



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I785142 B

(45)公告日：中華民國 111 (2022) 年 12 月 01 日

(21)申請案號：107139828

(22)申請日：中華民國 107 (2018) 年 11 月 09 日

(51)Int. Cl. : C09K11/06 (2006.01)

C07D405/14 (2006.01)

C07D409/14 (2006.01)

H01L51/54 (2006.01)

(30)優先權：2017/11/14

歐洲專利局

17201480.5

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

德國

(72)發明人：艾克霍夫 克莉斯汀 EICKHOFF, CHRISTIAN (DE)；帕姆 安瑪 PARHAM, AMIR

HOSSAIN (DE)；克洛伯 喬納斯 KROEBER, JONAS VALENTIN (DE)；葛羅斯

曼 托拜亞斯 GROSSMANN, TOBIAS (DE)；傑許 安佳 JATSCH, ANJA (DE)；

艾倫瑞區 克里斯汀 EHRENREICH, CHRISTIAN (DE)

(74)代理人：林志剛

(56)參考文獻：

KR 101744248B1

審查人員：王宗偉

申請專利範圍項數：16 項 圖式數：0 共 116 頁

(54)名稱

用於有機電子裝置之組成物

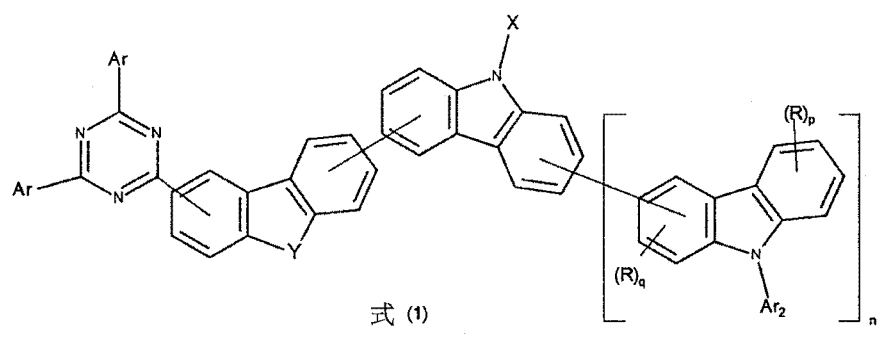
(57)摘要

本發明係關於包含特定雙極性主體及聯伸三苯衍生物之組成物、關於其於電子裝置之用途以及包含該組成物之電子裝置。

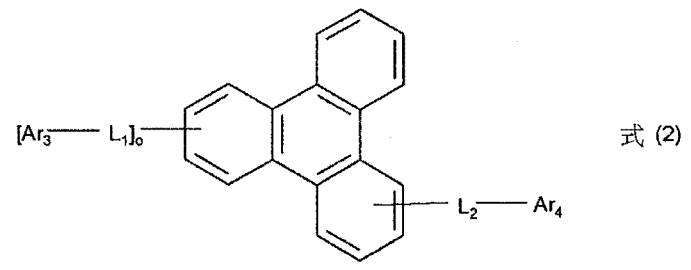
The present invention relates to a composition comprising a specific bipolar host and a triphenylene derivative, to the use thereof in electronic devices and electronic devices comprising said composition.

特徵化學式：

式(1)、式(2)



式(1)



式(2)



I785142

【發明摘要】

公告本

【中文發明名稱】

用於有機電子裝置之組成物

【英文發明名稱】

COMPOSITION FOR ORGANIC ELECTRONIC DEVICES

【中文】

本發明係關於包含特定雙極性主體及聯伸三苯衍生物之組成物、關於其於電子裝置之用途以及包含該組成物之電子裝置。

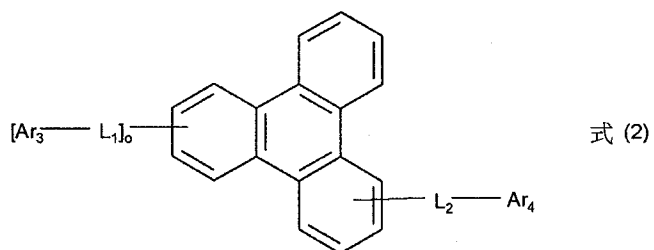
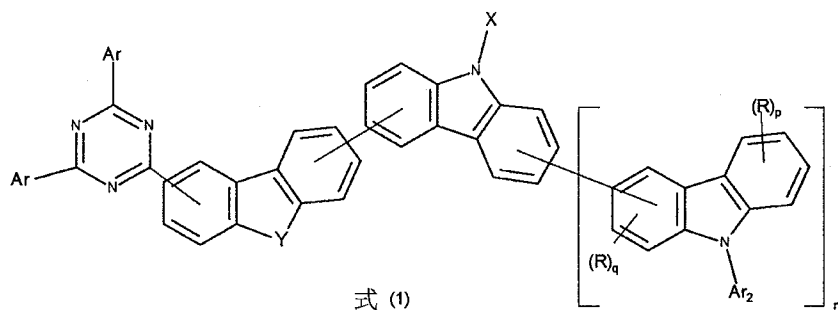
【英文】

The present invention relates to a composition comprising a specific bipolar host and a triphenylene derivative, to the use thereof in electronic devices and electronic devices comprising said composition.

【指定代表圖】無

【代表圖之符號簡單說明】無

【特徵化學式】式(1)、式(2)



【發明說明書】

【中文發明名稱】

用於有機電子裝置之組成物

【英文發明名稱】

COMPOSITION FOR ORGANIC ELECTRONIC DEVICES

【技術領域】

【0001】本發明係關於包含特定雙極性主體及聯伸三苯衍生物之組成物、關於其於電子裝置之用途以及包含該組成物之電子裝置。

【先前技術】

【0002】使用有機半導體作為功能性材料之有機電致發光裝置(例如，OLED-有機發光二極體，或OLEC-有機發光電化學電池)係描述於例如US 4539507、US 5151629、EP 0676461及WO 98/27136。此處所使用之發射材料以及螢光發射體愈來愈多為展現磷光而非螢光之有機金屬錯合物(M. A. Baldo等人，Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4-6)。因量子力學因素，使用有機金屬化合物作為磷光發射體之能量效率及功率效率提高多達四倍。然而，大體而言，仍需要改良OLED，尤其是展現三重態發射(磷光)之OLED關於例如效率、操作電壓及使用壽命方面。

【0003】有機電致發光裝置之性質不只由所使用之發

射體決定。此處亦特別重要的尤其是所使用之其他材料，諸如主體及基質材料、電洞阻擋材料、電子傳輸材料、電洞傳輸材料及電子或激子阻擋材料，其中尤其是主體或基質材料。該等材料之改良會造成電致發光裝置的明顯改善。

【0004】 用於有機電子裝置之主體材料為熟習本領域之人士熟知。用語「基質材料」於先前技術亦經常用以意指磷光發射體之主體材料。該用語之使用亦適用於本發明。同時，已發展兼用於螢光及用於磷光電子裝置之眾多主體材料。

【0005】 根據先前技術，酮(例如根據 WO 2004/093207 或 WO 2010/006680)或磷氧化物(例如根據 WO 2005/003253)係在用於磷光發射體之基質材料當中。根據先前技術之其他基質材料係以三吡啶(例如 WO 2008/056746、EP 0906947、EP 0908787、EP 0906948)及內醯胺(例如 WO 2011/116865 或 WO 2011/137951)表示。此外，根據先前技術，在材料當中，咪唑衍生物(例如根據 WO 2005/039246、US 2005/0069729 或 WO 2014/015931)、吡啶并咪唑衍生物(例如根據 WO 2007/063754 或 WO 2008/056746)或喹啉并咪唑衍生物(例如根據 WO 2010/136109 或 WO 2011/000455)，尤其是經缺電子雜芳族化合物(諸如三吡啶)取代者，係在用於磷光發射體之基質材料當中。WO 2011/057706 揭示經兩個三苯基三吡啶基取代之咪唑衍生物。WO 2011/046182 揭示經三吡啶上之萸基取代之咪唑-伸芳基-三吡啶。WO 2009/069442 揭示具有經缺

電子雜芳族化合物(例如吡啶、嘧啶或三吡)高度取代之三環系統，諸如咔唑、二苯并呋喃或二苯并噻吩作為主體材料。WO 2011/057706、WO 2015/014434及WO 2015/169412揭示包含三吡-二苯并呋喃-咔唑衍生物，尤其是三吡-二苯并噻吩-咔唑衍生物之另外的主體材料，其中三吡係隨意地藉由連接子鍵結至二苯并呋喃或二苯并噻吩。WO 2009/021126及US 2015/0340618描述聯伸三苯衍生物作為主體材料。

【0006】改善電子裝置，尤其是有機電致發光裝置之性能數據的其他方式係使用二或更多種材料，尤其是主體材料或基質材料之組合。

【0007】US 6,392,250 B1揭示將由電子傳輸材料、電洞傳輸材料及螢光發射體組成之混合物使用於OLED之發射層。借助於該混合物，可比先前技術改善OLED之使用壽命。

【0008】US 6,803,720 B1揭示將包含磷光發射體及電洞傳輸材料及電子傳輸材料之混合物使用於OLED之發射層。電洞傳輸材料及電子傳輸材料二者均為小型有機分子。

【0009】根據WO 2015/192941，可以混合物形式使用例如雙極性主體及未帶電共主體，較佳連同發射體或摻雜劑使用。雙極性主體及未帶電共主體係經選擇以使以下條件適用：

$$|\text{HOMO}(\text{C})| - \min\{|\text{HOMO}(\text{D})|; |\text{HOMO}(\text{B})|\} > 0.3$$

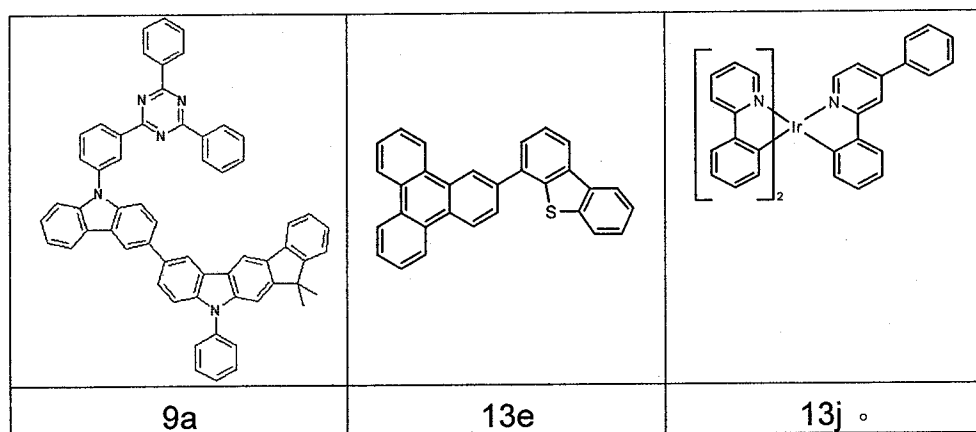
$$|\text{HOMO}(\text{B})| - |\text{HOMO}(\text{D})| < 0.15 \text{ eV}$$

$$|\text{LUMO}(\text{B})| - |\text{LUMO}(\text{C})| > 0.3 \text{ eV}$$

$$|\text{LUMO}(\text{B})| - |\text{LUMO}(\text{D})| > 0,$$

其中HOMO(C)為未帶電共主體之HOMO能，HOMO(B)及HOMO(D)對應地為雙極性主體及摻雜劑之HOMO能，LUMO(C)、LUMO(B)及LUMO(D)對應地為未帶電共主體、雙極性主體及摻雜劑之LUMO能，以及函數 $\min\{|\text{HOMO}(\text{D})|; |\text{HOMO}(\text{B})|\}$ 給出 $|\text{HOMO}(\text{D})|$ 及 $|\text{HOMO}(\text{B})|$ 二值中之較小值。

亦描述於發射層中包含主體材料化合物9a、化合物13e及發黃色磷光之發射體13j之標示為E21的OLED之製造。所使用之化合物的結構顯示如下：



【0010】然而，於雙極性化合物與未帶電共主體材料組合之情況下，仍需要改善，尤其是關於有機電子裝置之使用壽命，尤其是在與發綠色磷光之發射體併用的情況下。

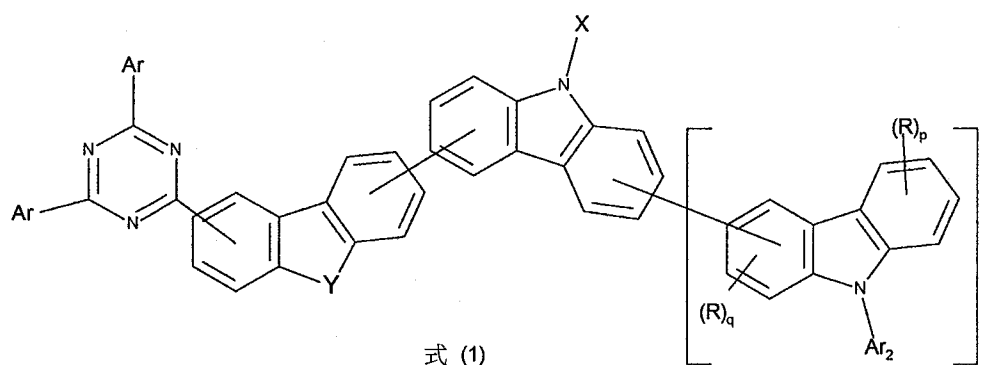
【0011】因此，本發明所針對之問題係提出適用於有

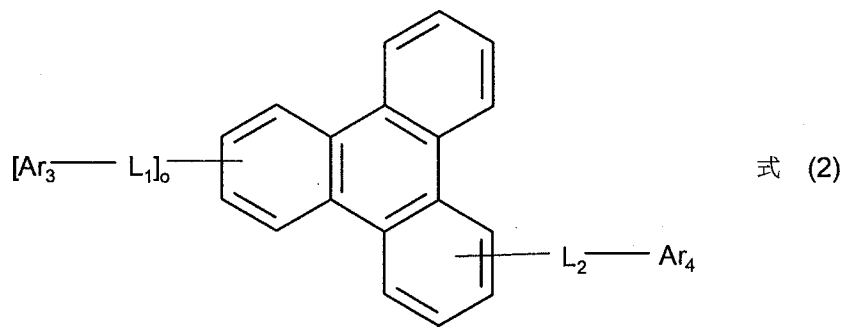
機電子裝置，尤其是適用於有機電致發光裝置，及尤其是適用於發綠色磷光之 OLED 的材料，以及造成良好裝置性質，尤其是關於經改良之使用壽命；以及提出相應之電子裝置。

【0012】現已發現藉由包含式(1)之雙極性化合物及式(2)之聯伸三苯化合物的組成物得以解決該問題以及消除先前技術之缺點。該種組成物造成有機電子裝置，尤其有機電致發光裝置之非常良好性質，尤其是關於使用壽命方面，尤其是於發射層中亦存在濃度介於 2 重量% 與 15 重量% 之發光組分，尤其是在發射層中存在綠色發光組分的情況下。

【發明內容】

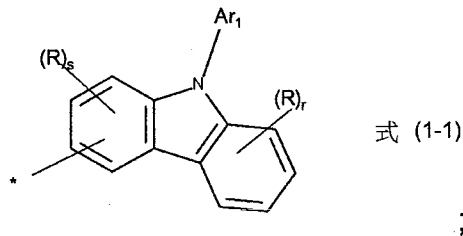
【0013】因此，本發明首先提供包含至少一種式(1)之化合物及至少一種式(2)之化合物的組成物





其中所使用之符號及指數如下：

X 於各情況下係相同或不同，且為 Ar₁或式(1-1)之取代基



Y 為 O 或 S ；

Ar、Ar₁、Ar₂ 於各情況下各自獨立地為具有 5 至 40 個環原子及可經一或多個 R³基取代之芳基或雜芳基，或具有 6 至 40 個環原子及可經一或多個 R³基取代之芳族或雜芳族環系統；

n 為 0 或 1 ；

p、q 各自獨立地為 0、1、2、3 或 4 ；

s、r 各自獨立地為 0、1、2、3 或 4 ；

* 為氮原子之附接位置 ；

R 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組：D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar)₂、N(R²)₂、C(=O)Ar、C(=O)R²、P(=O)(Ar)₂、P(Ar)₂、

$B(Ar)_2$ 、 $Si(Ar)_3$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 20 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有 3 至 20 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基或具有 2 至 20 個碳原子之烯基(其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經 $R^2C=CR^2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 或 $CONR^2$ 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換)、具有 5 至 40 個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有 5 至 40 個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 40 個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，此處有可能不超過一個 R 取代基與 Ar_1 一起形成單環或多環脂族、可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統；

o 為 0 或 1；

L_1 、 L_2 於各情況下係相同或不同，且為單鍵或具有 5 至 30 個環原子及可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統；

Ar_3 及 Ar_4 各自獨立地為具有 6 至 40 個環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統；

R^1 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 $N(Ar)_2$ 、 $N(R^2)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $P(Ar)_2$ 、 $B(Ar)_2$ 、 $Si(Ar)_3$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 20 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有 3 至 20 個碳原子之支鏈或環狀

烷基、烷氧基或硫烷基或具有2至20個碳原子之烯基(其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經 $R^2C=CR^2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 或 $CONR^2$ 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換)、具有5至40個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有5至40個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有5至40個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，隨意地可能兩個取代基 R^1 鍵結至同一碳原子或鍵結至相鄰碳原子以形成可經一或多個 R^2 基取代之單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統；

R^2 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 $N(Ar)_2$ 、 NH_2 、 $N(R^3)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $C(=O)H$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基或具有2至40個碳原子之烯基或炔基(其各可經一或多個 R^3 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經 $HC=CH$ 、 $R^3C=CR^3$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NH 、 NR^3 、 O 、 S 、 $CONH$ 或 $CONR^3$ 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換)、具有5至60個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有

5至60個環原子以及可經一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或該等系統之組合；其中隨意地可能二或更多個相鄰取代基 R^2 形成可經一或多個 R^3 基取代之單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統；

R^3 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組：H、D、F、CN、具有1至20個碳原子之脂族烴基、或具有5至30個環原子之芳族或雜芳族環系統(其中一或多個氫原子可經D、F、Cl、Br、I或CN置換，以及其可經一或多個各具有1至4個碳原子之烷基取代)；同時，可能二或更多個相鄰取代基 R^3 一起形成單環或多環、脂族環系統。

【0014】本發明進一步提出包含該種組成物之調配物、該等組成物於有機電子裝置之用途、包含該種組成物以及較佳包含該組成物於一層之有機電子裝置(較佳為電致發光裝置)，以及製造該種裝置之方法。如下述之對應的較佳實施態樣同樣形成本發明主題的一部分。經由已知材料之特定選擇，尤其是關於式(1)之雙極性材料的選擇，獲致令人意外且有利的效果。

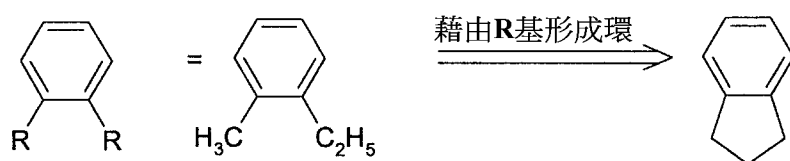
【0015】包含如上述或如下文描述為較佳之包含至少一種式(1)之化合物及至少一種式(2)之化合物的組成物之層尤其為發射層(EML)、電子傳輸層(ETL)、電子注入層(EIL)及/或電洞阻擋層(HBL)。

【0016】當該層為發射層時，較佳係其為特徵在於除了如上述包含式(1)及式(2)之基質材料的組成物以外亦包

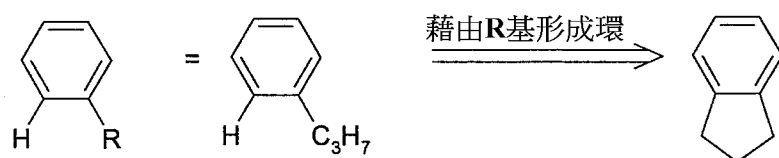
含磷光發射體，尤佳係包含綠色磷光發射體之磷光層。

【0017】本發明內容中之相鄰碳原子為彼此直接鍵結的碳原子。

【0018】本說明內容中，措辭「二或更多個基一起可形成環」應理解為尤其意指兩個基藉由化學鍵彼此接合而正式消除兩個氫原子。此係以下示反應式說明：



【0019】此外，然而上述措辭亦應理解為，若這兩個基之一為氫，則第二基結合至該氫原子所鍵結的位置，而形成環。此應以下示反應式說明：



【0020】本發明內容中之芳基含有6至40芳族環原子，較佳為碳原子。本發明內容中之雜芳基含有5至40芳族環原子，其中該等環原子包括碳原子及至少一雜原子，先決條件係碳原子與雜原子之總和加總至少為5。雜原子較佳係選自N、O及/或S。芳基或雜芳基於此處係理解為意指簡單芳族環(aromatic cycle)，即，苯基，衍生自苯；或簡單雜芳族環，例如衍生自吡啶、嘓啶或噻吩等；或稠合芳基或雜芳基，例如萘、蔥、菲、喹啉或異喹啉。

【0021】本發明內容中之芳族環系統於環系統中含有6至40個碳原子，以及可經一或多個R³基取代，其中R³具

萸或順-或反-二苯并茛并萸、參茛并苯、異參茛并苯、螺參茛并苯、螺異參茛并苯、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、吡啶、吡啶并吡啶、茛并吡啶、吡啶、喹啉、異喹啉、吡啶、啡啶、苯并-5,6-喹啉、苯并-6,7-喹啉、苯并-7,8-喹啉、啡噻吡、啡噻吡、吡啶、吡啶、苯并咪唑、萘并咪唑、菲并咪唑、吡啶并咪唑、吡啶并咪唑、喹噻吡并咪唑、噻吡、苯并噻吡、萘并噻吡、蔥并噻吡、菲并噻吡、異噻吡、1,2-噻吡、1,3-噻吡、苯并噻吡、噻吡、苯并噻吡、噻吡、苯并噻吡、噻吡、1,5-二吡蔥、2,7-二吡茈、2,3-二吡茈、1,6-二吡茈、1,8-二吡茈、4,5-二吡茈、4,5,9,10-四吡茈、吡啶、啡啶、啡噻吡、啡噻吡、螢紅環、噻吡、吡啶、苯并吡啶、啡啶、1,2,3-三噻、1,2,4-三噻、苯并三噻、1,2,3-噻二噻、1,2,4-噻二噻、1,2,5-噻二噻、1,3,4-噻二噻、1,2,3-噻二噻、1,2,4-噻二噻、1,2,5-噻二噻、1,3,4-噻二噻、1,3,5-三噻、1,2,4-三噻、1,2,3-三噻、四噻、1,2,4,5-四噻、1,2,3,4-四噻、1,2,3,5-四噻、噻吡、蝶啶、吡啶及苯并噻二噻。

【0023】本發明內容中之環狀烷基、烷氧基或硫烷基係理解為意指單環、雙環或多環基團。

【0024】本發明內容中，其中個別氫原子或 CH_2 基團亦可經上述基團取代的 C_1 至 C_{20} 烷基係理解為意指，例如，甲基、乙基、正丙基、異丙基、環丙基、正丁基、異

丁基、第二丁基、第三丁基、環丁基、2-甲基丁基、正戊基、第二戊基、第三戊基、2-戊基、新戊基、環戊基、正己基、第二己基、第三己基、2-己基、3-己基、新己基、環己基、1-甲基環戊基、2-甲基戊基、正庚基、2-庚基、3-庚基、4-庚基、環庚基、1-甲基環己基、正辛基、2-乙基己基、環辛基、1-雙環[2.2.2]辛基、2-雙環[2.2.2]辛基、2-(2,6-二甲基)辛基、3-(3,7-二甲基)辛基、金剛烷基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、1,1-二甲基-正-己-1-基、1,1-二甲基-正-庚-1-基、1,1-二甲基-正-辛-1-基、1,1-二甲基-正-癸-1-基、1,1-二甲基-正-十二-1-基、1,1-二甲基-正-十四-1-基、1,1-二甲基-正-十六-1-基、1,1-二甲基-正-十八-1-基、1,1-二乙基-正己-1-基、1,1-二乙基-正庚-1-基、1,1-二乙基-正辛-1-基、1,1-二乙基-正癸-1-基、1,1-二乙基-正十二-1-基、1,1-二乙基-正十四-1-基、1,1-二乙基-正十六-1-基、1,1-二乙基-正十八-1-基、1-(正丙基)環己-1-基、1-(正丁基)環己-1-基、1-(正己基)環己-1-基、1-(正辛基)環己-1-基及1-(正癸基)環己-1-基。

【0025】烯基係理解為意指，例如，乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、庚烯基、環庚烯基、辛烯基、環辛烯基、或環辛二烯基。

【0026】炔基係理解為意指，例如，乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基、己炔基、庚炔基或辛炔基。

【0027】 C_1 至 C_{20} 烷氧基係理解為意指，例如，甲氧基、三氟甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧

基、異丁氧基、第二丁氧基、第三丁氧基或2-甲基丁氧基。

【0028】 C_1 至 C_{20} 硫烷基係理解為意指，例如，S-烷基，例如硫甲基、1-硫乙基、1-硫-異丙基、1-硫-正丙基、1-硫-異丁基、1-硫-正丁基或1-硫-第三丁基。

【0029】具有5至40個環原子之芳基或雜芳氧基意指O-芳基或O-雜芳基，以及意指經由氧原子鍵結之芳基或雜芳基。

【0030】具有5至40個環原子之芳烷基或雜芳烷基意指如上述之烷基係經芳基或雜芳基取代。

【0031】本發明內容中之磷光發射體為展現來自具有較高自旋多重性(即，自旋態 > 1)之受激態，尤其是來自受激三重態之發光的化合物。本申請案之內容中，全部具有過渡金屬或鑰系元素之發光錯合物應視為磷光發射體。下文提供更精確的定義。

【0032】於使用包含如上述或如下文描述為較佳之至少一種式(1)之化合物及如上述或如下文描述為較佳之至少一種式(2)之化合物的組成物作為磷光發射體之基質材料時，較佳係其三重態能不顯著低於該磷光發射體之三重態能。關於三重態能階，較佳情況係 $T_1(\text{發射體})-T_1(\text{基質}) \leq 0.2 \text{ eV}$ ，更佳係 $\leq 0.15 \text{ eV}$ ，最佳係 $\leq 0.1 \text{ eV}$ 。此處之 $T_1(\text{基質})$ 為發射層中之基質材料的三重態能階，該條件可適用於兩種基質材料各者，以及 $T_1(\text{發射體})$ 為磷光發射體之三重態能階。若發射層含有超過兩種基質材料，上述關係較

佳亦適用於每一種另外的基質材料。用語「摻雜劑」與下文之發射體同義使用。

【0033】當組成物之組分滿足下列條件時，關於電子裝置之性能數據及使用壽命特別有利：

$$|\text{HOMO}(\text{C})| - \min\{|\text{HOMO}(\text{D})|; |\text{HOMO}(\text{B})|\} > 0.3$$

$$|\text{HOMO}(\text{B})| - |\text{HOMO}(\text{D})| < 0.15 \text{ eV}$$

$$|\text{LUMO}(\text{B})| - |\text{LUMO}(\text{C})| > 0.3 \text{ eV}$$

$$|\text{LUMO}(\text{B})| - |\text{LUMO}(\text{D})| > 0,$$

其中HOMO(C)為未帶電共主體之HOMO能，HOMO(B)及HOMO(D)對應地為雙極性主體及摻雜劑之HOMO能，LUMO(C)、LUMO(B)及LUMO(D)對應地為未帶電共主體、雙極性主體及摻雜劑之LUMO能，以及函數 $\min\{|\text{HOMO}(\text{D})|; |\text{HOMO}(\text{B})|\}$ 給出 $|\text{HOMO}(\text{D})|$ 及 $|\text{HOMO}(\text{B})|$ 二值中之較小值，以及其中 $|\text{HOMO}|$ 及 $|\text{LUMO}|$ 為個別值之絕對值。

【0034】所報告之能值係關於單離之化合物，以及係如下文所述確定。

【0035】該等材料之HOMO（最高占用分子軌域）及LUMO（最低未佔用分子軌域）能及三重態能階係經由量子-化學計算判定。基於該目的，於本情況下，使用"Gaussian09, Revision D.01"套裝軟體(Gaussian Inc.)。或者可使用其他套裝軟體，只要其中可實施相同方法即可。為了計算無金屬之有機物質(稱為「org.」法)，首先藉由半實驗法AM1 (Gaussian輸入列「# AM1 opt」)在電荷0且多重性1下進行幾何形狀最佳化。隨後，根據經最佳化之幾何形狀，進行電子基態及三重態能階之(單點)能計算。

此係使用 TDDFT(時間相依性密度泛函理論)法 B3PW91 採用 6-31G(d) 基組 (Gaussian 輸入列 「 # B3PW91/6-31G(d) td=(50-50,nstates=4) 」)(電荷 0, 多重性 1)完成。就有機金屬化合物(稱為「M-org.」法)而言,藉由 Hartree-Fock 法及 LanL2MB 基組 (Gaussian 輸入列 「 # HF/LanL2MB opt 」)(電荷 0, 多重性 1)使幾何形狀最佳化。如上述與上述有機物質類似地進行能計算,但金屬原子係使用「LanL2DZ」基組以及配位基係使用「6-31G(d)」基組 (Gaussian 輸入列 「 #B3PW91/gen pseudo=lanl2 td=(50-50,nstates=4) 」)。從該能計算,獲得以哈崔單位 (HEh 及 LEh) 計之為被兩個電子佔用之最後軌域的 HOMO(alpha occ. 特徵值)以及為第一個未被佔用軌域之 LUMO(alpha virt. 特徵值)。此用以測定以電子伏特計之 HOMO 及 LUMO 值,藉由循環伏安法測量校正,其係如下:

$$\text{LUMO(eV)} = (1.0658 * \text{LEh} * 27.212) - 0.5049$$

$$\text{HOMO(eV)} = (0.8308 * \text{HEh} * 27.212) - 1.1180$$

【0036】在本申請案之內容中,該等值應視為材料的 HOMO 及 LUMO。

【0037】材料之三重態能階 T1 係定義為具有藉由量子-化學能計算所求得之最低能的三重態之相對激發能(以 eV 計)。

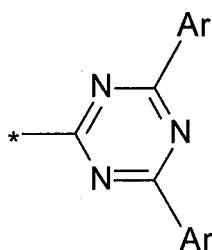
【0038】上述測定個別能值之條件及方法使熟習本技術領域之人士能以簡單方式識別來自先前技術的適用化合物。軌域能之計算為熟習本領域之人士的例行作業,熟習

本領域之人士能借助於上述方法於短時間內完成軌域能之計算。

【0039】 熟習本領域之人士將明白雙極性主體為於所使用之混合物中對於在所使用組件中的電子傳輸及電洞傳輸二者有重大貢獻者。熟習本領域之人士將進一步明白，此可藉由選擇因其能階與同一混合物中所使用之其他材料的能階比較而顯著程度地被注入電子及電洞二者之材料 (a)，以及因極低電子或電洞移動率 (低於 $10^{-8} \text{ cm}^2/(\text{Vs})$) 未抑制其中之傳輸的 (b) 而獲致。電子及電洞移動率之測量係由熟習本領域之人士藉由標準方法以例行方式進行。

【0040】 式(1)之雙極性主體：

於本發明一個實施態樣中，選擇其中 Y 係選自 O 及 S 以及取代基



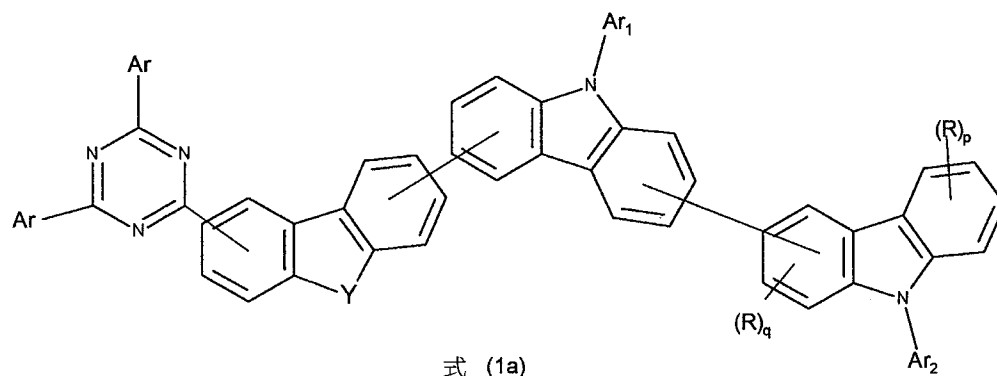
係鍵結於二苯并咪喃或二苯并噻吩之 1、2、3 或 4 位的式(1)之化合物，其中 X、Ar、Ar₁、Ar₂、R、n、p、q、r 及 s 具有前文所給之定義以及下文所給之定義，以及 * 表示與二苯并咪喃或二苯并噻吩之鍵結位置。

【0041】 較佳係 Y 為 O。

【0042】 如上述或描述為較佳之式(1)之化合物的符號 X 為 Ar₁ 或式(1-1)之取代基，其中 Ar₁、Ar₂、R、n、p、

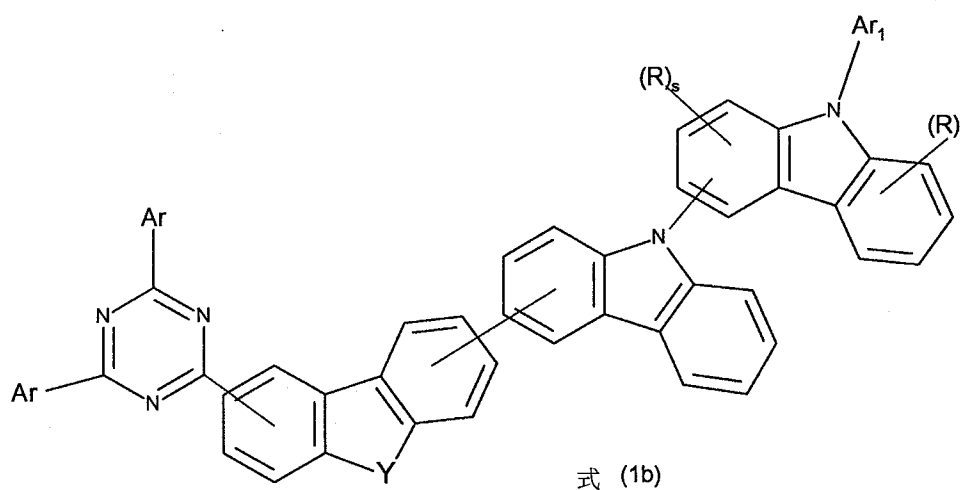
q、r及s具有上述定義或於下文指明為較佳者。

【0043】其中X為Ar₁以及n為1之式(1)之化合物係以式(1a)表示



其中Y、Ar、Ar₁、Ar₂、R、p及q具有前文所給之定義或下文所給之定義。

【0044】其中X為式(1-1)之取代基以及n為0之式(1)之化合物係以式(1b)表示



其中Y、Ar、Ar₁、Ar₂、R、p及q具有前文所給之定義或下文所給之定義。

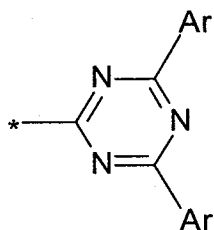
【0045】較佳的，選擇具有上述或下述為較佳之取代基的至少一種式(1a)之化合物用於該組成物。

【0046】較佳的，選擇具有上述或下述為較佳之取代

基的至少一種式(1b)之化合物用於該組成物。

【0047】本發明因此進一步提出如上述之組成物，其中式(1)之化合物對應於式(1a)或(1b)之化合物。

【0048】於本發明一個實施態樣中，選擇其中Y係來自O及S以及取代基

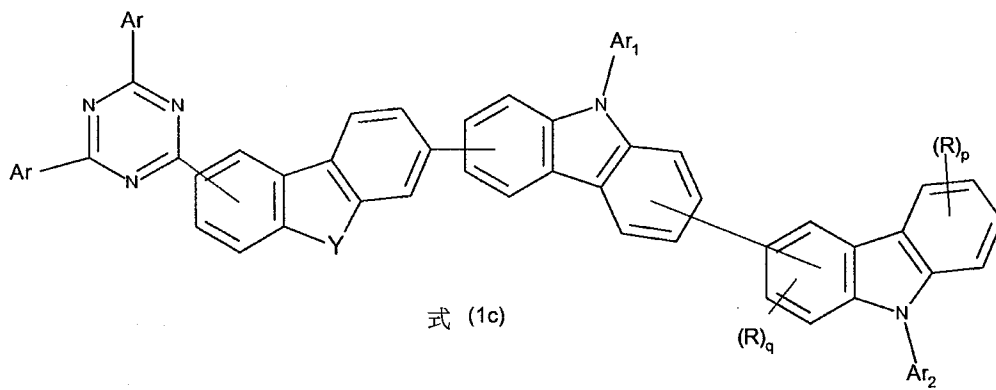


係鍵結於二苯并呋喃或二苯并噻吩之1、2、3或4位，以及咪唑單元係鍵結於二苯并呋喃或二苯并噻吩之6、7、8或9位的式(1)、(1a)或(1b)之化合物，其中Y、X、Ar、Ar₁、Ar₂、R、n、p、q、r及s具有前文所給之定義以及下文所給之定義，以及*表示與二苯并呋喃或二苯并噻吩之鍵結位置。

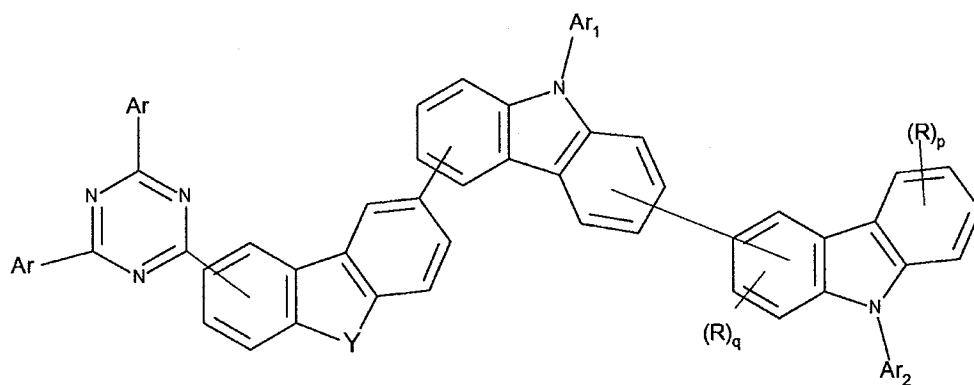
【0049】更佳係咪唑單元係鍵結於二苯并呋喃或二苯并噻吩之7或8位。

【0050】因此，更佳的，選擇咪唑單元係鍵結於二苯并呋喃或二苯并噻吩之7或8位的式(1)、(1a)或(1b)之化合物用於該組成物。

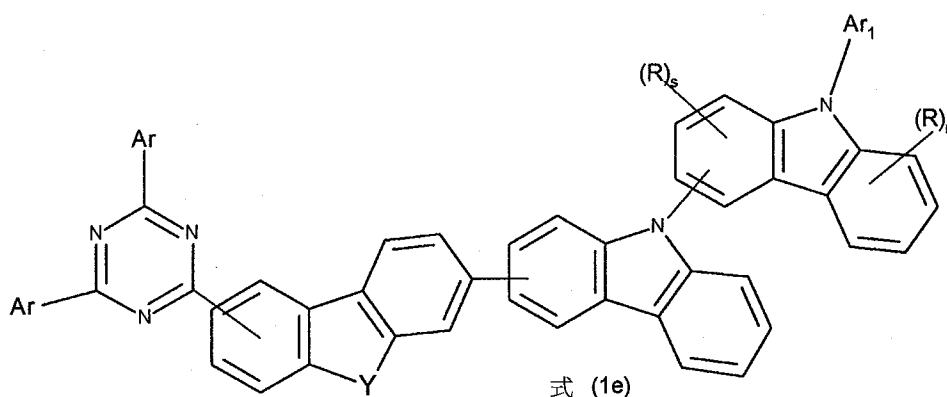
【0051】於該實施態樣中，較佳係選擇式(1c)、(1d)、(1e)或(1f)之化合物用於該組成物



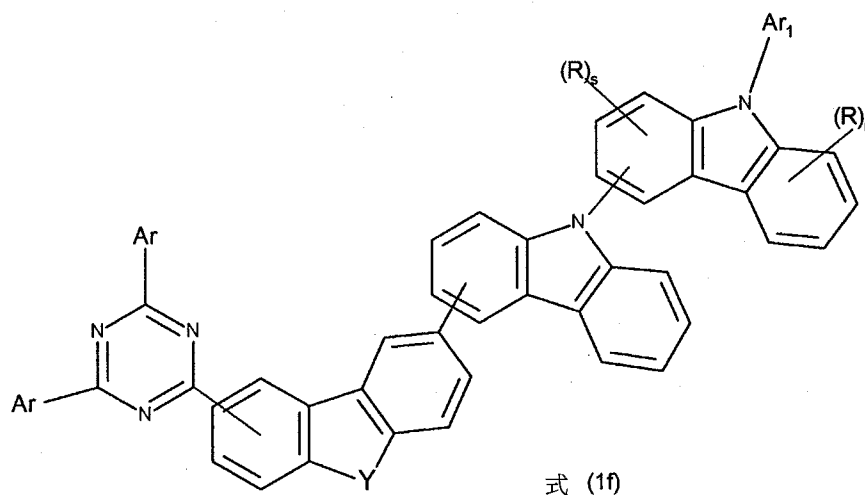
式 (1c)



式 (1d)



式 (1e)



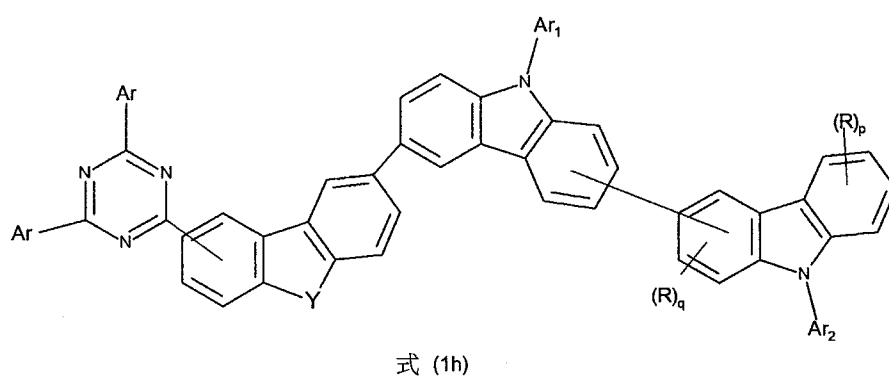
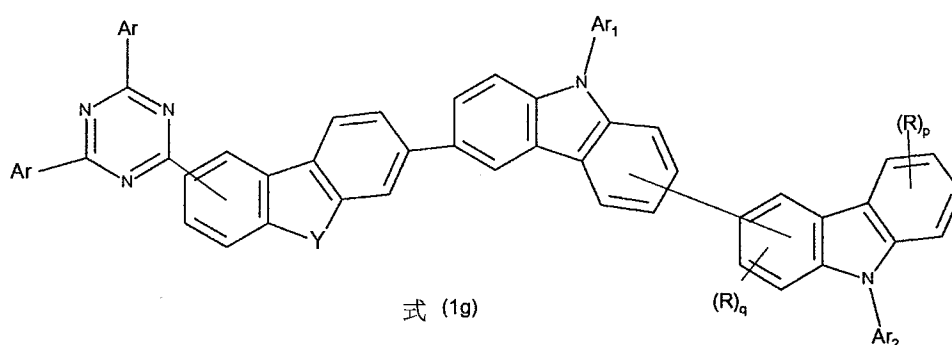
式 (1f)

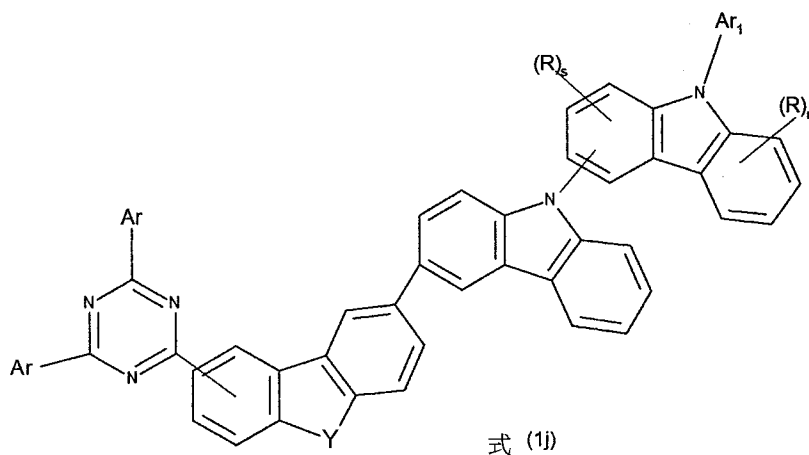
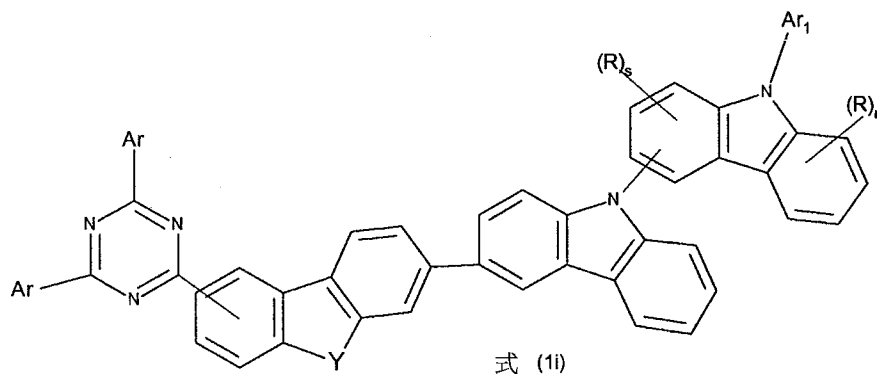
其中 Y、Ar、Ar₁、Ar₂、R、p、q、r及s具有前文所給之定義或下文所給之定義。

【0052】更佳係二苯并呋喃或二苯并噻吩單元係鍵結於咪唑之3位。

【0053】因此，更佳的，選擇二苯并呋喃或二苯并噻吩單元係鍵結於咪唑之3位的式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)或(1f)之化合物用於該組成物。

【0054】於該實施態樣中，較佳係式(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物用於該組成物





其中 Y、Ar、Ar₁、Ar₂、R、p、q、r 及 s 具有前文所給之定義或下文所給之定義。

【 0055 】 式 (1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i) 或 (1j) 之化合物、或描述為較佳之式 (1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i) 或 (1j) 之化合物中，Ar 於各情況下獨立地較佳為如上述或描述為較佳之具有 6 至 40 個碳原子之芳基，其可經一或多個 R³ 基取代。更佳的，至少一個 Ar 為苯基及另一芳族 Ar 取代基為具有 6 至 40 個碳原子及可經一或多個 R³ 基取代之芳基。更佳的，二者 Ar 基均為苯基。

【 0056 】 式 (1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i) 或 (1j) 之化合物、或描述為較佳之

式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物中， Ar_1 及 Ar_2 各自獨立地較佳為如上述或描述為較佳之具有6至40個碳原子之芳基，其可經一或多個 R^3 基取代。更佳的， Ar_1 及 Ar_2 各自獨立地為苯基或萘基，其各可經一或多個 R^3 基取代。

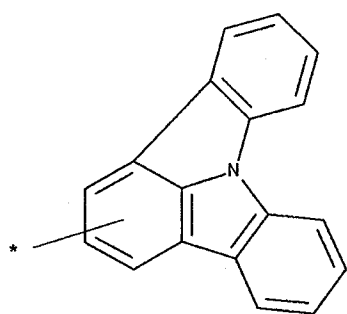
【0057】式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物、或描述為較佳之式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物中，當如上述或描述為較佳之 Ar_1 或 Ar_2 為經一或多個 R^3 基取代之芳基時，取代基 R^3 於各情況下係相同或不同且較佳係選自由D、F、具有1至20個碳原子之直鏈或支鏈烷基或具有5至40個環原子之芳族或雜芳族環系統所組成之群組。用於取代基 R^3 之具有5至40個環原子之雜芳族環系統較佳係衍生自二苯并呋喃或二苯并噻吩。用於取代基 R^3 之具有6至40個環原子之芳族環系統較佳為苯基、聯苯或聯三苯，更佳為苯基。用於取代基 R^3 之直鏈或支鏈烷基較佳為甲基、乙基、正丙基或正丁基，更佳為甲基。

【0058】式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物、或描述為較佳之式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物中， p 、 q 、 r 及 s 各自獨立地為0或1；更佳係 p 及 q 為0。

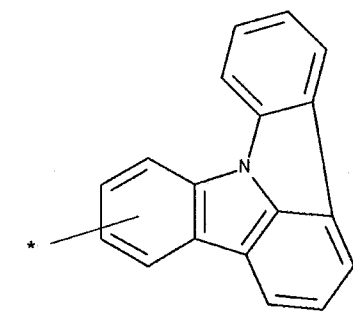
【0059】於式(1)、(1a)、(1c)、(1d)、(1g)或(1h)之化

合物或描述為較佳之式(1)、(1a)、(1c)、(1d)、(1g)或(1h)之化合物中， p 及 q 各自獨立地較佳為0或1，其中於 $p=1$ 以及 $q=0$ 或 $q=1$ 以及 $p=0$ 之情況下， R 與 Ar_2 取代基一起較佳地形成可經一或多個 R^2 基取代之單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統。較佳的，形成之環系統未經取代。

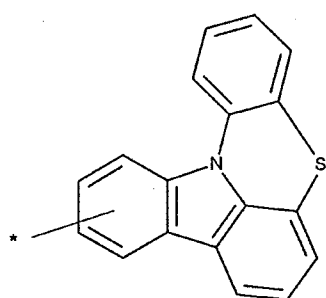
用於形成此種環系統之較佳實例為式(1-2)、(1-3)、(1-4)、(1-5)及(1-6)之取代基，較佳為式(1-4)、(1-5)及(1-6)之取代基；



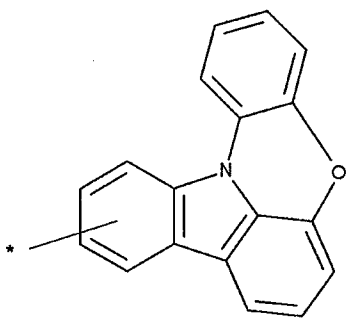
式 (1-2)



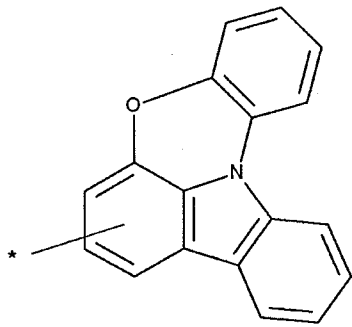
式 (1-3)



式 (1-4)



式 (1-5)

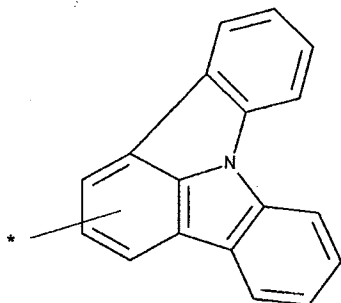


式 (1-6)

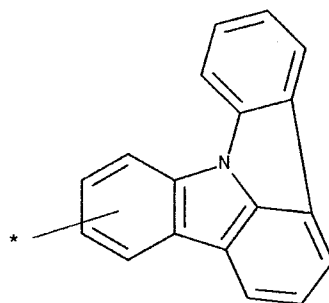
其中該取代基之附接位置係以*標示以及可能於咪唑單元之5、6、7或8位。

【0060】式(1)、(1b)、(1e)、(1f)、(1i)或(1j)之化合物或描述為較佳之式(1)、(1b)、(1e)、(1f)、(1i)或(1j)之化合物中， r 及 s 各自獨立地較佳為0或1，其中於 $r=1$ 以及 $s=0$ 或 $s=1$ 以及 $r=0$ 之情況下， R 與 Ar_1 取代基一起較佳地形成可經一或多個 R^2 基取代之單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統。較佳的，形成之環系統未經取代。

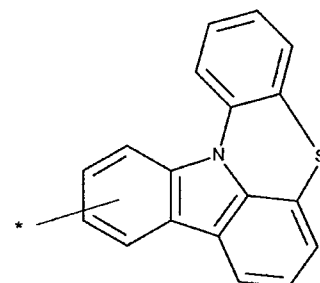
於式(1-1)之取代基中用於形成此種環系統之較佳實例為式(1-2)、(1-3)、(1-4)、(1-5)及(1-6)之取代基，較佳為式(1-2)及(1-3)；



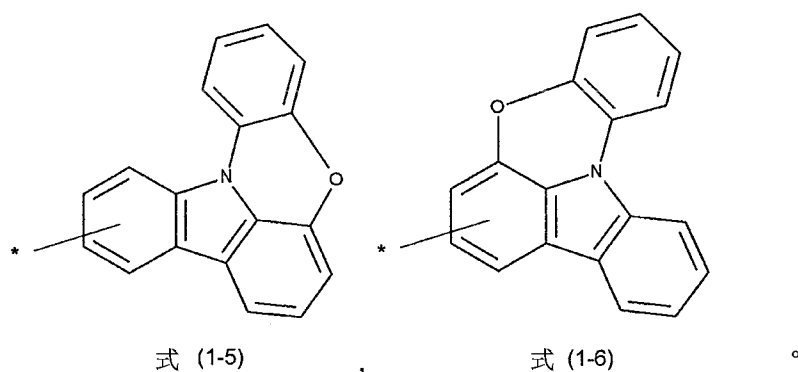
式 (1-2)



式 (1-3)



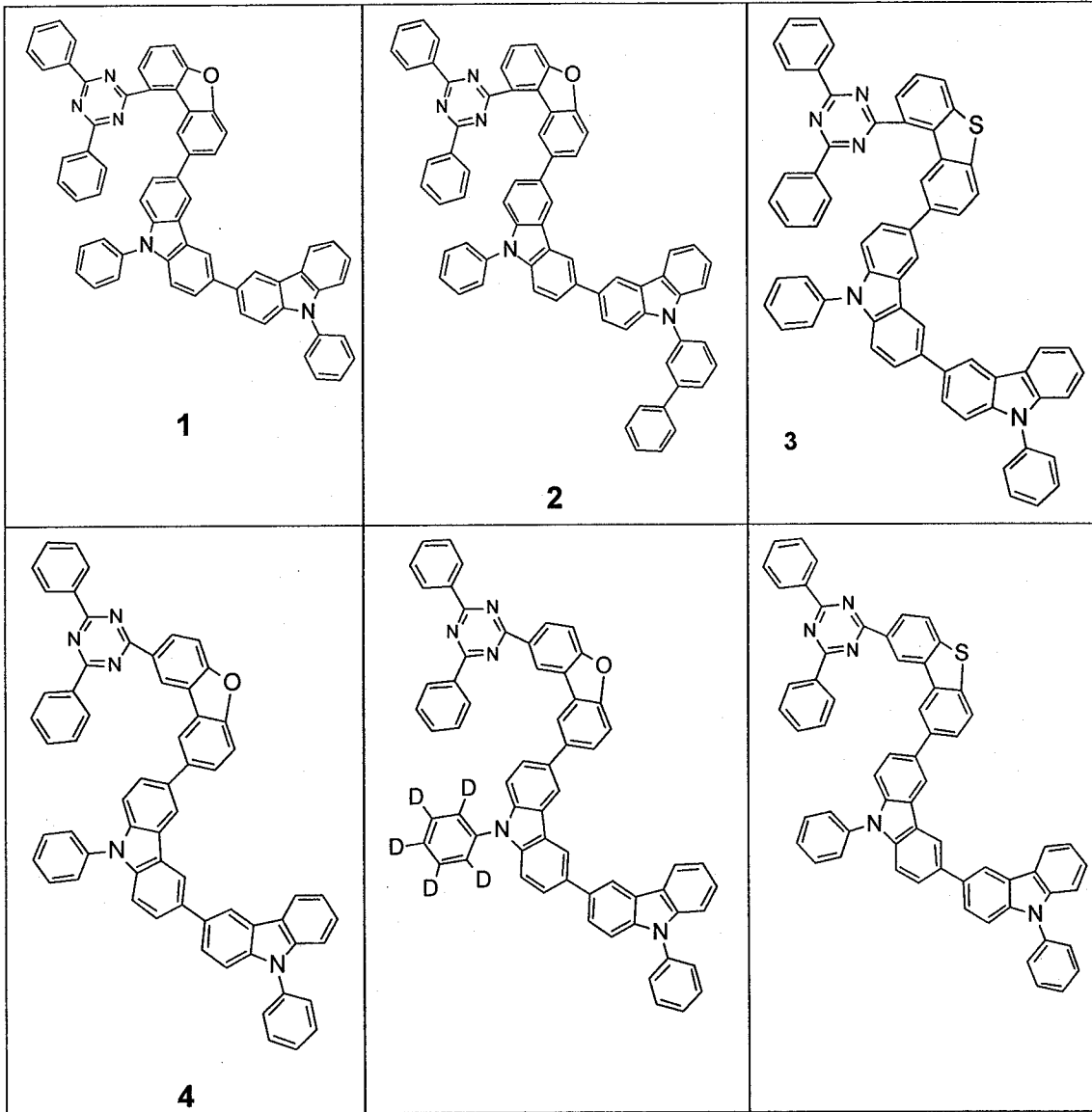
式 (1-4)

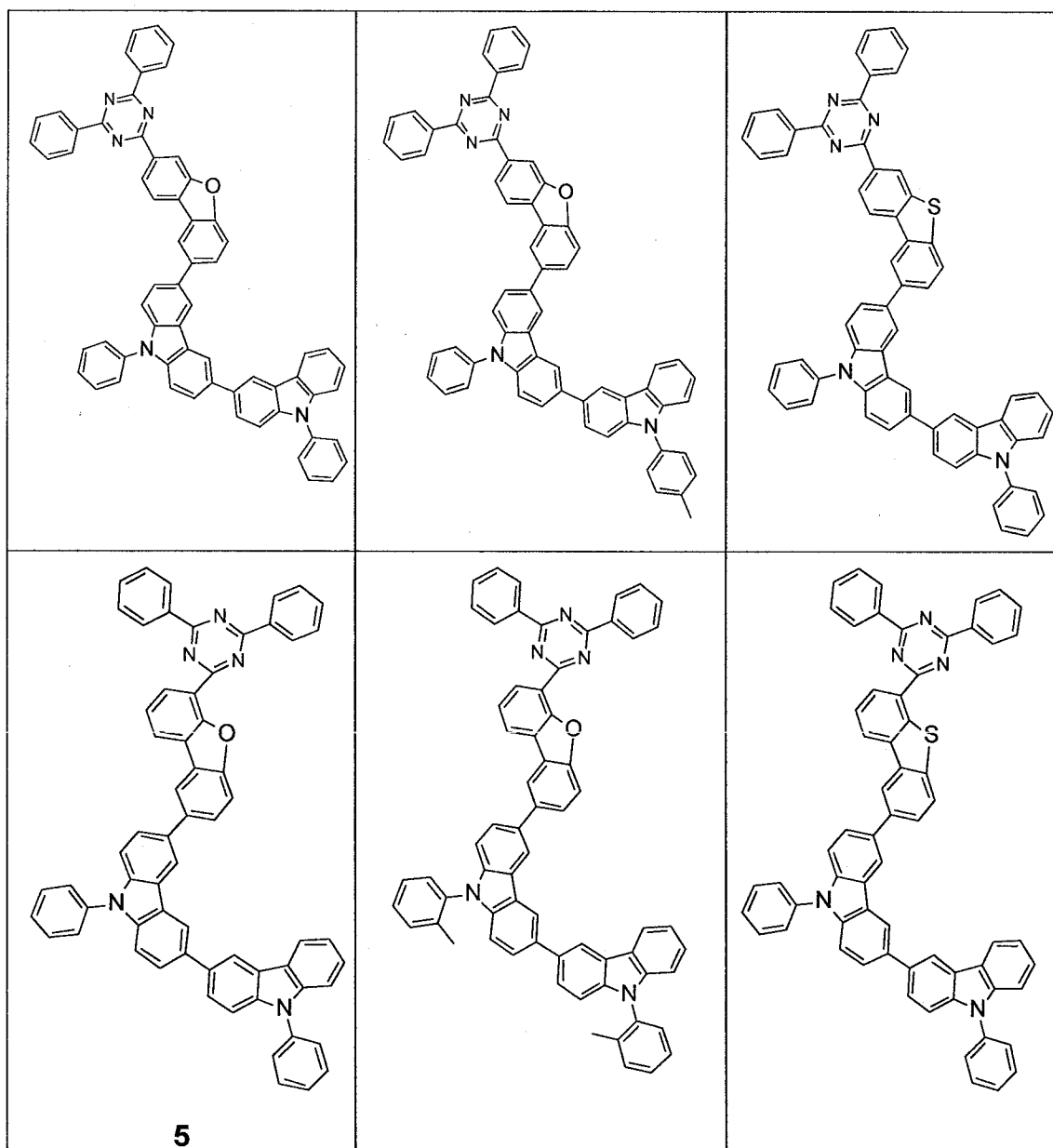


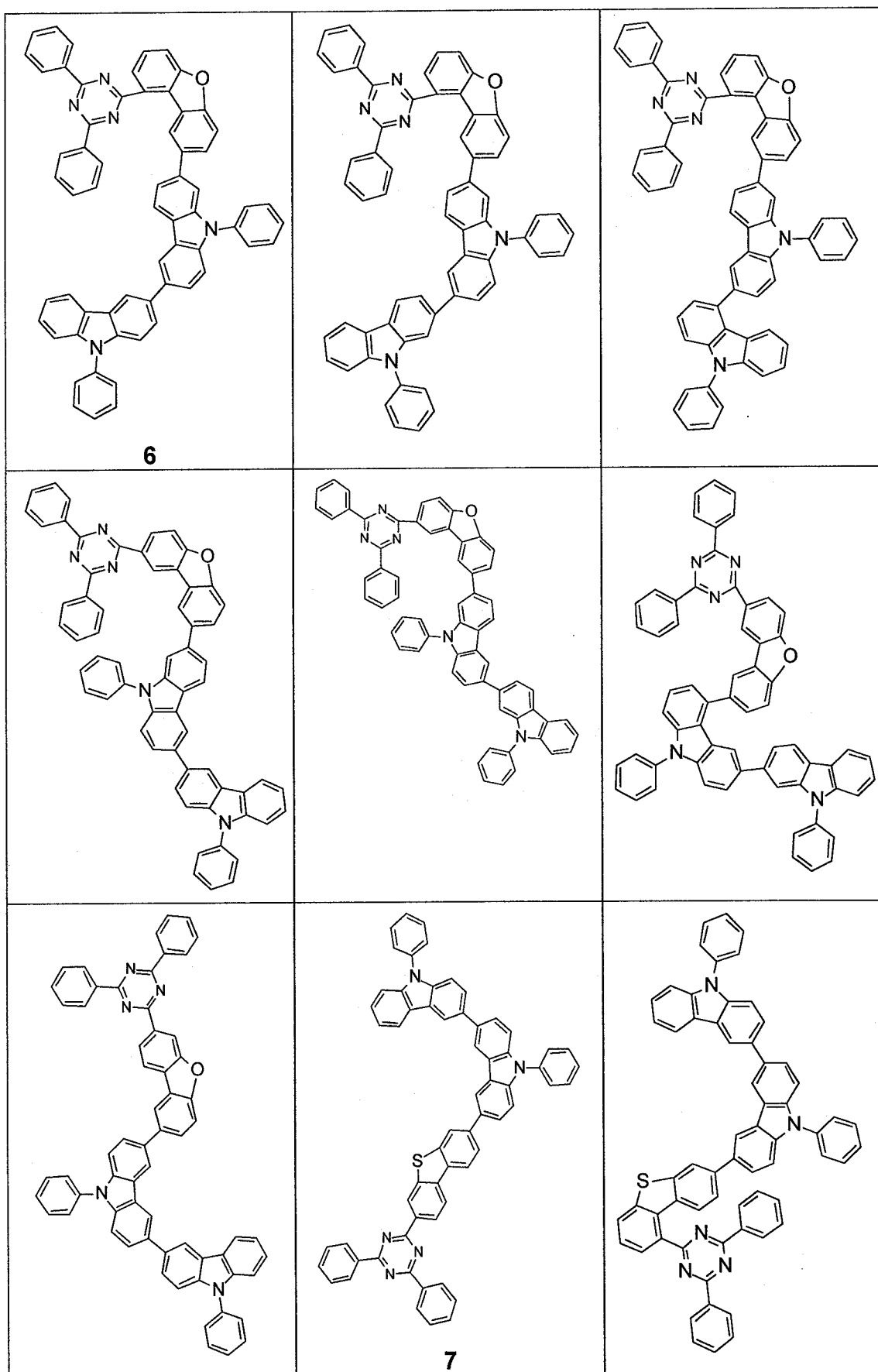
【 0061 】 式 (1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物、或描述為較佳之式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之化合物中 p、q、r及s為1時，取代基R於各情況下係相同或不同且較佳係選自由D、F、具有1至20個碳原子烷基或具有5至40個環原子之芳族或雜芳族環系統所組成之群組。用於取代基R之具有5至40個環原子之雜芳族環系統較佳係衍生自二苯并呋喃或二苯并噻吩。用於取代基R之具有6至40個環原子之芳族環系統較佳係衍生自苯基、聯苯或聯三苯，更佳為苯基。用於取代基R之具有1至20個碳原子之烷基較佳為具有1至4個碳原子之直鏈或支鏈烷基，更佳為甲基、乙基、正丙基或正丁基，最佳為甲基。

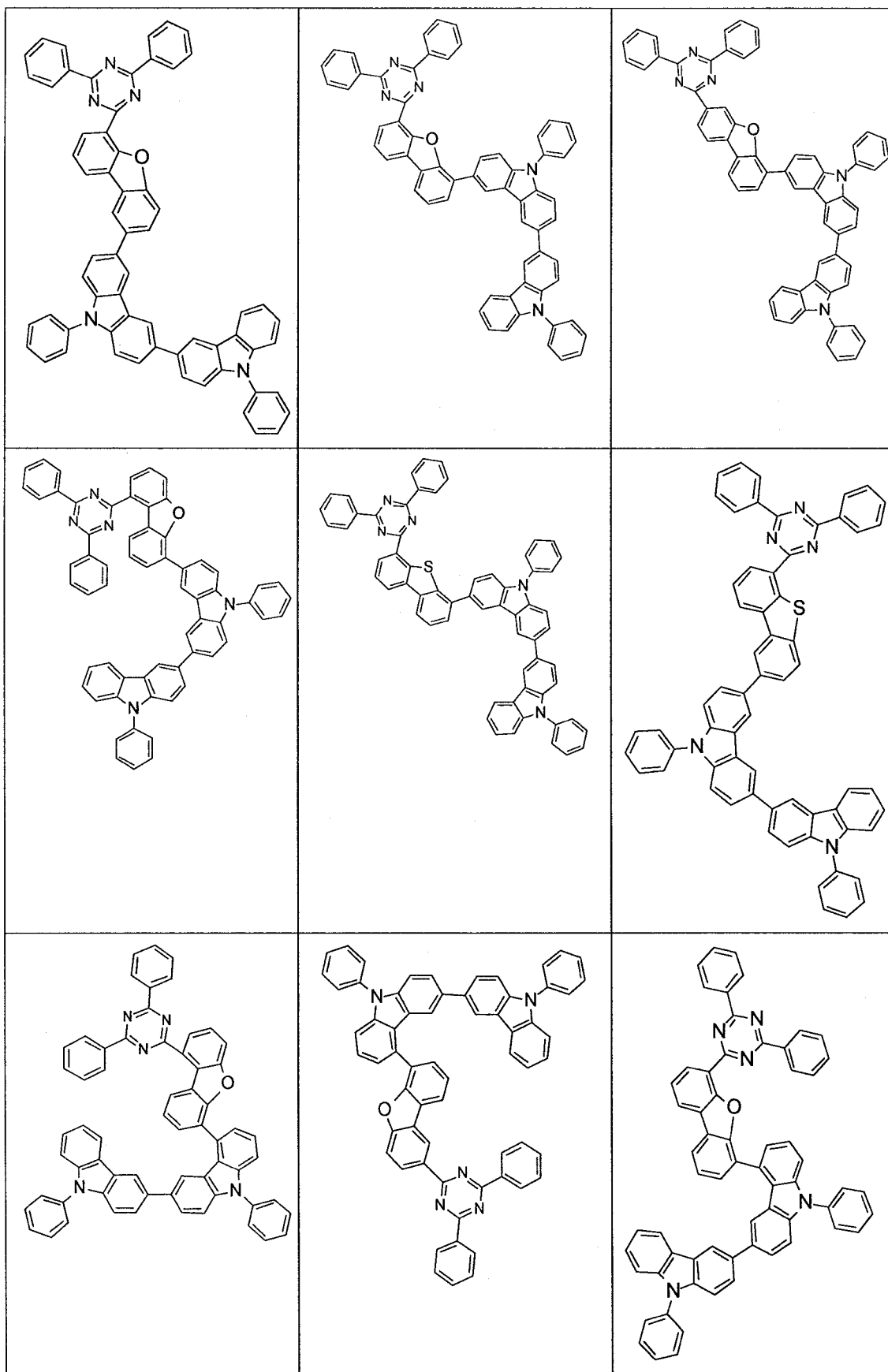
【 0062 】 根據本發明選擇之式(1)之化合物、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)的適用實例係以下顯示於表1之結構。

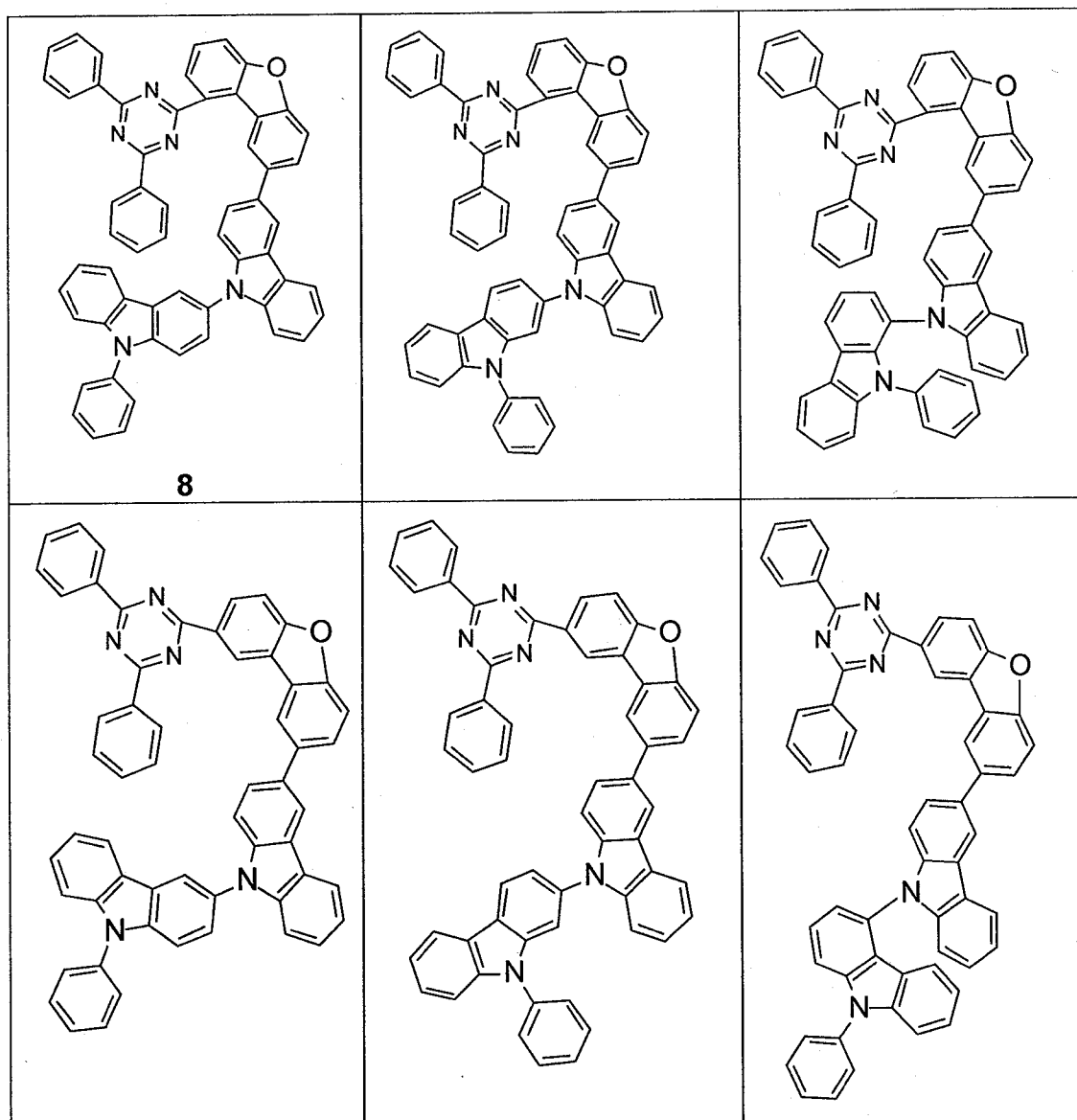
表 1:

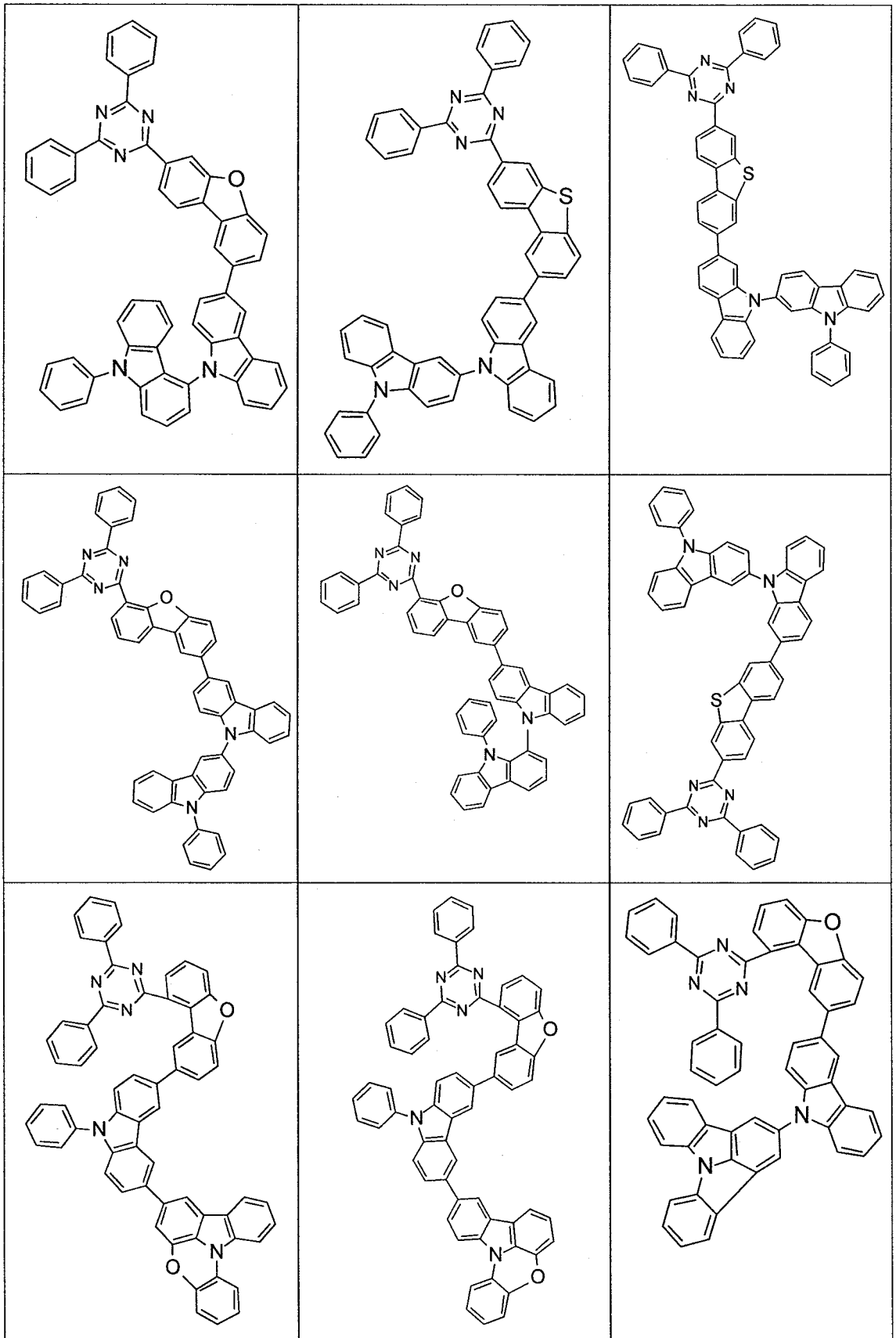


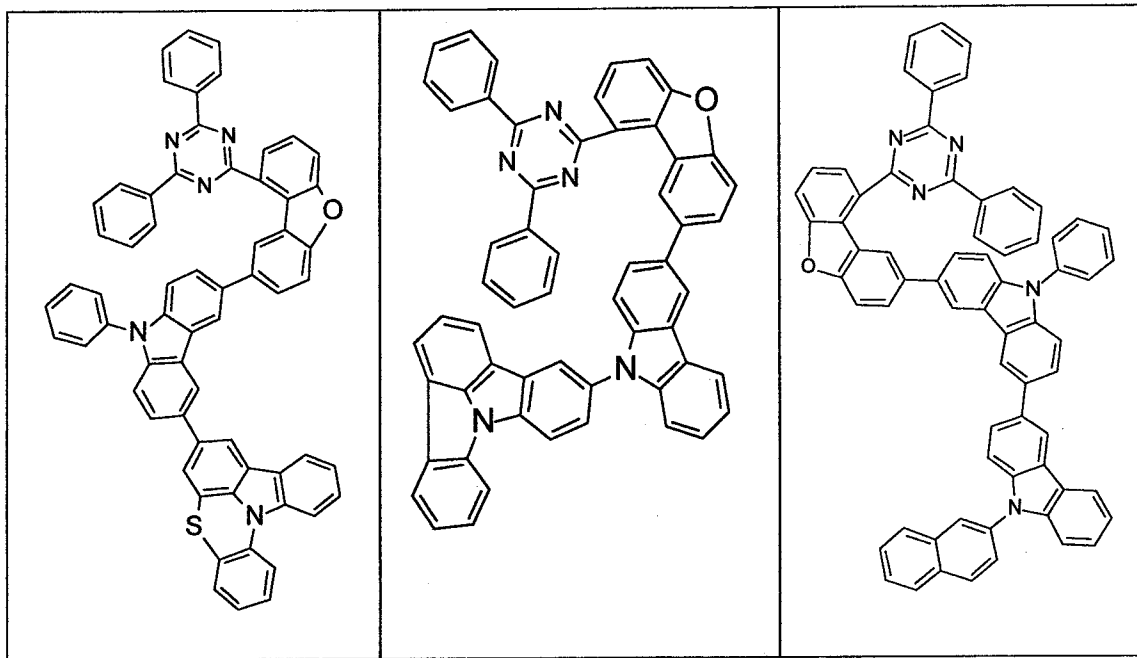










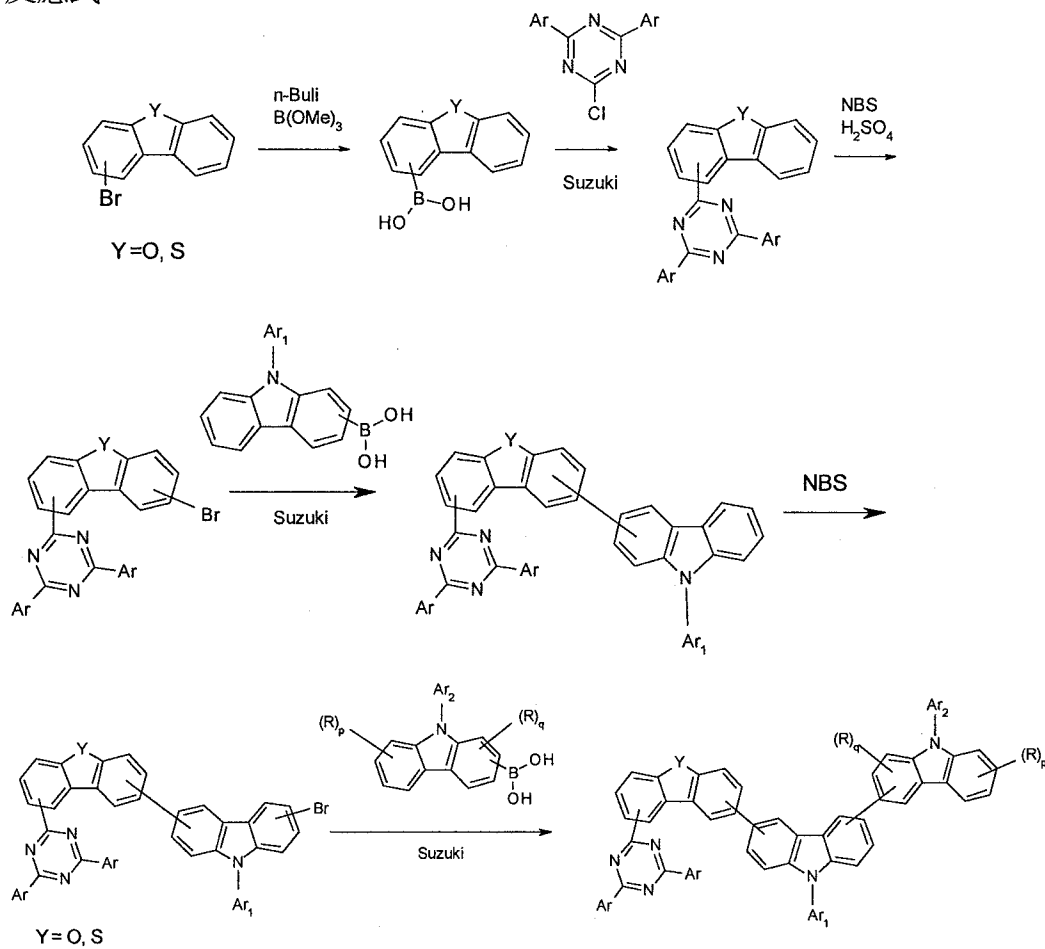


【0063】根據本發明選擇之式(1)之化合物、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)的特佳實例為上述表1中之化合物1至8。

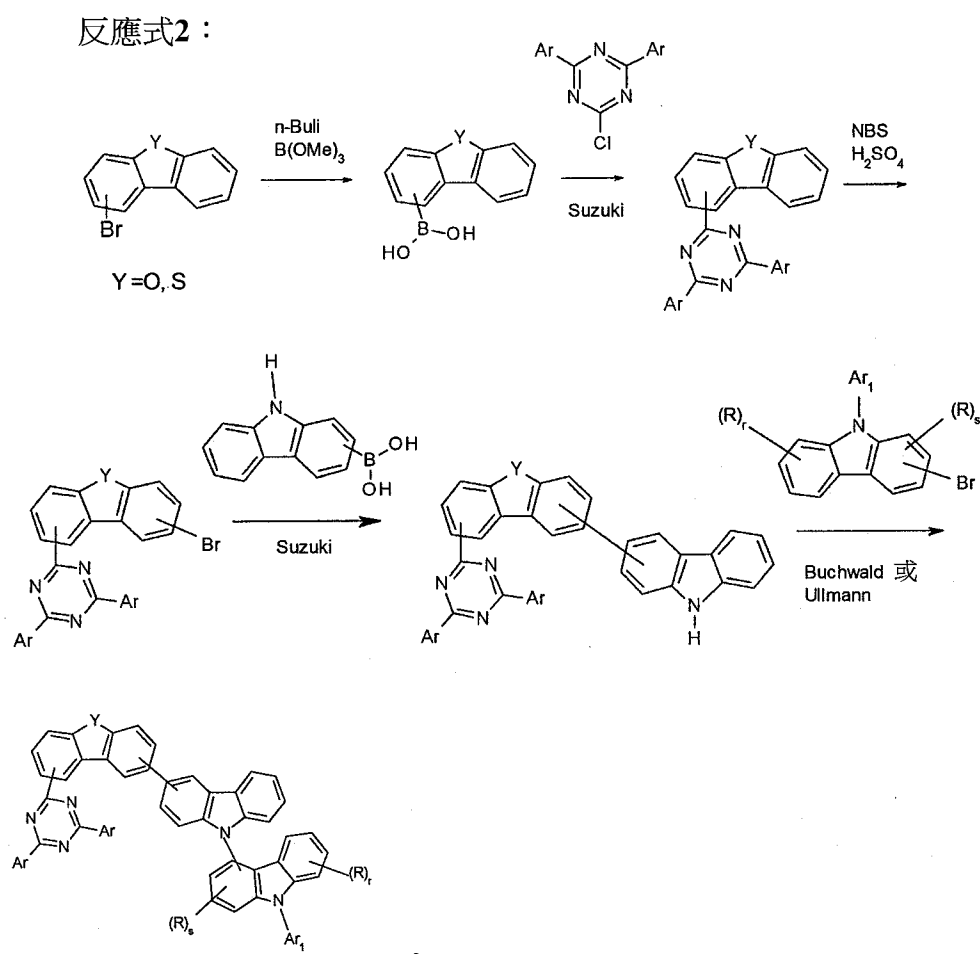
【0064】熟習本領域之人士已知式(1)之化合物或式(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)或(1j)之較佳化合物及化合物1至8之製備。本發明之化合物可藉由熟習本領域之人士已知的合成步驟製備，例如溴化、Suzuki偶合、Ullmann偶合、Hartwig-Buchwald偶合等。適用之合成方法係以下列反應式大致顯示。

【0065】式(1)或(1a)、(1c)、(1d)、(1g)或(1h)之化合物可根據下列反應式1製備，其中Y、R、p、q、Ar、Ar₁及Ar₂具有前文提供之定義之一。

反應式1：



【0066】式(1)或(1b)、(1e)、(1f)、(1i)或(1j)之化合物可根據下列反應式2製備，其中Y、R、r、s、Ar及Ar₁具有前文提供之定義之一。

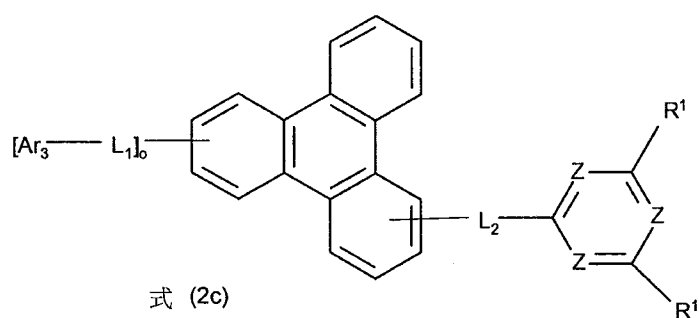
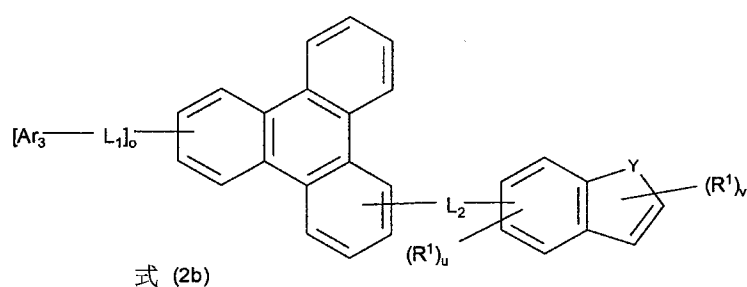
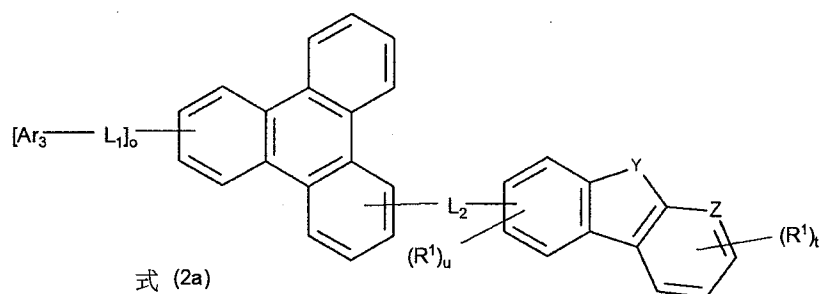


【0067】式(2)之聯伸三苯衍生物：

於本發明一個實施態樣中，選擇如上述式(2)之化合物，其係於該組成物中與如上述或描述為較佳之式(1)、(1a)、(1b)、(1c)、(1d)、(1e)、(1f)、(1g)、(1h)、(1i)及(1j)之化合物，或與表1中之化合物尤其是化合物1至8一起使用。

【0068】式(2)之化合物中之Ar₄較佳為具有5至40個環原子以及可經一或多個R¹基取代之雜芳族環系統，其中R¹於各情況下獨立地具有前文所給或於下文指明為較佳者之定義。

【0069】其中 Ar_4 於各情況下為特佳雜芳族環系統之式(2)之化合物係以式(2a)、(2b)及(2c)表示



其中所使用之符號及指數 Ar_3 、 L_1 及 L_2 具有上述定義或於下文指明之較佳定義，以及

Z 獨立地於各情況下為 N 或 CR^1 ，其中 R^1 具有上述定義或於下文指明之較佳定義，

Y 為 O 或 S ，

t 及 u 各自獨立地為 0 、 1 、 2 或 3 ，以及

v 於各情況下獨立地為 0 、 1 或 2 。

【0070】本發明因此進一步提出如上述之組成物，其

中式(2)之化合物對應於式(2a)、(2b)或(2c)之化合物。

【0071】於式(2a)及(2b)之化合物中，Y較佳為S。

於式(2a)之化合物中，Z較佳為CR¹，其中R¹具有上述定義或於下文指明之較佳定義。

於式(2c)之化合物中，Z至少一次較佳為N或至少兩次較佳為N或三次為N。更佳的，Z於各情況下為N。

【0072】於式(2a)之化合物中，t較佳為0、1或2。

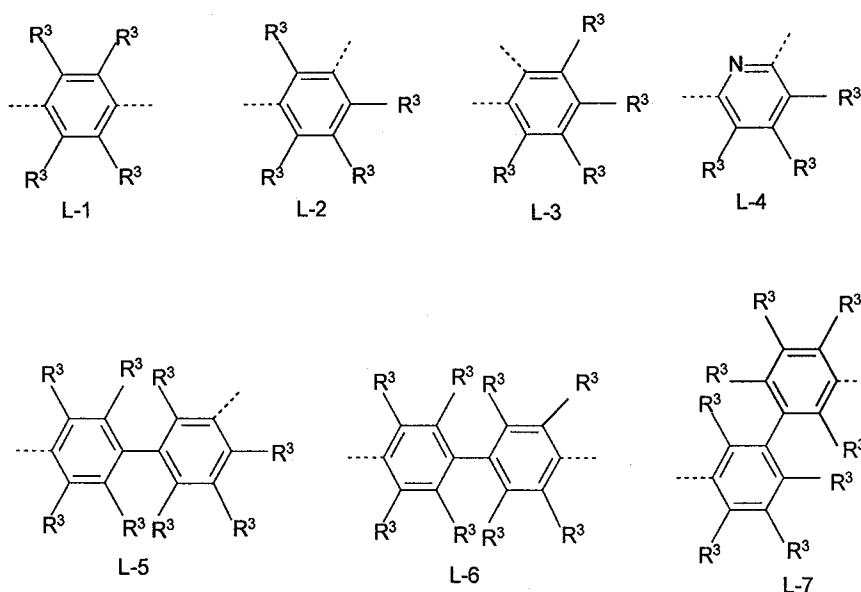
於式(2a)之化合物中，u較佳為0或1。

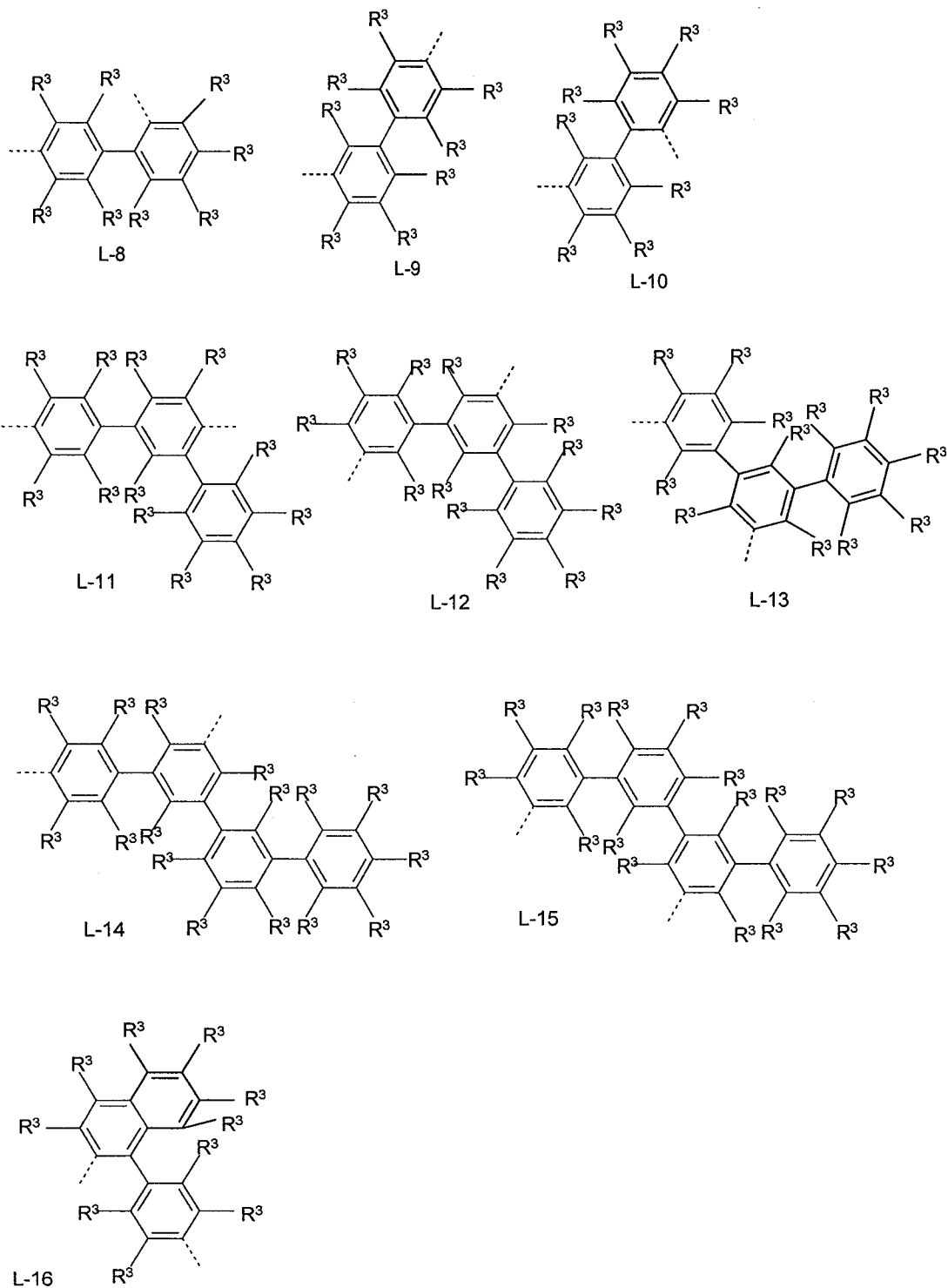
【0073】於式(2b)之化合物中，v較佳為2。

於式(2b)之化合物中，u較佳為0。

【0074】式(2)、(2a)、(2b)或(2c)中之連接子L₁、L₂於各情況下係相同或不同，且為單鍵或具有5至30個環原子及可經一或多個R³基取代之芳族或雜芳族環系統。

【0075】於式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物的較佳實施態樣中，L₁及L₂各自獨立地為單鍵或選自L-1至L-16之芳族或雜芳族環系統





其中 R^3 於各情況下係相同或不同，且具有如上述或下文描述為較佳之定義，以及虛線鍵表示至對應碳原子之鍵。

【0076】於式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物的較佳

實施態樣中， L_1 於各情況下較佳為單鍵。

於式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物的較佳實施態樣中， L_2 於各情況下較佳為單鍵或選自L-2、L-3、L-4、L-5、L-7或L-13連接子。

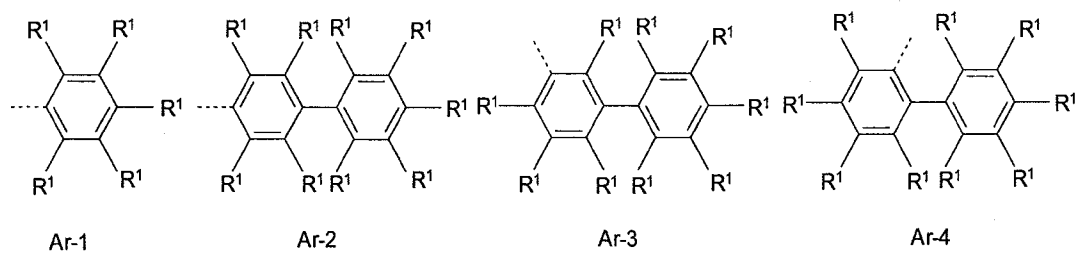
【0077】連接子L-1至L-16中之 R^3 於各情況下獨立地較佳為H或苯基，更佳為H。

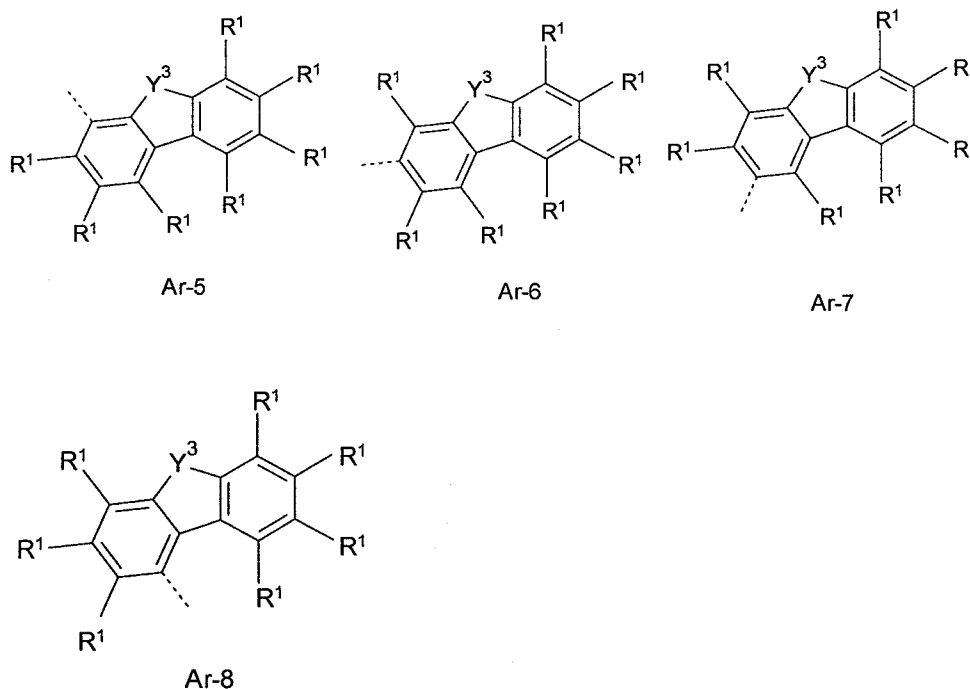
【0078】本發明因此進一步提出如上述之組成物，其中式(2)之化合物對應於式(2a)、(2b)或(2c)及 L_1 於各情況下為單鍵。

【0079】於式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物中， o 為0或1，較佳為0。

【0080】 Ar_3 於各情況下為具有6至40個環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統，其中 R^1 於各情況下為相同或不同且具有如上述或下文描述為較佳之定義。

【0081】於式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物，或描述為較佳之式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物中， Ar_3 於各情況下較佳係選自芳族或雜芳族環系統Ar-1至Ar-8





其中 Y^3 於各情況下係相同或不同，且為 O、 $NR^{\#}$ 、S 或 $C(R^{\#})_2$ ，其中鍵結至 N 之 $R^{\#}$ 基不為 H，且 R^1 具有上述定義或於下文之較佳定義以及虛線鍵表示至 L_1 或聯伸三苯之鍵。

【0082】 $R^{\#}$ 基於各情況下係相同或不同，且為 H、D、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 $N(Ar)_2$ 、 $N(R^2)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $P(Ar)_2$ 、 $B(Ar)_2$ 、 $Si(Ar)_3$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 20 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有 3 至 20 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基或具有 2 至 20 個碳原子之烯基(其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經 $R^2C=CR^2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、O、S 或 $CONR^2$ 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D、F、Cl、Br、I、CN 或 NO_2 置換)、具有 5 至 40 個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族

或雜芳族環系統、具有5至40個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有5至40個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，視情況鍵結至同一碳原子或鍵結至相鄰碳原子的兩個取代基 $R^{\#}$ 可能形成可經一或多個 R^2 基取代之單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統。

【0083】 Y^3 較佳為O、S或 $C(CH_3)_2$ 。 Y^3 最佳為S。

【0084】於結構Ar-1至Ar-8中，取代基 R^1 於各情況下係相同或不同且係選自由下列所組成之群組：H、D、F、CN、具有1至20個碳原子之脂族烴基、或具有5至30個環原子之芳族或雜芳族環系統(其中一或多個氫原子可經D、F、Cl、Br、I或CN置換，以及其可經一或多個各具有1至4個碳原子之烷基取代)；同時，可能二或更多個相鄰取代基 R^1 一起形成單環或多環、脂族環系統。於結構Ar-1至Ar-8中，取代基 R^1 於各情況下係相同或不同且較佳係選自由下列所組成之群組：H、F、CN、具有1至10個碳原子之脂族烴基或具有5至30個環原子之芳族或雜芳族環系統。於結構Ar-1至Ar-8，取代基 R^1 於各情況下較佳為H。

【0085】於式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物中，或描述為較佳之式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物， Ar_3 於各情況下更佳係選自芳族或雜芳族環系統Ar-1、Ar-5、Ar-6、Ar-7或Ar-8，其中取代基 R^1 及 Y^3 具有上述定義或描述為較佳者。

【0086】於式(2)、(2a)或(2b)之化合物中，當t、u或v

大於0時，取代基 R^1 於各情況下係相同或不同且較佳係選自由下列所組成之群組：D、F、具有1至40個碳原子之烷基或具有5至40個環原子且可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統。該 R^1 中之具有5至40個環原子之芳族或雜芳族環系統較佳係衍生自可經一或多個 R^2 基取代之苯、二苯并呋喃、二苯并噻吩、9-苯基咪唑、聯苯、聯伸三苯及三吡。[R^1]_t中之特佳取代基 R^1 於t大於0時，各自獨立地為可經一或多個取代基 R^2 取代之苯基、聯伸三苯及三吡。於該情況下，於各情況之 R^2 於各情況下獨立地較佳為苯基或聯伸三苯。

【0087】 [R^1]_u中之特佳取代基 R^1 於u大於0時，各自獨立地為可經一或多個 R^2 取代之苯基。

[R^1]_v中之特佳取代基 R^1 於v大於0時，各自獨立地為可經一或多個 R^2 取代之苯基。

【0088】 於式(2c)之化合物中，取代基 R^1 較佳係選自可經一或多個取代基 R^2 取代之苯基、聯苯、二苯并噻吩、嘧啶或吡啶，其中兩個取代基 R^1 亦可一起形成可經一或多個取代基 R^2 取代之芳族環。於該情況下，於各情況之 R^2 於各情況下獨立地較佳為苯基。

【0089】 於式(2a)之化合物中，同樣較佳情況為較佳係鍵結至相鄰碳原子之兩個取代基 R^1 形成單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統，較佳為芳族或雜芳族環系統。

【0090】 取代基 R^2 於各情況下係相同或不同且較佳係選自由下列所組成之群組：D、F、Cl、Br、I、CN、

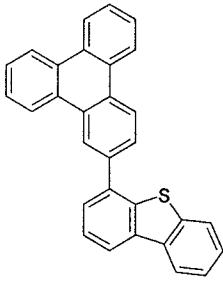
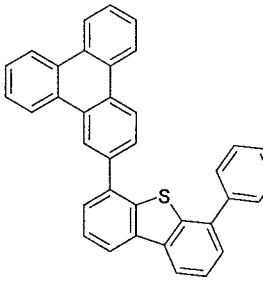
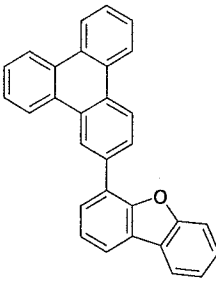
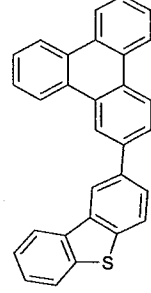
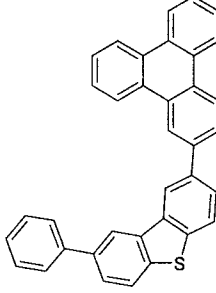
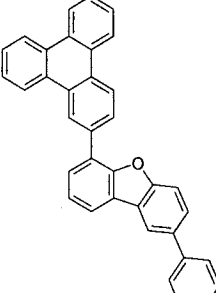
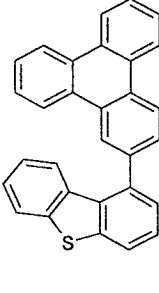
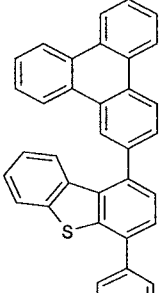
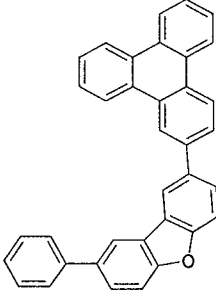
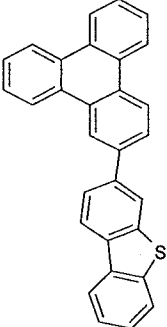
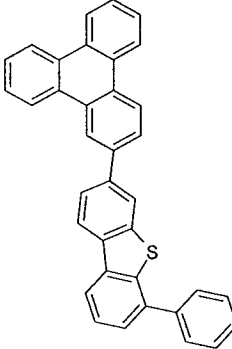
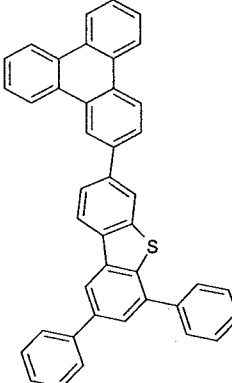
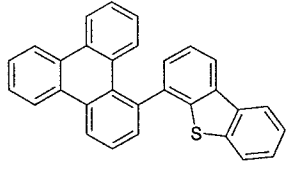
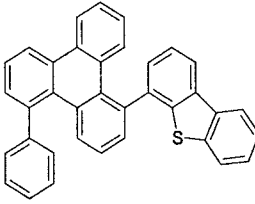
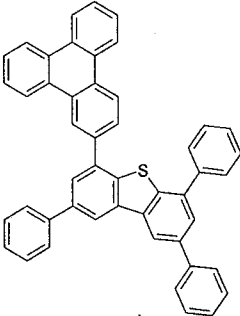
NO_2 、 $\text{N}(\text{Ar})_2$ 、 NH_2 、 $\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{Ar}$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^3$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{Ar})_2$ 、具有1至40個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有3至40個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基或具有2至40個碳原子之烯基或炔基(其各可經一或多個 R^3 基取代)、具有5至60個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有5至60個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基。取代基 R^2 於出現時更佳為如上述之芳族或雜芳族環系統，較佳係經選擇且衍生自呋啞、9-苯基呋啞、二苯并呋喃、二苯并噻吩、萸、聯三苯或螺聯萸之群組。

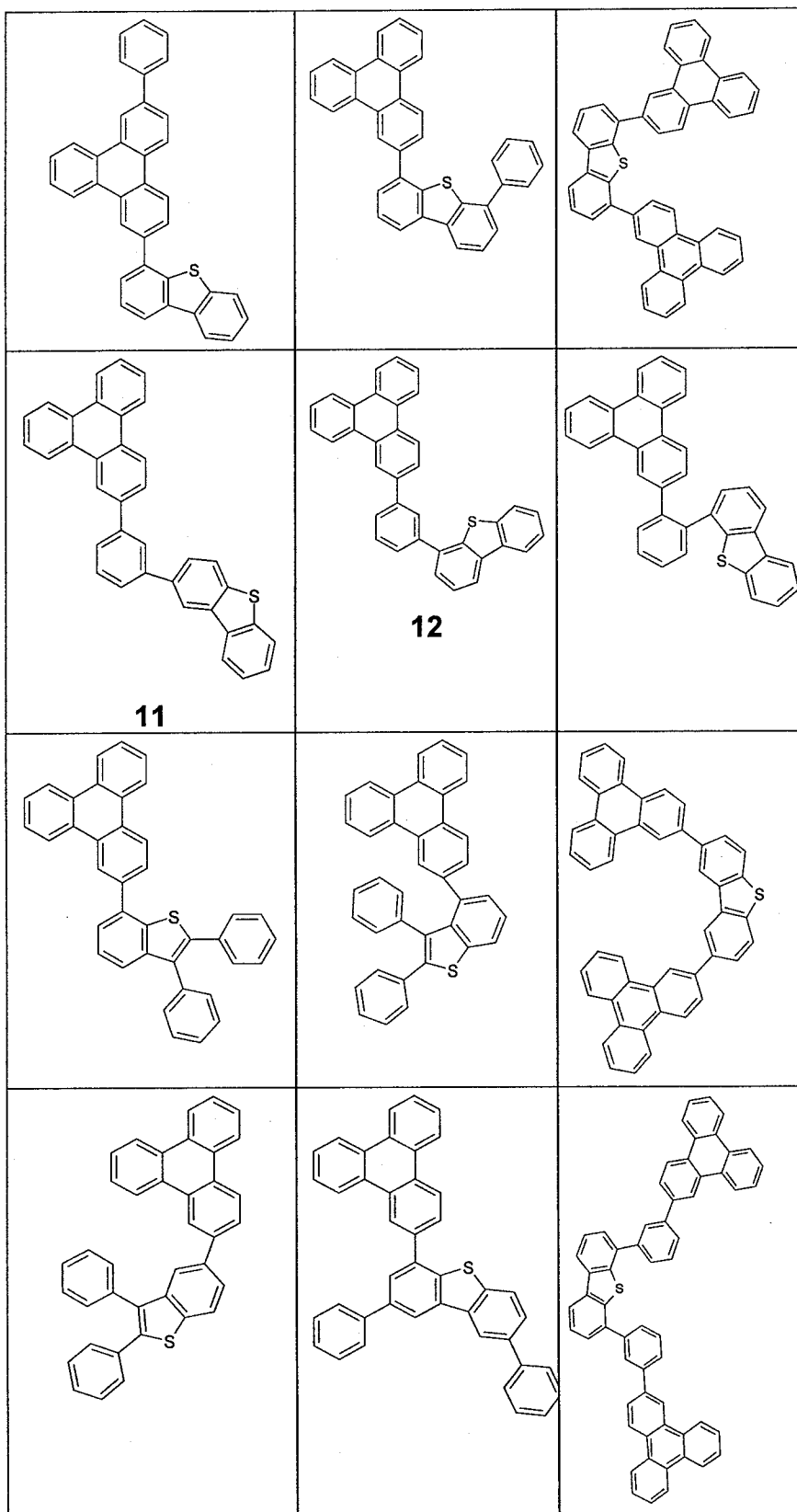
【0091】於如上述之取代基 R^2 之一者經取代基 R^3 取代的情況下，適用如上述或描述為較佳之 R^3 的定義。

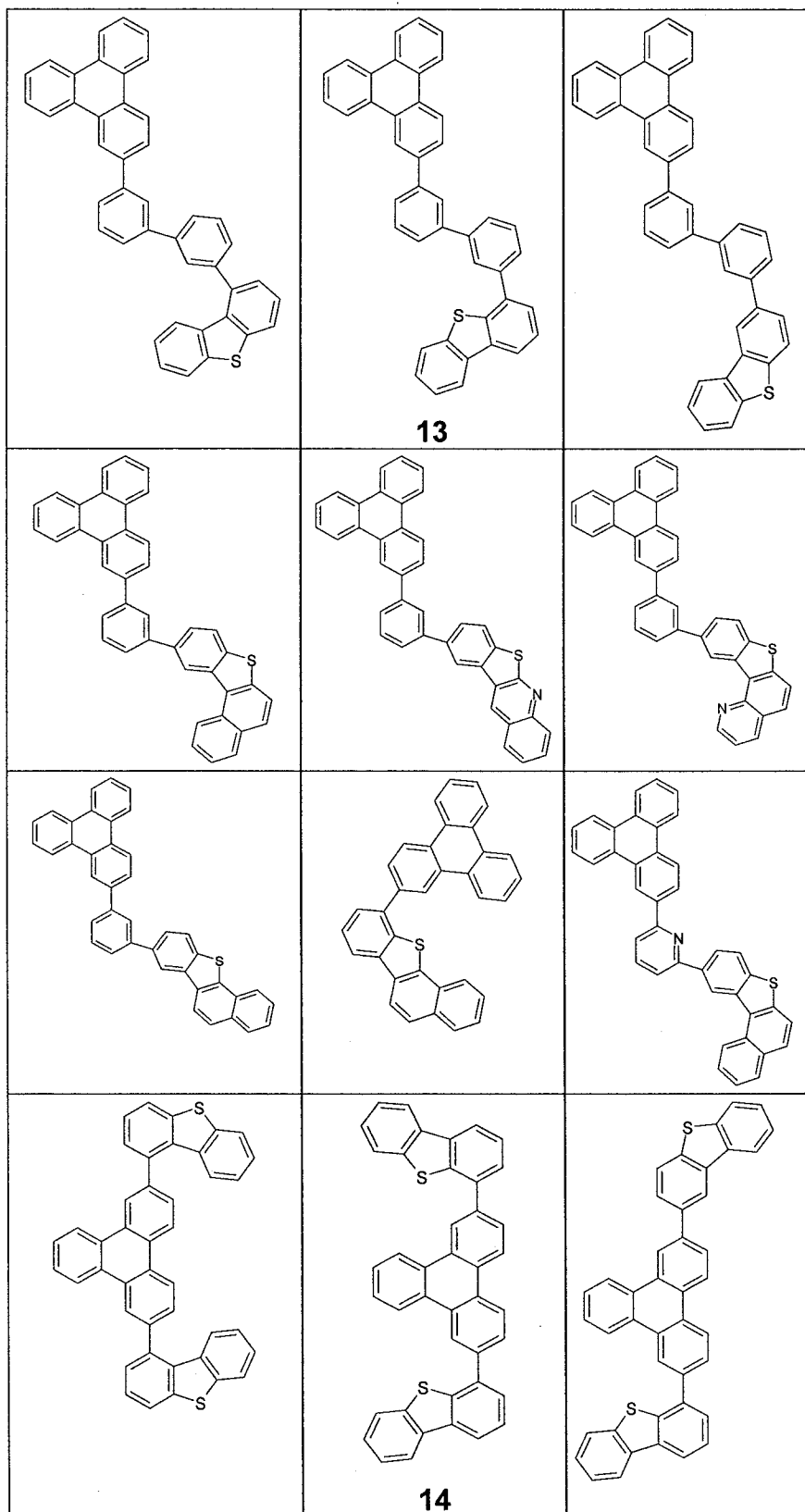
【0092】 R^3 較佳係於各情況下相同或不同，且為 H 或具有5至30個環原子之芳族或雜芳族環系統。 R^3 更佳為 H 或苯基。

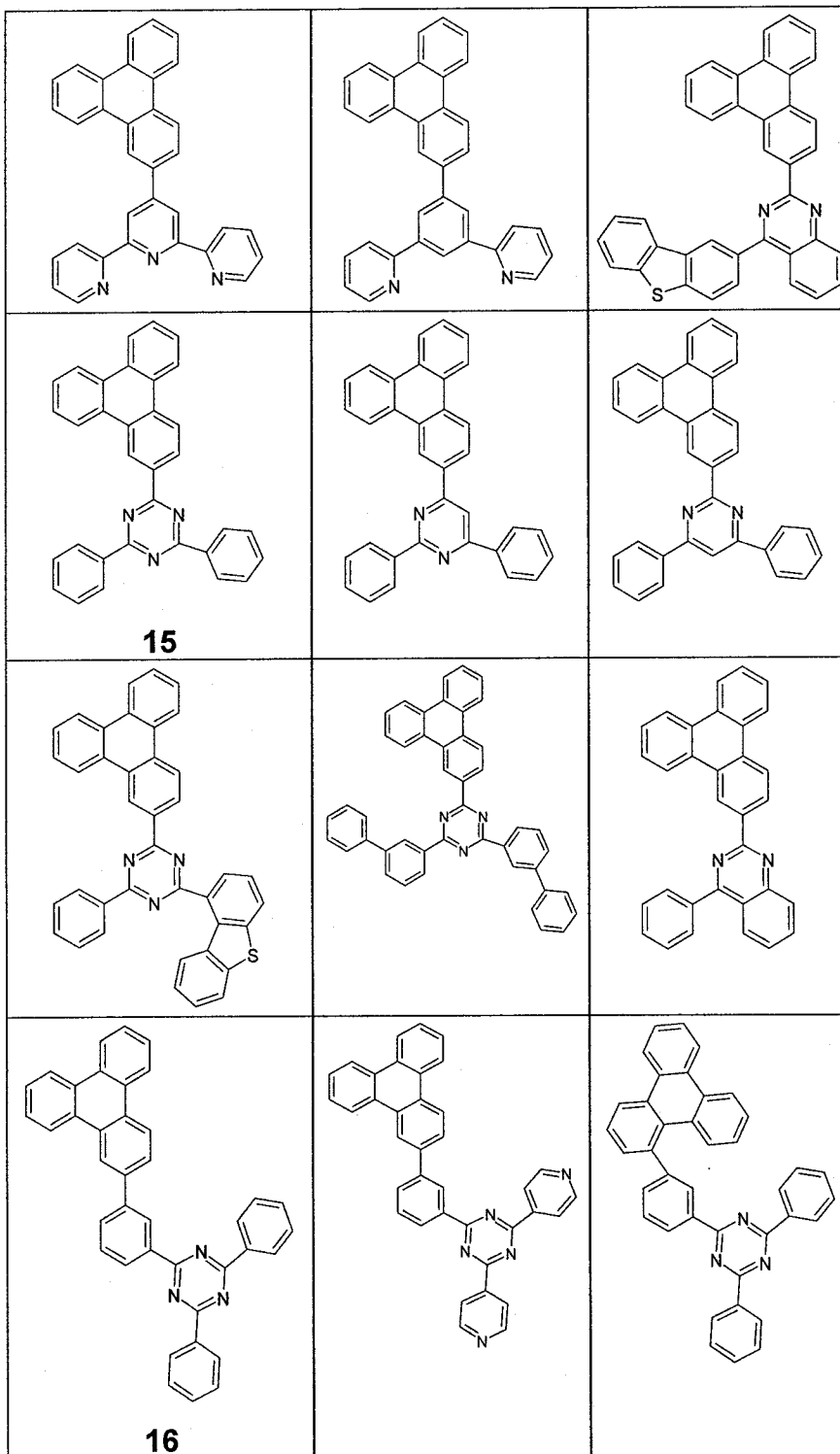
【0093】根據本發明選擇之式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之適用化合物的實例為以下顯示於表2之結構。

表 2 :

 <p style="text-align: center;">9</p>	 <p style="text-align: center;">10</p>	
		
		
		
		

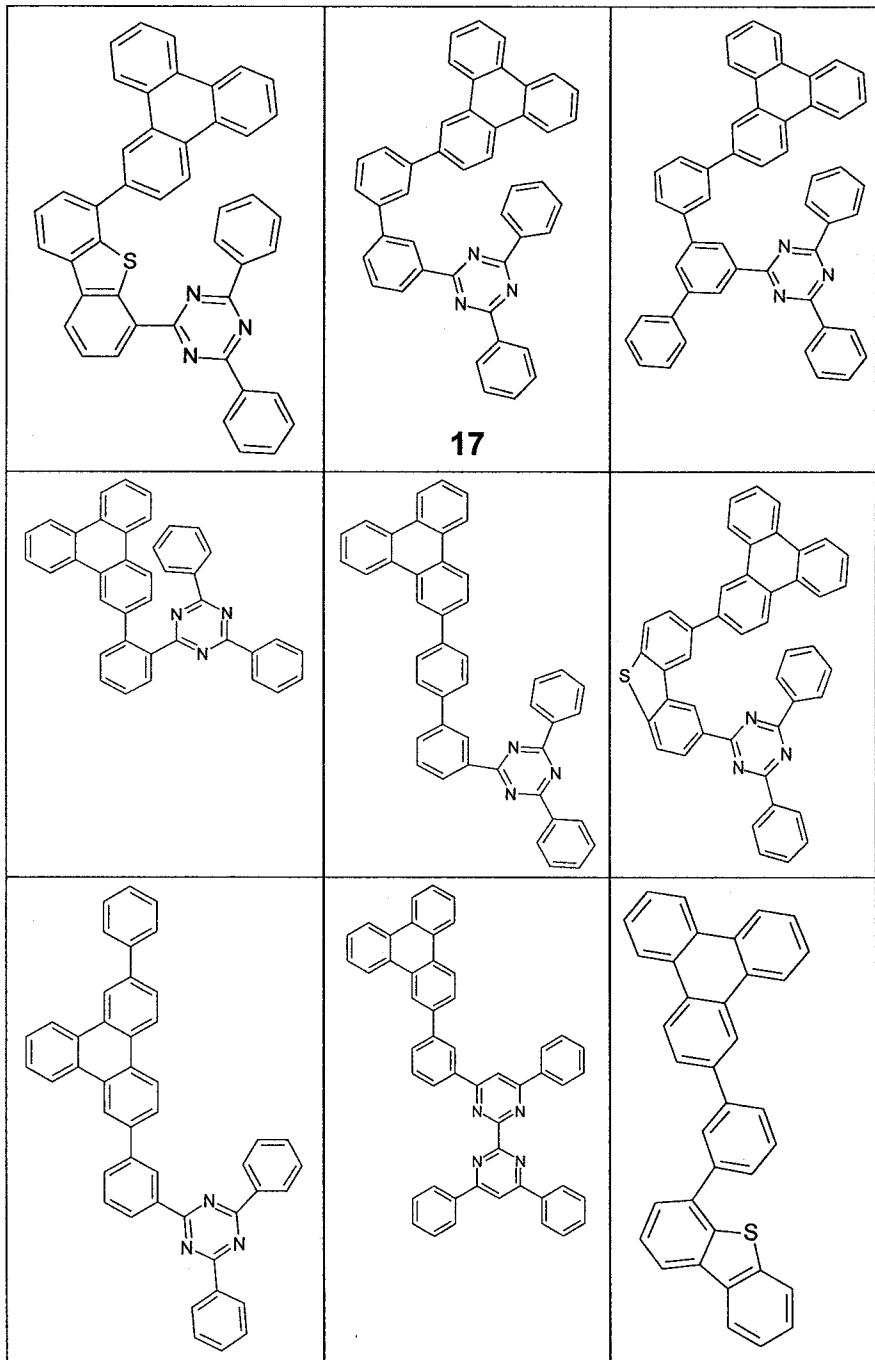


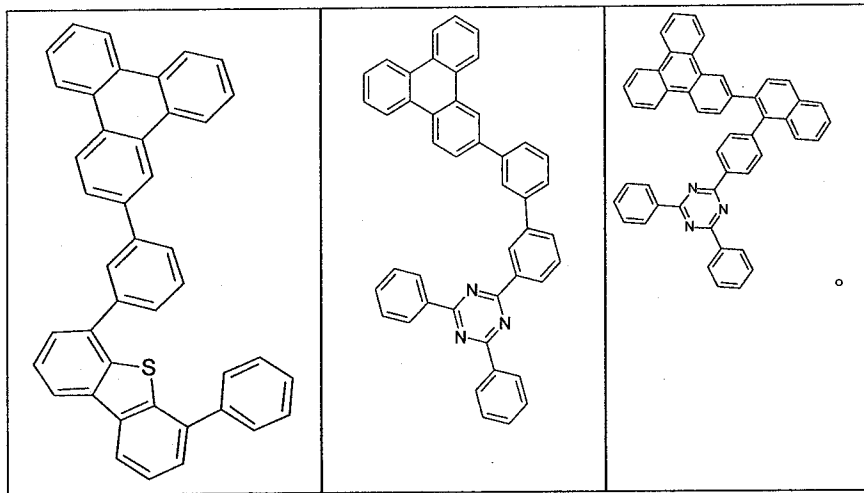




15

16



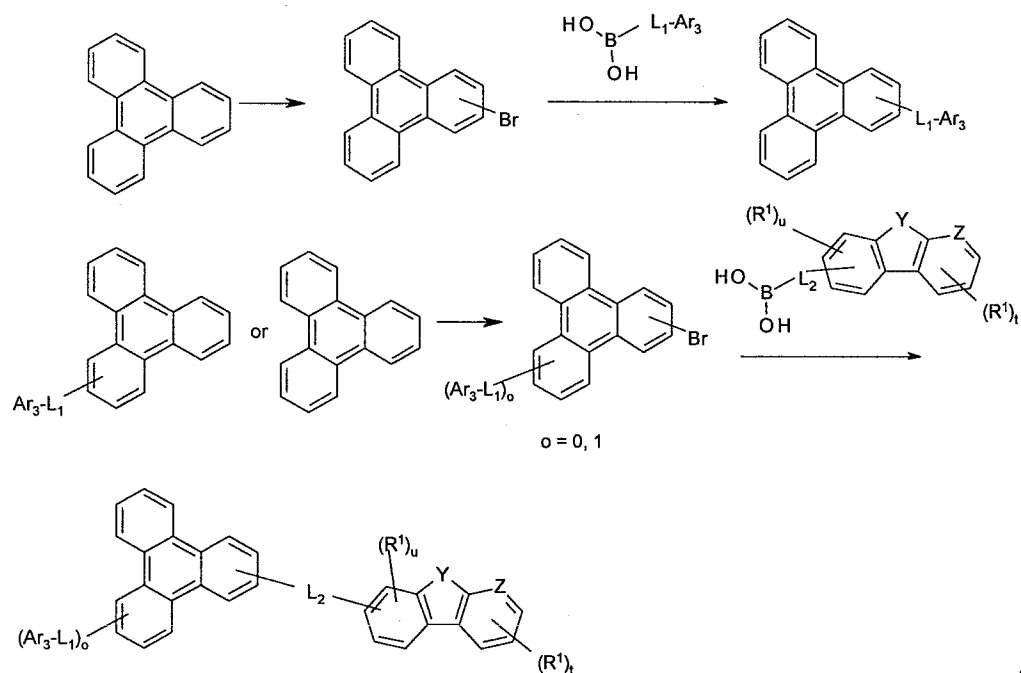


【0094】根據本發明選擇之式(2)、(2a)、(2b)或(2c)之化合物的特別適合實例係為如上述之化合物9至17。

【0095】式(2)之化合物或式(2a)、(2b)及(2c)之較佳化合物及來自表2之化合物的製備為熟習本領域之人士已知。該等化合物可藉由熟習本領域之人士已知的合成步驟製備，例如溴化、Suzuki偶合。聯伸三苯衍生物之製備亦描述於例如WO 2009/021126或US 2015340618。

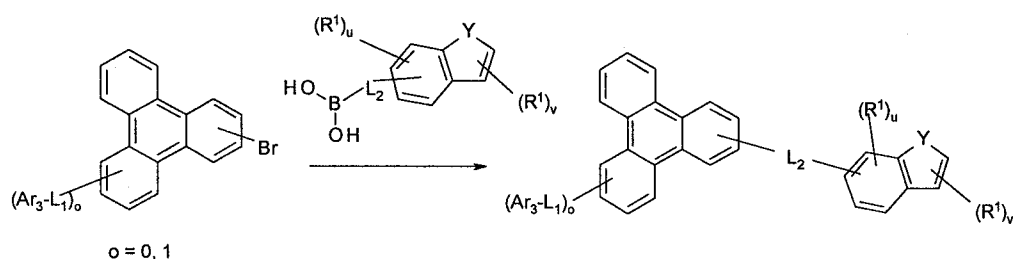
式(2)之化合物或式(2a)之較佳化合物可例如根據反應式3製備。反應條件為熟習本領域之人士已知。聯伸三苯之溴化係描述於例如US20060280965。Suzuki偶合係描述於例如WO 2009/021126。

反應式3：



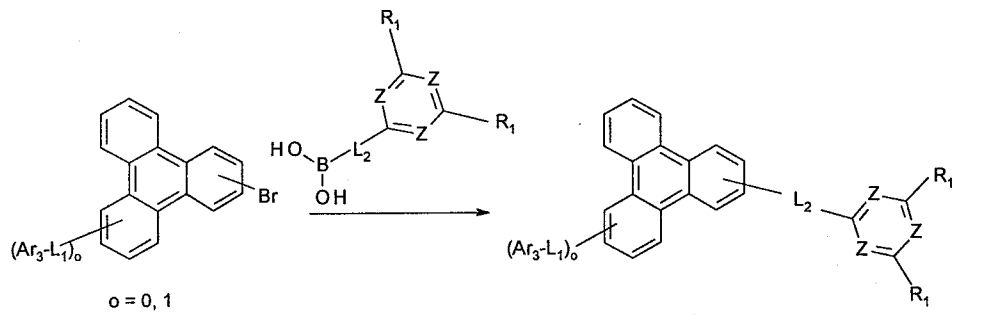
【0096】式(2)之化合物或式(2b)之較佳化合物可例如根據反應式4製備。反應條件為熟習本領域之人士已知。聯伸三苯之溴化係描述於例如US20060280965。Suzuki偶合係描述於例如WO 2009/021126。

反應式4：



【0097】式(2)之化合物或式(2c)之較佳化合物可例如根據反應式5製備。反應條件為熟習本領域之人士已知。聯伸三苯之溴化係描述於例如US20060280965。Suzuki偶合係描述於例如WO 2009/021126。

反應式5：



【0098】反應式3至5中所使用的全部符號及指數具有如上述或描述為較佳之相同意義。

合成之進一步細節及其他文獻參考資料係於實施例中引用。

【0099】上述式(1)及(1a)至(1j)之主體材料及描述為來自表1之化合物較佳者的其實施態樣可根據本發明視需要與式(2)、(2a)、(2b)及(2c)之特定主體材料及描述為來自表2之化合物較佳者的其實施態樣組合。

【0100】用於本發明之組成物的式(1)之主體材料與式(2)之主體材料的特佳混合物係藉由組合來自表1之化合物1至8與來自表2之化合物而獲得。

【0101】式(1)之主體材料與式(2)之主體材料的最佳混合物M1至M72係藉由組合表1所述之化合物1至8與表2所述之化合物9至17而獲得，如下表3所示。

表3：

M1	1	9	M2	1	10
M3	1	11	M4	1	12

M5	1	13	M6	1	14
M7	1	15	M8	1	16
M9	1	17	M10	2	9
M11	2	10	M12	2	11
M13	2	12	M14	2	13
M15	2	14	M16	2	15
M17	2	16	M18	2	17
M19	3	9	M20	3	10
M21	3	11	M22	3	12
M23	3	13	M24	3	14
M25	3	15	M26	3	16
M27	3	17	M28	4	9
M29	4	10	M30	4	11
M31	4	12	M32	4	13
M33	4	14	M34	4	15
M35	4	16	M36	4	17
M37	5	9	M38	5	10
M39	5	11	M40	5	12
M41	5	13	M42	5	14
M43	5	15	M44	5	16
M45	5	17	M46	6	9
M47	6	10	M48	6	11
M49	6	12	M50	6	13
M51	6	14	M52	6	15
M53	6	16	M54	6	17
M55	7	9	M56	7	10
M57	7	11	M58	7	12
M59	7	13	M60	7	14
M61	7	15	M62	7	16
M63	7	17	M64	8	9
M65	8	10	M66	8	11
M67	8	12	M68	8	13
M69	8	14	M70	8	15
M71	8	16	M72	8	17

【0102】如上述或於本發明之組成物中描述為較佳之式(1)之雙極性主體的濃度以全部組成物為基準計，係在5重量%至90重量%之範圍，較佳係在10重量%至85重量%之範圍，更佳係在20重量%至85重量%之範圍，又更佳係在

30重量%至80重量%之範圍，尤佳係在20重量%至60重量%之範圍，以及最佳係在30重量%至50重量%之範圍。

【0103】如上述或於組成物中描述為較佳之式(2)之聯伸三苯衍生物的濃度以全部組成物為基準計，係在10重量%至95重量%之範圍，較佳係在15重量%至90重量%之範圍，更佳係在15重量%至80重量%之範圍，又更佳係在20重量%至70重量%之範圍，尤佳係在40重量%至80重量%之範圍，以及最佳係在50重量%至70重量%之範圍。

【0104】於更佳實施態樣中，本發明之組成物連同如上述或描述為較佳之至少一種式(1)之化合物作為雙極性主體，及如上述或描述為較佳之至少一種式(2)之化合物作為未帶電共主體，亦可包含其他化合物，尤其是有機功能性材料。於該實施態樣中，該組成物較佳係如下文於電子裝置中形成有機層。

【0105】因此，本發明亦關於連同上述式(1)及(2)亦包含至少一種選自由下列所組成之群組的其他化合物之組成物：電洞注入材料、電洞傳輸材料、電洞阻擋材料、寬能帶隙材料、螢光發射體、磷光發射體、主體材料、電子阻擋材料、電子傳輸材料、電子注入材料、n-摻雜劑及p-摻雜劑。對於熟習本領域之人士而言，從為此種人士已知的眾多材料選出該等化合物毫無任何困難。

【0106】本文中之n-摻雜劑應理解為意指還原劑，即，電子供體。n-摻雜劑之較佳實例為 $W(hpp)_4$ 、根據WO 2005/086251 A2之其他富電子金屬錯合物、P=N化合物(例

如，WO 2012/175535 A1、WO 2012/175219 A1)、伸萘基
碳二醯亞胺(例如，WO 2012/168358 A1)、萸(例如，WO
2012/031735 A1)、自由基及雙自由基(例如，EP 1837926
A1、WO 2007/107306 A1)、吡啶(例如，EP 2452946 A1、
EP 2463927 A1)、N-雜環化合物(例如，WO 2009/000237
A1)及吡啶以及啡啉(例如，US 2007/145355 A1)。

【0107】本文中 p-摻雜劑應理解為意指氧化劑，
即，電子受體。p-摻雜劑之較佳實例為 F₄-TCNQ、F₆-
TNAP、NDP-2 (得自 Novaled)、NDP-9 (得自 Novaled)、醌
(例如，EP 1538684 A1、WO 2006/081780 A1、WO
2009/003455 A1、WO 2010/097433 A1)、輻向烯(radialene)
(例如，EP 1988587 A1、US 2010/102709 A1、EP 2180029
A1、WO 2011/131185 A1、WO 2011134458 A1、US
2012/223296 A1)、含 S 過渡金屬錯合物(例如，WO
2007/134873 A1、WO 2008/061517 A2、WO 2008/061518
A2、DE 102008051737 A1、WO 2009/089821 A1、US
2010/096600 A1)、雙咪唑(例如，WO 2008/138580 A1)、
酞青(例如，WO 2008/058525 A2)、博拉-四吡戊搭烯(bora-
tetraazapentalene)(例如，WO 2007/115540 A1)、富勒烯
(fullerene)(例如，DE 102010046040 A1)及主族鹵化物(例
如，WO 2008/128519 A2)。

【0108】本文中應理解寬能帶隙材料意指在 US
7,294,849 揭示範圍內之材料，其特徵為能帶隙為至少 3.5
eV，應瞭解能帶隙意指介於材料的 HOMO 及 LUMO 能之間

的能隙。

【0109】較佳係包含式(1)之雙極性主體及式(2)之未帶電共主體的本發明組成物另外包含至少一種發光化合物或發射體，特佳係磷光發射體。

【0110】用語「磷光發射體」通常涵蓋經由自旋禁止躍遷自具有高自旋多重性之受激態(即，自旋態 > 1)發出光，例如經由自三重態或具有甚至更高之自旋量子數之狀態(例如五重態)躍遷發出光的化合物。此較佳係理解為意指自三重態之躍遷。

【0111】適合的磷光發射體(= 三重態發射體)尤其為如下之化合物：其於適當受激時發光(較佳在可見範圍內)以及亦含有至少一個原子序大於20，較佳大於38以及小於84，更佳大於56以及小於80之原子，尤其是具有該原子序之金屬。所使用之較佳磷光發射體為含有銅、鉬、鎢、銻、鈦、鐵、銻、銻、鈹、鉑、銀、金或鎘的化合物，尤其是含有銻或鉑的化合物。在本發明內容中，含有上述金屬之所有發光化合物被視為磷光發射體。

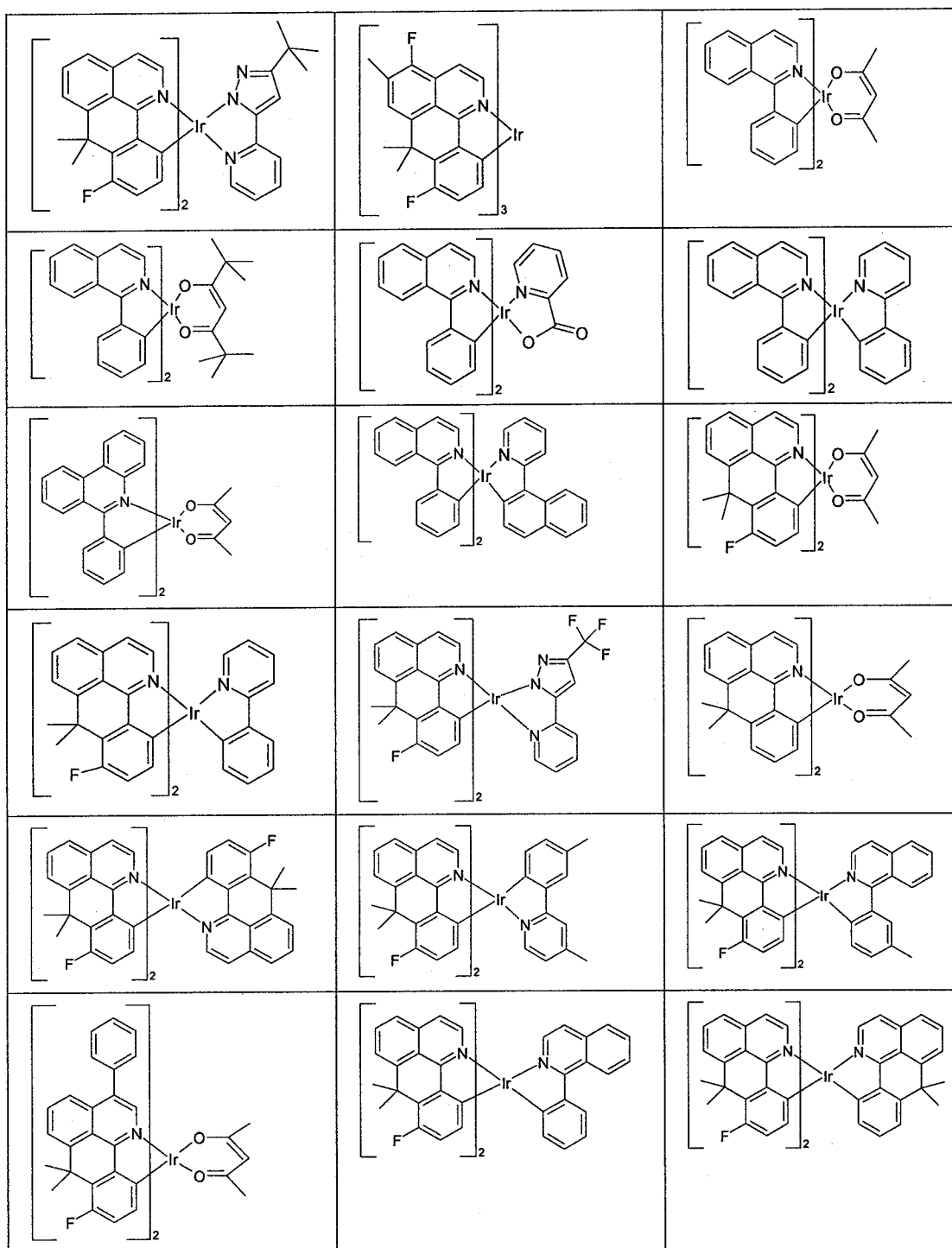
【0112】通常，用於根據先前技術以及為熟習有機電致發光裝置技術領域之人士已知的磷光OLED之全部磷光錯合物均適用。

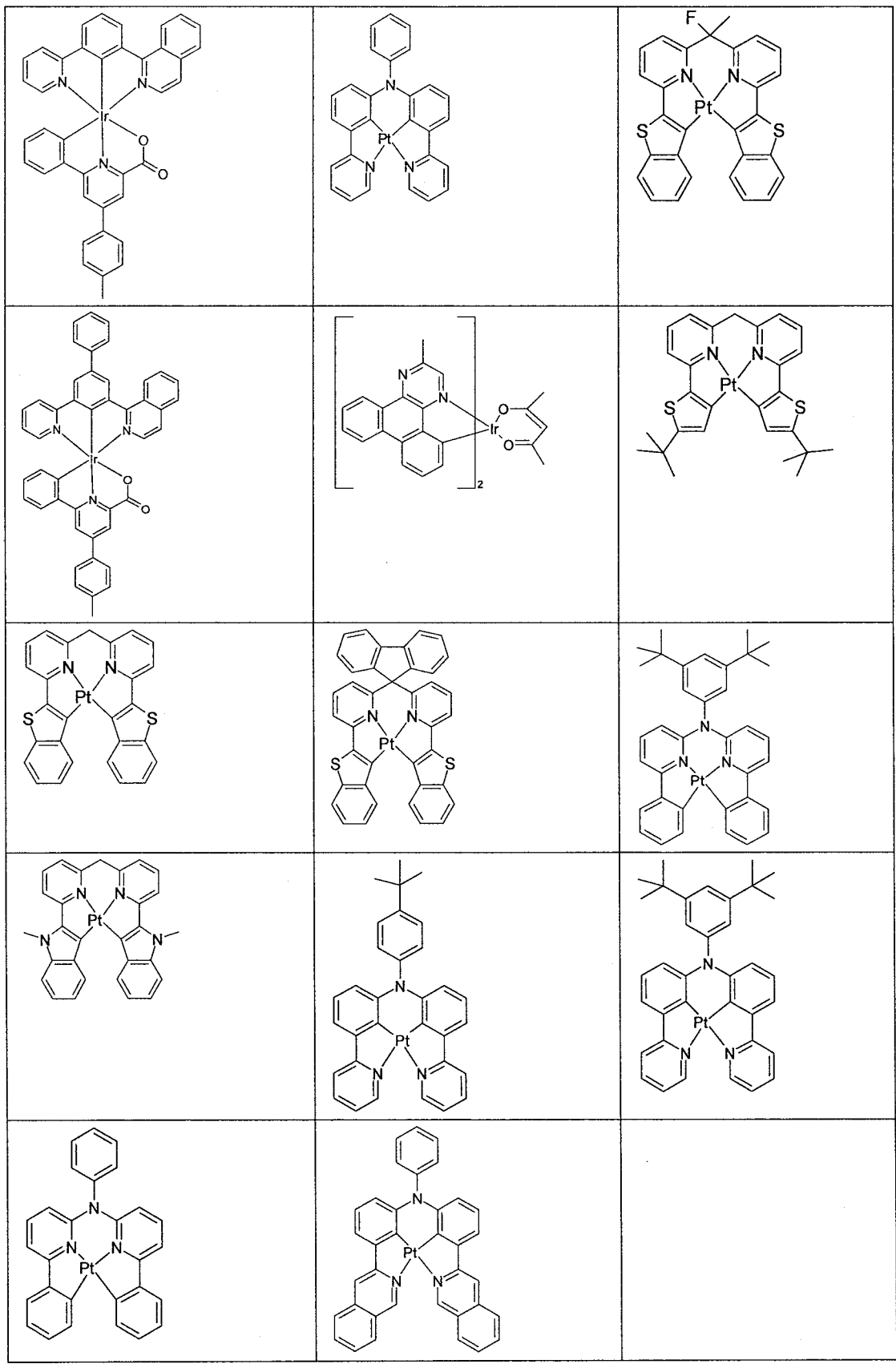
【0113】上述發射體之實例可見下列申請案：WO 2016/015815、WO 00/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373、US

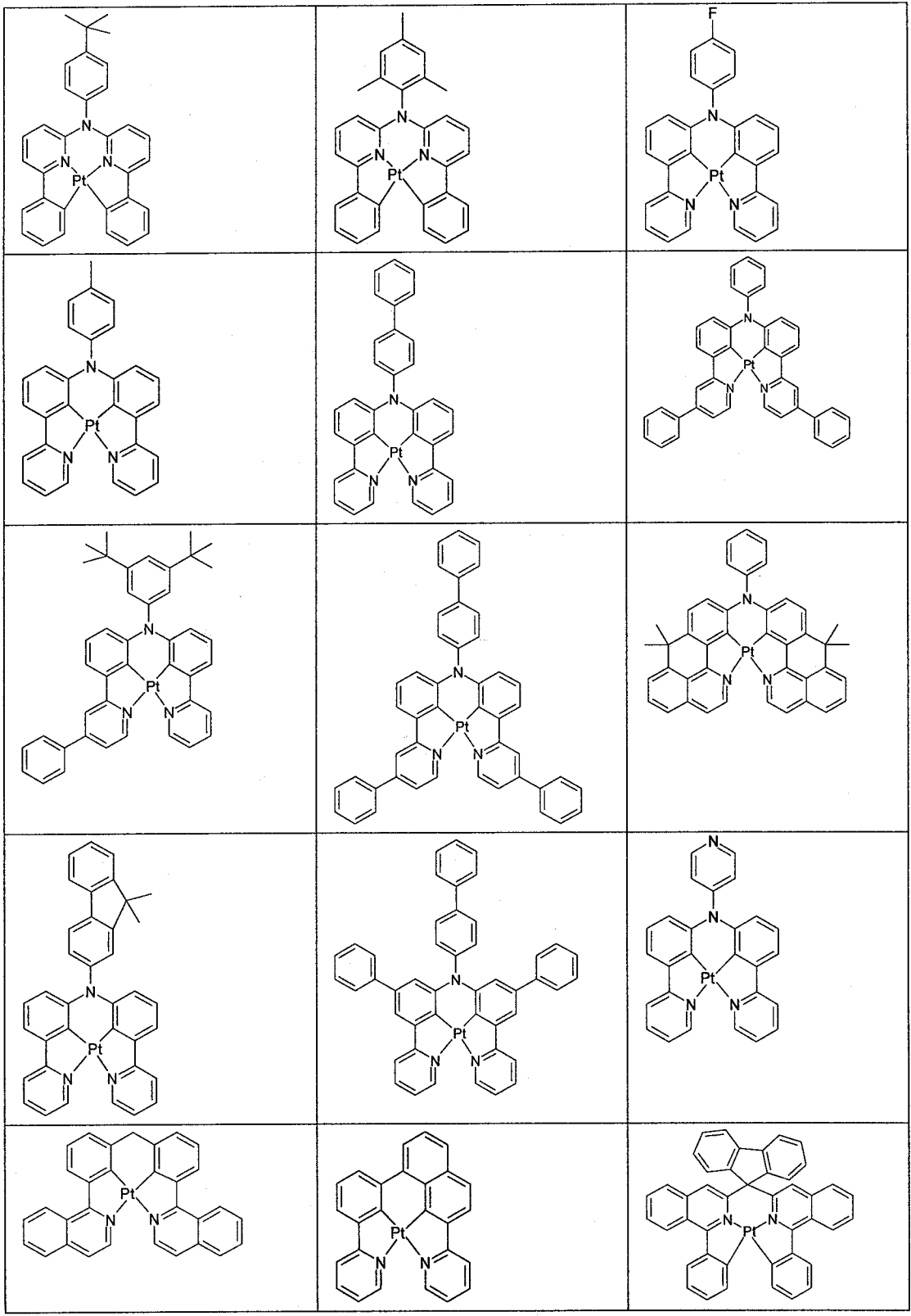
2005/0258742、WO 2009/146770、WO 2010/015307、WO 2010/031485、WO 2010/054731、WO 2010/054728、WO 2010/086089、WO 2010/099852、WO 2010/102709、WO 2011/032626、WO 2011/066898、WO 2011/157339、WO 2012/007086、WO 2014/008982、WO 2014/023377、WO 2014/094961、WO 2014/094960、WO 2015/036074、WO 2015/104045、WO 2015/117718、WO 2016/015815、WO 2016/124304、WO 2017/032439、WO 2015/036074、WO 2015/117718及WO 2016/015815。

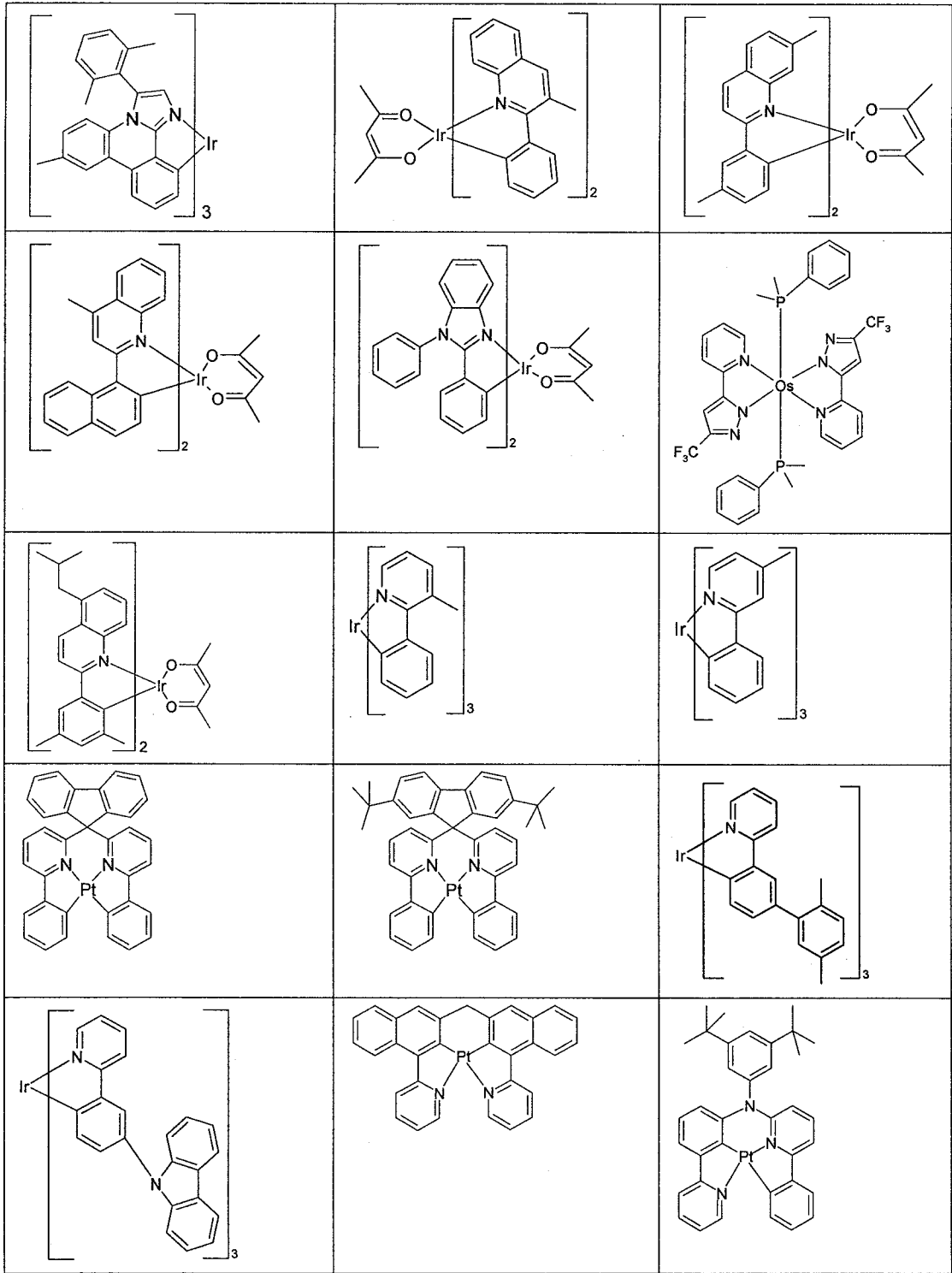
【0114】磷光發射體之較佳實例係列於下表4。

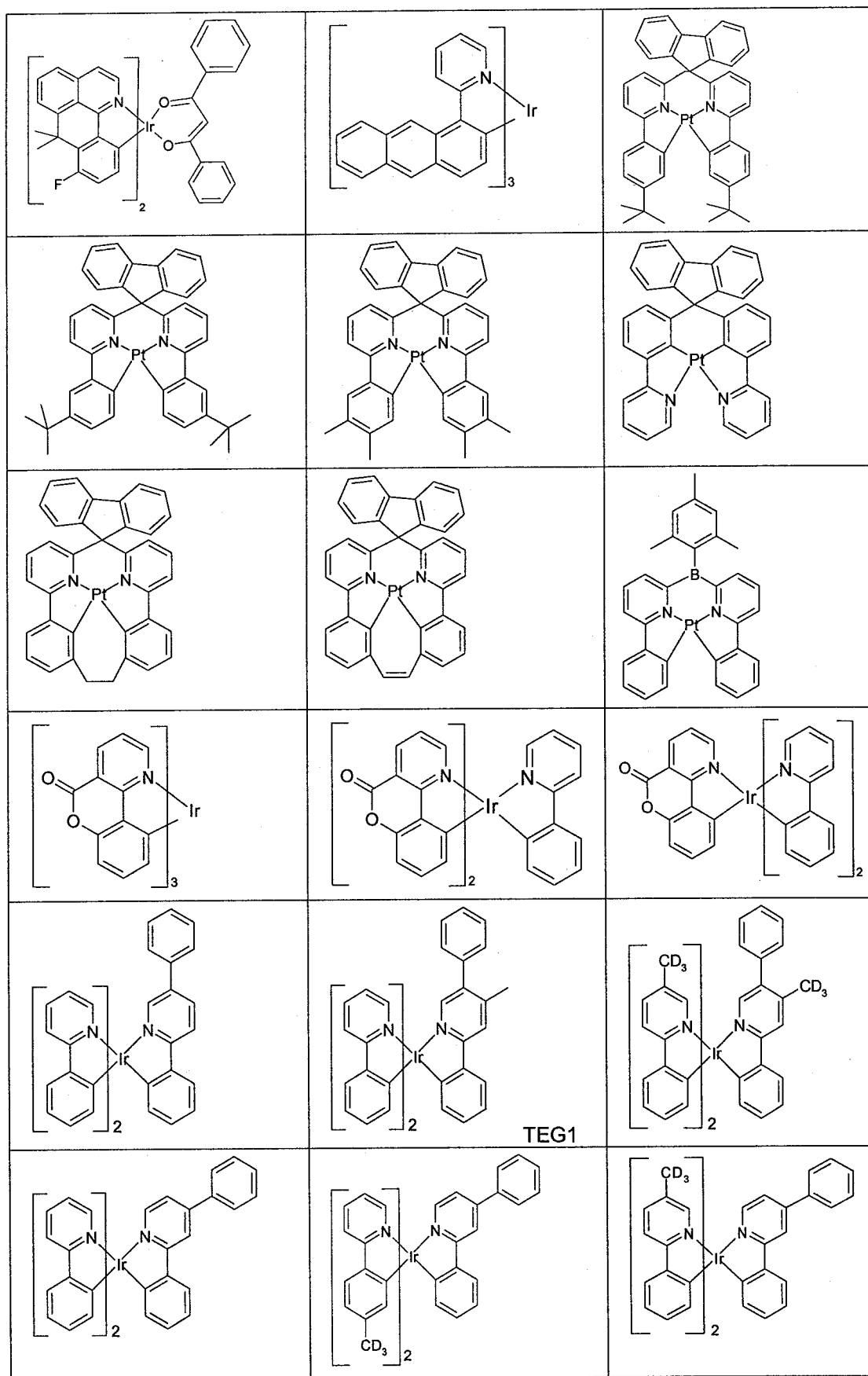
表 4:



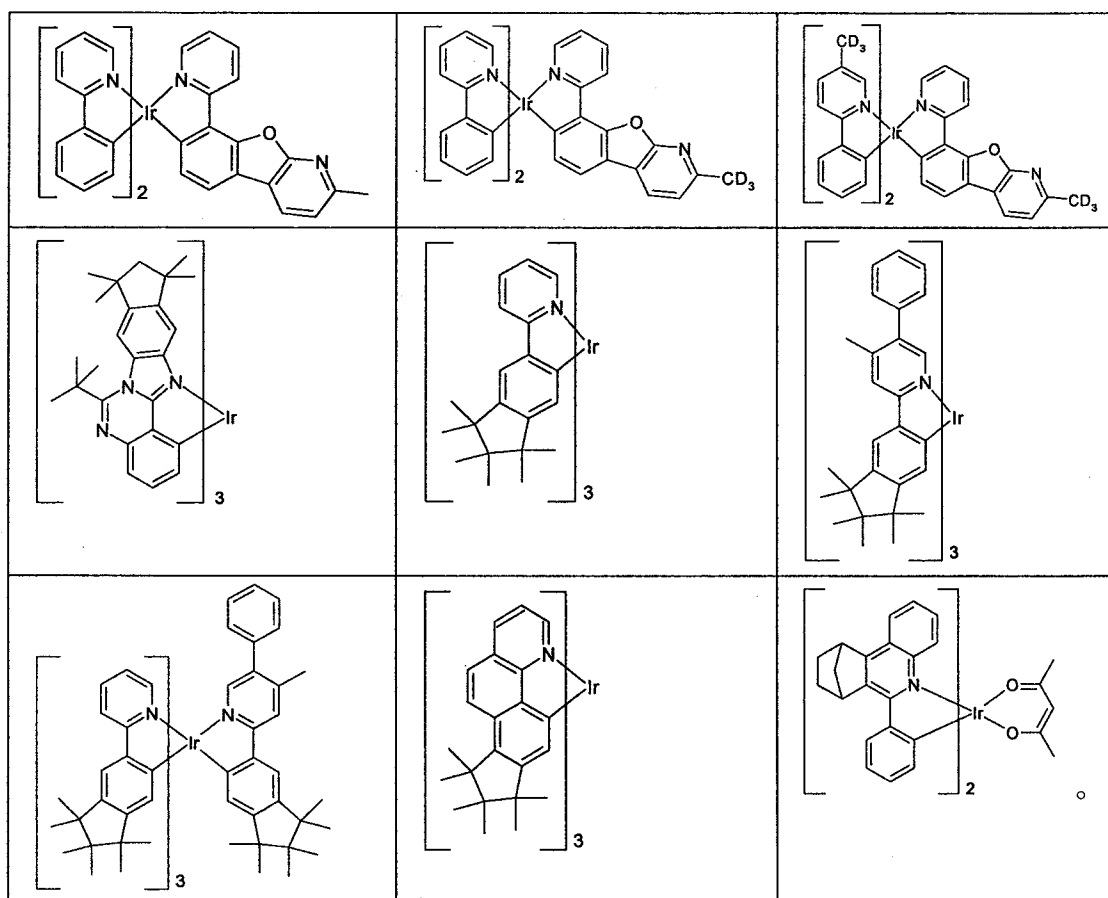








TEG1



【0115】磷光多足發射體 (polyodal emitter) 之較佳實例係列於下表 5。

表 5:

CAS-1269508-30-6	CAS-1989601-68-4	CAS-1989602-19-8	CAS-1989602-70-1
CAS-1215692-34-4	CAS-1989601-69-5	CAS-1989602-20-1	CAS-1989602-71-2
CAS-1370364-40-1	CAS-1989601-70-8	CAS-1989602-21-2	CAS-1989602-72-3
CAS-1370364-42-3	CAS-1989601-71-9	CAS-1989602-22-3	CAS-1989602-73-4
CAS-1989600-74-9	CAS-1989601-72-0	CAS-1989602-23-4	CAS-1989602-74-5
CAS-1989600-75-0	CAS-1989601-73-1	CAS-1989602-24-5	CAS-1989602-75-6
CAS-1989600-77-2	CAS-1989601-74-2	CAS-1989602-25-6	CAS-1989602-76-7
CAS-1989600-78-3	CAS-1989601-75-3	CAS-1989602-26-7	CAS-1989602-77-8
CAS-1989600-79-4	CAS-1989601-76-4	CAS-1989602-27-8	CAS-1989602-78-9
CAS-1989600-82-9	CAS-1989601-77-5	CAS-1989602-28-9	CAS-1989602-79-0
CAS-1989600-83-0	CAS-1989601-78-6	CAS-1989602-29-0	CAS-1989602-80-3
CAS-1989600-84-1	CAS-1989601-79-7	CAS-1989602-30-3	CAS-1989602-82-5
CAS-1989600-85-2	CAS-1989601-80-0	CAS-1989602-31-4	CAS-1989602-84-7
CAS-1989600-86-3	CAS-1989601-81-1	CAS-1989602-32-5	CAS-1989602-85-8
CAS-1989600-87-4	CAS-1989601-82-2	CAS-1989602-33-6	CAS-1989602-86-9
CAS-1989600-88-5	CAS-1989601-83-3	CAS-1989602-34-7	CAS-1989602-87-0
CAS-1989600-89-6	CAS-1989601-84-4	CAS-1989602-35-8	CAS-1989602-88-1
CAS-1989601-11-7	CAS-1989601-85-5	CAS-1989602-36-9	CAS-1989604-00-3

CAS-1989601-23-1	CAS-1989601-86-6	CAS-1989602-37-0	CAS-1989604-01-4
CAS-1989601-26-4	CAS-1989601-87-7	CAS-1989602-38-1	CAS-1989604-02-5
CAS-1989601-28-6	CAS-1989601-88-8	CAS-1989602-39-2	CAS-1989604-03-6
CAS-1989601-29-7	CAS-1989601-89-9	CAS-1989602-40-5	CAS-1989604-04-7
CAS-1989601-33-3	CAS-1989601-90-2	CAS-1989602-41-6	CAS-1989604-05-8
CAS-1989601-40-2	CAS-1989601-91-3	CAS-1989602-42-7	CAS-1989604-06-9
CAS-1989601-41-3	CAS-1989601-92-4	CAS-1989602-43-8	CAS-1989604-07-0
CAS-1989601-42-4	CAS-1989601-93-5	CAS-1989602-44-9	CAS-1989604-08-1
CAS-1989601-43-5	CAS-1989601-94-6	CAS-1989602-45-0	CAS-1989604-09-2
CAS-1989601-44-6	CAS-1989601-95-7	CAS-1989602-46-1	CAS-1989604-10-5
CAS-1989601-45-7	CAS-1989601-96-8	CAS-1989602-47-2	CAS-1989604-11-6
CAS-1989601-46-8	CAS-1989601-97-9	CAS-1989602-48-3	CAS-1989604-13-8
CAS-1989601-47-9	CAS-1989601-98-0	CAS-1989602-49-4	CAS-1989604-14-9
CAS-1989601-48-0	CAS-1989601-99-1	CAS-1989602-50-7	CAS-1989604-15-0
CAS-1989601-49-1	CAS-1989602-00-7	CAS-1989602-51-8	CAS-1989604-16-1
CAS-1989601-50-4	CAS-1989602-01-8	CAS-1989602-52-9	CAS-1989604-17-2
CAS-1989601-51-5	CAS-1989602-02-9	CAS-1989602-53-0	CAS-1989604-18-3
CAS-1989601-52-6	CAS-1989602-03-0	CAS-1989602-54-1	CAS-1989604-19-4
CAS-1989601-53-7	CAS-1989602-04-1	CAS-1989602-55-2	CAS-1989604-20-7
CAS-1989601-54-8	CAS-1989602-05-2	CAS-1989602-56-3	CAS-1989604-21-8
CAS-1989601-55-9	CAS-1989602-06-3	CAS-1989602-57-4	CAS-1989604-22-9
CAS-1989601-56-0	CAS-1989602-07-4	CAS-1989602-58-5	CAS-1989604-23-0
CAS-1989601-57-1	CAS-1989602-08-5	CAS-1989602-59-6	CAS-1989604-24-1
CAS-1989601-58-2	CAS-1989602-09-6	CAS-1989602-60-9	CAS-1989604-25-2
CAS-1989601-59-3	CAS-1989602-10-9	CAS-1989602-61-0	CAS-1989604-26-3
CAS-1989601-60-6	CAS-1989602-11-0	CAS-1989602-62-1	CAS-1989604-27-4
CAS-1989601-61-7	CAS-1989602-12-1	CAS-1989602-63-2	CAS-1989604-28-5
CAS-1989601-62-8	CAS-1989602-13-2	CAS-1989602-64-3	CAS-1989604-29-6
CAS-1989601-63-9	CAS-1989602-14-3	CAS-1989602-65-4	CAS-1989604-30-9
CAS-1989601-64-0	CAS-1989602-15-4	CAS-1989602-66-5	CAS-1989604-31-0
CAS-1989601-65-1	CAS-1989602-16-5	CAS-1989602-67-6	CAS-1989604-32-1
CAS-1989601-66-2	CAS-1989602-17-6	CAS-1989602-68-7	CAS-1989604-33-2
CAS-1989601-67-3	CAS-1989602-18-7	CAS-1989602-69-8	CAS-1989604-34-3
CAS-1989604-35-4	CAS-1989604-88-7	CAS-1989605-52-8	CAS-1989606-07-6
CAS-1989604-36-5	CAS-1989604-89-8	CAS-1989605-53-9	CAS-1989606-08-7
CAS-1989604-37-6	CAS-1989604-90-1	CAS-1989605-54-0	CAS-1989606-09-8
CAS-1989604-38-7	CAS-1989604-92-3	CAS-1989605-55-1	CAS-1989606-10-1
CAS-1989604-39-8	CAS-1989604-93-4	CAS-1989605-56-2	CAS-1989606-11-2
CAS-1989604-40-1	CAS-1989604-94-5	CAS-1989605-57-3	CAS-1989606-12-3
CAS-1989604-41-2	CAS-1989604-95-6	CAS-1989605-58-4	CAS-1989606-13-4
CAS-1989604-42-3	CAS-1989604-96-7	CAS-1989605-59-5	CAS-1989606-14-5
CAS-1989604-43-4	CAS-1989604-97-8	CAS-1989605-61-9	CAS-1989606-15-6
CAS-1989604-45-6	CAS-1989605-09-5	CAS-1989605-62-0	CAS-1989606-16-7
CAS-1989604-46-7	CAS-1989605-10-8	CAS-1989605-63-1	CAS-1989606-17-8
CAS-1989604-47-8	CAS-1989605-11-9	CAS-1989605-64-2	CAS-1989606-18-9
CAS-1989604-48-9	CAS-1989605-13-1	CAS-1989605-65-3	CAS-1989606-19-0
CAS-1989604-49-0	CAS-1989605-14-2	CAS-1989605-66-4	CAS-1989606-20-3
CAS-1989604-50-3	CAS-1989605-15-3	CAS-1989605-67-5	CAS-1989606-21-4
CAS-1989604-52-5	CAS-1989605-16-4	CAS-1989605-68-6	CAS-1989606-22-5
CAS-1989604-53-6	CAS-1989605-17-5	CAS-1989605-69-7	CAS-1989606-23-6
CAS-1989604-54-7	CAS-1989605-18-6	CAS-1989605-70-0	CAS-1989606-24-7
CAS-1989604-55-8	CAS-1989605-19-7	CAS-1989605-71-1	CAS-1989606-26-9
CAS-1989604-56-9	CAS-1989605-20-0	CAS-1989605-72-2	CAS-1989606-27-0
CAS-1989604-57-0	CAS-1989605-21-1	CAS-1989605-73-3	CAS-1989606-28-1

CAS-1989604-58-1	CAS-1989605-22-2	CAS-1989605-74-4	CAS-1989606-29-2
CAS-1989604-59-2	CAS-1989605-23-3	CAS-1989605-75-5	CAS-1989606-30-5
CAS-1989604-60-5	CAS-1989605-24-4	CAS-1989605-76-6	CAS-1989606-31-6
CAS-1989604-61-6	CAS-1989605-25-5	CAS-1989605-77-7	CAS-1989606-32-7
CAS-1989604-62-7	CAS-1989605-26-6	CAS-1989605-78-8	CAS-1989606-33-8
CAS-1989604-63-8	CAS-1989605-27-7	CAS-1989605-79-9	CAS-1989606-34-9
CAS-1989604-64-9	CAS-1989605-28-8	CAS-1989605-81-3	CAS-1989606-35-0
CAS-1989604-65-0	CAS-1989605-29-9	CAS-1989605-82-4	CAS-1989606-36-1
CAS-1989604-66-1	CAS-1989605-30-2	CAS-1989605-83-5	CAS-1989606-37-2
CAS-1989604-67-2	CAS-1989605-31-3	CAS-1989605-84-6	CAS-1989606-38-3
CAS-1989604-68-3	CAS-1989605-32-4	CAS-1989605-85-7	CAS-1989606-39-4
CAS-1989604-69-4	CAS-1989605-33-5	CAS-1989605-86-8	CAS-1989606-40-7
CAS-1989604-70-7	CAS-1989605-34-6	CAS-1989605-87-9	CAS-1989606-41-8
CAS-1989604-71-8	CAS-1989605-35-7	CAS-1989605-88-0	CAS-1989606-42-9
CAS-1989604-72-9	CAS-1989605-36-8	CAS-1989605-89-1	CAS-1989606-43-0
CAS-1989604-73-0	CAS-1989605-37-9	CAS-1989605-90-4	CAS-1989606-44-1
CAS-1989604-74-1	CAS-1989605-38-0	CAS-1989605-91-5	CAS-1989606-45-2
CAS-1989604-75-2	CAS-1989605-39-1	CAS-1989605-92-6	CAS-1989606-46-3
CAS-1989604-76-3	CAS-1989605-40-4	CAS-1989605-93-7	CAS-1989606-48-5
CAS-1989604-77-4	CAS-1989605-41-5	CAS-1989605-94-8	CAS-1989606-49-6
CAS-1989604-78-5	CAS-1989605-42-6	CAS-1989605-95-9	CAS-1989606-53-2
CAS-1989604-79-6	CAS-1989605-43-7	CAS-1989605-96-0	CAS-1989606-55-4
CAS-1989604-80-9	CAS-1989605-44-8	CAS-1989605-97-1	CAS-1989606-56-5
CAS-1989604-81-0	CAS-1989605-45-9	CAS-1989605-98-2	CAS-1989606-61-2
CAS-1989604-82-1	CAS-1989605-46-0	CAS-1989605-99-3	CAS-1989606-62-3
CAS-1989604-83-2	CAS-1989605-47-1	CAS-1989606-00-9	CAS-1989606-63-4
CAS-1989604-84-3	CAS-1989605-48-2	CAS-1989606-01-0	CAS-1989606-67-8
CAS-1989604-85-4	CAS-1989605-49-3	CAS-1989606-04-3	CAS-1989606-69-0
CAS-1989604-86-5	CAS-1989605-50-6	CAS-1989606-05-4	CAS-1989606-70-3
CAS-1989604-87-6	CAS-1989605-51-7	CAS-1989606-06-5	CAS-1989606-74-7
CAS-1989658-39-0	CAS-2088184-56-7	CAS-2088185-07-1	CAS-2088185-66-2
CAS-1989658-41-4	CAS-2088184-57-8	CAS-2088185-08-2	CAS-2088185-67-3
CAS-1989658-43-6	CAS-2088184-58-9	CAS-2088185-09-3	CAS-2088185-68-4
CAS-1989658-47-0	CAS-2088184-59-0	CAS-2088185-10-6	CAS-2088185-69-5
CAS-1989658-49-2	CAS-2088184-60-3	CAS-2088185-11-7	CAS-2088185-70-8
CAS-2088184-07-8	CAS-2088184-61-4	CAS-2088185-12-8	CAS-2088185-71-9
CAS-2088184-08-9	CAS-2088184-62-5	CAS-2088185-13-9	CAS-2088185-72-0
CAS-2088184-09-0	CAS-2088184-63-6	CAS-2088185-14-0	CAS-2088185-73-1
CAS-2088184-10-3	CAS-2088184-64-7	CAS-2088185-15-1	CAS-2088185-74-2
CAS-2088184-11-4	CAS-2088184-65-8	CAS-2088185-16-2	CAS-2088185-75-3
CAS-2088184-13-6	CAS-2088184-66-9	CAS-2088185-17-3	CAS-2088185-76-4
CAS-2088184-14-7	CAS-2088184-67-0	CAS-2088185-18-4	CAS-2088185-77-5
CAS-2088184-15-8	CAS-2088184-68-1	CAS-2088185-19-5	CAS-2088185-78-6
CAS-2088184-16-9	CAS-2088184-69-2	CAS-2088185-20-8	CAS-2088185-79-7
CAS-2088184-17-0	CAS-2088184-70-5	CAS-2088185-21-9	CAS-2088185-80-0
CAS-2088184-18-1	CAS-2088184-71-6	CAS-2088185-22-0	CAS-2088185-81-1
CAS-2088184-19-2	CAS-2088184-72-7	CAS-2088185-23-1	CAS-2088185-82-2
CAS-2088184-20-5	CAS-2088184-73-8	CAS-2088185-32-2	CAS-2088185-83-3
CAS-2088184-21-6	CAS-2088184-74-9	CAS-2088185-33-3	CAS-2088185-84-4
CAS-2088184-22-7	CAS-2088184-75-0	CAS-2088185-34-4	CAS-2088185-85-5
CAS-2088184-23-8	CAS-2088184-76-1	CAS-2088185-35-5	CAS-2088185-86-6
CAS-2088184-24-9	CAS-2088184-77-2	CAS-2088185-36-6	CAS-2088185-87-7
CAS-2088184-25-0	CAS-2088184-78-3	CAS-2088185-37-7	CAS-2088185-88-8
CAS-2088184-26-1	CAS-2088184-79-4	CAS-2088185-38-8	CAS-2088185-89-9

CAS-2088184-27-2	CAS-2088184-80-7	CAS-2088185-39-9	CAS-2088185-90-2
CAS-2088184-28-3	CAS-2088184-81-8	CAS-2088185-40-2	CAS-2088185-91-3
CAS-2088184-29-4	CAS-2088184-82-9	CAS-2088185-41-3	CAS-2088185-92-4
CAS-2088184-30-7	CAS-2088184-83-0	CAS-2088185-42-4	CAS-2088185-93-5
CAS-2088184-32-9	CAS-2088184-84-1	CAS-2088185-43-5	CAS-2088185-94-6
CAS-2088184-34-1	CAS-2088184-85-2	CAS-2088185-44-6	CAS-2088185-95-7
CAS-2088184-35-2	CAS-2088184-86-3	CAS-2088185-45-7	CAS-2088185-96-8
CAS-2088184-36-3	CAS-2088184-87-4	CAS-2088185-46-8	CAS-2088185-97-9
CAS-2088184-37-4	CAS-2088184-88-5	CAS-2088185-47-9	CAS-2088185-98-0
CAS-2088184-38-5	CAS-2088184-89-6	CAS-2088185-48-0	CAS-2088185-99-1
CAS-2088184-39-6	CAS-2088184-90-9	CAS-2088185-49-1	CAS-2088186-00-7
CAS-2088184-40-9	CAS-2088184-91-0	CAS-2088185-50-4	CAS-2088186-01-8
CAS-2088184-41-0	CAS-2088184-92-1	CAS-2088185-51-5	CAS-2088186-02-9
CAS-2088184-42-1	CAS-2088184-93-2	CAS-2088185-52-6	CAS-2088195-88-2
CAS-2088184-43-2	CAS-2088184-94-3	CAS-2088185-53-7	CAS-2088195-89-3
CAS-2088184-44-3	CAS-2088184-95-4	CAS-2088185-54-8	CAS-2088195-90-6
CAS-2088184-45-4	CAS-2088184-96-5	CAS-2088185-55-9	CAS-2088195-91-7
CAS-2088184-46-5	CAS-2088184-97-6	CAS-2088185-56-0	CAS-861806-70-4
CAS-2088184-47-6	CAS-2088184-98-7	CAS-2088185-57-1	CAS-1269508-30-6
CAS-2088184-48-7	CAS-2088184-99-8	CAS-2088185-58-2	
CAS-2088184-49-8	CAS-2088185-00-4	CAS-2088185-59-3	
CAS-2088184-50-1	CAS-2088185-01-5	CAS-2088185-60-6	
CAS-2088184-51-2	CAS-2088185-02-6	CAS-2088185-61-7	
CAS-2088184-52-3	CAS-2088185-03-7	CAS-2088185-62-8	
CAS-2088184-53-4	CAS-2088185-04-8	CAS-2088185-63-9	
CAS-2088184-54-5	CAS-2088185-05-9	CAS-2088185-64-0	
CAS-2088184-55-6	CAS-2088185-06-0	CAS-2088185-65-1	

【0116】本發明組成物中，較佳係將任一混合物 M1、M2、M3、M4、M5、M6、M7、M8、M9、M10、M11、M12、M13、M14、M15、M16、M17、M18、M19、M20、M21、M22、M23、M24、M25、M26、M27、M28、M29、M30、M31、M32、M33、M34、M35、M36、M37、M38、M39、M40、M41、M42、M43、M44、M45、M46、M47、M48、M49、M50、M51、M52、M53、M54、M55、M56、M57、M58、M59、M60、M61、M62、M63、M64、M65、M66、M67、M68、M69、M70、M71或M72與表4或5之化合物組合。

【0117】包含至少一種磷光發射體之本發明之組成物

較佳形成紅外線發射或黃光、橙光、紅光、綠光、藍光或紫外線發射層，更佳為綠光發射層。

【0118】此處應理解黃光發射層意指光致發光最大值在540至570 nm範圍內之層。應理解橙光發射層意指光致發光最大值在570至600 nm範圍內之層。應理解紅光發射層意指光致發光最大值在600至750 nm範圍內之層。應理解綠光發射層意指光致發光最大值在490至540 nm範圍內之層。應理解藍光發射層意指光致發光最大值在440至490 nm範圍內之層。該層之光致發光最大值於此處係藉由於室溫下測量厚度為50 nm之層的光致發光光譜來測定，該層具有本發明之組成物，即，包含發射體及基質。

該層之光致發光光譜係例如用市售光致發光光譜儀記錄。

【0119】所選擇之發射體的光致發光光譜通常係於 10^{-5} 莫耳之無氧溶液中，通常於室溫下測量，適用之溶劑為所選擇之發射體以所提及濃度溶解於其中的任何溶劑。特別適用之溶劑通常為甲苯或2-甲基-THF，但亦可為二氯甲烷。測量係用市售光致發光光譜儀進行。以eV計之三重態能T1係從發射體之光致發光光譜測定。首先，測定光致發光光譜之峰值P1max. (以nm計)。然後藉由下式將峰值P1max. (以nm計)轉化成eV： $E(T1, \text{以eV計}) = 1240/E(T1, \text{以nm計}) = 1240/P1max. (\text{以nm計})$ 。

【0120】較佳之磷光發射體因而為紅外線發射體，較佳來自表4或5，其三重態能T₁較佳為~1.9 eV至~1.0 eV。

【0121】較佳之磷光發射體因而為紅光發射體，較佳來自表4或5，其三重態能 T_1 較佳為~2.1 eV至~1.9 eV。

【0122】較佳之磷光發射體因而為黃光發射體，較佳來自表4或5，其三重態能 T_1 較佳為~2.3 eV至~2.1 eV。

【0123】較佳之磷光發射體因而為綠光發射體，較佳來自表4或5，其三重態能 T_1 較佳為~2.5 eV至~2.3 eV。

【0124】較佳之磷光發射體因而為藍光發射體，較佳來自表4或5，其三重態能 T_1 較佳為~3.1 eV至~2.5 eV。

【0125】較佳之磷光發射體因而為紫外線發射體，較佳來自表4或5，其三重態能 T_1 較佳為~4.0 eV至~3.1 eV。

【0126】特佳之磷光發射體因而為綠光發射體，較佳係來自如上述表4或5。

【0127】最佳之磷光發射體因而為綠光發射體，較佳來自表4或5，其三重態能 T_1 較佳為~2.5 eV至~2.3 eV。

【0128】最佳的，選擇如上述較佳來自表4或5之綠光發射體用於本發明之組成物或本發明之發射層。

【0129】較佳之螢光發射體係選自芳基胺之類別。應理解本發明內容中之芳基胺或或芳族胺意指含有三個直接鍵結至氮的經取代或未經取代之芳族或雜芳族環系統的化合物。較佳的，此等芳族或雜芳族環系統中至少一者為稠合環系統，更佳係具有至少14個環原子。此等之較佳實例為芳族蔥胺、芳族蔥二胺、芳族芘胺、芳族芘二胺、芳族萸胺或芳族萸二胺。應理解芳族蔥胺意指一個二芳胺基係直接鍵結至蔥基(較佳係在9位)之化合物。應理解芳族蔥

二胺意指兩個二芳胺基係直接鍵結至蔥基(較佳係在9,10位)之化合物。芳族芘胺、芘二胺、萘胺萘胺及萘二胺係類似地定義，其中二芳胺基較佳係在1位或在1,6位鍵結至芘。更佳之螢光發射體為 茚并芘胺或茚并芘二胺，例如根據WO 2006/108497或WO 2006/122630；苯并茚并芘胺或苯并茚并芘二胺，例如根據WO 2008/006449；及二苯并茚并芘胺或二苯并茚并芘二胺，例如根據WO 2007/140847；及具有稠合芳基之茚并芘衍生物，揭示於WO 2010/012328。

【0130】 在本發明之更佳實施態樣中，本發明之組成物係用作混合基質系統之組分。該混合基質系統較佳包含三或四種不同基質材料，更佳係三種不同基質材料(換言之，除本發明組成物以外之另外的基質組分)。可與本發明組成物併用作為混合基質系統中之基質組分的適用基質材料之實例係選自寬能帶隙材料、電子傳輸材料(ETM)及電洞傳輸材料(HTM)。

【0131】 較佳者係將混合基質系統用於磷光有機電致發光裝置。有關混合基質系統之更詳細資訊之一來源為申請案WO 2010/108579。可與本發明組成物併用作為磷光或螢光有機電致發光裝置中之混合基質系統的基質組分之特別適用基質材料係根據所使用之發射體類型而選自下文指定用於磷光發射體之較佳基質材料或用於螢光發射體之較佳基質材料。較佳的，混合基質系統係針對來自表4或5之發射體最佳化。

【0132】 連同如上述之本發明組成物，各式各樣物質

類別亦可用作另外的主體材料，較佳係用於螢光發射體，更佳係包含選自M1至M72之材料的混合物。較佳之另外的主體材料係選自下列類別：寡聚伸芳基(例如，根據EP 676461之2,2',7,7'-四苯基螺聯萘或二萘蔥)，尤其是含有稠合芳族基團之寡聚伸芳基；寡聚伸芳基伸乙烯(例如，根據EP 676461之DPVBi或螺-DPVBi)；多足金屬錯合物(polyodal metal complex)(例如根據WO 2004/081017)；電洞傳導化合物(例如根據WO 2004/058911)；電子傳導化合物，尤其是酮、磷氧化物、亞碲等(例如根據WO 2005/084081及WO 2005/084082)；構型異構物(例如根據WO 2006/048268)；硼酸衍生物(例如根據WO 2006/117052)或苯并蔥(例如根據WO 2008/145239)。特佳之主體材料係選自以下類別：寡聚伸芳基，包含萘、蔥、苯并蔥及/或芘或該等化合物、寡聚伸芳基伸乙烯、酮、磷氧化物及亞碲之構型異構物。最佳之基質材料係選自以下類別：寡聚伸芳基，包含蔥、苯并蔥、苯并菲及/或苯并蔥或該等態樣之構型異構物。

【0133】 本發明內容中之寡聚伸芳基應理解為意指至少三個芳基或伸芳基係彼此鍵結的化合物。

【0134】 連同如上述之本發明組成物，各式各樣物質類別亦可用作另外的基質材料，較佳係用於磷光發射體，更佳係包含選自M1至M72之材料的混合物。較佳之另外的基質材料係選自以下類別：芳族胺，尤其是三芳基胺，例如根據US 2005/0069729；吡啶衍生物(例如，

CBP、N,N-雙呋啞基聯苯)或根據根據 WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527 或 WO 2008/086851 之化合物；橋聯呋啞衍生物，例如根據 WO 2011/088877 及 WO 2011/128017；茚并呋啞衍生物，例如根據 WO 2010/136109 及 WO 2011/000455；吡呋啞衍生物，例如根據 EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160；吡啶并呋啞衍生物，例如根據 WO 2007/063754 或 WO 2008/056746；酮，例如根據 WO 2004/093207 或 WO 2010/006680；磷氧化物、亞砷及砷，例如根據 WO 2005/003253；寡聚伸苯基；雙極性基質材料，例如根據 WO 2007/137725；矽烷，例如根據 WO 2005/111172；吡雜茂(azaborole)或硼酸酯，例如根據 WO 2006/117052；三吡衍生物，例如根據 WO 2010/015306、WO 2007/063754 或 WO 2008/056746；鋅錯合物，例如根據 EP 652273 或 WO 2009/062578；鋁錯合物，例如 BA1q；二吡西羅(diazasilole)及四氮雜西羅(tetraazasilole)衍生物，例如根據 WO 2010/054729；二吡磷雜茂(diazaphosphole)衍生物，例如根據 WO 2010/054730；及鋁錯合物，例如 BA1Q。

【0135】於本發明另一實施態樣中，除了雙極性主體及未帶電共主體成分及隨意的磷光發射體之外，該組成物不含任何另外成分，即，任何功能性材料。

【0136】本發明因此進一步提出由式(1)、(1a)至(1j)之化合物或選自1至8之化合物及式(2)、(2a)、(2b)、(2c)之化合物或選自9至17之化合物組成之組成物。

【0137】本發明因此進一步提出由磷光發射體、式(1)、(1a)至(1j)之化合物或選自1至8之化合物及式(2)、(2a)、(2b)、(2c)之化合物或選自9至17之化合物組成之組成物。

【0138】如上述或描述為較佳之本發明組成物適用於有機電子裝置。此處之有機電子裝置應理解為意指含有至少一個含有至少一種有機化合物之層的裝置。該裝置亦包含無機材料或完全自無機材料形成的其他層。

【0139】本發明因此進一步提出如上述或描述為較佳之組成物，尤其是選自M1至M72之混合物，用於有機電子裝置的用途用途。

【0140】該等組成物之組分或成分可藉由汽相沉積(vapour deposition)或自溶液處理。若該等組成物係自溶液應用，需要包含至少一種另外的溶劑之本發明組成物的調配物。此等調配物可為例如溶液、分散液或乳液。基於此目的，較佳可使用二或更多種溶劑之混合物。

【0141】本發明因此進一步提出包含本發明組成物及至少一種溶劑之調配物。

【0142】適合且較佳之溶劑為例如甲苯、苯基甲基醚、鄰-、間-或對-二甲苯、苯甲酸甲酯、1,3,5-三甲苯、四氫萘、藜蘆醚、THF、甲基-THF、THP、氯苯、二噁烷、苯氧基甲苯(尤其是3-苯氧基甲苯)、(-)-葑酮、1,2,3,5-四甲苯、1,2,4,5-四甲苯、1-甲萘、2-甲苯并噻啉、2-苯氧乙醇、2-吡咯啉酮、3-甲基苯基甲基醚、4-甲

基苯基甲基醚、3,4-二甲基苯基甲基醚、3,5-二甲基苯基甲基醚、苯乙酮、 α -萸品醇、苯并噻唑、苯甲酸丁酯、異丙苯、環己醇、環己酮、環己苯、十氫萘、十二基苯、苯甲酸乙酯、二氫茛、苯甲酸甲酯、NMP、p-異丙基甲苯、苯基乙基醚、1,4-二異丙苯、二苄醚、二乙二醇丁基甲基醚、三乙二醇丁基甲基醚、二乙二醇二丁基醚、三乙二醇二甲基醚、二乙二醇一丁基醚、三丙二醇二甲基醚、四乙二醇二甲基醚、2-異丙基萘、戊苯、己苯、庚苯、辛苯、1,1-雙(3,4-二甲苯基)乙烷、六甲基二氫茛或此等溶劑之混合物。

【0143】該調配物亦可包含至少一種同樣用於該電子裝置之另外的有機或無機化合物，尤其是發射化合物，尤其是磷光發射體；及/或另外的基質材料。適用之發射化合物及另外的基質材料已於上文細述。

【0144】本發明亦提出本發明組成物用於有機電子裝置之用途，較佳係用於電子傳輸層及/或用於發射層。

【0145】有機電子裝置較佳係選自有機積體電路(OIC)、有機場效電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機電致發光裝置、有機太陽能電池(OSC)、有機光學偵測器及有機光受體，特佳為有機電致發光裝置。

【0146】使用本發明組成物之最佳有機電致發光裝置為有機發光電晶體(OLET)、有機場淬滅裝置(OFQD)、有機發光電化學電池(OLEC、LEC、LEEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機發光二極體(OLED)；以OLEC及OLED尤

佳，及以 OLED 最佳。

【0147】較佳的，如上述或描述為較佳之本發明組成物係用於電子裝置中具有電子傳輸功能之層。該層較佳為電子注入層(EIL)、電子傳輸層(ETL)、電洞阻擋層(HBL)及/或發射層(EML)，更佳為 ETL、EIL 及/或 EML。更佳的，本發明組成物係用於 EML，尤其是作為基質材料。

【0148】因此，本發明進一步提出尤其係選自上述電子裝置之一以及包含如上述或描述為較佳之本發明組成物，較佳包含於發射層(EML)、電子傳輸層(ETL)、電子注入層(EIL)及/或電洞阻擋層(HBL)，極佳於 EML、EIL 及/或 ETL 及最佳於 EML 的有機電子裝置。

【0149】當該層為發射層時，尤佳為磷光層，其特徵在於除如上述或描述為較佳之組成物以外，其亦包含磷光發射體，尤其連同來自表 4 或 5 之發射體或如上述之較佳發射體。

【0150】於本發明之特佳實施態樣中，因此，該電子裝置為有機電致發光裝置，最佳為有機發光二極體(OLED)，其包含如上述或描述為較佳之本發明組成物連同磷光發射體，較佳為來自表 4 或 5 之發射體，更佳係綠光發射體於發射層(EML)中。

【0151】於較佳實施態樣中之包含至少一種發射化合物的本發明組成物較佳含有以發射體及基質材料之整體混合物為基準計介於 99.9 體積%與 1 體積%，更佳係介於 99 體積%與 10 體積%，尤佳係介於 98 體積%與 60 體積%，極佳係

介於97體積%與80體積%之根據較佳實施態樣由至少一種式(1)之化合物及至少一種式(2)之化合物所構成的基質材料。因此，該組成物較佳含有以發射體及基質材料之整體組成物為基準計介於0.1體積%與99體積%，更佳係介於1體積%與90體積%，更佳係介於2體積%與40體積%，最佳係介於3體積%與20體積%之發射體。若該等化合物係自溶液處理，較佳係使用以重量%計之對應量而非上文指定之以體積%之量。

【0152】除了陰極、陽極及包含本發明組成物之層以外，電子裝置亦可包含其他層。彼等於各情況下係選自例如一或多種電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、發射層、電子傳輸層、電子注入層、電子阻擋層、激子阻擋層、中間層、電荷產生層(IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto、T. Nakada、J. Endo、K. Mori、N. Kawamura、A. Yokoi、J. Kido、Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer)及/或有機或無機p/n界面。然而，應指出不一定需要存在此等層之每一層。

【0153】有機電致發光裝置中之層的順序較佳如下：
陽極/電洞注入層/電洞傳輸層/發射層/電子傳輸層/電子注入層/陰極。

【0154】該等層之順序為較佳順序。

同時，應再次指出並非全部提及之層均需要存在及/或可另外存在其他層。

【0155】包含本發明組成物之有機電致發光裝置可包含多重發射層。更佳的，該情況下之該等發射層具有整體介於380 nm及750 nm之間的數個發射最大值，以使整體結果為白光發射；換言之，可發螢光或發磷光以及發出藍光或黃光或橙光或紅光之各種不同發射化合物係用於該等發射層。尤佳者為三層系統，即，具有三個發射層，其中這三層顯示藍光、綠光或橙光發射(其基本構造詳見例如WO 2005/011013)。應注意的是，為產生白光而非發射複數種發出色彩的發射體化合物，個別使用之發射廣波長範圍的發射體化合物亦可適用。

【0156】可用於本發明有機電致發光裝置之電洞注入或電洞傳輸層或電子阻擋層或用於電子傳輸層的適用之電荷傳輸材料為例如於Y. Shirota等人，Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010中所揭示之化合物，或根據先前技術用於該等層中之其他材料。

【0157】用於電子傳輸層之材料可為根據先前技術用作電子傳輸層中之電子傳輸材料的任何材料。尤其適用者為鋁錯合物，例如Alq₃；鋇錯合物，例如Zrq₄；苯并咪唑衍生物；三吡啶衍生物；嘧啶衍生物；吡啶衍生物；吡啶衍生物；喹啉衍生物；喹啉衍生物；喹啉二唑衍生物；芳族酮；內醯胺；硼烷；二吡磷雜茂衍生物；及氧化磷衍生物。其他適用材料為上述化合物之衍生物，如揭示於JP 2000/053957、WO 2003/060956、WO 2004/028217、WO 2004/080975及WO 2010/072300。

【0158】較佳之電洞傳輸材料尤其為可用於電洞傳輸、電洞注入或電子阻擋層之材料，諸如茛苳并萘胺衍生物(例如根據WO 06/122630或WO 06/100896)、揭示於EP 1661888之胺衍生物、六吡聯伸三苯衍生物(例如根據WO 01/049806)、具有稠合芳族系統之胺衍生物(例如根據US 5,061,569)、揭示於WO 95/09147之胺衍生物、一苯并茛苳并萘胺(例如根據WO 08/006449)、二苯并茛苳并萘胺(例如根據WO 07/140847)、螺聯萘胺(例如根據WO 2012/034627或尚未公佈之EP 12000929.5)、萘胺(例如根據WO 2014/015937、WO 2014/015938及WO 2014/015935)、螺二苯并哌喃胺(例如根據WO 2013/083216)及二氫吡啶衍生物(例如WO 2012/150001)。

【0159】較佳之電子裝置的陰極為具有低功函數之金屬、金屬合金、或由各種不同金屬，例如鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑰系元素(例如Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等)所構成之多層結構。其他適合者為由鹼金屬或鹼土金屬及銀所構成的合金，例如由鎂及銀所構成的合金。在多層結構之情況下，除了已提及的金屬之外，亦可能使用具有相對高功函數之其他金屬，例如Ag或Al，在該情況下，通常使用金屬之組合，諸如Ca/Ag、Mg/Ag或Ba/Ag。亦可能較佳係在金屬陰極及有機半導體之間引入具有高介電常數之材料的薄中間層。適用於本目的之適合材料的實例為鹼金屬或鹼土金屬氟化物，但亦可為對應之氧化物或碳酸鹽(例如，LiF、Li₂O、BaF₂、

MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃等)。基於本目的亦可能使用喹啉酸鋰(LiQ)。該層之層厚度較佳係介於0.5與5 nm之間。

【0160】較佳之陽極為具有高功函數之材料。較佳的，陽極係具有在真空下大於4.5 eV之功函數。首先，具有高氧化還原電位之金屬係適合此目的，例如Ag、Pt或Au。其次，金屬/金屬氧化物電極(例如，Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x)亦會較佳。就一些應用而言，電極中之至少一者必須為透明或部分透明以能照射該有機材料(有機太陽能電池)或發光(OLED、O-LASER)。此處較佳之陽極材料為傳導性混合金屬氧化物。特佳者係銦錫氧化物(ITO)或銦鋅氧化物(IZO)。另外之較佳者為傳導性經摻雜有機材料，尤其是傳導性經摻雜聚合物。此外，陽極亦可由二或更多層組成，例如由ITO之內層及金屬氧化物之外層，較佳為氧化鎢、氧化鋁或氧化釩之外層組成。

【0161】有機電子裝置於製造過程中係根據應用而適當地結構化、接點連接及最終密封，原因係本發明裝置的使用壽命於水及/或空氣存在下會縮短。

【0162】於更佳實施態樣中，包含本發明組成物之有機電子裝置的特徵在於藉由昇華法施加包含本發明組成物之一或多個有機層。在該情況下，材料係在真空昇華系統中在低於10⁻⁵ mbar，較佳係低於10⁻⁶ mbar之初始壓力下汽相沉積施加。然而，於該情況下，初始壓力亦可更低，例如低於10⁻⁷ mbar。

【0163】較佳者同樣為有機電致發光裝置，其特徵在

於一或多個層係藉由OVPD(有機汽相沉積)法或借助於載氣昇華作用施加。在該情況下，該等材料係在介於 10^{-5} mbar與1 bar之間的壓力下施加。該方法的特殊實例為OVJP(有機蒸氣噴射印刷)法，其中該等材料係藉由噴嘴直接施加，因此被結構化(例如M. S. Arnold等人之Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301)。

【0164】較佳者另外為有機電致發光裝置，其特徵在於一或多個包含本發明組成物之有機層係自溶液製造，例如藉由旋塗、或藉由任何印刷法，例如網版印刷、快乾印刷、噴嘴印刷或套版印刷，但更佳為LITI(光引發熱成像、熱轉印印刷)或噴墨印刷。基於此目的，需要本發明組成物之組分的可溶解化合物。高溶解性可經由適當取代對應之化合物而獲致。自溶液處理具有包含本發明組成物之層可以非常簡單及便宜的方式施加之優點。該技術尤其適於大量製造有機電子裝置。

【0165】此外，亦可用其中自溶液施加一或多個層及藉汽相沉積施加一或多個其他層之混合方法。

【0166】該等方法大體上為熟習本領域之人士已知以及可應用於有機電致發光裝置。

【0167】本發明因此進一步提出用於製造包含如上述或描述為較佳之本發明組成物的有機電子裝置之方法，其特徵在於至少一個包含本發明組成物之有機層係藉由氣相沉積(gas phase deposition)尤其是藉由昇華法施加，及/或藉由OVPD(有機汽相沉積)法施加及/或借助於載氣昇華作

用施加，或自溶液尤其是藉由旋塗或藉由印刷法施加。

【0168】 在利用氣相沉積製造有機電子裝置中，原則上有兩種方法可藉以施加應包含本發明組成物及可包含多種不同成分之有機層，或藉由汽相沉積施加至任何基板。首先，所使用之材料可各先裝填於材料源中，及最終自不同材料源蒸發(「共蒸發」)。其次，該等不同材料可預先混合及將該混合物先裝填於單一材料源，最終從該單一材料源蒸發(「預混物蒸發」)。以此方式，可以簡單及迅速方式獲致具有組分均勻分布之層的汽相沉積，而不需要精確啟動眾多材料源。

【0169】 本發明因此進一步提出一種方法，其特徵在於如上述或描述為較佳之至少一種式(1)之化合物及如上述或描述為較佳之至少一種式(2)之化合物係自至少兩個材料源隨意連同如上述或描述為較佳之其他材料自氣相連續或同時沉積，以及形成有機層。

【0170】 於本發明之一較佳實施態樣中，該至少一有機層係利用氣相沉積施加，其中該組成物之成分係預先混合且自單一材料源蒸發。

【0171】 本發明因此進一步提出一種方法，其特徵在於使用如上述或描述為較佳之本發明組成物作為氣相沉積之材料源，及隨意地連同其他材料，形成有機層。

【0172】 本發明進一步提出一種用於製造包含如上述或描述為較佳之本發明組成物的有機電子裝置之方法，其特徵在於使用如上述之本發明調配物施加有機層。

【0173】本發明組成物及本發明裝置的特徵為優於先前技術之下列令人意外的優點：

【0174】本發明組成物用於有機電子裝置，尤其是用於有機電致發光裝置，及尤其是用於OLED或OLEC，造成裝置的使用壽命顯著增長。

【0175】如下文引用之實施例1明顯看出，單獨使用式(1)之主體材料，例如用於OLED C1之化合物，在EML中於12%之中等發射體濃度下獲致良好電壓及效率。然而，該等組件之使用壽命短。

【0176】使用壽命之改善連同經改良組件效率可利用如上述式(1)之化合物與如上述式(2)之化合物的本發明組合物獲致。

【0177】使用壽命之改善及經改良組件效率較佳可憑藉如上述式(1)之化合物與如上述式(2)之化合物的本發明組合物，於發射層中之發射體濃度為2重量%至15重量%下獲致。

【0178】式(1)之化合物之該優點係於實施例I2及I4經由使用化合物1 (縮寫為CbzT2)與聯伸三苯衍生物9 (縮寫為WBG1)，在發射體濃度為12%下示意及代表性地顯示。

【0179】即使於EML中僅有7%之通常使OLED使用壽命降低的低發射體濃度下，本發明組合物所獲致之使用壽命比先前技術更明顯改善。式(1)之化合物之此現象係於實施例I1及I3經由使用化合物1 (縮寫為CbzT2)與聯伸三苯衍生物9 (縮寫為WBG1)，在發射體濃度為7%下示意及代

表性地顯示。

【0180】 WO 2015/192941之揭示與I21數據的差異在於式(1)之雙極性主體的結構。具有黃光發射體之組合物顯示高使用壽命。熟習本領域之人士明白包含黃光發射體之電致發光裝置的使用壽命通常高於包含綠光發射體者。以熟習本領域之人士無法預見的方式，如上述或描述為較佳之式(1)之化合物，尤其是化合物1至8之結構改變造成電子裝置，尤其是OLED，甚至含有綠光發射體者之使用壽命改善。因使用壽命及組件效率比先前技術提高而使此改善變得明顯。

【0181】 本發明之組成物用於發射層之適用性非常好，以及展現比如上述先前技術之化合物改良之性能數據，尤其是使用壽命方面。

【0182】 本發明之組成物可容易處理，因此非常適用於商業用途之大量製造。

【0183】 本發明之組成物可預先混合及從單一材料源汽相沉積，因此可以簡單及迅速方式製造所使用之組分均勻分布的有機層。

【0184】 應指出本發明中所述之實施態樣的變化係涵蓋在本發明範圍內。除非明確排除，否則本發明所揭示之任何特徵可與用於相同目的或相等或類似目的的替代性特徵交換。除非另外陳述，否則本發明中所揭示之任何特徵因此應視為通用系列之實例或視為相等或類似特徵。

【0185】 除非特別的特徵及/或步驟相互排斥，否則

本發明所有特徵可以任何方式彼此組合。本發明之較佳特徵尤其如此。

【0186】同樣地，可獨立(且非組合)使用非基本組合之特徵。

【實施方式】

【0187】本發明揭示之技術性教示可予以摘要及與其他實例組合。

本發明係以下列實例更詳細說明，且無因而限制本發明的任何意圖。

一般方法：

軌域能及電子態之測定

【0188】材料之HOMO及LUMO能及三重態能階及單態能階係經由量子-化學計算判定。基於該目的，於本情況下，使用"Gaussian09, Revision D.01"套裝軟體(Gaussian Inc.)。為了計算無金屬之有機物質(稱為「org.」法)，首先藉由半實驗法AM1 (Gaussian輸入列「# AM1 opt」)在電荷0且多重性1下進行幾何形狀最佳化。隨後，根據經最佳化之幾何形狀，進行電子基態及三重態能階之(單點)能計算。此係使用TDDFT(時間相依性密度泛函理論)法B3PW91採用6-31G(d)基組(Gaussian輸入列「# B3PW91/6-31G(d) td=(50-50,nstates=4)」)(電荷0，多重性1)完成。就有機金屬化合物(稱為「M-org.」法)而言，藉由Hartree-

Fock法及LanL2MB基組(Gaussian輸入列「# HF/LanL2MB opt」)(電荷0, 多重性1)使幾何形狀最佳化。如上述與有機物質類似地進行能計算, 但金屬原子係使用「LanL2DZ」基組以及配位基係使用「6-31G(d)」基組(Gaussian輸入列「#B3PW91/gen pseudo=lanl2 td=(50-50,nstates=4)」)。從該能計算, 獲得以哈崔單位計之為被兩個電子佔用之最後軌域的HOMO(alpha occ.特徵值)以及為第一個未被佔用軌域之LUMO(alpha virt.特徵值), 其中HEh及LEh分別表示以哈崔單位計之HOMO能以及以哈崔單位計之LUMO能。此用以測定以電子伏特計之HOMO及LUMO值, 藉由循環伏安法測量校正, 其係如下:

$$\begin{aligned} \text{HOMO (eV)} &= (\text{HEh} * 27.212) * 0.8308 - 1.118; \\ \text{LUMO (eV)} &= (\text{LEh} * 27.212) * 1.0658 - 0.5049。 \end{aligned}$$

【0189】 材料之三重態能階T1係定義為具有藉由量子-化學能計算所求得之最低能的三重態之相對激發能(以eV計)。

材料之單態能階S1係定義為具有藉由量子-化學能計算所求得之次低能的單態之相對激發能(以eV計)。

最低能單態係稱為S0。

本文所述之方法與所使用之套裝軟體無關, 且始終獲得相同結果。為此目的之經常使用的程式實例為「Gaussian09」(Gaussian Inc.)及Q-Chem 4.1(Q-Chem, Inc.)。於本情況下, 能係使用「Gaussian09, Revision D.01」套裝軟體來計算。

實施例 1：製造 OLED

【0190】以下之實施例 I1 至 I4 (見表 6) 代表使用本發明之材料組合物於 OLED 中。

【0191】實施例 I1 至 I4 之前置處理：塗布有厚度為 50 nm 之經結構化 ITO (銻錫氧化物) 的玻璃板在塗布之前係先用氧電漿，然後藉由氬電漿處理。此等經電漿處理之玻璃板形成其上施加有 OLED 之基板。

【0192】該等 OLED 基本上具有下列層結構：基板/電洞注入層(HIL)/電洞傳輸層(HTL)/電子阻擋層(EBL)/發射層(EML)/隨意的電洞阻擋層(HBL)/電子傳輸層(ETL)/隨意的電子注入層(EIL)及最後為陰極。陰極係由厚度為 100 nm 之鋁層形成。OLED 之確切結構可見表 6。該等 OLED 製造所需之材料係示於表 7。OLED 之數據係列於表 8。實例 C1 為比較例，其代表性地僅含有式 (1) 之主體材料；實施例 I1 至 I4 顯示本發明 OLED 之數據。

【0193】所有材料係於真空槽中藉熱汽相沉積施加。於該情況下，發射層始終由至少一種基質材料(主體材料)，基於本發明之目的為至少兩種基質材料，以及藉由共蒸發以體積計之特別比例添加至基質材料的發射摻雜劑(發射體)組成。以如 CbzT2:WBG1:TEG1 (46%:47%:7%) 之形式提供的細節於此處意指材料 CbzT2 於該層中之存在比例(體積計)為 46%，WBG1 之存在比例為 47% 及 TEG1 之存在比例為 7%。類似的，電子傳輸層亦可由兩種材料之混

合物組成。

【0194】該等 OLED 係以標準方式表示特徵。基於該目的，電致發光光譜、電流效率 (CE，以 cd/A 測量) 及外部量子效率 (EQE，以 % 測量) 係如同使用壽命，作為耀度之函數測定，係自假定為藍伯特發射特徵 (Lambertian emission characteristic) 之電流-電壓-耀度特徵計算。電致發光光譜係在 1000 cd/m^2 之耀度下測定，以及自其計算 CIE 1931 x 及 y 色坐標。在表 8 中之參數 U1000 係指耀度為 1000 cd/m^2 所需之電壓。CE1000 及 EQE1000 代表性地表示於 1000 cd/m^2 下達到的電流效率及外部量子效率。

使用壽命 LT 係界定為在用恆定電流密度 j_0 操作的過程中耀度從起始耀度降至某比例 L1 之後的時間。表 8 中之數字 L1=80% 意指 LT 欄中所報告之使用壽命對應於耀度降至其起始值的 80% 之後的時間。

於 OLED 中使用本發明混合物

【0195】本發明之材料組合物可用於磷光 OLED 中之發射層中。對應於化合物 1 之化合物 CbzT2 與 WBG1 (對應於化合物 9) 之本發明組合物係用於實施例 I1 至 I4 作為發射層中之基質材料。

表 6：OLED之結構

實施例	HIL 厚度	HTL 厚度	EBL 厚度	EML 厚度	HBL 厚度	ETL 厚度	EIL 厚度
C1	HATCN 5nm	SpMA1 215nm	SpMA2 20nm	CbzT2:TEG1 (88%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I1	HATCN 5nm	SpMA1 215nm	SpMA2 20nm	CbzT2:WBG1:TEG1 (46%:47%:7%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I2	HATCN 5nm	SpMA1 215nm	SpMA2 20nm	CbzT2:WBG1:TEG1 (22%:66%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I3	HATCN 5nm	SpMA1 215nm	SpMA2 20nm	CbzT2:WBG1:TEG2 (46%:47%:7%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I4	HATCN 5nm	SpMA1 215nm	SpMA2 20nm	CbzT2:WBG1:TEG2 (22%:66%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

表 7: OLED之材料的結構式

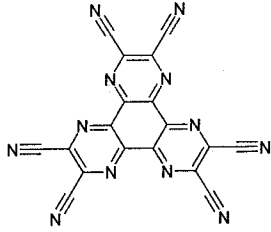
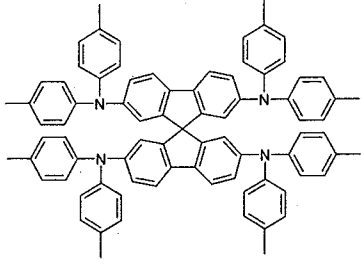
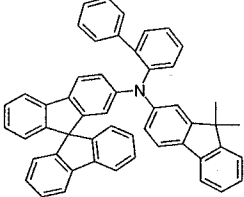
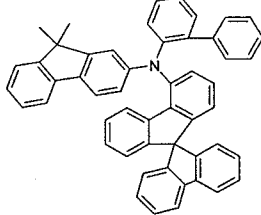
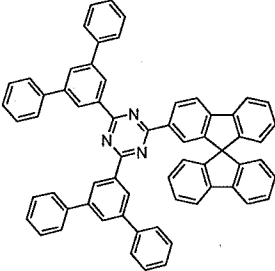
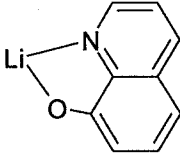
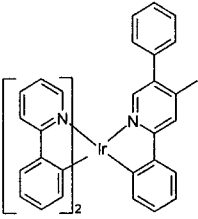
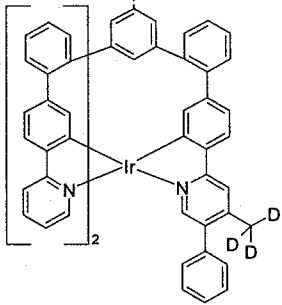
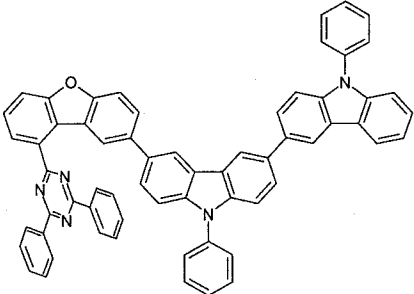
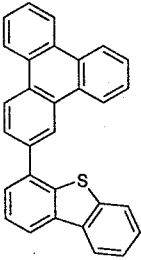
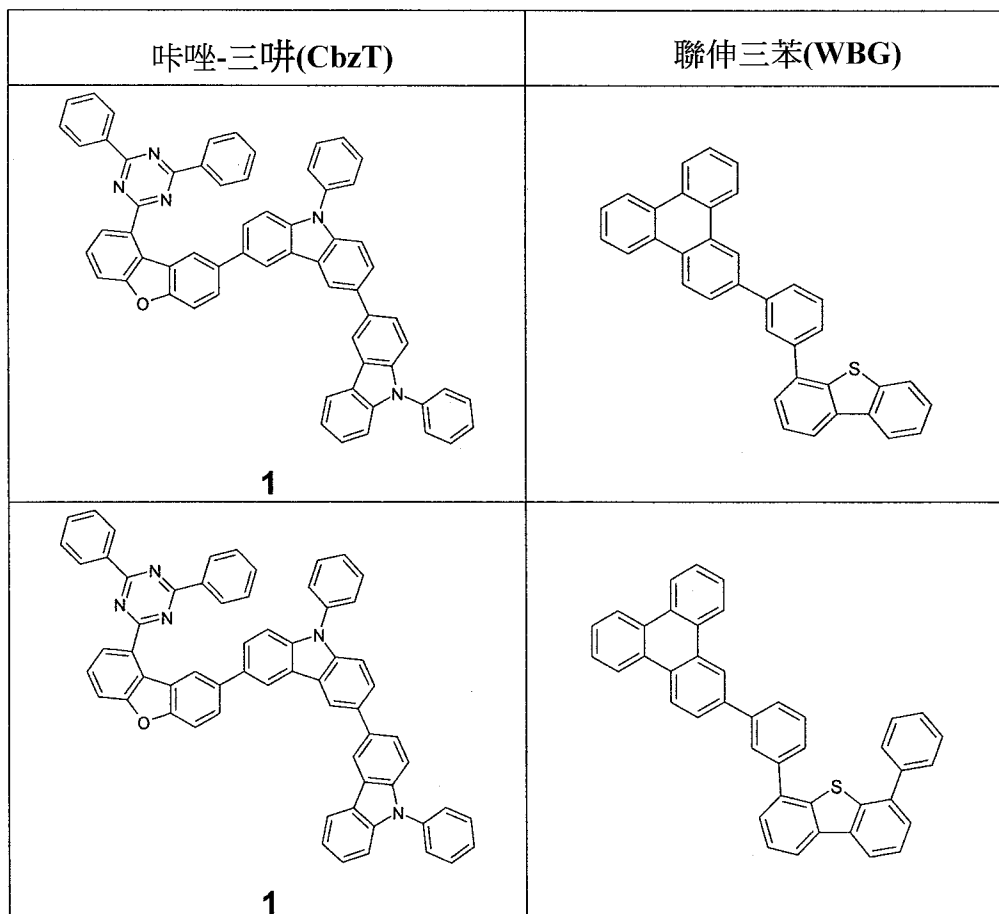
	
HATCN	SpA1
	
SpMA1	SpMA2
	
ST2	LiQ
	
TEG1	TEG2
	
CbzT2	WBG1

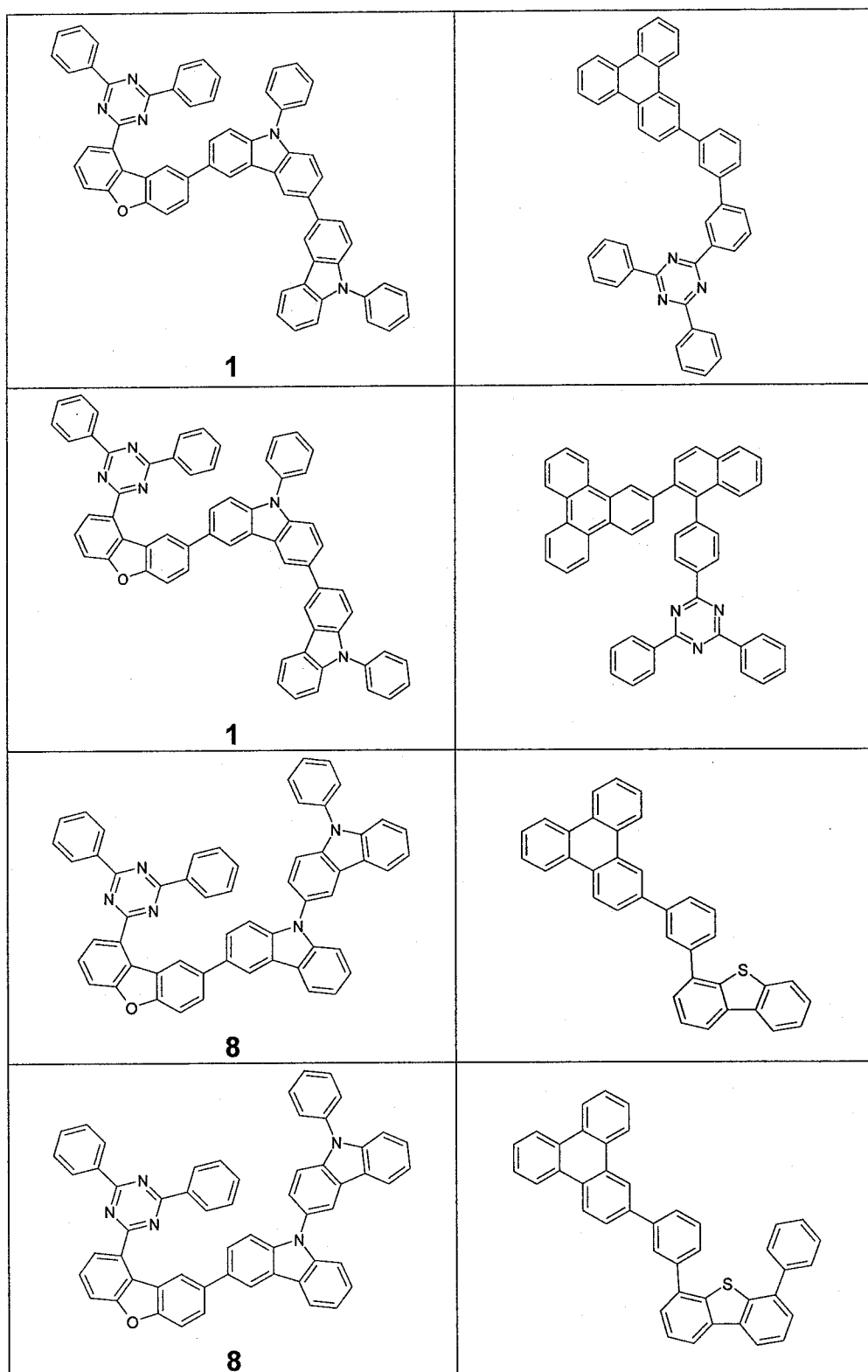
表 8: OLED之數據

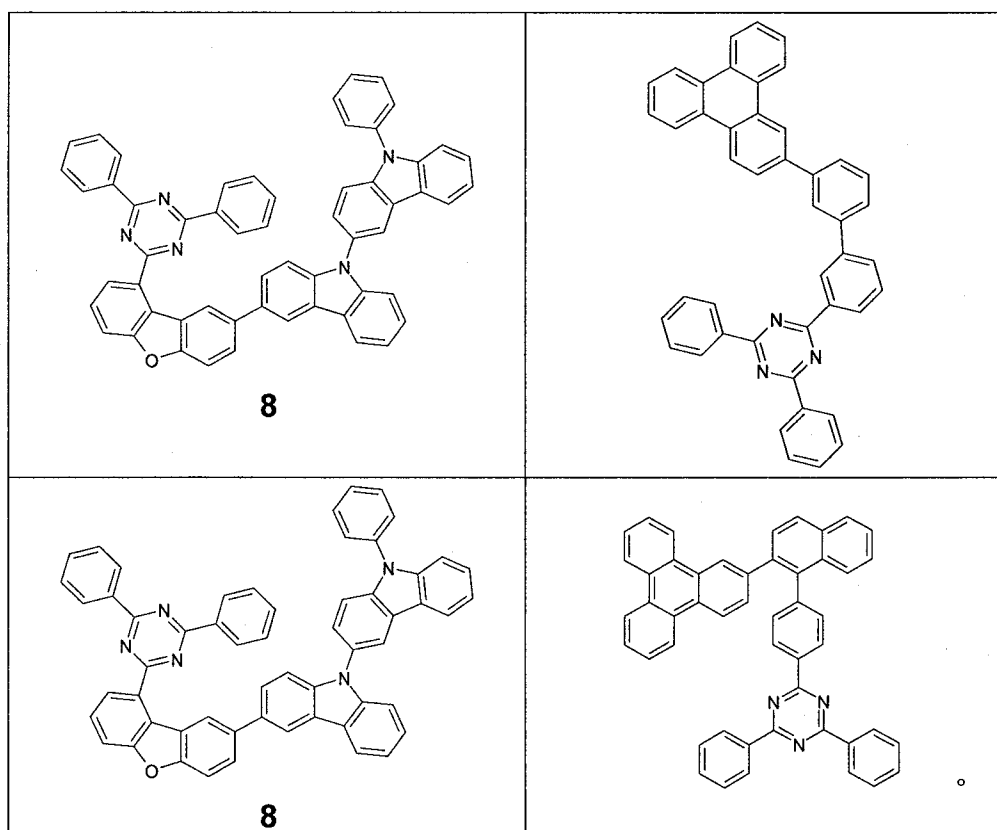
實施例	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	EQE 1000 (%)	於1000 cd/m ² 之 CIE x/y	j ₀ (mA/cm ²)	L1 (%)	LT (h)
C1	3.0	60	16.4	0.33/0.63	20	80	660
I1	3.3	76	20.6	0.32/0.64	20	80	819
I2	3.7	64	17.4	0.32/0.64	20	80	1262
I3	3.4	77	20.5	0.39/0.59	20	80	1576
I4	3.8	76	19.9	0.38/0.60	20	80	3017

【0196】經由與發射體 TEG1 之特定組合，於 EML 中於高及特別是低發射體濃度 (12% 或 7%) 下獲得使用壽命及效率之優異改善。與發射體 TEG2 (I3 及 I4) 之組合，使用壽命之另外明顯改善為有可能。

【0197】以下之本發明混合物於電子裝置中顯示相似的行為：

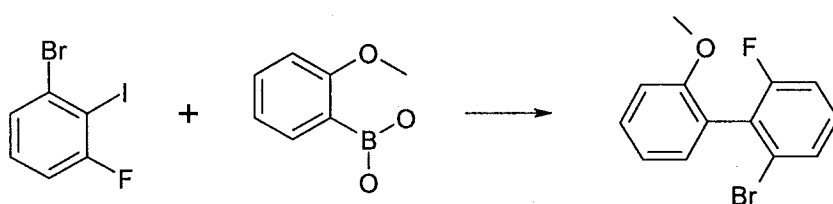






實施例 2：合成化合物 1 (CbzT2)

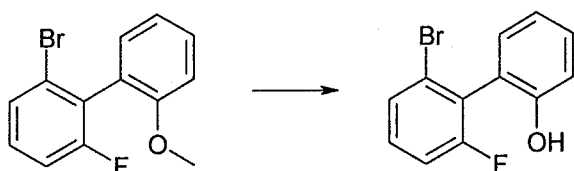
【0198】 a) 6-溴-2-氟-2'-甲氧基聯苯



將 200 g (664 mmol) 之 1-溴-3-氟-2-碘苯、101 g (664 mmol) 之 2-甲氧基苯基硼酸及 137.5 g (997 mmol) 之四硼酸鈉溶解於 1000 ml 之 THF 及 600 ml 之水中，並予以除氣。添加 9.3 g (13.3 mmol) 之氯化雙(三苯基膦)鈣(II) 及 1 g (20 mmol) 之氫氧化鉍。反應混合物然後在保護性氣體氣氛下於 70°C 攪拌 48 小時。經冷卻之溶液係經甲苯補充、以水重

複清洗、乾燥並濃縮之。產物係經由管柱層析術在矽膠上採用甲苯/庚烷(1:2)予以純化。產量：155 g (553 mmol)，理論值之83%。

【0199】 b) 6'-溴-2'-氟聯苯-2-醇



將112 g (418 mmol)之6-溴-2-氟-2'-甲氧基聯苯溶解於2 l之二氯甲烷並冷卻至5°C。在90分鐘內將41.01 ml (431 mmol)之三溴化硼滴加該溶液，並持續攪拌該混合物一夜。該混合物隨後逐漸與水摻混，並用水清洗有機相三次，經Na₂SO₄乾燥，藉由旋轉蒸發濃縮，並藉由層析術純化。產量：104 g (397 mmol)，理論值之98%。

【0200】 c) 1-溴二苯并呋喃



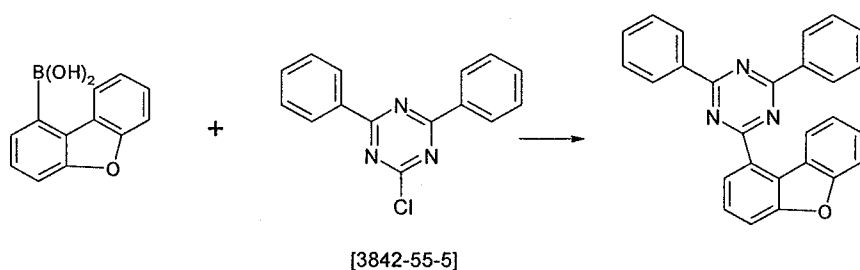
將111 g (416 mmol)之6'-溴-2'-氟聯苯-2-醇溶解於2 l之DMF (最大值為0.003% H₂O) SeccoSolv®並冷卻至5°C。將20 g (449 mmol)之氫化鈉(於石蠟油中之60%懸浮液)分數部分添加至此溶液，一旦添加結束時，攪拌該混合物20分鐘，然後將該混合物加熱至100°C為時45分鐘。冷卻之後，將500 ml之乙醇逐漸添加至該混合物，其係藉由旋轉蒸發濃縮，然後藉由層析術純化。產量：90 g (367 mmol)，理論值之88.5%。

【0201】d) 二苯并呋喃-1-硼酸



將 180 g (728 mmol) 之 1-溴二苯并呋喃溶解於 1500 ml 之無水 THF 並冷卻至 -78°C 。在此溫度下，於約 5 分鐘內添加 305 ml (764 mmol/於己烷中 2.5 M) 之正丁基鋰，然後該混合物係在 -78°C 再攪拌 2.5 小時。在此溫度下，非常迅速地添加 151 g (1456 mmol) 之硼酸三甲酯，並使反應逐漸來到室溫(約 18 小時)。反應溶液係以水清洗，並用甲苯對沉澱之固體及有機相進行共沸乾燥。粗產物係在攪拌狀態下在約 40°C 下自甲苯/二氯甲烷萃取，並以吸濾濾除。產量：146 g (690 mmol)，理論值之 95%。

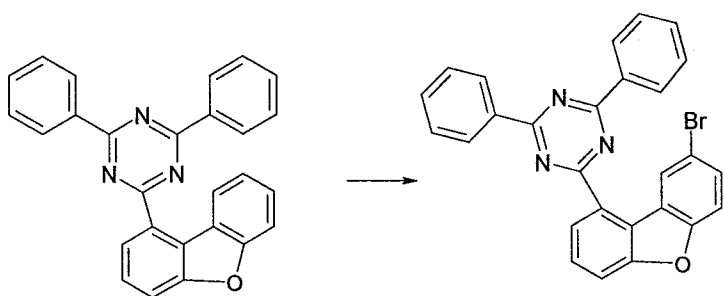
【0202】e) 2-二苯并呋喃-1-基-4,6-二苯基[1,3,5]三吡



將 23 g (110.0 mmol) 之二苯并呋喃-1-硼酸、29.5 g (110.0 mmol) 之 2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三吡及 21 g (210.0 mmol) 之碳酸鈉懸浮於 500 ml 之乙二醇二胺醚及 500 ml 之水中。添加至該懸浮液的是 913 mg (3.0 mmol) 之三-鄰甲苯基膦，然後是 112 mg (0.5 mmol) 之乙酸鈣(II)，且反應混合物係在回流下加熱 16 小時。冷卻之後，將有機相移除，經由

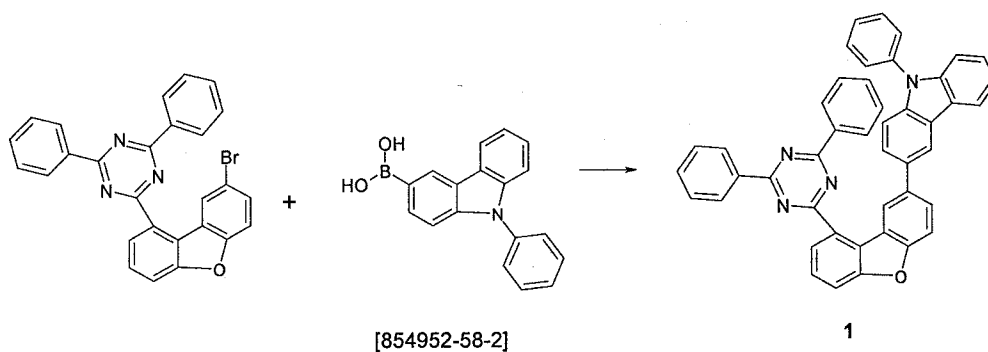
矽膠過濾，以 200 ml 之水清洗三次，然後濃縮至乾。殘留物係自甲苯以及自二氯甲烷/庚烷再結晶。產量為 37 g (94 mmol)，對應於理論值之 87%。

【0203】 f) 2-(8-溴二苯并呋喃-1-基)-4,6-二苯基[1,3,5]三吡



將 70 g (190.0 mmol) 之 2-二苯并呋喃-1-基-4,6-二苯基[1,3,5]三吡懸浮於 2000 ml 之乙酸 (100%) 及 2000 ml 之硫酸 (95 至 98%) 中。將 34 g (190 mmol) 之 NBS 分成數部分添加至該懸浮液且該混合物係在黑暗中攪拌 2 小時。然後，添加水/冰，並將固體移出以及以乙醇清洗。殘留物係自甲苯再結晶。產量為 80 g (167 mmol)，對應於理論值之 87%。

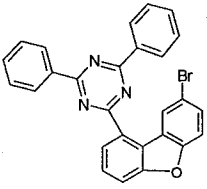
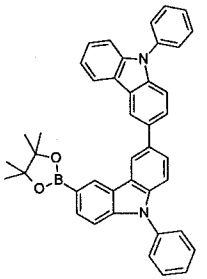
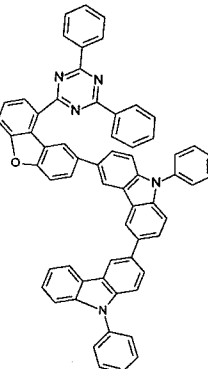
【0204】 g) 3-[9-(4,6-二苯基[1,3,5]三吡-2-基)二苯并呋喃-2-基]-9-苯基-9H-吡啶

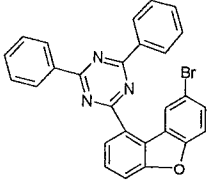
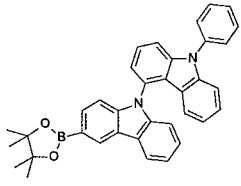
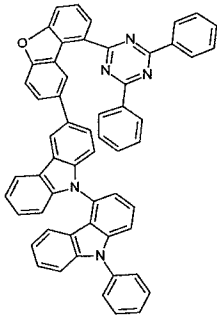
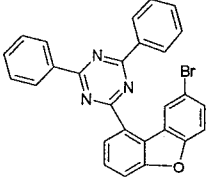
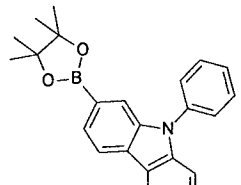
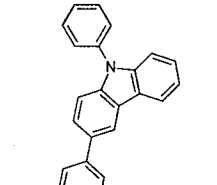
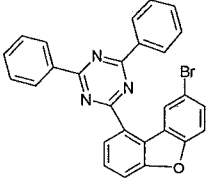
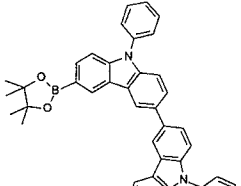
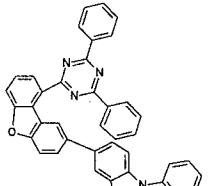
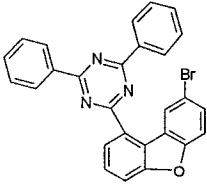
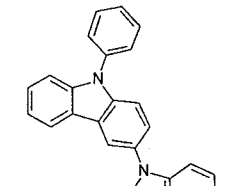
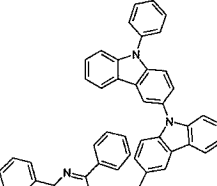


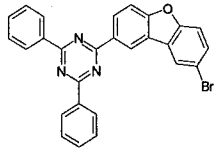
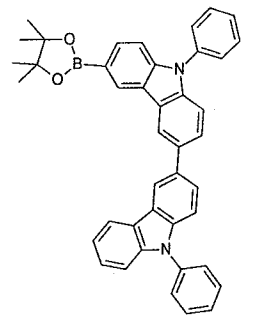
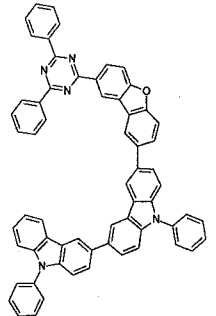
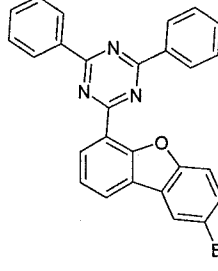
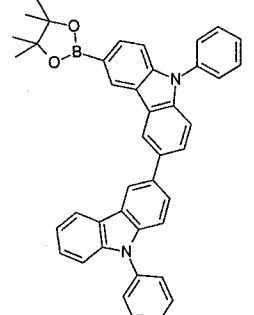
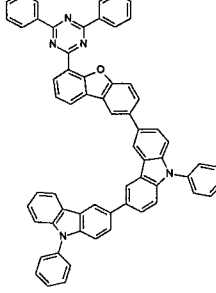
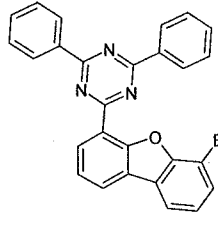
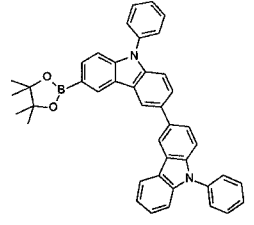
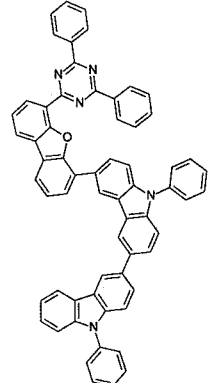
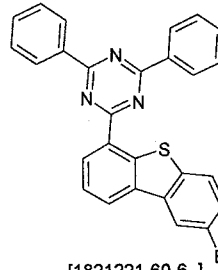
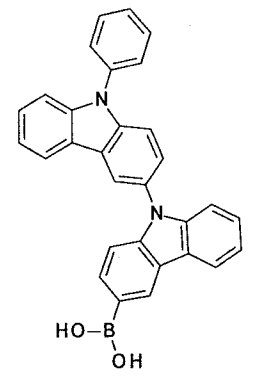
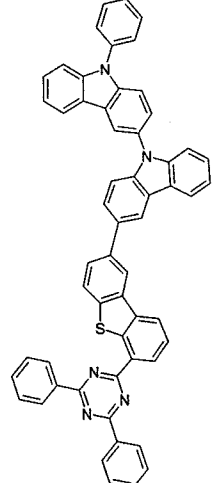
將 75 g (156 mmol) 之 2-(8-溴二苯并呋喃-1-基)-4,6-二

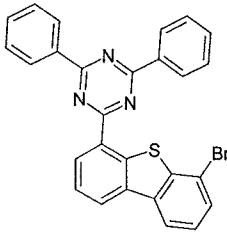
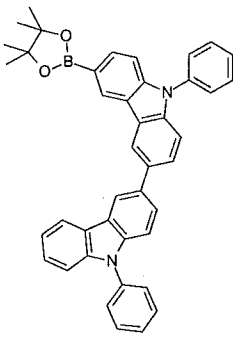
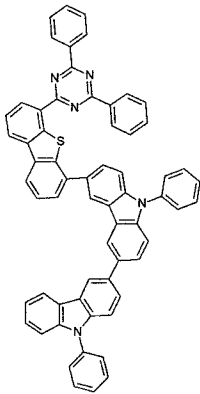
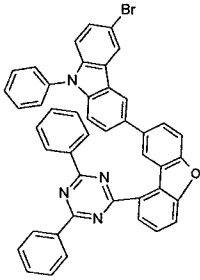
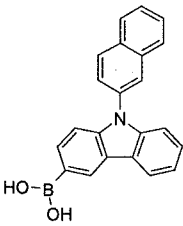
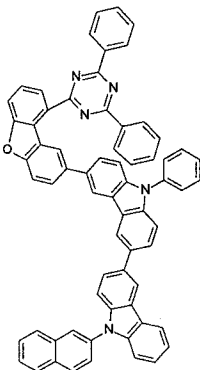
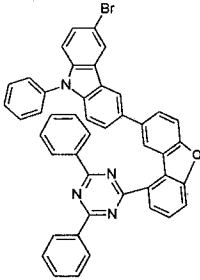
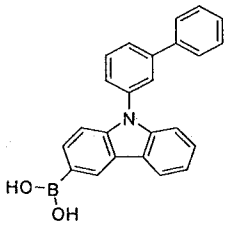
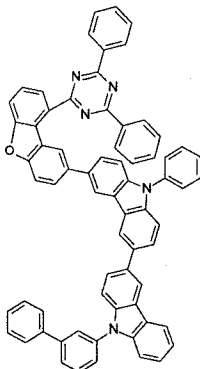
苯基-[1,3,5]-三吡、50 g (172 mmol)之N-苯基吡啶-3-硼酸 [854952-58-2]及36 g (340 mmol)之碳酸鈉懸浮於1000 ml之乙二醇二胺醚及280 ml之水中。1.8 g (1.5 mmol)之肆(三苯基磷)鈰(0)添加於該懸浮液，且該反應混合物係在回流下加熱16小時。冷卻之後，將有機相移除，經由矽膠過濾，以200 ml之水清洗三次，然後濃縮至乾。該產物係經由管柱層析術在矽膠上用甲苯/庚烷(1:2)純化，及最終在高度真空下($p=5 \times 10^{-7}$ mbar)昇華(99.9%純度)。產量為50 g (78 mmol)，對應於理論值之50%。

以類似方式，可獲得下列物質：

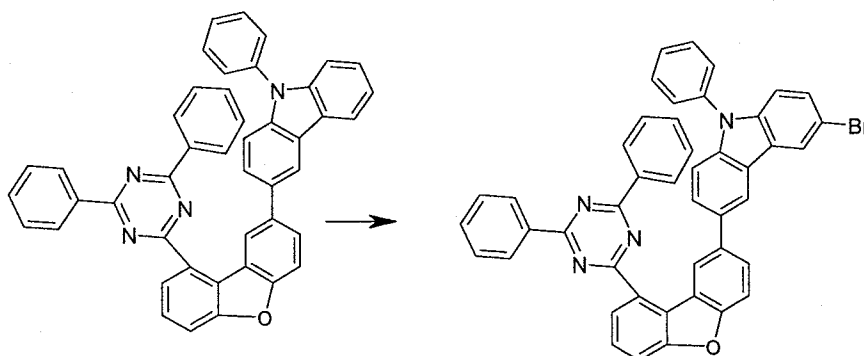
	反應物 1	反應物 2	產物	產率
g1		 [1572537-61-1]		61%

g2		[1814934-97-8] 		63%
g3		[1702359-51-0] 		64%
g4		[1572537-61-1] 		66%
g5		[1316311-24-6] 		72%

g6		 <p>[1572537-61-1]</p>		77%
g7	 <p>[1821221-55-9]</p>	 <p>[1572537-61-1]</p>		73%
g8	 <p>[1651196-06-3]</p>	 <p>[1572537-61-1]</p>		60%
g9	 <p>[1821221-60-6]</p>	 <p>[1316311-24-6]</p>		65%

<p>g10</p>	 <p>[11443049-88-4]</p>	 <p>[1572537-61-1]</p>		<p>67%</p>
<p>g11</p>		 <p>[1133057-98-3]</p>		<p>67%</p>
<p>g12</p>		 <p>[1416814-68-0]</p>		<p>62%</p>

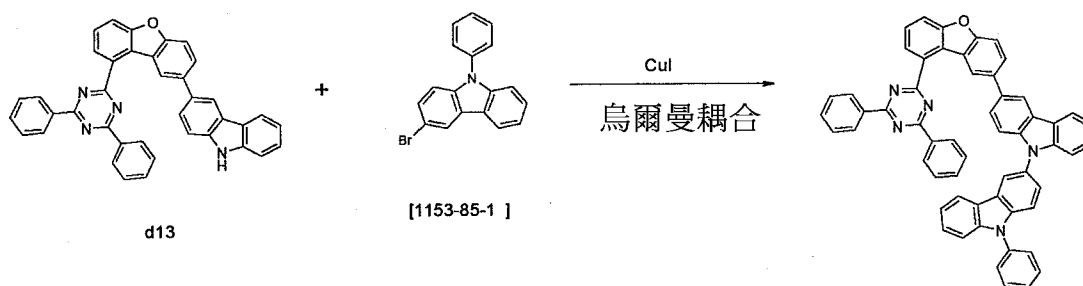
【0205】 h) 3-溴-6-[9-(4,6-二苯基-[1,3,5]三吡啶-2-基)二苯并咪唑-2-基]-9-苯基-9H-吡啶



將 121 g (190.0 mmol) 之 3-[9-(4,6-二苯基 [1,3,5] 三吡啶-2-基) 二苯并呋喃-2-基]-9-苯基-9H-吡啶懸浮於 2000 ml 之乙酸 (100%) 及 2000 ml 之硫酸 (95 至 98%) 中。將 34 g (190 mmol) 之 NBS 分成數部分添加至該懸浮液且該混合物係在黑暗中攪拌 2 小時。然後，添加水/冰，並將固體移出以及以乙醇清洗。殘留物係自甲苯再結晶。產量為 103 g (143 mmol)，對應於理論值之 76%。

實施例 3：合成式 (1b) 之化合物

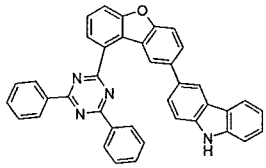
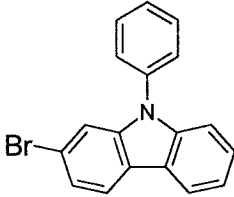
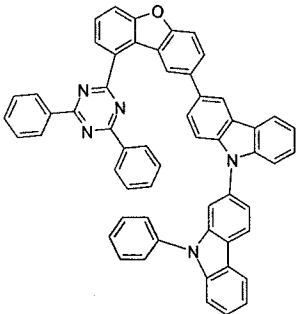
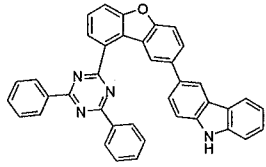
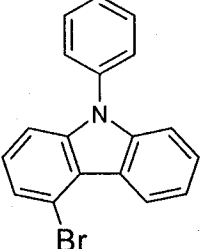
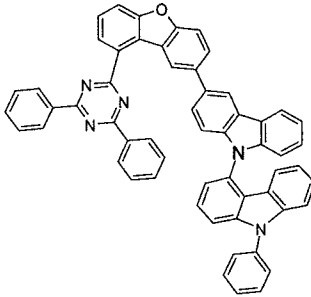
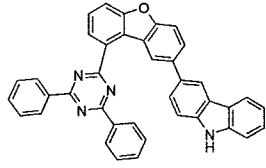
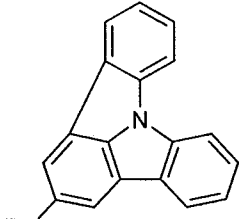
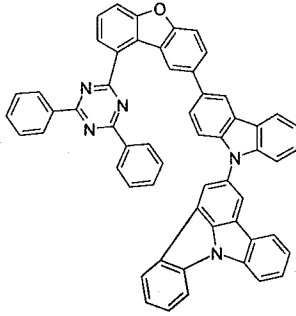
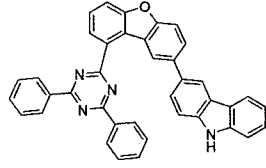
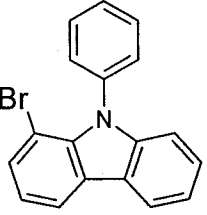
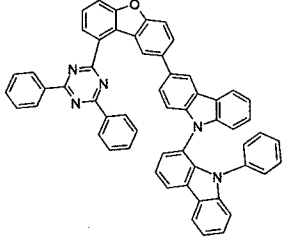
【0206】 a) 9-苯基-3'-(9-{4-苯基-6-[(E)-((Z)-1-丙烯基)丁-1,3-二烯基]-[1,3,5]三吡啶-2-基}二苯并呋喃-2-基)-9H-[3,9']聯吡啶

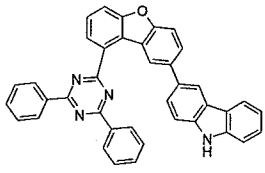
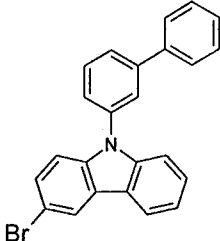
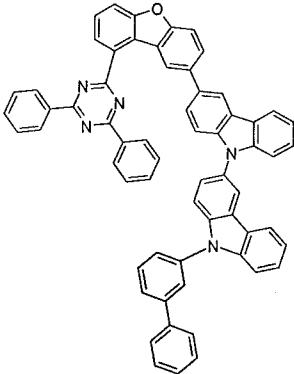
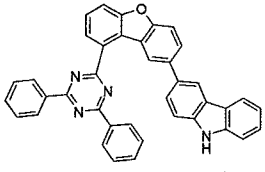
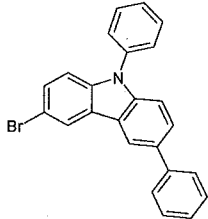
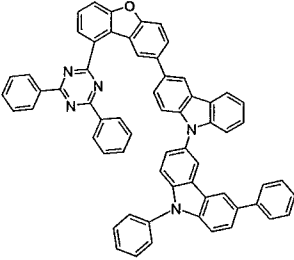


將 16.9 g (30 mmol) 之 3-[9-(4,6-二苯基 [1,3,5] 三吡啶-2-基) 二苯并呋喃-2-基]-9H-吡啶、9.9 g (31 mmol, 1.1 當量) 之 3-溴-9-苯基-9H-吡啶 及 12.1 g (12 mmol, 0.36 當量) 之碘化銅(I) 與 150 g (706 mmol, 4 當量) 之磷酸鉀懸浮於 1 l 之 1,4-二噁烷中。隨後，該反應混合物係除氣 30 分鐘，並於保護氣體下添加 17.6 ml (147 mmol, 0.83 當量) 之反-環己胺。該混合物係於回流下加熱 12 小時，且於反應結束後添加二氯甲烷。沉澱之固體係以吸濾濾除，溶解於甲苯中，

並經矽膠過濾。在減壓下移除溶劑之後，自甲苯/庚烷重複再結晶殘留物，最終予以昇華。獲得 12.9 g (16 mmol, 54%) 之 HPLC 純度 > 99.9% 的無色固體。

【0207】以類似方式製備下列化合物：

	反應物 1	反應物 2	產物	產率 [%]
1e		 [94994-62-4]		76
2e		 [1097884-37-1]		60
3e		 [1174032-81-5]		58
4e		 [1333002-37-1]		57

5e		 [1428551-28-3]		49
6e		 CAS 1160294-85-8		45

實施例 4：

【0208】 實施例9係從文獻得知並根據 WO 2009/021126 實施例1類似地製備。

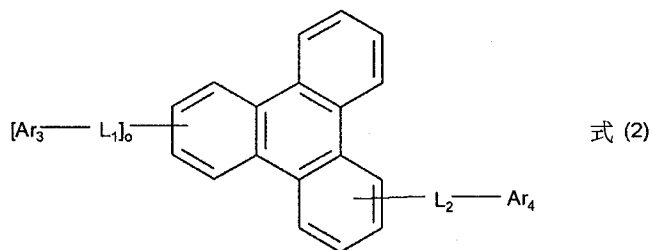
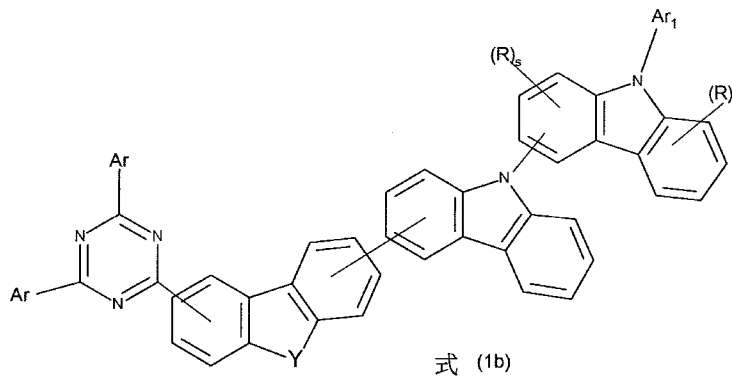
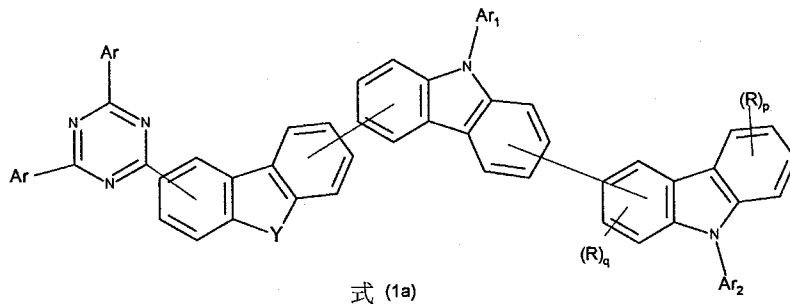
實施例 5：

【0209】 與實施例4類似地製備化合物 10至17。

【發明申請專利範圍】

【第 1 項】

一種組成物，其包含式 (1a) 或 (1b) 之至少一種化合物及至少一種式 (2) 之化合物



其中所使用之符號及指數如下：

Y 為 O 或 S；

Ar、Ar₁、Ar₂ 於各情況下各自獨立地為具有 5 至 40 個環原子及可經一或多個 R³ 基取代之芳基或雜芳基，或具有 6 至 40 個環原子及可經一或多個 R³ 基取代之芳族或雜芳族環系統；

p 、 q 各自獨立地為 0、1、2、3 或 4；

s 、 r 各自獨立地為 0、1、2、3 或 4；

R 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組： D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 $N(Ar)_2$ 、 $N(R^2)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $P(Ar)_2$ 、 $B(Ar)_2$ 、 $Si(Ar)_3$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 20 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有 3 至 20 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基或具有 2 至 20 個碳原子之烯基(其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經 $R^2C=CR^2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 或 $CONR^2$ 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換)、具有 5 至 40 個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有 5 至 40 個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 40 個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，此處有可能不超過一個 R 取代基與 Ar_1 一起形成可經一或多個 R^2 基取代之單環或多環脂族、芳族或雜芳族環系統；

o 為 0 或 1；

L_1 、 L_2 於各情況下係相同或不同，且為單鍵或具有 5 至 30 個環原子及可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統；

Ar_3 及 Ar_4 各自獨立地為具有 6 至 40 個環原子及可經一或多個 R^1 基取代之芳族或雜芳族環系統；

R^1 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 $N(Ar)_2$ 、 $N(R^2)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、 $P(Ar)_2$ 、 $B(Ar)_2$ 、 $Si(Ar)_3$ 、 $Si(R^2)_3$ 、具有 1 至 20 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有 3 至 20 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基或具有 2 至 20 個碳原子之烯基(其各可經一或多個 R^2 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經 $R^2C=CR^2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 或 $CONR^2$ 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換)、具有 5 至 40 個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^2 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有 5 至 40 個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或具有 5 至 40 個環原子以及可經一或多個 R^2 基取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，隨意地可能兩個取代基 R^1 鍵結至同一碳原子或鍵結至相鄰碳原子以形成可經一或多個 R^2 基取代之單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統；

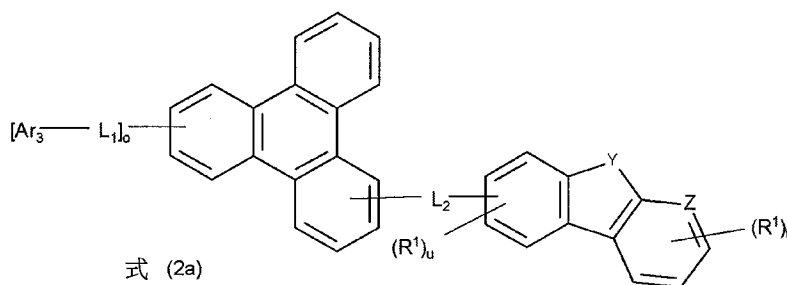
R^2 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 NO_2 、 $N(Ar)_2$ 、 NH_2 、 $N(R^3)_2$ 、 $C(=O)Ar$ 、 $C(=O)H$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(Ar)_2$ 、具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或硫烷基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或硫烷基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基或炔基(其各可經一或多個 R^3 基取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經 $HC=CH$ 、

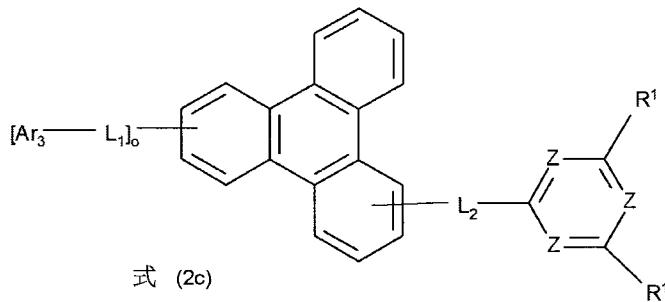
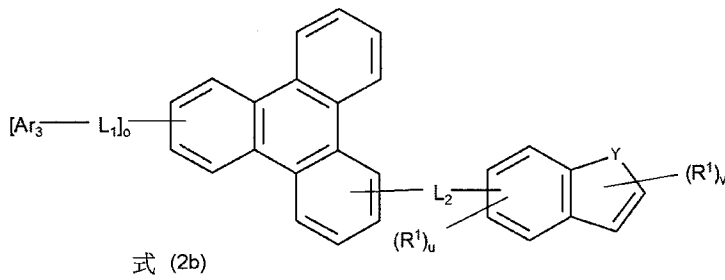
$R^3C=CR^3$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NH 、 NR^3 、 O 、 S 、 $CONH$ 或 $CONR^3$ 置換，以及其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換)、具有 5 至 60 個環原子以及於各情況下可經一或多個 R^3 基取代之芳族或雜芳族環系統、具有 5 至 60 個環原子以及可經一或多個 R^3 基取代之芳氧基或雜芳氧基、或該等系統之組合；其中隨意地可能二或更多個相鄰取代基 R^2 形成可經一或多個 R^3 基取代之單環或多環、脂族、芳族或雜芳族環系統；

R^3 於各情況下係相同或不同，且係選自由下列所組成之群組： H 、 D 、 F 、 CN 、具有 1 至 20 個碳原子之脂族烴基、或具有 5 至 30 個環原子之芳族或雜芳族環系統(其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 或 CN 置換，以及其可經一或多個各具有 1 至 4 個碳原子之烷基取代)；同時，可能二或更多個相鄰取代基 R^3 一起形成單環或多環、脂族環系統。

【第 2 項】

如申請專利範圍第 1 項之組成物，其中式 (2) 之化合物符合式 (2a)、(2b) 或 (2c)





其中所使用之符號及指數具有如申請專利範圍第 1 項之定義，

Z 於各情況下獨立地為 N 或 CR¹，其中 R¹ 具有如申請專利範圍第 1 項明確指出之定義，

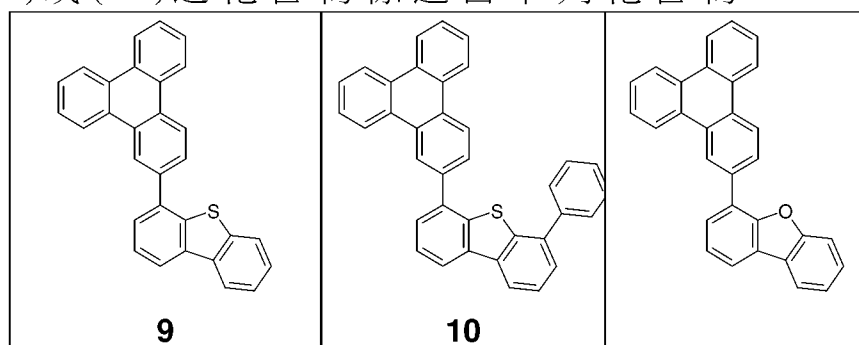
在式 (2a) 或 (2b) 中之 Y 為 O 或 S，

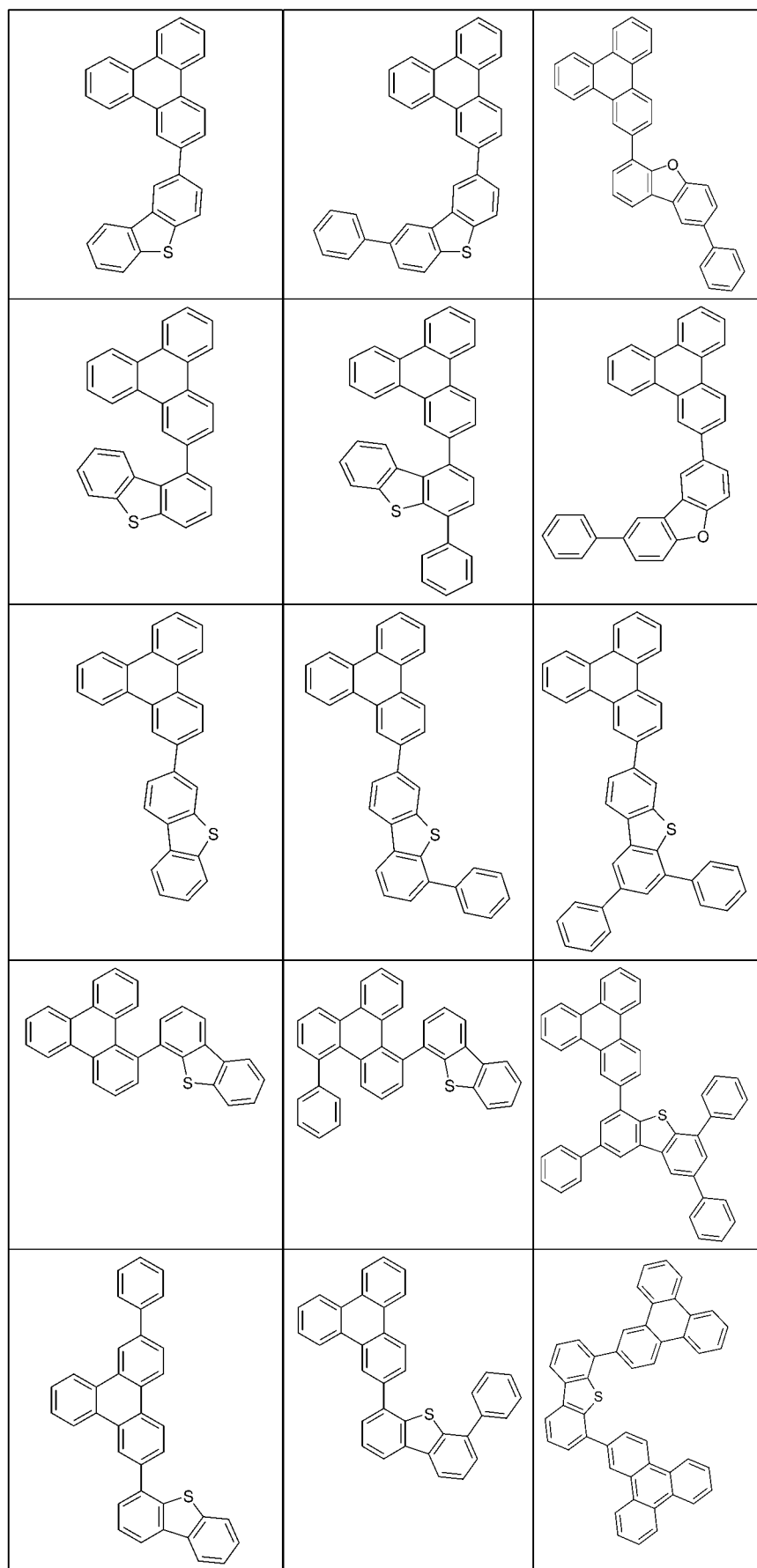
t 及 u 各自獨立地為 0、1、2 或 3，

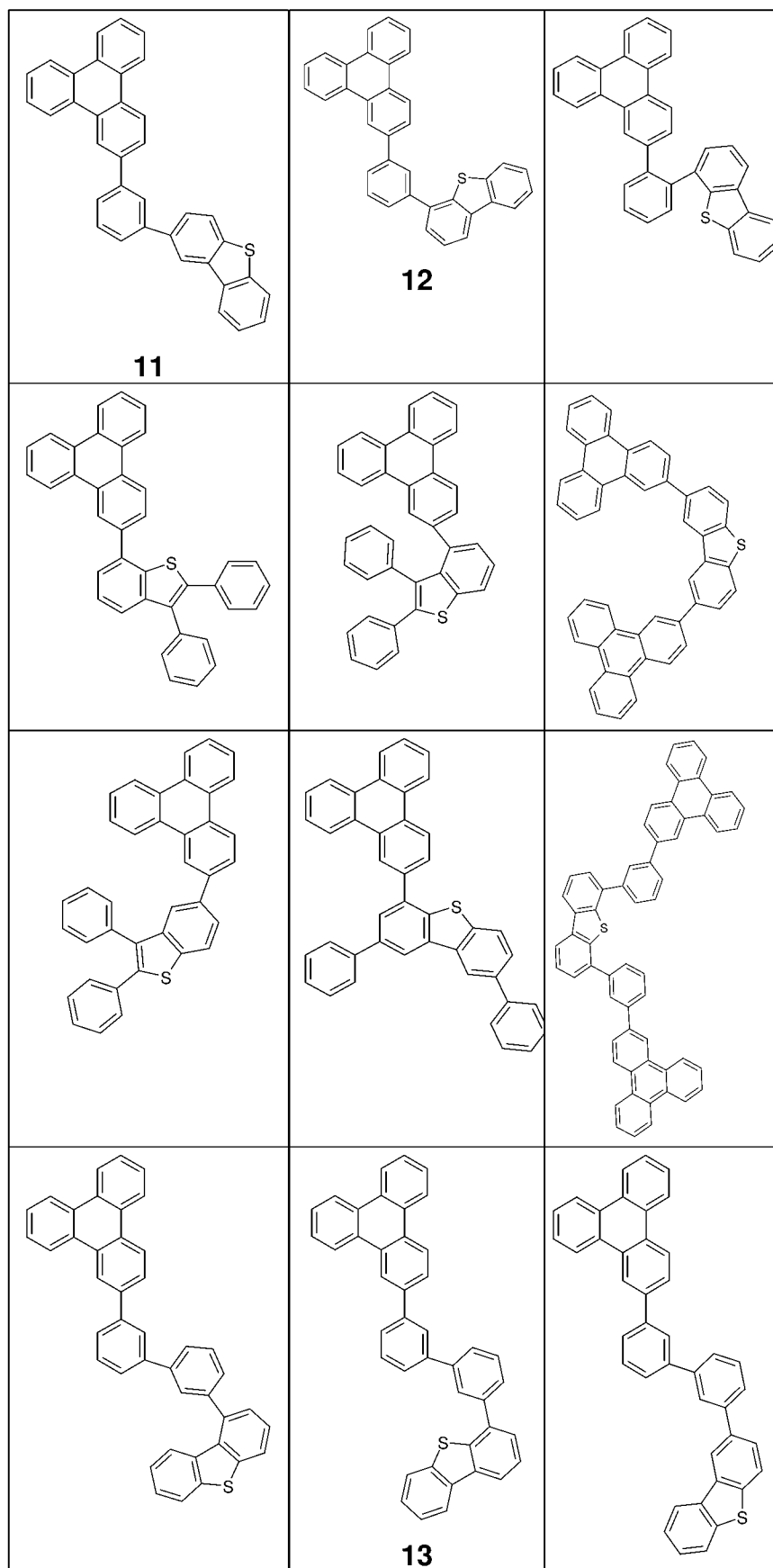
v 於各情況下獨立地為 0、1 或 2。

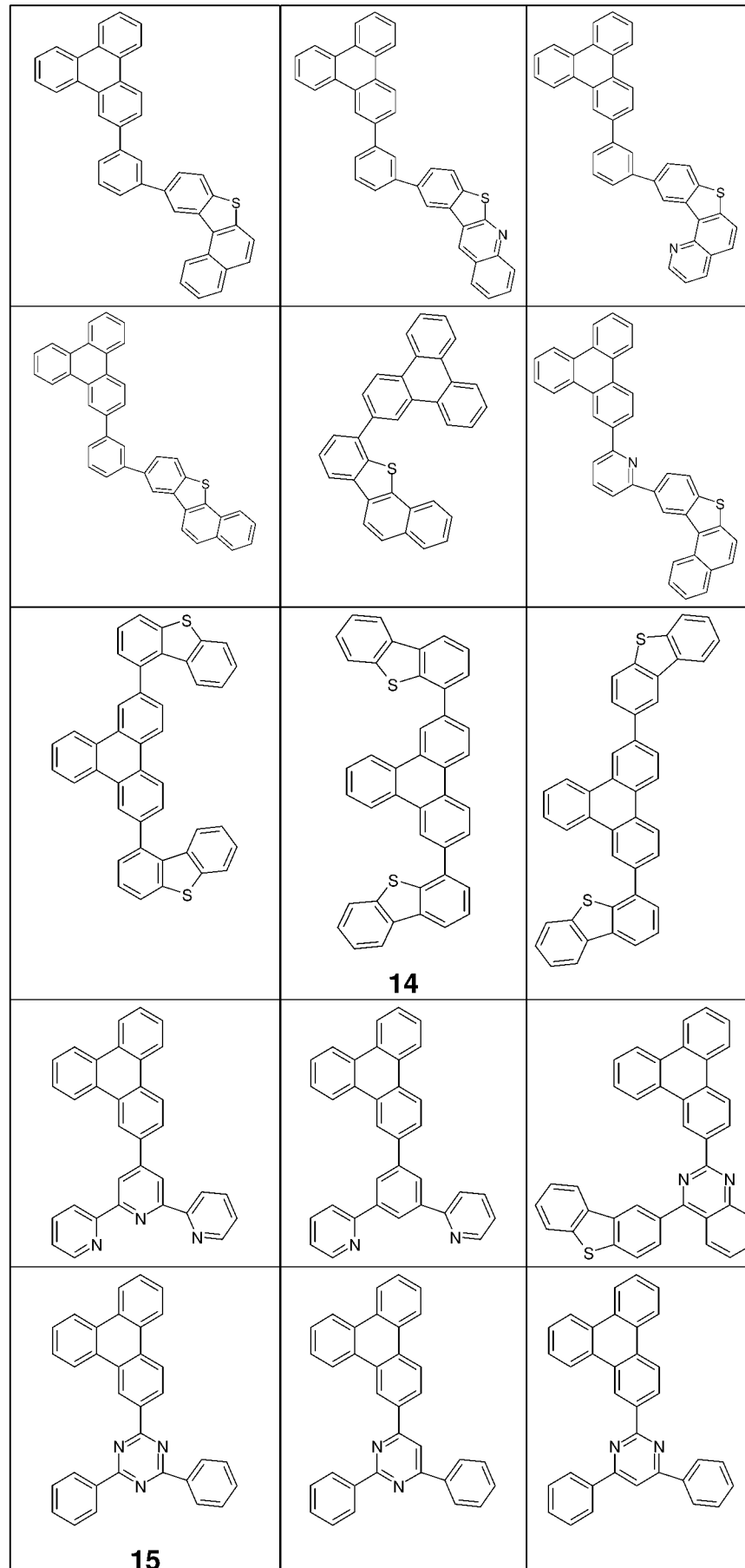
【第 3 項】

如申請專利範圍第 1 或 2 項之組成物，其中式 (2)、(2a)、(2b) 或 (2c) 之化合物係選自下列化合物：



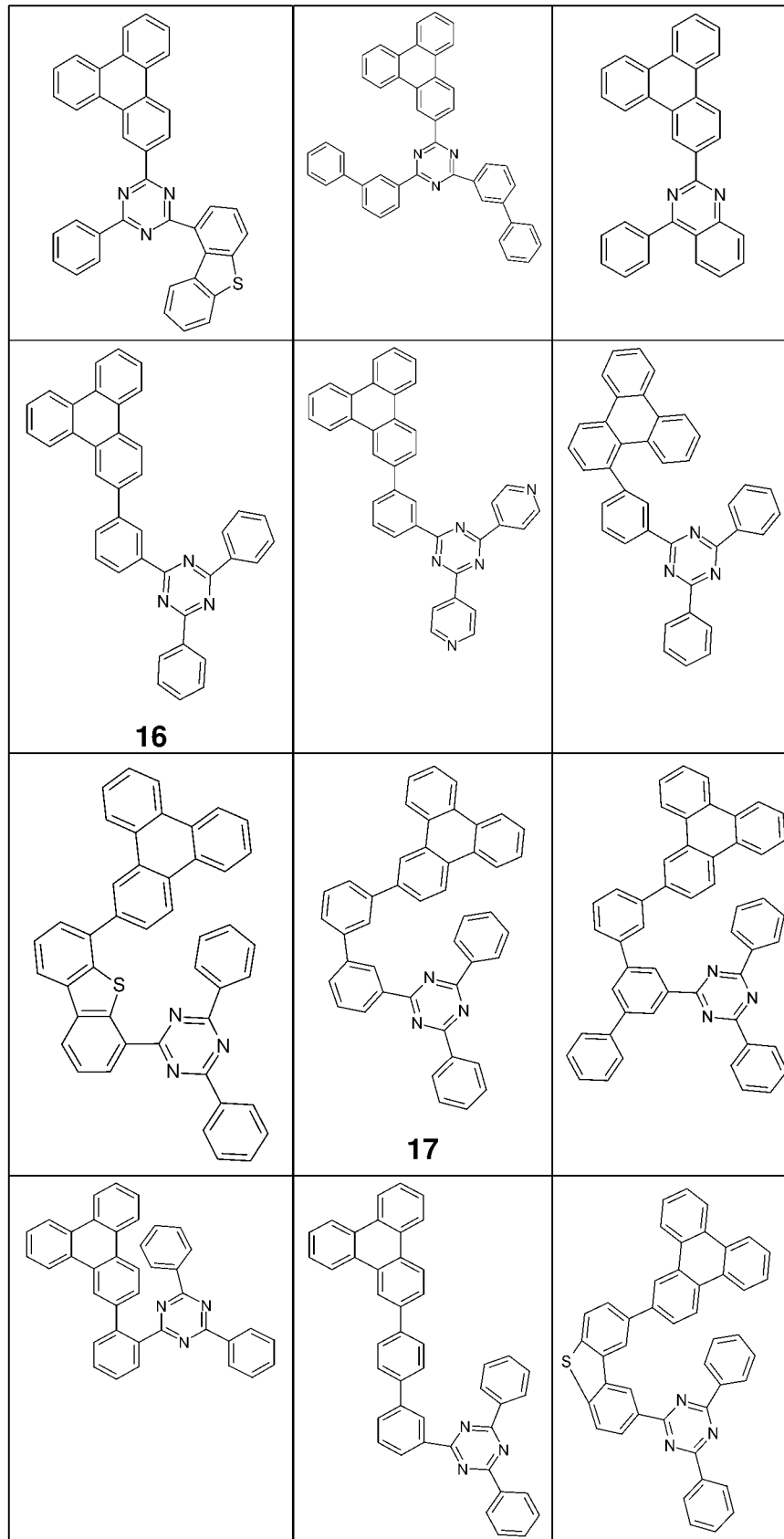






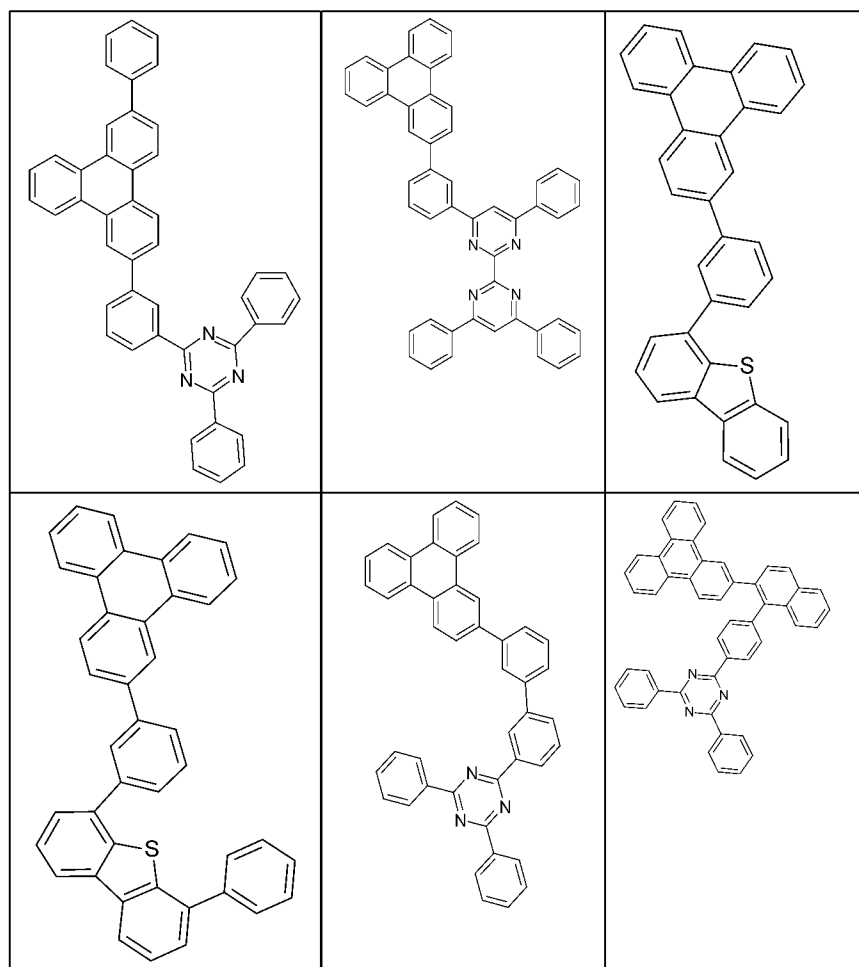
14

15



16

17



。

【第4項】

如申請專利範圍第1或2項之組成物，其中該組成物包含至少一種選自由下列所組成之群組的另外的化合物：電洞注入材料、電洞傳輸材料、電洞阻擋材料、寬能帶隙材料、螢光發射體、磷光發射體、主體材料、電子阻擋材料、電子傳輸材料及電子注入材料、n-摻雜劑及p-摻雜劑。

【第5項】

一種調配物，其包含如申請專利範圍第1至4項中任一項之組成物及至少一種溶劑。

【第6項】

一種如申請專利範圍第1至4項中任一項之組成物之用途，其係用於有機電子裝置。

【第7項】

如申請專利範圍第6項之用途，其中該有機電子裝置係選自由下列所組成之群組：有機積體電路(OIC)、有機場效電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機電致發光裝置、有機太陽能電池(OSC)、有機光學偵測器及有機光受體。

【第8項】

一種有機電子裝置，其包含至少一種如申請專利範圍第1至4項中任一項之組成物。

【第9項】

如申請專利範圍第8項之裝置，其中該裝置係選自由下列所組成之群組：有機積體電路(OIC)、有機場效電晶體(OFET)、有機薄膜電晶體(OTFT)、有機電致發光裝置、有機太陽能電池(OSC)、有機光學偵測器及有機光受體。

【第10項】

如申請專利範圍第8或9項之裝置，其中該裝置係選自由下列所組成之群組的電致發光裝置：有機發光電晶體(OLET)、有機場淬滅裝置(organic field quench device)(OFQD)、有機發光電化學電池(OLEC、LEC、LEEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機發光二極體(OLED)。

【 第 11 項 】

如申請專利範圍第 8 或 9 項之裝置，其中該裝置包含如申請專利範圍第 1 至 5 項中任一項之組成物於發射層 (EML)、於電子傳輸層 (ETL)、於電子注入層 (EIL) 及 / 或於電洞阻擋層 (HBL) 中。

【 第 12 項 】

如申請專利範圍第 8 或 9 項之裝置，其中該裝置包含如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之組成物連同磷光發射體一起於該發射層中。

【 第 13 項 】 一種用於製造如申請專利範圍第 8 至 12 項中任一項之裝置之方法，其中至少一個包含如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之組成物之有機層係藉由氣相沉積或從溶液施加。

【 第 14 項 】

如申請專利範圍第 13 項之方法，其中如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項所述之至少一種式 (1) 之化合物及至少一種式 (2) 之化合物係隨意地連同其他材料從氣相依次沉積或從至少兩種材料源同時沉積，以及形成該有機層。

【 第 15 項 】

如申請專利範圍第 13 項之方法，其中如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之組成物係用作氣相沉積之材料源以及形成該有機層。

【 第 16 項 】

如申請專利範圍第 13 項之方法，其中使用如申請專利

範圍第5項之調配物以施加該有機層。