93 mmol; 96%)

可以類似方式合成下列化合物：

化合物	起始材料	產物	產率
C2	 CAS 302554-81-0		89 %
C3	D2		78 %

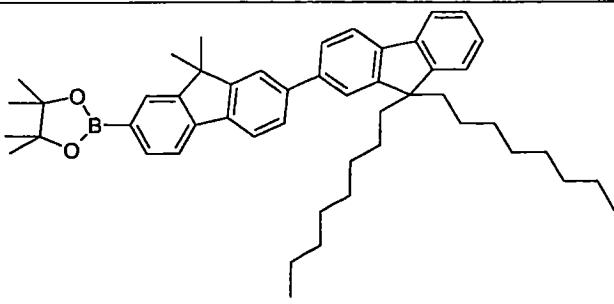
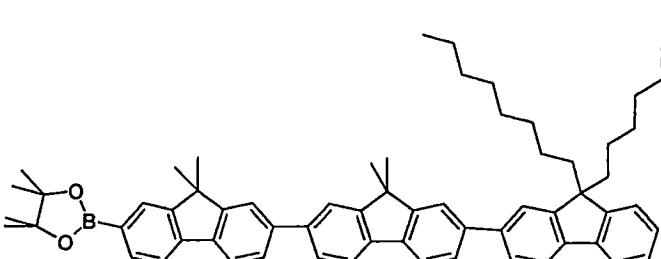
## D1之合成



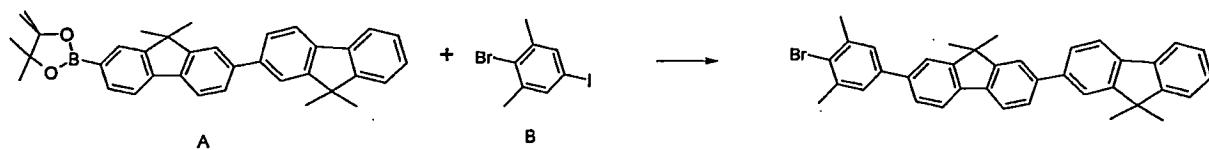
將 40 g (95 mmol) 的 C1、38.6 g (152 mmol) 的聯硼酸  
 頻那醇酯、4.2 g (5.7 mmol) 的反式 - 二氯(三環己基膦)鈀  
 (II) 及 28 g (285 mmol) 的乙酸鉀溶解於 400 mL 二噁烷中並  
 於回流攪拌 16 h。允許反應混合物冷卻至室溫及添加 400  
 mL 甲苯。分離有機相，以水清洗 (2x200 mL) 並過濾通過矽  
 藻土。於減壓下將溶液濃縮至乾。殘質藉由從甲苯 / 庚烷  
 再結晶而純化。

產率：36 g (70 mmol; 74 %)

可以類似方式合成下列化合物：

化合物	起始材料	產物	產率
D2	C2		89 %
D3	C3		87 %

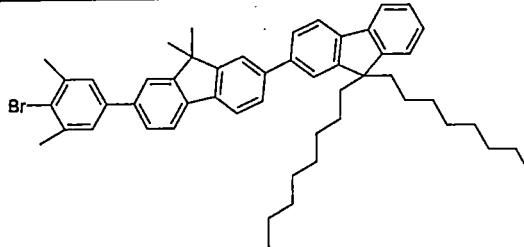
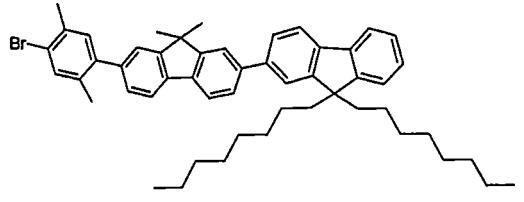
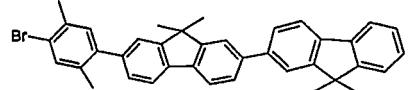
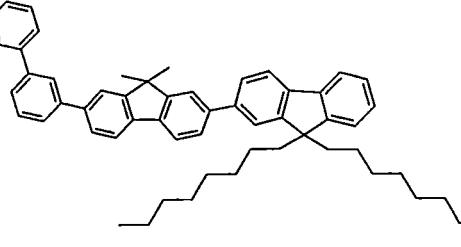
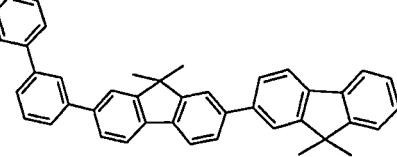
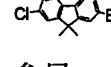
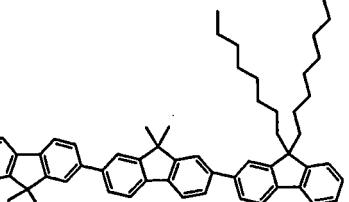
## E1之合成

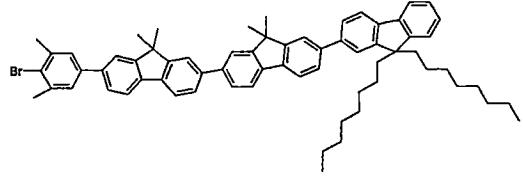
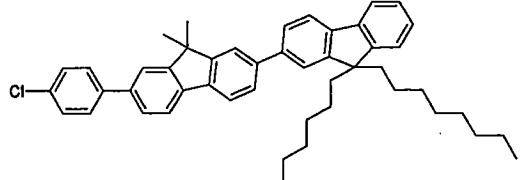
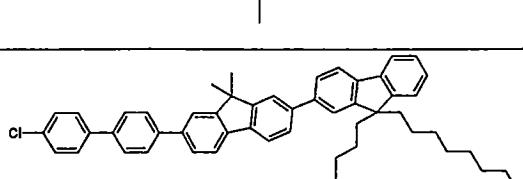


將 5.5 g (17.8 mmol)的 2-溴 -5-碘 -1,3-二甲基苯、6.5 g (12.7 mmol)的 D1、366 mg (0.3 mmol)的 肆(三苯基膦)-鈀 (0)及 2.7 g (13 mmol)的 碳酸鈉溶解在 200 ml 的 甲苯、乙醇 及 水 (2:1:1) 中 並 在 90 °C 攪拌 16 小時。冷卻至室溫後 添加 100 ml 甲苯，分離有機相並以水清洗 (2x50 ml)。於減壓下 將 有機相濃縮至乾。殘質藉由從 甲苯 / 庚烷 再結晶而純化。

產率：6.2 g (11 mmol; 86 %)

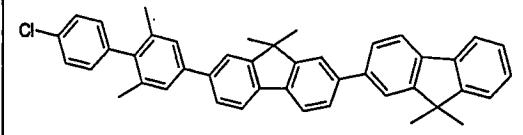
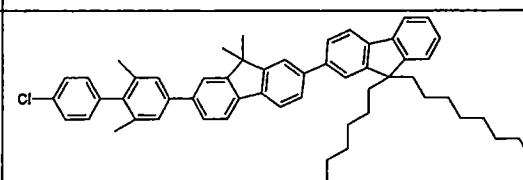
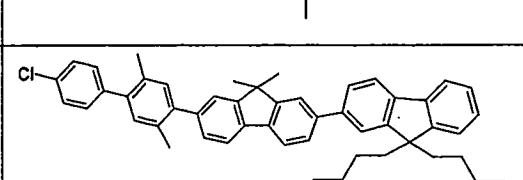
可以類似方式合成下列化合物：

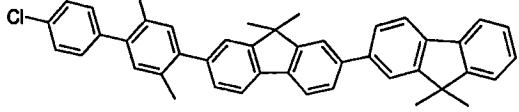
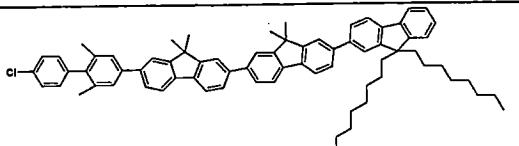
化合物	起始材料 A	起始材料 B	產物	產率
E2	D2	CAS 689260- 53-5		89 %
E3	D2	CAS 699119- 05-6		87 %
E4	D1	CAS 699119- 05-6		83 %
E5	D2	CAS 844856- 42-4		85 %
E6	D1	CAS 844856- 42-4		81 %
E7	D2	Cl-  參見 JP 20032 77305 A		78 %

E8	D3	CAS 689260- 53-5		82 %
E9	D2	CAS 637- 87-6		87 %
E10	D2	CAS 23055-77- 8		78 %

### 化合物F之合成

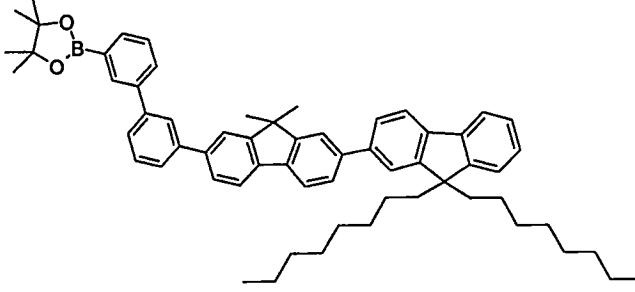
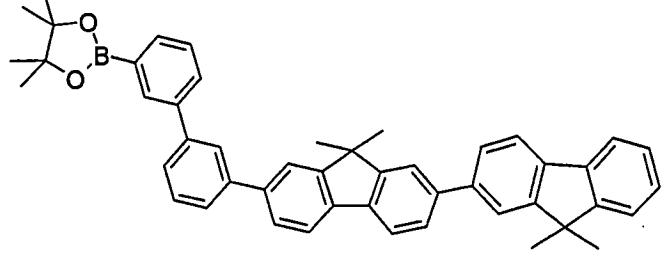
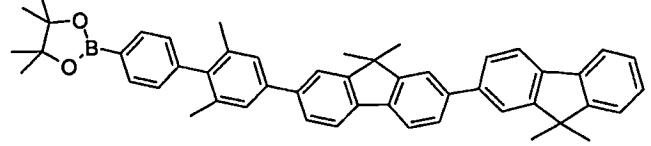
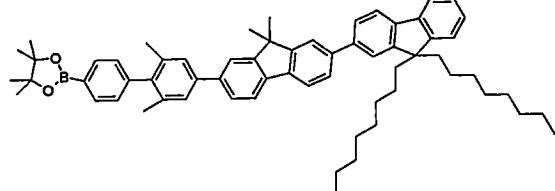
可以類似於E1之方式合成化合物F：

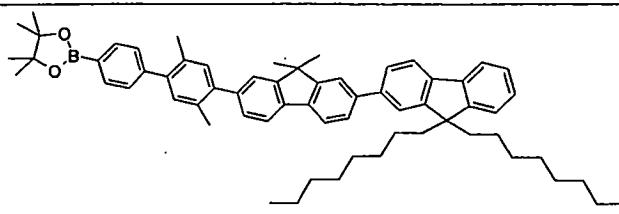
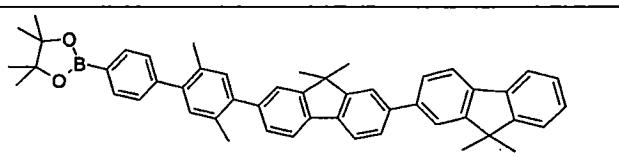
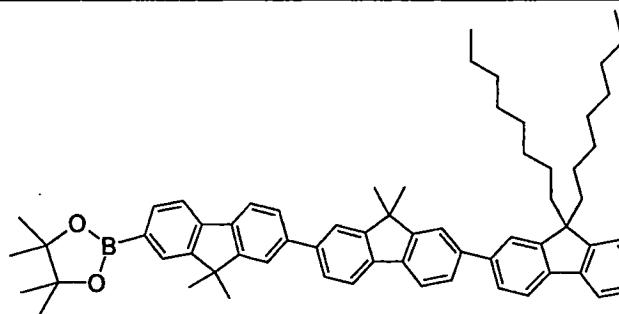
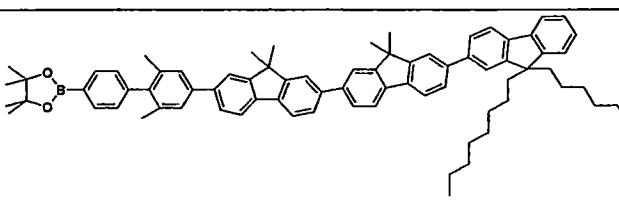
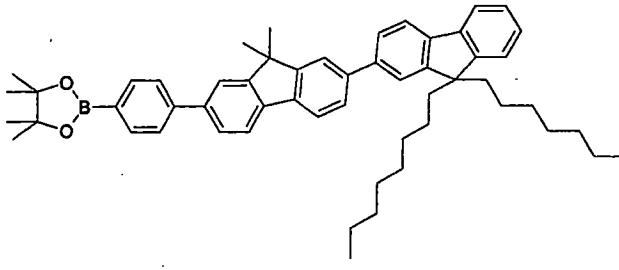
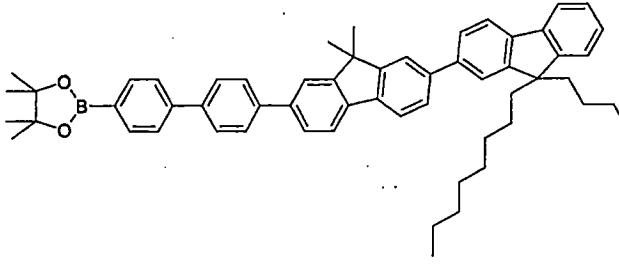
化合物	起始材料 A	起始材料 B	產物	產率
F1	CAS 1679- 18-1	E1		68 %
F2	CAS 1679- 18-1	E2		67 %
F3	CAS 1679- 18-1	E3		72 %

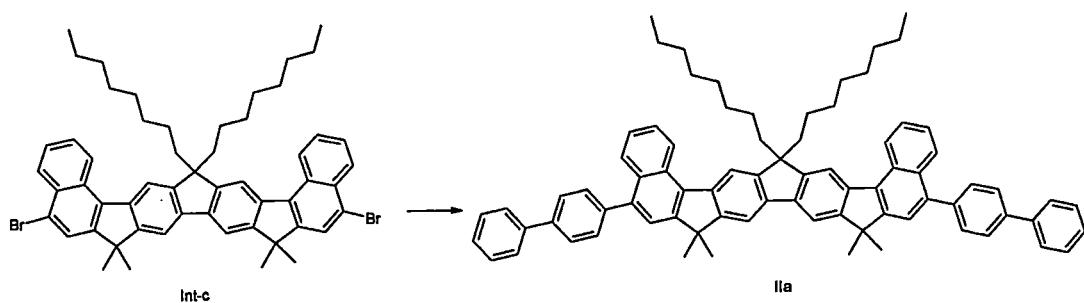
F4	CAS 1679- 18-1	E4		69 %
F5	CAS 1679- 18-1	E8		72 %

## 化合物 G 之合成

可以類似於 D1 之方式合成化合物 G：

化合物	起始材料	產物	產率
G1	E5		82 %
G2	E6		79 %
G3	F1		78 %
G4	F2		81 %

G5	F3		83 %
G6	F4		70 %
G7	E7		72 %
G9	F5		69 %
G10	E9		73 %
G11	E10		81 %



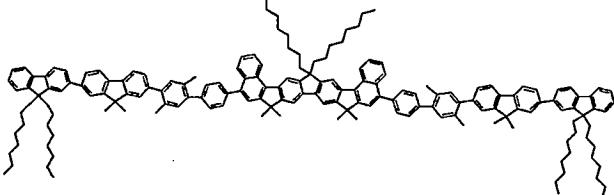
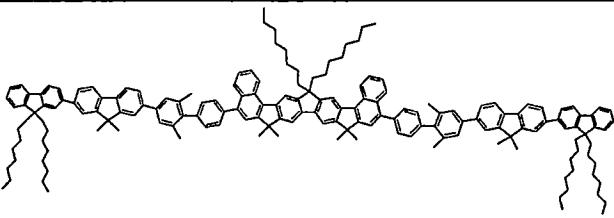
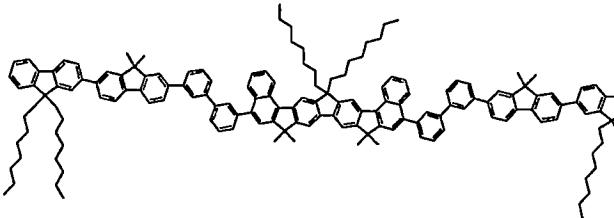
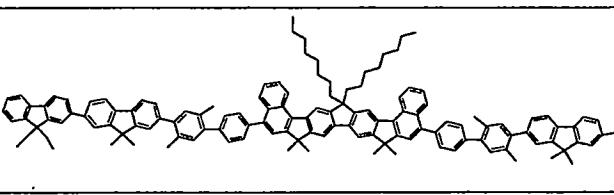
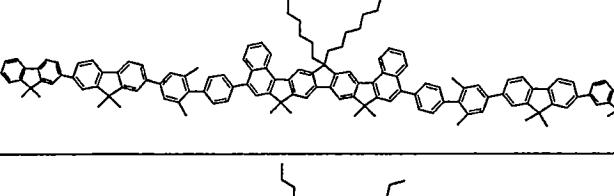
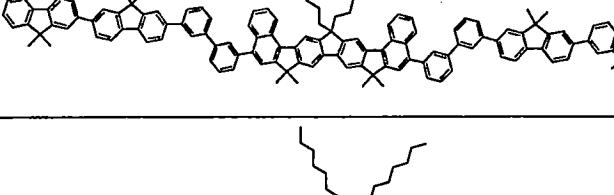
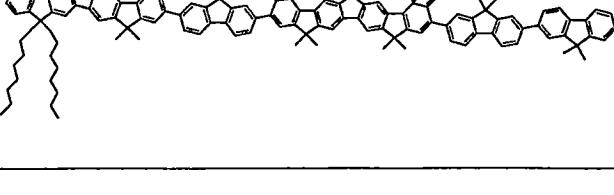
### 化合物 IIa

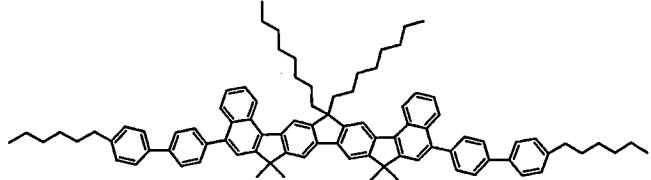
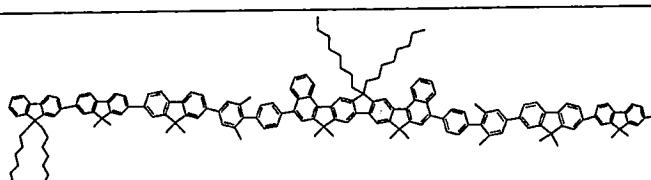
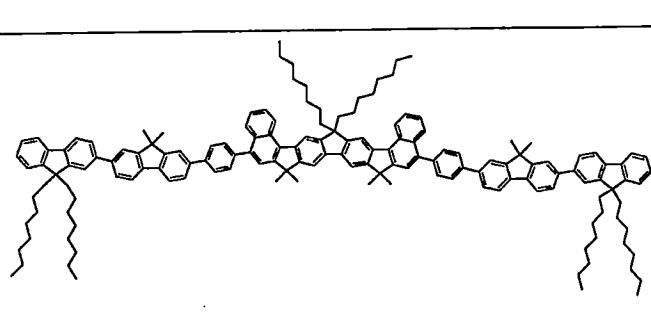
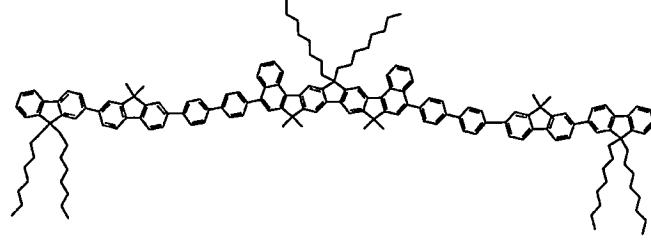
將 Int-c (18.7 g, 21.2 mmol)、4-聯苯基硼酸 (9.25 g, 46.7 mmol) 及碳酸鈉 (4.5 g, 42.4 mmol) 溶解在甲苯、乙醇及水 (2:1:1) 的混合物中且該溶液以氫飽和。添加肆(三苯基膦)-鈀 (0) (613 mg, 0.53 mmol) 並在 110 °C 攪拌 6 小時。允許反應混合物冷卻至室溫後，添加甲苯 (400 mL) 及水 (200 mL) 及分離有機相並以水 (400 mL) 清洗兩次。於減壓下將有機相濃縮。殘質進一步藉由過濾通過矽石 (以甲苯溶洗)、從庚烷/甲苯再結晶而純化。

產率：13.3 g (12.9 mmol; 61 %)

可以類似方式合成下列化合物 IIb 至 IIm：

	起始材料 A	起始材料 B	產率
IIb	Int-C1	D1	52 %

<b>IIc</b>	Int-C1	G5		58 %
<b>IId</b>	Int-C1	G4		62 %
<b>IIe</b>	Int-C1	G1		63 %
<b>IIf</b>	Int-C1	G6		59 %
<b>IIg</b>	Int-C1	G3		57 %
<b>IIh</b>	Int-C1	G2		55 %
<b>III</b>	Int-C1	G7		54 %

IIj	Int-C1	C		58 %
IIk	Int-C1	G9		57 %
III	Int-C1	G10		62 %
IIl	Int-C1	G11		67 %

## B) 裝置實施例

### B-1) 自溶液加工之裝置實施例：OLED之產製

溶液系 OLED 之產製係原理上描述於文獻中，例如 WO 2004/037887 及 WO 2010/097155。於下列實施例中，組合兩種產製方法（從氣相應用並溶液加工），以致係從溶液進行加工高至且包括發光層，且後續層（電洞阻擋層/電子傳輸層）係藉由真空氣相沉積施加。上述之一般製程係為了適應於此描述的情況（層厚度變化、材料）採用並組合如下。

所用裝置結構因而如下：

- 基材，
- ITO (50 nm)，
- PEDOT (20 nm)，
- 電洞傳輸層(HTL) (20 nm)，
- 發光層(92%的主體，8%的摻雜劑) (60 nm)，
- 電子傳輸層(ETL) (20 nm)，
- 電子注入層(EIL) (3nm)
- 陰極(A1) (100nm)。

所用基材為塗佈有厚度50 nm之結構化ITO (銦錫氧化物)之玻璃板。為了較好的加工，塗佈有緩衝液(PEDOT) Clevios P VP AI 4083 (Heraeus Clevios GmbH, Leverkusen)。於空氣中自水進行緩衝液之旋轉塗佈。之後藉由在180°C 加熱10分鐘而乾燥該層。將電洞傳輸及發光層施加至以此方式塗佈之玻璃板。

電洞傳輸層為表2所示結構之聚合物，該聚合物係根據WO 2010/097155合成。若欲藉由旋轉塗佈之手段達成，如於此，層厚度為20 nm(對裝置而言為典型)，則將聚合物溶解於甲苯中，以致溶液典型具有固體含量為約5 g/l。該等層係藉由旋轉塗佈施加，此係於惰性氣體氣氛下(於本情況下為氬)，並藉由在180°C 加熱60分鐘而乾燥。

發光層(EML)總是由至少一種基質材料(主體=H)及發光摻雜劑(發光體=D)所構成。在此表示法，諸如H1 (92%)：D1 (8%)意指材料H1以92重量%比例出現在發光層中且摻雜劑D1以8重量%比例出現在發光層中。發光層之

混合物係溶解於甲苯中。若欲藉由旋轉塗佈之手段達成，如於此，層厚度為 60 nm(對裝置而言為典型)，則此溶液之典型固體含量為約 18 g/l。該等層係藉由旋轉塗佈施加，此係於惰性氣體氮氣下(於本情況下為氮)，並藉由在 140°C 加熱 10 分鐘而乾燥。所用材料顯示於表 2 中。

藉由於真空艙中熱氣相沉積而施加用於電子傳輸層材料、電子注入層材料以及陰極之材料。例如，電子傳輸層可由多於一種材料所組成，彼等材料藉由共蒸發以某種體積比例彼此混合。表示法諸如 ETM:EIL (50%:50%) 將意指材料 ETM 與 EIL 各以 50 體積 % 比例出現在層中。在本情況下所用材料顯示於表 2 中。

藉由標準方法將 OLED 特徵化。為了此目的，紀錄電致發光光譜、電流效率(以 cd/A 測定)電壓及外部量子效率(EQE，以百分比測量)，其係作為亮度密度之函數，假定朗伯照射特性(Lambertian radiation characteristic)從電流-電壓-亮度密度特性(IUL 特性線)計算；及最終判定組件壽命。紀錄於 1000 cd/m<sup>2</sup> 亮度密度之電致發光光譜，且從此數據計算 CIE 1931 x 及 y 顏色座標。用語 EQE @ 1000 cd/m<sup>2</sup> 係指在 1000 cd/m<sup>2</sup> 之操作亮度密度下的外部量子效率。壽命 LD80 @ 10 mA/cm<sup>2</sup> 為在 10 mA/cm<sup>2</sup> 驅動電流密度下，直到初始亮度掉了 20% 所經過的時間。各種 OLED 所獲數據總結於表 1 中。

根據本發明之化合物在有機發光二極體中作為螢光發光體

## 材料之用途

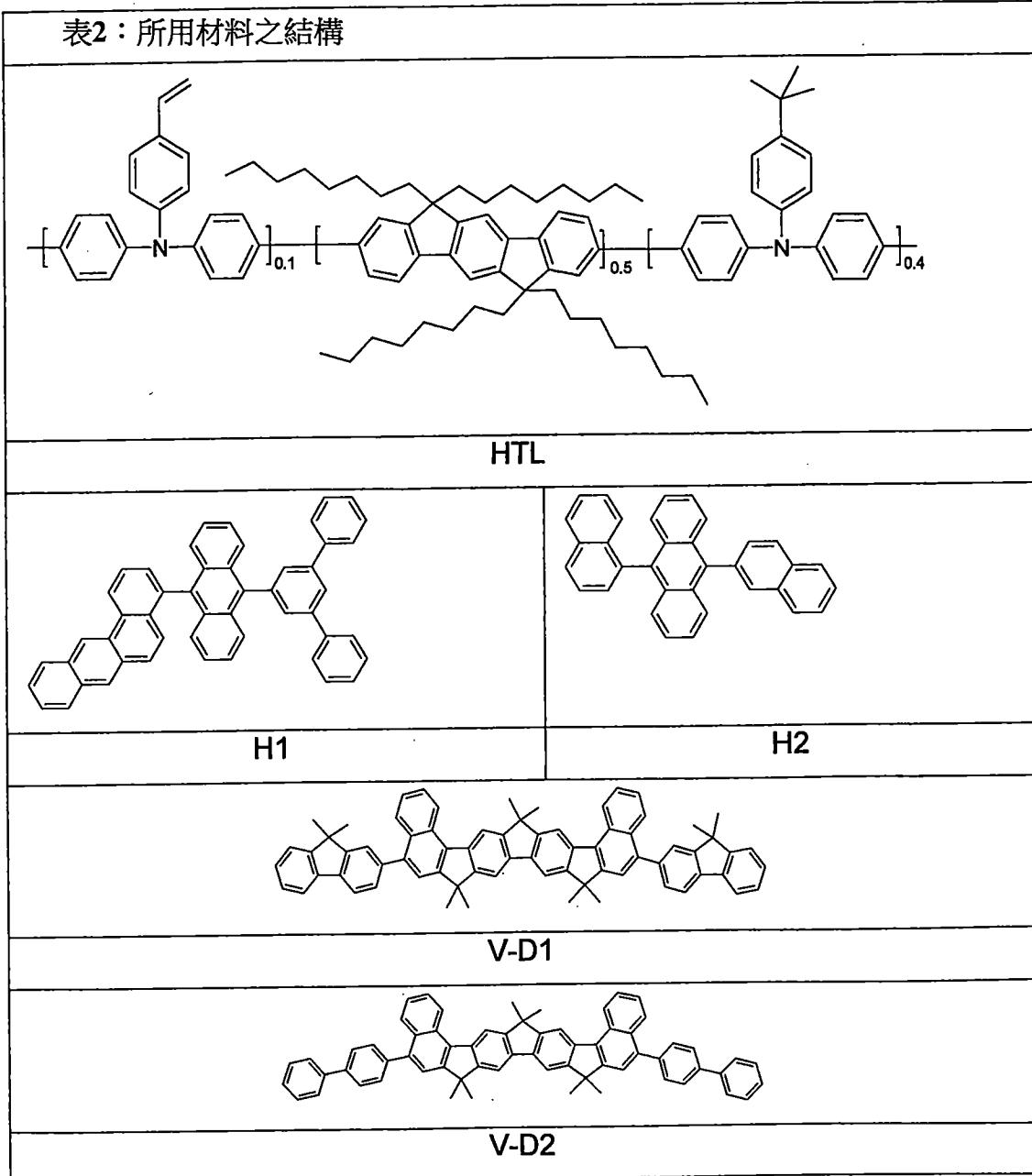
根據本發明之化合物特別適合在藍色螢光OLED中作為發光體材料。顯示發光體D1、D2、D3及D4作為根據本發明之化合物。比較用之技術現況(state-of-the-art)化合物係以V-D1及V-D2代表。所有發光體與主體H1或H2組合使用。

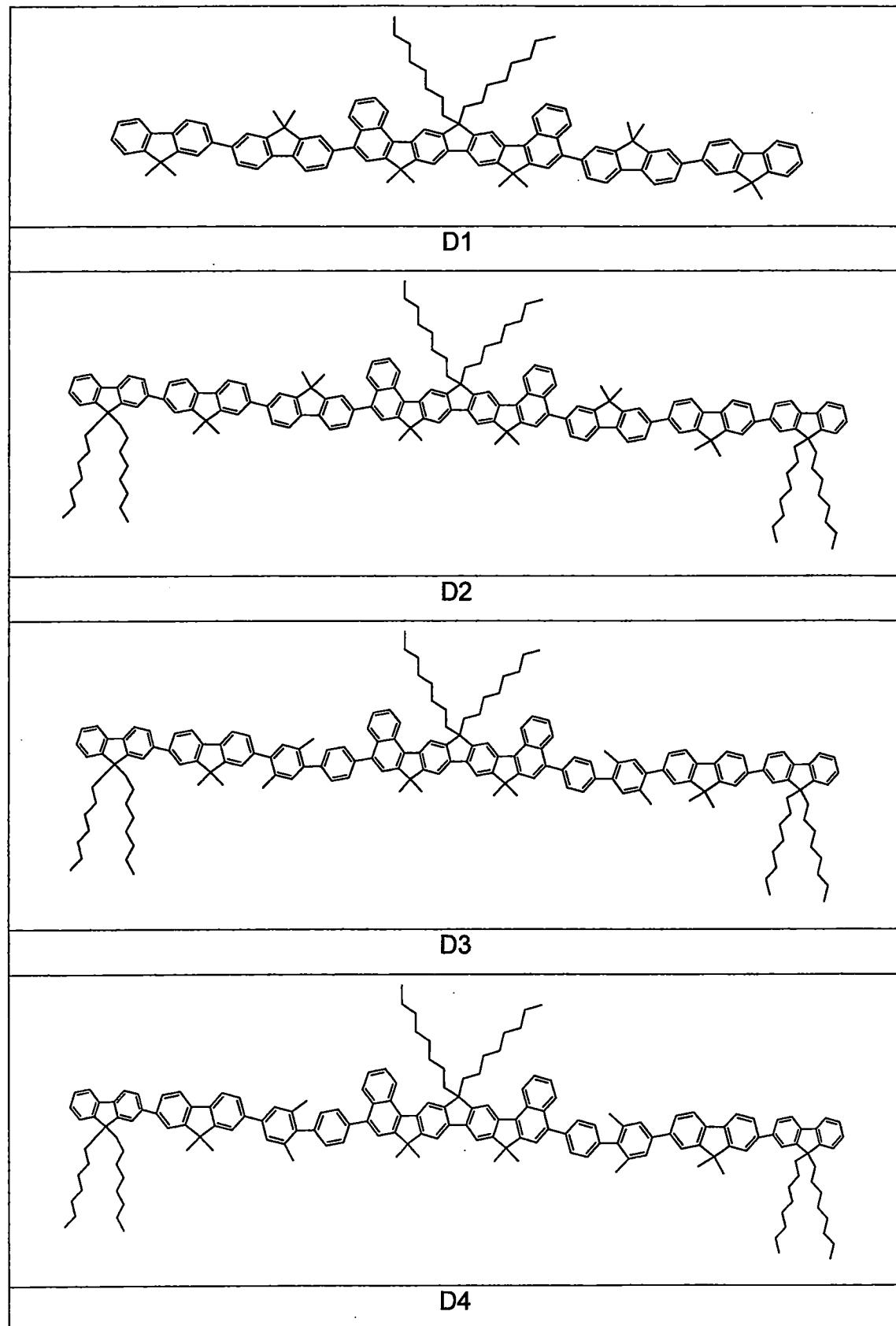
於與比較例V1及V2之比較檢驗中，實施例E1至E8顯示，當與比較性材料V-D1及V-D2相比時，根據本發明之化合物D1、D2、D3及D4達成改善之外部量子效率(EQE)及增加之壽命(LD80)，具有深藍色發光。尤其，材料V-D1(裝置V1及V2)與D3(實施例E5)及D4(實施例E6)之比較顯示本發明之技術效果，其中與技術現況相比，擴大雙-茚并苝-芯導致改善之裝置性能但維持相同深藍色。

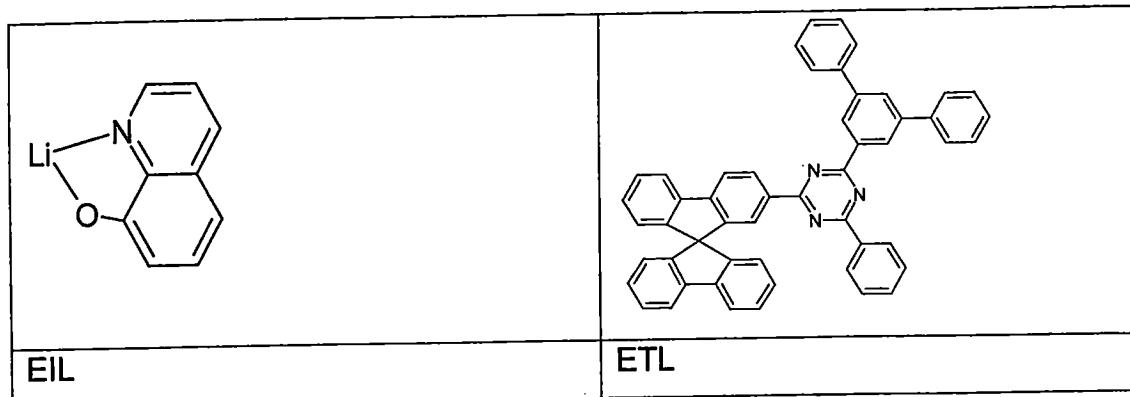
表1：OLED的數據						
實施例	主體	發光體	EQE @ 1000 cd/m <sup>2</sup>	LD80 @ 10mA/ cm <sup>2</sup>	CIE	
	92 %	8 %	%	[h]	x	y
V1	H1	V-D1	2.9	140	0.144	0.132
V2	H2	V-D1	3.2	150	0.142	0.138
V3	H1	V-D2	3.1	150	0.144	0.129
V4	H2	V-D2	3.3	160	0.147	0.134
E1	H1	D1	4.1	200	0.146	0.158

<i>E2</i>	<i>H2</i>	<i>D1</i>	4.3	220	0.138	0.164
<i>E3</i>	<i>H1</i>	<i>D2</i>	4.5	220	0.139	0.162
<i>E4</i>	<i>H2</i>	<i>D2</i>	4.6	230	0.137	0.165
<i>E5</i>	<i>H2</i>	<i>D3</i>	4.5	190	0.142	0.130
<i>E6</i>	<i>H1</i>	<i>D4</i>	4.3	210	0.144	0.128

表2：所用材料之結構







根據本發明之化合物具備適度溶解度並因此非常適合溶液加工。藉由此技術，可產生具優異性能數據之基於藍色螢光發光體之電子裝置。

替代地，或額外地，根據本發明之化合物可在發光層(EML)內作為主體材料、在有機發光二極體中作為電洞注入材料(HIL)、作為電洞傳輸材料(HTL)、作為電子傳輸材料(ETL)或作為電子注入材料(EIL)。

201815734

201815734

## 【發明摘要】

### 【中文發明名稱】

有機電致發光裝置用之材料

### 【英文發明名稱】

Materials for organic electroluminescent devices

### 【中文】

本發明關於式(1)化合物，其係適用於電子裝置中，特別是有機電致發光裝置中；及關於電子裝置，其包含這些化合物。

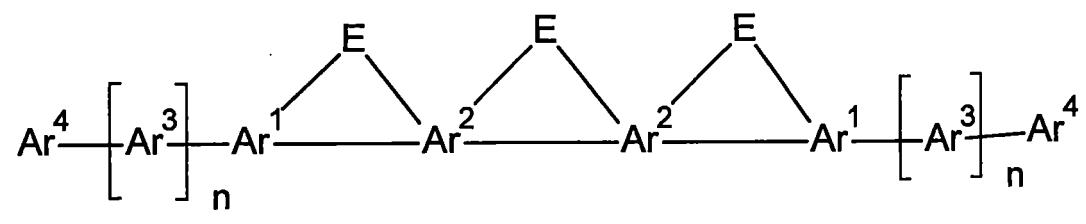
### 【英文】

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】無

【代表圖之符號簡單說明】無

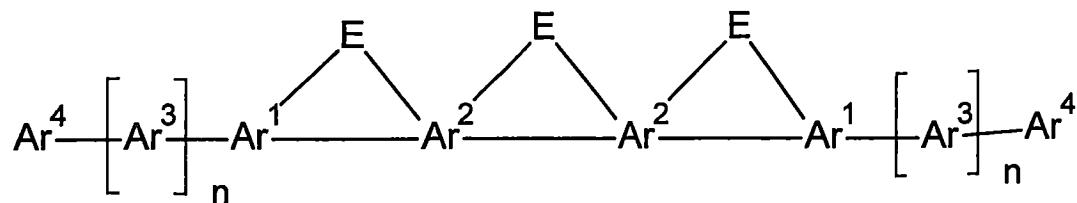
【特徵化學式】式(1)



## 【發明申請專利範圍】

### 【第1項】

一種式(1)化合物，



式(1)

其中下列係應用到所用符號及標號：

$\text{Ar}^1$ 每次出現時相同或不同地表示具有6至18個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個 $\text{R}^1$ 基取代，其中式(1)中 $\text{Ar}^1$ 基之至少一者具有10或更多個芳族環原子；

$\text{Ar}^2$ 每次出現時相同或不同地表示具有6個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個 $\text{R}^1$ 基取代；

$\text{Ar}^3$ 、 $\text{Ar}^4$ 每次出現時相同或不同地表示具有5至25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 $\text{R}^1$ 基取代；

$\text{E}$ 每次出現時相同或不同地選自 $-\text{BR}^0-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-\text{C}(\text{R}^0)_2-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-\text{O}-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-\text{S}-$ 、 $-\text{R}^0\text{C}=\text{CR}^0-$ 、 $-\text{R}^0\text{C}=\text{N}-$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^0)_2-$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^0)_2-\text{Si}(\text{R}^0)_2-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})-$ 、 $-\text{C}(=\text{NR}^0)-$ 、 $-\text{C}(=\text{C}(\text{R}^0)_2)-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{S}(=\text{O})-$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、 $-\text{N}(\text{R}^0)-$ 、 $-\text{P}(\text{R}^0)-$ 及 $-\text{P}((=\text{O})\text{R}^0)-$ ，且兩個 $\text{E}$ 基可相對於彼此在順式或反式位置；

$\text{R}^0$ 、 $\text{R}^1$ 每次出現時相同或不同地表示 $\text{H}$ ； $\text{D}$ ； $\text{F}$ ； $\text{Cl}$ ；

$\text{Br}$ ； $\text{I}$ ； $\text{CHO}$ ； $\text{CN}$ ； $\text{N}(\text{Ar}^5)_2$ ； $\text{C}(=\text{O})\text{Ar}^5$ ； $\text{P}(=\text{O})(\text{Ar}^5)_2$ ； $\text{S}(=\text{O})\text{Ar}^5$ ； $\text{S}(=\text{O})_2\text{Ar}^5$ ； $\text{NO}_2$ ； $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ ； $\text{B}(\text{OR}^2)_2$ ； $\text{OSO}_2\text{R}^2$ ；具有1至40個C原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基、烷氧基或硫烷基，其之各者可經一或多個 $\text{R}^2$ 基取代，其中在各情況下一或多個非相鄰 $\text{CH}_2$ 基可經 $\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^2)$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$ 或 $\text{CONR}^2$ 置換且其中一或多個H原子可經D、F、Cl、Br、I、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 $\text{R}^2$ 基取代；或具有5至40個芳族環原子之芳氧基，其可經一或多個 $\text{R}^2$ 基取代，其中兩個相鄰 $\text{R}^0$ 取代基及/或兩個相鄰 $\text{R}^1$ 取代基可形成單環或多環之脂族環系統或芳族環系統，其可經一或多個 $\text{R}^2$ 基取代；

$\text{R}^2$ 每次出現時相同或不同地表示 $\text{H}$ ； $\text{D}$ ； $\text{F}$ ； $\text{Cl}$ ； $\text{Br}$ ； $\text{I}$ ； $\text{CHO}$ ； $\text{CN}$ ； $\text{N}(\text{Ar}^5)_2$ ； $\text{C}(=\text{O})\text{Ar}^5$ ； $\text{P}(=\text{O})(\text{Ar}^5)_2$ ； $\text{S}(=\text{O})\text{Ar}^5$ ； $\text{S}(=\text{O})_2\text{Ar}^5$ ； $\text{NO}_2$ ； $\text{Si}(\text{R}^3)_3$ ； $\text{B}(\text{OR}^3)_2$ ； $\text{OSO}_2\text{R}^3$ ；具有1至40個C原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基、烷氧基或硫烷基，其之各者可經一或多個 $\text{R}^3$ 基取代，其中在各情況下一或多個非相鄰 $\text{CH}_2$ 基可經 $\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$ 或 $\text{CONR}^3$ 置換且其中一或多個H原子可經D、F、Cl、Br、I、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R<sup>3</sup>基取代；或具有5至60個芳族環原子之芳氧基，其可經一或多個R<sup>3</sup>基取代，其中兩個相鄰R<sup>2</sup>取代基可形成單環或多環之脂族環系統或芳族環系統，其可經一或多個R<sup>3</sup>基取代；

R<sup>3</sup>每次出現時相同或不同地表示H；D；F；Cl；Br；I；CN；具有1至20個C原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至20個C原子之分支或環狀烷基、烷氧基或硫烷基，其中在各情況下一或多個非相鄰CH<sub>2</sub>基可經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；

Ar<sup>5</sup>為具有5至24個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其在各情況下也可經一或多個R<sup>3</sup>基取代；

n為1至20之整數；

其中若n等於1且Ar<sup>3</sup>或Ar<sup>4</sup>基之至少一者表示苯基，則式(1)化合物帶有至少一個R<sup>0</sup>或R<sup>1</sup>基，該至少一個R<sup>0</sup>或R<sup>1</sup>基表示具有2至40個C原子之直鏈烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基，其之各者可經一或多個R<sup>2</sup>基取代。

## 【第2項】

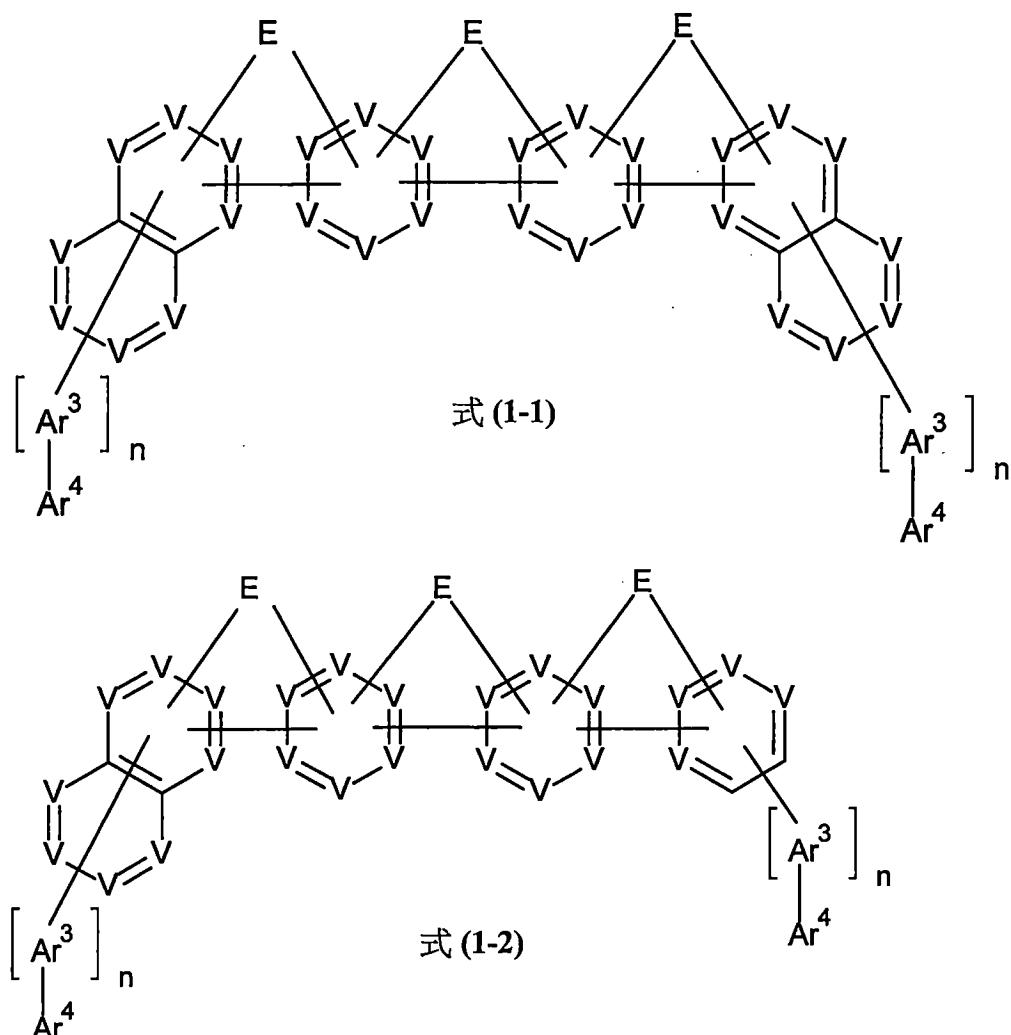
如請求項1之化合物，其中n為2至8之整數。

## 【第3項】

如請求項1或2之化合物，其中該式(1)化合物含有至少一個R<sup>0</sup>或R<sup>1</sup>基，其表示具有2至40個C原子之直鏈烷基或具有3至40個C原子之分支或環狀烷基，其之各者可經一或多個R<sup>2</sup>基取代。

## 【第4項】

如請求項1或2之化合物，其中，該式(1)化合物係選自式(1-1)及式(1-2)化合物，

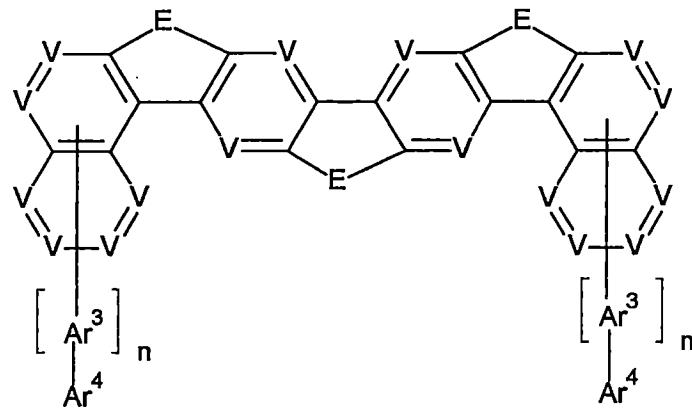


其中符號E、 $\text{Ar}^3$ 、 $\text{Ar}^4$ 及標號n具有如請求項1中之相同意義且其中：

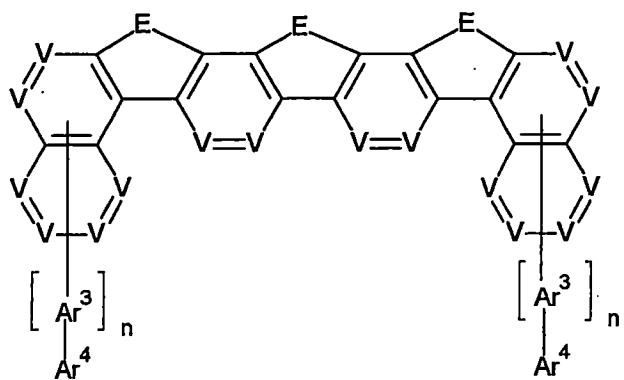
V 每次出現時相同或不同地為 $\text{CR}^1$ 或N，其中當V鍵結至 $\text{Ar}^3$ 基或至E基時，V為C。

## 【第5項】

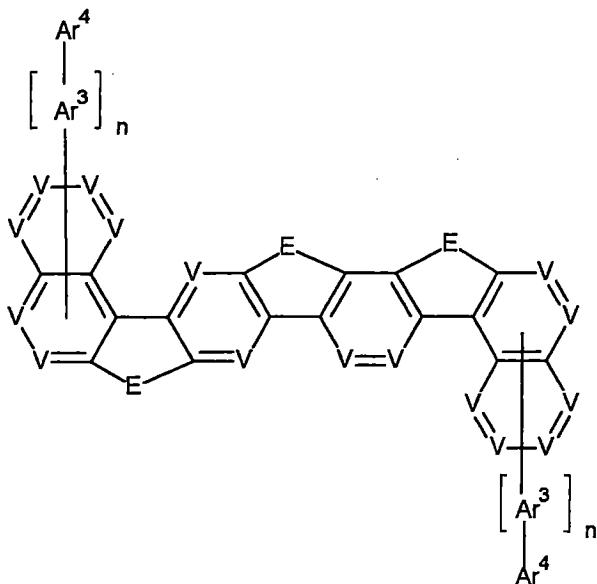
如請求項1或2之化合物，其中，該式(1)化合物係選自式(1-1-1)至(1-1-11)及(1-2-1)至(1-2-7)化合物，



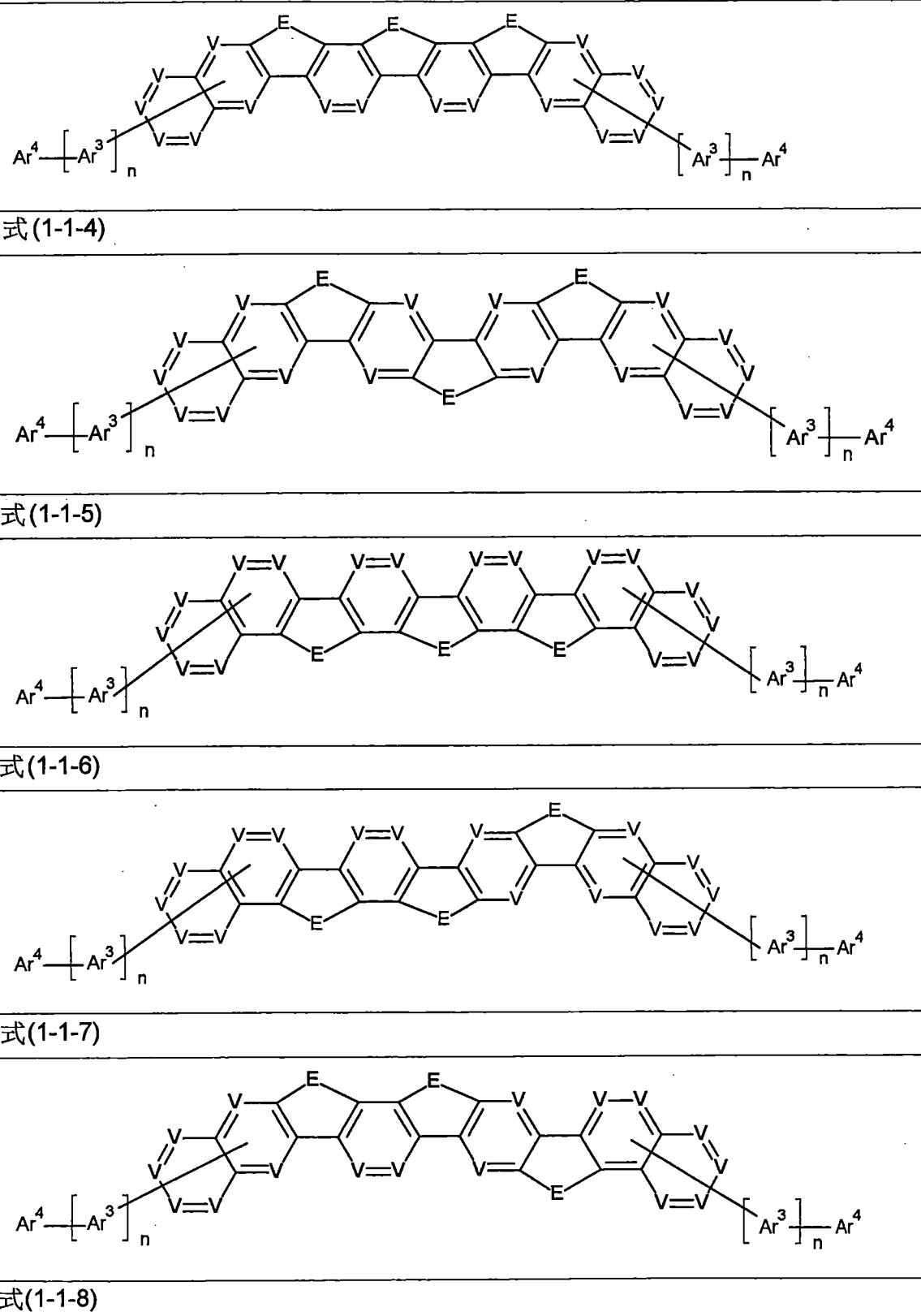
式(1-1-1)

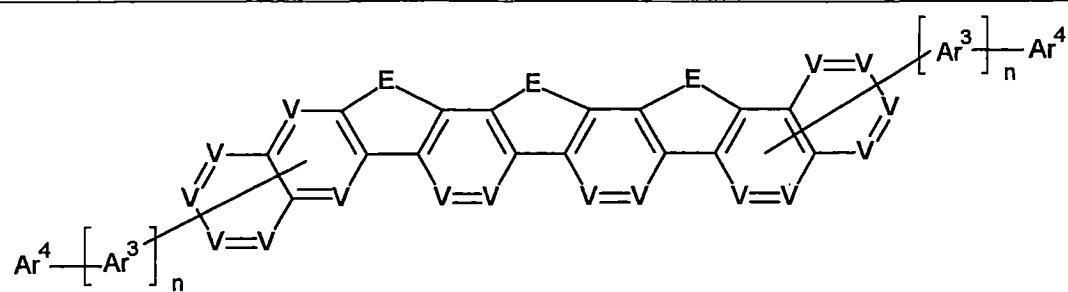


式 (1-1-2)

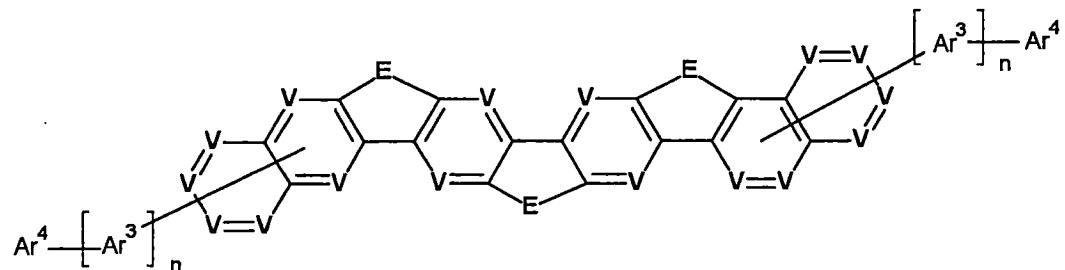


式 (1-1-3)

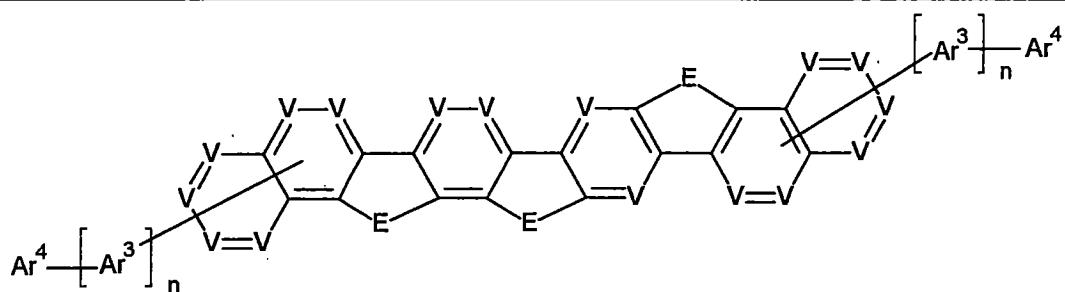




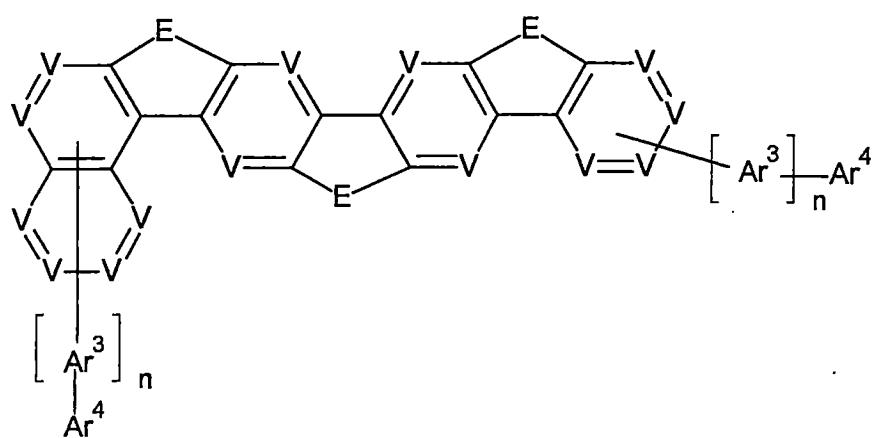
式(1-1-9)



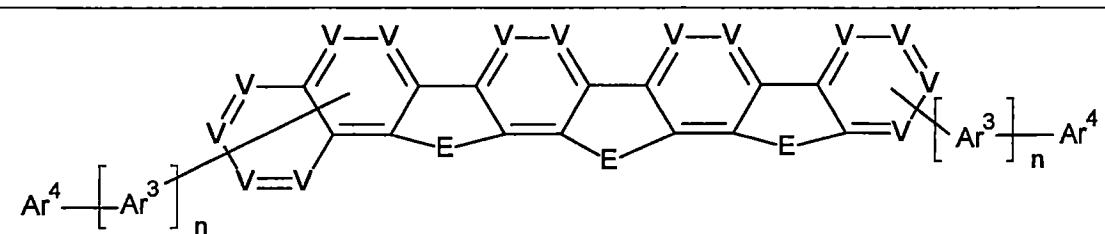
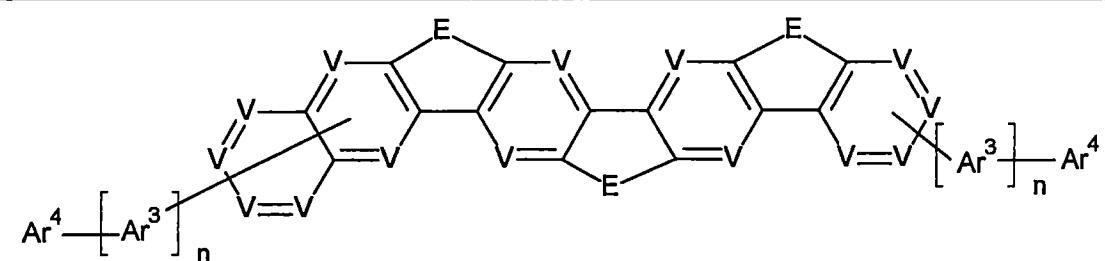
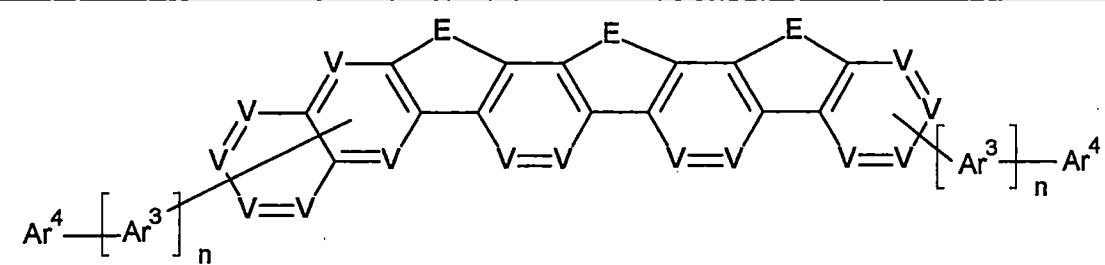
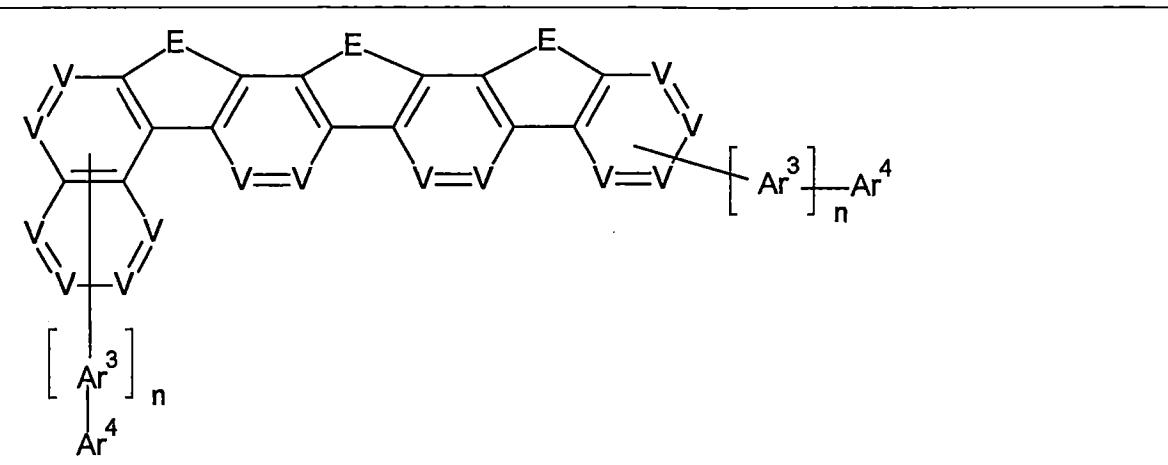
式(1-1-10)

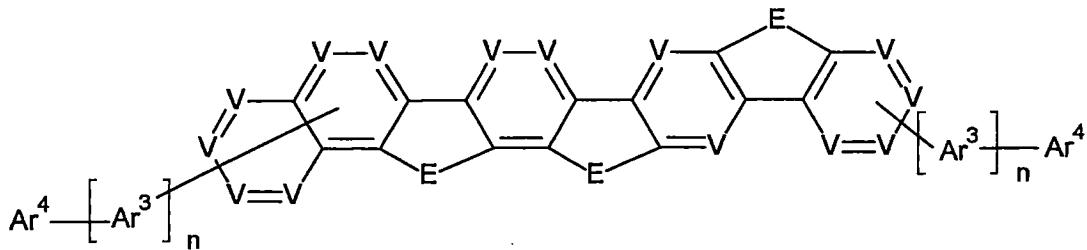


式(1-1-11)

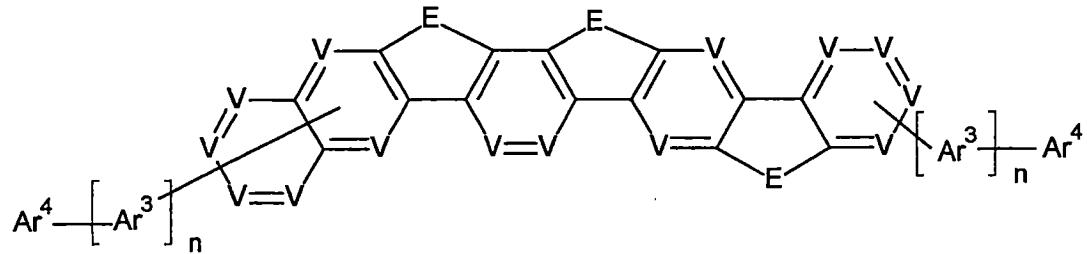


式(1-2-1)





式(1-2-6)

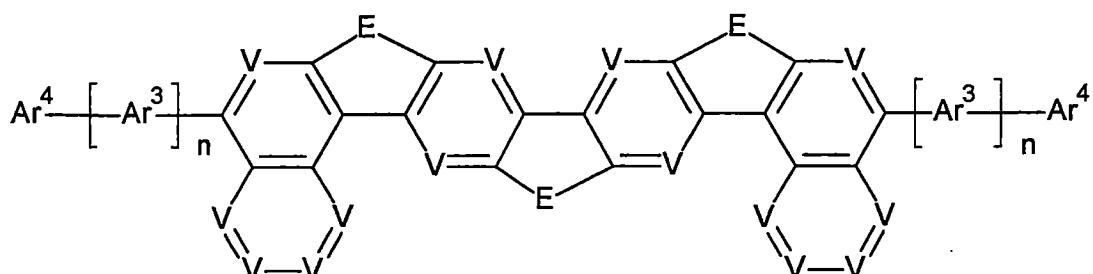


式(1-2-7)

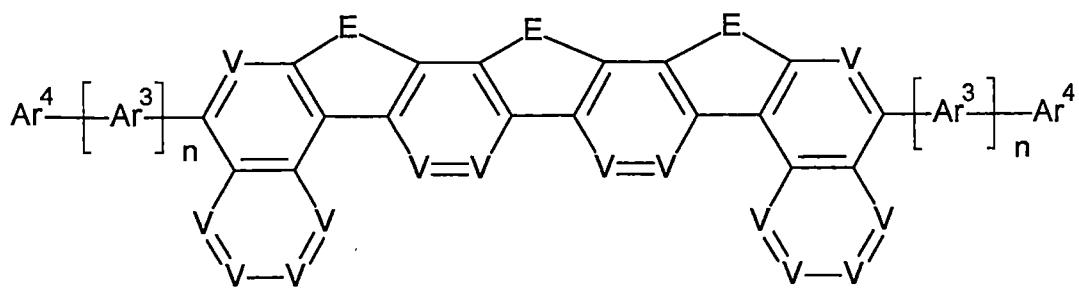
其中符號 E、 $\text{Ar}^3$ 、 $\text{Ar}^4$  及標號 n 具有如請求項 1 中之相同意義且符號 V 具有如請求項 4 中之相同意義。

### 【第 6 項】

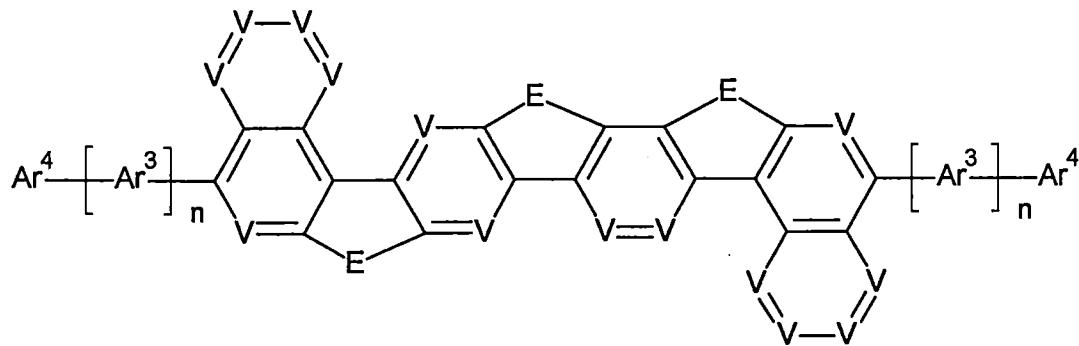
如請求項 1 或 2 之化合物，其中，該式(1)化合物係選自式(1-1-1-a)至(1-1-11-a)及(1-2-1-a)至(1-2-7-a)化合物，



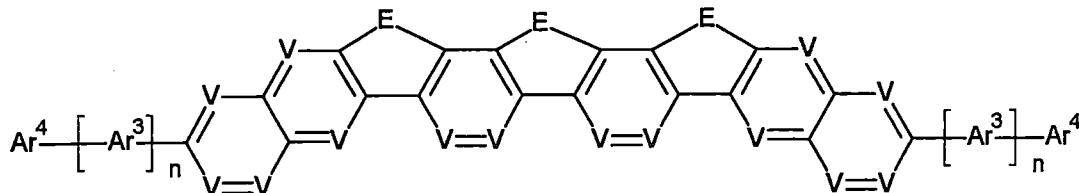
式(1-1-1-a)



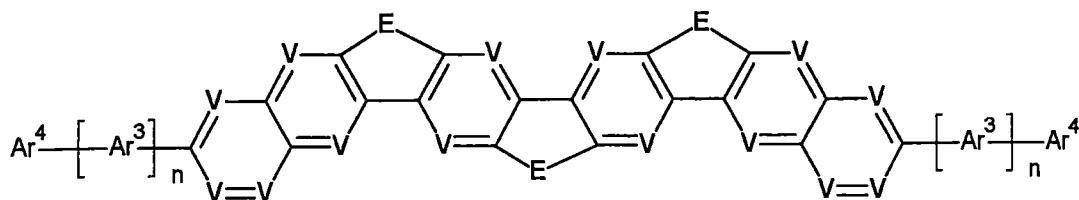
式(1-1-2-a)



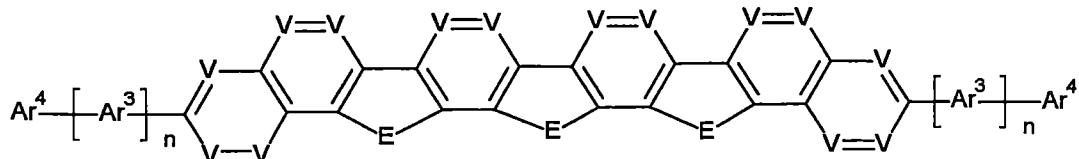
式(1-1-3-a)



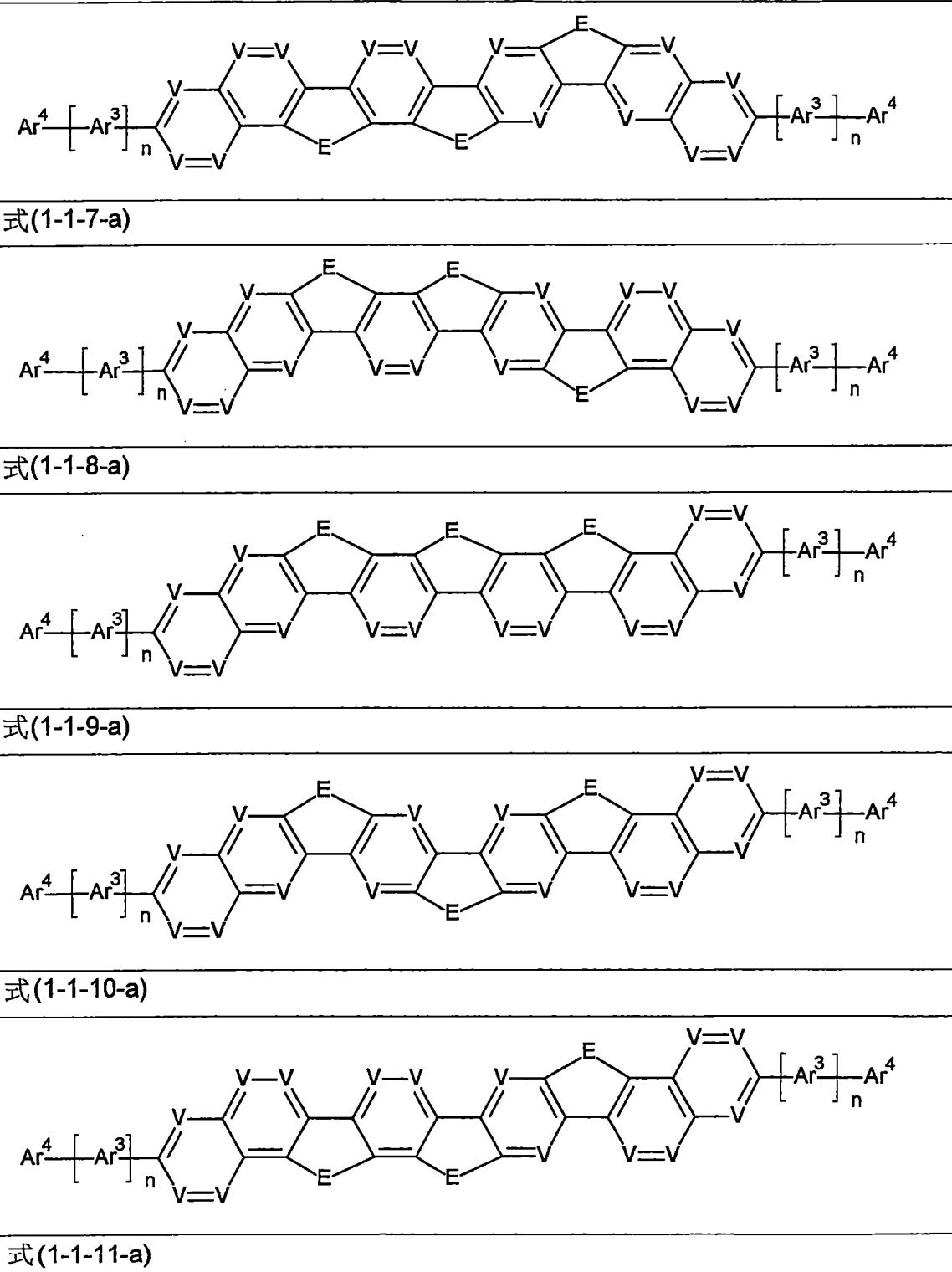
式(1-1-4-a)

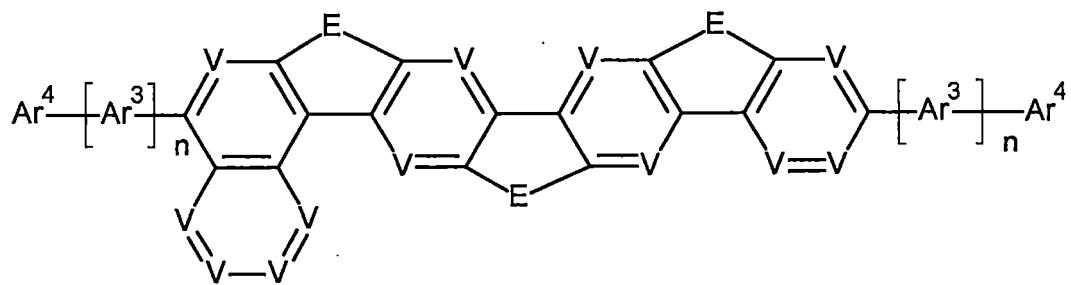


式(1-1-5-a)

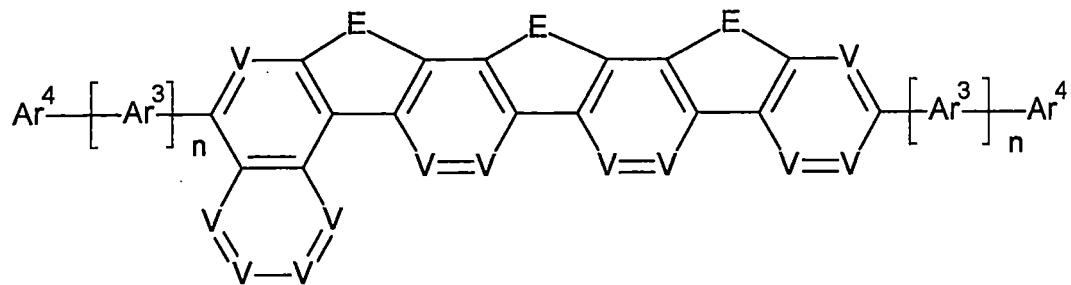


式(1-1-6-a)

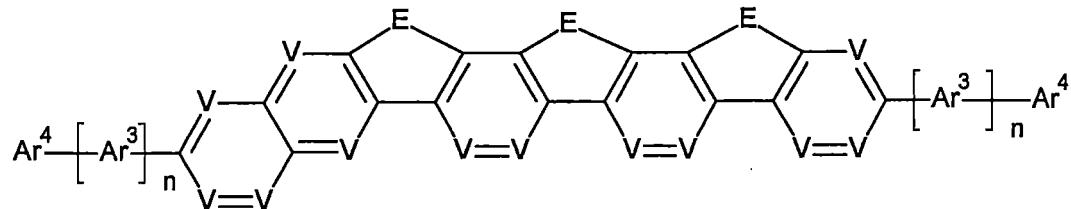




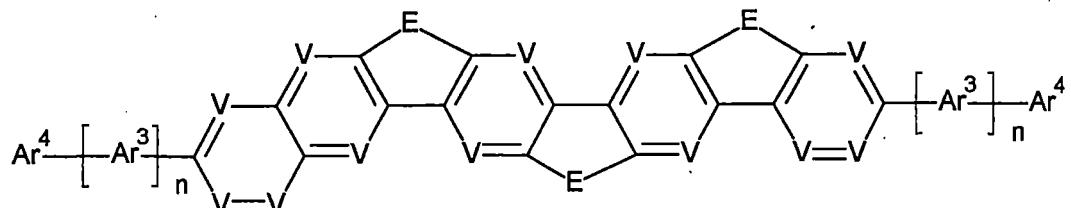
式(1-2-1-a)



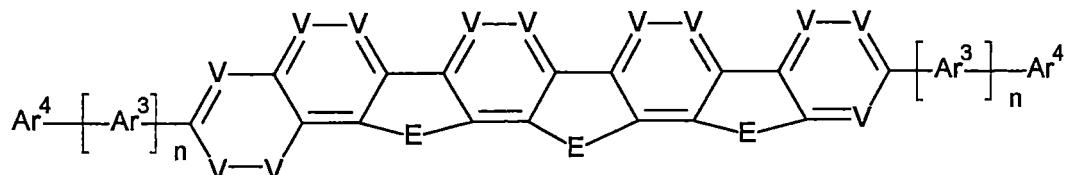
式(1-2-2-a)



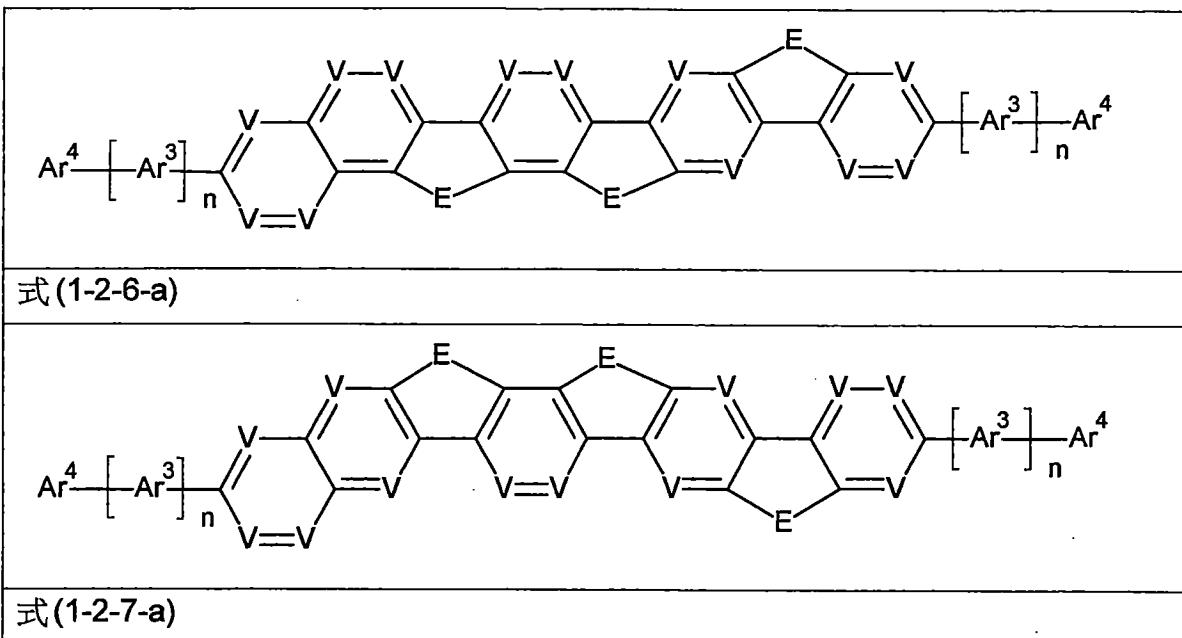
式(1-2-3-a)



式(1-2-4-a)



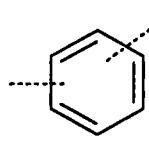
式(1-2-5-a)



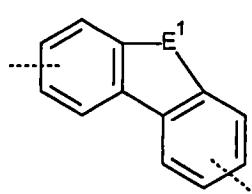
其中符號 E、 $\text{Ar}^3$ 、 $\text{Ar}^4$  及標號 n 具有如請求項 1 中之相同意義且符號 V 具有如請求項 4 中之相同意義。

### 【第 7 項】

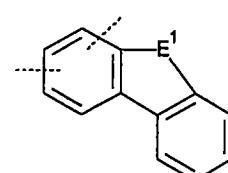
如請求項 1 或 2 之化合物，其中， $\text{Ar}^3$  係選自式(Ar3-1)至(Ar3-25)之一者，



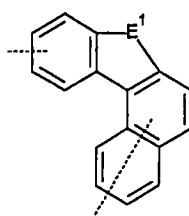
(Ar3-1)



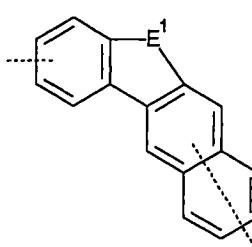
(Ar3-2)



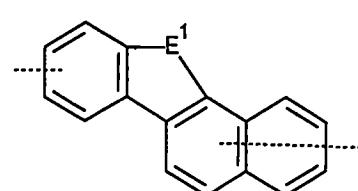
(Ar3-3)



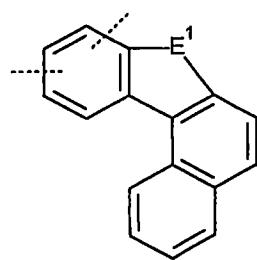
(Ar3-4)



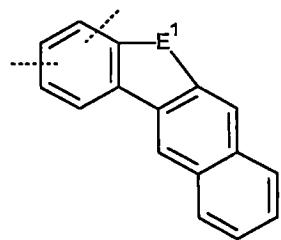
(Ar3-5)



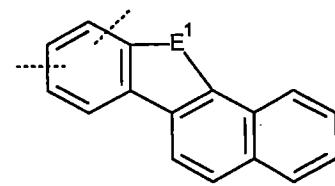
(Ar3-6)



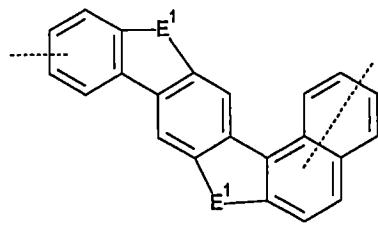
(Ar3-7)



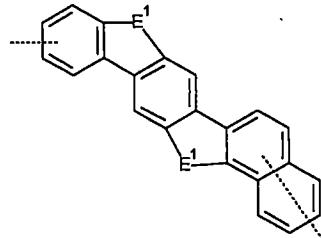
(Ar3-8)



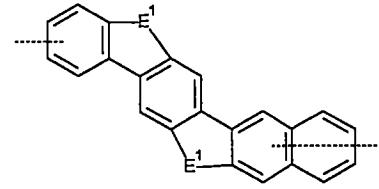
(Ar3-9)



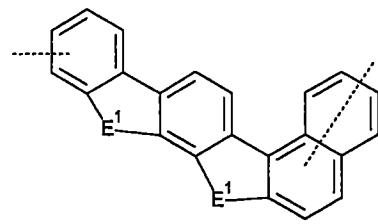
(Ar3-10)



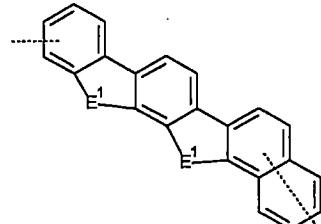
(Ar3-11)



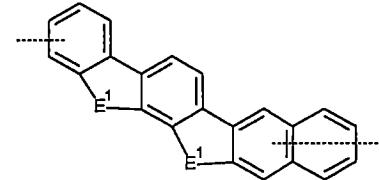
(Ar3-12)



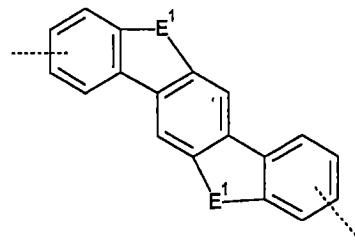
(Ar3-13)



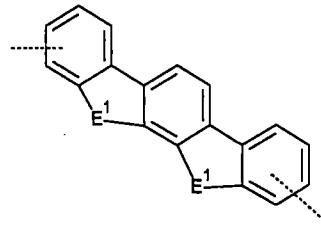
(Ar3-14)



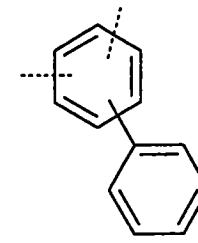
(Ar3-15)



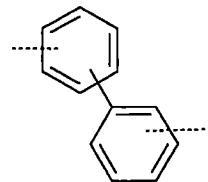
(Ar3-16)



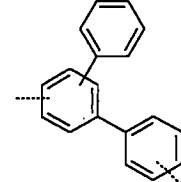
(Ar3-17)



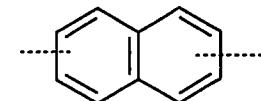
(Ar3-18)



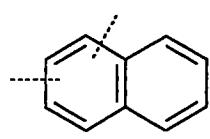
(Ar3-19)



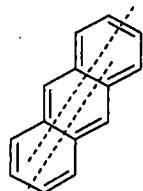
(Ar3-20)



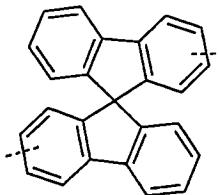
(Ar3-21)



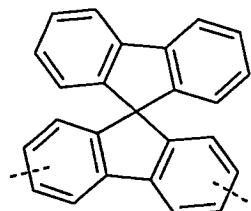
(Ar3-22)



(Ar3-23)



(Ar3-24)



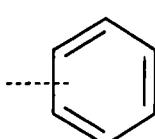
(Ar3-25)

其中虛線鍵指出與  $\text{Ar}^1$  及與  $\text{Ar}^3$  或  $\text{Ar}^4$  基之鍵結且式 (Ar3-1) 至 (Ar3-25) 之基可在各有空位置經  $\text{R}^1$  基取代， $\text{R}^1$  具有如請求項 1 中之相同意義且其中

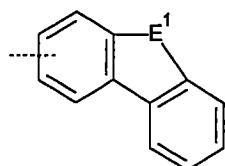
$\text{E}^1$  係選自  $-\text{B}(\text{R}^0)^{-}$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2^{-}$ 、 $-\text{C}(\text{R}^0)_2-\text{C}(\text{R}^0)_2^{-}$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^0)_2^{-}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})^{-}$ 、 $-\text{C}(=\text{NR}^0)^{-}$ 、 $-\text{C}=(\text{C}(\text{R}^0))_2^{-}$ 、 $-\text{O}^{-}$ 、 $-\text{S}^{-}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})^{-}$ 、 $-\text{SO}_2^{-}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^0)^{-}$ 、 $-\text{P}(\text{R}^0)^{-}$  及  $-\text{P}((=\text{O})\text{R}^0)^{-}$ ，其中  $\text{R}^0$  取代基具有如請求項 1 中之相同意義。

### 【第 8 項】

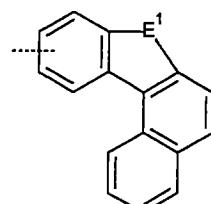
如請求項 1 或 2 之化合物，其中， $\text{Ar}^4$  係選自式 (Ar4-1) 至 (Ar4-27) 之一者，



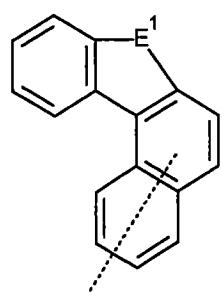
(Ar4-1)



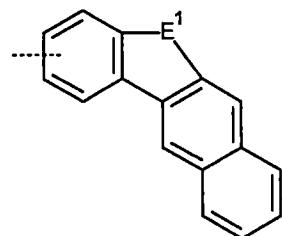
(Ar4-2)



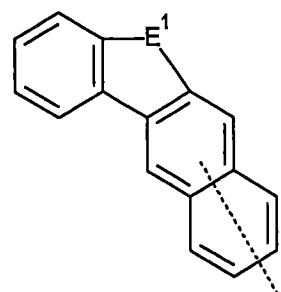
(Ar4-3)



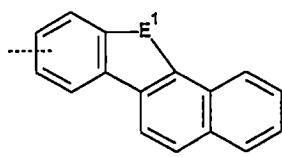
(Ar4-4)



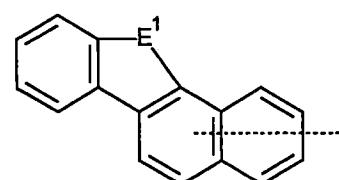
(Ar4-5)



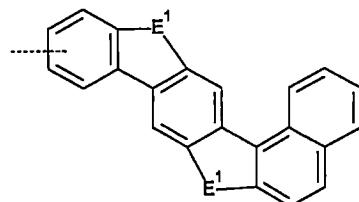
(Ar4-6)



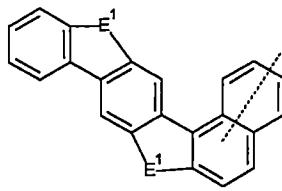
(Ar4-7)



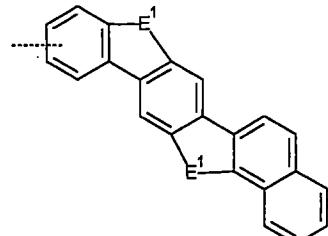
(Ar4-8)



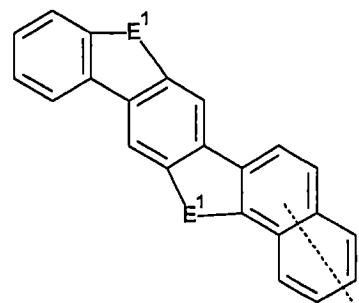
(Ar4-9)



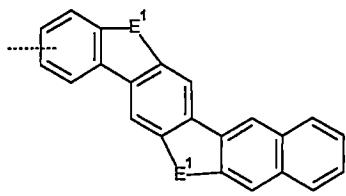
(Ar4-10)



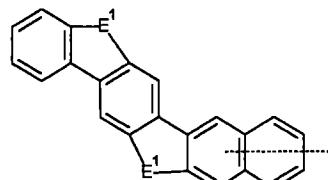
(Ar4-11)



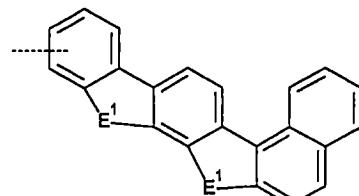
(Ar4-12)



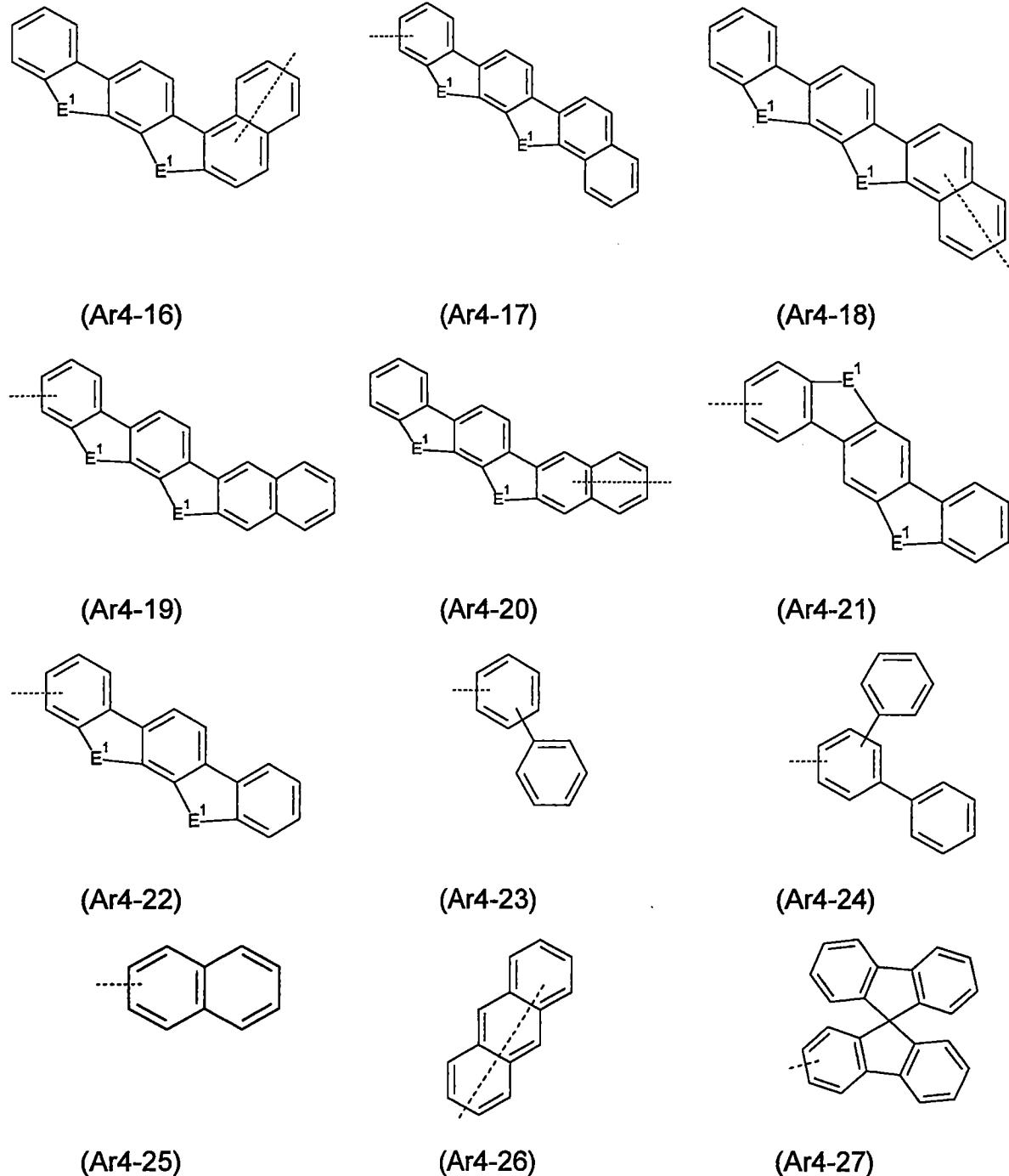
(Ar4-13)



(Ar4-14)



(Ar4-15)

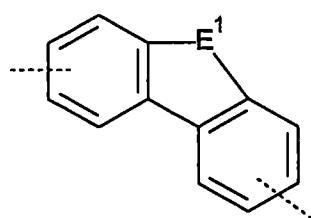


其中虛線鍵指出與  $\text{Ar}^3$  之鍵結且其中  $\text{E}^1$  具有如請求項 7 中之相同意義，及式 (Ar4-1) 至 (Ar4-27) 之基可在各有空位置經  $\text{R}^1$  基取代， $\text{R}^1$  具有如請求項 1 中之相同意義。

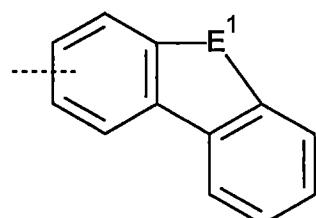
### 【第 9 項】

如請求項 1 或 2 之化合物，其中，至少一個  $\text{Ar}^3$  基表示

式(Ar3-2)之基及/或至少一個Ar<sup>4</sup>基表示式(Ar4-2)之基，



(Ar3-2)



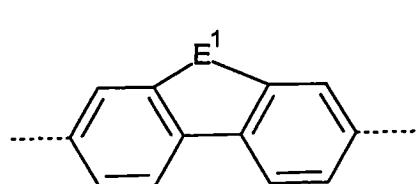
(Ar4-2)

其中

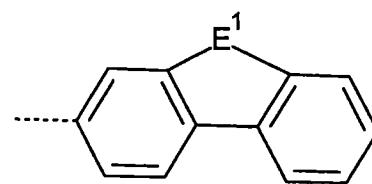
- 式(Ar3-2)中之虛線鍵指出與Ar<sup>1</sup>及與Ar<sup>3</sup>或Ar<sup>4</sup>基之鍵結；
- 式(Ar4-2)中之虛線鍵指出與Ar<sup>3</sup>之鍵結；
- E<sup>1</sup>具有如請求項7中之相同意義；及
- 式(Ar3-2)及(Ar4-2)之基可在各有空位置經R<sup>1</sup>基取代，R<sup>1</sup>具有如請求項1中之相同意義。

#### 【第10項】

如請求項1或2之化合物，其中，至少一個Ar<sup>3</sup>基表示式(Ar3-2-1)之基及/或至少一個Ar<sup>4</sup>基表示式(Ar4-2-1)之基



(Ar3-2-1)



(Ar4-2-1)

其中

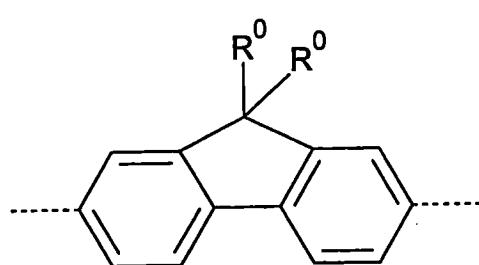
- 式(Ar3-2-1)中之虛線鍵指出與Ar<sup>1</sup>及與Ar<sup>3</sup>或Ar<sup>4</sup>基之鍵結；
- 式(Ar4-2-1)中之虛線鍵指出與Ar<sup>3</sup>之鍵結；

-E<sup>1</sup>具有如請求項7中之相同意義；及

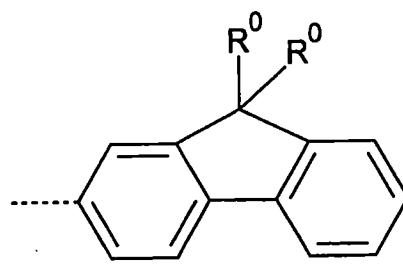
-式(Ar3-2-1)及(Ar4-2-1)之基可在各有空位置經R<sup>1</sup>基取代，R<sup>1</sup>具有如請求項1中之相同意義。

### 【第11項】

如請求項1或2之化合物，其中，至少一個Ar<sup>3</sup>基表示式(Ar3-2-1b)之基及/或至少一個Ar<sup>4</sup>基表示式(Ar4-2-1b)之基



式 (Ar3-2-1b)



式 (Ar4-2-1b)

其中

-式(Ar3-2-1b)中之虛線鍵指出與Ar<sup>1</sup>及與Ar<sup>3</sup>或Ar<sup>4</sup>基之鍵結；

-式(Ar4-2-1b)中之虛線鍵指出與Ar<sup>3</sup>之鍵結；

-R<sup>0</sup>具有如請求項1中之相同意義；及

-式(Ar3-2-1b)及(Ar4-2-1b)之基可在各有空位置經R<sup>1</sup>基取代，R<sup>1</sup>具有如請求項1中之相同意義。

### 【第12項】

如請求項1或2之化合物，其中E及E<sup>1</sup>每次出現時相同或不同地選自-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-、-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-、-O-、-S-及-N(R<sup>0</sup>)-。

### 【第13項】

如請求項1或2之化合物，其中E表示 $-C(R^0)_2-$ 。

#### 【第14項】

如請求項1或2之化合物，其中 $R^0$ 每次出現時相同或不同地表示H；D；F；CN； $Si(R^2)_3$ ；具有1至10個C原子之直鏈烷基或具有3至10個C原子之分支或環狀烷基，其之各者可經一或多個 $R^2$ 基取代，其中在各情況下一或多個H原子可經F置換；或具有5至40個芳族環原子之芳基或雜芳基，其在各情況下可經一或多個 $R^2$ 基取代，其中兩個相鄰 $R^0$ 取代基可形成單環或多環之脂族環系統或芳族環系統，其可經一或多個 $R^2$ 基取代。

#### 【第15項】

一種含有一或多種如前述請求項中一或多項之化合物之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中與該聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物之鍵結可位在經 $R^1$ 取代之式(1)中的任何所欲位置。

#### 【第16項】

一種製劑，其包含至少一種如請求項1至14中一或多項之化合物或至少一種如請求項15之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物及至少一種溶劑。

#### 【第17項】

一種電子裝置，其包含至少一種如請求項1至14中一或多項之化合物或至少一種如請求項15之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，該電子裝置係選自由有機電致發光裝置、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、染料敏化有機太陽能電池、有機光學偵檢器、有機光接收器、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發光裝置所組成群組。

**【第18項】**

如請求項16之電子裝置，其係有機電致發光裝置，其中如請求項1至14中一或多項之化合物或如請求項15之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物係作為螢光發光體或作為螢光發光體之基質材料使用。