

發明專利說明書

200421933

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※ 申請案號：92128864

※ 申請日期：92.10.17

※IPC 分類：H05B33/20

壹、發明名稱：(中文/英文)

用於有機電子裝置之電子傳遞劑

ELECTRON TRANSPORT AGENTS FOR ORGANIC ELECTRONIC
DEVICES

貳、申請人：(共 1 人)

姓名或名稱：(中文/英文)

美商 3M 新設資產公司

3M INNOVATIVE PROPERTIES COMPANY

代表人：(中文/英文)

卡洛林 A. 貝提斯

CAROLYN A. BATES

住居所或營業所地址：(中文/英文)

美國明尼蘇答州聖保羅市 3M 中心

3M CENTER, SAINT PAUL, MINNESOTA 55144-1000, U.S.A.

國籍：(中文/英文)

美國 U.S.A.

參、發明人：(共 4 人)

姓 名：(中文/英文)

1. 詹姆士 葛高瑞 班森
JAMES GREGORY BENTSEN
2. 尼可拉斯 菲利普 高普蘭
NICHOLAS PHILLIP GOPLEN
3. 李穎波
YINGBO LI
4. 拉夫 朗尼 羅伯特
RALPH RODNEY ROBERTS

住居所地址：(中文/英文)

1. 美國明尼蘇答州聖保羅市郵政信箱 33427 號
POST OFFICE BOX 33427, ST. PAUL, MINNESOTA
55133-3427, U.S.A.
2. 美國明尼蘇答州聖保羅市郵政信箱 33427 號
POST OFFICE BOX 33427, ST. PAUL, MINNESOTA
55133-3427, U.S.A.
3. 美國明尼蘇答州聖保羅市郵政信箱 33427 號
POST OFFICE BOX 33427, ST. PAUL, MINNESOTA
55133-3427, U.S.A.
4. 美國明尼蘇答州聖保羅市郵政信箱 33427 號
POST OFFICE BOX 33427, ST. PAUL, MINNESOTA
55133-3427, U.S.A.

國 籍：(中文/英文)

1. 美國 U.S.A.
2. 美國 U.S.A.
3. 中國 PEOPLE'S REPUBLIC OF CHINA
4. 英國 UNITED KINGDOM

肆、聲明事項：

本案係符合專利法第二十條第一項第一款但書或第二款但書規定之期間，其日期為： 年 月 日。

本案申請前已向下列國家（地區）申請專利：

1. 美國；2003年04月15日；10/413,653
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

主張國際優先權(專利法第二十四條)：

【格式請依：受理國家（地區）；申請日；申請案號數 順序註記】

1. 美國；2003年04月15日；10/413,653
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

主張國內優先權(專利法第二十五條之一)：

【格式請依：申請日；申請案號數 順序註記】

- 1.
- 2.

主張專利法第二十六條微生物：

國內微生物 【格式請依：寄存機構；日期；號碼 順序註記】

國外微生物 【格式請依：寄存國名；機構；日期；號碼 順序註記】

熟習該項技術者易於獲得，不須寄存。

玖、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明有關一種化合物、組合物、有機電子裝置、及製備有機電子裝置之方法。本發明尤其有關可於有機電子裝置諸如有機電致發光裝置中作為電子傳遞劑之化合物及組合物。

【先前技術】

有機電致發光(OEL)裝置，諸如有機發光二極體(OLED)，因為外型薄、重量輕、可得到各式各樣之發光色彩、且驅動電壓低，而被期望使用於電子媒體中。OLED具有使用於諸如圖形之背照光、像素化之顯示器、及大型發光圖形應用中之潛力。

目前仍持續研究發展適用於該等裝置之電致發光材料、電活性材料、及電荷傳遞材料，及該裝置之製造方法。在某些情況下，可選擇或發展有助於此等裝置製備方法中之一或多種的材料。已有人提出一種使材料自施體片按照圖型地熱轉移至受體基材，來形成OEL裝置的方法。顯然使有機發光劑進行選擇性熱轉移，以形成有機電致發光裝置的方法特別有效。

分子噁二唑及三唑衍生物已於OLED裝置中作為電子傳遞/電洞阻隔材料。一般使用之一種噁二唑衍生物係為2-(4-聯苯)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(PBD)。一般使用之一種三唑衍生物係為3-(4-聯苯基)-4-苯基-5-(4-第三丁基苯基)1,2,4-三唑(TAZ)。然而，採用PBD或TAZ之OLED裝置經

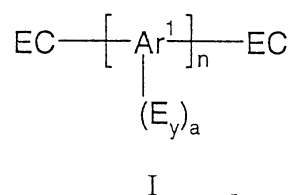
常因為PBD或TAZ之再結晶或形成聚集體，導致相分離及形成抑制發光之電荷載子陷阱，而具有較短之工作壽命。

在摻合聚合物系統中用以解決此等問題之研究中，記載數種基團將電子傳遞結構(諸如PBD)鍵結於可撓性聚合物鏈，產生非晶形材料。例如，已記載有具有喹二唑側鏈之聚甲基丙烯酸甲酯。然而，已發現因為PBD聚集導致以此等材料為底質之裝置的工作壽命皆極短(例如參照Strukelj等，Science, 267, 1969, (1995))。

【發明內容】

本發明有關一種組合物、組合物、有機電子裝置、及製備有機電子裝置之方法。本發明尤其有關一種含有伸芳基之化合物及組合物，該伸芳基係具有包括-C=N-單元之側鏈雜芳基。該化合物可於有機電子裝置(諸如有機電致發光裝置)中作為電子傳遞劑。

本發明一方面提出一種具有通式I之化合物，其具有一芳族核心及兩個輻合於該芳族核心之末端封端基團：



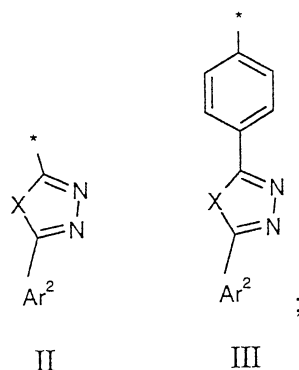
其中

各Ar¹個別係為伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基及其組合之基團

所取代；

各 a 個別係為 1 或 2；

各 E_y 個別係為具有通式 II 或通式 III 之結構：



各 X 個別係為 O、S 或 NR¹，其中 R¹ 係為烷基、芳基、雜芳基、雜烷基、或其組合；

各 Ar² 個別係為碳環芳基，其未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、烷基嘓二唑基、芳基嘓二唑基、烷基三唑基、芳基三唑基、二芳基胺基、芳基二芳胺基、及其組合之基團所取代；

各星號(-*)係表示該化合物中一鍵結相對於另一基團的位置；

n 係為等於 1 或 2 之整數；且

各末端封端基團 (EC) 個別係為碳環芳基、雜芳基、或三級胺基芳基，其係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代，其中是通式 II 或通式 III 之基團的 EC 不多於一個。

本發明另一方面提出一種組合物，其包括通式I之化合物，且結合有至少一種係為電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、發光材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物之其他化合物。

本發明另一方面提出一種包括通式I化合物之有機電子裝置。在部分具體實例中，該有機電子裝置係為有機電致發光裝置。

此外，本發明提出一種製造有機電致發光裝置之方法。該方法係包括(1)製備一施體片，其包括含有通式I化合物之轉移層，及(2)將該轉移層轉移至受體基材之表面上。

前述發明內容並未描述本發明所揭示之各個具體實例或每一實施過程。以下圖式及實施方式則更詳細地例證此等具體實例。

【實施方式】

定義

本發明所使用之「一(a)」、「一(an)」及「該(the)」等辭係可與「至少一」交換使用，表示描述一或多個要素。

本發明所使用之「活性」一辭，在使用於化合物時，係表示該化合物可傳遞電洞、傳遞電子、參與電子/電洞重組、發光、或其組合。

本發明所使用之「非晶形」一辭係表示非結晶且在自溶劑取出時不結晶之化合物或組合物。

本發明所使用之「烷基」一辭係同時包括未經取代或經取代之直鏈、分支鏈及環狀烷基。該烷基一般係具有1至約

30個碳原子。在部分具體實例中，該烷基係含有1至約20個或1至約10個碳原子。烷基實例係包括(但不限於)甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、第三丁基、異丙基、異丁基、正辛基、正庚基、及乙基己基。

本發明所使用之「烯基」一辭係表示具有一或多個脂族碳-碳雙鍵之直鏈、分支鏈或環狀烯的單價基團，同時包括未經取代或經取代之烯基。該烯基一般包括2至約30個碳原子。部分具體實例中，該烯基係含有2至約20個或2至約10個碳原子。烯基之實例係包括(但不限於)正辛-3-烯基及正庚-6-烯基。該烯基可具有交替之碳-碳雙鍵及單鍵。例如，該烯基可為在各個碳-碳雙鍵之間具有碳-碳單鍵之二烯或三烯。

本發明所使用之「伸烷基」係同時包括直鏈、分支鏈、及環狀二價烴基，且同時包括未經取代及經取代之伸烷基。該伸烷基一般係包括最多約30個碳原子。部分具體實例中，該伸烷基含有最多約20個或最多約10個碳原子。本發明所使用之「伸烷基」的實例係包括(但不限於)亞甲基、伸乙基、伸丙基、伸丁基、及伸異丙基，及其類者。

本發明所使用之「烷氧基」一辭係表示烷基上連接有氧原子之基團。該烷氧基一般係具有1至約30個碳原子。部分具體實例中，該烷氧基係含有1至約20個或1至約10個碳原子。實例係包括甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基、及其類者。烷氧基係為雜烷基之亞群。烷氧基可未經取代或經取代。

本發明所使用之「芳族」一辭係兼指碳環芳族化合物或基團及雜芳族化合物或基團。碳環芳族化合物係為芳族環結構中僅含有碳原子之化合物。雜芳族化合物係為芳族環結構中含有至少一個選自S、O、N及P之雜原子的化合物。

本發明所使用之「芳基」係表示具有一至十個環、多重稠合環、或其組合物的單價不飽和芳族碳環基團。即，芳基係為碳環芳族化合物之單價基團。部分具體實例中，芳基係具有最多10個環、最多8個環、最多6個環、最多4個環、最多3個環、最多2個環、或一芳族環。該芳基可含有(例如)最多約60、最多約50、最多約40、最多約30或最多約20個碳原子。芳基之實例係包括(但不限於)苯基、聯苯基、聯三苯基、蔥基(anthryl)、萘基、芘基、菲基、二氫菲基、蔥基(anthracenyl)、蒾基、9-矽雜蒾基、四氫芘基、芘基、螺雙蒾基、螢蔥基、芘基、二氫芘基、四氫芘基、紅螢烯基、蒎基、5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥基、6,12-二氫茚并[1,2-b]蒾基、5,12-二氫-6H-茚并[1,2-b]菲基、二氫菲基、及苯并[g,h,i]芘基。

本發明所使用之「伸芳基」係表示具有一至十個環、多重稠合環、或其組合物之二價不飽和芳族碳環基團。即，一伸芳基係為碳環芳族化合物之二價基團。部分具體實例中，該伸芳基係具有最多8環、最多6環、最多4環、最多3環、最多2環、或一芳族環。部分實例中，該伸芳基係含有最多60碳原子、最多50碳原子、最多40碳原子、最多30碳原子、或最多20碳原子。伸芳基之實例係包括(但不限於)

苯、萘基、蒽、菲、蔥、萸、9-矽雜萸、螢蔥、苯并蒽、芳族克瑞烯(corene)、二氫菲、四氫蒽、蒽、螺雙萸、蒽、紅螢烯、及蒞。伸芳基之特例係包括苯-1,3-二基、苯-1,4-二基、萘-2,7-二基、萘-2,6-二基、萘-1,4-二基、萘-1,5-二基、蒽-二基、菲-3,8-二基、5,6-二氫菲-3,8-二基、4,5,9,10-四氫蒽-2,7-二基、蒽-2,7-二基、萸-2,7-二基、9-矽雜萸-2,7-二基、蔥-9,10-二基、蒽-3,9-二基、蒽-3,10-二基、螺雙萸-二基、5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥-3,10-二基、螢蔥-二基、紅螢烯-二基、蒞-二基、苯并[g,h,I]蒽-二基、及其類者之二價基團。

本發明所使用之「芳氧基」係表示具有連接於芳基之氧原子的基團。實例係包括(但不限於)苯氧基。

以下任何通式中之星號(-*)皆係表示分子中之一鍵結相對於另一基團的位置。

本發明所使用之「碳環」一辭係表示由碳原子形成之環。該環結構中不含雜原子。

本發明所使用之「縮合多環伸芳基」一辭係為伸芳基之亞群，表示具有3至約10個稠合環之二價伸芳基。部分具體實例中，該縮合多環伸芳基含有最多約8稠合環、最多約6稠合環、最多約4稠合環或3稠合環。縮合多環伸之實例係包括(但不限於)菲、蔥、螢蔥、蒽、蒽、苯并蒽、紅螢烯、蒞、芳族可瑞烯(corene)及其類者之二價基團。

本發明所使用之「共軛」表示具有至少兩個碳-碳雙鍵或參鍵之不飽和化合物，其含有交替之碳-碳單鍵與碳-碳雙鍵

或參鍵。相同地，「非共軛」表示非共軛之不飽和化合物。例如，未共軛芳族基團係具有兩個或多個將交替之碳-碳單鍵與碳-碳雙鍵或參鍵截開之碳-碳單鍵。

本發明所使用之「電活性」係表示傳遞電洞、傳遞電子、或參與電子/電洞重組之化合物。

本發明所使用之「電化學安定性」係表示對電化學降解具安定性，故有關之任何氧化及/或還原反應皆係可逆。

本發明所使用之「氟烷基」係表示有至少一氫原子被氟原子所取代的烷基。

本發明所使用之「雜烷基」係同時包括直鏈、分支鏈、及環狀烷基，其具有一或多個個別選自S、O、N、P或Si之雜原子來取代碳原子。該雜烷基一般係含有1至約30個碳原子，且可具有最多達10個雜原子。部分具體實例中，該雜烷基係含有1至約20或1至約10個碳原子。烷氧基少為雜烷基之一亞群。雜烷基之實例係包括(但不限於)甲氧基、乙氧基、丙氧基、3,6-二氧雜庚基、3-(三甲基甲矽烷基)-丙基、具有通式 $-O(C_mH_{2m}O)_y-$ 之片段的聚(氧伸烷基)基團(其中m係為1至6之整數，且y係為2至20之整數)、及具有通式 $-[Si(C_wH_{2w+1})_2O]_y-$ 之片段的聚(二烷基矽氧烷)基團(其中w係為1至10之整數且y係為2至20之整數)。

本發明所使用之「雜芳基」一辭係表示具有五至七員芳族環之單價基團，該環中包括一或多個個別選自S、O、N及P之雜原子。即，雜芳基係為雜芳族化合物之單價基團。該題芳基環可稠合於一或多個環，且含有一至約10個選自

其他雜環、雜芳基環、芳基環、環烯基環、環烷基環、及其組合物的其他環。部分具體實例中，該雜芳基係具有最多達8個其他環、最多6個其他環、最多4個其他環、最多3個其他環、最多2個其他環、或一其他環。該雜芳基一般含有最高達約60個碳原子。部分具體實例中，該雜芳基含有最高達約50個碳原子、最高達約40個碳原子、最高達約30個碳原子、或最高達約20個碳原子。雜芳基之實例係包括(但不限於)呋喃基、噻吩基、吡咯基、咪唑基、吡唑基、三唑基、四唑基、噻唑基、嘔唑基、異嘔唑基、嘔二唑基、噻二唑基、異噻唑基、吡啶基、噻吡基、嘔吡基、噻啉基、異噻啉基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、吲哚基、呋唑基、苯并嘔唑基、苯并噻唑基、苯并咪唑基、噌啉基、噻啉基、噻嘔啉基、酞吡基、苯并噻二唑基、苯并三吡基、吩吡基、菲啶基、吡啶基、及吲哚基、矽羅(siloles)、及其類者。

本發明所使用「具有-C=N-單元之雜芳基」係為雜芳基之亞群，表示在至少一雜芳族環中具有-C=N-單元的雜芳基。適當之實例包括(但不限於)嘔二唑基、N-經取代-三唑基、N-經取代咪唑基、N-經取代吡唑基、嘔唑基、異嘔唑基、噻唑基、異噻唑基、吡啶基、噻吡基、嘔吡基、吡吡基、三吡基、四吡基、苯并嘔唑基、苯并噻唑基、苯并噻二唑基、噻啉基、異噻啉基、噌啉基、噻啉基、噻嘔啉基、酞吡基、苯并三吡基、吩吡基、菲啶基、吡啶基、及其類者。

苯并[1,2,5]噻二唑-4,7-二基、1,3-噻唑-2,5-二基、吡啶-2,4-二基、吡啶-2,3-二基、吡啶-2,5-二基、嘧啶-2,4-二基、喹啉-2,3-二基、1,1-二烷基-1H-矽羅-2,5-二基、及其類者。

本發明所使用之「具有-C=N-單元之伸雜芳基」係為伸雜芳基之亞群，表示在至少一雜芳族環中具有-C=N-單元之伸雜芳基。具有-C=N-單元之伸雜芳基的實例係包括(但不限於)喹二唑、N-經取代-三唑、N-經取代-咪唑、N-經取代吡唑、喹唑、異喹唑、噻唑、異噻唑、吡啶、噻吡、嘧啶、吡吡、三吡、四吡、苯并喹唑、苯并噻唑、苯并噻二唑、喹啉、異喹啉、噌啉、喹啉、喹喹啉、酞吡、苯并三吡、吩吡、菲啶、吡啶、及其類者之二價基團。

本發明所使用之「富含電子的伸雜芳基」係為伸雜芳基之亞群，表示可自雜原子貢獻電子密度給 π 鍵結系統的伸雜芳基。適當實例係包括二芳基矽烷醇、噻吩、聯噻吩、咪喃、N-烷基吡唑、N-芳基吡唑、N-烷基吡咯、N-芳基吡咯、及其類者之二價基團。

當本發明使用「非活性」時，係指化合物非電活性、非電致發光或其組合。

本發明所使用之「萘基芳基」係為芳基之亞群，表示具有稠合萘環結構之單價不飽和芳族碳環基團。未經取代之萘基芳基具有兩個稠合芳族環。萘基芳基實例係包括萘-2-基、萘-1-基、萘-7-基、萘-6-基、萘-4-基、萘-5-基、萘基及其類者。

本發明所使用之「萘基伸芳基」係為伸芳基亞群，表示

具有稠合萘環結構之二價不飽和芳族碳環基團。未經取代之萘基伸芳基具有兩個碳環芳族環。萘基伸芳基實例係包括(但不限於)萘-2,7-二基、萘-2,6-二基、萘-1,4-二基、萘-1,5-二基、茈-二基、及其類者。

本發明所使用之「全氟烷基」係表示所有氫原子皆被氟原子所取代之烷基。全氟烷基係為氟烷基之亞群。

本發明所使用之「伸苯基芳基」係為芳基之亞群，表示具有一、二或三個共軛苯環或伸苯環(例如苯基、聯苯、及聯三苯)之單價不飽和芳族碳環基團，該環視情況與伸烷基或經二取代之伸甲矽烷基(-Si(R)₂-)的二價基團稠合，其中R個別選自C₁₋₃₀烷基、C₂₋₃₀烯基、C₁₋₃₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、C₁₋₃₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基、氟、C₁₋₃₀氟烷基、C₁₋₃₀全氟烷基及其組合。未經取代之伸苯基芳基具有最多三個碳環芳族環。適當之伸苯基芳基實例係包括(但不限於)苯基、聯苯基、聯三苯基、5,6-二氫菲基、4,5,9,10-四氫芘基、萘基、9-矽雜萘基、螺雙萘基、6,12-二氫茚并[1,2-b]萘基、5,12-二氫-6H-茚并[1,2-b]菲基、5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蒽基、及其類者。

本發明所使用之「伸苯基伸芳基」係為伸芳基之亞群，表示具有一、二或三個共軛伸苯環(例如伸苯基、伸聯苯、及伸聯三苯)之二價不飽和芳族碳環基團，該環視情況與伸烷基或經二取代之伸甲矽烷基(-Si(R)₂-)的二價基團稠合，其中R個別選自C₁₋₃₀烷基、C₂₋₃₀烯基、C₁₋₃₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、C₁₋₃₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基、氟、C₁₋₃₀氟烷

基及C₁₋₃₀全氟烷基及其組合。未經取代之伸苯基伸芳基具有最多三個碳環芳族環。適當之伸苯基伸芳基實例係包括(但不限於)苯-1,3-二基、苯-1,4-二基、菲-3,8-二基、5,6-二氫菲-3,8-二基、4,5,9,10-四氫芘-2,7-二基、萸-2,7-二基、9-矽雜萸-2,7-二基、螺雙萸-2,7-二基、6,12-二氫茛并[1,2-b]萸-2,8-二基、5,12-二氫-6H-茛并[1,2-b]菲-3,10-二基、5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥-3,10-二基、及其類者。

本發明所使用之「小分子」表示非聚合之化合物(當有重現單元時，少於三個重現單元)。

本發明所使用之「溶液可加工」表示可溶解於溶液中之化合物或組合物。部分具體實例中，溶液可加工之化合物或組合物可自溶液塗覆成薄膜。其他具體實例中，該化合物或組合物之溶液可施加於基材上。例如，該溶液可印刷或塗覆於基材上。

本發明所使用之「取代基」一辭係表示烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、雜烷基、雜芳基、氟、氟烷基、全氟烷基、及其類者。通式I中各種基團皆可經例如一或多個選自C₁₋₃₀烷基、C₂₋₃₀烯基、C₁₋₃₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、C₁₋₃₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基、氟、C₁₋₃₀氟烷基及C₁₋₃₀全氟烷基的基團所取代。

本發明所使用之「三級芳族胺」一辭係表示一種具有一或多個三級氮中心而各氮中心係鍵結於三個芳族碳中心的分子化合物。三級芳族胺之實例係包括二芳基苯胺；烷基吡啶；芳基吡啶；及四芳基二胺，諸如例如N,N,N',N'-四芳

基聯苯胺、N,N,N',N'-四芳基-1,4-伸苯二胺、N,N,N',N'-四芳基-2,7-二胺基萸衍生物(諸如專利申請案EP 0 953 624 A1及EP 0 879 868 A2所教示)、N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(亦稱為TPD)、N,N'-雙(3-萘-2-基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(亦稱為NPB)、1,4-雙(吡啶基)聯苯(亦稱為CBP)、及其他四芳基二胺衍生物(諸如B.E. Koene等, Chem. Mater., 10, 2235-2250 (1998)、美國專利第5,792,557號、美國專利第5,550,290號及專利公告EP 0 891 121 A1所述);全芳基三胺衍生物,諸如美國專利第6,074,734號及專利申請案EP 0 827 367 A1所述;星芒胺衍生物,諸如4,4',4''-三(N,N-二芳基胺基)三苯胺及1,3,5-三(4-二芳基胺基苯基)苯、4,4',4''-三(N,N-二苯胺基)三苯基胺(亦稱為TDATA)、4,4',4''-三(N-3-甲基苯基-N-苯胺基)三苯基胺(亦稱為mTDATA);1,3,5-三(4-二苯胺基苯基)苯(TDAPBs);及其他樹枝狀及螺旋胺衍生物,如專利申請案EP 0 650 955 A1、Tokito等, Polym. Prep. (Am. Chem. Soc. Div. Polym. Chem.) 38(1), 388-389 (1997)、Tamake等, Chem. Commun., 2175-21761 (1996)及Tokito等, Appl. Inst. Phys., 70(15), 1929-1931 (1997)所教示。

本發明所使用之「三級芳族胺基芳基」一辭係表示前文定義之三級芳族胺之單價芳族環基團。

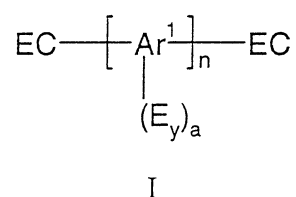
本發明所使用之「三級芳族胺基伸芳基」一辭係表示前文定義之三級芳族胺的二價不飽和芳族碳環基團。

化合物

本發明一方面提出一種具有一芳族核心及兩個軛合於該

芳族核心之末端封端基團 (EC)。該芳族核心含有一伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基具有包括 -C=N- 單元之側向雜芳基。該化合物可使用於有機電子裝置。例如，該化合物可於有機電子裝置 (諸如有機電致發光裝置) 中作為電子傳遞材料。

該化合物具有通式 I 之結構：

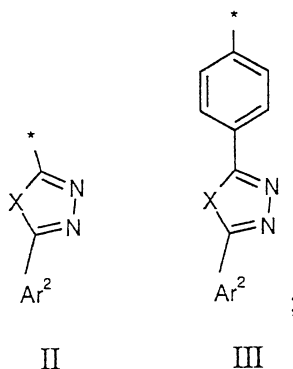


其中

各 Ar¹ 個別係為伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代；

各 a 個別係為 1 或 2；

各 E_y 個別係為具有通式 II 或通式 III 之結構：



各 X 個別係為 O、S 或 NR¹，其中 R¹ 係為烷基、芳基、雜芳

基、雜烷基、或其組合；

各 Ar^2 個別係為碳環芳基，此基未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、烷基嘔二唑基、芳基嘔二唑基、烷基三唑基、芳基三唑基、二芳胺基、芳基二芳胺基及其組合之基團所取代；

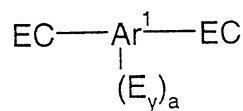
各星號(-*)係表示該化合物中一鍵結相對於另一基團的位置；

n 係為等於1或2之整數；且

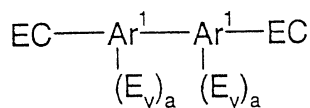
各末端封端基團(EC)個別係為碳環芳基、雜芳基或三級胺基芳基，此基未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代，其中係為通式II或通式III基團之EC不多於一個。

本發明所使用之「芳族核心」係表示通式I化合物不為末端封端基團的部分。該芳族核心可包括碳環伸芳基、伸雜芳基、三級芳族胺基伸芳基、及其組合。芳族核心一辭並非表示任何特定合成方法或合成順序。

通式I化合物可為具有通式IV或V之化合物：



IV



V

該末端封端基團(EC)可相同或相異。

該化合物可為溶液可加工且成形為用於有機電子裝置中之薄膜。部分具體實例中，該末端封端基團及芳族核心可選擇以提供非晶形化合物。

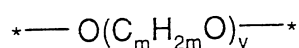
通式I化合物可於有機電子裝置中作為電子傳遞劑。該芳族核心含有至少一個具有-C=N-單元之雜芳基(即通式I中之 E_y)。-C=N-單元與碳-碳雙鍵比較係缺乏電子。部分具體實例中，該-C=N-單元可於該化合物上提供電子傳遞及電子注射性質。可選擇 Ar^1 基團及末端封端基團，以於該化合物上提供附加功能。例如，於部分具體實例中，該化合物可作為電子傳遞劑及電洞傳遞分子。其他具體實例中，該化合物可作為電子傳遞分子及發光分子。

安定性可位於 $Ar^1-(E_y)_a$ 基團、該末端封端基團或其組合物上。該取代基可選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合。部分具體實例中，該化合物係經 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、氟、 C_{1-30} 氟烷基、 C_{1-30} 全氟烷基、 C_{1-30} 雜烷基、 C_{3-30} 雜芳基、及其組合所取代。例如，該化合物可經 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基、及其組合所取代。

該取代基可促進(例如)該化合物於有機溶劑中之溶解度、該化合物與組合物中其他材料的相容性、溶液加工性、或其組合物性質。該取代基可修飾溶解度參數、修飾電離勢、

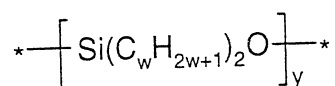
修飾電子親和勢、降低分子內或分子間相互作用(會產生不期望之發光)、或此等情況之任何組合。例如，取代基可幫助抑制該化合物在形成薄膜時的聚集及相分離狀況。

本發明化合物之部分具體實例中，取代基可包括具有通式 VI 之二價聚(氧伸烷基)軟性鏈段



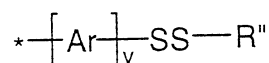
VI

或通式 VII 之二價聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段



VII

其中 m 係為 1 至 6 之整數，y 係為 2 至 20 之整數，且 w 係為 1 至 10 之整數。部分具體實例中，該聚(氧伸烷基)或聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段可連接於烷基、芳基或雜芳基。該取代基可(例如)具有通式 VIII



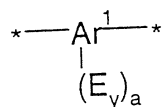
VIII

其中 SS 係為聚(氧伸烷基)或聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段，Ar 係為伸芳基，v 係為 0 或 1 之整數，且 R'' 係為芳基、雜芳基、或烷基。部分實施例中，R'' 係為立體受阻基團。具有通式 VIII 之基團可減少會產生不期望之激元或激態複合物發光的分子間或分子內結構之形成。

其他具體實例中，本發明化合物可經一或多個選自氟、 C_{1-30} 氟烷基、及 C_{1-30} 全氟烷基之基團所取代。此等取代基可改善該化合物之溶解度及薄膜形成性質，可增加該化合物之電離勢及電子親和勢，或其組合。具有增高之電離勢及電子親和勢之化合物在使用於有機電致發光裝置中時，較易於注射電子及阻隔電洞。氟、氟烷基或全氟烷基取代基亦可降低化合物之蒸氣壓，使其較易於進行氣相沉積。

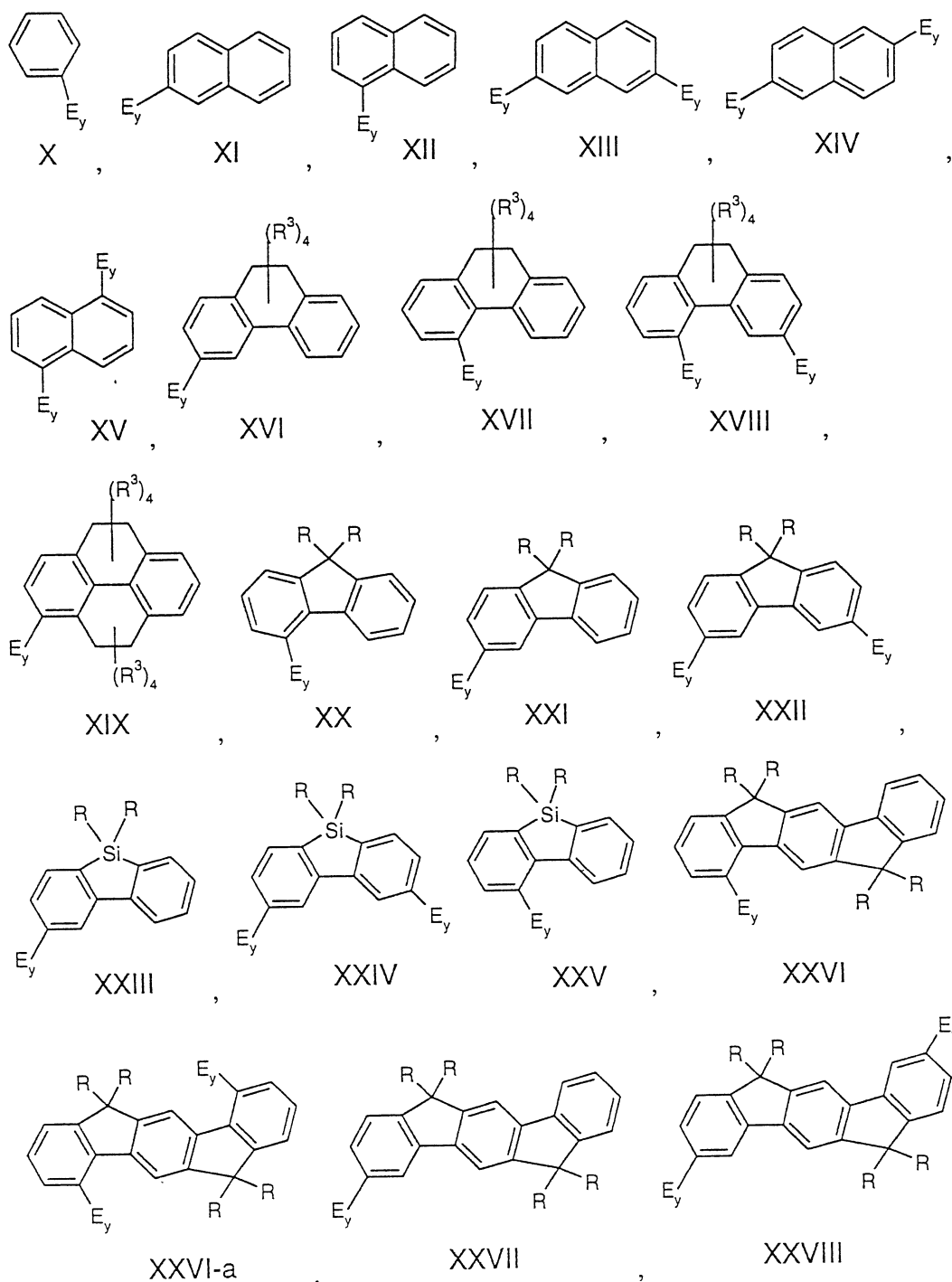
部分具體實例中，不期望使用已知為光激發光淬熄劑的取代基，諸如芳基羰基及硝基，因為該等基團會破壞有機電致發光裝置的電致發光效率。部分具體實例中，不期望使用已知進行電化學消去反應的取代基，諸如烷基胺，因為此等基團會降低有機電致發光體積之工作壽命。部分具體實例中，不期望使用含有可進行電化學反應之可滴定質子的取代基，諸如一級或二級胺、酚、醇及其類者，因為等基團會在有機電致發光裝置操作期間還原成氫。氫之生成會導致陰極剝落，最後使有機電致發光裝置損壞。氯、溴、碘、醯酸、及醯酸酯取代基會在部分具體實例中導致電化學不安定性。該等基團若以雜質形式存在於本發明化合物中，則含量應約百萬分之1000重量份數(ppm)。此外，部分應用中不期望有諸如對氟苯基之基團，因為此等基團易產生不可逆之電化學降解。然而，若可得到其他所期望之特性，則可包括此等基團中任一種。

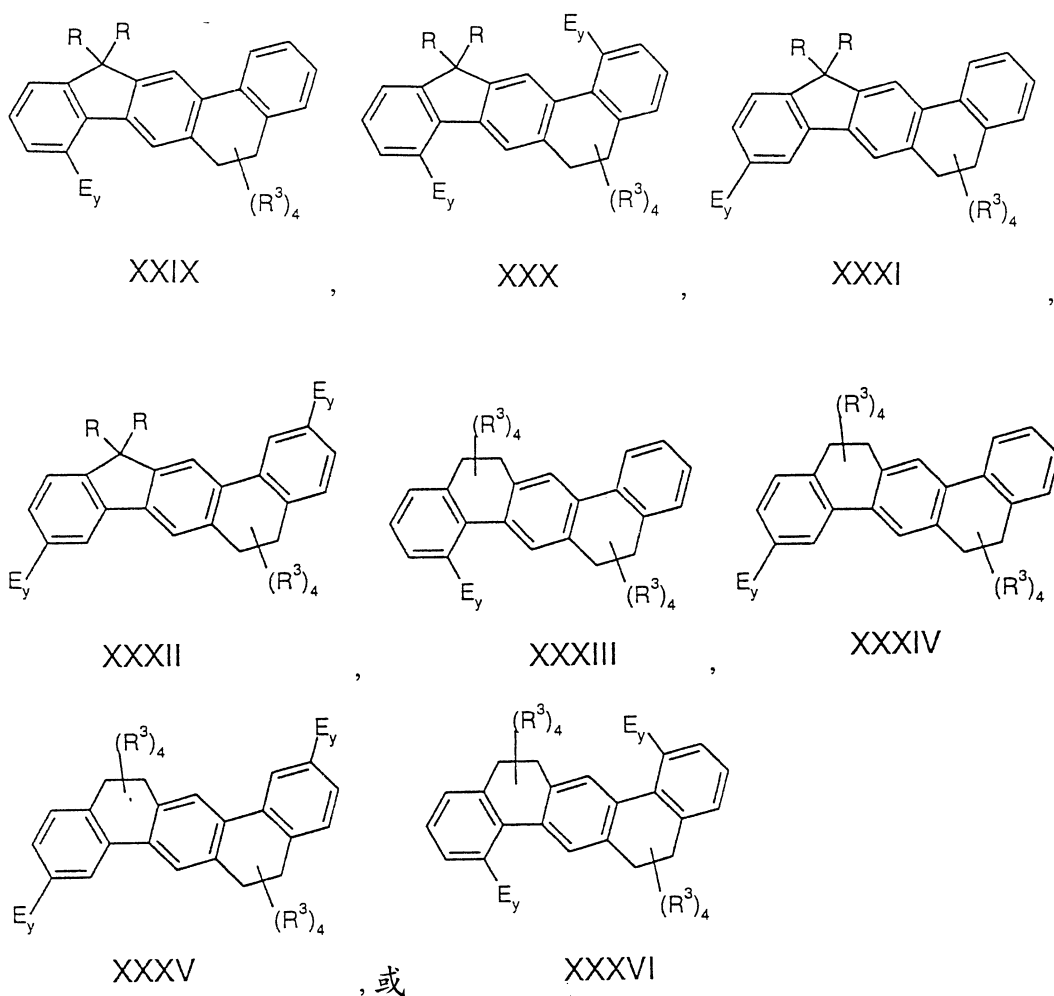
本發明化合物之芳族核心中含有一或兩個具有通式IX之基團



IX

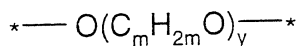
各通式IX基團個別係為伸苯基伸芳基或萘基伸芳基。適當之通式IX基團係包括(但不限於)二價基團





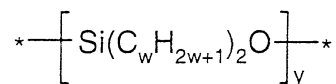
其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基、及其組合的基團所取代。各R係個別為 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合。各 R^3 個別選自氫、 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合。

該芳族核心中任何R或 R^3 皆可包括通式VI之二價聚(氧伸烷基)軟性鏈段



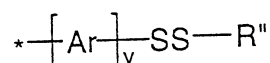
VI

或通式 VII 之二價聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段



VII

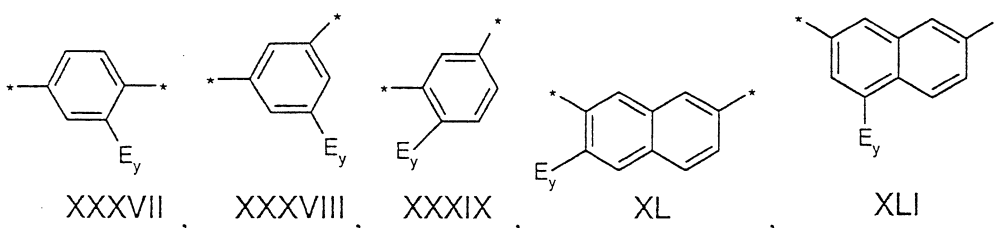
其中 m 係為 1 至 6 之整數，y 係為 2 至 20 之整數，且 w 係為 1 至 10 之整數。部分具體實例中，該聚(氧伸烷基)或聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段可連接於烷基、芳基、或雜芳基。該取代基可(例如)具有通式 VIII

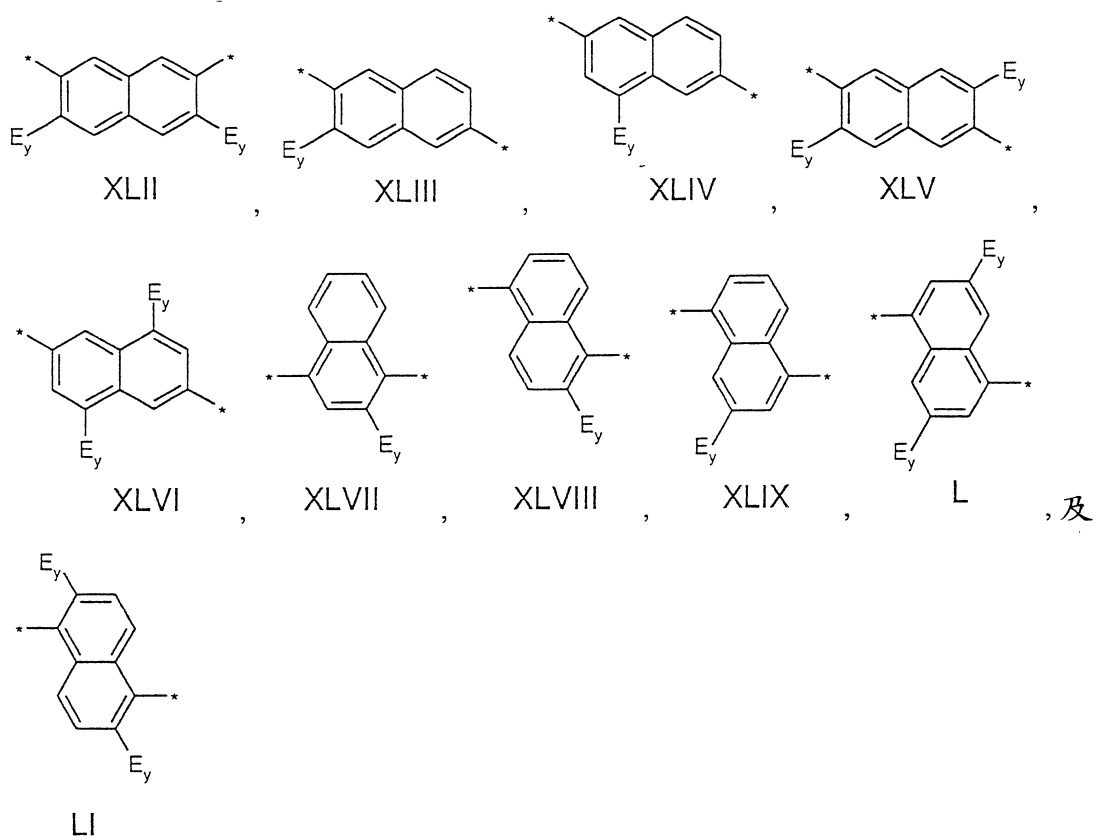


VIII

其中 SS 係為聚(氧伸烷基)或聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段，Ar 係為伸芳基，v 係為整數 0 或 1，且 R'' 係為芳基、雜芳基或烷基。部分實施例中，R'' 係為立體受基團。通式 VIII 之基團可減少會產生不期望之激元或激態複合物發光的分子間或分子內結構之形成。

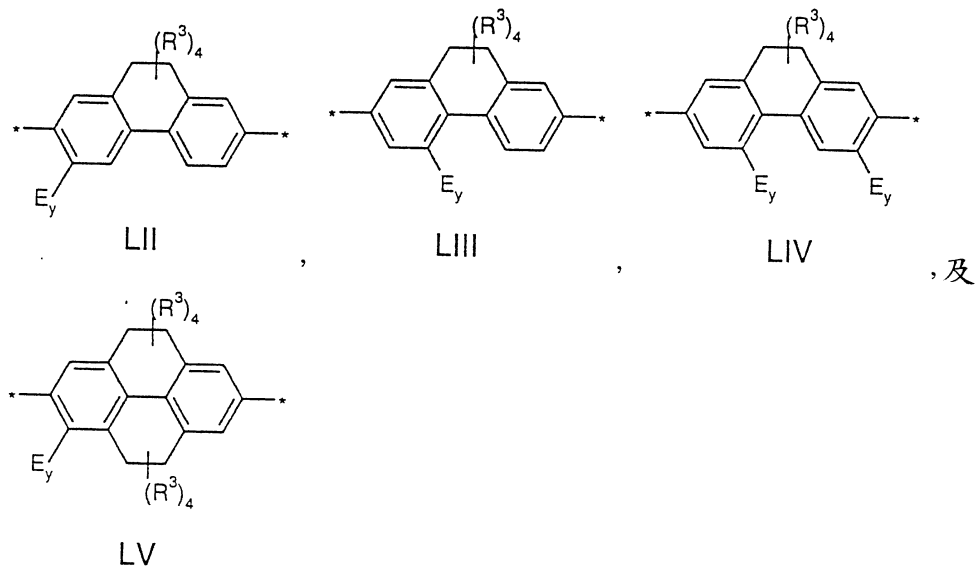
部分化合物中，至少一具有通式 IX 之二價基團係選自





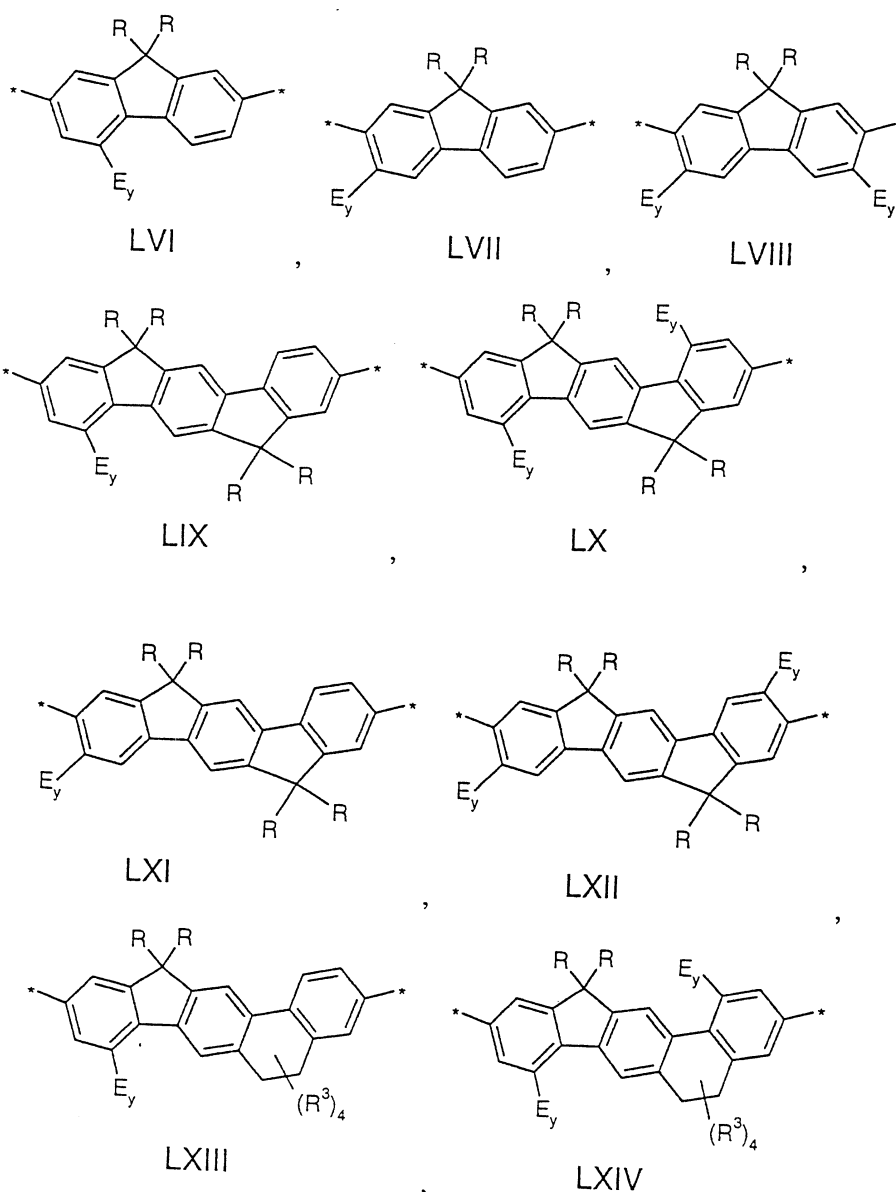
其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基、及其組合的基團所取代。

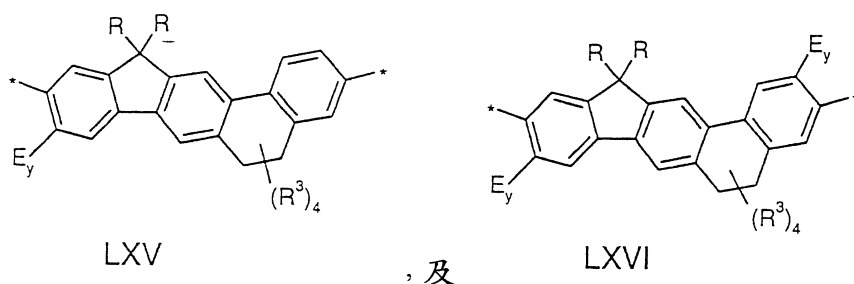
其他實施例中，至少一個具有通式 IX 之二價基團可選自



其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基、及其組合之基團所取代。各 R^3 個別選自氫、 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合。

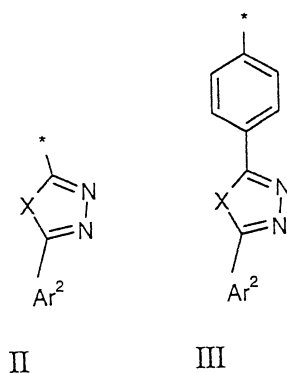
其他實施例中，至少一個具有通式 IX 之二價基團係選自





其未經取代或經一或多個選自 C₁₋₂₀ 烷基、C₂₋₂₀ 烯基、C₁₋₂₀ 烷氧基、C₆₋₂₀ 芳基、C₆₋₂₀ 芳氧基、氟、C₁₋₂₀ 氟烷基、C₁₋₂₀ 全氟烷基、C₁₋₂₀ 雜烷基、C₃₋₂₀ 雜芳基、及其組合的基團所取代。各 R 係個別為 C₁₋₃₀ 烷基、C₂₋₃₀ 烯基、C₁₋₃₀ 烷氧基、C₆₋₃₀ 芳基、C₆₋₃₀ 芳氧基、C₃₋₃₀ 雜芳基、C₁₋₃₀ 雜烷基及其組合。各 R³ 個別選自氫、C₁₋₃₀ 烷基、C₂₋₃₀ 烯基、C₁₋₃₀ 烷氧基、C₆₋₃₀ 芳基、C₆₋₃₀ 芳氧基、C₃₋₃₀ 雜芳基、C₁₋₃₀ 雜烷基及其組合。

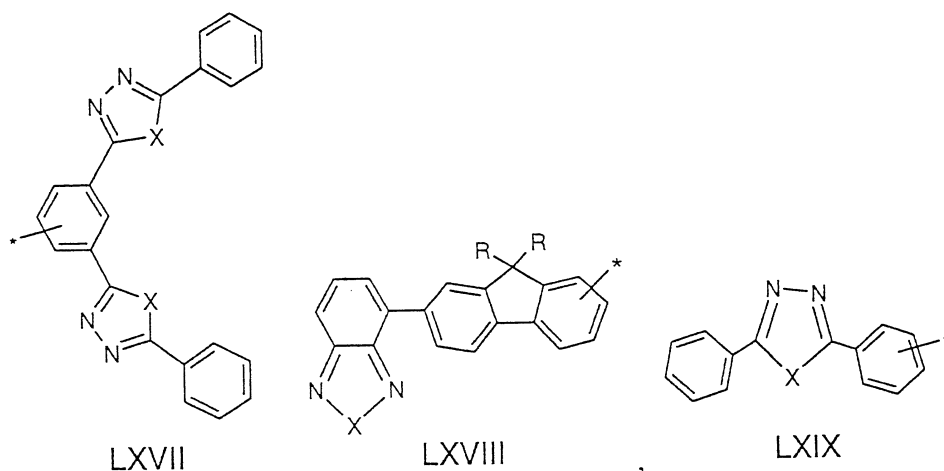
通式 I 中之各 E_y 係為具有通式 II 或通式 III 之單價基團：

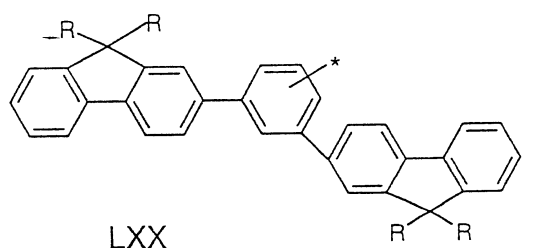


其中各 X 個別係為 O、S 或 NR¹，其中 R¹ 係為烷基、芳基、雜芳基、雜烷基或其組合。通式 II 及通式 III 中之各 Ar² 個別係為碳環芳基。該 Ar² 一般係為 C₆₋₄₀ 碳環芳基。該 Ar² 係經由包括於 Ar² 中之碳環芳族環鍵結於 E_y 之其餘部分。即，Ar² 係軛合於通式 II 及通式 III 中之雜環。

部分具體實例中，Ar²係為選自苯基、聯苯基、聯三苯基、蒽基 (anthryl)、萘基、芘基、菲基、二氫菲基、蒽基 (anthracenyl)、萘基、9-矽雜萘基、四氫芘基、芘基、螺雙萘基、螢蒽基、芘基、二氫芘基、四氫芘基、紅螢烯基、蒎基、5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蒽基、6,12-二氫蒽并[1,2-b]萘基、5,12-二氫-6H-蒽并[1,2-b]菲基、二氫菲基、及苯并[g,h,i]芘基，其未經取代或經一或多個C₁₋₂₀烷基、C₂₋₂₀烯基、C₁₋₂₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、氟、C₁₋₂₀氟烷基、C₁₋₂₀全氟烷基、C₁₋₂₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基、C₃₋₃₀烷基喹啉二唑基、C₃₋₃₀芳基喹啉二唑基、C₃₋₂₀烷基三唑基、C₃₋₃₀芳基三唑基、C₃₋₃₀二芳胺基、C₃₋₃₀芳基二芳胺基及其組合所取代。

Ar²之部分具體實例係經一或多個C₁₋₂₀烷基、C₁₋₂₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、C₁₋₂₀氟烷基、C₃₋₂₀雜芳基、C₃₋₃₀烷基喹啉二唑基、C₃₋₃₀芳基喹啉二唑基、C₃₋₃₀烷基三唑基或C₃₋₃₀芳基三唑基所取代。取代基Ar²之實例係包括(例如)單價基團

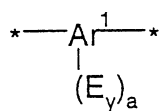




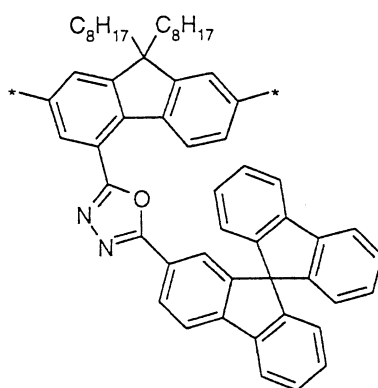
及其類者。各X係個別為O、S或NR¹，其中R¹係為C₁₋₃₀烷基、C₆₋₂₀芳基、C₃₋₃₀雜芳基、C₁₋₃₀雜烷基、或其組合。各R係個別選自C₁₋₃₀烷基、C₂₋₃₀烯基、C₁₋₃₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、C₃₋₂₀雜芳基、C₁₋₃₀雜烷基及其組合。

部分具體實例中，在通式II或通式III雜環中之X係為碳或氧。

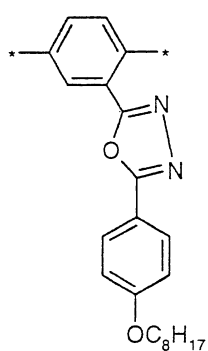
該通式I之二價基團



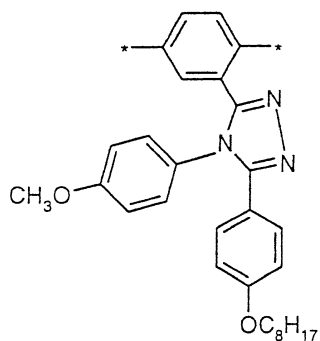
IX



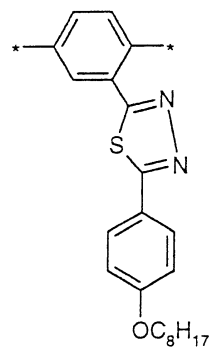
的特例係包括(但不限於)



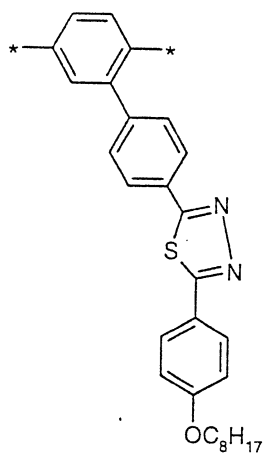
LXXII



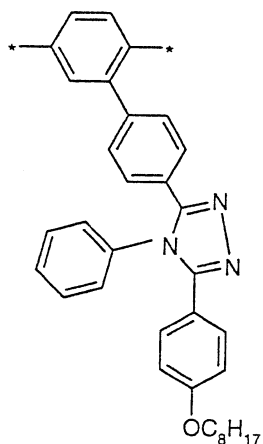
LXXIII



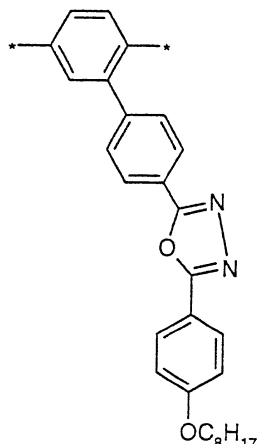
LXXIV



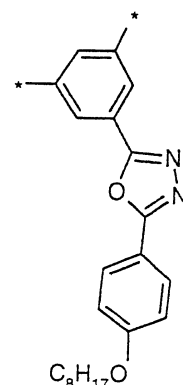
LXXV



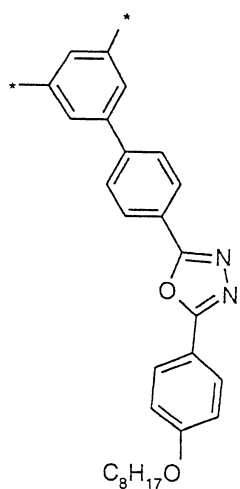
LXXVI



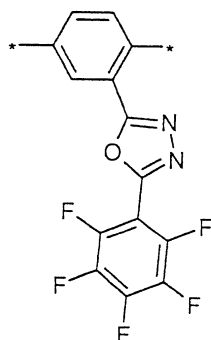
LXXVII



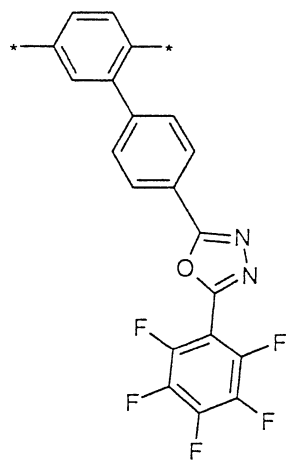
LXXVIII



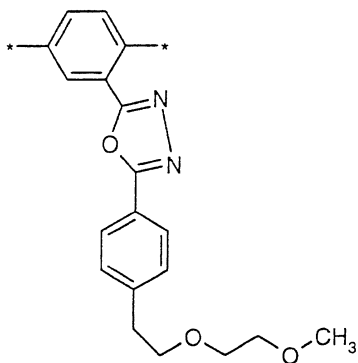
LXXIX



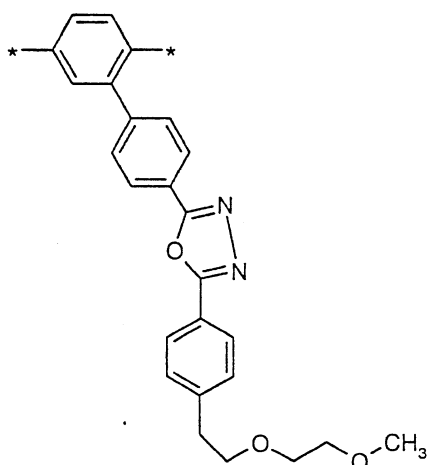
LXXX



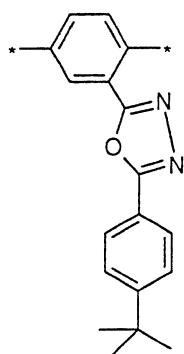
LXXXI



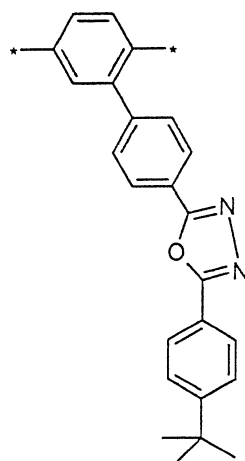
LXXXII



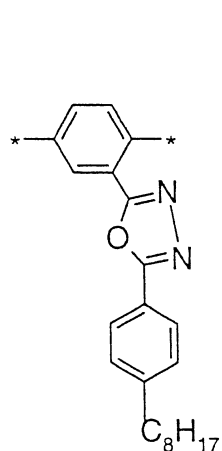
LXXXIII



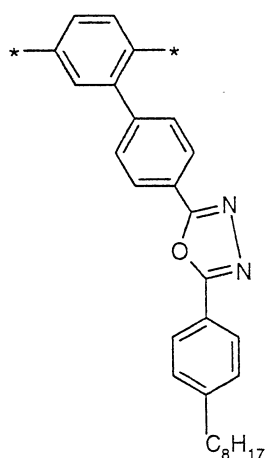
LXXXIV



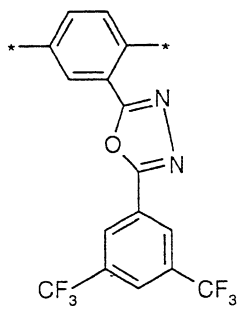
LXXXV



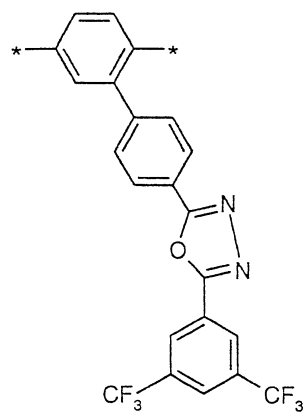
LXXXVI



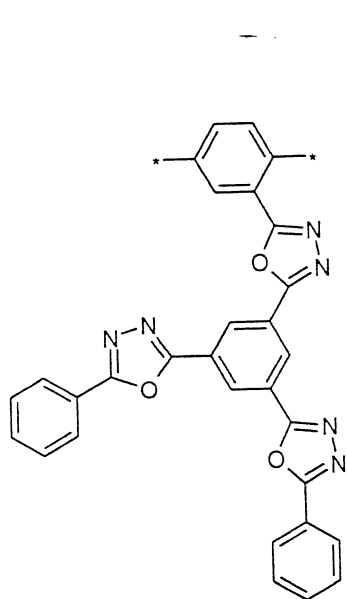
LXXXVII



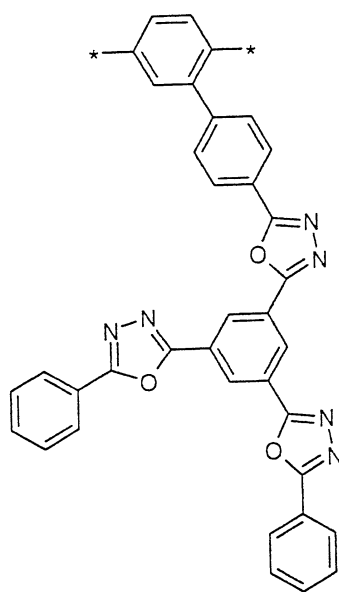
LXXXVIII



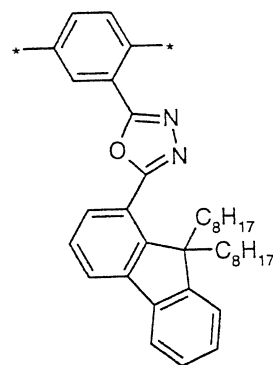
LXXXIX



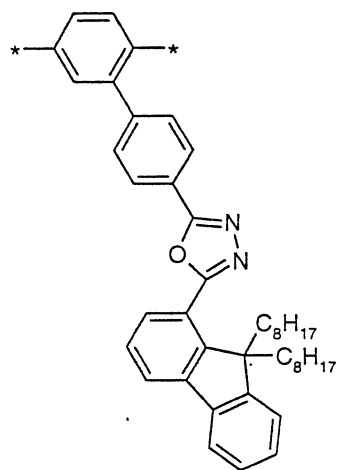
XC



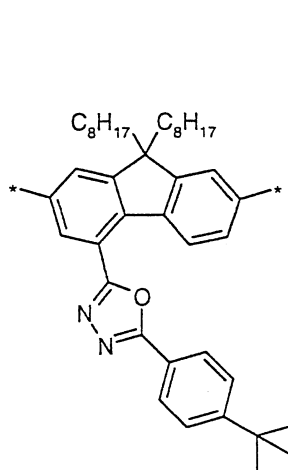
XCI



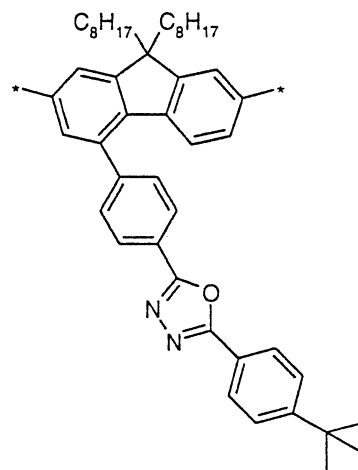
XCII



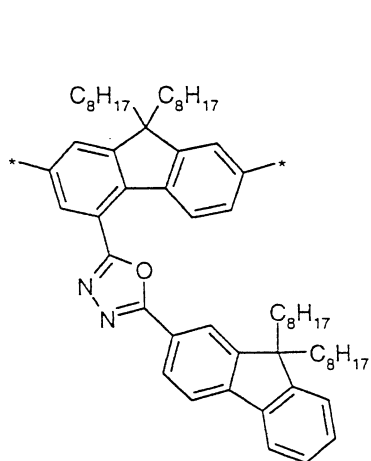
XCIII



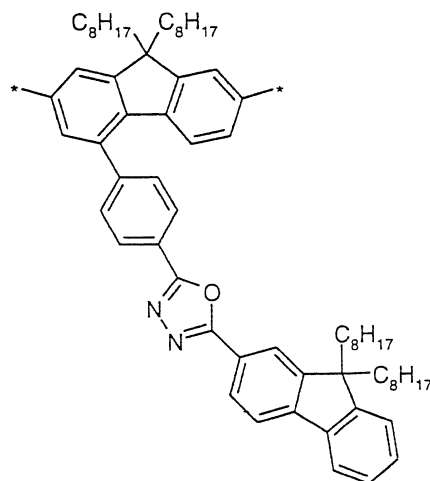
XCIV



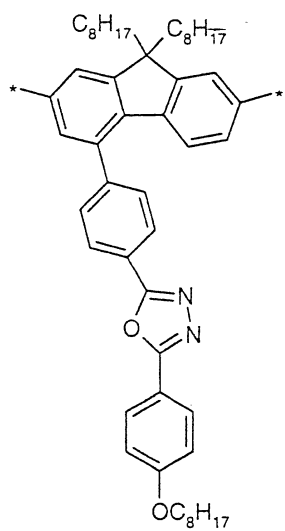
XCV



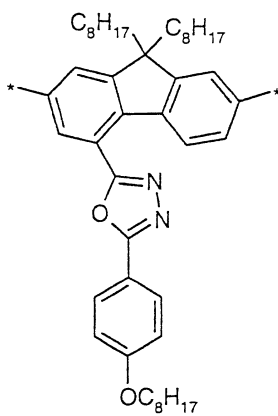
XCVI



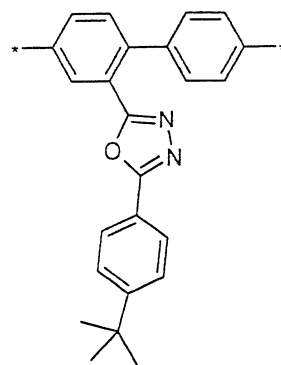
XCVII



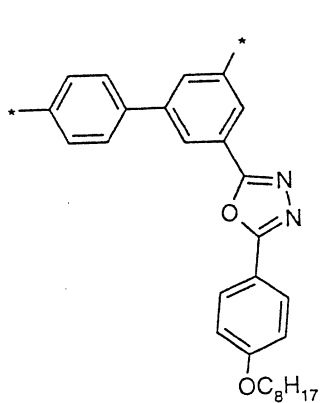
XCVIII



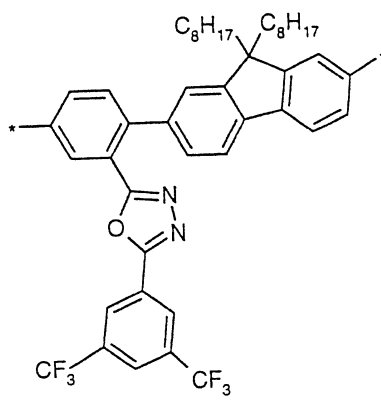
XCIX



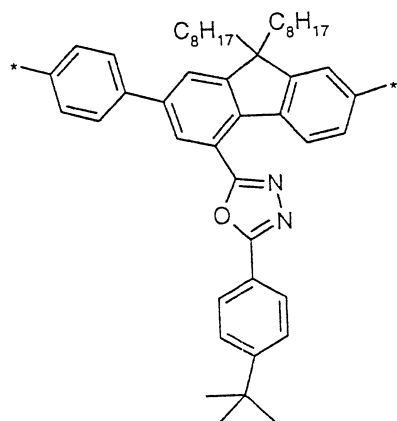
C



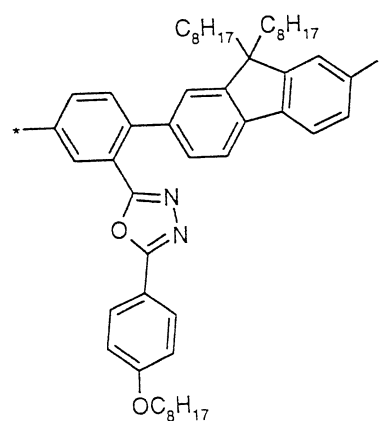
CI



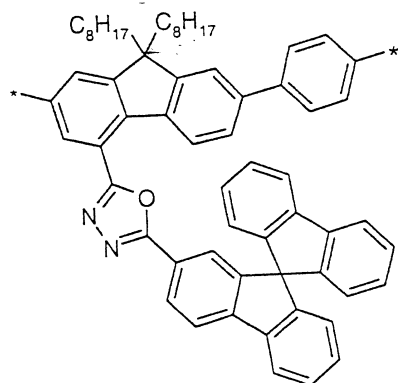
CII



CIII



CIV



CV

或其類者。

通式 I 中末端封端 (EC) 基團個別係選自碳環芳基、雜芳基、或三級胺基芳基，其未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代。該末端封端基團一般係為 C₆₋₄₀ 碳環芳基、C₃₋₄₀ 雜芳基、或 C₁₂₋₆₀ 三級芳族胺基芳基，其未經取代或經一或多個選自 C₁₋₂₀ 烷基、C₂₋₂₀ 烯基、C₁₋₂₀ 烷氧基、C₆₋₂₀ 芳基、C₆₋₂₀ 芳氧基、氟、C₁₋₂₀ 氟烷基、C₁₋₂₀ 全氟烷基、C₁₋₂₀ 雜烷基、C₃₋₂₀ 雜芳基、及其組合的基團所取代。

該末端封端基團之碳原子數不包括可能存在於取代基中之碳原子。例如，末端封端基團(經丁基取代之苯基)係視為六碳之碳環芳基。因此，碳環芳基末端封端基團可具有總數多於 40 個的碳原子。相同的，雜芳基末端封端基團可具有總數多於 40 個的碳原子，三級芳族胺基芳基末端封端基團可具有總數多於 60 個的碳原子。

末端封端基團具有通式 II 或通式 III 者不多於一個。部分

具體實例中，末端封端基團皆不具通式II或通式III。該末端封端基團係同時軌合於該芳族核心。介於各末端封端基團與該芳族核心之間的鍵結一般係為連接芳族核心之芳族環與各末端封端基團之芳族環的碳-碳單鍵。

適當之 C_{6-40} 碳環芳基末端封端基團係包括(但不限於) 苯基、聯苯基、聯三苯基、蔥基(anthryl)、萘基、芘基、菲基、二氫菲基、蔥基(anthracenyl)、蒾基、9-矽雜蒾基、四氫芘基、芘基、螺雙蒾基、螢蔥基、芘基、二氫芘基、四氫芘基、紅螢烯基、蒽基、或苯并[g,h,i]芘基，其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代。

適當之末端 C_{3-40} 雜芳基封端基團係包括(但不限於)呋喃基、噻吩基、吡咯基、咪唑基、吡唑基、三唑基、三唑基、四唑基、噻唑基、嘓唑基、異嘓唑基、嘓二唑基、噻二唑基、異噻唑基、吡啶基、嘓啞基、吡啞基、嘓啞基、喹啞基、異喹啞基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、吡啞基、吡啞基、苯并嘓唑基、苯并噻唑基、苯并咪唑基、嘓啞基、噻啞基、喹啞基、酞啞基、苯并噻二唑基、苯并三啞基、吩啞基、菲啞基、吡啞基、吡啞基、或矽羅(siloles)，其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代。

適當之 C_{12-60} 三級芳族胺基芳基末端封端基團係包括(但

不限於)二芳基苯胺、烷基吡啶、芳基吡啶、四芳基二胺、星芒胺、對芳基三胺、樹枝狀胺、螺旋胺、及其類者的單價基團，其未經取代或經一或多個選自C₁₋₂₀烷基、C₂₋₂₀烯基、C₁₋₂₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、氟、C₁₋₂₀氟烷基、C₁₋₂₀全氟烷基、C₁₋₂₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基及其組合之基團所取代。例如N,N,N',N'-四芳基聯苯胺、N,N,N',N'-四芳基-1,4-伸苯二胺、N,N,N',N'-四芳基-2,7-二胺基萘、N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺、N,N'-雙(1-萘基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺、1,4-雙(吡啶)聯苯、4,4',4''-三(N,N-二芳基胺基)三苯基胺、1,3,5-三(4-二芳基胺基苯基)苯、4,4',4''-三(N,N-二苯基胺基)三苯基胺、4,4',4''-三(N-三-甲基苯基-N-苯基胺基)三苯基胺、1,3,5-三(4-二苯基胺基苯基)苯、及其類者。

部分通式I具體實例中，該末端封端基團可於最高佔用分子軌道(HOMO)與最低未佔用分子軌道(LUMO)之間提供高能帶隙。本發明所使用之高能帶隙係表示介於HOMO與LUMO之間的能量差至少2.5電子伏特。部分具體實例中，該能量差係至少3電子伏特。高能帶隙使得該化合物適於作為發光分子。

部分碳環芳基末端封端基團(例如伸苯基芳基、萘基芳基、及縮合多環芳基)可於最高佔用分子軌道(HOMO)提供電子親和勢且於最低未佔用分子軌道(LUMO)提供電離勢，此與芳族核心極為配合。當期望使用高能帶隙分子作為電子傳遞劑、作為電洞阻隔劑、作為分子或聚合藍色發光劑用之分子主體、或作為發射藍光之電致發光分子時，

此種能量配合及介於HOMO與LUMO之間的高值能帶隙特別有利。此外，部分碳環芳基末端封端基團可充分立體受阻，以減少因為形成分子間或分子內結構，而產生會導致電致發光色彩偏移的激元或激態複合物發光。

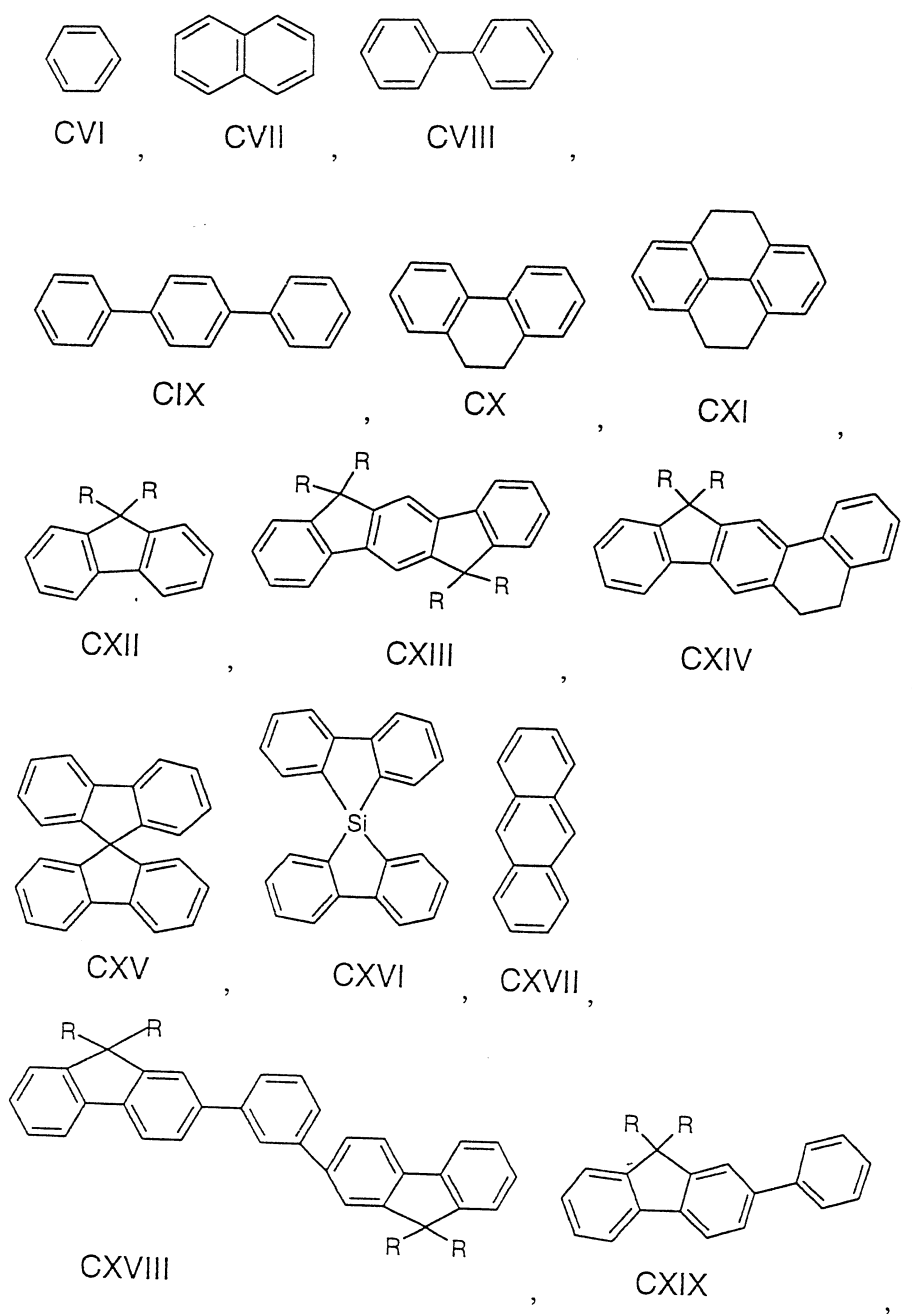
部分末端封端基團可用以傳遞電洞或阻隔電子之傳遞。該末端封端基團可包括(例如)富含電子之雜芳基及三級芳族胺基芳基。使用該種末端封端基團可平衡電洞及電子傳遞效果，或調節本發明化合物之電離勢及/或電子親和勢。該種末端封端基團可增加或修飾該化合物之能帶隙及/或電致發光特性。該末端封端基團可用於化合物中(例如)調節該化合物或其他化合物之發光色彩。特定雜芳基及三級芳族胺基芳基末端封端基團可使該化合物具有在可見光譜之紅光、綠光或藍光區中的發光。

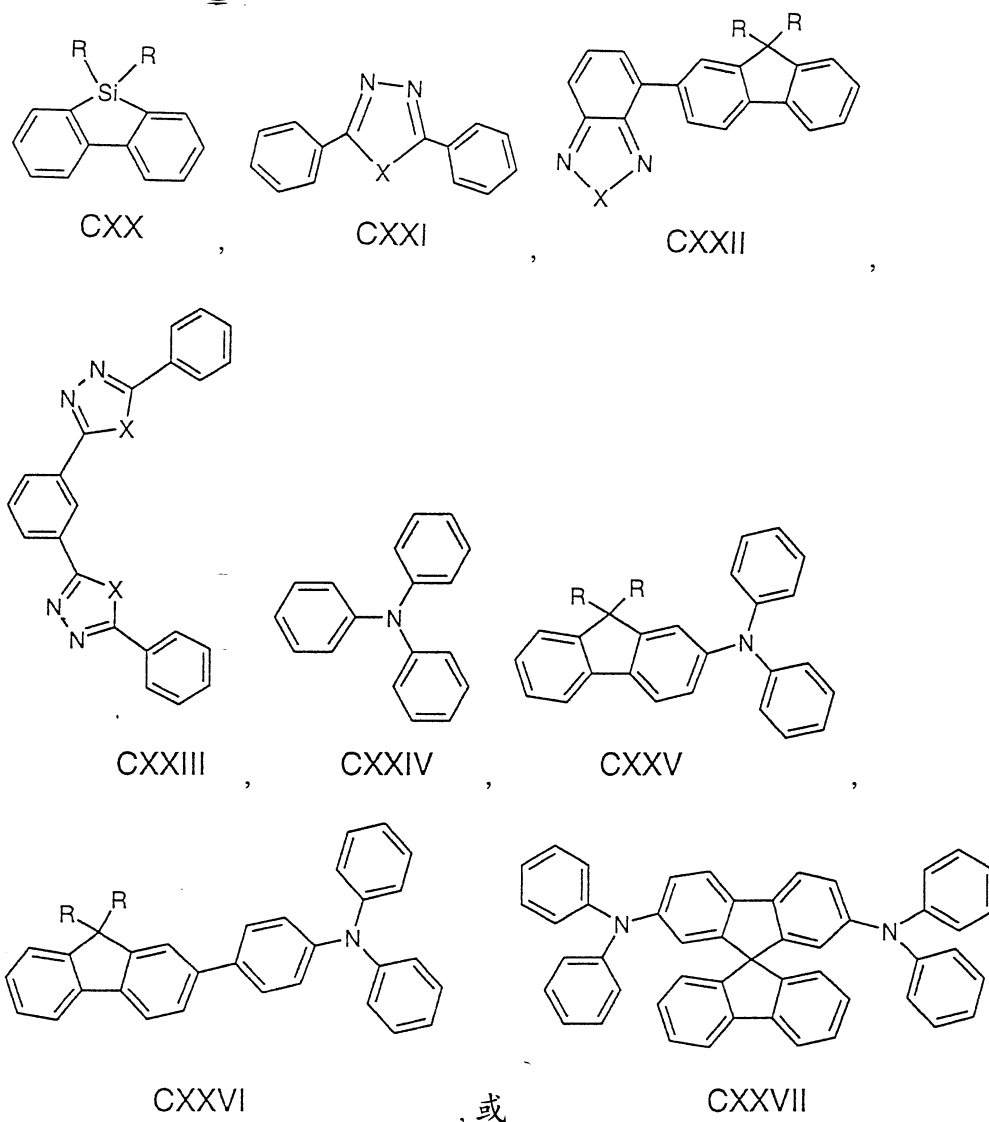
縮合多環伸芳基可與具有-C=N-單元之伸雜芳基結合包括於該末端封端基團中，以於部分化合物中提供供激子重組及發光使用的中心。部分化合物中，結合導入縮合多環伸芳基或芳基與伸雜芳基或具有-C=N-單元之雜芳基可提供色彩調整。例如自蔥、茈及茈衍生之縮合多環伸芳基或芳基可與相鄰之自苯并噻二唑衍生的伸雜芳基或雜芳基結合。

其他具體實例中，該末端封端基團可用以傳遞電子或阻隔電洞之傳遞。該末端封端基團可包括(例如)具有-C=N-單元之雜環化合物的基團，諸如例如喹二唑、N-經取代-三唑、N-經取代咪唑、N-經取代吡唑、喹唑、異喹唑、噻唑

基、異噻唑、吡啶、噻吡、噻啉、吡啶、三吡、四吡、苯并噻啉、苯并噻啉、苯并噻二啉、喹啉、異喹啉、噌啉、喹啉、喹啉、噻吡、苯并三吡、吩吡、菲啉、吡啶及其類者之基團。

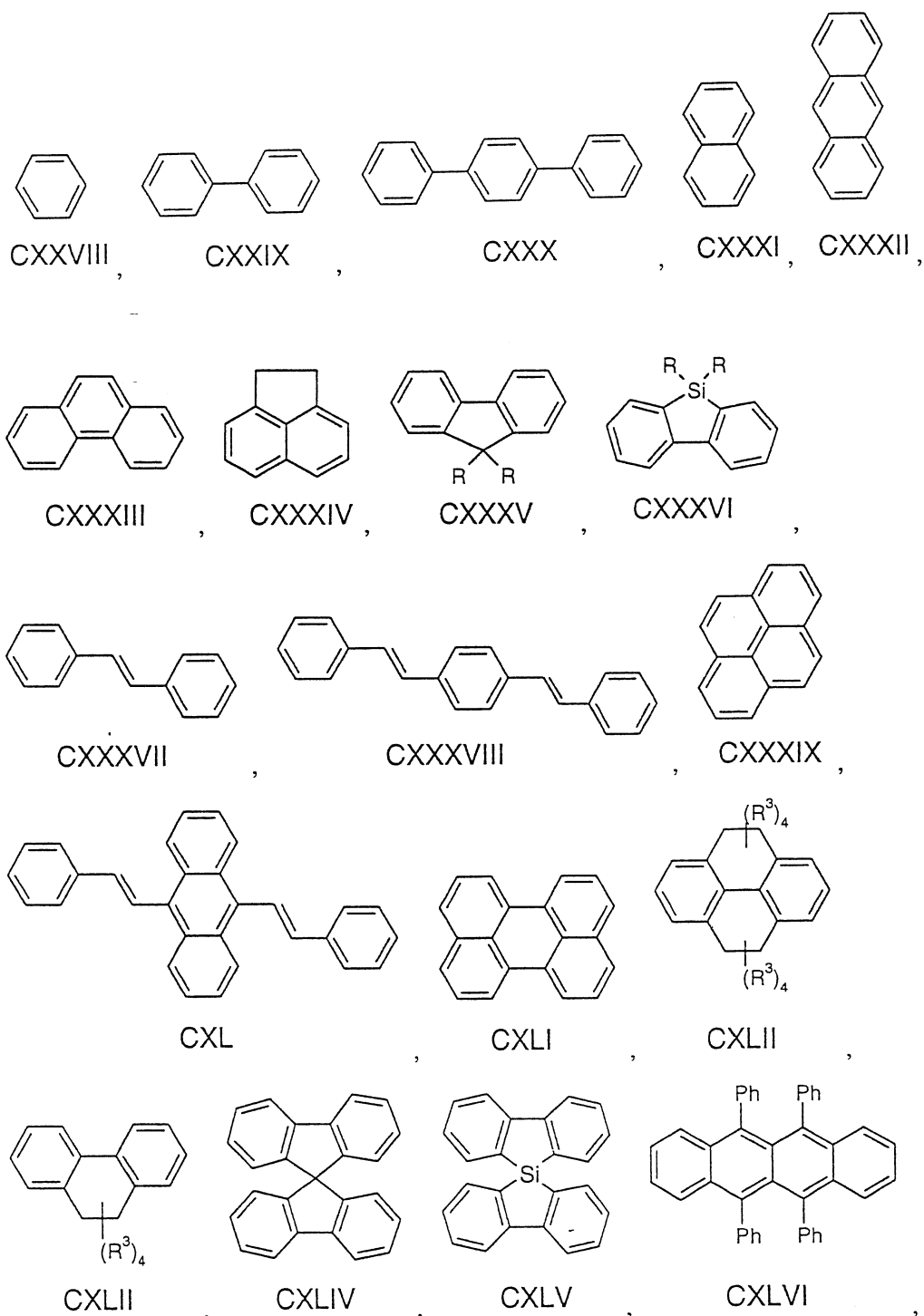
部分通式I化合物中，兩末端封端基團皆個別選自

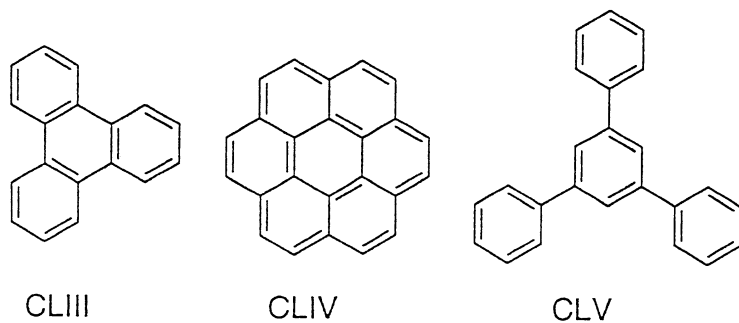
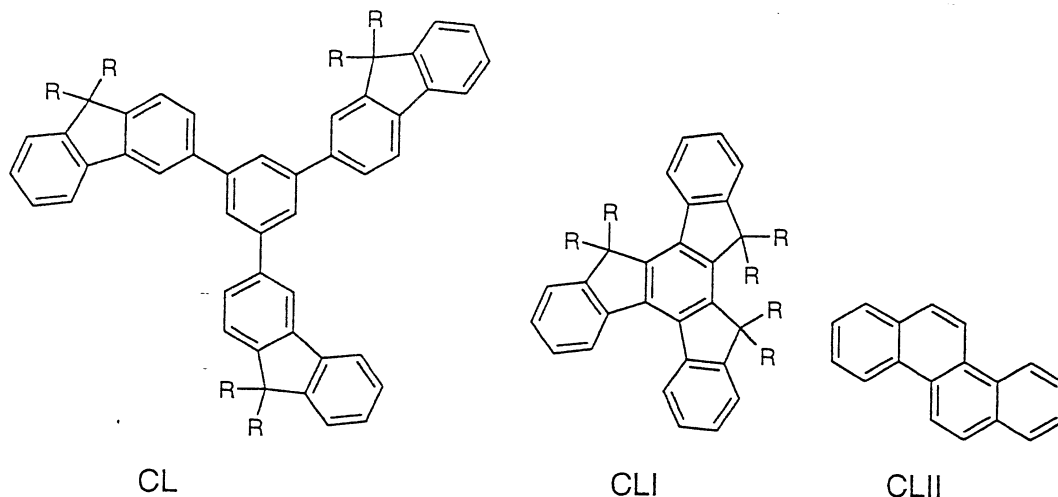
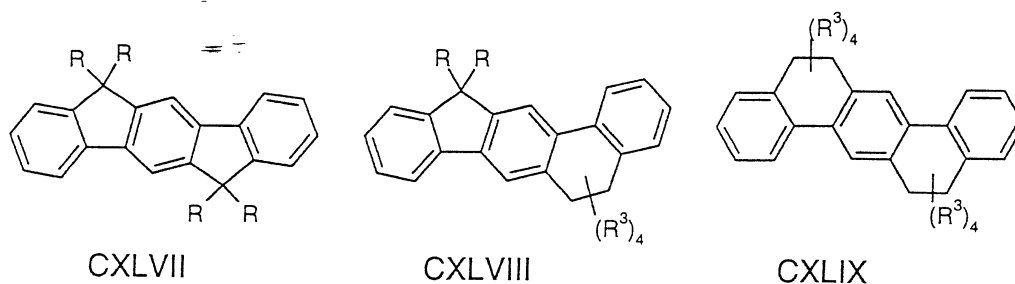




之單價基團，其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代。各 R 係個別選自 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合。各 X 係個別為 O、S 或 NR^1 ，其中 R^1 係為 C_{1-30} 烷基、 C_{6-20} 芳基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基、或其組合。

部分末端封端基團具體實例中，碳環伸芳基係軛合於通式CVI至CXXVII之基團。該碳環伸芳基係介於該芳族核心與該通式CVI至CXXVII基團之間。例如，通式CVI至CXXVII之基團可軛合於

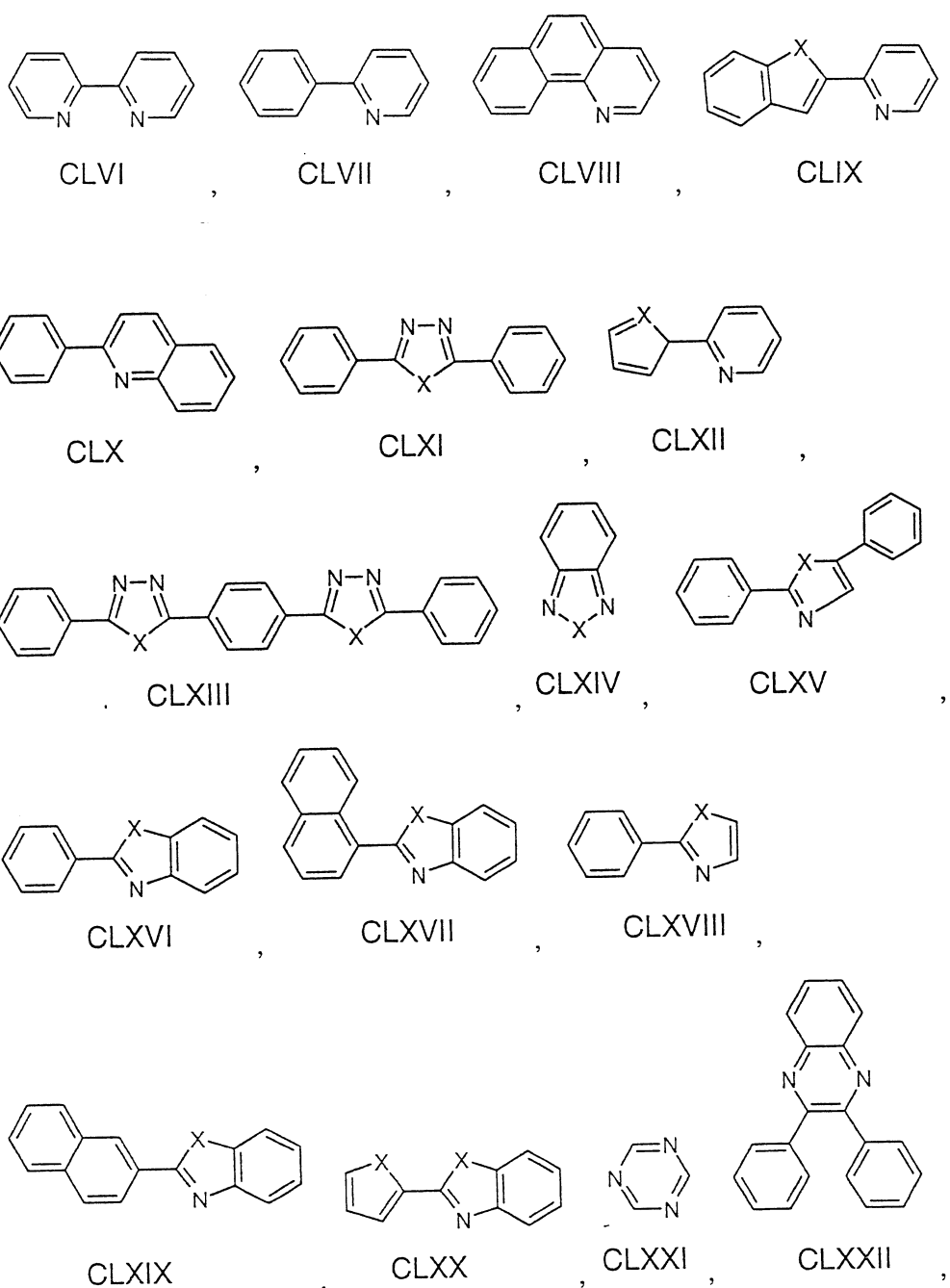


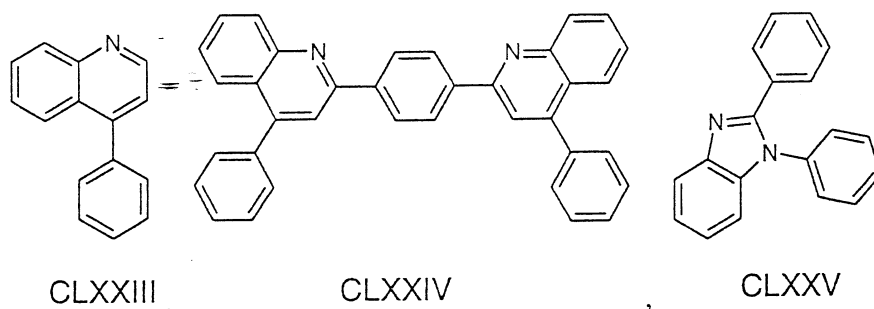


或其類者之二價基團，其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代。各 R 係個別選自 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合。各 R^3 個別選自氫、 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30}

雜烷基及其組合。

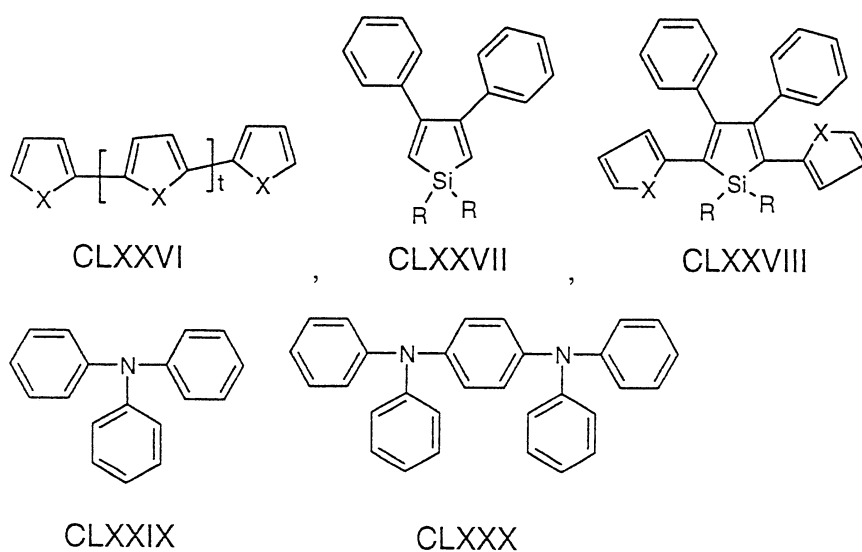
單價末端封端基團之其他具體實例中，通式 CVI 至 CXXVII 之基團可軛合於具有 $-C=N-$ 單元的基團。該具有 $-C=N-$ 單元的基團係介於該芳族核心與該通式 CVI 至 CXXVII 基團之間。例如，通式 CVI 至 CXXVII 之基團可軛合於

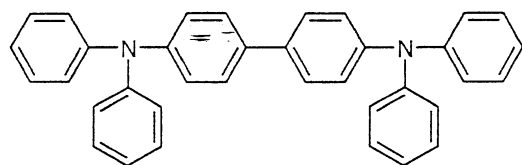




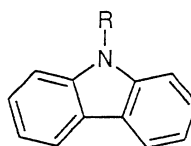
或其類者之二價基團。其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代。各 X 係個別為 O、S 或 NR^1 ，其中 R^1 係為 C_{1-30} 烷基、 C_{6-20} 芳基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基、或其組合。

單價末端封端基團之其他具體實例中，通式 CVI 至 CXXVI 之教；可軛合於富含電子之伸雜芳基或軛合於三級芳族胺基伸芳基。該伸雜芳基或三級芳族伸芳基係位於該芳族核心與通式 CVI 至 CXXVII 之基團之間。例如，通式 CVI 至 CXXVII 之基團可軛合於

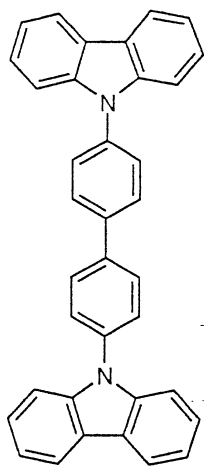




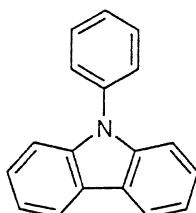
CLXXXI



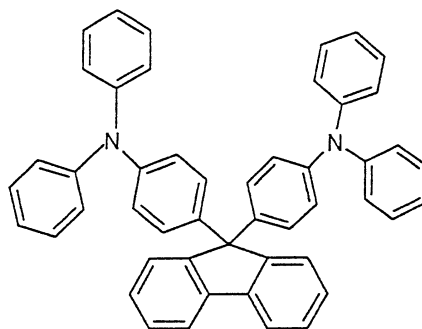
CLXXXII



CLXXXIII



CLXXXIV



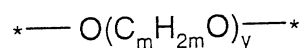
CLXXXV

或其類者之基團，其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代。各 R 係個別選自 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合。各 X 係個別為 O、S 或 NR^1 ，其中 R^1 係為 C_{1-30} 烷基、 C_{6-20} 芳基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基、或其組合。各 t 係為等於 0 至 4 之整數。

當通式 CVI 至 CXXVII 之基團與其他基團結合以形成末端封端基團時，並非表示用以製備通式 I 化合物的合成順序或合成方法。第二基團(例如通式 CXXVIII 至 CLXXXV)可在連接於通式 CVI 至 CXXCVII 之基團之前連接於該芳族核心，或

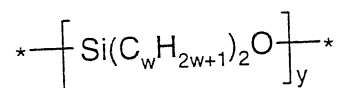
該第二基團可在連接於該芳族核心之前連接於末端封端基團(例如通式CVI至CXXVII之基團)的其餘部分。

位於末端封端基團上之任何基團R或R³可包括通式VI之二價聚(氧伸烷基)軟性鏈段



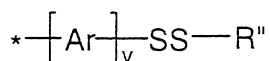
VI

或通式VII之二價聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段



VII

其中m係為1至6之整數，y係為2至20之整數，且w係為1至10之整數。部分具體實例中，該聚(氧伸烷基)或聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段可連接於烷基、芳基或雜芳基。該取代基可(例如)具有通式VIII



VIII

其中SS係為聚(氧伸烷基)或聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段，Ar係為伸芳基，v係為0或1之整數，且R''係為芳基、雜芳基、或烷基。部分實施例中，R''係為立體受阻基團。諸如包括於通式VIII之基團可減少會產生不期望之激元或激態複合物發光的分子間或分子內結構的形成。

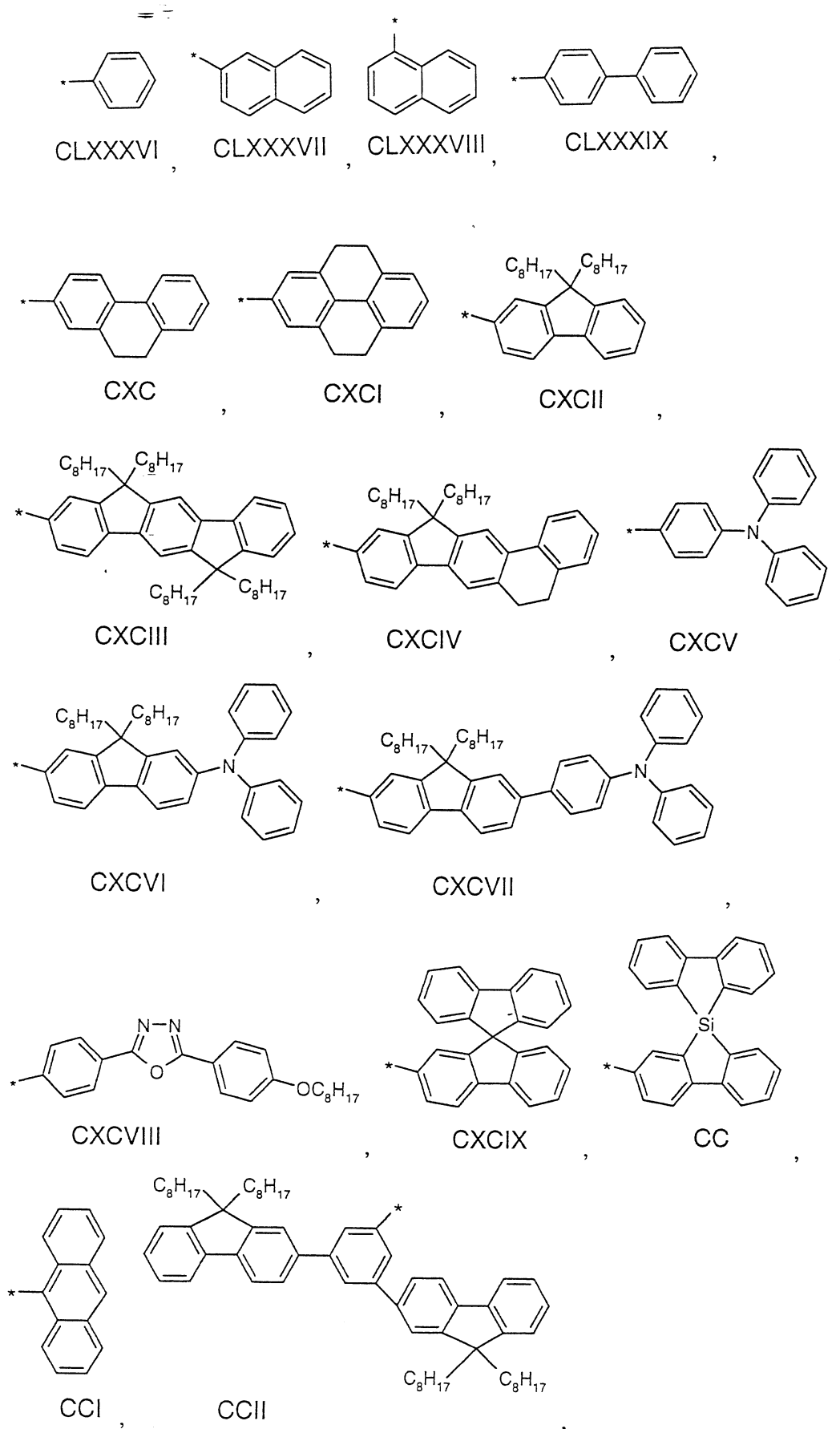
有些製備有機電致發光裝置的方法中，本發明化合物係自施體基材熱轉移至受體基材。具有(例如)聚(氧伸烷基)或

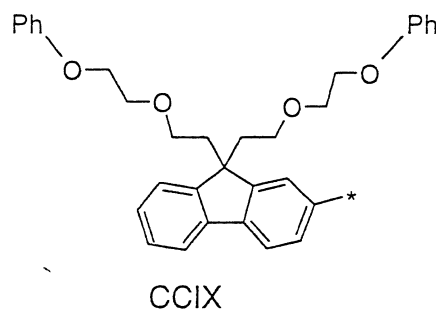
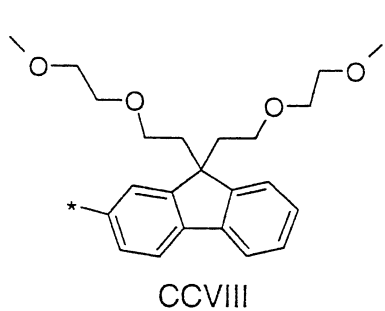
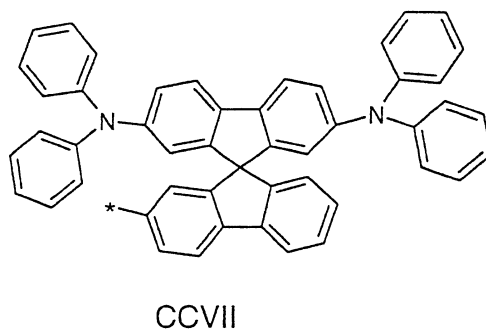
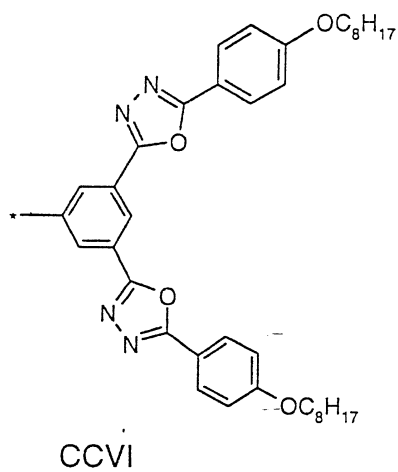
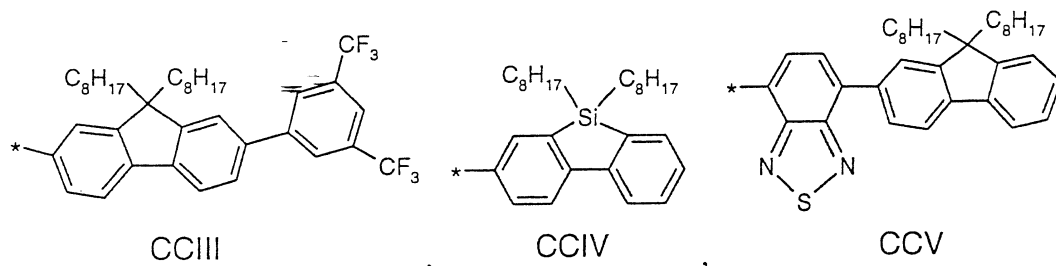
聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段之化合物可提供配合受體基材之適當溶解度參數。若需要，則此等軟性鏈段亦可或選擇可改變其鍍可用於熱轉移或薄膜安定性的性質，諸如例如分子量、熔點、玻璃態化溫度、結晶百分比及結晶傾向或形成聚集體之傾向、黏度、薄膜形態、流變性質諸如熔體黏度及鬆弛時間、激元及激態複合物形成、內聚強度、及發光頻率。該聚(氧伸烷基)基團或聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段可在部分化合物中改善分子膜或摻合物對於市售導電性離子聚合物(諸如PEDT及PANI，此一般係於有機電致發光裝置結構中作為陽極緩衝層)之熱轉移及黏著性。

部分化合物中，該末端封端基團可經一或多個選自氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基及其組合物的基團所取代。此等取代基可降低該化合物之蒸氣壓，使其更適於氣相沉積。此等取代基可改善化合物之溶解度及薄膜形成性質。此等取代基可於部分化合物中增加電離勢及電子親和勢，以使該化合物更易於注射電子且阻隔電洞。

該兩末端封端基團可相同或相異。部分通式I之具體實例中，兩末端封端基團(EC)係相同。其他具體實例中，末端封端基團具有相同之基本結構，但位於一末端封端基團上之取代基不存在另一基團上。另外其他具體實例中，兩末端封端基團具有相同之基本結構，且各末端封端基團具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基或其組合物)，但該取代基含有不同數目之碳原子。

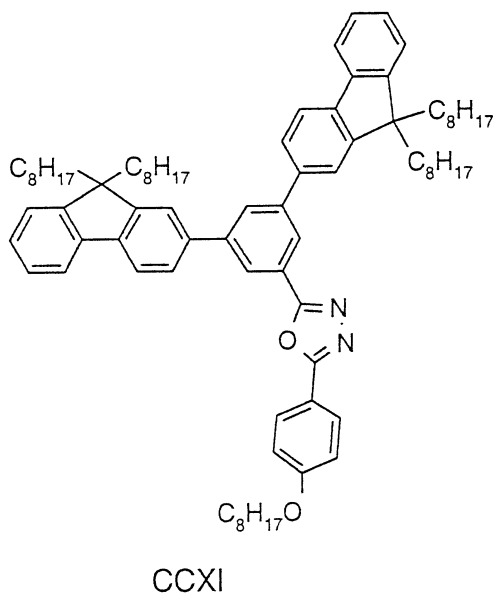
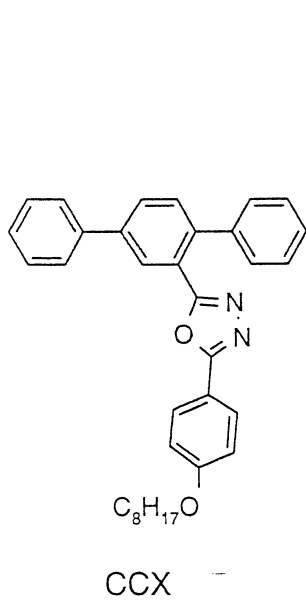
部分具體實例中，兩末端封端基團係選自

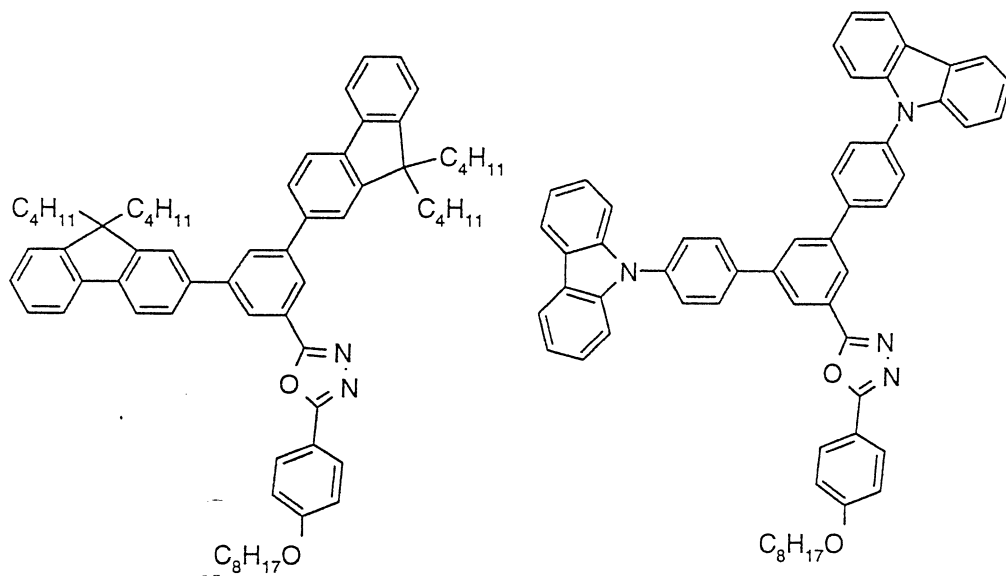




, 或

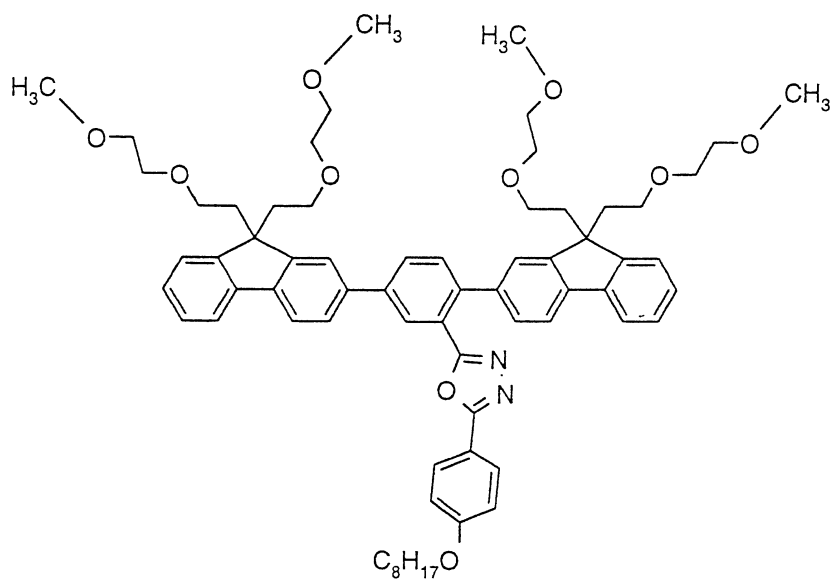
通式I化合物之特例係包括(但不限於)



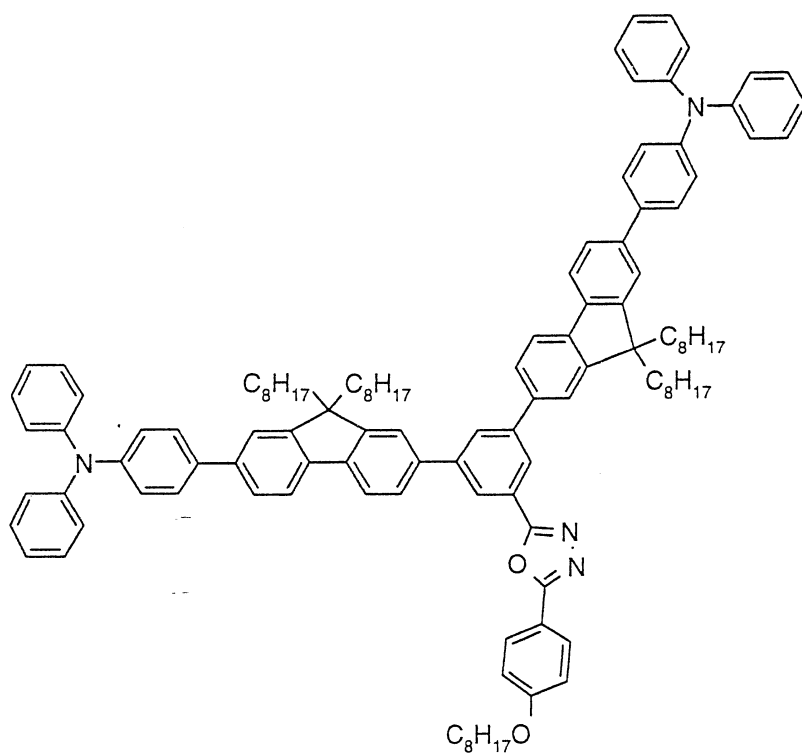


CCXII

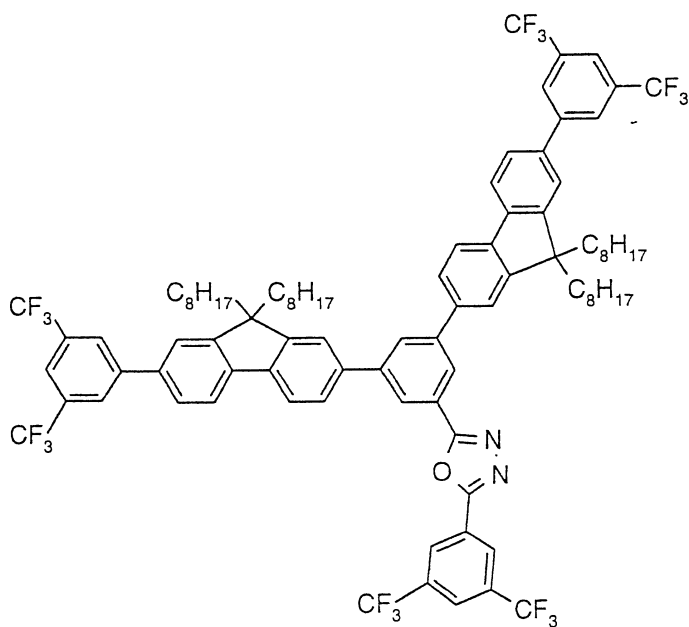
CCXIII



CCXIV

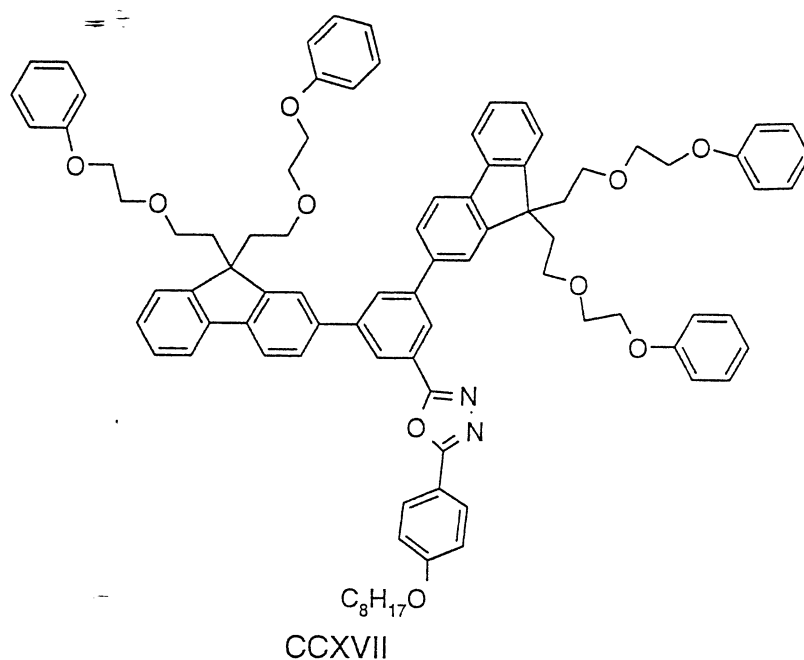


CCXV



CCXVI

, 及

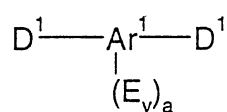


通式I化合物可藉任何技術界已知之方法製備。部分具體實例中，該化合物係藉著在鈀催化條件下，使用Suzuki偶聯方法(Suzuki等，Chemical Reviews, 95, 2457-2483 (1995)所教示，以引用方式整體併入本文中)，使該芳族核心之二溴化物或二氯化物中間體與該末端封端基團之醯酸或醯酸酯中間體進行反應而製備。

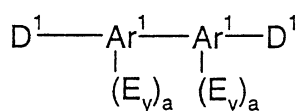
通式I化合物亦可藉著芳基二溴化物或碘化物與芳基格利雅(Grignard)試劑(參照Widdowson, D.A., Zhang, Y., Tetrahedron, 42, 2111 (1986))與芳基錫化合物(參照Beiley, T.R., Tetrahedron Lett., 27, 4407 (1986)，以引用方式併入本文)及與芳基汞化合物(參照Bumagin, N.A., More, P.G., Beletskaya, I. P., J. Organomet. Chem., 364, 231 (1986)，以引用方式併入本文)進行反應而製備。芳基硼可與芳基格利雅試劑於鎳觸媒存在下進行偶聯(參照Clayden, J., Cooney,

J.J.A., Julia, M., J. Chem. Soc. Perkin Trans., 1, 7 (1995), 以引用方式併入本文)。部分具體實例中EC可逐一偶聯於該芳族核心。部分具體實例中，該芳族核心可偶聯於一部分該末端封端基團，可於後續步驟中添加其餘部分之末端封端基團。

該芳族核心之二鹵化中間體係包括下列化合物：



CCXL

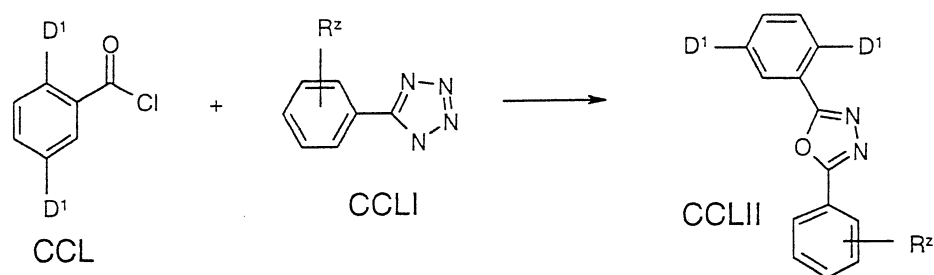


CCXLI

其中D¹係為溴基或氯基，且Ar¹-(E_y)_a係如前文定義。

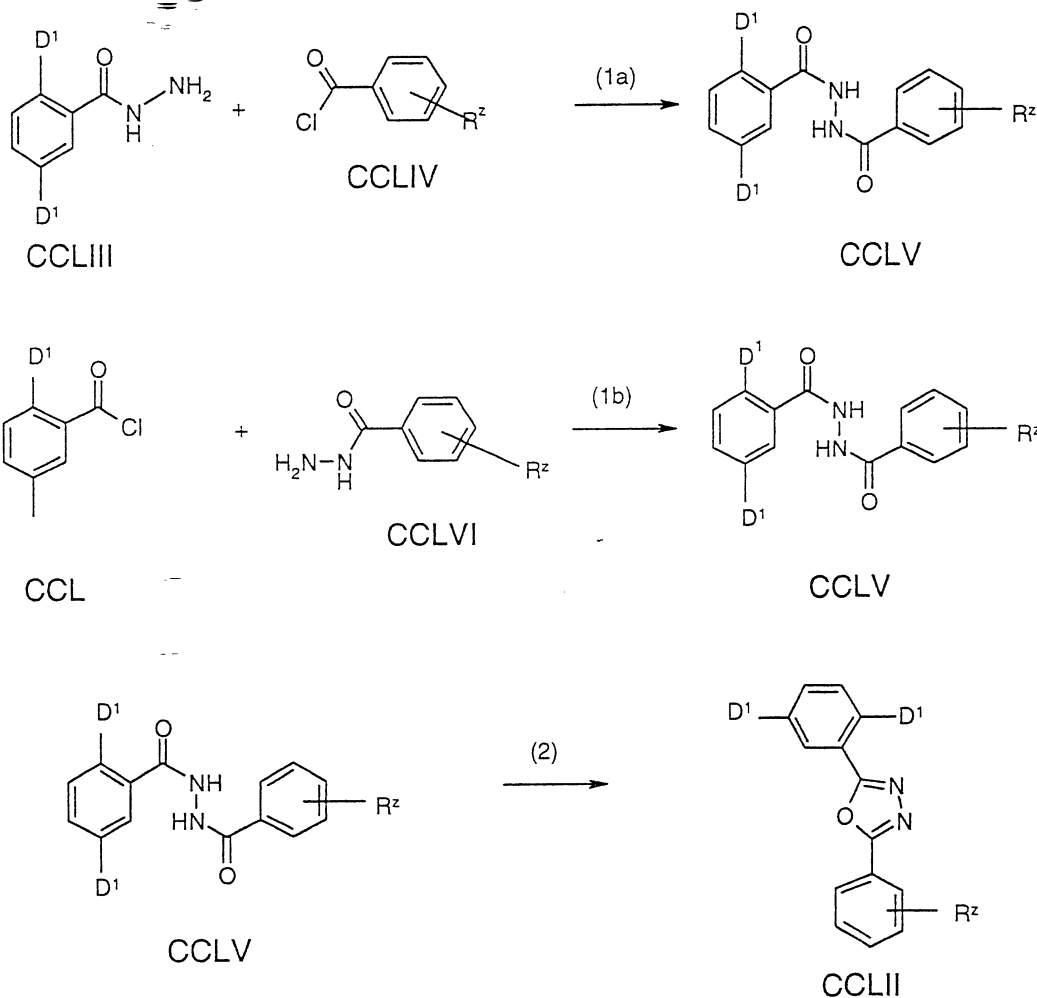
通式CCLII之二鹵化1,3,4-噁二唑可藉著如反應流程圖I所示，將經取代之四唑醯化而合成。通式CCL之二鹵芳醯氯係在惰性溶劑諸如吡啶中加熱約12小時，與通式CCLI之經取代四唑反應(Myznikov等，J. Gen. Chem. USSR (Engl. Transl.), 62 (6), 1125-1128 (1992))形成通式CCLII之二鹵化噁二唑中間體。D¹係為鹵素，且R^z係為選擇性取代基，選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、烷基噁二唑基、芳基噁二唑基、烷基三唑基、芳基三唑基、二芳基胺基、芳基二芳基胺基、及其組合物。通式CCLI之四唑可藉著對應之銜與NaN₃及NH₄Cl於N,N-二甲基甲醯胺(DMF)中於回流下反應而製備。

反應流程圖 I

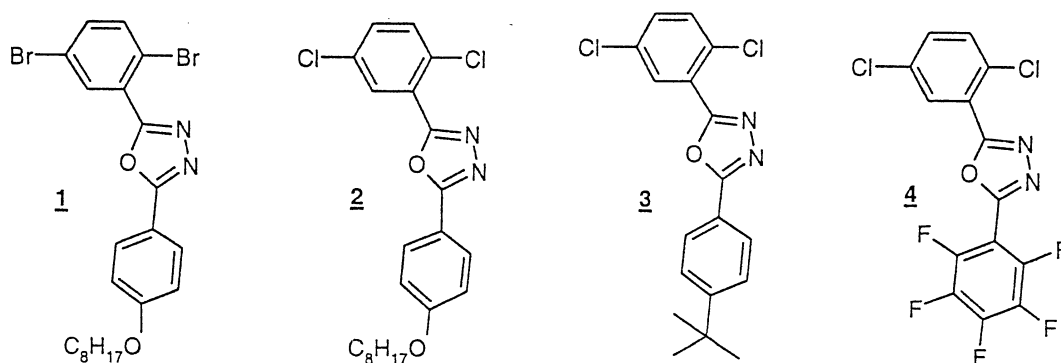


或通式 CCLII 之化合物可藉著反應流程圖 II 所示般地使
 苺醯芳醯肼進行環縮合而製備 (Grekow 等, J. Gen. Chem. USSR (Engl. Transl.), 30, 3763-3766 (1960)), 其中 D¹ 及 R^z 係
 如前文定義。反應流程圖 II 之步驟 (1a) 中, 通式 CCLIII 之二
 鹵芳醯肼係於室溫下於含有一當量三乙胺之二氯甲烷
 (DCM) 中與通式 CCLIV 之選擇性經取代苺醯氯反應, 形成通
 式 CCLV 之苺醯芳醯肼。或於反應流程圖 II 之步驟 (1b) 中,
 通式 CCL 之二鹵素芳醯氯與通式 CCLVI 之經取代苺醯肼化
 合物反應, 形成通式 CCLV 之苺醯芳醯肼。步驟 (2) 中, 通式
 CCLV 之苺醯芳醯肼於回流下與磷醯氯反應, 形成通式
 CCLII 之二鹵化喹二唑中間體。

反應流程圖 II

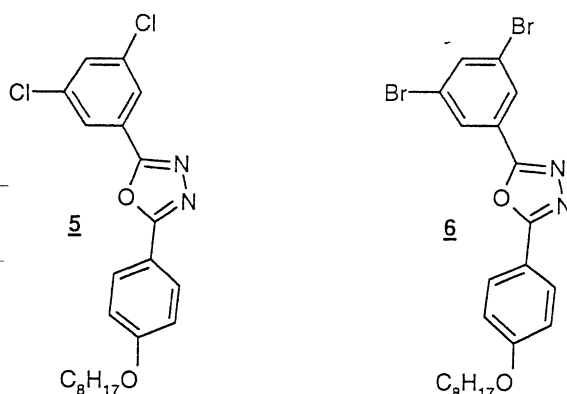


例如，電子傳遞中間體1、2、3及4係藉著對應之2,5-二鹵基苄醯氣與適當之經取代苄醯肼縮合而製得。



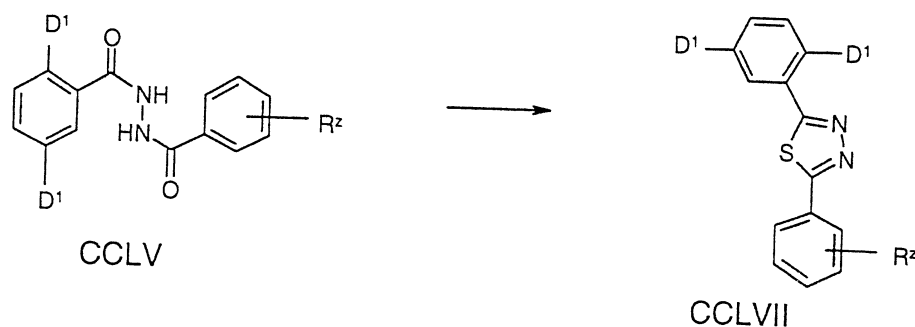
同法製備1,3-三鹵化中間體。例如，電子傳遞中間體

2-(3,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑(5)及2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑(6)係藉著對應之3,5-二鹵基苄醯氯與辛氧基苄醯肼進行縮合，之後使中間體3,5-二鹵基-N'-[4-(辛氧基)苄醯基]-苄醯肼進行環縮合而製備。同法自對應之單鹵化前驅物製備單鹵化1,3,4-噁二唑末端封端基團中間體。

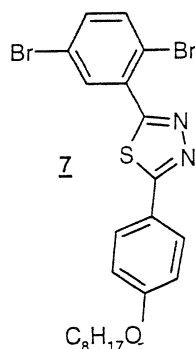


通式CCLVII之二鹵化1,3,4-噁二唑中間體可如反應流程圖III所示，藉著苄醯芳醯肼中間體之環縮合而製備(A. T. Prudchenko, J.Gen.Chem.USSR (Engl. Transl.), 37, 2082-2084 (1967))，其中 D^1 及 R^z 係如反應流程圖I所定義。反應流程圖III中，通式CCLV之苄醯芳醯中間體係於置換條件下與 P_2S_5 反應，產生通式CCLVII之1,3,4-噁二唑。

反應流程圖 III

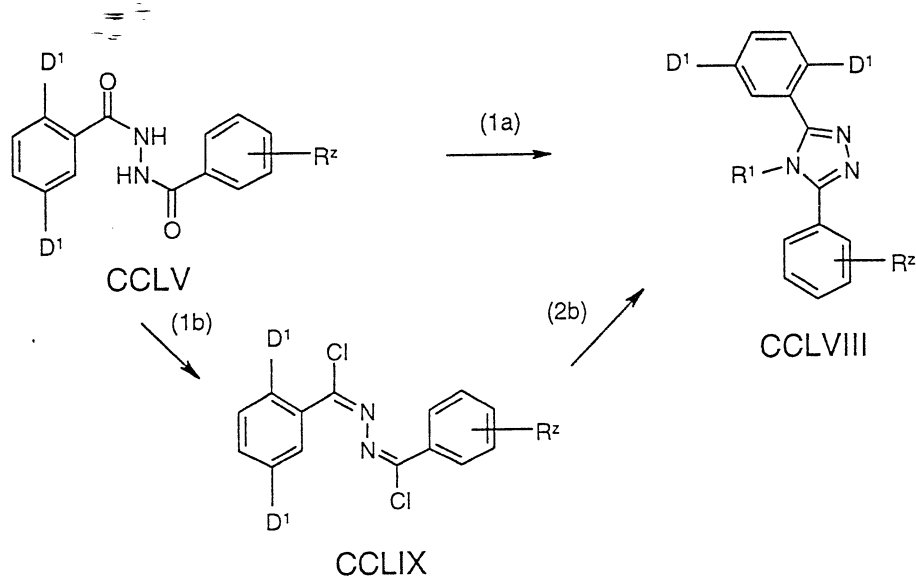


例如，對應之3-(2,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噻二唑(Z)可依此方式製得。同法自對應之單鹵化前驅物製備單鹵化1,3,4-噻二唑末端封端基團中間體。

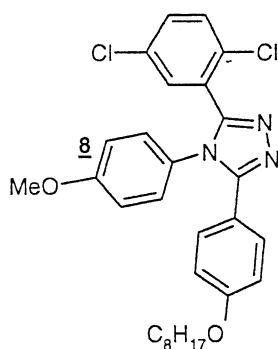


通式 CCLVIII 之二鹵化 1,3,4-三唑中間體可如反應流程圖 IV 所示，藉著苺醯芳醯肼中間體之環縮合製備 (E. Klingsberg, *J. Org. Chem.*, 23, 1086(1958))，其中 D^1 及 R^z 係如反應流程圖 I 所定義，且 R^1 係為芳基、烷基、雜芳基或雜烷基。反應流程圖 IV 之步驟 (1a) 中，通式 CCLV 之苺醯芳醯肼中間體係於高溫 (例如 150°C) 下於 $R^1\text{NH}_2$ (其中 R^1 係為芳基或雜芳基) 存在下與三氯化磷反應，產生通式 CCLVIII 之 1,3,4-三唑。或於反應流程圖 IV 的步驟 (1b) 中，苺醯芳醯肼係於冰醋酸 (Moss 等，*J. Chem. Soc. Perkin Trans.*, 1(9), 1999-2006 (1982)) 或其他非反應性溶劑中與氯反應，形成通式 CCLIX 之 1,4-二氯-1,4-二苯基化合物。反應流程圖 IV 之步驟 (2b) 中，通式 CCLIX 之 1,4-二氯-1,4-二苯基化合物係與 $R^1\text{NH}_2$ 反應 (Gautun 等，*Acta Chem. Scand.*, 45(6), 609-615 (1991))，其中 R^1 係為烷基或芳基烷基，產生對應之通式 CCLVIII 的 1,3,4-三唑。

反應流程圖 IV



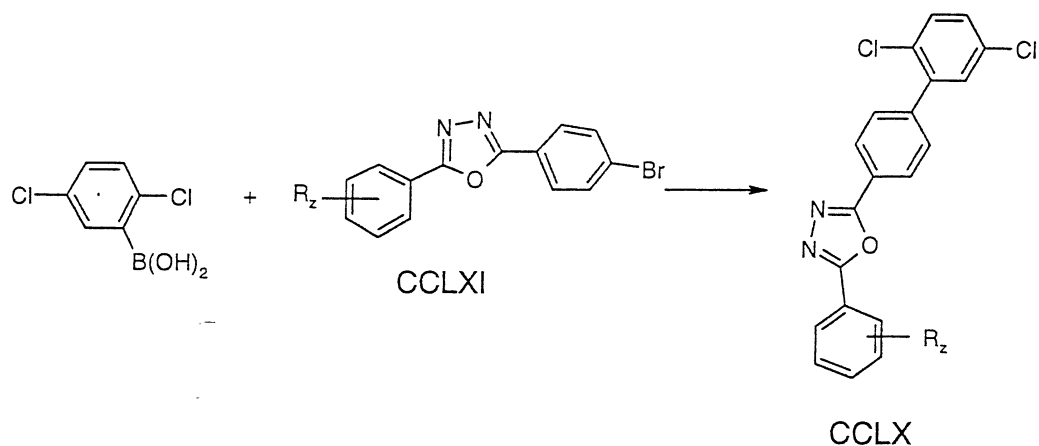
例如，三唑衍生物 3-(2,5-二氯苯基)-4-(4-甲氧苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-4H-1,2,4-三唑(8)係藉此方法製得。同法自對應之單鹵化前驅物製備單鹵化 1,3,4-三唑末端封端基團。



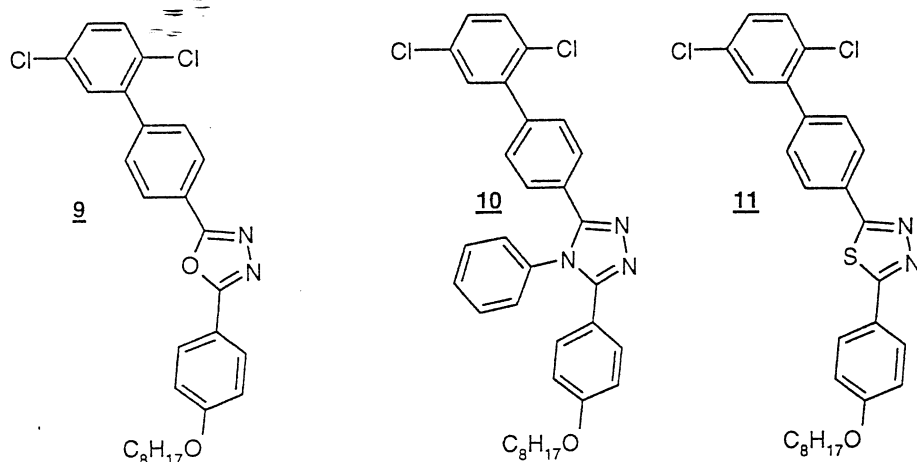
通式 CCLX 之二鹵化 1,3,4-噁二唑中間體可藉著如反應流程圖 V 所示之單官能基二芳基噁二唑與該二鹵基伸芳基之單醯酸/酯的 Suzuki 偶聯來合成。反應流程圖 V 中(其中 R^2 係如反應流程圖 I 所定義)，2,5-二氯苯基醯酸係與通式 CCLXI 之單官能基 2-(4-溴苯基)-1,3,4-噁二唑係於二氯化雙(三苯膦)鈣及碳酸鈉存在下，於惰性溶劑(諸如四氫呋喃)中於加

熱下進行反應，形成通式 CCLX 之二鹵基 1,3,4-噁二唑中間體。該 2,5-二氯苯基硼酸可藉著使 1-溴-2,5-二氯苯與丁基鋰進行反應，之後與硼酸三甲酯進行反應，之後酸化而製備。

反應流程圖 V

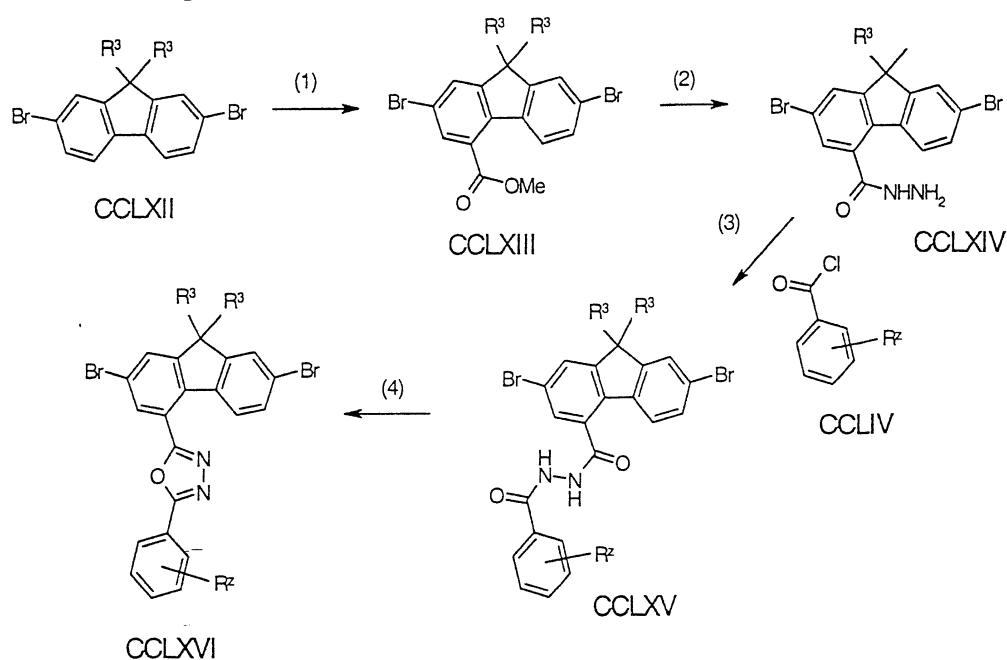


例如電子傳遞中間體 2-(2',5'-二氯-1,1'-聯苯-4-基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑(9)可藉著 2,5-二氯苯基硼酸與 2-(4-溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑於標準 Suzuki 偶聯條件下進行反應而製備。對應之 1,3,4-噁二唑(11)亦可藉著 2,5-二氯苯基硼酸與 2-(溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑於標準 Suzuki 偶聯條件下進行反應而製備。而且，對應之三唑化合物(10)亦可藉著 2,5-二氯苯基硼酸與單官能性 3-(4-溴苯基)-4-(4-苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-4H-1,2,4-三唑中間體反應而製備。通式 CCLX 之二氯中間體可藉鹵素交換轉化成對應之二溴中間體，例如，藉著於催化量 FeBr_3 存在下與溴化氫反應(Yoon等, J. Chem. Soc. Commun., 13, 1013-1014 (1987))。



通式I之一有效具體實例中， $\text{Ar}^1-(\text{E}_y)_a$ 基團係為萘。此等可(例如)使用二芳醯肼環縮合路徑根據反應流程圖VI製得，其中 R^z 係如反應流程圖I所定義，且 R^3 個別係為氫、 C_{1-30} 烷基、 C_{1-30} 烯基、 C_{6-20} 芳基、 C_{3-20} 雜芳基、或含有一或多個S、N、O、P或Si原子的 C_{1-30} 烴基。反應流程圖VI之步驟(1)中，通式CCLXII之2,7-二溴萘藉著於惰性溶劑諸如二硫化碳中於氯化鋁存在下，與甲氧羰基氯反應以轉化成通式CCLXIII之4-甲酯。步驟(2)中，通式CCLXIII之4-甲酯係藉著於加熱下與肼反應而轉化成通式CCLXIV之肼。步驟(3)中，通式CCLXIV之肼係藉著於三乙胺存在下，與通式CCLIV之未經取代或經取代苄醯氯縮合，而轉化成通式CCLXV之苄醯芳醯肼。步驟(4)中，通式CCLXV之苄醯芳醯肼係於回流下與磷醯氯環縮合，產生通式CCLXVI之二溴萘基-1,3,4-噁二唑。

反應流程圖 VI



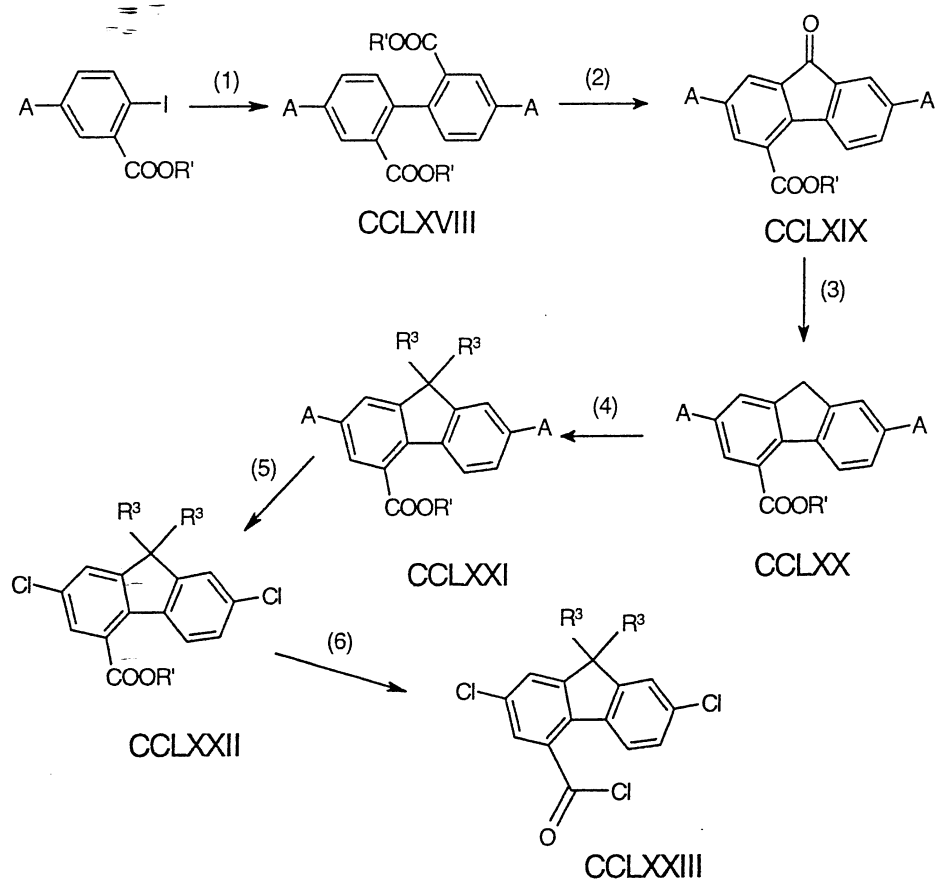
例如，電子傳遞中間體 2-(2,7-二溴-9,9-二辛基-9H-芴-4-基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑可藉此方法製得。此情況下，2,7-二溴-9,9-二取代芴中間體係轉化成 4-甲酯 (Bokova 等，J. Org. Chem. USSR (Engl. Transl.), 5, 1103-1106 (1969))；Schidlo 等，Chem Ber., 96, 2595-2600 (1963))，與肼反應，之後與 4-(辛氧基)苄醯氯縮合，產生 2,7-二溴-N'-[4-(辛氧基)苄醯]-芴醯肼中間體，此中間體進行環縮合而產生所需之中間體。

對應之噁二唑及三唑可如同反應流程圖 III，藉著通式 CCLXV 之中間體苄醯芳醯肼與 P_2S_5 於置換條件下進行反應，產生 1,3,4-噁二唑，之後如同反應流程圖 IV 般與 R_1NH_2 反應，產生 1,3,4-三唑。

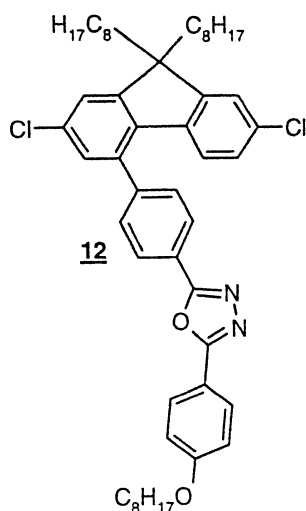
在以下反應流程圖 VII 中， $Ar^1-(E_y)_a$ 基團亦可經由通式

CCLXVII之經碘取代的苄醯氧酯(其中A係為H、Cl或Br，且R¹係為C₁₋₄烷基)與銅/青銅之步驟(1) Ulmann自體偶聯反應(參照Rule等，J. Chem. Soc., 1096-1101 (1937)); Namkung等，J. Med. Chem. Soc., 8, 551-554 (1965))構成，形成之通式CCLXVIII聯苯酸隨之進行以酸促進之環閉合(Huntress等，J. Am. Chem. Soc., 55, 4262-4270 (1933))，例如於170°C下使用硫酸，而產生通式CCLXIX之9-萸酮。9-萸酮於步驟(3)中以紅磷還原，產生通式CCLXX之萸，其可於步驟(4)中藉著與丁基鋰反應，之後藉R³-鹵化物或藉相轉移方法採用(例如)氯化苄基三乙銨於二甲基亞砷中反應，隨之藉50%氫氧化鈉水溶液及後續R³-Br反應而將9-位置烷基化。形成之通式CCLXXI之9-烷基化萸(其中A係為H，且R'係為甲基)在2及7位置上的鹵化可(例如)藉著於步驟(5)中於甲基環氧乙烷中與氯反應產生通式CCLXXII之2,7-二氯萸(其中R'係為甲基)(Schidlo等，Chem Ber., 2595-2600 (1963))而達成。於步驟(6)中使用亞磺醯氯處理通式CCLXXII之2,7-二氯萸產生通式CCLXXIII之醯基氯中間體。醯基氯中間體之醯基氯基隨之可如同反應流程圖II-IV經由苄醯肼或如同反應流程圖I藉著直接與四唑偶聯，而形成該喹二唑、噻二唑、或三唑。

反應流程圖 VII



該電子傳遞中間體 2-[4-(2',7'-二氯-9',9'-二辛基-9'H-萸-4'-基)苯基]-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑 (12)

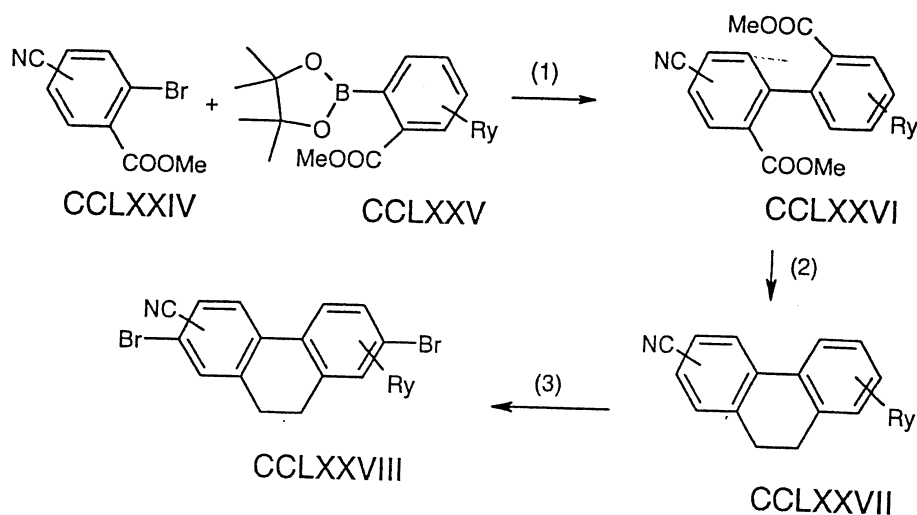


可藉著 2,7-二氯-9,9-二辛基-9H-萸之單溴化產生 4-溴-2,7-

二氯-9,9-二辛基-9H-芴，轉化成對應之二氯伯瑞烷 (dichloroborolane)，之後與2-(4-溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑於標準Suzuki偶聯條件下反應而製備。

基於9,10-二氫菲之 $\text{Ar}^1-(\text{E}_y)_a$ 基團可藉著以下反應流程圖VIII所示之方法合成。步驟(1)中，通式CCLXXV之苯基硼腴與通式CCLXXIV之氰基溴苄酸甲酯進行Suzuki偶聯，產生通式CCLXXVI之氰基聯苯酸酯。步驟(2)中，偶姻還原(Fritsch等，Chem. Ber., 125, 849-855 (1992))可提供通式CCLXXVII之氰基-9,10-二氫菲。步驟(3)中，於(例如)室溫下二氯甲烷中，使用溴將CCLXXVII溴化產生通式CCLXXVIII之二溴-氰基-9,10-二氫菲，其氰基藉鹼處理轉化成羧酸基或於回流下於DMF中藉 NaN_3 及 NH_4Cl 處理轉化成四唑基。噁二唑、噻二唑、或三唑基團可藉著於甲基環氧丙烷中先使用亞磺醯氯鹵化，之後形成噁二唑、噁二唑、或三唑基團，而自羧酸基形成，如同反應流程圖II、III或IV。該四唑可如反應流程圖II所示與芳醯氯反應，形成噁二唑。

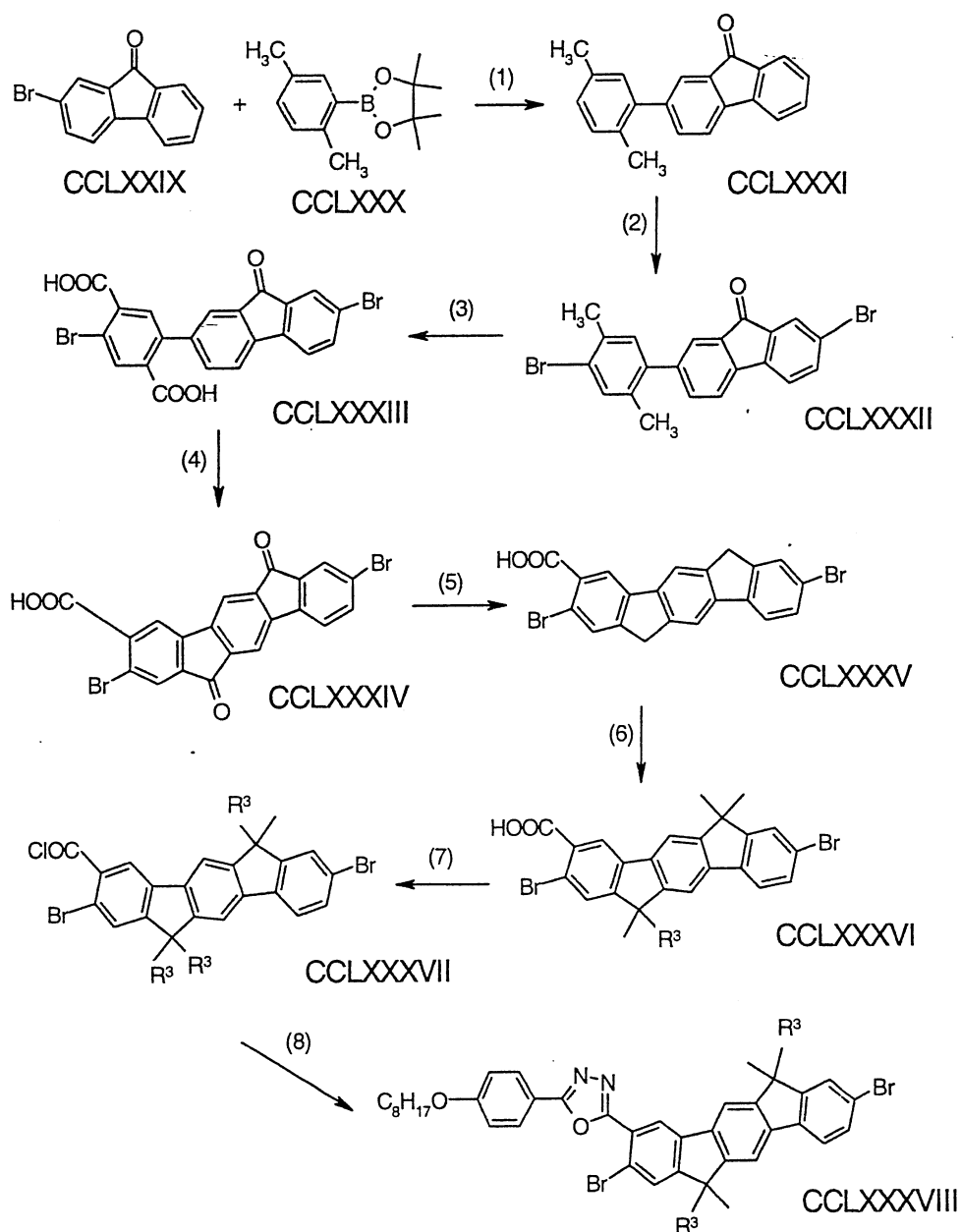
反應流程圖 VIII



$\text{Ar}^1-(\text{E}_y)_a$ 基團可使用反應流程圖IX之方法，藉著製備2,8-二溴-6,12-二氫茛苳并[1,2-b]萸而製備。步驟(1)中，2-(2,5-二甲基苯基)-4,4,5,5-四甲基[1,3,2]二氧硼腴(CCLXXX)與市售2-溴-9-萸(CCLXXIX)進行Suzuki偶聯，產生2-(2,5-二甲基苯基)萸-9-酮(CCLXXXI)。市售2-溴-對-二甲苯係藉丁基鋰處理，且鋰化中間體與2-異丙氧-4,4,5,5-四甲基[1,3,2]二氧硼腴反應，而轉化成2-(2,5-二甲基苯基)-4,4,5,5-四甲基[1,3,2]二氧硼腴(CCLXXX)。步驟(2)中，2-(2,5-二甲基苯基)萸-9-酮(CCLXXXI)可於0°C下於氯仿中以溴轉化成2-溴-7-(4-溴-2,5-二甲基苯基)萸-9-酮(CCLXXII)。苯環之4'-位置的區域專一性溴化係由5'-甲基及萸取代基引導。步驟(3)中，2-溴-7-(4-溴-2,5-二甲基苯基)萸-9-酮(CCLXXII)可進行高錳酸鉀氧化，產生2-溴-5-(7-溴-9-合氧基-9H-萸-2-基)對苯二甲酸(CCLXXIII)。步驟(4)中環閉合成2,8-二溴-6,12-二氧雜-6,12-二氫茛苳并[1,2-b]萸-3-甲酸(CCLXXXIV)係使用硫酸處理進行。步驟(5)中，2,8-二溴-6,12-二氧雜-6,12-二氫茛苳并[1,2-b]萸-3-甲酸(CCLXXXIV)使用紅磷還原產生2,8-二溴-6,12-二氫茛苳并[1,2-b]萸-3-甲酸(CCLXXXV)。步驟(6)中，與丁基鋰反應，之後以 R^3 -鹵化物或於二甲基亞砷中使用(例如)氯化苄基三乙銨藉相轉移方法，之後使用50%氫氧化鈉水溶液，之後 $\text{R}^3\text{-Br}$ 來進行烷基化，產生通式CCLXXXVI之茛苳并[1,2-b]衍生物。使用亞磺醯氯處理通式CCLXXXVI之茛苳并[1,2-b]萸，產生通式CCLXXXVII之反應性醯基氯中間體。該噁二唑、噻二唑、或三唑可如同反應流程圖II-IV經由苯醯肼中間體或如同反應流程圖I與四唑直接偶聯，而於

醯基氯中間體之醯基氯基上形成。步驟(8)中，例如通式 CCLXXXVII 之喹二唑係藉由通式 CCLXXXVII 醯基氯中間體與 5-(4-辛氧苯基)-1H-四唑之反應提供，如同反應流程圖 I。

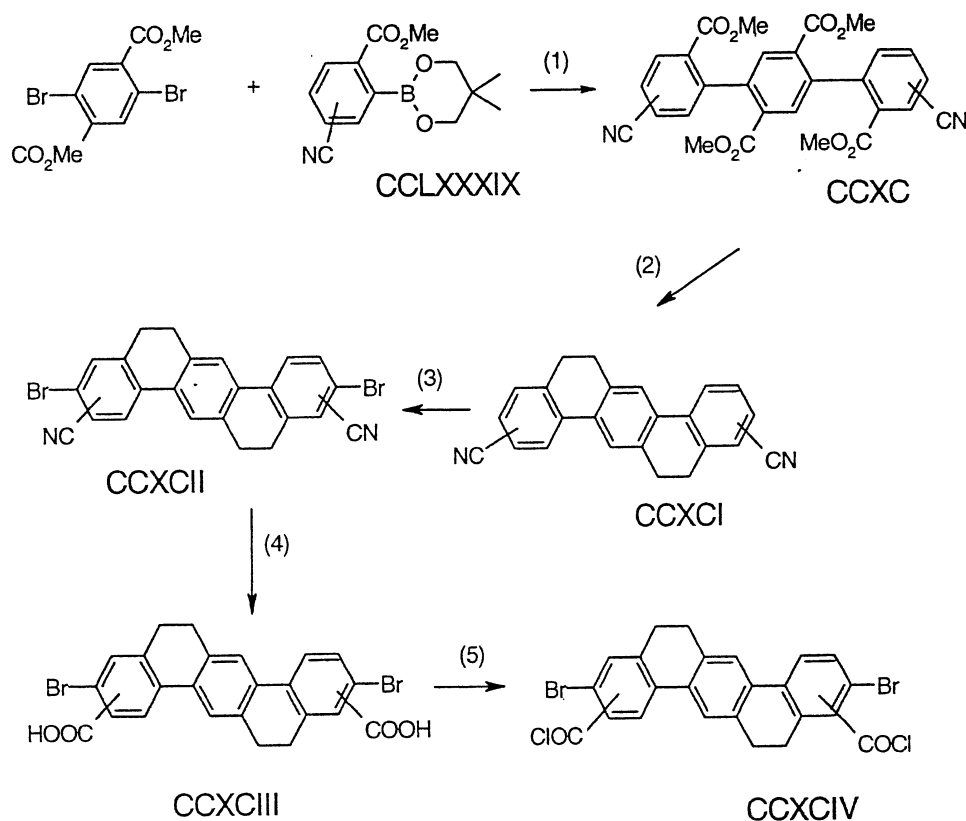
反應流程圖 IX



具有一或兩個被 E_y 取代之末端環的 Ar¹-(E_y)_a 基團可如同以下反應流程圖 X 所說明，藉著先製得 3,10-二溴-5,6,12,13-

四氫二苯并[a,h]蔥之二羧基而製得。步驟(1)中，2,4-二溴對苯二甲酸二甲酯(購自 Maybridge Chemical Co., UK)與通式 CCLXXXIX 之氰基苯基硼腴反應(參照 Kristensen 等, *Org. Lett.*, 10, 1435-1438 (2001))產生通式 CCXC 之經氰基取代的三苯基化合物。步驟(2)中，通式 CCXC 化合物進行偶姻還原(參照 Fritsch 等, *Chem Ber.*, 125, 849-855 (1992))可產生通式 CCXCI 之經二氰基取代的 5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥。步驟(3)中，於 0°C 下於氯仿中，以溴進行二溴化，產生通式 CCXCII 之經二氰基取代的 3,10-二溴-5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥。步驟(4)中，以鹼處理通式 CCXCII 之化合物，產生通式 CCXCIII 之二羧酸。步驟(5)中，使用亞磺醯氯處理通式 CCXCIII 之化合物，產生通式 CCXCIV 之反應性醯基氯中間體。

反應流程圖 X



該喹二唑、噻二唑、或三唑可如同反應流程圖II-IV般經由苜醯芳醯胺中間體或如同反應流程圖I般直接與四唑偶聯，而於通式CCXCIV之醯基氯中間體的醯基氯基上形成。

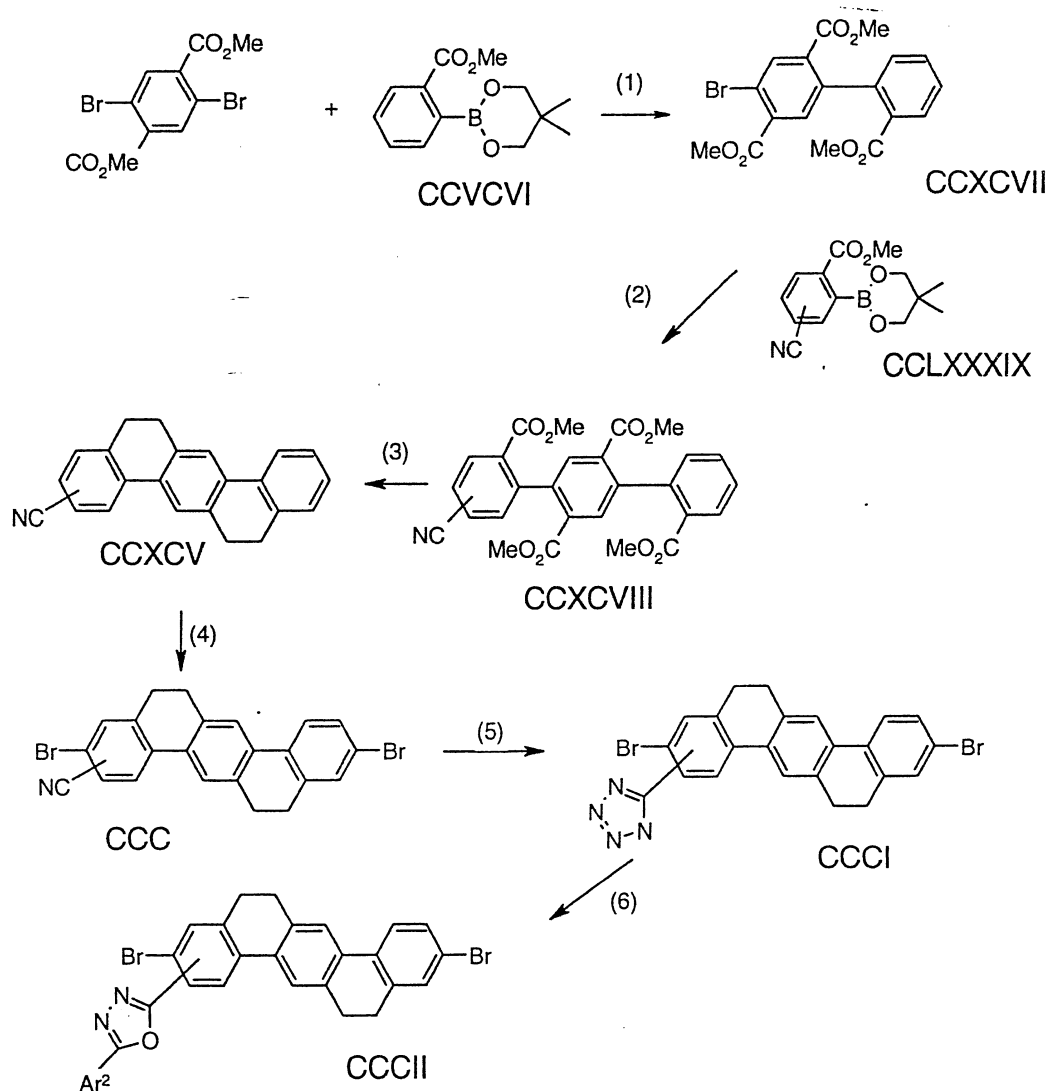
或通式CCXCII之經二氰基取代的3,10-二溴-5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥之氰基可於回流下於DMF中使用NaN₃及NH₄Cl處理，以轉化成四唑基團。該四唑可如反應流程圖I所示地與芳醯氯反應，以形成喹二唑。

通式CCXCV之經單氰基取代的5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥可經由流程圖XI所示之連續Suzuki偶聯製得。步驟(1)中，通式CCXCVI之苯基硼腴係與過量(一般為5當量)2,4-二溴對苯二甲酸二甲酯反應，產生通式CCXCVII之4-溴聯苯的主要產物。步驟(2)中，在純化之後，該通式CCXCVII之4-溴聯苯係於相同Suzuki偶聯條件下與通式CCLXXXIX之氰基苯基硼腴反應，產生通式CCXCVIII之經單氰基取代的聯三苯。步驟(3)中，如同反應流程圖X所示之偶姻還原產生通式CCXCV之經單氰基取代的5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥。在步驟(4)中，例如於0°C下於氯仿中以溴進行二溴化之後，產生通式CCC之二溴單氰基化合物。步驟(5)中，該通式CCC之二溴單氰基化合物可於回流下於DMF中與NaN₃及NH₄Cl反應，以形成通式CCCI之四唑，其可於步驟(6)中與芳醯氯Ar²C(O)Cl反應，形成通式CCCII之具有側向喹二唑的5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蔥。

或通式CCC之化合物上的氰基可水解以形成羧酸，其又可使用亞磺醯氯處理，以形成醯基氯中間體。該醯基氯中

間體可如同反應流程圖II與芳醯肼反應，以形成芳醯芳醯肼，其可如反應流程圖II-IV所述般地轉化成喹二唑、噻二唑、或三唑。

反應流程圖 XI



前述反應流程圖中所製備之二鹵基中間體可藉[1,1'-雙(二苯膦基)二茂鐵]二氯鈹催化，於二甲基亞砜中使用雙(頻那醇根基)二硼及乙酸鉀處理，產生二硼腴衍生物而轉化成對應之二硼腴(Meng等, *J. Am. Chem. Soc.*, 123(37), 9214-

9215 (2001))。

通式V化合物之合成可藉著具有特定封端基之芳基酞酸酯與過量之特定芳族核心中間體的二鹵化物於Suzuki偶聯條件下反應，生成具有一偶聯於一單鹵化芳族核心基團的封端基之中間體。此中間體隨之可藉[1,1'-雙(二苯膦基)二茂鐵]二氯鈣催化，於二甲基亞砷中使用雙(頻那醇根基)二硼及乙酸鉀處理，而轉化成對應之芳基酞酸酯中間體(Ishiyama等, *J. Org. Chem.*, 60, 7508-7510 (1995))。該芳基酞酸酯中間體可於Suzuki偶聯條件下與具有相同或相異結構之末端封端且單鹵化之芳族核心偶聯，以得到最終之通式V化合物。

組合物

技術界需要一種溶液可加工之電致發光組合物，其可均勻塗覆或印刷於基材上，以製造有機電致發光裝置。此等組合物所製備之OLED裝置較佳應提供下列中至少一項：低操作電壓、高值外量子效率、適當之色彩座標(例如供顯示應用之紅色、綠色及藍色或供背照應用之白色)、長工作壽命、及與印刷方法(例如噴墨印刷、雷射引發之熱成像、照相凹版印刷等)之相容性。

本發明一方面提供一種可使用於有機電子裝置(諸如有機電致發光裝置)中的組合物。該組合物係包括通式I化合物，其係與電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、發光材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物摻合。該電荷傳遞材料可為小分子或聚合物材料，且可傳遞電洞、電子或

其組合物。該電荷阻隔材料可為小分子或聚合物材料，且可阻隔電洞、電子、或其組合物。該發光材料及色彩轉換材料可為小分子或聚合物材料。該摻合物可藉(例如)於溶液或熔體狀態下摻合該化合物而製備。該組合物可為自摻合化合物製備之薄膜形式。

該組合物可藉著將該材料熱圖案化於受體上而用於製造有機電子裝置。其亦可用於非熱印刷、圖案化、及轉移方法，包括例如噴墨印刷、網版印刷、及微影圖案化。

可使用於此等組合物中之電洞傳遞劑以選自前述三級芳族胺衍生物、前述富含電子之仲雜芳基衍生物、富含電子之無機及有機金屬錯合物、或自此等材料衍生之聚合物為佳。可使用於此等摻合物之電洞傳遞聚合物係包括聚乙烯基吡啶、以三級胺為主之聚合物(DE專利編號3,610,649、美國專利第5,681,664號、專利申請案WO 99/32537及專利申請案WO 98/06773教示之類型，所有利物皆以引用方式併入本文)。電洞傳遞劑之其他實例係包括銅酞花青(CuPC)及諸如H. Fujikawa等, Synthetic Metals, 91, 161 (1997)及J.V. Grazulevicius等, "Charge-Transporting Polymers and Molecular Glasses", Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices, H.S. Nalwa (ed.), 10, 233-274 (2001) 所述之化合物。

此等摻合系統中可使用之電子傳遞劑可選自多環芳族烴、且有-C=N-單元之雜芳族化合物、及缺乏電子之無機錯合物。適當之電子傳遞劑係包括喹二啉衍生物，諸如2-(4-

聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(亦稱為PBD)、1,3-雙[5-(4-(\square),1-二甲基乙基)苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(已知為PBD二聚物)及噁二唑之星芒狀及樹枝狀衍生物(Bettenhausen等, Synthetic Metals, 91, 223 (1997)); N-經取代之三唑, 諸如3-(4-聯苯基)-4-苯基-5-(4-第三丁基苯基)1,2,4-三唑(亦稱為TAZ)及三唑之星芒狀及樹枝狀衍生物; 有機金屬化合物, 諸如三(8-羥基喹啉根基)鋁(Alq₃)及聯苯根基雙(8-羥基喹啉根基)鋁(Balq); 及其他描述於C.H. Chen等, Macromol. Symp. 125, 1 (1997)及J.V. Grazulevicius等, "Charge-Transporting Polymers and Molecular Glasses", Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices, H.S. Nalwa (ed.), 10, 233 (2001)。

可使用於此等摻合系統之小分子發光劑不限制, 但一般選自由螢光多環伸芳基及伸雜芳基衍生物、Ir(III)、Rh(III)、Os(II)、Ru(II)、Ni(II)及Pt(II)之磷光環金屬化鉗合劑錯合物、及Zn(II)及Al(III)之螢光鉗合劑錯合物衍生之分子發光劑。可使用之螢光多環伸芳基發光劑的實例係包括自芘、苯并[g,h,i]芘、蔥、芘、十環烯及蒽所衍生之分子。可使用之螢光多環伸雜芳基衍生物的實例係包括自香豆衍生之分子, 諸如10-(2-苯并噻唑基)-2,3,6,7-四氫-1,1,7,7-四甲基-1H,5H,11H-[1]苯并吡喃并[6,7,8-ij]喹啉-11酮(亦稱為香豆素C545T)、3-(2-苯并噻唑基)-7-二乙胺基香豆素(亦稱為香豆素6或香豆素540)及3-噻吩基-7-甲氧香豆素。

可使用之Ir(III)、Rh(III)、Os(II)、Ru(II)及Pt(II)之磷光環

金屬化鉈合劑錯合物的實例係包括自燐光有機金屬 $L^1_3Ir(III)$ 、 $L^1_3Rh(III)$ 、 $L^1L^2Ir(III)X$ 、 $L^1L^2Rh(III)X$ 、 $L^1L^2Os(II)Y$ 、 $L^1L^2Ru(II)Y$ 、 $L^1L^2Pt(II)$ 化合物衍生之分子，其中 L^1 及 L^2 各可相同或相異，且係為2-(1-萘基)苯并喹啉、2-萘基苯并喹啉、2-萘基苯并噻啉、2-萘基苯并咪啉、7,8-萘并喹啉、香豆素、(噻吩基吡啶)、萘基吡啶、萘并噻吩基吡啶、3-甲氧-2-萘基吡啶、噻吩基吡啶、甲萘基吡啶之視情況經取代的環金屬化二配位基配位體；X係選自乙醯基丙酮("acac")、六氟乙醯基丙酮、亞水楊基、皮考啉酸根、及8-羥基喹啉酸根；Y係選自電荷中性鉈合化合物，諸如菲繞啉或聯吡啶之視情況經取代衍生物。環金屬化Ir(III)鉈合劑衍生物(諸如專利申請案WO 00/70655及WO 01/41512 A1所揭示)，及環金屬化Os(II)鉈合劑衍生物(諸如2001年8月22日申請之美國專利申請案S.N. 09/935,183第號所教示)係以引用方式併入本文。亦可使用樸啉鉑(II)，諸如八乙基樸啉(亦稱為Pt(OEP))。

可使用之Zn(II)及Al(III)螢光鉈合劑錯合物實例係包括錯合物諸如雙(8-喹啉根基)鋅(II)、雙(2-2-羥基萘基)苯并喹啉酸根)鋅(II)、雙(2-(2-羥基萘基)苯并噻啉根)鋅(II)、雙(2-(2-羥基萘基)-5-萘基-1,3,4-喹二啉)鋅(II)、雙(8-喹啉根基)鋁(III)、及聯萘根基雙(8-羥基喹啉根基)鋁(BALq)。螢光Zn(II)鉈合劑(諸如Tokito等，Synthetic Metals, 111-112, 393-396 (2000)及專利申請案WO 01/39234 A2所教示)皆以引用方式併入本文。可使用之Al(III)鉈合劑係包括美國專利

第6,203,933 B1號所教示者。

適用於此等摻合物之發光聚合物係為聚萘(PFs)、聚對伸苯基(PPPs)、聚伸苯基伸乙烯(PPVs)、及聚螺雙萘。

於一具體實例中，通式I之化合物與一或多種材料摻合，以提供可傳遞電洞及電子兩者之組合物。例如，可傳遞電子之通式I化合物可與小分子或聚合物電洞傳遞材料結合。該組合物可藉著摻合比例及所選擇之化合物而達到電荷平衡。發光聚合物或電致發光小分子可視情況添加於該摻合物，以形成可形成有機發光元件之組合物。

此等類型之組合物可為溶液可加工，且可旋塗以產生電致發光薄膜。該組合物可為例如可自施體物質轉移至受體物質之非晶形薄膜形式。該組合物可進行熱成像以形成可使用於OLED顯示器製造之已像素化陣列，且可藉著在特定範圍內改變薄膜厚度及成份比例來最佳化，以得到高量子效率電致發光。發光顏色可藉著選擇發光材料而改變。例如，芘、雙(2-(2-羥基苯基)苯并噁唑酸根)鋅(II)或3-噻吩基-7-甲氧基-香豆素產生藍色發光；苯并噻吩基吡啶乙醯基丙酮酸銨(III)、或八乙基撲啉產生紅色發光；香豆素6、香豆素C545T及Ir(ppy)₃產生綠色發光；而經第三丁基化之十環烯產生白色發光。

該組合物可包括通式I之第一化合物及與第一化合物具有結構相似性之第二化合物。通式I化合物具有一芳族核心及兩連接於該芳族核心之末端封端基團。第二化合物可包括一包括第一化合物芳族核心之基團、一包括第一化合物

末端封端基團之單價基團、一包括第一化合物之末端封端基團之二價基團、或其組合物。該第二化合物可例如為發光材料、色彩轉換材料、電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、聚合物黏合劑、或其組合物。

於此態樣中，第二化合物可未經取代，可具有與存在於第一化合物之對應結構上相同之類型三取代基，可經不存在於該第一化合物之對應結構上的取代基所取代。部分具體實例中，位於第二化合物之基團上的取代基可與位在第一化合物之對應結構上者相同。而第一化合物之對應結構可為第一芳族核心、第一末端封端基團、或第一末端封端基團之二價基團。第二化合物之基團及第一化合物之對應結構兩者皆可不含取代基。特例中，第一末端封端基團可為不具有任何取代基之蔥基團，且第二化合物包括不具有任何取代基之蔥基團。相同地，第二化合物之基團與第一化合物之對應結構兩者皆可具有相同之取代基。特例中，該第一種末端封端基團可為具有甲氧取代基之蔥基團，而第二化合物包括在與第一末端封端基團相同位置上具有甲氧取代基的蔥基團。

此外，該第二化合物可含有與第一化合物對應結構類似(但不相同)之基團。例如，第一化合物對應結構上可不存有位於第二化合物之基團上的取代基。特例中，第一種末端封端基團係為不具有任何取代基之蔥基團，而第二化合物包括具有甲氧取代基之蔥基團。相同地，第二化合物之對應結構可不存有位在第一化合物中所包括之基團上的取代

基。另一特例中，第一化合物具有含有甲基取代基之螺雙萸基團的末端封端基團，而第二化合物具有未經取代螺雙萸基的末端封端基團。

位於第二化合物之基團上的取代基可為與位在第一化合物對應結構上之取代基相同類型(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、或其組合物)，但含有不同數目之碳原子。特例中，該第一末端封端基團係為具有甲氧取代基之蒎基團，而第二化合物係包括具有乙氧取代基之蒎基團。另一特例中，第一化合物具有經甲基取代之螺雙萸基的末端封端基團，且第二化合物含有經第三丁基取代之螺雙萸基團的末端封端基團。

若第一化合物及第二化合物係於相同位置上經取代，則其取代基無法具有不同類型。特例中，若第一末端封端基團係為經甲基取代之螺雙萸基團，則第二化合物具有經苯基取代之螺雙萸基團，而此苯基位在與第一末端封端基團相同的位置上，而該基團不視為結構相似。

該組合物之第二化合物可為小分子(即非聚合物)或可為聚合物材料。部分具體實例中，該組合物係同時包括電洞傳遞材料及電子傳遞材料。其他具體實例中，該組合物係包括電洞傳遞材料、電子傳遞材料、及發光材料。

本發明組合物之一具體實例中，第一化合物係為通式I之化合物且具有第一末端封端基團(例如第一化合物可表示為通式 Z_1-A-Z_1 ，其中A係為芳族核心，且 Z_1 係為兩相同之

末端封端基團)。第二化合物可為聚合物或小分子(即非聚合物), 且具有第二末端封端基團, 此基團包括該第一末端封端基團(例如第二化合物具有末端封端基團 Z_2 ; 且 Z_2 包括 Z_1)。

此第一具體實例之變化形式中, 該第一末端封端基團或第二末端封端基團具有不存在另一部分中之取代基。另一變化形式中, 該第一末端封端基團及第二末端封端基團係具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基或其組合物), 但取代基中之碳原子數目不同。

第二具體實例中, 該第一化合物係為通式I之化合物且具有第一芳族核心(例如該第一化合物可表示為(例如)通式 $Z-A_1-Z$, 其中 A_1 係為第一芳族核心, 且 Z 係為兩相同末端封端基團)。該第二化合物可為聚合物或小分子且含有包括第一芳族核心之基團(例如第二化合物含有基團 A_2 , 而 A_2 包括 A_1)。

第二具體實例之變化形式中, 該第二化合物之第一芳族核心或對應之基團係具有不存在於另一部分中的取代基。其他變化形式中, 該第一芳族核心及第二化合物中之對應基團係具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、或其組合物), 但取代基中之碳原子數目不同。

第三具體實例中, 該第一化合物係為通式I化合物且具有第一末端封端基團(例如第一化合物可表示為例如通式

Z_1-A-Z_1 ，其中A係為芳族核心，且 Z_1 係兩相同第一末端封端基團)。第二化合物係為小分子，且具有第二末端封端基團，此基團包括第一末端封端基團(例如第二化合物可表示為例如通式 Z_2-B-Z_2 ，其中B係為芳族核心，且 Z_2 係為兩相同第二末端封端基團；且 Z_2 係包括 Z_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，此薄膜包括具有一活性(即電活性或電致發光)芳族核心的兩個小分子。可使用類似末端封端基團以促進兩個小分子的相容性。

第三具體實例之變化形式中，該第一末端封端基團或第二末端封端基團可含有另一末端封端基團所缺乏之取代基。另一變化形式中，第一及第二末端封端基團兩者皆可具有相同類型取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基或其組合物)，但該取代基可含有不同數周之碳原子。

第四具體實例中，該組合物係包括通式I化合物、小分子之第二化合物、及發光聚合物之第三種化合物。該第一化合物係具有第一末端封端基團(例如該第一化合物可表示為例如通式 Z_1-A-Z_1 ，其中A係為芳族核心，且 Z_1 係為兩個相同第一末端封端基團)，第二化合物具有包括第一末端封端基團之第二末端封端基團(例如第二化合物可表示為例如通式 Z_2-B-Z_2 ，其中B係為芳族核心，且 Z_2 係為兩個相同第二末端封端基團；而 Z_2 包括 Z_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，此薄膜包括含有發光聚合物的小分子摻合物，其中該第一種及第二化合物的末端封端基團可促進整體組

合物的相容性。該小分子可包括活性芳族核心。

第四具體實例之變化形式中，該第一末端封端基團或第二末端封端基團可含有在另一末端封端基團中缺乏之取代基。另一變化形式中，第一及第二末端封端基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、或其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第五具體實例中，該組合物係包括通式I之第一化合物、小分子之第二化合物、及電活性聚合物之第三種化合物。該第一化合物具有第一末端封端基團(例如第一化合物可表示為例如通式 Z_1-A-Z_1 ，其中A係為芳族核心，且 Z_1 係為兩個相同之第一末端封端基團)，而第二化合物具有包括第一末端封端基團的第二末端封端基團(例如第二化合物可表示為例如通式 Z_2-B-Z_2 ，其中B係為芳族核心，且 Z_2 係為兩個相同之第二末端封端基團；且 Z_2 包括 Z_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，此薄膜包括含有電活性聚合物之小分子摻合物，其中該第一及第二化合物的末端封端基團可促進整體組合物的相容性。該小分子可包括活性芳族核心。

第五具體實例之變化形式中，第一末端封端基團或第二末端封端基團可含有另一末端封端基團所缺乏之取代基。另一變化形式中，第一及第二末端封端基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、或其組合物)，但該取代基可含有不同數目的碳原子。

第六具體實例中，該組合物包括通式I之第一化合物、小分子之第二化合物、及非活性聚合物之第三化合物。本發明所使用之「非活性聚合物」一辭係表示非電活性且非發光聚合物之聚合物。該非活性聚合物可作為(例如)第一化合物及第二化合物之基質。該第一化合物具有第一末端封端基團(例如第一化合物可表示為例如通式 Z_1-A-Z_1 ，其中A係為芳族核心，且 Z_1 係兩個相同之第一末端封端基團)，而第二化合物具有包括第一末端封端基團之第二末端封端基團(例如該第二化合物可表示為例如通式 Z_2-B-Z_2 ，其中B係為芳族核心，且 Z_2 係為兩個相同第二末端封端基團；且 Z_2 係包括 Z_1)。該組合物可用以例如製備一薄膜，該薄膜包括位於非活性聚合物基質中之小分子摻合物，其中該第一及第二化合物之末端封端基團可促進整體組合物之相容性。該小分子可包括活性芳族核心。

此第六具體實例之變化形式中，該第一末端封端基團或第二末端封端基團可含有不存在另一末端封端基團中的取代基。另一變化形式中，該第一及第二末端封端基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、或其組合物)，但該取代基可含不同數目之碳原子。

第七具體實例中，該組合物係包括通式I之第一化合物及小分子之第二化合物。該第一化合物係具有第一芳族核心(例如第一化合物可表示為例如通式 $Z-A_1-Z$ ，其中 A_1 係為第一芳族核心，且Z係為兩個相同末端封端基團)，該第二化

合物係含有包括第一芳族核心之對應基團(例如, 第二化合物可表示為例如通式 $Y-A_2-Y$, 其中 A_2 係為第二芳族核心, 且 Y 係為兩相同末端封端基團; 且 A_2 包括 A_1)。該組合物可用於例如製備一薄膜, 此薄膜包括兩個具有活性(即電活性或電致發光)末端封端基團之小分子。該類似芳族核心可用以(例如)促進該兩小分子之相容性。

第七具體實例之變化形式中, 第一芳族核心或第二化合物中之對應基團係含有另一部分所缺乏的取代基。另一變化形式中, 第一芳族核心及第二化合物中之對應基團係具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物), 但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第八具體實例中, 該組合物包括通式I之第一化合物、小分子之第二化合物、及發光聚合物之第三化合物。該第一化合物具有第一芳族核心(例如第一化合物可表示為例如通式 $Z-A_1-Z$, 其中 A_1 係為第一芳族核心, 且 Z 係為兩相同末端封端基團), 而第二化合物含有包括第一芳族核心之對應基團(例如第二化合物可表示為例如通式 $Y-A_2-Y$, 其中 A_2 係為第二芳族核心, 且 Y 係為兩相同末端封端基團; 且 A_2 包括 A_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜, 該薄膜係包括含有發光聚合物之小分子摻合物, 其中第一及第二化合物之芳族核心可促進整體組合物之相容性。該小分子可包括(例如)活性末端封端基團。

第八具體實例之變化形式中, 第一芳族核心或第二化合

物中之對應基團可含有另一部分所缺乏的取代基。另一變化形式中，第一芳族核心及第二化合物中之對應基團係具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第九具體實例中，該組合物包括通式I之第一化合物、小分子之第二化合物、及電活性聚合物之第三化合物。該第一化合物具有第一芳族核心(例如第一化合物可表示為例如通式 $Z-A_1-Z$ ，其中 A_1 係為第一芳族核心，且 Z 係為兩相同末端封端基團)，而第二化合物含有包括第一芳族核心之對應基團(例如第二化合物可表示為例如通式 $Y-A_2-Y$ ，其中 A_2 係為第二芳族核心，且 Y 係為兩相同末端封端基團；且 A_2 包括 A_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，該薄膜係包括含有電活性聚合物之小分子摻合物，其中第一及第二化合物之芳族核心可促進整體組合物之相容性。該小分子可包括(例如)活性末端封端基團。

第九具體實例之變化形式中，第一芳族核心或第二化合物中之對應基團可含有另一部分所缺乏的取代基。另一變化形式中，第一芳族核心及第二化合物中之對應基團係具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第十具體實例中，該組合物包括通式I之第一化合物、小分子之第二化合物、及非活性聚合物之第三化合物。該第

一化合物具有第一芳族核心(例如第一化合物可表示為例如通式 $Z-A_1-Z$ ，其中 A_1 係為第一芳族核心，且 Z 係為兩相同末端封端基團)，而第二化合物含有包括第一芳族核心之對應基團(例如第二化合物可表示為例如通式 $Y-A_2-Y$ ，其中 A_2 係為第二芳族核心，且 Y 係為兩相同末端封端基團；且 A_2 包括 A_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，該薄膜係包括含有非活性聚合物之小分子摻合物，其中第一及第二化合物之芳族核心可促進整體組合物之相容性。該小分子可包括(例如)活性末端封端基團。

第十具體實例之變化形式中，第一芳族核心或第二化合物中之對應基團可含有另一部分所缺乏的取代基。另一變化形式中，第一芳族核心及第二化合物中之對應基團係具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第十一具體實例中，該組合物包括通式I之第一化合物及聚合物之第二化合物。該第一化合物具有第一芳族核心(例如第一化合物可表示為例如通式 $Z-A_1-Z$ ，其中 A_1 係為第一芳族核心，且 Z 係為兩相同末端封端基團)。該聚合物係為單體混合物之反應產物，該單體混合物係包括含有包括第一芳族核心之基團的第一單體(例如第一單體含有基團 A_2 ；且 A_2 包括 A_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，該薄膜係包括具有與聚合物共有之基團的小分子。該共有基團可促進組合物中之化合物的相容性。

第十一具體實例之變化形式中，第一芳族核心或第二化合物中之對應基團可含有另一部分所缺乏的取代基。另一變化形式中，第一芳族核心及第二化合物中之對應基團係具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第十二具體實例中，該組合物包括通式I之第一化合物及聚合物之第二化合物。該第一化合物含有第一末端封端基團(例如第一化合物可表示為例如通式 Z_1-A-Z_1 ，其中A係為芳族核心，且 Z_1 係為兩相同第一末端封端基團)。該聚合物係為單體混合物之反應產物，該單體混合物係包括含有包括第一末端封端基團二價基團之二價基團的第一單體(例如第一單體含有基團 Z_2 ；且 Z_2 包括 Z_1)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，該薄膜係包括具有與聚合物共有之基團的小分子。該第一及第二化合物兩者中的類似基團可促進組合物中之化合物的相容性。

第十二具體實例之變化形式中，第一末端封端基團或第二末端封端基團可含有另一末端封端基團所缺乏的取代基。另一變化形式中，兩末端封端基團可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第十三具體實例中，該組合物包括通式I之第一化合物、小分子之第二化合物、及聚合物。該第一化合物含有第一

末端封端基團及第一芳族核心(例如第一化合物可表示為例如通式 Z_1-A-Z_1 ，其中A係為第一芳族核心，且 Z_1 係為兩相同第一末端封端基團)。該第二化合物具有包括第一末端封端基團 Z_1 之第二末端封端基團，但第二芳族核心係異於第一芳族核心(例如第二化合物可表示為例如通式 Z_2-B-Z_2 ，其中B係為第二芳族核心，且 Z_2 係為兩相同第二末端封端基團； Z_1 係包括 Z_2 ；且B不包括A)。該聚合物係為單體混合物之反應產物，該單體混合物包括含有包括第一芳族核心之基團的第一單體及含有包括第二芳族核心之基團的第二單體(例如該第一單體含有基團 A_3 ，而該第二單體含有基團 B_3 ； A_3 包括A；且 B_3 包括B)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，該薄膜係包括具有與聚合物共有之基團的小分子，此聚合物係藉著該單體混合物進行反應而形成。兩小分子中之類似基團及小分子與聚合物間之類似基團可促進組合物中之化合物的相容性。

該第十三具體實例之第一變化形式中，第一末端封端基團或第二末端封端基團可含有另一末端封端基團所缺乏的取代基。第二變化形式中，兩末端封端基團可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。第三變化形式中，該第一芳族核心或該聚合物中之對應基團可含有另一部分中所缺乏之取代基。第四變化形式中，第一芳族核心及聚合物中之對應基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷

基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。第五變化形式中，該第二芳族核心或該聚合物中之對應基團可含有另一部分中所缺乏之取代基。另一變化形式中，第二芳族核心及聚合物中之對應基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

第十四具體實例中，該組合物包括通式I之第一化合物、小分子之第二化合物、及聚合物。該第一化合物具有第一芳族核心及第一末端封端基團(例如第一化合物可表示為例如通式 $Z-A_1-Z$ ，其中 A_1 係為第一芳族核心，且 Z 係為兩相同第一末端封端基團)。該第二化合物具有包括第一芳族核心之第二芳族核心，但第二末端封端基團係異於第一末端封端基團(例如第二化合物可表示為例如通式 $Y-A_2-Y$ ，其中 A_2 係為第二芳族核心，且 Y 係為兩相同第二末端封端基團；且 A_2 係包括 A_1)。該聚合物係為單體混合物之反應產物，該單體混合物包括含有第一末端封端基團之二價基團的第一單體及含有第二末端封端基團之二價基團的第二單體(例如該第一單體含有基團 Z_3 ，而該第二單體可含有基團 Y_3 ； Z_3 包括 Z 之基團；且 Y_3 包括 Y 之基團)。該組合物可用於(例如)製備一薄膜，該薄膜係包括具有與聚合物共有之基團的小分子，此聚合物係藉著該單體混合物進行反應而形成。兩小分子中之類似基團及小分子與聚合物間之類似基團可

促進組合物中之化合物的相容性。

該第十四具體實例之第一變化形式中，第一芳族核心或第二化合物中之基團可含有另一部分中所缺乏的取代基。第二變化形式中，第一芳族核心及第二化合物中之對應基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。第三變化形式中，該第一末端封端基團或該單體混合物之第一單體中之對應單價基團可含有另一部分中所缺乏之取代基。第四變化形式中，該第一末端封端基團及該第一單體中之對應單價基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。第五變化形式中，該第二末端封端基團或該單體混合物之第二單體中之對應單價基團可含有另一部分中所缺乏之取代基。另一變化形式中，該第二末端封端基團及該第二單體中之對應單價基團兩者皆可具有相同類型之取代基(例如烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合物)，但該取代基可含有不同數目之碳原子。

前述具體實例提供該第一化合物具有相同末端封端基團之實例。相同實施例包括其中第一化合物具有不相同末端封端基團，且第二化合物與至少一末端封端基團具有結構相似性之情況。

前述具體實例供該第二化合物具有兩末端封端基團之實例。類似實例包括其中第二化合物僅具有一末端封端基團或於兩個末端封端基團之情況。

前述具體實例係提供第二化合物具有相同末端封端基團之實例。第二化合物之末端封端基團可彼此相同或相異。類似實例包括其中至少一末端封端基團與該第一化合物具有結構相似性之情況。

有機電子裝置

另一態樣中，本發明提供一種有機電子裝置，此裝置包含通式I化合物或包含通式I化合物之組合物。有機電子裝置係為包括有機材料層，而其中至少一層可傳導電流的物件。可使用本發明化合物或組合物製得之有機電子裝置實例係包括有機電晶體及二極體、光電伏打裝置、有機電致發光(OEL)裝置(諸如有機發光二極體(OLEDs))及其類者。

有機電子裝置可為有機電致發光顯示器或裝置。本發明所使用之「有機電致發光(OEL)顯示器或裝置」係表示包括一夾置於一陽極與一陰極之間的有機發光材料之顯示器或裝置。該發光材料可為小分子(SM)發光劑、摻雜有SM之聚合物、發光聚合物(LEP)、摻雜之LEP、摻合之LEP、或其他可單獨或與任何其他有機或無機材料(具功能性或不具功能性)結合配置於OEL顯示器或裝置中之有機發光材料。該有機電致發光顯示器或裝置具有應用於諸如圖型之背光、像素化顯示器、及大型發光圖型的潛能。

R.H. Friend等人於「Electroluminescence in Conjugated

Polymers, "Nature, 397, 121 (1999)中描述一種電致發光之機制，包括「自一電極注射電子，而自另一電極注射電洞，截捕帶相反電荷之載流子(所謂重組)，所激發之電子-電洞狀態(激子)因為此種重組過程而輻射衰變」。

有機電致發光裝置包括一有機發光元件。該有機發光元件包括夾置於一陰極與一陽極之間之一或多種適當之有機材料薄層或薄層等。該有機發光元件一般提供電子傳遞及電洞傳遞與發光。電子在活化時自陰極注射至有機發光元件內，而電洞自陽極注射至有機發光元件內。電子在有機發光元件係為基團陰離子形式，而電洞則係基團陽離子形式。當所注射之電荷向著帶相反電荷之電極移動時，其可重組形成電子-電洞對，一般稱為激子。裝置中一般形成激子之區域可稱為重組區。此等激子或激態物質在衰變回到基態時可發射光形式之能量。

該有機發光元件一般包括發光層。發光層係包括發光材料，諸如發光聚合物或發光小分子。該發光層視情況包括其他材料，諸如例如電洞傳遞材料、電子傳遞材料、黏合劑、聚合物黏合劑、波導粒子、磷光化合物、及色彩轉換材料。部分具體實例中，該發光層係包括通式I化合物。例如，該發光層可包括通式I化合物及第二化合物，此第二化合物係為發光材料、電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物。

有機發光元件亦可存在其他層，諸如電洞傳遞層、電子傳遞層、電洞注射層、電子注射層、電洞阻隔層、電子阻

隔層、緩衝層、及其類者。此外，OEL裝置之發光層或其他層中可存在光致發光材料，例如，用以將電致發光材料所發射之光的色彩轉換成另一色彩。此等及其他該薄層及材料可用以改變或調整層狀OEL裝置之電子性質及行為，例如達到所需之電流/電壓響應、所需之裝置效率、所需之色彩、所需之亮度、及其類者。部分具體實例中，發光元件之此等其他層中可包括通式I化合物。其他具體實例中，此等其他層中至少一層係包括通式I化合物及第二化合物，此第二化合物係為發光材料、電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物。例如，電子傳遞層、電洞傳遞層、或其組合物中可包括本發明化合物或組合物。

部分具體實例中，有機電致發光裝置之有機發光元件中包括之發光分子可為經分子性摻雜之聚合物，其中攜帶電荷及/或發光之物質係分散於聚合物基質中(參照J. Kido, "Organic Electroluminescent devices Based on Polymeric Materials", Trends in Polymer Science, 2, 350-355 (1994)); 共軛聚合物或發光聚合物(LEP)，其中聚合物(諸如聚(伸苯基伸乙烯基))層係作為攜帶電荷及發光物質(參照J.J.M. Halls, D.R. Baigent, F. Cacialli, N.C. Greenham, R.H. Friend, S.C. Moratti, 及 A.B. Holmes, "Light-emitting and Photoconductive Diodes Fabricated with Conjugated Polymers" Thin Solid Films, 276, 13-20 (1996)); 氣相沉積小分子異質結構(參照U. S. Pat. No. 5,061,569，以引用方式併入本文，

及 C. H. Chen, J. Shi, 及 C. W. Tang, "Recent Developments in Molecular Organic Electroluminescent Materials", Macromolecular Symposia, 125, 1-48 (1997); 或此等元件之各種組合物。

OLEDs之其他實例係包括發光型電化學單元(參照 Q. Pei, Y. Yang, G. Yu, C. Zang, 及 A. J. Heeger, "Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells: In Situ Formation of Light-Emitting p-n Junction, "Journal of the American Chemical Society, 118, 3922-3929 (1996)及可發出多重波長之光的垂直堆疊有機發光二極體(參照美國專利第 5,707,745 號, 以引用方式併入, 及 Z. Shen, P. E. Burrows, V. Bulovic, S. R. Forrest 及 M. E. Thompson, "Three-Color, Tunable, Organic Light-Emitting Devices,"Science, 276, 2009-2011 (1997))。

有機電致發光裝置之典型陽極係為濺鍍於透明物質(諸如塑膠或玻璃)上之氧化銦錫(ITO)。適當之基材包括例如玻璃、透明塑膠(諸如聚烯烴、聚醚砜、聚碳酸酯、聚酯、聚芳基化物、及聚合多層薄膜)、塗覆 ITO 之障壁膜(諸如 3M Optical Systems Division 所售之塑膠膜導體(Plastic Film Conductor))、經表面處理之薄膜、及選擇之聚醯亞胺。部分具體實例中, 該基材具有配合保護性(或相對電極)薄膜之障壁性。亦可使用玻璃之可撓性捲筒。該材料可層積於一聚合物載體上, 以得到更佳之結構整體性。

塗覆該基材之陽極材料係導電性, 且可為光學透明性或半透明性。除了 ITO 外, 適當之陽極材料包括氧化銦、氧化

氟錫(FTO)、氧化鋅、氧化鈮、氧化鋅-錫、金、鉑、鈀銀、其他高功函數金屬、及其組合物。實際上，該陽極係視情況塗覆10至200埃之離子性聚合物，諸如PEDT或PANI，以幫助表面平整，且修飾陽極之有效功函數。

典型陰極包括低功函數金屬，諸如鋁、鋇、鈣、鈔、鎂、銀、鎂/銀合金、鋰、氟化鋰、鎵、及鈣與鎂之合金。

就裝置結構之實例而言，圖1說明OEL顯示器或裝置100，其包括一裝置層110及一基材120。顯示器100亦可包括任何其他適當之顯示組件。附加之光學元件或其他適用於電子顯示器、裝置或燈之裝置皆可視情況配置於顯示器100與觀測位置140之間，如選擇性元件130所示。

部分具體實例(如所示者)中，裝置層110包括一或多個OEL裝置，其發射光線穿透基材，而射向觀測者位置140。該觀測者位置140一般用以表示發射光所欲到達之目的地，不論是實際觀測之人、螢幕、光學組件、電子裝置、或其類者皆然。其他具體實例(未示)中，裝置層110係放置於基材120與觀測者位置140之間。當基材120對於裝置層110所發射之光係透光性時，且當透明導電性電極係配置於該裝置中介於裝置發光層與基材之間時，可使用圖1所示之裝置結構(稱為「底部發光」)。當基材120可或無法使裝置層所發射之光穿透且夾置於基材與裝置發光層之間的電極無法使該裝置發射之光穿透時，可使用相反結構(稱為「頂部發光」)。

裝置層110可包括依任何適當之方式排列的一或多個

OEL裝置。例如，於燈具應用(例如液晶顯示器(LCD)模組用之背光)中，裝置層110可構成單一個可跨越整個背光區域之OEL裝置。或在其他燈具應用中，裝置層110可構成多個間隔緊密而可同時啟動的裝置。例如，可於共用電極之間製得相對小且間隔緊密之紅色、綠色及藍色發光器圖案，使得裝置層110在啟動發光器時發射白光。亦可使用背光應用之其他配置。

在直視或其他顯示應用中，期望裝置層110可包括多個可個別定址而發射相同或不同顏色之OEL裝置或元件。各個裝置可表示像素化顯示器(例如高解析度顯示器)之一個別像素或一個別亞像素、一分段顯示器(例如低資訊容量顯示器)之一個別區段或亞區段、或一個別圖符、一圖符之一部分、或圖符用之燈(例如指示器應用)。

回至圖1，裝置層110係配置於基材120上。基材120可為任何適用於OEL裝置及顯示應用的基材。例如，基材120可包括玻璃、透明塑膠、或其他對於可見光實質透明之適當材料。基材120亦可對可見光不透明，例如不銹鋼、結晶矽、多晶矽、或其類者。因為OEL裝置中之部分材料特別易因曝露於氧或水而受損，故基材120以具有適當之環境障壁為佳，或配置一或多層可提供適當之環境障壁的薄層、塗層、或層積物。

基材120亦可包括任何數目之適於OEL裝置及顯示器的裝置或組件，諸如電晶體陣列及其他電子裝置；濾色器、偏光板、波板、漫射器、及其他光學裝置；絕緣體、障壁

條、黑色基質、罩幕工具及其他該等組件；及其類者。通常，可在形成OEL裝置的其餘層(等)或形成裝置層110之裝置之前，先於基材120上塗覆、沉積、圖案化或配置一或多個電極。使用發光基材120且OEL裝置或裝置等係底部發光時，配置於基材120與發光材料之間的電極或電極等以實質透光為佳，例如透明導電性電極諸如氧化銦錫(ITO)或許多其他透明導電性氧化物中之任一種。

元件130可為任何適用於OEL顯示器或裝置100之元件或元件組合物。例如，當裝置100係背光時，元件130可為LCD模組。可於該LCD模組與背光裝置100之間配置一或多個偏光板或其他元件，例如吸光性或反射性淨化偏光板(clean-up polarizer)。或當裝置100本身係為資訊顯示器時，元件130可包括一或多個偏光板、波板、觸控板、防反射塗層、防污塗層、投影螢幕、亮度改善薄膜、或其他光學組件、塗層、使用者界面裝置、或其類者。

圖4A至4D說明本發明不同OEL裝置組態(例如有機發光二極體)之實例。各組態係包括一基材250、一陽極252、一陰極254、及一發光層256。發光層256可包括通式I化合物或含有通式I化合物且結合有第二化合物(電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、發光材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物)之組合物。圖4C及4D之組態亦包括電洞傳遞層258，而圖4B及4D之組態係包括電子傳遞層260。此等薄層個別自陽極傳遞電洞或自陰極傳遞電子。本發明化合物及組合物可包括於此等薄層中之一或兩者中。部分具體實例

中，圖4B至4D之OEL裝置係於發光層256及電子傳遞層260中之一或兩者中皆包括本發明化合物或組合物。

該陽極252及陰極254一般係使用導電性材料形成，諸如金屬、合金、金屬化合物、金屬氧化物、導電性陶瓷、導電性分散液、及導電性聚合物，包括例如金、鉑、鈮、鋁、鈣、鈦、氮化鈦、氧化銦錫(ITO)、氧化氟錫(FTO)、及聚苯胺。該陽極252及陰極254可為單層導電性材料或其可包括多層。例如，一陽極或一陰極可包括一層鋁及一層金、一層鈣及一層鋁、一層鋁及一層氟化鋰、或一金屬層與一導電性有機層。

電洞傳遞層258有助於自陽極注射電洞至該裝置內，及幫助其向重組區移動。該電洞傳遞層258可進一步作為電子到達陽極252之通道的障壁。部分實例中，該電洞傳遞層258可包括(例如)二胺衍生物，諸如N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(亦稱為TPD)或N,N'-雙(1-萘基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺(NPB)，或三芳基胺衍生物，諸如4,4',4''-三(N,N-二苯基胺基)三苯基胺(TDATA)或4,4',4''-三(N-3-甲基苯基-N-苯基胺基)三苯基胺(mTDATA)。可處於電洞傳遞層中之其他材料實例包括銅酞菁(CuPC); 1,3,5-三(4-二苯胺基苯基)苯(TDAPBs); 及其他化合物，諸如H. Fujikawa等，Synthetic Metals, 91, 161 (1997)及J.V. Grazulevicius, P. Strohriegl, "Charge-Transporting Polymers and Molecular Glasses", Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices, H.S. Nalwa (ed.), 10, 233-274 (2001)所描述。

電子傳遞層 260 有助於注射電子且幫助其向重組區移動。若需要，該電子傳遞層 260 可進一步作為電洞通達陰極 254 之通道的障壁。部分實例中，該電子傳遞層 260 可使用有機金屬化合物三(8-羥基醌醇根基)鋁(Alq3)形成。可使用於電子傳遞層 260 中之電子傳遞材料的其他實例係包括 1,3-雙[5-(4-(1,1-二甲基乙基)苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯、2-(聯苯-4-基)-5-(4-(1,1-二甲基乙基)苯基)-1,3,4-噁二唑(tBuPBD) 及其他描述於 C.H. Chen 等, Macromol. Symp., 125, 1 (1997) 及 J.V. Grazulevicius 等, "Charge-Transporting Polymers and Molecular Glasses", Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices, H.S. Nalwa (ed.), 10, 233 (2001) 之化合物。

本發明包括包含有通式 I 化合物或包含通式化合物之組合物的發光 OEL 顯示器及裝置，該組合物另外包含電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、發光材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物之第二化合物。於一具體實例中，OEL 顯示器可製成發光且相鄰裝置或元件可發射不同顏色之光。例如，圖 3 出示一 OEL 顯示器 300，其包括多個彼此相鄰且配置於一基材 320 上之 OEL 元件 310。兩個或多個相鄰元件 310 可發射不同顏色之光，例如紅色、綠色及藍色。其中一或多個元件 310 係包括本發明化合物或組合物。

出示於元件 310 之間的分隔係僅供說明。相鄰裝置可分隔、接觸、重疊等，或在顯示基材上之一個以上的方向上使用此等情況的不同組合。例如，電洞傳遞材料之平行條

狀圖案可形成於該基材上，之後形成電洞傳遞材料之條狀圖案及紅色、綠色及藍色發光LEP層的條狀重複圖案，之後形成陰極之條狀圖案，該陰極條紋係與該陽極條紋垂直。該結構適於形成被動陣列型顯示器。其他具體實例中，透明導電性陽極墊可於基材上配置成二維圖案，且配合以定址電子構件，諸如一或多個電晶體、電容器等，諸如適用於製造主動陣列型顯示器者。其他層(包括發光層)可隨之於單層形式下塗覆或配置於陽極或電子裝置上或可進行圖案化(例如平行條紋、配合陽極之二維圖案等)。本發明亦包括任何其他適當之結構。

於一具體實例中，顯示器300可為多色顯示器。例示具體實例中，各元件310係發射光線。圖3所說明之一般結構涵蓋許多顯示器及裝置結構。其中部分結構係討論於下文。

OEL背光之結構可包括空的或經電路化之基材、陽極、陰極、電洞傳遞層、電子傳遞層、電洞注射層、電子注射層、發光層、色彩變換層、及其他層與適用於OEL裝置之材料。結構亦包括偏光板、漫射器、光導、透鏡、控光薄膜、亮度增強薄膜、及其類者。應用係包括白色或單色大面積單像素燈具，例如，其中發光材料係藉熱印轉移法、層積轉移法、電阻頭熱印法或其類者配置；白色或單色大面積單電極對燈具，其具有大量藉由雷射感應熱轉移法進行圖案化之緊密間隔發光層；及可調色之多電極大面積燈具。

低解析度OEL顯示器之結構可包括空的或經電路化之基

材、陽極、陰極、電洞傳遞層、電子傳遞層、電洞注射層、電子注射層、發光層、色彩變換層、及其他層與適用於OEL裝置之材料。結構亦可包括偏光板、漫射器、光導、透鏡、控光薄膜、亮度增強薄膜、及其類者。應用係包括圖型指示燈(例如圖符);分段字數顯示器(例如儀器時間指示器);小型單色被動或主動陣列型顯示器;作為積合顯示器(例如行動電話顯示器)之一部分的小型單色被動或主動陣列型顯示器加圖型指示器燈具;大型面積像素顯示方塊(例如多個模組或方塊,各具有相對少數之像素),諸如可適用於戶外顯示器;及安全顯示應用。

高解析度OEL顯示器之結構可包括空的或經電路化之基材、陽極、陰極、電洞傳遞層、電子傳遞層、電洞注射層、電子注射層、發光層、色彩變換層、及其他層與適用於OEL裝置之材料。結構亦可包括偏光板、漫射器、光導、透鏡、控光薄膜、亮度增強薄膜、及其類者。應用係包括主動或主動陣列型多色或全色彩顯示器;主動或被動陣列型多色彩或全色彩顯示器加分段或圖型指示燈(例如將高解析度裝置進行雷射感應轉移加上將圖符進行熱壓印於相同基材上);及安全顯示應用。此類熱圖案化結構之一特別有效具體實例係包括將紅色、綠色及藍色發光層高解析度地轉移於共同基材上。高解析度轉移係表示所轉移之材料的rms(均方根)邊緣糙度係為5微米或更小。

製造OEL層之方法

本發明另一態樣提出一種製備有機電致發光裝置的方

法。該裝置係包括一有機發光結構，其包括通式I化合物或包含通式I化合物與第二化合物(發光材料、電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物)之組合物。

特定應用中，期望將一或多層有機電子裝置圖案化於一基材上，例如以便製造發光顯示器。圖案化方法包括選擇性轉移，例如雷射熱轉移、微影圖案化、噴墨印刷、網版印刷、及其類者。

本發明之一態樣係提出一種製造有機電子裝置的方法。製備具有轉移層之施體片。該轉移層係包括通式I化合物或含有通式I化合物與第二化合物(發光材料、電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物)之組合物。製備有機電子裝置之方法係包括製備具有轉移層之施體片，自施體層將轉移層轉移至受體片上。

特別可用以形成本發明有機電子裝置(例如有機電致發光裝置)之方法包括藉雷射熱圖案化轉移一或多層轉移層。此方法係描述於例如美國專利第6,358,664號、第6,284,425號、第6,242,152號、第6,228,555號、第6,228,543號、第6,221,553號、第6,221,543號、第6,214,520號、第6,194,119號、第6,114,088號、第5,998,085號、第5,725,989號、第5,710,097號、第5,695,907號及第5,693,446號及共讓受之美國專利申請案第09/853,062號、第09/844,695號、第09/844,100號、第09/662,980號、第09/451,984號、第09/931,598號及第10/004,706號中。圖案化方法之效率可視

轉移層之物性決定。

其中一參數係為轉移層之內聚力或薄膜強度。成像期間，該轉移膜以沿著劃分成像及未成像區域之線整齊斷開，以形成圖案邊緣為佳。存在長鏈構形之高度共軛聚合物(諸如聚伸苯基伸乙烯基)可具有高於聚芳醯胺纖維之拉伸強度及彈性模數。實際上，發光聚合物於雷射熱成像期間形成整齊邊緣具有挑戰性。所不期望之形成較差邊緣的結果是經轉移圖案上粗糙、破裂或碎裂的邊緣。另一項參數係為該轉移層與該受體表面之間所形成的黏合強度。此強度受到轉移層與受體表面之溶解度參數相容性所影響。

部分情況下，期望選擇位於基材表面上之材料及欲轉移之材料(例如本發明化合物或組合物)，使得溶解度參數相容，以改善或甚至可熱轉移或進行其他圖案化方法。例如，可選擇該材料以使得此等溶解度參數差值不大於 $4 \text{ J}^{1/2} \text{ cm}^{-3/2}$ ，且以不大於 $2 \text{ J}^{1/2} \text{ cm}^{-3/2}$ 為佳，此值係根據 D.W. Van Krevelen 編輯，Elsevier Science Publishers B.V. 於 1990 出版之 聚合物性質；與化學結構之關連；得自加成基團之數值估算及預測 (Properties of Polymers; Their Correlation with Chemical Structure; Their Numerical Estimation and Prediction from Additive Group Contributions) 第 7 章第 189 至 225 頁所述測定。

材料之溶解度參數可自材料在一些具有不同溶解度參數之溶劑中的平衡潤脹程度的測量值決定。溶劑本身之溶解度參數可自其蒸發熱決定。溶解度參數 δ 與內聚能 E_{coh} 及比

容 V 具有關係式 $\delta = (E_{\text{coh}}/V)^{1/2}$ 。就低分子量溶劑而言，內聚能與莫耳蒸發熱 ΔH_{vap} 有密切關係 $E_{\text{coh}} = \Delta H_{\text{vap}} - p\Delta V = \Delta H_{\text{vap}} - RT$ 。因此， E_{coh} 及 δ 可自溶劑之蒸發熱或自蒸氣壓之溫度函數來計算。

因為部分材料(諸如聚合物)無法蒸發，故需使用間接方法來決定其溶解度參數。為決定聚合物之溶解度參數，測定聚合物於各種具有不同 δ 之溶劑中的平衡潤脹性，產生聚合物之平衡潤脹性相對於溶劑溶解度參數的繪圖。聚合物之溶解度參數係定義為此圖上得到最大潤脹性的點。溶解度參數低於或大於聚合物之溶劑的潤脹性較低。有數種可基於存在於聚合物中之官能基的加成貢獻，而理論性地預估聚合物之溶解度參數的方法。

含有本發明化合物或組合物之有機電子裝置至少一部分可藉著使該化合物或組合物選擇性地自熱轉移施體片轉移至所需之受體基材上而製得。例如，顯示器及燈具可藉著塗覆發光層於施體片上，之後單獨或與其他裝置層或材料一起選擇性地轉移該發光層至該顯示(受體)基材上而製得。

圖2出示適用於本發明之熱轉移施體片200的實例。施體元件200包括一基材210、一選擇性底層212、一選擇性光對-熱轉化層(LTHC層)214、一選擇性中間層216、及一包含通式I化合物或包括通式I化合物與第二化合物(電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、發光材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物)之組合物的轉移層218。亦可存在其他化合物、組合物、或薄層。適當之施體或施體層的實例係

揭示於美國專利第6,358,664號、第6,284,425號、第6,242,152號、第6,228,555號、第6,228,543號、第6,221,553號、第6,221,543號、第6,214,520號、第6,194,119號、第6,114,088號、第5,998,085號、第5,725,989號、第5,710,097號、第5,695,907號及第5,693,446號及共讓受美國專利申請案第09/853,062號、第09/844,695號、第09/844,100號、第09/662,980號、第09/451,984號、第09/931,598號及第10/004,706號中。

發光有機材料，藉著將施體元件之轉移層放置成與受體相鄰，且選擇性加熱該施體元件，可將轉移層中包括LEPs或包含本發明化合物或組合物之經分子摻雜的聚合物薄膜自施體片轉移或選擇性轉移至受體基材。轉移或選擇性轉移之方法係描述於例如美國專利第6,242,152號中。轉移層亦可自施體片轉移，而不會選擇性地轉移該轉移層。例如，轉移層可形成於一施體基材上，此基材基本上係作為暫時內襯，在轉移層與受體基材之後即可脫離，接觸時一般施加加熱或壓力。該方法(稱為層積轉移)可用以將整體轉移層，或其大部分轉移至受體上。

來自個別施體片之材料可與其他材料相鄰地轉移至一受體上，以形成相鄰裝置、相鄰裝置之一些部分、或相同裝置之不同部分。或來自個別施體片之材料可藉熱轉移或部分其他方法(例如微影術、經由蔭罩幕沉積等)而直接轉移於其他先前圖案化於該受體上之材料層上，或部分與其重疊。可使用兩片或多片施體片的各種其他組合形成一裝

置，各施體片形成該裝置之一或多個部分。已知此等裝置之其他部分或受體上之其他裝置可整體或部分地藉由任何適當之方法形成，包括微影法、噴墨法、及各種其他印刷或以罩幕為主之方法，不論習用者或新穎者皆可。

圖2中，施體基材210可為聚合物薄膜。適當之薄膜係描述於美國專利第6,242,152號及第6,228,555號中。

圖2中，選擇性底層212可塗覆或配置於施體基材與LTHC層之間，例如用以控制在成像期間介於基材與LTHC之間的熱流，或用以提供施體元件在儲存、操作、施體加工、或成像時的機械安定性。適當之底層及提供底層之方法的實例係揭示於美國專利第6,228,555號及共讓受美國專利申請案第09/743,114號中。

該底層可包括在施體元件上賦予所需之機械或熱性質的材料。例如，該底層可包括相對於施體基材具有低比熱 \times 密度或低熱導係數之材料。該底層可用以增加到達轉移層之熱流，例如改善該施體之成像靈敏度。

該底層亦可包括供其機械性質或供介於基材與LTHC之間的黏著性使用的材料。使用改善介於該基材與該LTHC層之間之黏著性的底層可使所轉移之影像失真情況減輕。例如，在部分情況下，可使用減少或消除在施體介質成像期間可能發生之LTHC層剝離或分離的底層。此點可減少轉移層之被轉移部分的物理性畸變程度。但在其他情況下，可能期望採用在成像期間促進薄層之間或之中產生至少某些程度之分離的底層，例如於成像期間在薄層之間產生空氣

間隙，提供隔熱功能。在成像期間之分離亦可提供用以釋放氣體(在成像期間可能因為LTHC層加熱而產生)之通道。提供該通道可導致較少之成像缺陷。

該底層在成像波長下可能實質透明，或亦可至少部分吸收或反射成像輻射。成像輻射藉由底層減弱或反射的情況，可用以控制在成像期間之熱生成。

圖2中，LTHC層214可包括於本發明施體片中，以將照射能量耦合至施體片中。該LTHC層以包括一輻射吸收劑，吸收入射輻射(例如雷射光)，且將入射輻射至少一部分轉化成可使轉移層自施體片轉移至受體之熱。適當之LTHC層係描述於例如美國專利第6,242,152號及第6,228,555號中。

圖2中，選擇性中間體216可配置於LTHC層214與轉移層218之間。該中間體可用以(例如)將轉移層被轉移部分的損壞及污染減至最少，且亦可減輕轉移層之被轉移部分中的失真情況。該中間層亦可影響轉移層對於施體片其餘部分的黏著性。該中間層一般具有高度耐熱性。該中間層以具在成像條件下失真或化學分解為佳，尤其是不會使被轉移之影像失去功能的程度。該中間層在轉移過程中一般係與LTHC接觸，實質上未與轉移層一起轉移。適當之中間層係描述於例如美國專利第6,242,152號及第6,228,555號中。

圖2中，熱轉移層218係包括於施體片200中。轉移層218係包括本發明化合物或組合物，且可包括任何其他適當之材料或材料等，此等材料可配置成單層或多層，且可單獨或與其他材料結合使用。當施體元件曝露於直接加熱或成

像輻射(可被光-對-熱之轉化材料吸收且轉變成熟)時，轉移層218可藉任何適當之轉移機制選擇性地整個單元或部分地轉移。

本發明另外配置一發光轉移層，其包括通式I化合物或包含通式I化合物與第二化合物(其係發光材料、電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合物)之組合物。配置轉移層之一種方式係將發光材料溶液塗覆於該施體基材上或任何前述薄層，即底層、中間層、光-對-熱轉化層。此種方法中，發光材料可藉著添加適當之相容性溶劑而增溶，藉旋塗法、照相凹版式塗覆、梅耶(Mayer)桿塗法、刮刀塗覆法及其類者塗覆於該施體基材上或任一前述薄層上。所選擇之溶劑以不會與施體片中已存在之薄層中的任一者產生不受期望之相互反應(例如潤脹或溶解)為佳。該塗層隨之可經退火，且溶劑蒸發以留下轉移層。

該轉移層隨之自形成之施體片或元件選擇性地熱轉移至緊鄰之受體基材上。若需要，則使用單一施體片轉移一層以上之轉移層，以轉移多層結構。適當之受體基材係描述於例如美國專利第6,242,152號及第6,228,555號中。

受體基材可預先圖案化而具有電極、電晶體、電容器、絕緣條、間隔器、濾色器、黑色基質、電洞傳遞層、電子傳遞層、及其他可用於電子顯示器或其他裝置中之元件中之任何一或多種。

以下實施例係進一步描述本發明，其僅供說明，而絕不

構成限制。

實施例

實施例1至23係描述本發明化合物及所使用之中間體的合成。除非另有陳述，否則所有試劑皆係購自Aldrich chemical Company。所有化合物皆藉¹H-NMR定性，且發現對應於所示之結構。

辭彙解釋

CBP-電洞傳遞劑，4,4'-雙(吡啶-9-基)聯苯，購自H.W. Sands, Jupiter, FL。

C80-自2-(2,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之聚合衍生的苯基末端封端聚合物。該2-(2,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之合成係描述於實施例1。此材料係如下文所述般地進行聚合且進行末端封端。

在裝置有隔板及氮換氣管之燒瓶中導入4.10克(9.77毫莫耳)來自實施例1之2-(2,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑、2.85克(10.89毫莫耳)三苯膦、及0.31克(1.421毫莫耳)無水溴化鎳(II)。於其中添加75毫升無水DMF及25毫升無水甲苯。此者使用汀-斯達克(Dean-Stark)冷凝器共沸，之後餾除大部分之甲苯。在強氮氣吹洗下，在冷卻之反應溶液中添加另外0.31克(1.421毫莫耳)無水溴化鎳(II)。此者於80°C下加熱30分鐘，之後添加1.0克作為末端-封端劑之氯苯。反應於80°C下進行8小時。冷卻之反應混合物倒入約500毫升丙酮中並過濾。固體濾渣置入二氯甲烷中，添加1N HCl，該雙相系統攪拌約一小時。濾出形成之固體，濾

液移入分液漏斗中。分離底層有機層，倒入過量甲醇中。收集固體，以甲醇洗滌，且乾燥產生2.8克聚合物。

GPC分析得到重量平均分子量(Mw)為 1.7×10^5 ，數量平均分子量(Mn)為 4.9×10^4 ，而聚合度分散液(PD)係為3.55。

Ir(ppy)₃-分子發光劑，三(2-苯基吡啶)銻(III)，購自H.W. Sands, Jupiter, FL。

PBD-電子傳遞劑，2-(4-聯苯基)-5-(4-第三丁基苯基)-1,3,4-噁二唑，購自H.W. Sands, Jupiter, FL。

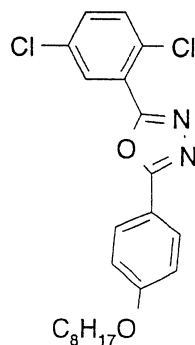
PEDT/PSS-共聚物(聚(3,4-伸乙二氧基噻吩)/聚苯乙烯磺酸酯，購自Bayer AG, Leverkusen, Germany，商標Baytron™ P4083。

PVK-電洞傳遞劑，聚(9-乙基噻唑)，購自Aldrich, Milwaukee, WI。

四(三苯膦)鈹(0)係得自Strem Chemical, Newburyport, MA。

TPD-電洞傳遞劑，N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺，購自H.W. Sands, Jupiter, FL。

實施例1：2-(2,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之合成



A部分：4-辛氧基苄酸甲酯之合成

在燒瓶內導入251.0克(1.65莫耳)4-羥基苄酸甲酯、276.37克(1.99莫耳)碳酸鉀及1200克丙酮。此者回流45分鐘，之後使用1小時逐滴添加386.17克(1.99莫耳)1-辛基溴。反應混合物回流兩日。過濾冷卻之反應混合物，蒸發濾液以產生油。此者置入乙酸乙酯中，使用5% NaOH (2 x 100毫升)及後續之水(2 x 100毫升)萃取。將有機層乾燥(MgSO₄)，濃縮，移至1公升之三頸燒瓶中。燒瓶內容物進行高度真空蒸餾，以移除過量之1-辛基溴。罐中殘留物基本上係為純的4-辛氧基苄酸甲酯(376克，86%)。

B部分：4-辛氧基苄醯肼之合成

A部分所得之燒瓶內容物中添加387.14克98%肼。此者回流5小時(106°C)。冷卻之溶液倒入3公升水中，濾出沉澱之固體，以大量水洗滌，於真空中乾燥，產生4-辛基苄醯肼(343克，91%產率，mp 90°C)。

C部分：2,4-二氯苄醯氯之合成

在裝有回流冷凝器及磁性攪拌棒之2公升燒瓶內導入150克(0.785莫耳)2,5-二氯苄酸及575毫升(7.85莫耳)亞硫醯氯。混合物回流8小時。餾除大部分亞硫醯氯，之後藉旋轉蒸發移除其餘者。蒸餾產生130克(79%產率)2,4-二氯苄醯氯(鍋溫110°C；蒸餾溫度70°C/0.70 mm Hg)。

D部分：2,5-二氯-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苄醯肼之合成

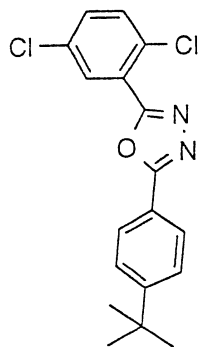
在氮覆蓋下，將8.8克(0.087莫耳)2,4-二氯苄醯氯添加於23.0克(0.087莫耳)4-辛氧基苄醯肼及12.13毫升(8.8克，

0.087莫耳)新蒸餾之三乙胺於348毫升無水氯仿中之溶液中。攪拌約一小時之後，形成所需產物之致密白色沉澱物。持續攪拌至次日。過濾收集產物，自乙醇/水再結晶以產生31克(81.5%產率)之2,5-二氯-N'-[4-(辛氧基)苄基]苯醯肼的白色固體。

E部分：2-(2,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苄基]-1,3,4-噁二唑之合成

在裝置有機械攪拌器及溫度計之250毫升燒瓶中導入30克(0.0686莫耳) 2,5-二氯-N'-[4-(辛氧基)苄基]苯醯肼及181毫升磷醯氯。此物回流且攪拌8小時。於減壓下餾除約100毫升磷醯氯。冷卻之殘留物於手動攪拌下倒於水及碎冰上，放置至冰融化。過濾收集沉澱之白色固體，乾燥，自乙醇再結晶。得到25.7克(89%產率，mp 86°C)之2-(2,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苄基]-1,3,4-噁二唑。藉1D及2D NMR技術明確確認結構，產生下列數據：¹H-NMR (500 MHz, CDCl₃) 0.89 (3H, t), 1.31 (8H, m), 1.46 (2H, q), 1.79 (2H, q), 6.97 (2H, d), 7.38 (1H, dd), 7.44 (1H, d), 8.01 (2H, d), 8.06 (1H, d); ¹³C-NMR (500 MHz, CDCl₃) 13.90, 22.44, 25.79, 28.91, 29.01, 29.13, 31.59, 68.08, 114.78, 115.37, 124.27, 128.58, 130.23, 130.87, 131.75, 132.20, 132.87, 161.03, 161.98, 164.95。

實施例2：2-(4-第三丁基苄基)-5-(2,5-二氯苯基)-1,3,4-噁二唑之合成



A部分：N-(4-第三丁基苄醯)-2,5-二氯苄醯肼之合成

4-第三丁基苄醯肼(185克，0.96莫耳)及剛自氫化鈣蒸餾之三乙胺(97.37克，0.96莫耳)添加於位在10公升燒瓶中之4公升二氯甲烷中。於機械攪拌下添加201.5克2,4-二氯苄醯氯。在三小時後未發現產物沉澱，反應於室溫下攪拌至次日。添加4公升己烷以使產物沉澱析出。過濾，以己烷洗滌，於80°C下於強制空氣烘箱中乾燥，於99%產率下產生產物。

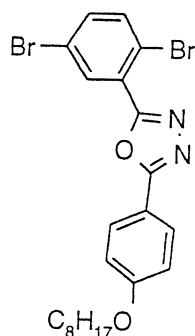
B部分：2-(4-第三丁基苄基)-5-(2,5-二氯苄基)-1,3,4-噁二唑之合成

在2公升燒瓶中導入200克N-(4-第三丁基苄醯)-2,5-二氯苄醯肼(0.55莫耳)及1378毫升磷醯氯(2267克，14.78莫耳)。此者回流8小時，於輕度真空下蒸發溶劑。殘留物倒於碎冰上，放置至次日。過濾產生黏稠物質，其溶解於甲醇中，藉添加少許水得到固體物質。過濾且乾燥產生112克產物之白色結晶固體(產率59%)。

實施例3：2-(2,5-二溴苄基)-5-[4-(辛氧基)苄基]-1,3,4-噁二唑之合成

此實施例係描述2-(2,5-二溴苄基)-5-[4-(辛氧基)苄基]-1,3,4-噁二唑之合成，亦提供一種製備一些可用於Suzuki偶

聯反應中之有效芳基嘔二唑化二溴中間體的一般方法。



A部分：2,5-二溴苄醯氯之合成

藉實施例1之C部分的一般方法，使50.0克(0.1786莫耳) 2,5-二溴苄酸與150毫升亞硫醯氯反應，於蒸餾後產生40克 2,5-二溴苄醯氯。

B部分：2,5-二溴-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苯醯肼之合成

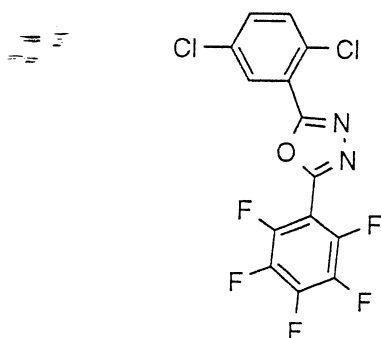
藉實施例2之A部分的一般方法，2,5-二溴苄醯氯(57.43克，0.11925莫耳)、4-辛氧苄醯肼(50.88克，0.1925莫耳)及三乙胺(27毫升，19.48克，0.1925莫耳)於800毫升二氯甲烷中進行反應，產生產物。產物自DMF/水再結晶，產生79.38克(78%產率)之2,5-二溴-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苯醯肼。

C部分：2-(2,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-嘔二唑之合成

藉實施例2之B部分的一般方法，39.1克(0.0743莫耳) 2,5-二溴-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苯醯肼與203毫升磷醯氯進行環縮合8小時，自EtOH/水再結晶之後，產生33.6克(89%產率) 2-(2,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-嘔二唑。

實施例4：2-(2,5-二氯苯基)-5-(五氟苯基)-1,3,4-嘔二唑之合

成



A部分：2,5-二氯苯醯肼之合成

在燒瓶中導入30克(0.1463莫耳)2,5-二氯苄酸甲酯及46.89克(1.463莫耳)肼。此者回流5小時。冷卻之反應混合物倒入過量水中，沉澱析出稍帶黃色之白色固體。過濾且於真空下乾燥，產生30克固體。¹H-NMR顯示該物質係為相當純之2,5-二氯苯醯肼，因此可不加純化直接使用。

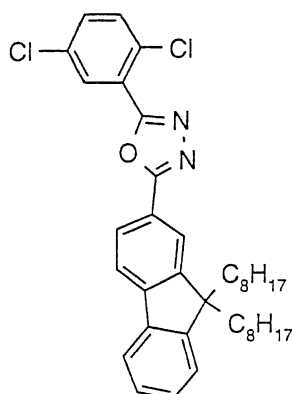
B部分：2,5-二氯-N'-(五氟苄醯)苯醯肼之合成

藉實施例2之A部分的一般方法，21.0克(0.1024莫耳)2,5-二氯苯醯肼與23.6克(0.1024莫耳)五氟苄醯氯及14.3毫升(0.1026莫耳)三乙胺於二氯甲烷/DMF(1公升，1:1)中反應，自DMF/水再結晶後產生22.51克(55%產率，mp 227至232°C)之2,5-二氯-N'-(五氟苄醯)苯醯肼。

C部分：2-(2,5-二氯苯基)-5-(五氟苯基)-1,3,4-噁二唑之合成

藉實施例2之B部分的一般方法，21.0克(0.05377莫耳)2,5-二氯-N'-(五氟苄醯)苯醯肼於POCl₃中反應產生產物，自乙醇/水再結晶之後，產生16.59克(81%產率)之2-(2,5-二氯苯基)-5-(五氟苯基)-1,3,4-噁二唑。

實施例5：2-(2,5-二氯苯基)-5-(9,9-二辛基-9H-芴-2-

基)-1,3,4-噁二唑之合成A部分：2-溴-9,9-二辛基萘之合成

裝置有機械攪拌器之3公升燒瓶中置入2-溴萘(45克，183.6毫莫耳)及150毫升DMSO。於N₂氛圍下添加80毫升50% NaOH水溶液及2.72克氯化三乙銨(2.72克，11.98毫莫耳)。此者於RT下攪拌2小時。在劇烈機械攪拌下，經由滴液漏斗添加正辛基溴(84.96克，440毫莫耳)(放熱)。攪拌持續2小時。在反應混合物中添加500毫升1:1之水/乙醚混合物，分離有機層，連續以鹽水及後續水洗滌。使用硫酸鎂乾燥，蒸發溶劑產生油。藉管柱層析純化(矽膠；作為移動相之己烷)產生67克(78%產率)之2-溴-9,9-二辛基萘之蒼白色油。

B部分：9,9-二辛基-9H-萘-2-羧酸之合成

裝置有氮入口及橡膠隔板之燒瓶中導入2-溴-9,9-二辛基萘(34.18克，72.8毫莫耳)及無水四氫呋喃(300毫升)。溶液冷卻至-60°C且經注射筒添加正丁基鋰(29.1毫升，於己烷中2.5M，72.8毫莫耳)。發現反應混合物轉紅。在-60°C下攪拌1小時之後，反應混合物倒於粉狀乾冰上，放置隔夜。混合

物使用1M HCl酸化，以氯仿萃取。氯仿萃取液以水洗滌，以硫酸鎂乾燥並濃縮產生油狀之酸。

C部分：9,9-二辛基-9H-芴-2-羧基氯之合成

9,9-二辛基-9H-芴-2-羧酸(32.36克，74.5毫莫耳)於亞硫醯氯(93克，782毫莫耳)中回流8小時。餾除未反應之亞硫醯氯，殘留物不加純化而直接使用。

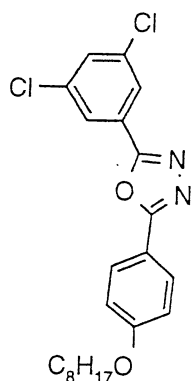
D部分：2,5-二氯-N'-[(9,9-二辛基-9H-芴-2-基)羧基]苯醯肼之合成

2,5-二氯苯醯肼(一當量)及三乙胺(一當量)於500毫升1,2-二氯乙烷中加溫至固體物質溶解。於冷卻下，添加9,9-二辛基-9H-芴-2-羧酸(一當量)，混合物於RT攪拌兩日。濾出不溶物，濾液蒸發產生油。此者置入庚烷中，濾出沉澱之固體。將殘留之溶液乾燥(MgSO₄)且濃縮產生所需之中間體。

E部分：2-(2,5-二氯苯基)-5-(9,9-二辛基-9H-芴-2-基)-1,3,4-噁二唑之合成

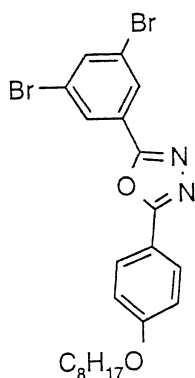
2,5-二氯-N'-[(9,9-二辛基-9H-芴-2-基)羧基]苯醯肼(20.0克，32.17毫莫耳)及磷醯氯(91毫升)回流8小時。反應蒸餾至約留下一半體積。將鍋中部分冷卻，於固定攪拌下倒於冰/水混合物上。形成之黏稠糊漿萃取於己烷中，將己烷萃取液乾燥且濃縮。管柱層析(於己烷中5%乙酸乙酯)產生14.98克(77%產率)之油狀所需化合物。

實施例6：2-(3,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之合成



藉實施例3中合成2-(2,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之一般方法，使3,5-二氯苄醯氯(20.0克，0.010莫耳)與4-辛氧基苄醯肼(25.24克，0.010莫耳)反應，產生中間體3,5-二氯-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苄醯肼(25克，60%產率)。中間體3,5-二氯-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苄醯肼(16.0克)與POCl₃ (83毫升)進行環化縮合產生2-(3,5-二氯苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑(11.16克，73%產率)。

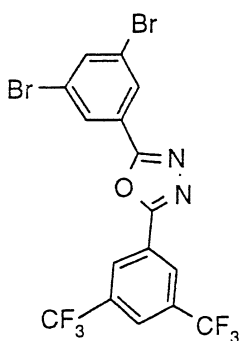
實施例7：2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之合成



藉實施例3中合成2-(2,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之一般方法，使3,5-二溴苄醯氯(20.13克，0.06747莫耳)與4-辛氧基苄醯肼(17克，0.06747莫耳)反應，

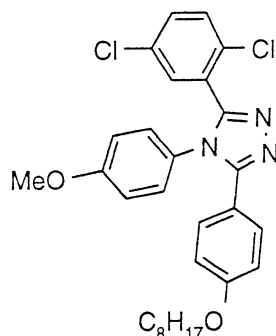
產生中間體 3,5-二溴-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苯醯肼(12.87克，36%產率)。中間體 3,5-二溴-N'-[4-(辛氧基)苄醯]苯醯肼(12.17克)與 POCl_3 (63毫升)進行環化縮合產生 2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苄基]-1,3,4-噁二唑(6.12克，52%產率)。

實施例 8: 2-(3,5-二溴苯基)-5-[3,5-雙(三氟甲基)苄基]-1,3,4-噁二唑之合成



藉實施例 1 之 B 部分的一般方法，使 3,5-雙(三氟甲基)苄酸甲酯與 98% 肼反應，產生中間體 3,5-雙(三氟甲基)苄醯肼。藉實施例 2 之 A 部分的一般方法，使 3,5-二溴苄醯氯與 3,5-雙(三氟甲基)苄醯肼於三乙胺存在下反應，產生中間體 3,5-二溴-N'-[3,5-雙(三氟甲基)苄醯]苯醯肼。藉實施例 2 之 B 部分的一般方法，此中間體與 POCl_3 進行環縮合產生 2-(3,5-二溴苯基)-5-[3,5-雙(三氟甲基)苄基]-1,3,4-噁二唑。

實施例 9: 3-(2,5-二氯苯基)-4-(4-甲氧基苄基)-5-[4-(辛氧基)苄基]-4H-1,2,4-三唑之合成

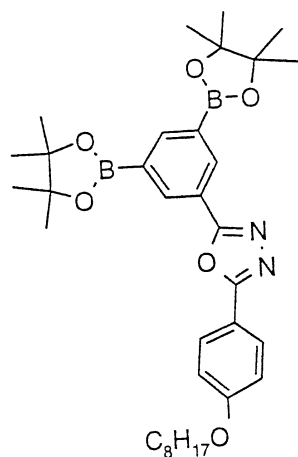


在裝置有機械攪拌器、回流冷凝器及氮入口之1公升圓底燒瓶中導入2,5-二氯-N'-[4-(辛氧基)苄基]苯醯肼(40克, 0.09146莫耳, 1當量)、對-茴香胺(67.60克, 0.5487莫耳, 6當量)及300毫升1,2-二氯苯。機械攪拌導致固體有部分溶合。添加三氯化磷(12.56克, 0.0146莫耳, 1當量), 燒瓶內容器於180°C下加熱12小時。於輕度真空下餾除溶劑, 殘留物使用1公升1:1丙酮/庚烷混合物移至2公升燒瓶。濾出固體物質, 且溶解於丙酮中。添加足量之庚烷, 以使紫色油狀淤渣沉澱析出。丙酮/庚烷層之試樣以庚烷稀釋, 確定油狀淤渣已完全沉澱析出。傾析去除丙酮/庚烷層, 再以大量過量之庚烷稀釋, 使白色固體沉澱。濾出此者, 溶解於丙酮中, 使用庚烷再沉澱。過濾且乾燥產生3-(2,5-二氯苯基)-4-(4-甲氧基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-4H-1,2,4-三唑(16.25克, 34%產率)。

實施例10：2-(3,5-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基))
苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之合成

此實施例係描述2-(3,5-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基))苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑之合成, 亦提

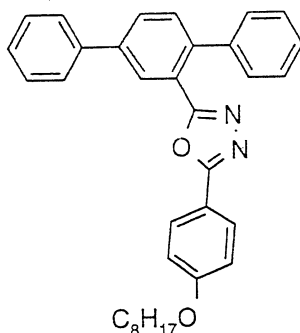
供製備某些有效之芳基喹二唑、三唑、及噻二唑二酮酸中間體的一般方法。Ranger等人於Chem. Commun. 1597-1598 (1997)所記錄之芳基酮酸酯的一般合成方法無法完全適用於此種環狀系統，因為丁基鋰與喹二唑有副反應。使用Ishiyama, Murata,及Miyaura於J. Org. Chem. 1995, 60, 7508-7510所描述之製備芳基酮酸酯的一般方法可得到良好轉化率。



依據此種一般方法，2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-喹二唑、雙(頻那醇根基)二硼、乙酸鉀、及[1,1'-雙(二苯膦基)-二茂鐵]二氯鈮(II)(與二氯甲烷1:1錯合-Aldrich, 0.089克, 0.1毫莫耳)於DMSO中於氮下在80°C反應18小時。冷卻後，反應混合物倒於冰水上，水層以二氯甲烷萃取三次，結合之有機部分以鹽水洗滌，以硫酸鎂乾燥，以薄二氧化矽床過濾，旋轉蒸發產生所需之2-(3,5-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基))苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-喹二唑。此等一般方法可用以製備許多可用於

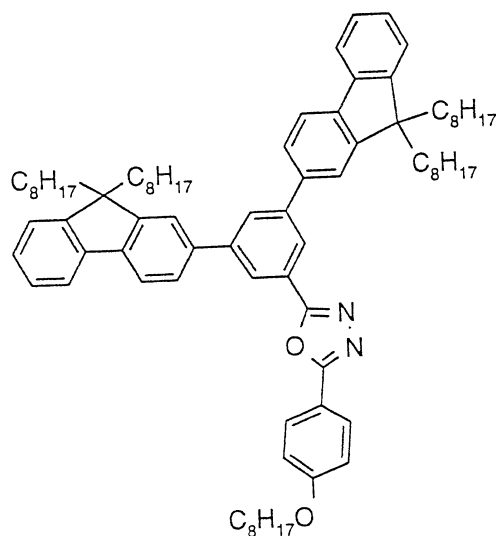
製備通式I化合物的芳烯、喹二唑、三唑及噁二唑二酮酸酯中間體。

實施例 11：2-(4-辛氧基-苯基)-5-[1,1',4',1'']聯三苯-2'-基[1,3,4]喹二唑之合成



實施例 3 之 2-(2,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]1,3,4-喹二唑(3.0克)、苯基酮酸(2.2克)、及 NaHCO_3 (3.4克) 以乙二醇二甲基醚 60 毫升及水 60 毫升混合。混合物以氮沖洗一小時，之後添加 0.35 克 $(\text{Ph}_3\text{P})_4\text{Pd}$ ，反應於氮下回流 20 小時。將反應冷卻之後，水層與有機層分離，以甲苯洗滌。結合之有機層以水洗滌兩次，以 Na_2SO_4 乾燥。濾除乾燥劑之後，將有機層蒸發乾燥。殘留物自乙醇再結晶 3 次，產生灰色固體之產物(2.0克，67%產率)。

實施例 12：2-[3,5-雙-(9,9-二辛基-9H-芴-2-基)苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成



A部分：2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-二辛基萸之合成

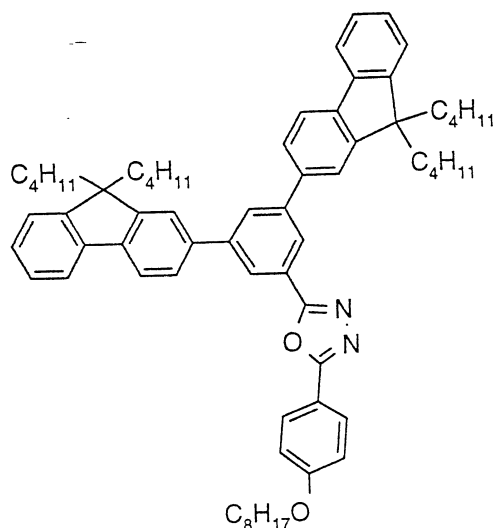
2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-二辛基萸係藉 Ranger 等人於 Chem. Commun. 1597-1598 (1997) 所記錄且描述於實施例 19 之芳基硼酸酯的一般合成方法自 2-溴-9,9-二辛基-萸(實施例 5 之 A 部分) 合成。

B部分：2-[3,5-雙-(9,9-二辛基-9H-萸-2-基)苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]噁二唑之合成

於燒瓶中導入 2.8 毫升甲苯、2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-二辛基萸(0.80 克，1.5 毫莫耳)、實施例 7 之 2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑(0.375 克，0.7 毫莫耳)、Aliquat™ 336 (0.15 克，0.4 毫莫耳) 及 1.4 毫升 2M Na₂CO₃ 水溶液。此者以 N₂ 沖洗 1 小時。燒瓶加熱至約 80°C，於氮沖洗下添加四(三苯膦)鈾(0)(12 毫克，0.01 毫莫耳)。燒瓶內容物回流 21 小時。將反應燒瓶冷卻至 RT，添加約 5 毫升水，分離有機層。水層以 3 x 15 毫升乙醚萃取。結

合有機層，連續以飽和NaCl洗滌兩次，之後以MgSO₄乾燥。濃縮產生油，藉快速層析純化(溶離劑：於己烷中之10%乙酸乙酯)，於真空下乾燥30分鐘成油狀，產生0.59克2-[3,5-雙-(9,9-二辛基-9H-芴-2-基)苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑。

實施例 13：2-[3,5-雙-(9,9-二丁基-9H-芴-2-基)-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成



A部分：2-溴-9,9-二丁基芴之合成

2-溴-9,9-二丁基芴係依實施例5之A部分所列的一般方法自2-溴芴及1-溴丁烷合成。

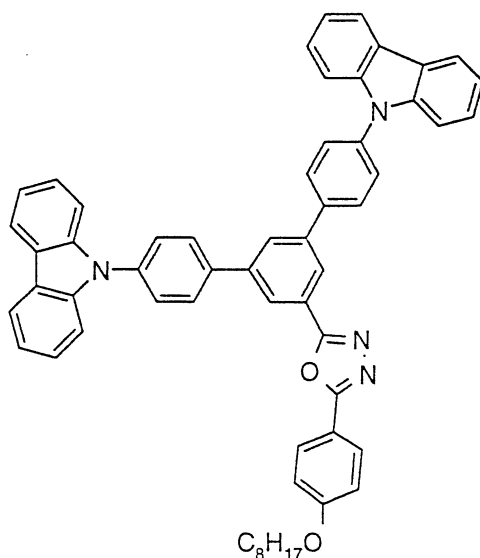
B部分：2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-二丁基芴之合成

2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-二丁基芴係藉實施例12之A部分所述的方法自2-溴-9,9-二丁基芴合成。

C部分：2-[3,5-雙-(9,9-二丁基-9H-芴-2-基)-苯基]-5-(4-辛氧

基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成

使用實施例12之B部分的方法，2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-二丁基芴(1.88克，4.6毫莫耳)與實施例7之2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-喹二唑(1.13克，2.2毫莫耳)反應產生對應之2-[3,5-雙-(9,9-二丁基-9H-芴-2-基)-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑。

實施例14：2-[3,5-雙-(苯-4-基-9H-吡唑)-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成A部分：4-溴苯基-9H-吡唑之合成

使用 Goodbrand 及 Hu 於 J. Org. Chem. 1999, 64, 670-674 (以引用方式併入本文) 中所描述 Ullmann 縮合之配位體加速催化的一般方法，吡唑(14.77克，88.4毫莫耳)、1-溴-4-碘苯(25.00克，88.4毫莫耳)、1,10-菲繞啉(0.6365克，3.3145毫莫耳)、氯化亞銅(0.3128克，3.2145毫莫耳)及碳酸鉀(95.38克，691.12毫莫耳)係與70毫升無水甲苯混合。溶液以氮沖洗，

於氮下加熱至回流歷經82小時，冷卻至室溫，之後以水洗滌，過濾，以硫酸鎂乾燥，蒸發乾燥。自乙酸乙酯再結晶，產生18.5克4-溴苯基咪唑與4-碘苯基咪唑之70:30混合物，其不加純化而直接使用。

B部分：4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-苯基-9H-咪唑之合成

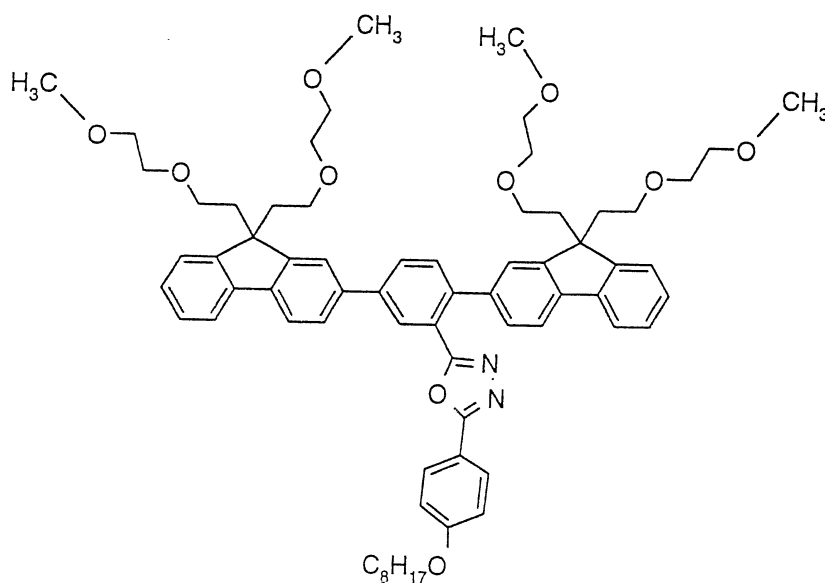
根據Ishiyama, Murata,及Miyaura於J. Org. Chem. 1995, 60, 7508-7510所描述之製備芳基硼酸酯的一般方法，4-溴苯基-9H-咪唑(1.089克，3.3毫莫耳)、雙(頻那醇根基)二硼(0.922克，3.6毫莫耳)、乙酸鉀(1.062克，11.0毫莫耳)、及[1,1'-雙(二苯膦基)-二茂鐵]二氯化鈣(II)(與二氯甲烷1:1錯合-Aldrich, 0.089克，0.1毫莫耳)混合於20毫升DMSO中。溶液以氮沖洗，於氮下於80°C下加熱18小時。冷卻之後，反應混合物倒入冰水中，水層以二氯甲烷萃取三次，結合之有機部分以鹽水洗滌，以硫酸鎂乾燥，使用薄二氧化矽床過濾，旋轉蒸發產生1.02克4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-苯基-9H-咪唑(84%產率)。

C部分：2-[3,5-雙-(苯-4-基-9H-咪唑)-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]噁二唑之合成

於燒瓶中導入10毫升甲苯、4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-N-苯基咪唑(2.0克，5.4毫莫耳)、實施例7之2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑(1.31克，2.6毫莫耳)、Aliquat™ 336(0.521克，1.3毫莫耳)及5毫升2M Na₂CO₃水溶液。此者以N₂沖洗1小時。燒瓶加熱至約

80°C，於氮沖洗下添加四(三苯膦)鈀(0)(94毫克，0.081毫莫耳)。燒瓶內容物回流21小時。將反應燒瓶冷卻至RT，添加約20毫升水，分離有機層。水層以6x10毫升二氯甲烷萃取。結合有機層，連續以飽和NaCl洗滌兩次，之後以MgSO₄乾燥。濃縮產生固體，自50:50二氯甲烷：己烷再結晶純化產生1.3克2-[3,5-雙-(苯-4-基-9H-吡啶)-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑。

實施例 15：2-[2,5-雙-{9,9-雙-(3,6-二氧庚基)-9H-萘-2-基}-
苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成



A部分：2-溴-9,9-雙(3,6-二氧庚基)-萘之合成

2-溴-9,9-雙(3,6-二氧庚基)-萘係根據實施例5之A部分所述的方法自溴-2-(2-甲氧乙氧基)乙烷及2-溴萘合成。

B部分：2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-雙(3,6-二氧庚基)-萘之合成

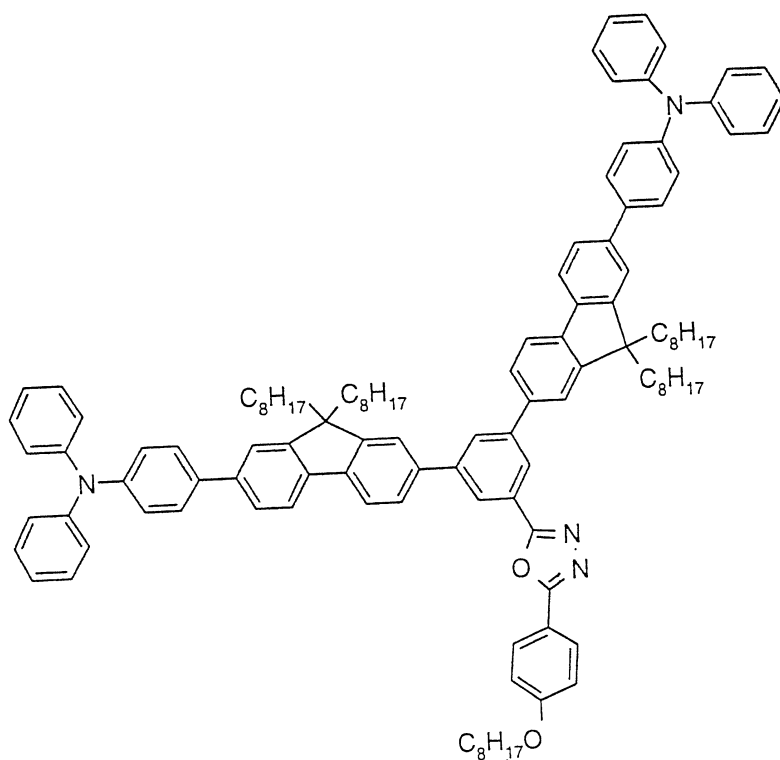
2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9,9-雙(3,6-二氧庚基)-萘係藉實施例12之A部分所述的方法自2-溴-9,9-雙

(3,6-二氧庚基)-萸合成。

C部分：2-[2,5-雙-{9,9-雙-(3,6-二氧庚基)-9H-萸-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成

根據實施例12之B部分的方法，2-[2,5-雙-{9,9-雙-(3,6-二氧庚基)-9H-萸-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑係藉著9-溴-9,9-雙(3,6-二氧庚基)-萸與實施例3之2-(2,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]1,3,4-喹二唑反應而製備。形成之產物顯然可產生光致發光，且形成可熱轉移至離子傳導性聚合物薄膜(諸如PEDT，聚(3,4-伸乙二氧噻吩)；CH-8000，購自Bayer AG, Leverkusen, Germany)之薄膜。

實施例16：2-[3,5-雙{9,9-二辛基-7-(苯基-4-胺基-N,N-二苯基)-9H-萸-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成



A部分：2,7-二溴-9,9-二辛基-蒾之合成

2,7-二溴-~~9,9~~-二辛基-蒾係如 Ranger 等人於 Can. J. Chem. 1571-1577 (1998) 所述般地製得。

B部分：2-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-蒾-2-基]-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴之合成

2-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-蒾-2-基]-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴係如 Ranger 等人於 Chem. Commun. 1597-1598 (1997) 所述般地自 2,7-二溴-9,9-二辛基-蒾製得。

C部分：4-溴-N,N-二苯基苯胺之合成

4-溴-N,N-二苯基苯胺係如 Creason 等人，J. Org. Chem. 37, 4440-4446 (1972) 所述般地製得。

D部分：4-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-蒾-2-基]-N,N-二苯基苯胺之合成

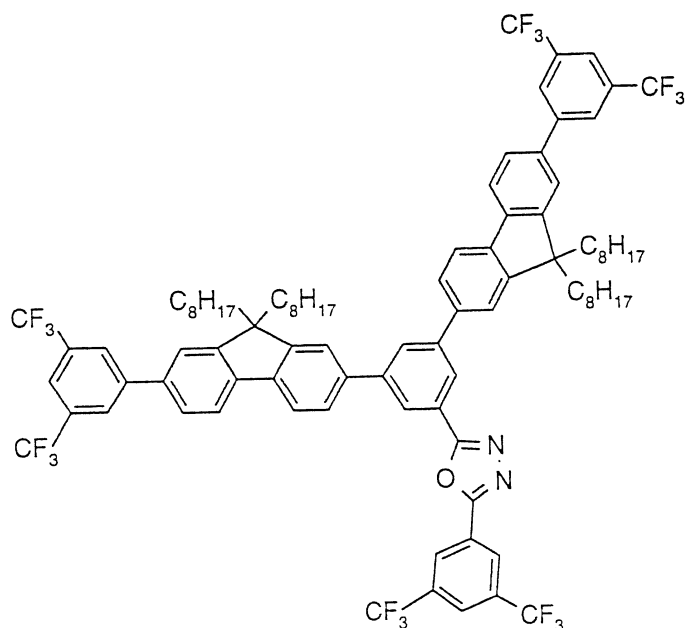
4-溴-N,N-二苯基苯胺(19.44克，60毫莫耳)、2-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-蒾-2-基]-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴(76.9克，120毫莫耳)、AliquatTM 336 (氯化三辛基甲基銨)(6克，15毫莫耳)及2M碳酸鈉水溶液(75毫升，150毫莫耳)添加於600毫升甲苯中。此者以氮流沖洗約30分鐘。於氮沖洗下添加四(三苯膦)鈀(0)(348毫克，0.30毫莫耳)。反應混合物回流16小時。將反應冷卻至室溫，添加水。分離有機層，以水洗滌，之後以鹽水洗滌。有機層以Na₂SO₄乾燥，蒸發溶劑產生淡黃色固體。此者懸浮於丙酮中，混合物調至回流，於室溫下放置隔夜。濾出固體，濾液濃縮產生固體，進行管柱層析(甲苯：

己烷 3:7) 產生 4-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-芴-2-基]-N,N-二苯基苯胺。

E 部分：2-[3,5-雙{9,9-二辛基-7-(苯基-4-胺基-N,N-二苯基)-9H-芴-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成

2-[3,5-雙{9,9-二辛基-7-(苯基-4-胺基-N,N-二苯基)-9H-芴-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑係藉著 4-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-芴-2-基]-N,N-二苯基苯胺與實施例 7 之 2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-喹二唑 (2.2 毫莫耳) 於實施例 12 之 B 部分所列的條件下反應而製備。形成之產物產生光致發光，形成同時可於 OLED 組合物中支持電洞及電子傳遞之薄膜。

實施例 17：2-[3,5-雙{9,9-二辛基-7-(3,5-雙-三氟甲基-苯基)-9H-芴-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成



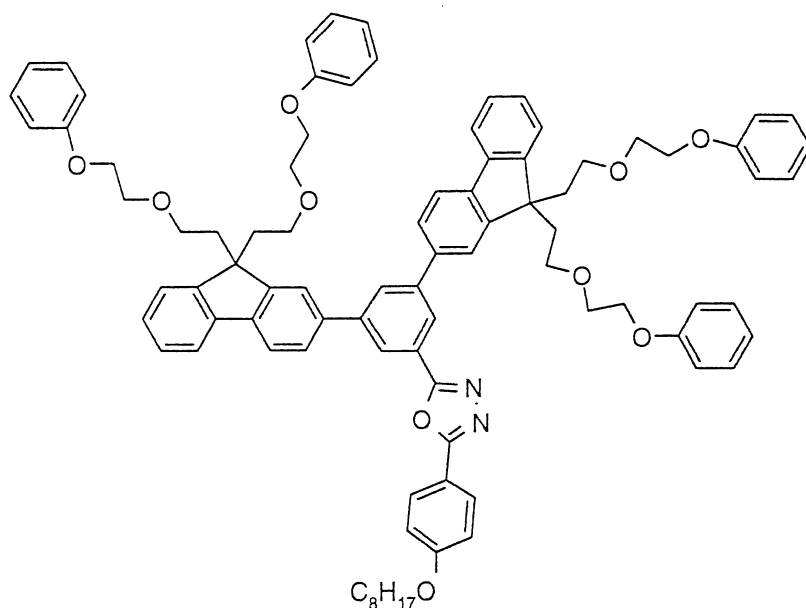
A部分：2-{7-[3,5-雙(三氟甲基)苯基]-9,9-二辛基-9H-芴-2-基}-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴及2,7-雙[3,5-雙(三氟甲基)苯基]-9,9-二辛基-9H-芴之合成

3,5-雙三氟甲基溴苯(0.293克, 1毫莫耳)、2-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-芴-2-基]-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴(1.28克, 2毫莫耳)、AliquatTM 336(氯化三辛基甲基銨)(0.15克, 0.375毫莫耳)及2M碳酸鈉水溶液(1.25毫升, 2.5毫莫耳)添加於10毫升甲苯中。此者以氮流沖洗約30分鐘。於氮沖洗下添加四(三苯膦)鈀(0)(14毫克, 0.012毫莫耳)。反應混合物回流16小時。將反應冷卻至室溫, 添加水。分離有機層, 以水洗滌, 之後以鹽水洗滌。有機層以Na₂SO₄乾燥, 蒸發溶劑產生淡黃色固體。此固體溶於乙醚中, 少部分施加於二氧化矽薄層層析(TLC)板上。該TLC板使用1:1甲苯:己烷溶離, 產生三個不連續之譜帶。收集中間譜帶, 測定係為2-{7-[3,5-雙(三氟甲基)苯基]-9,9-二辛基-9H-芴-2-基}-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴之淡黃色油(28毫克)。¹H NMR: δ 0.53-0.69 (m, 4H), 0.78 (t, 6H), 0.96-1.29 (m, 20H), 1.40 (s, 12H), 1.97-2.11 (m, 4H), 7.52 (s, 1H), 7.56 (d, 1H), 7.72-7.80 (m, 2H), 7.80-7.88 (m, 3H), 8.05 (s, 2H)。收集具有最大溶離距離之譜帶, 確定係為副產物2,7-雙[3,5-雙(三氟甲基)苯基]-9,9-二辛基-9H-芴之淡黃色油(8毫克)。¹H NMR: δ 0.51-0.65 (m, 4H), 0.70 (t, 6H), 0.91-1.26 (m, 20H), 1.98-2.11 (m, 4H), 7.49 (s, 2H), 7.56 (d, 2H), 7.80 (d, 4H), 8.00 (s, 4H)。

B部分：2-[3,5-雙{9,9-二辛基-7-(3,5-雙-三氟甲基-苯基)-9H-蒽-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成

2-[3,5-雙{9,9-二辛基-7-(3,5-雙-三氟甲基-苯基)-9H-蒽-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑係藉著2-{7-[3,5-雙(三氟甲基)苯基]-9,9-二辛基-9H-蒽-2-基}-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴與2-(3,5-二溴苯基)-5-[3,5-雙(三氟甲基)苯基]-1,3,4-喹二唑於實施例12之B部分所列的條件下進行反應而製備。

實施例18：2-[3,5-雙{9,9-雙(3,6-二氧己基苯基)-9H-蒽-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑之合成



A部分：PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I之合成

PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I係如 Otera 等人於 Bull. Chem. Soc. Jpn. 2964-2967 (1981) 所述般地製得。

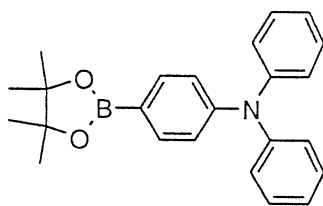
B部分：2-溴-9,9-雙(3,6-二氧己基苯基)-蒽之合成

2-溴-9,9-雙(3,6-二氧己基苯基)-蒾係根據實施例5之A部分所示之一般方法自 $\text{PhO}(\text{CH}_2)_2\text{O}(\text{CH}_2)_2\text{I}$ 及2-溴蒾合成。

C部分：2-[3,5-雙{9,9-雙(3,6-二氧己基苯基)-9H-蒾-2-基}-
苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]噁二唑之合成

根據實施例12之B部分的一般方法，2-[3,5-雙{9,9-雙(3,6-二氧己基苯基)-9H-蒾-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]噁二唑係藉著2-溴-9,9-雙(3,6-二氧己基苯基)-蒾與實施例3之2-(3,5-二溴苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-噁二唑反應而製備。形成之產物顯然可產生光致發光，形成可熱轉移至離子傳導性聚合物薄膜(諸如PEDT，聚(3,4-伸乙二氧噻吩)；CH-8000，購自Bayer AG, Leverkusen, Germany)之薄膜。

實施例19：N,N-二苯基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-
基)苯胺的合成及應用

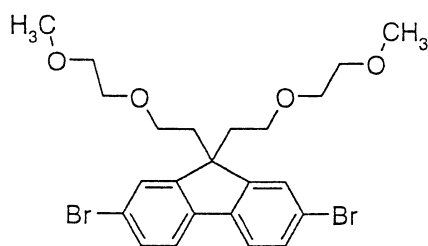


根據Ranger等人於Chem. Commun. 1597-1598 (1997)所記錄之芳基硼酸酯的一般合成方法，經由注射器將正丁基鋰逐滴添加於4-溴-N,N-二苯基苯胺(24克，0.074莫耳)於175毫升無水THF中之 -78°C (丙酮-乾冰冷卻浴)溶液。於 -78°C 下持續攪拌一小時，之後於 -50°C 下攪拌一小時。混合物冷卻至 -78°C ，經由注射筒一次添加2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基

-1,3,2-二氧硼腴(17.22克，0.0925莫耳)。溫度於-78℃下保持三小時。移除冷卻浴，反應保持溫至室溫，同時放置12小時。反應混合物倒入飽和乙酸銨中，以乙醚萃取。乙醚層以硫酸鎂乾燥，濃縮產生黏稠之油。管柱層析純化(聚矽酮，以己烷：甲苯混合物溶離，漸增梯度係自100%己烷至40%己烷)，產生N,N-二苯基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)苯胺之油(19.9克，72.8%產率)，其於放置時緩緩結晶成固體。

此化合物可藉著直接交聯於伸芳基喹二唑化二溴核心上，而用以在末端封端基團上導入電洞傳遞功能。或此化合物可使用於(例如)實施例16所教示之化合物2-[3,5-雙{9,9-二辛基-7-(苯基-4-胺基-N,N-二苯基)-9H-萸-2-基}-苯基]-5-(4-辛氧基-苯基)-[1,3,4]喹二唑的另一種合成路徑。此者可藉著N,N-二苯基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)苯胺與過量之2,7-二溴-9,9-二辛基萸反應，產生4-[9,9-二辛基-7-溴-9H-萸-2-基]-N,N-二苯基苯胺，此化合物與實施例10之2-(3,5-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基))苯基)-5-[4-(辛氧基)苯基]-1,3,4-喹二唑於Suzuki偶聯條件下反應時，產生實施例16之最終化合物。

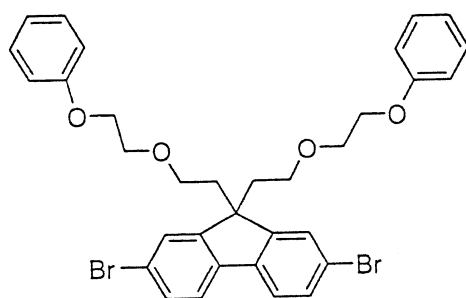
實施例20：2,7-二溴-9,9-雙(3,6-二氧庚基)萸之合成及應用



氯化苄基三乙銨(3.19克，14毫莫耳，0.077當量)及2,7-二溴萸(59克，182毫莫耳，1當量)懸浮於178毫升DMSO中。添加50%NaOH水溶液80毫升。之後分小批地添加1-溴-2-(2-甲氧乙氧基)乙烷(80克，437毫莫耳，2.4當量)。反應於室溫下攪拌2小時，之後停止，水層以乙醚萃取。結合之乙醚層以水洗滌五次，以Na₂SO₄乾燥。過濾有機層，蒸發乾燥，殘留物於矽膠管柱上快速層析，產生純化合物(73克)，產率86%。

此化合物可用於(例如)修飾實施例16化合物的溶解度參數。為達此項功能，使用2,7-二溴-9,9-雙(3,6-二氧庚基)-萸取代實施例16中之2,7-二溴-9,9-二辛基萸。

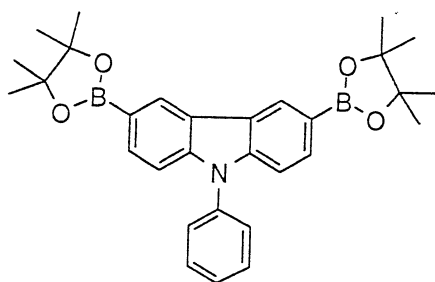
實施例21：2,7-二溴-9,9-雙(3,6-二氧己基-6-苯基)萸之合成及應用



先根據J. Otera, T. Shiomi, K. Murakami及Y. Kawasaki於Bull. Chem. Soc. Jpn., 1981, 2964-2967中所述之方法合成PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I。隨之根據實施例5之A部分的一般方法自PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I及2,9-二溴萸合成2,7-二溴-9,9-雙(3,6-二氧己基-6-苯基)萸。

此化合物可用於(例如)修飾實施例16化合物的溶解度參教。為達此目的，使用2,7-二溴-9,9-雙(3,6-二氧己基苯基)萘取代實施例16中之2,7-二溴-9,9-二辛基萘。

實施例22：9-苯基-3,6-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-吡啶之合成及應用



A部分：3,6-二溴-9-苯基吡啶之合成

3,6-二溴-9-苯基吡啶係如 Park 等人於 Tetrahedron, 42, 12707-12714 (1998)中所述般製得。

B部分：9-苯基-3,6-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-吡啶之合成

2公升燒瓶中置入600毫升無水THF及3,6-二溴-9-苯基吡啶(60克，0.15莫耳)。此者使用丙酮-乾冰浴冷卻至-78°C。經注射筒逐滴添加正丁基鋰(138毫升，於己烷中之2.5M溶液，0.34莫耳)。反應攪拌20分鐘，溫至50°C。溫度降低至-78°C，經注射筒添加2-異丙氧-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴(64克，0.34莫耳)，速率係使溫度保持低於-60°C。溫度保持於-78°C下歷經兩小時，之後倒入乙酸安水溶液(90克於2100毫升水中)中。分層，水相以甲基-第三丁基醚(2 x 200毫升)萃取。結合之有機相及萃取液以鹽水(2 x 200毫升)洗

滌，使用硫酸鎂乾燥。濃縮且所得之固體自丙酮再結晶，產生純9-苯基-3,6-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-吡啶。

此化合物可用以(例如)修飾實施例17化合物之電洞傳遞性質。為達此目的，使用9-苯基-3,6-雙(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-吡啶取代實施例17中之2-[9,9-二辛基-7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴-2-基)-9H-芴-2-基]-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼腴。

實施例23：4,7-二溴-2,1,3-苯并噻二唑-3,9-二溴-芘及3,10-二溴-芘之合成及應用

4,7-二溴-2,1,3-苯并噻二唑係如 Pilgram 等人於 J. Heterocycl. Chem., 7, 629-633 (1970) 所述般製得。

3,9-二溴-芘及3,10-二溴-芘係如 Zinke 等人於 Chem. Ber. 74, 107-112 (1941) 所述般製得。此等化合物可用以修飾(例如)實施例16或17之化合物的發光性質。此可藉著使用此等化合物中之一取代實施例16或17所述之製備中的2,7-二溴-9,9-二辛基芴而達成。

實施例24至31：電活性組合物及有機電致發光裝置

電活性組合物係如下製備：實施例11至14之電子傳遞化合物(ETA's)個別於1至3重量/重量%下溶解於二氯甲烷或甲苯中(購自 Aldrich Chemical, Milwaukee, WI 之 HPLC 級)。選自 TPD、CBP 及 PVK 之電洞傳遞劑(HTA)係於 ETA/HTA=10:3 的比例下添加；部分情況下，係為 10:10 或 10:1。藉著添加少量發光劑於二氯甲烷(DCE)中之 10 mM 溶液而導入 0.01 至

0.5重量/重量%的量之分子發光劑 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 。各塗覆溶液在施加之之前皆經0.2微米耐綸注射濾器過濾。

有機電致發光裝置係如下構成：自 Thin Film Devices (Anaheim, CA) 得到2厘米x2厘米之玻璃方塊，其一側面上氣相沉積氧化銦錫 (ITO) 塗層。該塗覆有ITO之側面以甲醇清洗，以 O_2 電漿蝕刻處理(50 W及200 mTorr下4分鐘)，旋塗(2500 rpm下30秒) PEDT/PSS共聚物水溶液，於 115°C 下於氮吹拂下乾燥。之後，先前製備之塗覆溶液各旋塗於塗覆有PEDT/PSS之基材頂面(2000 rpm下30秒)。玻璃方塊放置於鋁框內，置入真空沉積艙內，泵抽至 10^{-6} 托耳歷經約1小時。藉氣相沉積約10埃之LiF及約2000埃之鋁以施加陰極。

評估形成之有機電致發光燈具的驅動電壓(V)、外加量子效率百分比(% Q.E.)、發光強度(cd/m^2)及針對在 $20 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 驅動電流下操作之藍色、綠色及紅色燈具的發光最大值($\lambda_{\text{max}} \text{ nm}$)。

表1列出電活性組合物及個別燈的評估結果。電活性組合物中之材料於表1中係以添加於1000份(1000 p) DCE中以製得製備燈具所用之旋塗溶液的重量份數表示。

表 1. 電活性組合物及燈具評估結果

| 實施例 | p ETA/ 1000 p DCE (ETA) | p HTA/ 1000 p DCE (HTA) | p發光劑/ 1000 p DCE (發光劑) | 電致發光性 λ nm |
|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| | 24 | 10 (Ex.11) | 3 (TPD) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) |
| 對照例25 | 10 (C8O) | 3 (CBP) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) | 508 |
| 26 | 10 (C8O) | 3 (Ex. 14) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) | 510 |
| 27 | 10 (Ex.12) | 3 (CBP) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) | 508 |
| 28 | 10 (Ex.12) | 3 (Ex. 14) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) | 508 |
| 29 | 10 (Ex.12) | 3 (PVK) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) | 508 |
| 30 | 10 (Ex.11) | 3 (PVK) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) | 505 |
| 31 | 10 (Ex.12) | 3 (PVK) | 0.085 (Ir(ppy) ₃) | 508 |

(Ex.11)表示實施例11化合物。

(Ex.12)表示實施例12化合物。

(Ex.14)表示實施例14化合物。

實施例32：施體片之製備

熱轉移施體片係依下列方式製備。表2所述之LTHC溶液塗覆於0.1毫米厚之聚對苯二甲酸乙二醇酯(PET)薄膜基材(M7, Teijin, Osaka, Japan)上。塗覆係使用Yasui Seiki Lab Coater型號CAG-150以每英寸具有150個螺旋單元之微型凹印滾筒進行。LTHC塗層係於80°C下連線乾燥，且於紫外線(UV)輻射下固化。

表 2. LTHC 溶液

| 成份 | 商標 | 重量份數 |
|-------------------------------|--------------------------------|-------|
| 碳黑顏料 | Raven 760 Ultra ⁽¹⁾ | 3.88 |
| 聚乙烯醇縮丁醛樹脂 | Butvar B-98 ⁽²⁾ | 0.69 |
| 丙烯酸樹脂 | Joncryl 67 ⁽³⁾ | 2.07 |
| 分散劑 | Disperbyk 161 ⁽⁴⁾ | 0.34 |
| 含氟界面活性劑 | FC-430 ⁽⁵⁾ | 0.01 |
| 環氧基酚醛清漆丙烯酸酯 | Ebecryl 629 ⁽⁶⁾ | 13.18 |
| 丙烯酸樹脂 | Elvacite 2669 ⁽⁷⁾ | 8.79 |
| 2-苄基-2-(二甲胺基)-1-(4-嗎福啉基)苯基)丁酮 | Irgacure 369 ⁽⁸⁾ | 0.89 |
| 1-羥基環己基苯基酮 | Irgacure 184 ⁽⁸⁾ | 0.13 |
| 2-丁酮 | | 43.75 |
| 1,2-丙二醇單甲基醚乙酸酯 | | 26.25 |

⁽¹⁾Columbian Chemicals Co., Atlanta, GA

⁽²⁾Solutia Inc., St. Louis, MO

⁽³⁾S.C. Johnson & Son, Inc. Racine, WI

⁽⁴⁾Byk-Chemie USA, Wallingford, CT

⁽⁵⁾3M Co., Ts. Paul, MN

⁽⁶⁾UCB Radcure Inc., N. Augusta, SC

⁽⁷⁾ICI Acrylics Inc., Memephis, TN

⁽⁸⁾Ciba-Geigi Corp., Tarrytown, NY

之後，藉轉輪壓印塗覆法，使用 Yasui Seiki 實驗室塗覆機

CAG-150型(具有每線線英吋180螺旋單元之微型凹印滾筒)，將表3所示之中間層溶液塗覆於固化之LTHC層上。此塗層於60°C連線乾燥，且於紫外線(UV)輻射下固化。

表3. 中間層塗覆溶液

| 成份 | 重量份數 |
|--|-------|
| SR 351 HP (三羥甲基丙烷三丙烯酸酯， 購自 Sartomer, Exton, PA) | 14.85 |
| Butvar B-98 | 0.93 |
| Joncryl 67 | 2.78 |
| Irgacure 369 | 1.25 |
| Irgacure 184 | 0.19 |
| 2-丁酮 | 48.00 |
| 1-甲氧-2-丙醇 | 32.00 |

之後，將轉移層形成於該施體片之中間層上。該轉移層係藉著於約2000至2500 rpm下將實施例26或27經分子摻雜之聚合物組合物旋轉30秒(Headway Research旋塗器)，產生約50奈米薄膜厚度，而配置於該施體片上。

實施例33：轉移層之雷射感應熱成像

A部分：製備受體基材

PEDT (聚(3,4-伸乙二氧噻吩))溶液(Baytron P 4083，得自 Bayer AG, Leverkusen, Germany)，以去離子水稀釋1:1)經WHATMAN PURADISC 0.2微米耐綸注射濾器過濾。

未圖案化之ITO (氧化銻錫)玻璃(Delta Technologies,

Stillwater, MN, 小於 100 歐姆/平方, 1.1 毫米厚) 於 3% 熱 Deconex 12NS 清潔劑 (Borer Chemie AG, Zuchwil, Switzerland) 溶液中以超音波清洗。基材隨之置入 Plasma Science 電漿處理器中, 於下列條件下進行表面處理: 2 分鐘; 功率: 500 瓦 (165 瓦/厘米²); 且氧流: 100 托耳。

在電漿處理之後, 該 PEDT 溶液立即過濾, 經由 WHATMAN PURADISC 0.2 微米耐綸注射濾器分配於 ITO 基材上。該基材於 2000 rpm 下旋轉 (Headway Research 旋塗器) 30 秒, 產生 40 奈米之 PEDT 薄膜厚度。所有基材皆於氮下加熱至 200°C 歷經 5 分鐘。

B 部分: 來自施體片之轉移層的雷射感應熱成像

實施例 33 之施體片係與受體基材接觸。之後, 施體片使用兩個單一模式之 Nd:YAG 雷射成像。使用線性電流計系統進行掃描, 結合之雷射光束使用 f- θ 掃描透鏡 (近-遠心結構之一部分) 集中於影像平面上。雷射能量密度係為 0.4 至 0.8 焦耳/厘米²。雷射光點尺寸 (於 1/e² 強度下測量) 係為 30 微米乘 350 微米。線性雷射光點速度係於每秒 10 及 30 米之間調整 (於影像平面上測量)。雷射光點係於約 100 微米振幅下與主要位移方向垂直的高頻振動。轉移層係以線條形式轉移於受體基材上, 線條所需寬度約 100 微米。雷射感應之熱成像係於 11.4 至 20.0 米/秒之掃描速度及下列條件下進行: 劑量 0.4 至 0.7 焦耳/厘米²; 掃描速度 20 至 11.4 米/秒; 線寬 90 微米; 而間距 225 微米。

形成之雷射感應熱成像圖案的數位影像顯示電活性組合

物轉移至受體表面上被成像之區域中，而未成像受體表面上無電活性雜質。

【圖式簡單說明】

參照附圖且考慮前文針對本發明各具體實例之詳細描述，可更充分明瞭本發明，其中：

圖1係為有機電致發光顯示結構的側面視意圖；

圖2係為轉移材料使用之施體片的側面示意圖；

圖3係為有機電致發光顯示器的側面示意圖；

圖4A係為有機電致發光裝置之第一具體實例的側面示意圖；

圖4B係為有機電致發光裝置之第二具體實例的側面示意圖；

圖4C係為有機電致發光裝置之第三具體實例的側面示意圖；及

圖4D係為有機電致發光裝置之第四具體實例的側面示意圖。

雖然本發明可有各種修飾及備擇形式，但其特性係例示於圖中且詳細描述於前文。然而，應瞭解本發明不限於所述之特定具體實例。相反的，本發明係涵蓋包括在本發明精神及範圍內之所有修飾、同等形式及備擇物。

【圖式代表符號說明】

100 OEL顯示器或裝置

110 裝置層

120 基材

- 130 選擇性元件
- 140 觀測位置
- 200 熱轉移施體片
- 210 基材
- 212 選擇性底層
- 214 選擇性光-對-熱轉化層(LTHC層)
- 216 選擇性中間層
- 218 轉移層
- 250 基材
- 252 陽極
- 254 陰極
- 256 發光層
- 258 電洞傳遞層
- 260 電子傳遞層
- 300 顯示器
- 310 OEL元件
- 320 基材

伍、中文發明摘要：

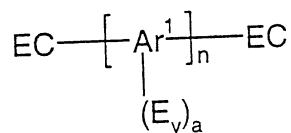
本發明提供一種可在有機電子裝置諸如有機電致發光裝置中作為電子傳遞劑之化合物及組合物。該化合物為非聚合物，且具有軛合於末端封端基的芳族核心。該芳族核心係含有伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基具有包括-C=N-單元之側向雜芳基。

陸、英文發明摘要：

Compounds and compositions are provided that can be used as electron transport agents in organic electronic devices such as organic electroluminescent devices. The compounds are non-polymeric and have an aromatic core conjugated to end capping groups. The aromatic core contains a phenylene group arylene or naphthalene group arylene having a pendant heteroaryl group that includes a -C=N-unit.

拾、申請專利範圍：

1. 一種包含一芳族核心及兩個輻合於該芳族核心之末端封端基團的化合物，該化合物係具有通式I：



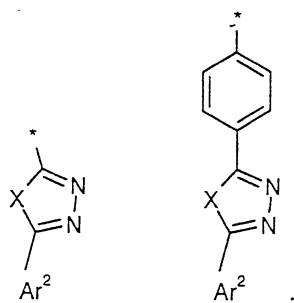
I

其中

各Ar¹個別係為伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基及其組合之基團所取代；

各a個別係為1或2；

各E_y個別係為具有通式II或通式III之結構：



II

III

各X個別係為O、S或NR¹，其中R¹係為烷基、芳基、雜芳基、雜烷基、或其組合；

各Ar²個別係為碳環芳基，其未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、

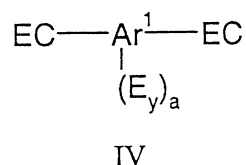
全氟烷基、雜烷基、雜芳基、烷基喹二唑基、芳基喹二唑基、烷基三唑基、芳基三唑基、二芳基胺基、芳基二芳胺基、及其組合之基團所取代；

各星號(-*)係表示該化合物中一鍵結相對於另一基團的位置；

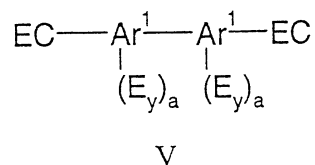
n係為等於1或2之整數；且

各末端封端基團(EC)個別係為碳環芳基、雜芳基、或三級胺基芳基，其係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代，其中係為通式II或通式III之基團的EC不多於一個。

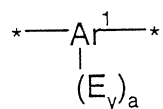
2. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中該化合物係具有通式IV：



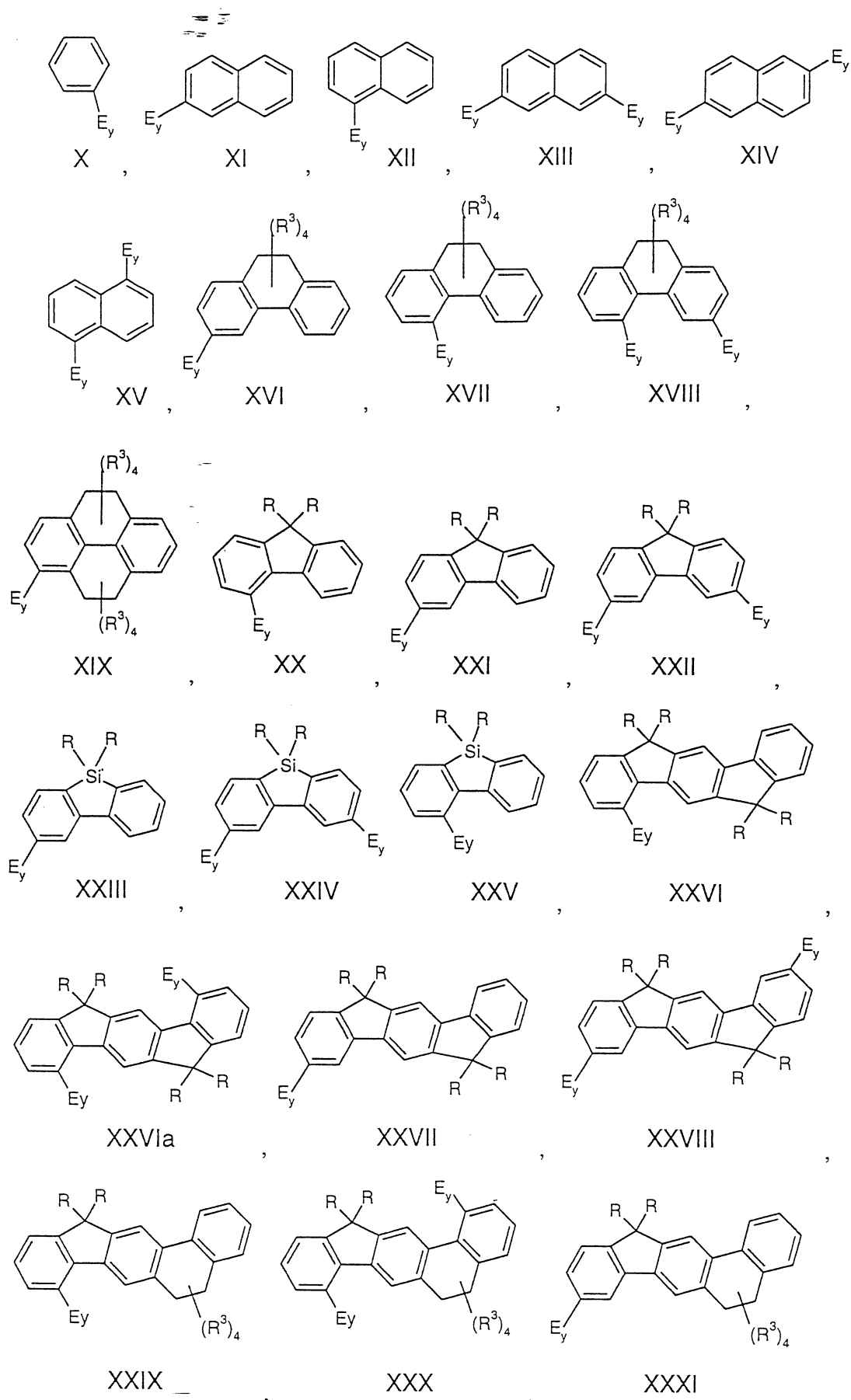
3. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中該化合物係具有通式V：

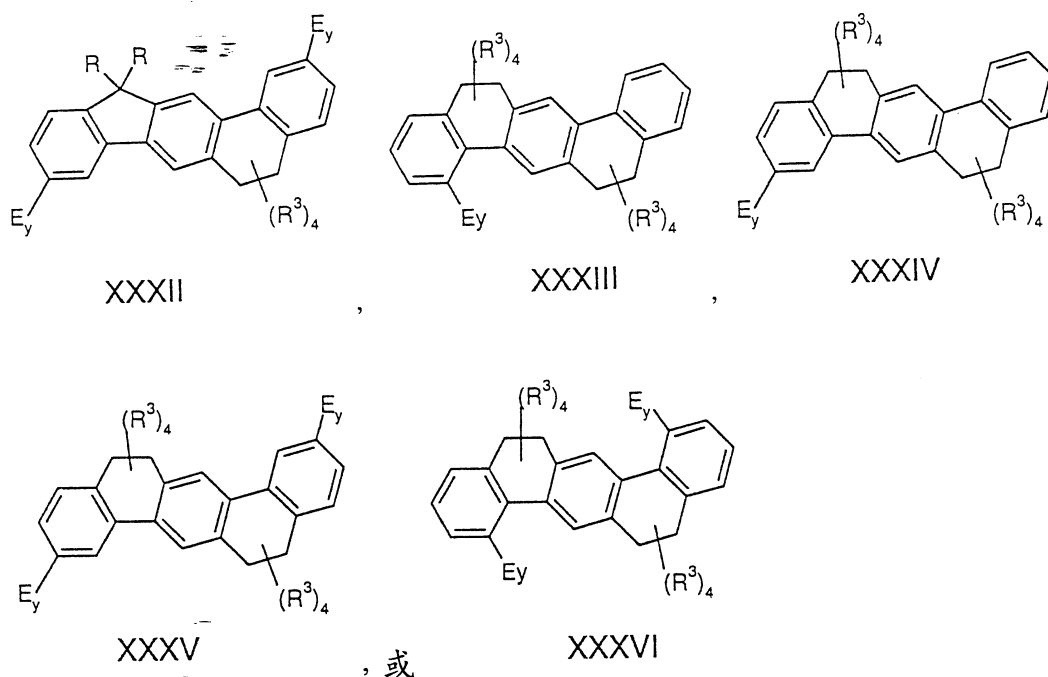


4. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中各個通式I中之



部分個別係為下列二價基團



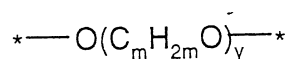


其未經取代或經一或多個選自 C₁₋₂₀ 烷基、C₂₋₂₀ 烯基、C₁₋₂₀ 烷氧基、C₆₋₂₀ 芳基、C₆₋₂₀ 芳氧基、氟、C₁₋₂₀ 氟烷基、C₁₋₂₀ 全氟烷基、C₁₋₂₀ 雜烷基、C₃₋₂₀ 雜芳基、及其組合的基團所取代，其中

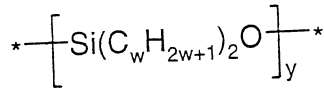
各 R 係個別為 C₁₋₃₀ 烷基、C₂₋₃₀ 烯基、C₁₋₃₀ 烷氧基、C₆₋₃₀ 芳基、C₆₋₃₀ 芳氧基、C₃₋₃₀ 雜芳基、C₁₋₃₀ 雜烷基及其組合；且

各 R³ 個別選自氫、C₁₋₃₀ 烷基、C₂₋₃₀ 烯基、C₁₋₃₀ 烷氧基、C₆₋₃₀ 芳基、C₆₋₃₀ 芳氧基、C₃₋₃₀ 雜芳基、C₁₋₃₀ 雜烷基及其組合。

5. 如申請專利範圍第 4 項之化合物，其中至少一 R 或 R³ 係包括具有通式 VI 之二價聚(氧伸烷基)軟性鏈段

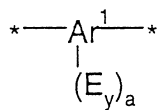


或具有通式 VII 之二價聚(二烷基矽氧烷)軟性鏈段

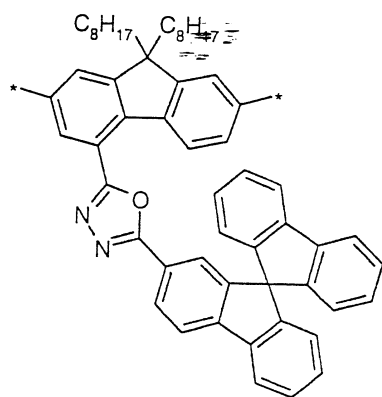


其中 m 係為 1 至 6 之整數，y 係為 2 至 20 之整數，且 w 係為 1 至 10 之整數。

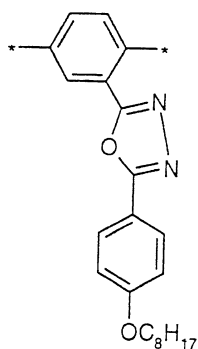
6. 如申請專利範圍第 4 項之化合物，其中至少一 R 或 R³ 係包含氟、氟烷基或全氟烷基。
7. 如申請專利範圍第 1 項之化合物，其中 Ar² 係為選自苯基、聯苯基、聯三苯基、蒽基 (anthryl)、萘基、芘基、菲基、二氫菲基、蒽基 (anthracenyl)、萘基、9-矽雜萘基、四氫芘基、芘基、螺雙萘基、螢蒽基、芘基、二氫芘基、四氫芘基、紅螢烯基、蒾基、5,6,12,13-四氫二苯并[a,h]蒽基、6,12-二氫茛并[1,2-b]萘基、5,12-二氫-6H-茛并[1,2-b]菲基、二氫菲基、及苯并[g,h,I]芘基，其未經取代或經一或多個 C₁₋₂₀ 烷基、C₂₋₂₀ 烯基、C₁₋₂₀ 烷氧基、C₆₋₂₀ 芳基、C₆₋₂₀ 芳氧基、氟、C₁₋₂₀ 氟烷基、C₁₋₂₀ 全氟烷基、C₁₋₂₀ 雜烷基、C₃₋₂₀ 雜芳基、C₃₋₃₀ 烷基嘔二唑基、C₃₋₃₀ 芳基嘔二唑基、C₃₋₂₀ 烷基三唑基、C₃₋₃₀ 芳基三唑基、C₃₋₃₀ 二芳胺基、C₃₋₃₀ 二芳胺基芳基及其組合所取代。
8. 如申請專利範圍第 1 項之化合物，其中至少一個通式 I 之基團



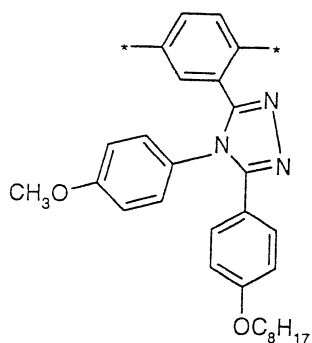
係選自



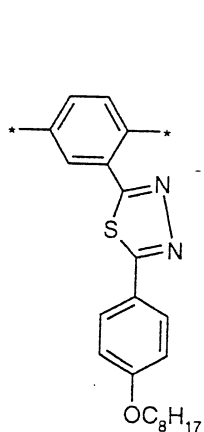
LXXI



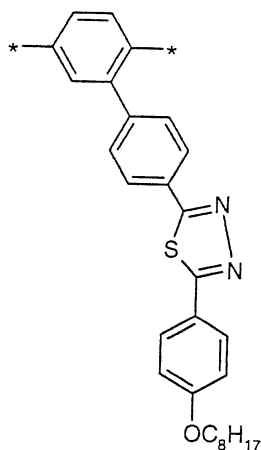
LXXII



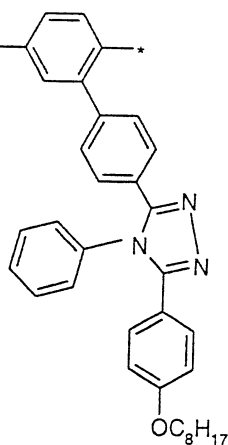
LXXIII



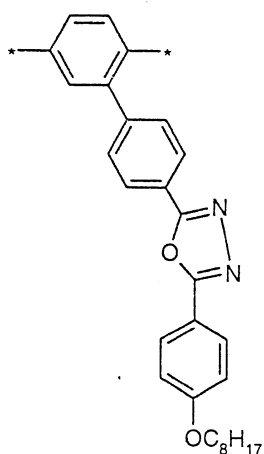
LXXIV



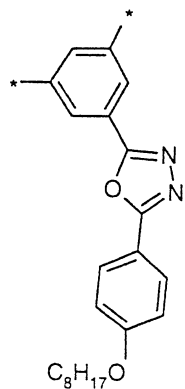
LXXV



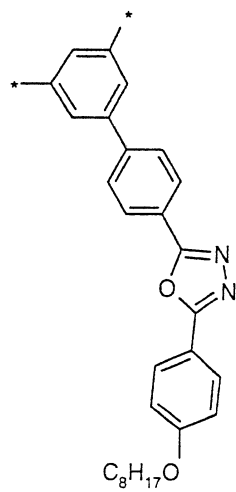
LXXVI



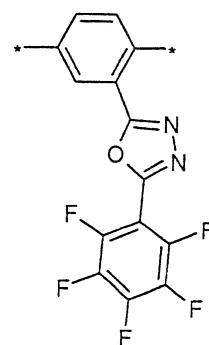
LXXVII



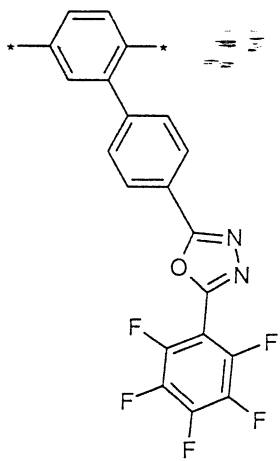
LXXVIII



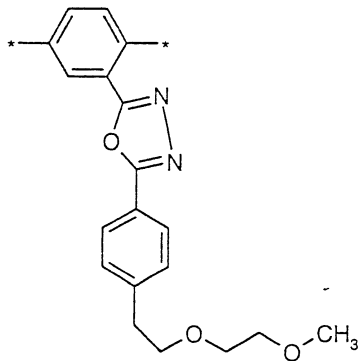
LXXIX



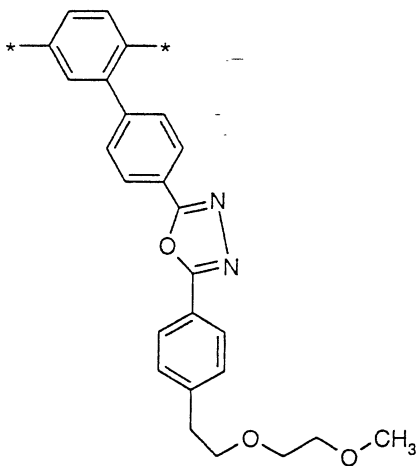
LXXX



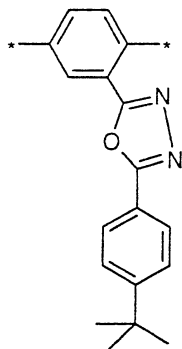
LXXXI



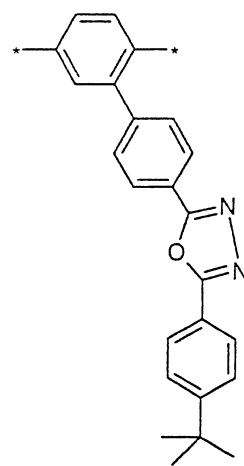
LXXXII



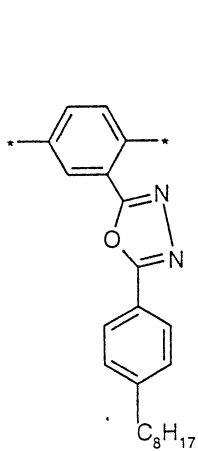
LXXXIII



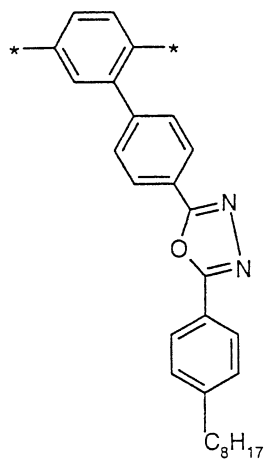
LXXXIV



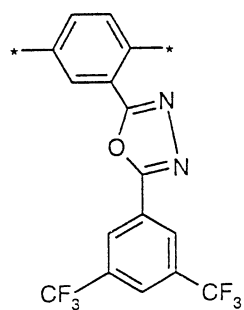
LXXXV



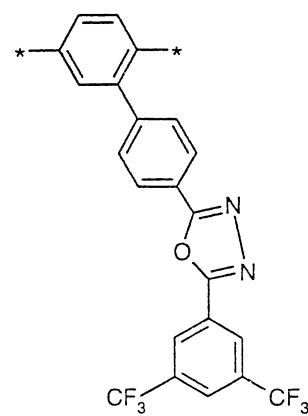
LXXXVI



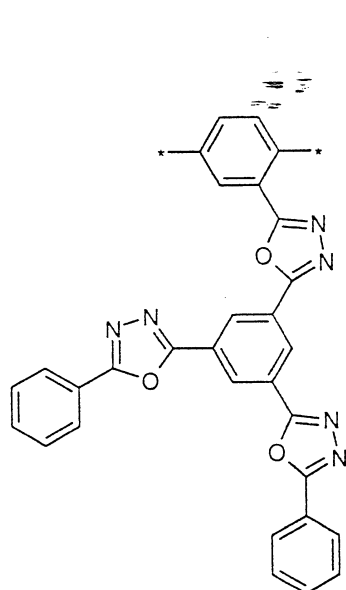
LXXXVII



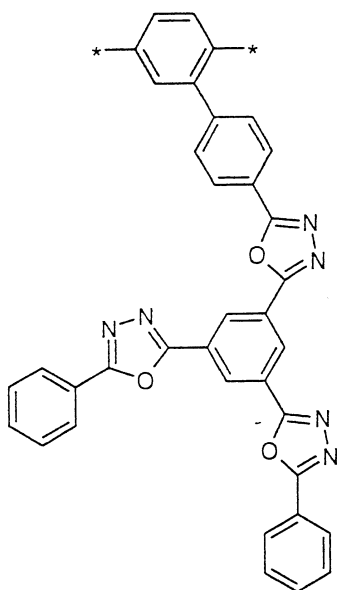
LXXXVIII



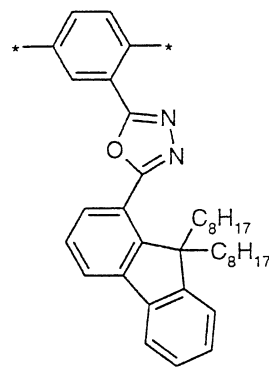
LXXXIX



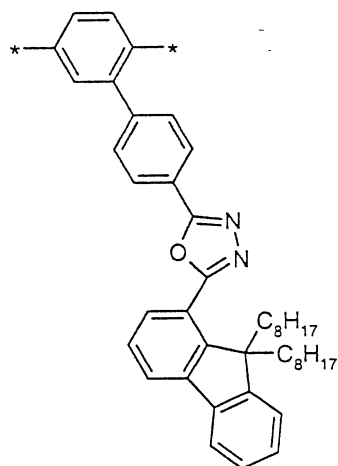
XC



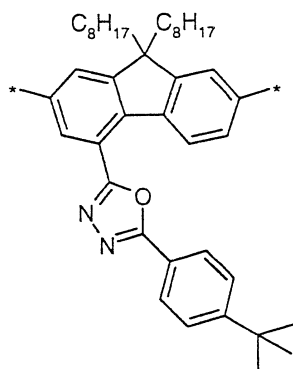
XCI



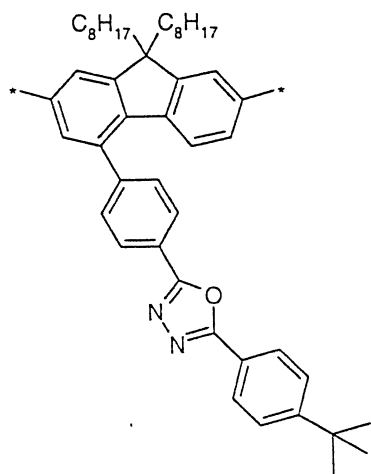
XCII



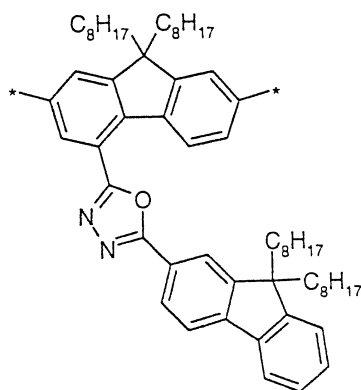
XCIII



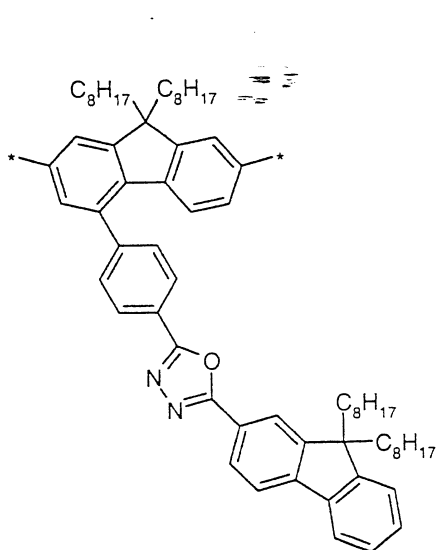
XCIV



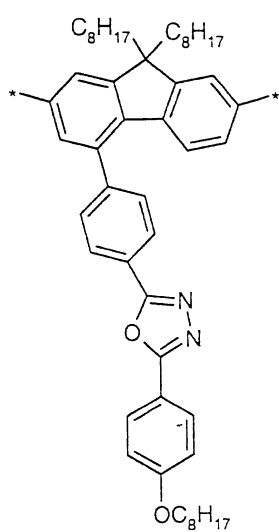
XCV



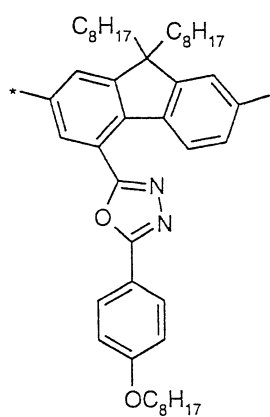
XCVI



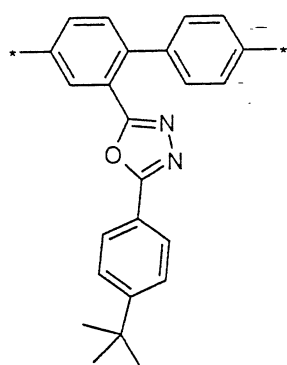
XCVII



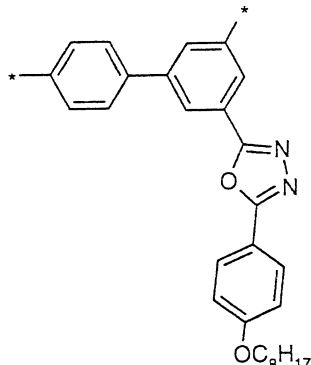
XCVIII



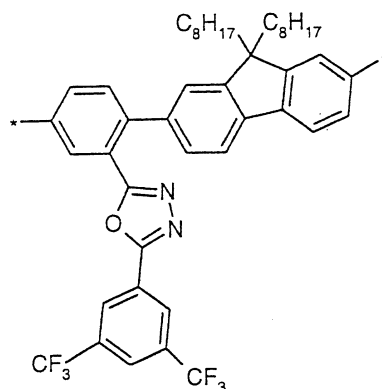
XCIX



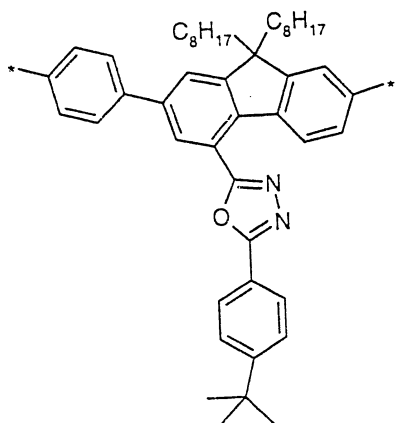
C



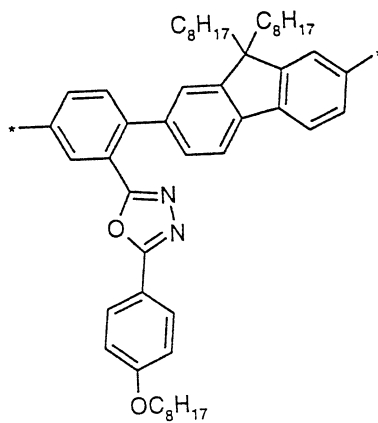
CI



CII

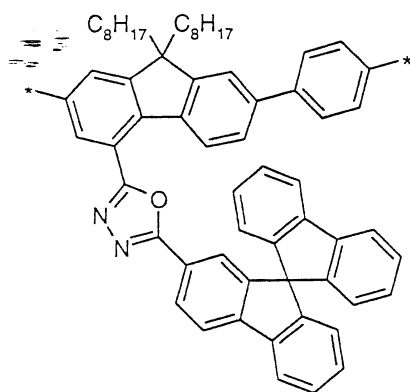


CIII



CIV

或



CV

9. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中至少一末端封端基團係包含 C_{6-40} 碳環芳基，此基團係包含苯基、聯苯基、聯三苯基、蔥基(anthryl)、萘基、芘基、菲基、二氫菲基、蔥基(anthracenyl)、蒾基、9-矽雜蒾基、四氫芘基、芘基、螺雙蒾基、螢蔥基、芘基、二氫芘基、四氫芘基、紅螢烯基、蒈基、苯并[g,h,i]芘基、或其基團，

其中該末端封端基團係未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代。

10. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中至少一末端封端基團係包含 C_{3-40} 雜芳基或伸雜芳基，此基團係包含呋喃基、噻吩基、吡咯基、咪唑基、吡唑基、三唑基、四唑基、噻唑基、嘔唑基、異嘔唑基、嘔二唑基、噻二唑基、異噻唑基、吡啶基、噻吡基、吡吡基、嘓啶基、喹啉基、異喹啉基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、吡啶基、吡唑基、苯并嘔唑基、苯并噻唑基、苯并咪唑基、噌啉基、噻唑

啉基、喹啉基、酞吡基、苯并噻二唑基、苯并三吡基、吩吡基、菲啶基、吡啶基、吡唑基、矽羅(siloles)或其基團，

其中該末端封端基團係未經取代或經一或多個選自C₁₋₂₀烷基、C₂₋₂₀烯基、C₁₋₂₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、氟、C₁₋₂₀氟烷基、C₁₋₂₀全氟烷基、C₁₋₂₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基及其組合之基團所取代。

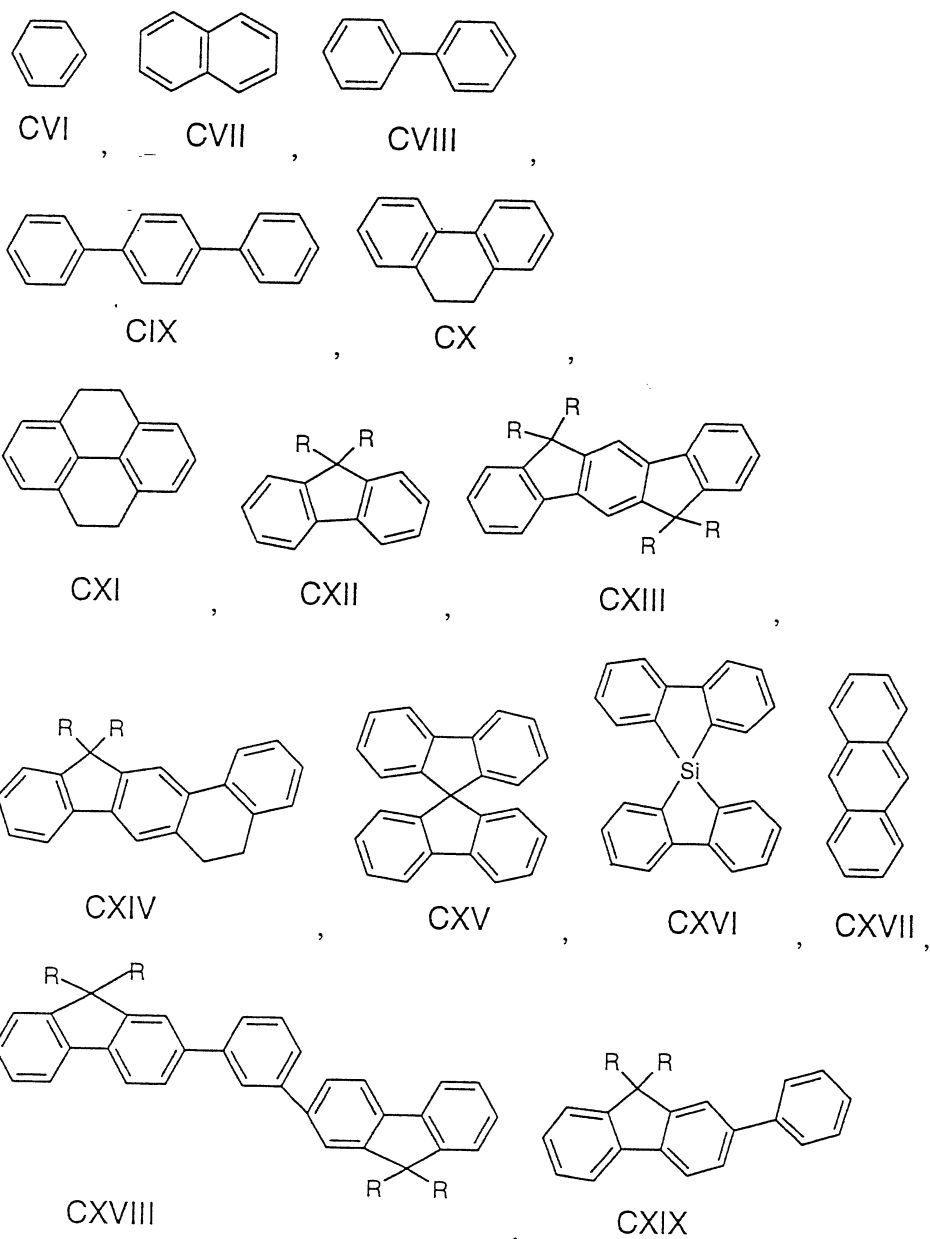
11. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中至少一末端封端基團係包含適當之C₁₂₋₆₀三級芳族胺基芳基，此基團係包含二芳基苯胺、烷基吡唑、芳基吡唑、四芳基二胺、星芒胺、對芳基三胺、樹枝狀胺、或螺旋胺之基團，

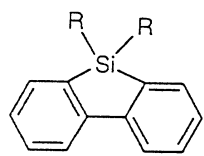
其中該末端封端基團係未經取代或經一或多個選自C₁₋₂₀烷基、C₂₋₂₀烯基、C₁₋₂₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、氟、C₁₋₂₀氟烷基、C₁₋₂₀全氟烷基、C₁₋₂₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基及其組合之基團所取代。

12. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中至少一末端封端基團係包含C₁₂₋₆₀三級胺基芳族芳基，包括N,N,N',N'-四芳基聯苯胺、N,N,N',N'-四芳基-1,4-伸苯二胺、N,N,N',N'-四芳基-2,7-二胺基萘、N,N'-雙(3-甲基苯基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺、N,N'-雙(1-萘基)-N,N'-雙(苯基)聯苯胺、1,4-雙(吡唑)聯苯、4,4',4''-三(N,N-二芳基胺基)三苯基胺、1,3,5-三(4-二芳基胺基苯基)苯、4,4',4''-三(N,N-二苯基胺基)三苯基胺、4,4',4''-三(N-3-甲基苯基-N-苯基胺基)三苯基胺、或1,3,5-三(4-二苯基胺基苯基)苯，

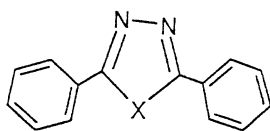
其中該末端封端基團係未經取代或經一或多個選自 C₁₋₂₀烷基、C₂₋₂₀烯基、C₁₋₂₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、氟、C₁₋₂₀氟烷基、C₁₋₂₀全氟烷基、C₁₋₂₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基及其組合之基團所取代。

13. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中至少一末端封端基團係為下列之單價基團

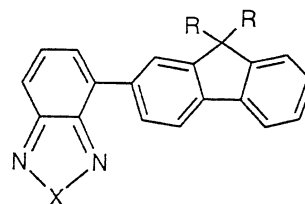




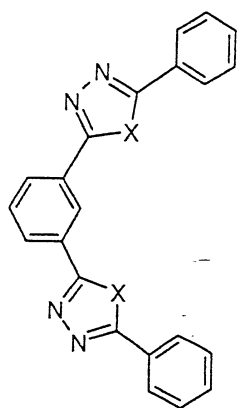
CXX



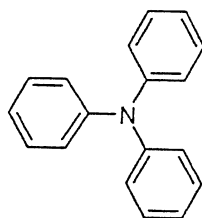
CXXI



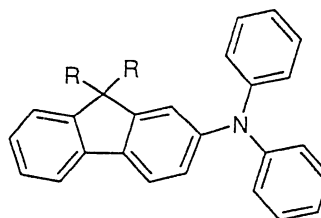
CXXII



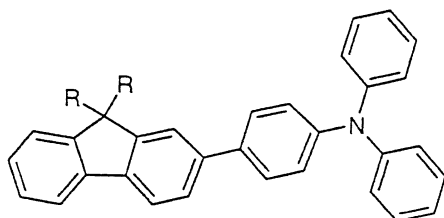
CXXIII



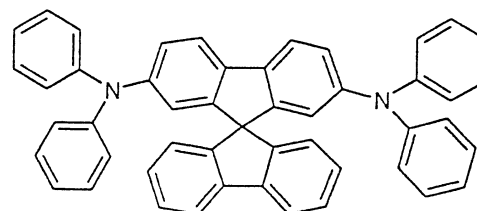
CXXIV



CXXV



CXXVI



CXXVII

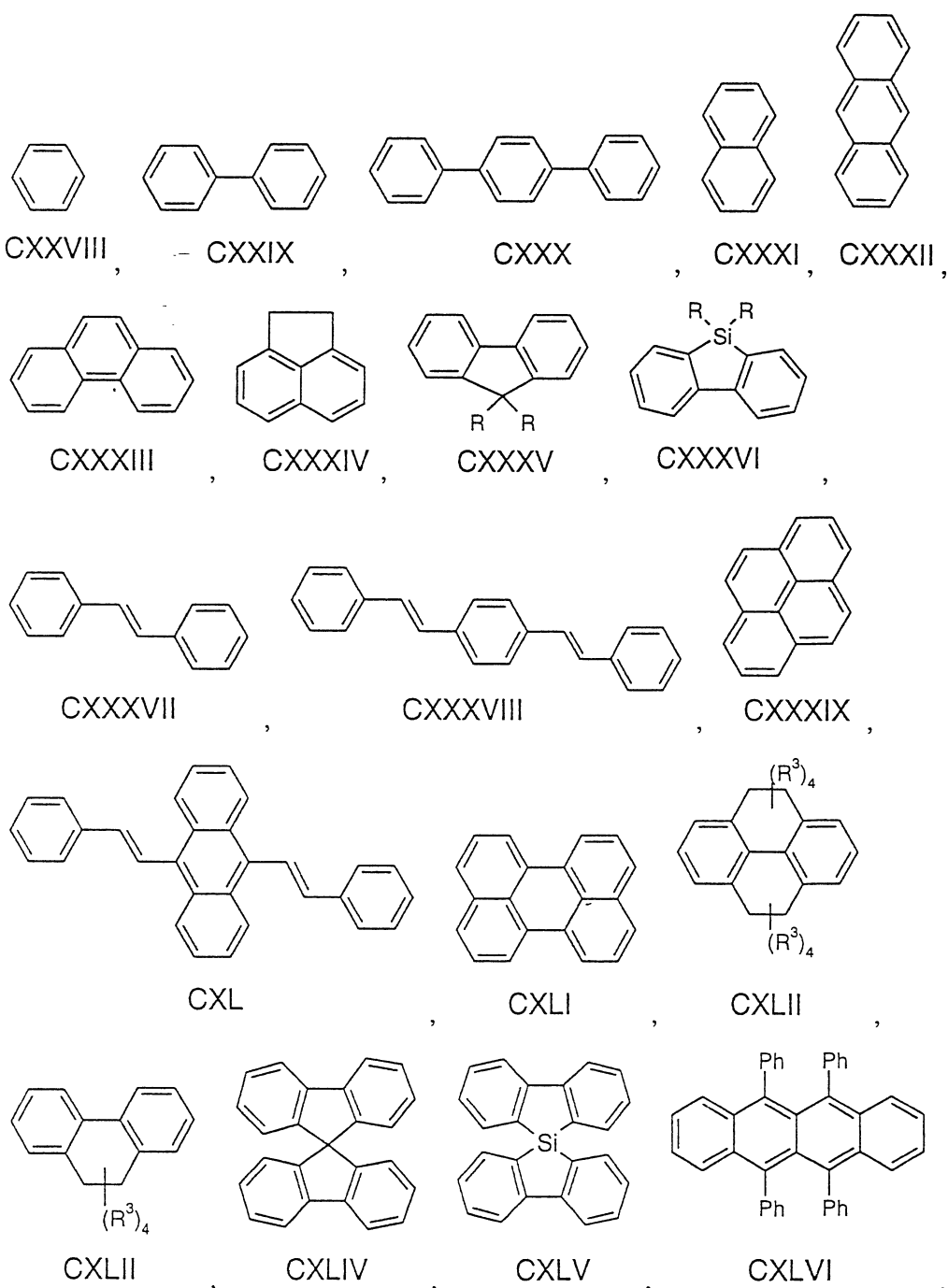
, 或

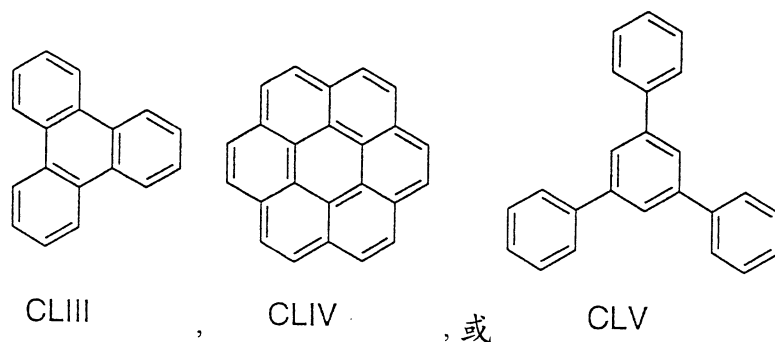
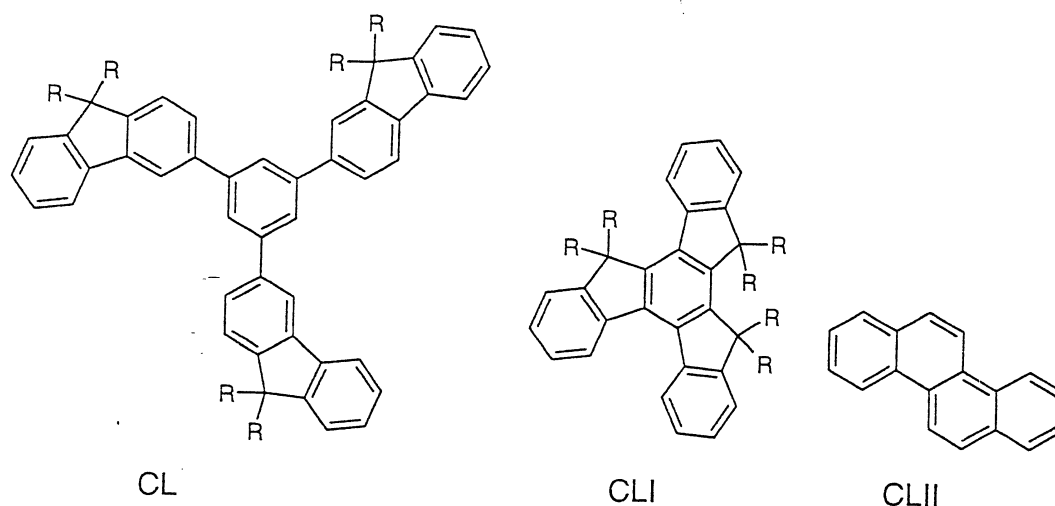
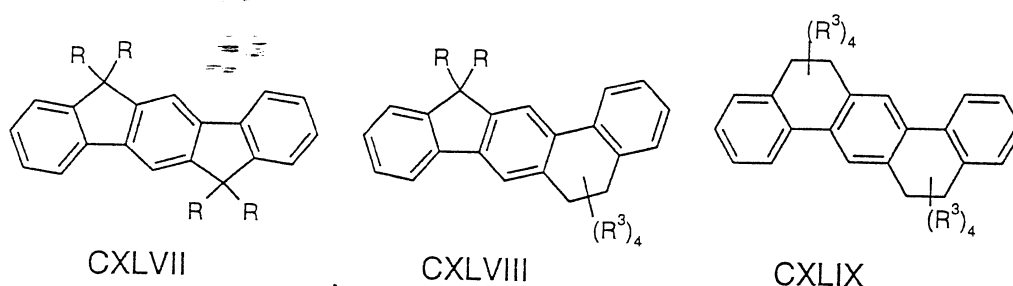
其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代，

其中各 R 係個別選自 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合；且

各X係個別為O、S或NR¹，其中R¹係為C₁₋₃₀烷基、C₆₋₂₀芳基、C₃₋₃₀雜芳基、C₁₋₃₀雜烷基、或其組合。

14. 如申請專利範圍第13項之化合物，其中該末端封端基團尚包括軛合於通式CVI至CXXVII之基團的部分，該部分係選自下列二價基團





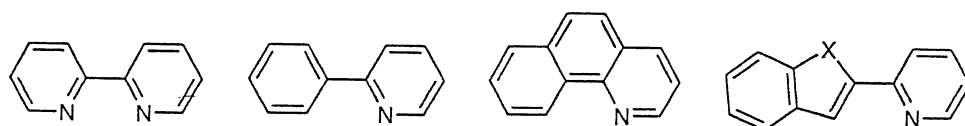
其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代，其中

各 R 係個別選自 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合；

且

各 R^3 個別選自氫、 C_{1-30} 烷基、 C_{2-30} 烯基、 C_{1-30} 烷氧基、 C_{6-30} 芳基、 C_{6-30} 芳氧基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基及其組合。

15. 如申請專利範圍第13項之化合物，其中該末端封端基團尚包括符合於通式CVI至CXXVII之基團的部分，該部分係選自下列二價基團

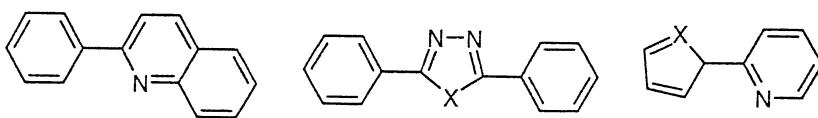


CLVI

CLVII

CLVIII

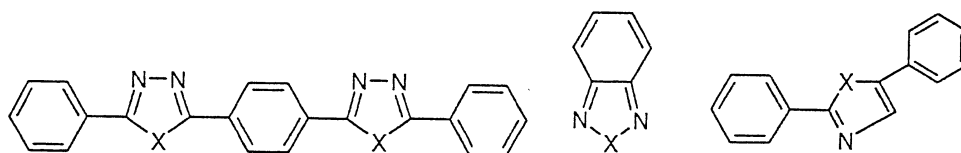
CLIX



CLX

CLXI

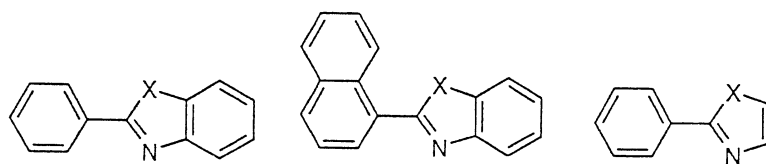
CLXII



CLXIII

CLXIV

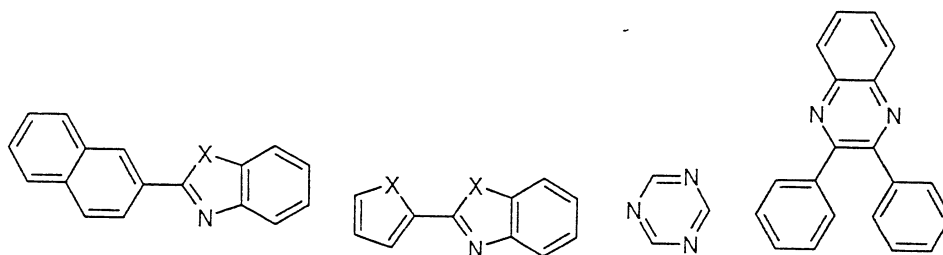
CLXV



CLXVI

CLXVII

CLXVIII

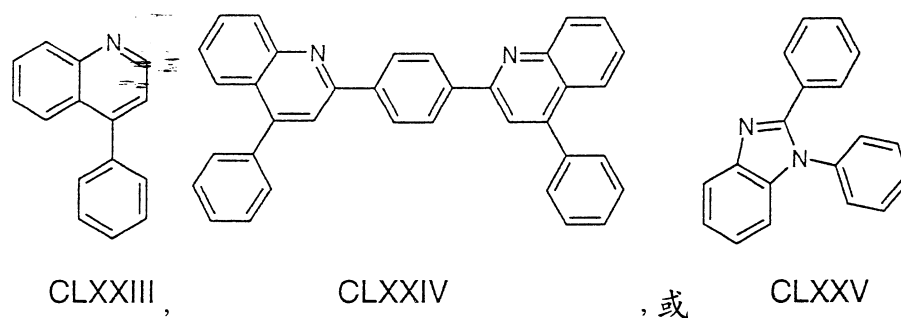


CLXIX

CLXX

CLXXI

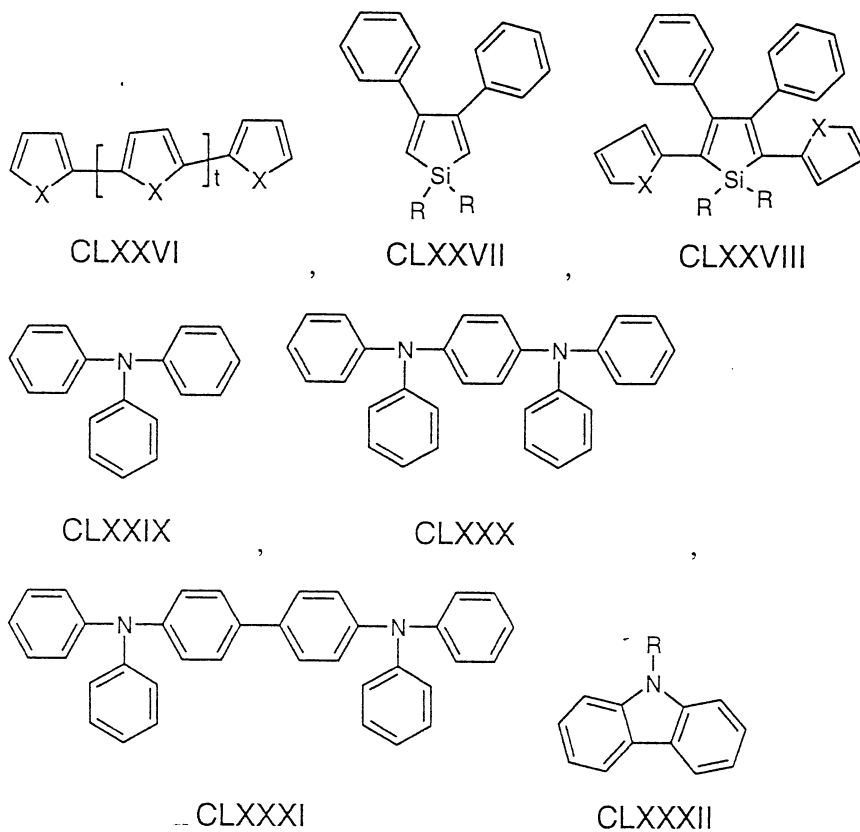
CLXXII

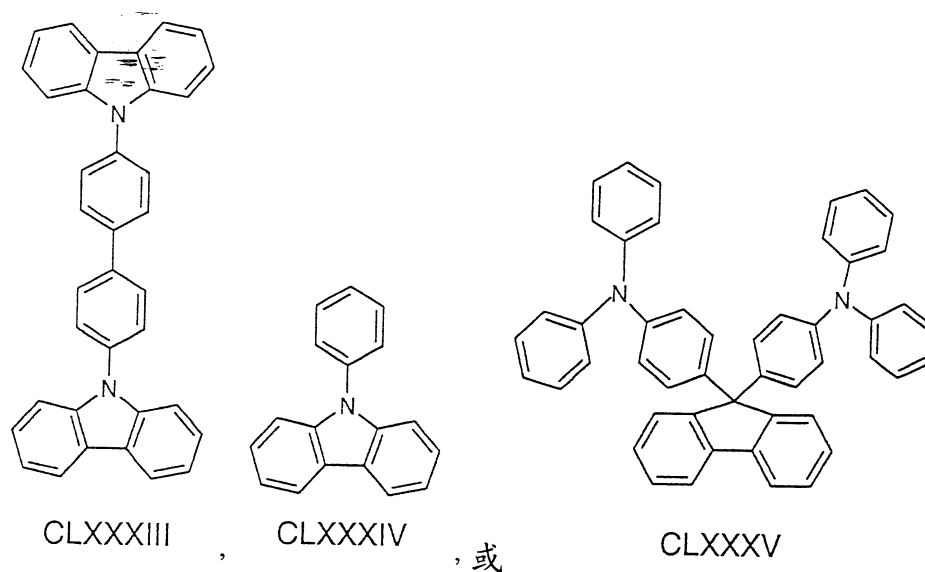


其未經取代或經一或多個選自 C_{1-20} 烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{1-20} 烷氧基、 C_{6-20} 芳基、 C_{6-20} 芳氧基、氟、 C_{1-20} 氟烷基、 C_{1-20} 全氟烷基、 C_{1-20} 雜烷基、 C_{3-20} 雜芳基及其組合之基團所取代，其中

各 X 係個別為 O、S 或 NR^1 ，其中 R^1 係為 C_{1-30} 烷基、 C_{6-20} 芳基、 C_{3-30} 雜芳基、 C_{1-30} 雜烷基、或其組合。

16. 如申請專利範圍第 13 項之化合物，其中該末端封端基團尚包括軛合於通式 CVI 至 CXXVII 之基團的部分，該部分係選自下列二價基團





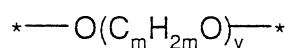
其未經取代或經一或多個選自C₁₋₂₀烷基、C₂₋₂₀烯基、C₁₋₂₀烷氧基、C₆₋₂₀芳基、C₆₋₂₀芳氧基、氟、C₁₋₂₀氟烷基、C₁₋₂₀全氟烷基、C₁₋₂₀雜烷基、C₃₋₂₀雜芳基及其組合之基團所取代，其中

各R係個別選自C₁₋₃₀烷基、C₂₋₃₀烯基、C₁₋₃₀烷氧基、C₆₋₃₀芳基、C₆₋₃₀芳氧基、C₃₋₃₀雜芳基、C₁₋₃₀雜烷基及其組合；

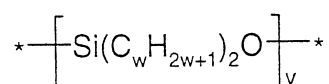
各X係個別為O、S或NR¹，其中R¹係為C₁₋₃₀烷基、C₆₋₂₀芳基、C₃₋₃₀雜芳基、C₁₋₃₀雜烷基、或其組合；且

各t係為等於0至4之整數。

17. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中該化合物可被至少一個包含下式之二價聚(氧伸烷氧基)鏈段

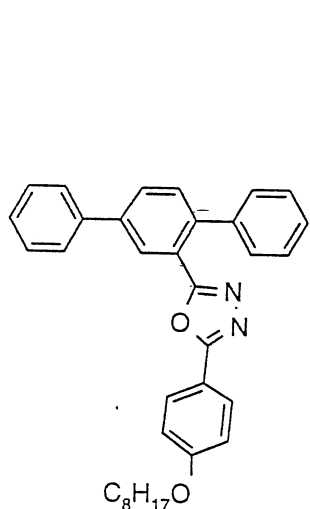


或下式之二價聚(二烷基矽氧烷)鏈段之軟性鏈段所取代

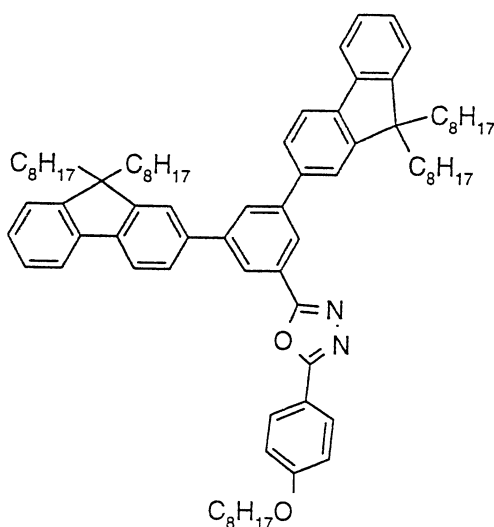


其中 m 係為 1 至 6 之整數， y 係為 2 至 20 之整數，且 w 係為 1 至 10 之整數。

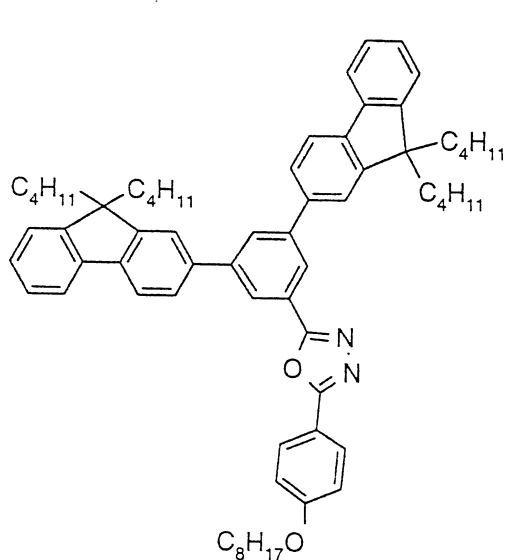
18. 如申請專利範圍第 1 項之化合物，其中該化合物係被至少一個氟、氟烷基、或全氟烷基所取代。
19. 如申請專利範圍第 1 項之化合物，其中該化合物係為



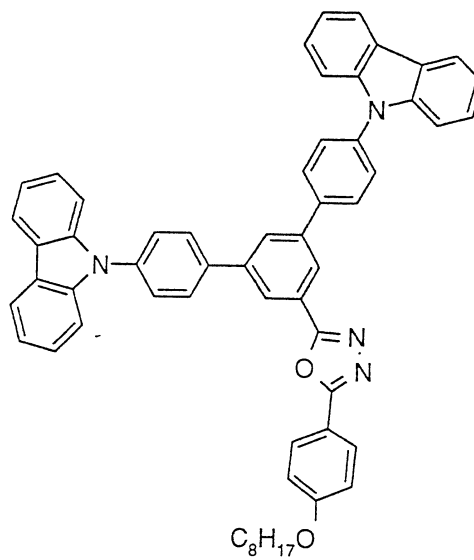
CCX



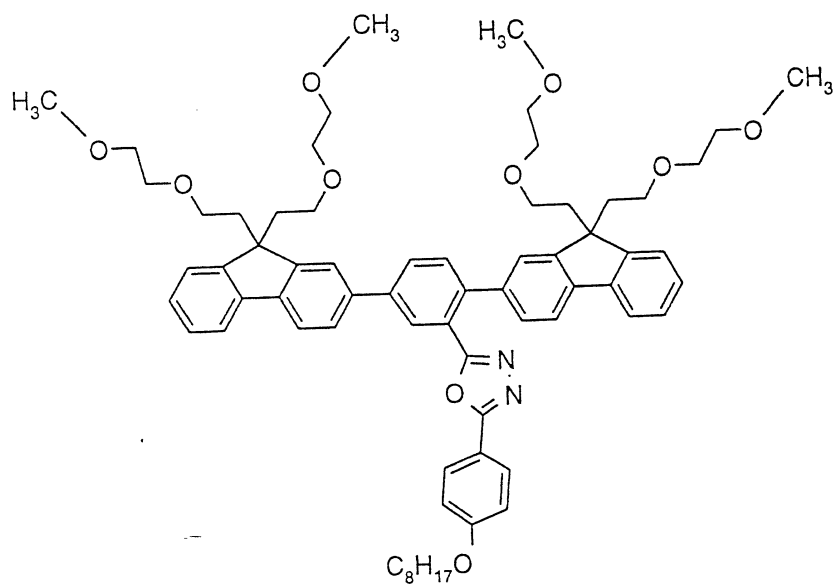
CCXI



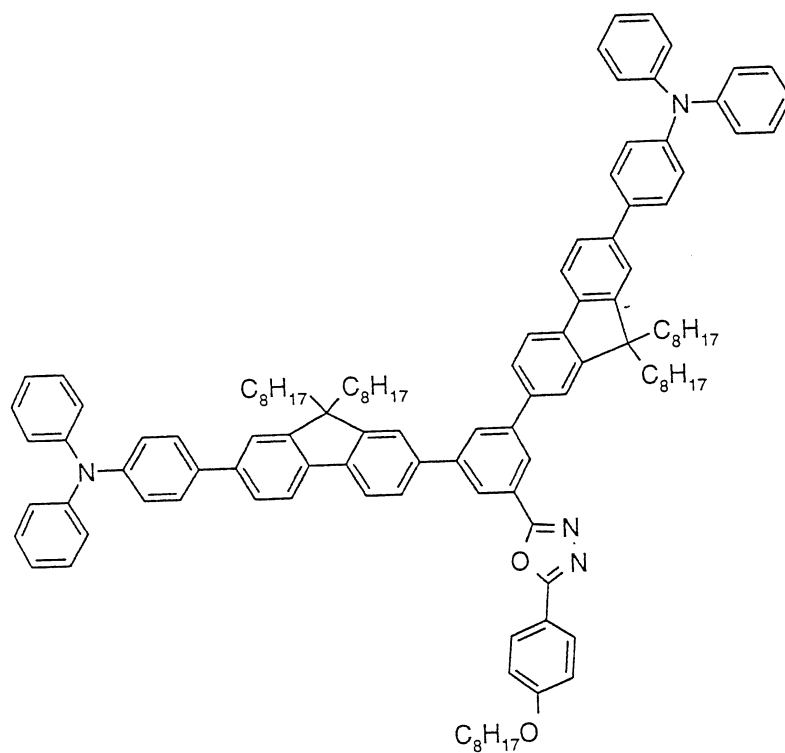
CCXII



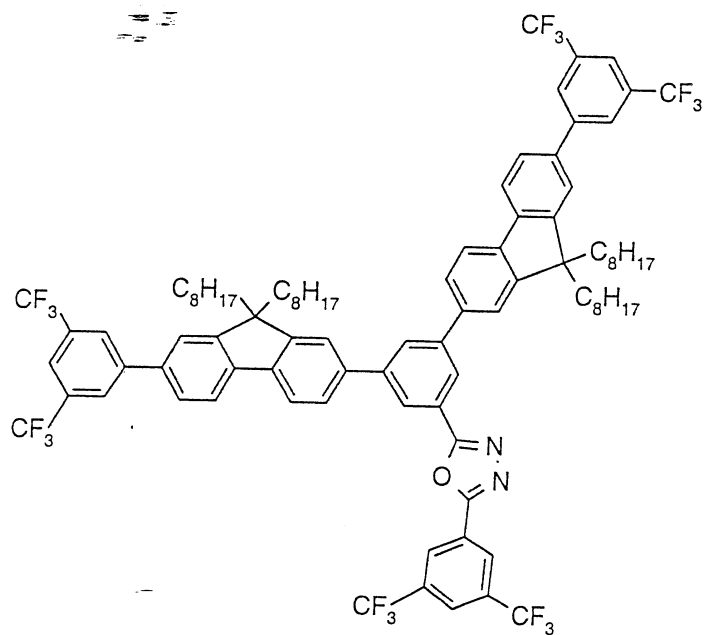
CCXIII



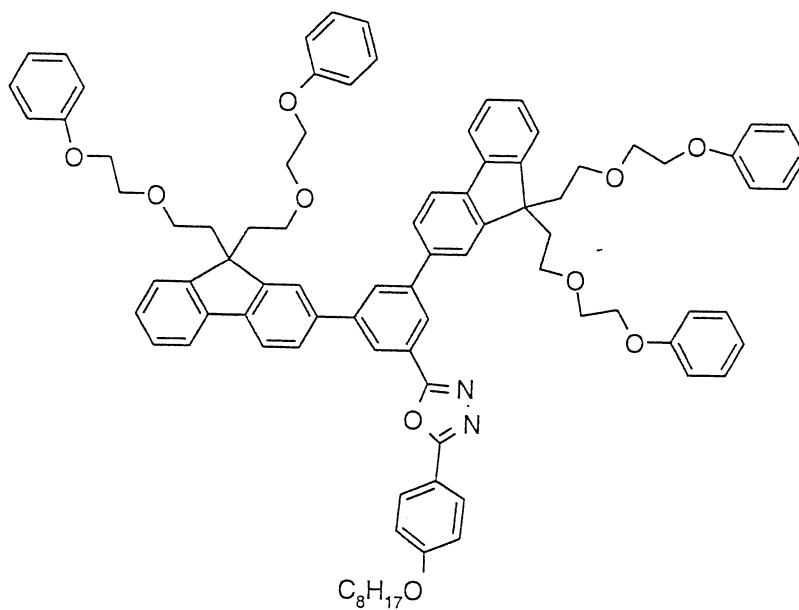
CCXIV



CCXV



CCXVI



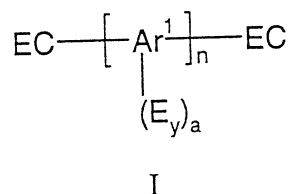
CCXVII

或

20. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中該化合物係為非晶性。
21. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中該化合物係為電子傳遞材料。

22. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中該化合物係同時為電子及電洞傳遞材料。
23. 如申請專利範圍第1項之化合物，其中該化合物係為發光材料及電子傳遞材料。
24. 一種組合物，其包含：

(a) 一第一化合物，包含一第一芳族核心及兩個輻合於該第一芳族核心之第一末端封端基團，該化合物係具有通式I：

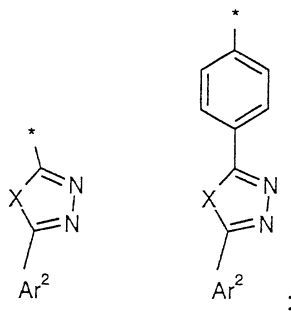


其中

各Ar¹個別係為伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基及其組合之基團所取代；

各a個別係為1或2；

各E_y個別係為具有通式II或通式III之結構：



II

III

各X個別係為O、S或NR¹，其中R¹係為烷基、芳基、雜芳基、雜烷基、或其組合；

各Ar²個別係為碳環芳基，其未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、烷基噁二唑基、芳基噁二唑基、烷基三唑基、芳基三唑基、二芳基胺基、芳基二芳胺基、及其組合之基團所取代；

各星號(-*)係表示該化合物中一鍵結相對於另一基團的位置；

n係為等於1或2之整數；且

各末端封端基團(EC)個別係為碳環芳基、雜芳基、或三級胺基芳基，其係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代，其中係為通式II或通式III之基團的EC不多於一個；及

(b) 一第二化合物，其係選自電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、發光材料、色彩轉換材料、聚合物黏合劑、或其組合。

25. 如申請專利範圍第24項之組合物，其中該組合物係包含電洞傳遞材料及電子傳遞材料。
26. 如申請專利範圍第24項之組合物，其中該組合物係包含電洞傳遞材料、電子傳遞材料及發光材料。
27. 如申請專利範圍第24項之組合物，其中該第二化合物係選自電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、發光材料、色彩轉

換材料、或其組合物，該第二化合物係具有

一芳族基團，其包含該第一化合物之第一芳族核心，其中該第二化合物之芳族基團可未經取代或經與存在於第一化合物之第一芳族核心上相同類型之取代基所取代，或經不存在於該第一化合物之芳族核心上的取代基所取代；

一第二末端封端基團，其包含該第一化合物之第一末端封端基團，其中該第二末端封端基團可未經取代、經與存在於第一末端封端基團上相同類型之取代基所取代，或經不存在於該第一末端封端基團上的取代基所取代；

一二價基團，其包含該第一化合物之第一末端封端基團之二價基團，其中該第二化合物中之二價基團可未經取代或經與存在於第一末端封端基團上相同類型之取代基所取代、或經不存在於該第一末端封端基團之取代基所取代；或

其組合。

28. 如申請專利範圍第27項之組合物，其中該第二化合物係非聚合物，該第二化合物係包含第二芳族核心及至少一個第二末端封端基團。
29. 如申請專利範圍第28項之組合物，其中該第二化合物之第二末端封端基團係包含第一化合物之第一末端封端基團。
30. 如申請專利範圍第28項之組合物，其尚包含一發光聚合

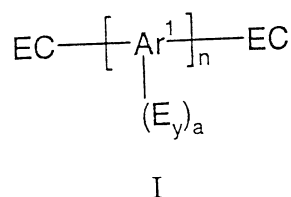
物。

31. 如申請專利範圍第28項之組合物，其尚包含一電活性聚合物。
32. 如申請專利範圍第28項之組合物，其尚包含一非活性聚合物。
33. 如申請專利範圍第29項之組合物，其中該第二化合物之第二芳族核心係異於該第一化合物之第一芳族核心，而該化合物尚包含一單體混合物，此單體混合物係包含具有第一芳族核心之第一單體及具有第二芳族核心之第二單體。
34. 如申請專利範圍第29項之組合物，其中該第二化合物之第二芳族核心係異於第一化合物之第一芳族核心，而該組合物尚包含一聚合物，此聚合物係為包含具有第一芳族核心之第一單體及具有第二芳族核心之第二單體的單體混合物之反應產物。
35. 如申請專利範圍第28項之組合物，其中該第二化合物之第二芳族核心係包含第一化合物之第一芳族核心。
36. 如申請專利範圍第35項之組合物，其尚包含一發光聚合物。
37. 如申請專利範圍第35項之組合物，其尚包含一電活性聚合物。
38. 如申請專利範圍第35項之組合物，其尚包含一非活性聚合物。
39. 如申請專利範圍第35項之組合物，其中該第二化合物之

第二末端封端基團係異於該第一化合物之第一末端封端基團，而該化合物尚包含一單體混合物，此單體混合物係包含具有第一末端封端基團或第一末端封端基團之二價基團的第一單體及具有第二末端封端基團或第二末端封端基團之二價基團的第二單體。

40. 如申請專利範圍第35項之組合物，其中該第二化合物係具有異於第一化合物之第一末端封端基團的第二末端封端基團，而該組合物尚包含一聚合物，此聚合物係為包含具有第一末端封端基團或第一末端封端基團之二價基團的第一單體及具有第二末端封端基團或第二末端封端基團之二價基團的第二單體的單體混合物之反應產物。
41. 如申請專利範圍第24項之組合物，其中該第二化合物係為一單體混合物之反應產物的聚合物，該單體混合物係包含一包含第一化合物之第一芳族核心的第一單體。
42. 如申請專利範圍第24項之組合物，其中該第二化合物係為一單體混合物之反應產物的聚合物，該單體混合物係包含一具有第一末端封端基團或第一末端封端基團之二價基團的第一單體。
43. 如申請專利範圍第24項之組合物，其中該組合物係為非晶型。
44. 如申請專利範圍第24項之組合物，其中該組合物係為溶液可加工。
45. 一種有機電子裝置，其包含一種具有一芳族核心及兩個軛合於該芳族核心之末端封端基團的化合物，該化合物

係具有通式 I:

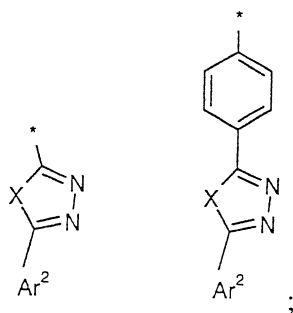


其中

各 Ar¹ 個別係為伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基及其組合之基團所取代；

各 a 個別係為 1 或 2；

各 E_y 個別係為具有通式 II 或通式 III 之結構：



II

III

各 X 個別係為 O、S 或 NR¹，其中 R¹ 係為烷基、芳基、雜芳基、雜烷基、或其組合；

各 Ar² 個別係為碳環芳基，其未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、烷基嘔二唑基、芳基嘔二唑基、烷基三唑基、芳基三唑基、二芳基胺基、芳基二

芳胺基、及其組合之基團所取代；

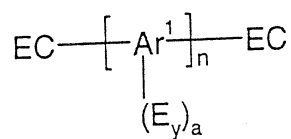
各星號(*)係表示該化合物中一鍵結相對於另一基團的位置；

n係為等於1或2之整數；且

各末端封端基團(EC)個別係為碳環芳基、雜芳基、或三級胺基芳基，其係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代，其中係為通式II或通式III之基團的EC不多於一個。

46. 如申請專利範圍第45項之有機電子裝置，其中該裝置係為有機電致發光裝置。
47. 如申請專利範圍第46項之有機電子裝置，其中該有機電致發光裝置係包括包含通式I化合物之有機發光元件。
48. 如申請專利範圍第47項之有機電子裝置，其中該有機發光元件尚包括電荷傳遞材料、電荷阻隔材料、聚合物材料、發光材料、色彩轉換材料、或其組合。
49. 如申請專利範圍第47項之有機電子裝置，其中該有機發光元件具有多層薄層，而該通式I化合物係位於發光層中。
50. 如申請專利範圍第47項之有機電子裝置，其中該有機發光元件具有多層薄層，而該通式I化合物係位於電荷傳遞層中。
51. 一種製造有機電致發光裝置之方法，其包括：
 - (a) 製備一包括一轉移層之施體片，此轉移層包含一種具有一芳族核心及兩個軛合於該芳族核心之末端封端

基團的化合物，該化合物係具有通式 I：



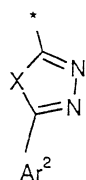
I

其中

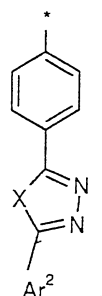
各 Ar¹ 個別係為伸苯基伸芳基或萘基伸芳基，此基係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基及其組合之基團所取代；

各 a 個別係為 1 或 2；

各 E_y 個別係為具有通式 II 或通式 III 之結構：



II



III

各 X 個別係為 O、S 或 NR¹，其中 R¹ 係為烷基、芳基、雜芳基、雜烷基、或其組合；

各 Ar² 個別係為碳環芳基，其未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、烷基嘔二唑基、芳基嘔二唑基、烷基三唑基、芳基三唑基、二芳基胺基、芳基二

芳胺基、及其組合之基團所取代；

各星號(*)係表示該化合物中一鍵結相對於另一基團的位置；

n係為等於1或2之整數；且

各末端封端基團(EC)個別係為碳環芳基、雜芳基、或三級胺基芳基，其係未經取代或經一或多個選自烷基、烯基、烷氧基、芳基、芳氧基、氟、氟烷基、全氟烷基、雜烷基、雜芳基、及其組合之基團所取代，其中係為通式II或通式III之基團的EC不多於一個；及

(b) 將該轉移層自該施體片轉移至一受體片上，其中該轉移層至少形成發光結構之一部分。

拾壹、圖式：

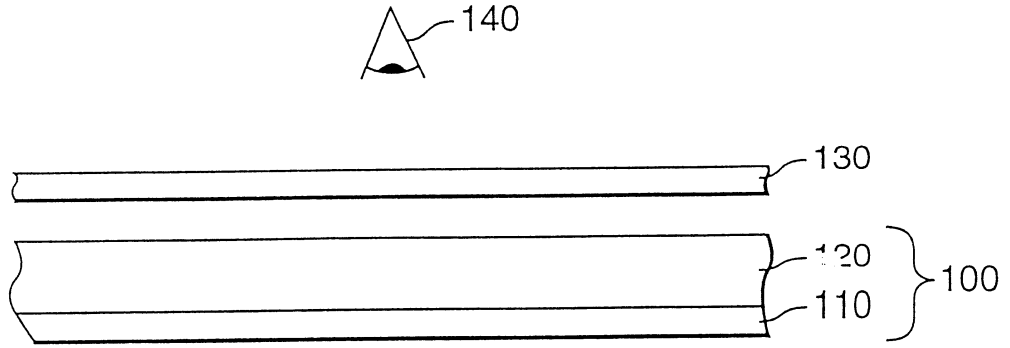


圖 1

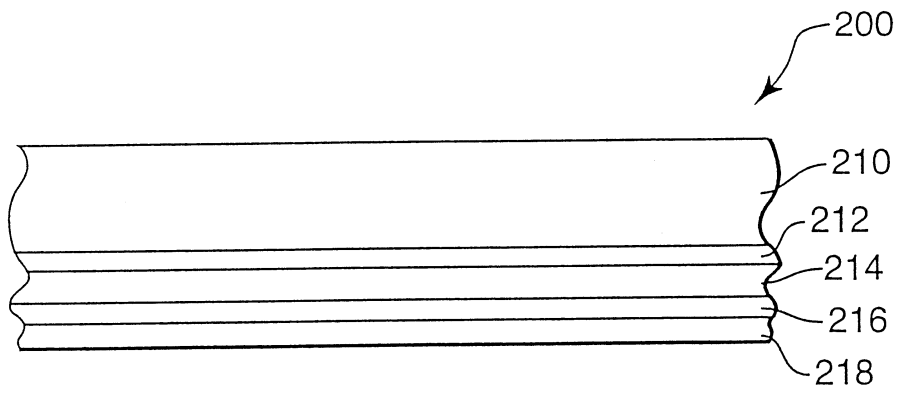


圖 2

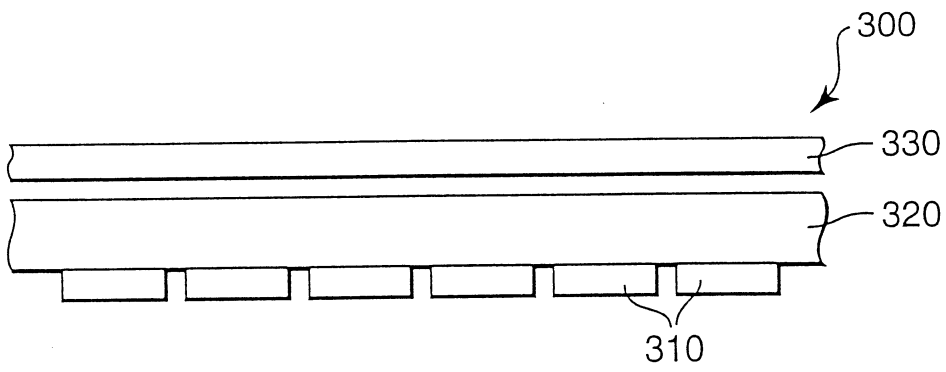


圖 3

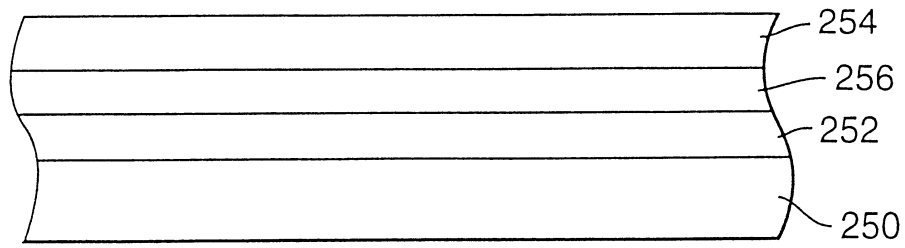


圖 4A

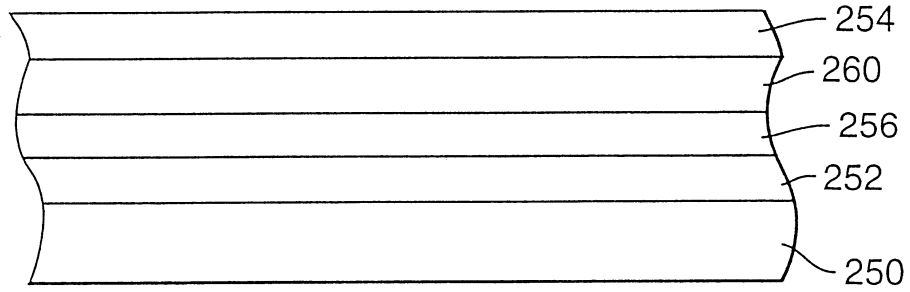


圖 4B

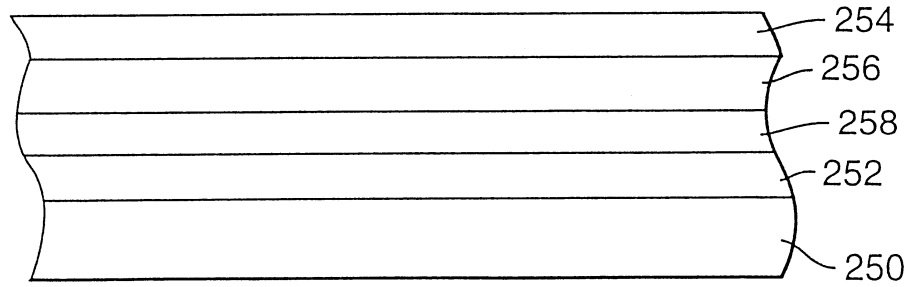


圖 4C

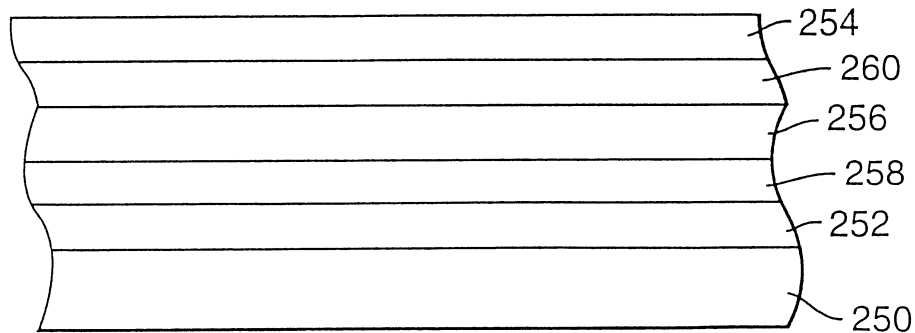


圖 4D

柒、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第 (4A) 圖。

(二)本代表圖之元件代表符號簡單說明：

250 基材

252 陽極

254 陰極

256 發光層

捌、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

