



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公開本

(11) 公開編號：TW 201833300 A

(43) 公開日：中華民國 107 (2018) 年 09 月 16 日

(21) 申請案號：107102180

(22) 申請日：中華民國 107 (2018) 年 01 月 22 日

(51) Int. Cl. :

*C09K11/06 (2006.01)**C07D209/82 (2006.01)**C07D491/00 (2006.01)**C07D495/04 (2006.01)**C07D403/00 (2006.01)**C07D405/14 (2006.01)**C07D409/14 (2006.01)**C07D493/04 (2006.01)**C07D471/02 (2006.01)**C07D401/04 (2006.01)**C07D487/02 (2006.01)**C07F7/10 (2006.01)**C07F9/6561 (2006.01)**H01L51/50 (2006.01)*

(30) 優先權：2017/01/25

歐洲專利局

17152962.1

(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：帕姆 安瑪 PARHAM, AMIR HOSSAIN (DE)；路德曼 歐雷莉 LUDEMANN, AURELIE (FR)；喬斯汀 多明尼克 JOOSTEN, DOMINIK (DE)；葛羅斯曼 托拜亞斯 GROSSMANN, TOBIAS (DE)；克洛伯 喬納斯 KROEBER, JONAS VALENTIN (DE)

(74) 代理人：林志剛

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：15 項 圖式數：0 共 151 頁

(54) 名稱

咔唑衍生物

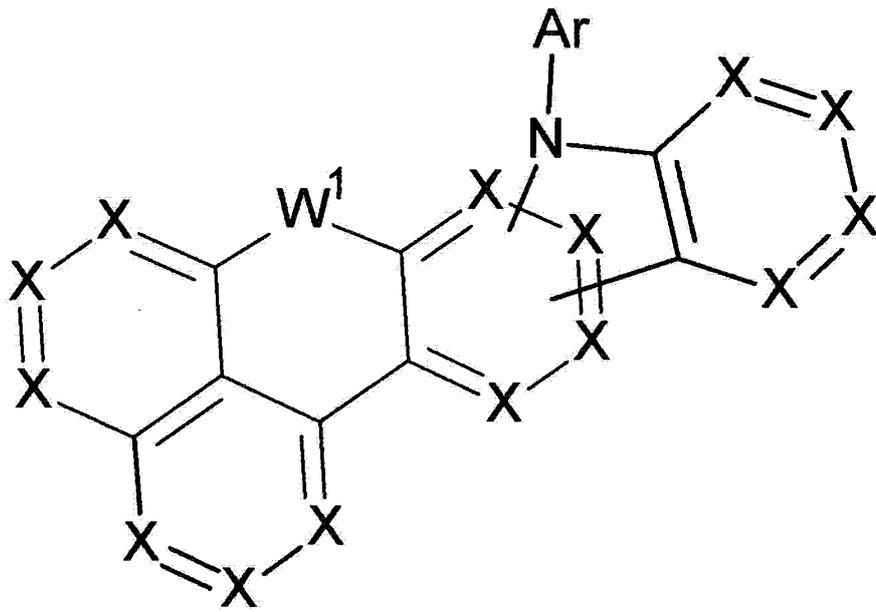
CARBAZOLE DERIVATIVES

(57) 摘要

本發明關於一種咔唑衍生物，尤其是用於電子裝置者。本發明又關於一種用於製備本發明化合物之方法以及一種包含彼等化合物的電子裝置。

The present invention relates to carbazole derivatives, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

特徵化學式：



式 (I)

【發明說明書】

【中文發明名稱】

咔唑衍生物

【英文發明名稱】

Carbazole derivatives

【技術領域】

本發明關於咔唑衍生物，尤其是使用於電子裝置者。本發明進一步關於用於製備本發明化合物之方法以及包含彼等化合物之電子裝置。

【先前技術】

使用於有機電致發光裝置(OLED)中的發光材料常為展現磷光(phosphorescence)之有機金屬錯合物。由於量子力學的原因，使用有機金屬化合物作為磷光發射體，高達四倍能量效率及功率效率是可能的。一般而言，仍需要改良OLED，也尤其是展現磷光的OLED，例如關於效率、操作電壓及壽命。

有機電致發光裝置之性質並非僅由所使用的發射體決定。在此也具有特別重要的意義者尤其是所使用的其他材料，諸如主體/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。對這些材料之改良可導致對電致發光裝置之明顯改良。

根據先前技術，用作為磷光化合物之基質材料的實例包括咪唑衍生物，儘管也有具有咪唑結構及衍生自苯并吡啶(benzoxanthene)結構二者的已知化合物。根據彼等的取代，這些化合物可用作為電子傳輸材料。例如，KR 2015/0065383描述相應化合物。然而，所述苯并吡啶衍生物包括萘結構，以該萘結構形成咪唑基。

一般而言，在這些材料例如用作為基質材料、電洞導體材料、或電子傳輸材料的情況下，仍然需要改良，特別是關於壽命，但也關於裝置之效率和操作電壓。再者，該等化合物應具有高色純度。

【發明內容】

本發明所解決的問題因此為提供其係適合使用於有機電子裝置中，尤其是使用於有機電致發光裝置中，且當其使用於此裝置時導致良好裝置性質之化合物；及提供相應電子裝置。

更特別地，本發明所解決的問題為提供導致高壽命、良好效率及低操作電壓之化合物。特別地，基質材料、電洞導體材料或電子傳輸材料之性質對有機電致發光裝置之壽命和效率也具有基本影響。

本發明所解決的又一問題可認為是提供適用於磷光或螢光(fluorescent)OLED之化合物，尤其是用作為基質材料之化合物。更特別地，本發明所解決的問題為提供適合於發紅色-、黃色-和綠色-磷光OLED之基質材料。

此外，化合物，尤其當彼等用作為有機電致發光裝置中之基質材料、電洞導體材料或電子傳輸材料時，應獲致具有優異色純度之裝置。

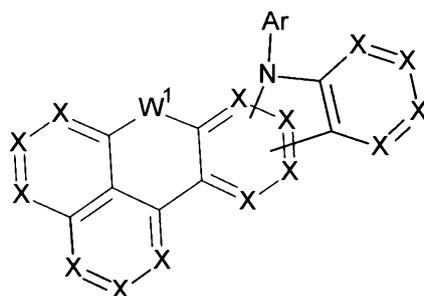
再者，化合物應可以非常簡單的方式加工且尤其是展現良好溶解度及膜形成。例如，化合物應該展現提高的氧化安定性及改良的玻璃轉移溫度。

又一目的可認為是非常便宜地且恆定品質地提供具有優異性能之電子裝置。

又者，應可能使電子裝置使用或適應於許多目的。更特別地，應在廣溫度範圍保持電子裝置的性能。

令人驚訝地，已經發現下文所詳細描述的特定化合物解決這些問題並消除來自先前技術的缺點。化合物之使用導致有機電子裝置(尤其是，有機電致發光裝置)之非常良好的性質，尤其是關於壽命、效率和操作電壓。本發明因此提供電子裝置，尤其是有機電致發光裝置，其含有此等化合物及相應較佳具體實施例。

本發明因此提供一種化合物，其包含至少一種式(I)之結構：



式 (I)

其中所使用的符號如下：

X 在各情況下係相同或不同且為 **N** 或 **CR¹**，較佳 **CR¹**，或者若吲哚并基 (indolo group) 鍵結至 **X** 時，則為 **C**；

W¹ 為 **O**、**S**、**C(R¹)₂**、**P(=O)Ar** 或 **Si(R¹)₂**，較佳 **O**、**S**、**C(R¹)₂** 或 **P(=O)Ar**，更佳 **O**、**S** 或 **C(R¹)₂**，最佳 **O** 或 **S**；

R¹ 在各情況下係相同或不同且為 **H**；**D**；**F**；**Cl**；**Br**；**I**；**CN**；**NO₂**；**N(Ar¹)₂**；**N(R²)₂**；**C(=O)Ar¹**；**C(=O)R²**；**P(=O)(Ar¹)₂**；**P(Ar¹)₂**；**B(Ar¹)₂**；**B(OR²)₂**；**Si(Ar¹)₃**；**Si(R²)₃**；具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基；烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基，其之各者可經一或多個 **R²** 基團取代，其中一或多個非相鄰 **CH₂** 基可經 **-R²C=CR²-**、**-C≡C-**、**Si(R²)₂**、**Ge(R²)₂**、**Sn(R²)₂**、**C=O**、**C=S**、**C=Se**、**C=NR²**、**-C(=O)O-**、**-C(=O)NR²-**、**NR²**、**P(=O)(R²)**、**-O-**、**-S-**、**SO** 或 **SO₂** 置換且其中一或多個氫原子可經 **D**、**F**、**Cl**、**Br**、**I**、**CN** 或 **NO₂** 置換；或具有 5 至 40 個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 **R²** 基團取代之芳族或雜芳族環系統；或具有 5 至 40 個芳族環原子且可經一或多個 **R²** 基團取代之芳氧基或雜芳氧基；或具有 5 至 40 個芳族環原子且可經一

或多個 R^2 基團取代之芳烷基或雜芳烷基；或這些系統的組合；同時，二或更多個較佳相鄰之 R^1 基團一起可形成單環或多環之脂族；雜脂族；芳族或雜芳族環系統；

Ar 在各情況下係相同或不同且為具有 5 至 60 個芳族環原子且可經一或多個較佳非芳族 R^1 基團取代之芳族或雜芳族環系統；

Ar¹ 在各情況下係相同或不同且為具有 5 至 30 個芳族環原子且可經一或多個較佳非芳族 R^2 基團取代之芳族或雜芳族環系統；同時，鍵結到相同之矽原子、氮原子、磷原子或硼原子的二個 Ar^1 基團也可經由藉由單鍵之橋或選自下列中之橋結合在一起： $B(R^2)$ 、 $C(R^2)_2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^2$ 、 $C=C(R^2)_2$ 、 O 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^2)$ 、 $P(R^2)$ 及 $P(=O)R^2$ ；

R² 在各情況下係相同或不同且為 H ； D ； F ； Cl ； Br ； I ； CN ； $B(OR^3)_2$ ； NO_2 ； $C(=O)R^3$ ； $CR^3=C(R^3)_2$ ； $C(=O)OR^3$ ； $C(=O)N(R^3)_2$ ； $Si(R^3)_3$ ； $P(R^3)_2$ ； $B(R^3)_2$ ； $N(R^3)_2$ ； NO_2 ； $P(=O)(R^3)_2$ ； OSO_2R^3 ； OR^3 ； $S(=O)R^3$ ； $S(=O)_2R^3$ ；具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基，其之各者可經一或多個 R^3 基團取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經

-R³C=CR³- 、 -C≡C- 、 Si(R³)₂ 、 Ge(R³)₂ 、 Sn(R³)₂ 、 C=O 、 C=S 、 C=NR³ 、 -C(=O)O- 、 -C(=O)NR³- 、 NR³ 、 P(=O)(R³) 、 -O- 、 -S- 、 SO 或 SO₂ 置換且其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO₂ 置換；或具有 5 至 40 個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R³ 基團取代之芳族或雜芳族環系統；或具有 5 至 40 個芳族環原子且可經一或多個 R³ 基團取代之芳氧基或雜芳氧基；或這些系統的組合；同時，二或更多個較佳相鄰之 R² 取代基一起也可形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統；

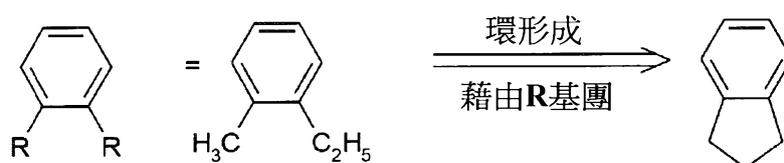
R³ 在各情況下係相同或不同且為選自下列所組成群組：H 、 D 、 F 、 CN 、 具有 1 至 20 個碳原子之脂族烴基團、或具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 或 CN 置換且其可經一或多個各具有 1 至 4 個碳原子之烷基取代；同時，二或更多個較佳相鄰之 R³ 取代基一起也可形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統。

本文之式 (I) 中的吡啶并基係鍵結到兩個相鄰 X 原子。此外，吡啶并基可於兩個走向上鍵結，而使得吡啶并基的氮原子與 W¹ 基係相對於中心苯環要麼在順式位置要麼在反式位置。

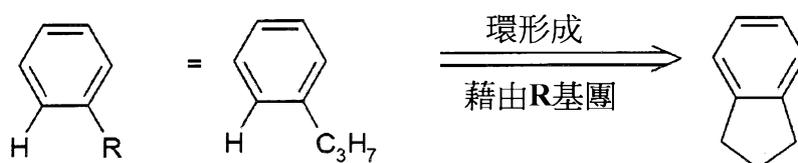
在本發明的內文中，相鄰的碳原子為彼此直接鍵結的

碳原子。此外，在基團之定義中，"相鄰基團"意指此等基團係鍵結至相同的碳原子或至相鄰的碳原子。此等定義相應地適用於尤其是術語"相鄰基(adjacent group)"及"相鄰取代基"。

在本說明書的內文中，二或更多個基團一起可形成環的措辭應理解為係指尤其是該二個基團藉由化學鍵彼此結合而形式上消去二個氫原子。此以下列圖示例示說明：



然而，此外，上述措辭亦應理解為意指：若二個基團中之一者為氫，則第二個基團鍵結至該氫原子所鍵結的位置，形成一環。此將以下列圖示例說明：



在本發明的內文中，稠合芳基、稠合芳族環系統或稠合雜芳族環系統為其中二或更多個芳族基團沿著共用邊彼此稠合(即并環(annelated))而使得例如二個碳原子隸屬於至少二個芳族或雜芳族環(如例如在萘中)之基團。相比之下，例如，在本發明的內文中萘不為稠合芳基，因為萘中的二個芳族基團不具有共用邊。相應定義適用於雜芳基且適用於可但不一定也含有雜原子之稠合環系統。

在本發明的內文中，芳基含有6至60個碳原子，較佳6至40個碳原子，更佳6至30個碳原子；在本發明的內文中，雜芳基含有2至60個碳原子，較佳2至40個碳原子，更佳2至30個碳原子，以及至少一個雜原子，先決條件為碳原子和雜原子的總數為至少5。雜原子較佳係選自N、O及/或S。芳基或雜芳基在此係理解為意指要麼是簡單芳族環，亦即苯、或簡單雜芳族環，例如吡啶、嘧啶、噁吩等等，要麼是稠合芳基或雜芳基，例如萘、蔥、菲、喹啉、異喹啉等等。

在本發明的內文中，芳族環系統係在環系統中含有6至60個碳原子，較佳6至40個碳原子，更佳6至30個碳原子。在本發明的內文中，雜芳族環系統係在環系統中含有1至60個碳原子，較佳1至40個碳原子，更佳1至30個碳原子，以及至少一個雜原子，先決條件為碳原子和雜原子的總數為至少5。雜原子較佳係選自N、O及/或S。在本發明的內文中，芳族或雜芳族環系統應理解為意指不一定只含有芳基或雜芳基，而是其中二或更多個芳基或雜芳基可能被非芳族單元(較佳為少於10%之氫以外的原子，例如，碳、氮或氧原子或羰基)中斷之系統。例如，在本發明的內文中，諸如9,9'-螺聯萘、9,9-二芳基萘、三芳基胺、二芳基醚類、二苯乙烯、等等之系統亦應視為芳族環系統，且還有其中二或更多個芳基被，例如直鏈或環狀烷基或被矽基所中斷的系統。此外，其中二或更多個芳基或雜芳基彼此直接鍵結的系統，例如，聯苯、聯三苯、聯四苯或聯

吡啶同樣應視為芳族或雜芳族環系統。

環狀烷基、烷氧基或烷硫基在本發明的內文中係理解為意指單環、雙環或多環的基團。

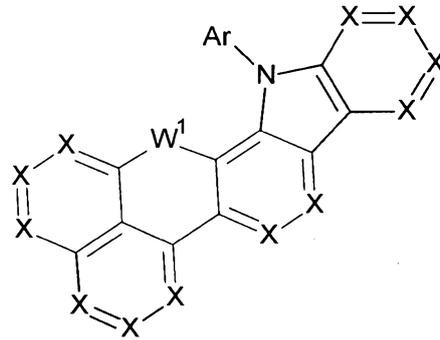
在本發明的內文中，其中個別氫原子或 CH_2 基團亦可經上述基團置換之 C_1 -至 C_{20} -烷基係理解為意指，例如甲基、乙基、正丙基、異丙基、環丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、環丁基、2-甲基丁基、正戊基、第二戊基、第三戊基、2-戊基、新戊基、環戊基、正己基、第二己基、第三己基、2-己基、3-己基、新己基、環己基、1-甲基環戊基、2-甲基戊基、正庚基、2-庚基、3-庚基、4-庚基、環庚基、1-甲基環己基、正辛基、2-乙基己基、環辛基、1-雙環[2.2.2]辛基、2-雙環[2.2.2]辛基、2-(2,6-二甲基)辛基、3-(3,7-二甲基)辛基、金剛烷基、三氟甲基、五氟乙基、2,2,2-三氟乙基、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-正十二烷-1-基、1,1-二甲基-正十四烷-1-基、1,1-二甲基-正十六烷-1-基、1,1-二甲基-正十八烷-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-正十二烷-1-基、1,1-二乙基-正十四烷-1-基、1,1-二乙基-正十六烷-1-基、1,1-二乙基-正十八烷-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-基和1-(正癸基)環己-1-基基團。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。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。C₁-至C₄₀-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。

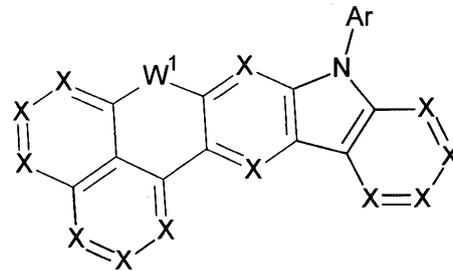
具有5至60個，較佳5至40個芳族環原子，更佳5至30個芳族環原子且在各情況下亦可經上述基團取代並可經由任何所欲位置結合至芳族或雜芳族系統之芳族或雜芳族環系統係理解為意指，例如衍生自下列者之基團：苯、萘、蒽、苯并蒽、菲、苯并菲、芘、葸(chrysene)、芘、丙二烯合萘(fluoranthene)、苯并丙二烯合萘(benzofluoranthene)、稠四苯、稠五苯、苯并芘、聯苯、聯伸二苯(biphenylene)、聯三苯(terphenyl)、聯伸三苯(terphenylene)、萘、螺聯萘、二氫菲、二氫芘、四氫芘、順-或反-茛并萘、順-或反-單苯并茛并萘、順-或反-二苯并茛并萘、參茛并苯(truxene)、異參茛并苯(isotruxene)、螺參茛并苯、螺異參茛并苯、呋喃、苯并呋喃、異苯并呋喃、二苯并呋喃、噻吩、苯并噻吩、異苯并噻吩、二苯并噻吩、吡咯、吡啶、異吡啶、咪唑、吡啶并咪唑、茛并咪唑、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、啡噻嗪、啡噁嗪、吡啶、吡啶、咪唑、苯并咪唑、萘并咪唑(naphthimidazole)、菲

并咪唑 (phenanthrimidazole) 、吡啶并咪唑 (pyridimidazole)、吡嗪并咪唑 (pyrazinimidazole)、喹噁啉并咪唑 (quinoxalinimidazole)、噁唑、苯并噁唑、萘并噁唑 (naphthoxazole)、蒽并噁唑 (anthroxazole)、菲并噁唑 (phenanthroxazole)、異噁唑、1,2-噻唑、1,3-噻唑、苯并噻唑、嗒嗪、苯并嗒嗪、嘧啶、苯并嘧啶、喹噁啉、1,5-二氮雜蒽、2,7-二氮雜芘、2,3-二氮雜芘、1,6-二氮雜芘、1,8-二氮雜芘、4,5-二氮雜芘、4,5,9,10-四氮雜芘、吡嗪、啡嗪、啡噁嗪、啡噻嗪、熒紅環 (fluorubin)、噻啶、氮雜呋唑、苯并呋啉、啡啉、1,2,3-三唑、1,2,4-三唑、苯并三唑、1,2,3-噁二唑、1,2,4-噁二唑、1,2,5-噁二唑、1,3,4-噁二唑、1,2,3-噻二唑、1,2,4-噻二唑、1,2,5-噻二唑、1,3,4-噻二唑、1,3,5-三嗪、1,2,4-三嗪、1,2,3-三嗪、四唑、1,2,4,5-四嗪、1,2,3,4-四嗪、1,2,3,5-四嗪、嘌呤、喋啶、吲哚 (indolizine) 和苯并噻二唑。

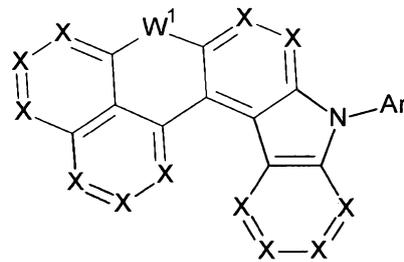
於較佳組態中，本發明之化合物可包含至少一種式 (IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIe) 或 (IIf) 之結構：



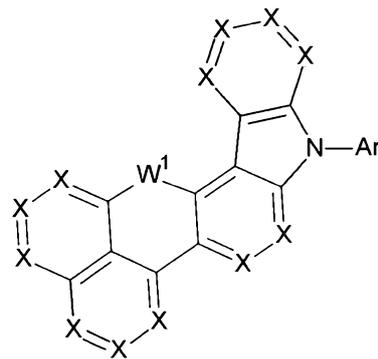
式 (IIa)



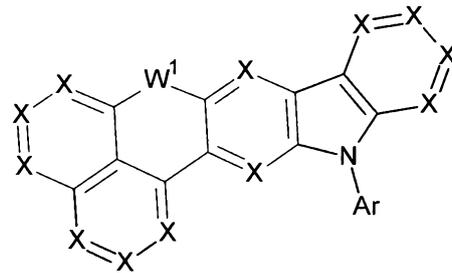
式 (IIb)



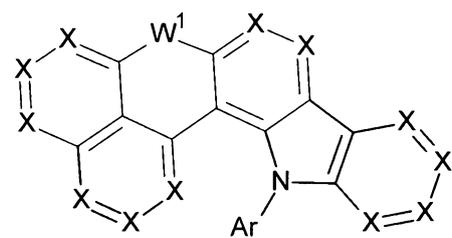
式 (IIc)



式 (IIId)



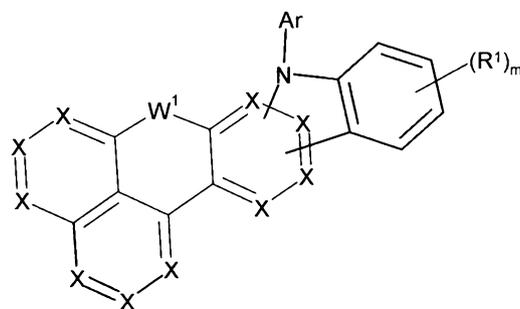
式 (IIe)



式 (IIf)

其中所使用的符號 Ar、 W^1 及 X 具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (I) 所給予之定義。

較佳，本發明之化合物可包含至少一種式 (III) 之結構：

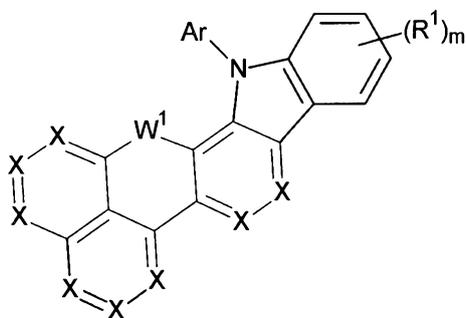


式 (III)

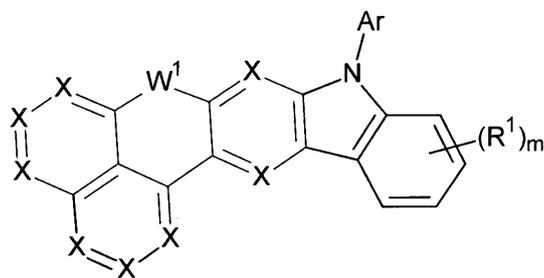
其中符號 R^1 、Ar、 W^1 及 X 具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (I) 所給予之定義，且 m 為 0、1、2、3 或 4，較

佳 0、1、2 或 3。

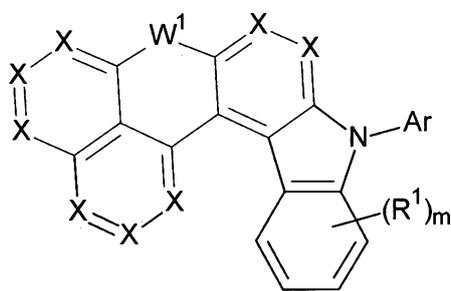
較佳，本發明之化合物可包含至少一種式 (IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIIe) 或 (III f) 之結構：



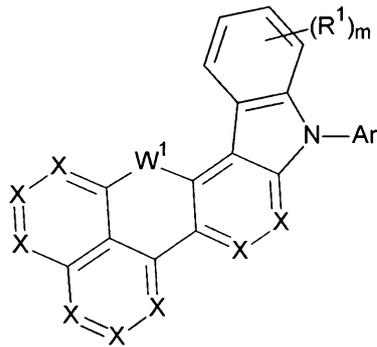
式 (IIIa)



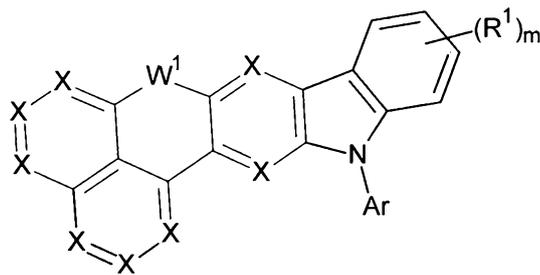
式 (IIIb)



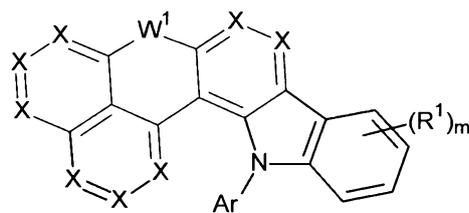
式 (IIIc)



式 (III d)



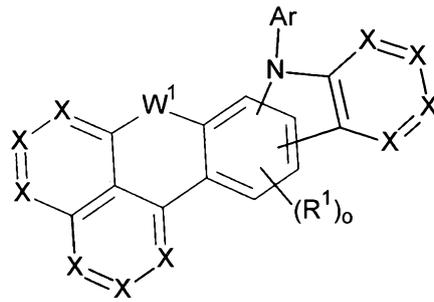
式 (III e)



式 (III f)

其中符號 R^1 、 Ar 、 W^1 及 X 具有上面所給予之定義，尤其是針對式(I)所給予之定義，且 m 為0、1、2、3或4，較佳0、1、2或3。

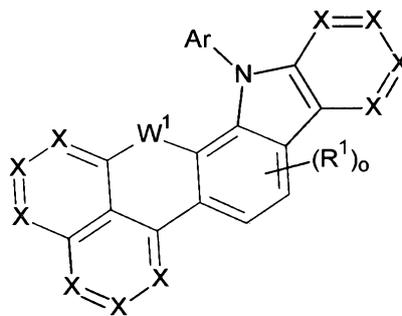
於又一較佳具體實施例中，本發明之化合物可包含至少一種式(IV)之結構：



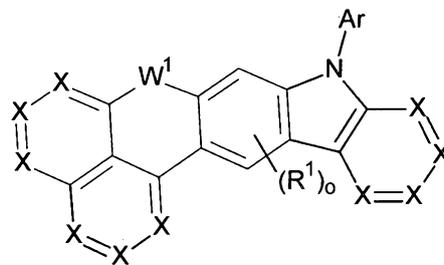
式 (IV)

其中符號 R^1 、Ar、 W^1 及 X 具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (I) 所給予之定義，且 o 為 0、1 或 2，較佳 0 或 1。

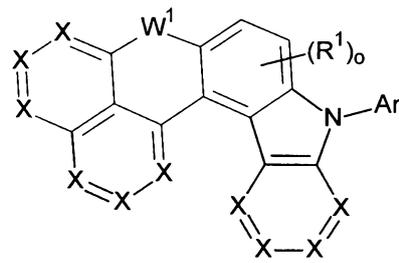
較佳，本發明之化合物可包含至少一種式 (IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVe) 或 (IVf) 之結構：



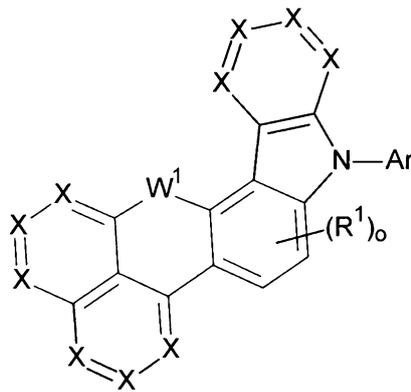
式 (IVa)



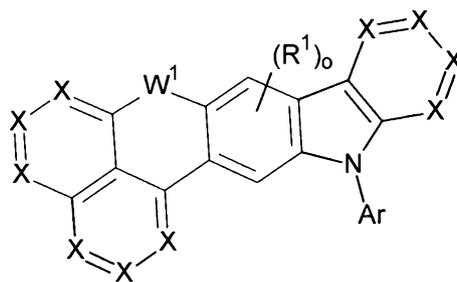
式 (IVb)



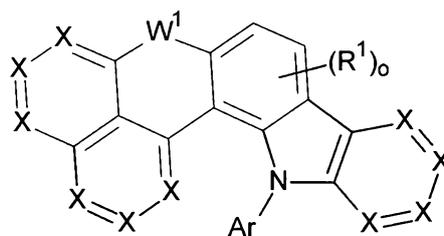
式 (IVc)



式 (IVd)



式 (IVe)

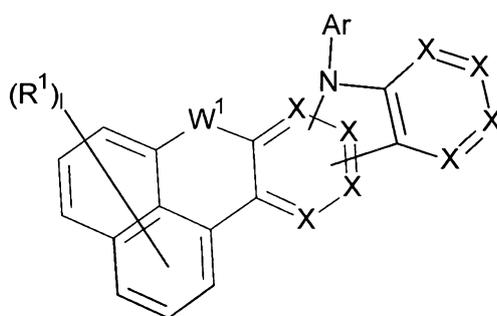


式 (IVf)

其中所使用的符號 R^1 、Ar、 W^1 及 X具有上面所列之定

義，尤其是針對式(I)所列之定義，且 o 為0、1或2，較佳0或1。

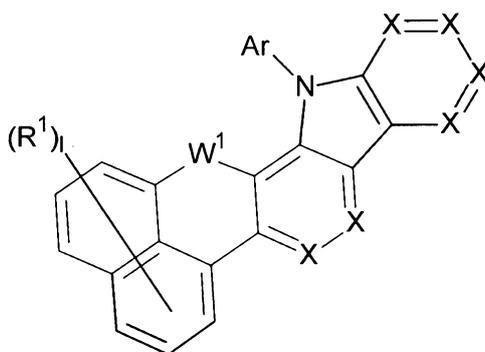
於又一較佳組態中，本發明之化合物可包含至少一種式(V)之結構：



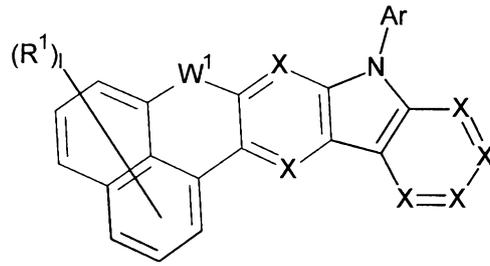
式(V)

其中符號 R^1 、 Ar 、 W^1 及 X 具有上面所給予之定義，尤其是針對式(I)所給予之定義，且 l 為0、1、2、3、4、5或6，較佳0、1、2、3或4，更佳0、1或2。

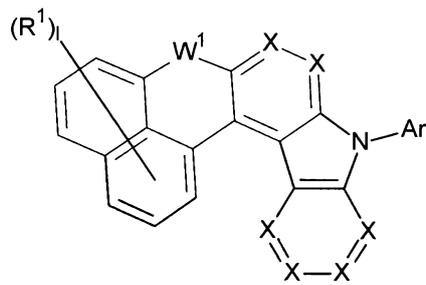
較佳，本發明之化合物可包含至少一種式(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)或(Vf)之結構：



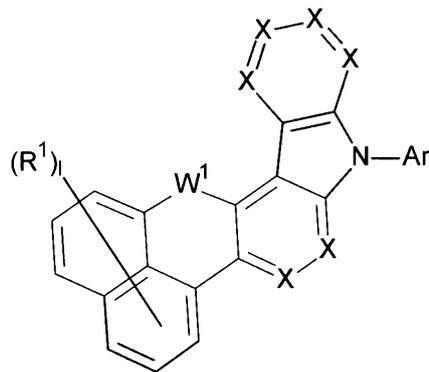
式(Va)



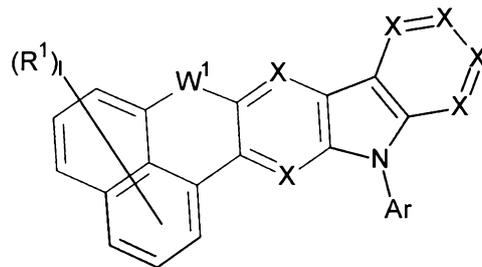
式 (Vb)



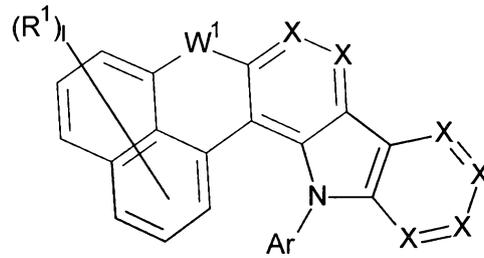
式 (Vc)



式 (Vd)



式 (Ve)



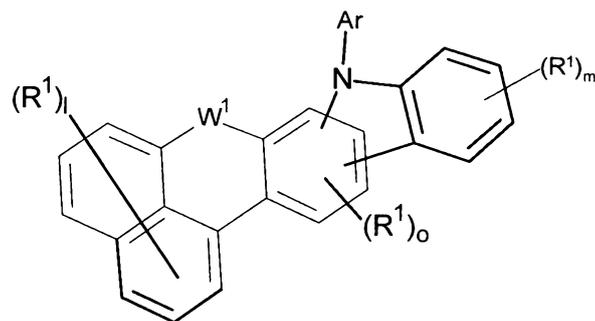
式 (Vf)

其中所使用的符號 R^1 、 Ar 、 W^1 及 X 具有上面所列之定義，尤其是針對式(I)所列之定義，且 l 為 0、1、2、3、4、5或 6，較佳 0、1、2、3或 4，更佳 0、1或 2。

亦偏好者為具有下述結構之化合物：其中每環不大於二個 X 基為 N 及較佳每環的該等 X 基中的至少一個，更佳至少二個係選自 $C-H$ 及 $C-D$ 中。

又偏好者為具有式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIe)、(IIf)、(III)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)、(IIIe)、(IIIf)、(IV)、(IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe)、(IVf)、(V)、(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)及/或(Vf)之結構之化合物，其中不大於四個 X 基，較佳不大於二個 X 基，及尤其不大於一個 X 基為 N ，且更佳其上未有吡啶并基鍵結的所有 X 基為 CR^1 ，其中以 X 表示的該等 CR^1 基中的較佳不大於四個，更佳不大於三個，及尤佳不大於二個不為 CH 基。

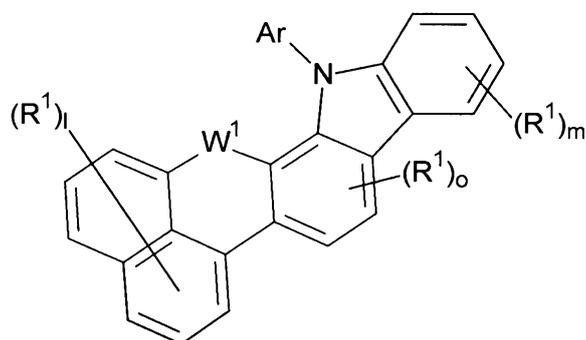
較佳，本發明之化合物可包含至少一種式(VI)之結構：



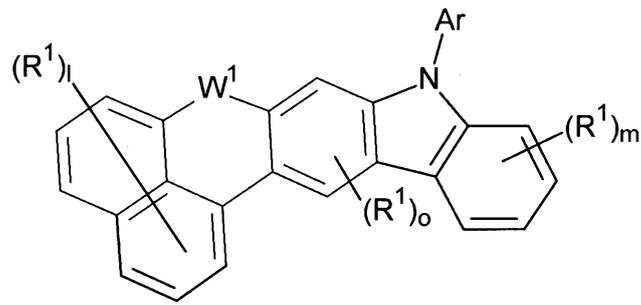
式 (VI)

其中符號 R^1 、 Ar 及 W^1 具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (I) 所給予之定義，且 l 為 0、1、2、3、4、5 或 6，較佳 0、1、2、3 或 4，更佳 0、1 或 2， m 為 0、1、2、3 或 4，較佳 0、1、2 或 3，且 o 為 0、1 或 2，較佳 0 或 1。

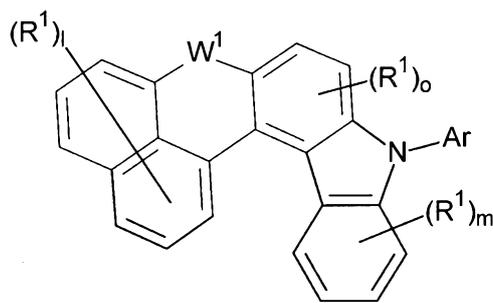
於又一較佳具體實施例中，本發明之化合物可具有至少一種式 (VIa)、(VIb)、(VIc)、(VI d)、(VIe) 或 (VI f) 之結構：



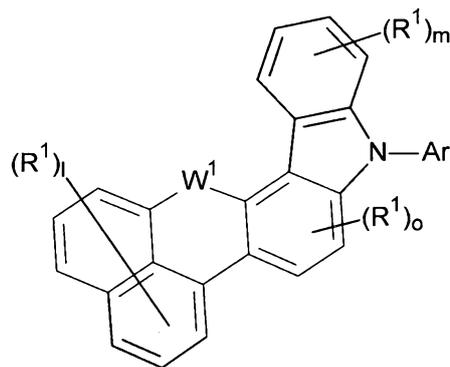
式 (VIa)



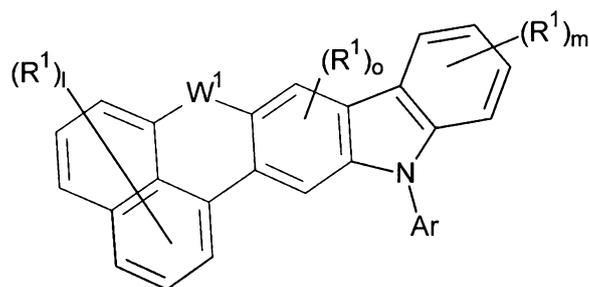
式 (VIb)



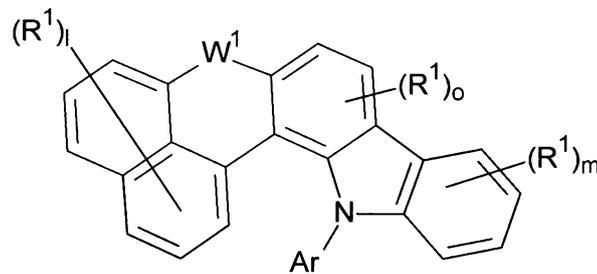
式 (VIc)



式 (VI d)



式 (VIe)



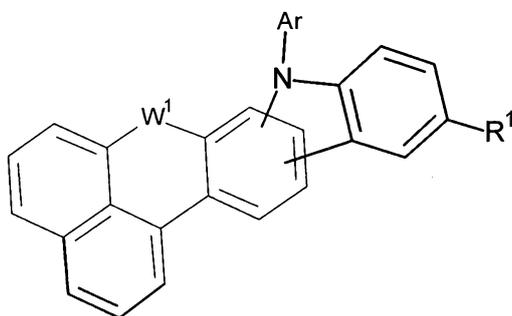
式 (VI f)

其中所使用的符號 R^1 、 Ar 及 W^1 具有上面所給予之定義，尤其是針對式(I)所給予之定義，且 l 為 0、1、2、3、4、5或6，較佳 0、1、2、3或4，更佳 0、1或2， m 為 0、1、2、3或4，較佳 0、1、2或3，且 o 為 0、1或2，較佳 0或1。

此外，於式(VI)、(VIa)、(VIb)、(VIc)、(VI d)、(VI e)及/或(VI f)之結構中，可能的情況是指標 l 、 m 及 o 的總數不大於6，較佳不大於4且更佳不大於2。

此外，可能的情況是，於式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(II d)、(II e)、(II f)、(III)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(III d)、(III e)、(III f)、(IV)、(IVa)、(IVb)、(IVc)、(IV d)、(IV e)、(IV f)、(V)、(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)、(Vf)、(VI)、(VIa)、(VIb)、(VIc)、(VI d)、(VI e)及/或(VI f)中，恰好一個不是H或D的 R^1 基團存在，所以其他X基為N、CH或CD，或換言之，指標 l 、 m 及 o 的總數恰好一個。較佳，此 R^1 基團係鍵結至這些式子中的咪唑基，其中 R^1 基團係更佳鍵結至咪唑之不直接具有鍵結至 W^1 基之鍵的環。此 R^1 取代基較佳於咪唑單元之氮原子的對位。

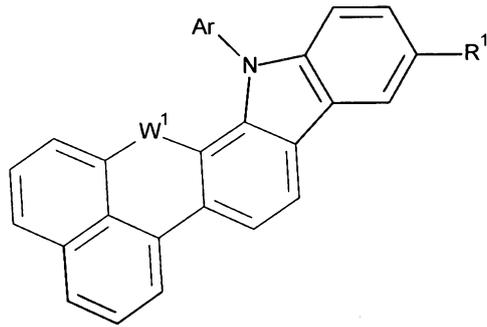
較佳，本發明之化合物可包含至少一種式(VII)之結構：



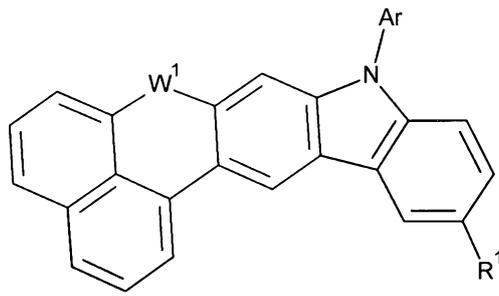
式 (VII)

其中符號 R^1 、Ar及 W^1 具有上面所給予之定義，尤其是針對式(I)所給予之定義。在此情況中， R^1 較佳不為H或D。

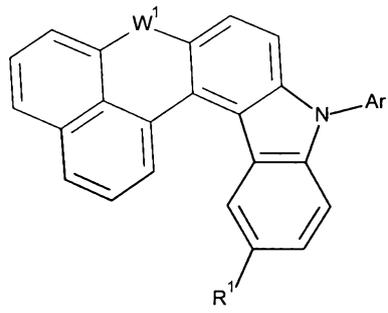
於又一較佳具體實施例中，本發明之化合物可包含至少一種式(VIIa)、(VIIb)、(VIIc)、(VIId)、(VIIe)及/或(VIIIf)之結構：



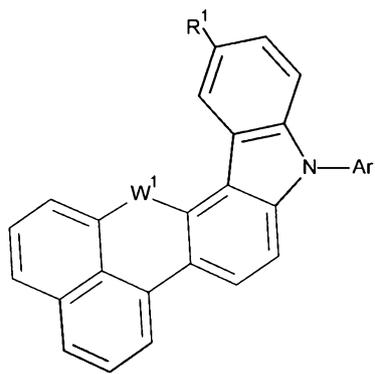
式 (VIIa)



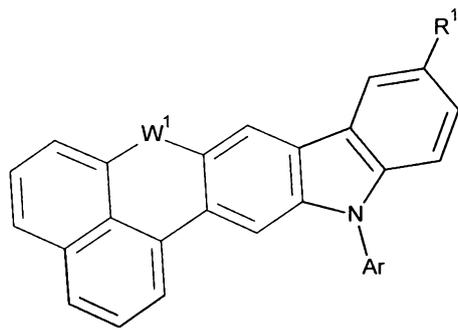
式 (VIIb)



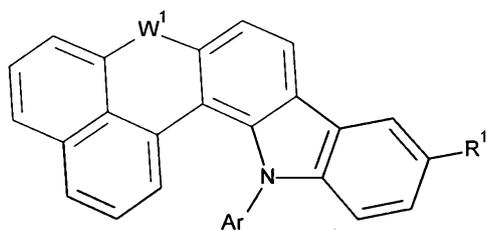
式 (VIlc)



式 (VIId)



式 (VIle)



式 (VIIf)

其中所使用的符號 Ar 、 W^1 及 R^1 具有上面所列之定

義，尤其是針對式(I)所列之定義。在此情況中， R^1 較佳不為H或D。

較佳，包含至少一種式(I)至(VII)中之一者的結構或相應較佳具體實施例之化合物係以式(I)至(VII)中之一者的結構或相應較佳具體實施例表示。

較佳，鍵結至式(VII)、(VIIa)、(VIIb)、(VIIc)、(VIId)、(VIIe)及/或(VIIIf)中之咪唑基的 R^1 基團係具有5至24個芳族環原子，較佳6至13個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R^2 基團取代但較佳未經取代之芳族或雜芳族環系統。鍵結至式(VII)、(VIIa)、(VIIb)、(VIIc)、(VIId)、(VIIe)及/或(VIIIf)中之咪唑基的 R^1 基團的較佳基可能代表，尤其包括苯基；鄰-、間-或對-聯苯基；聯三苯基，尤其支鏈聯三苯基；聯四苯基(quaterphenyl)，尤其支鏈聯四苯基；1-或2-萘基；1-、2-、3-或4-萘基；1-、2-、3-或4-螺聯萘基；吡啶基；嘧啶基；1-、2-、3-或4-二苯并咪喃基；1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基；1-、2-、3-或4-咪唑基及茚并咪唑基，其之各者可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代。萘基團或茚并咪唑基團較佳在茚并基(indeno)碳原子上經二個 R^2 基團取代。當不是經由氮原子鍵結時，咪唑基團或茚并咪唑基團較佳在氮原子上經H及D以外的 R^2 基團取代，較佳經芳族或雜芳族 R^2 基團取代。

可能之又一情況為式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIe)、(IIIf)、(III)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)、

(IIIe)、(IIIf)、(IV)、(IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe)、(IVf)、(V)、(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)、(Vf)、(VI)、(VIa)、(VIb)、(VIc)、(VIId)、(VIf)、(VII)、(VIIa)、(VIIb)、(VIIc)、(VIId)、(VIIe)及/或(VIIIf)之雜芳族環系統的 R^1 取代基不與基礎結構之雜芳族環系統的環原子形成稠合芳族或雜芳族環系統(較佳任何稠合環系統)。此包括與可能鍵結至 R^1 基團之可能的 R^2 或 R^3 取代基形成稠合環系統。

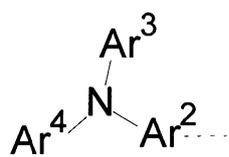
於較佳組態中，本發明之化合物可藉由式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IIId)、(IIe)、(IIIf)、(III)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)、(IIIe)、(IIIIf)、(IV)、(IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe)、(IVf)、(V)、(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)、(Vf)、(VI)、(VIa)、(VIb)、(VIc)、(VIId)、(VIf)、(VII)、(VIIa)、(VIIb)、(VIIc)、(VIId)、(VIIe)及/或(VIIIf)之結構表示。較佳，包含式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、(IIId)、(IIe)、(IIIf)、(III)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)、(IIIe)、(IIIIf)、(IV)、(IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe)、(IVf)、(V)、(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)、(Vf)、(VI)、(VIa)、(VIb)、(VIc)、(VIId)、(VIf)、(VII)、(VIIa)、(VIIb)、(VIIc)、(VIId)、(VIIe)及/或(VIIIf)之結構的化合物具有分子量不大於5000g/mol，較佳不大於4000g/mol，特佳不大於3000g/mol，尤佳不大於2000g/mol且最佳不大於1200g/mol。

此外，本發明之較佳化合物的特徵為彼等係可昇華。這些化合物通常具有莫耳質量小於約1200g/mol。

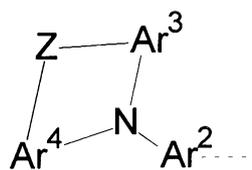
較佳，以符號Ar或Ar¹表示之芳族或雜芳族環系統的芳族或雜芳族基係直接鍵結到(亦即經由芳族或雜芳族基的原子)又一基團的各別原子。

於一個具體實施例中，Ar基可包含電洞傳輸基或由電洞傳輸基所構成。電洞傳輸基為技術領域中已知，且彼等較佳包括三芳基胺基或吡啶基。

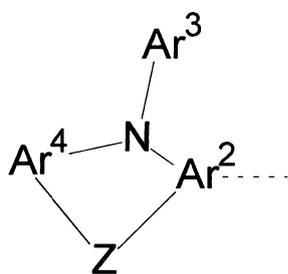
可能較佳的情況是電洞傳輸基包含一基，且較佳為選自式(H-1)至(H-3)中之基：



式 (H-1)



式 (H-2)



式 (H-3)

其中虛線鍵標記出附接至氮原子的附接位置，以及此外：

Ar²、Ar³、Ar⁴ 各獨立為具有6至40個碳原子的芳基或具有3至40個碳原子的雜芳基，其之各者可

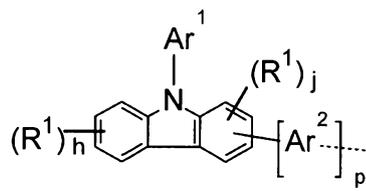
經一或多個 R^1 基團取代；

以及

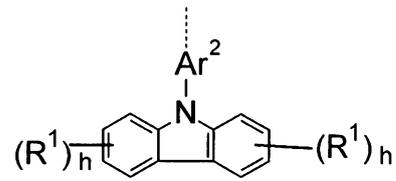
Z 為 $C(R^1)_2$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $N-Ar^1$ 、 BR^1 、 PR^1 、 $PO(R^1)$ 、 SO 、 SO_2 、 Se 、 O 或 S ，較佳 $C(R^1)_2$ 、 $N-Ar^1$ 、 O 或 S ，其中符號 Ar^1 及 R^1 具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (I) 所給予之定義。

據此， Ar 基可包含式 (H-1)、(H-2) 及 / 或 (H-3) 之基團且可較佳為式 (H-1)、(H-2) 或 (H-3) 之基團。

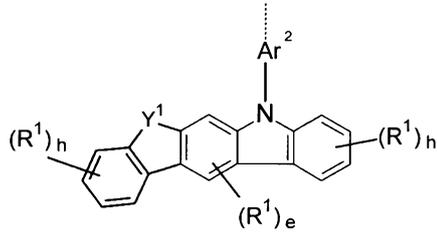
可能額外地情況是， Ar 基包含一基，且較佳為選自式 (H-4) 至 (H-26) 中之基：



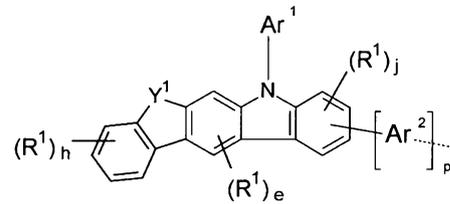
式 (H-4)



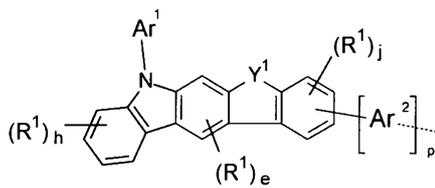
式 (H-5)



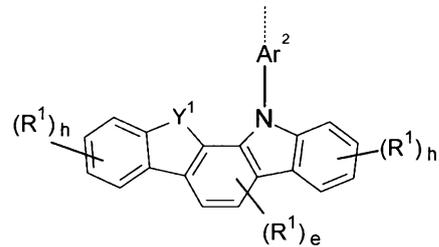
式 (H-6)



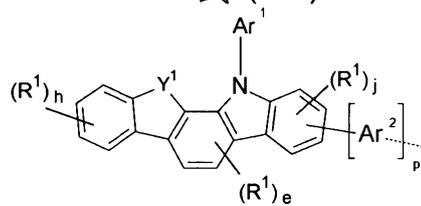
式 (H-7)



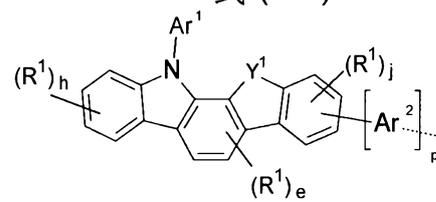
式 (H-8)



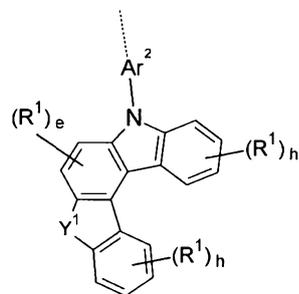
式 (H-9)



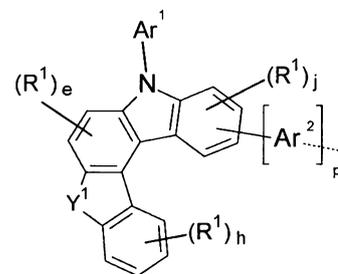
式 (H-10)



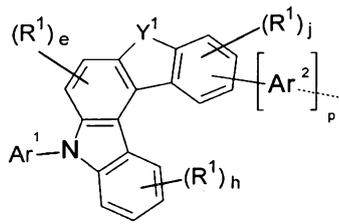
式 (H-11)



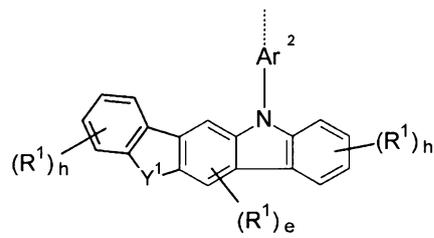
式 (H-12)



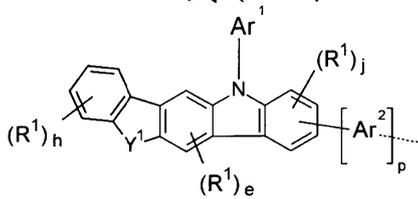
式 (H-13)



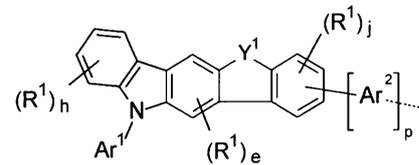
式 (H-14)



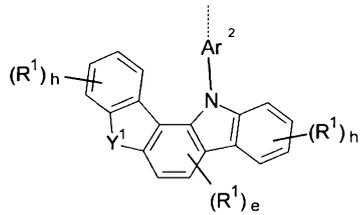
式 (H-15)



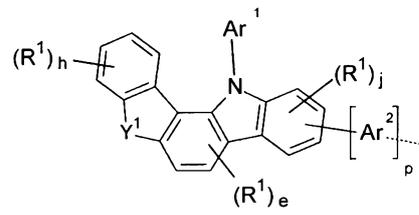
式 (H-16)



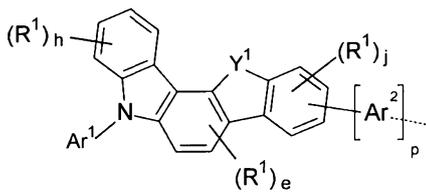
式 (H-17)



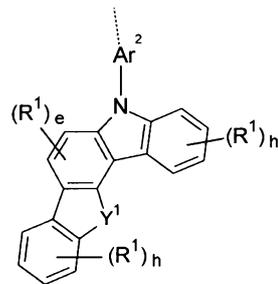
式 (H-18)



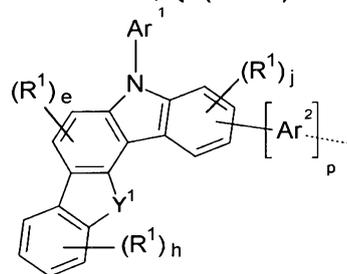
式 (H-19)



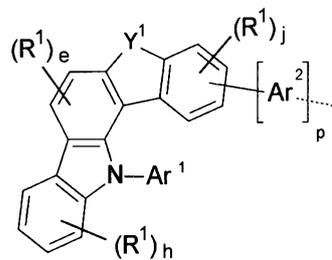
式 (H-20)



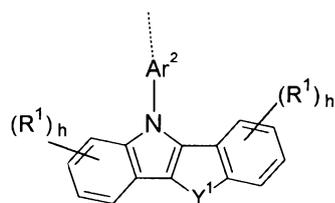
式 (H-21)



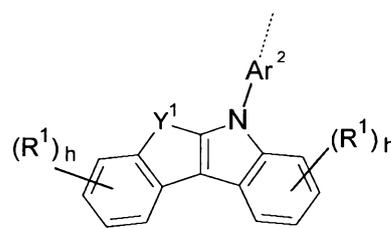
式 (H-22)



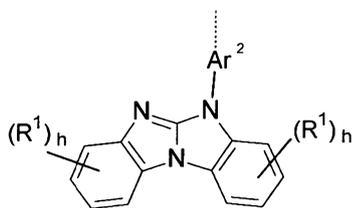
式 (H-23)



式 (H-24)



式 (H-25)



式 (H-26)

其中 Y^1 為 O、S、 $C(R^1)_2$ 或 NAr^1 ，虛線鍵標記出附接至氮原子的附接位置， e 為 0、1 或 2， j 為 0、1、2 或 3， h 在各情況下係相同或不同且為 0、1、2、3 或 4， p 為 0 或 1， Ar^1 及 R^1 具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (I) 所給予之定義，以及 Ar^2 具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (H-1) 或 (H-2) 所給予之定義。

上面詳述之式 (H-1) 至 (H-26) 之電洞傳輸基也構成式 (I) 化合物或此式的較佳具體實施例中之較佳 R^1 基團，其中於此情況，式 (H-1) 至 (H-26) 詳述之 R^1 基應被 R^2 基團置換。

從上揭措辭顯然得知，若指標 $p=0$ ，則相應 Ar^2 基不存在且形成鍵。

較佳， Ar^2 基可與芳族或雜芳族基團或式 (H-1) 至 (H-26) 之 Ar^2 基可能鍵結之氮原子形成穿通共軛 (through-conjugation)。

在本發明的又一較佳具體實施例中， Ar^2 係具有 5 至 14 個芳族或雜芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，較佳具有

6至12個碳原子之芳族環系統，且其可經一或多個 R^1 基團取代但較佳未經取代，其中 R^1 可具有上面所給出之定義，尤其是針對式(I)所給出之定義。更佳， Ar^2 係具有6至10個芳族環原子之芳族環系統或具有6至13個雜芳族環原子之雜芳族環系統，其之各者可經一或多個 R^1 基團取代但較佳未經取代，其中 R^1 可具有上面所給出之定義，尤其是針對式(I)所給出之定義。

更佳，式(H-1)至(H-26)所顯示之符號 Ar^2 尤其是具有5至14個環原子，較佳6至13個環原子，更佳6至10個環原子之伸芳基或雜伸芳基，而使得芳族或雜芳族環系統的芳族或雜芳族基係直接鍵結到(亦即經由芳族或雜芳族基的原子)又一基團的各別原子。

可能額外地情況是，式(H-1)至(H-26)所顯示之 Ar^2 基包含具有不大於二個稠合芳族及/或雜芳族六員環之芳族環系統；較佳，其不包含任何具稠合六員環之稠合芳族或雜芳族環系統。據此，萘結構比蔥結構為佳。此外，萸基、螺聯萸基、二苯并呋喃基及/或二苯并噻吩基結構比萘基結構為佳。特別偏好的是不具有稠合的結構，例如苯基、聯苯基、聯三苯基及/或聯四苯基結構。

可能又一情況是，式(H-1)至(H-26)所顯示之 Ar^2 基尤其具有不大於1個氮原子，較佳不大於2個雜原子，尤佳不大於一個雜原子且最佳沒有雜原子。

在本發明的又一較佳具體實施例中， Ar^3 及/或 Ar^4 在各情況下係相同或不同且為具有6至24個芳族環原子，較佳6

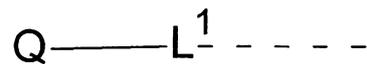
至 18 個芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，且更佳具有 6 至 12 個芳族環原子之芳族環系統或具有 6 至 13 個芳族環原子之雜芳族環系統，其之各者可經一或多個 R^1 基團取代但較佳未經取代，其中 R^1 可具有上面所給出之定義，尤其是針對式 (I) 所給出之定義。

於又一較佳具體實施例中，Ar 基可包含電子傳輸基，較佳構成電子傳輸基。電子傳輸基為技術領域所廣知且促進化合物傳輸及/或傳導電子的能力。缺電子雜芳基尤其適合此目的。這些係定義在彼等含有具有至少一個氮原子之雜芳族六員環及/或定義在彼等含有具有至少二個雜原子之雜芳族五員環，其中至少一個雜原子是氮。也可能的是有另外的芳基或雜芳基將稠合在這些結構上，例如於喹啉或苯并咪唑中者。

在這方面，應強調的是本發明具有電子傳輸基之化合物特佳作為主體材料及/或電子傳輸材料，尤其也比本發明具有電洞傳輸基但無電子傳輸基之化合物為佳。

又者，藉由包含至少一種式 (I) 之結構或其之較佳具體實施例的化合物展現意外優點，於該化合物中 Ar 基包含至少一個選自下列所組成群組之結構：吡啶、嘧啶、吡嗪、噻嗪、三嗪、喹啉、喹噁啉、喹啉、異喹啉、咪唑及/或苯并咪唑，特別偏好的是嘧啶、三嗪和喹啉。

於本發明之較佳組態中，可能的情況是 Ar 基為可藉由式 (QL) 表示之基：



式 (QL)

其中， L^1 表示鏈或具有5至40個，較佳5至30個芳族環原子且可經一或多個 R^1 基團取代之芳族或雜芳族環系統，及 Q 為電子傳輸基，其中 R^1 具有上面所給予之定義，尤其是針對式(I)所給予之定義。於此情況中，電子傳輸基係如上揭般定義。

較佳， L^1 基可與 Q 基及式(QL)之 L^1 基所鍵結之氮原子形成穿通共軛。一旦在相鄰的芳族或雜芳族環之間形成直接鍵，就形成了芳族或雜芳族系統的穿通共軛。在前述共軛基之間的又一鍵，例如經由硫、氮或氧原子或羰基係對共軛無害。於萸系統之情況中，二個芳族環直接鍵結，其中在第9位置的 sp^3 -雜合之碳原子確實防止這些環稠合，但可共軛，這是因為此在第9位置的 sp^3 -雜合之碳原子不一定要在電子傳輸 Q 基與氮原子之間。相比之下，在第二螺聯萸結構之情況中，若在 Q 基與式(QL)之 L^1 基所鍵結之芳族或雜芳族基團之間的鍵係經由螺聯萸結構中之相同苯基或經由螺聯萸結構中之彼此直接鍵結並在一個平面上的苯基鍵結時，可形成穿通共軛。若在 Q 基與式(QL)之 L^1 基所鍵結之芳族或雜芳族基團之間的鍵係經由透過在第9位置的 sp^3 -雜合之碳原子鍵結之第二螺聯萸結構中之不同苯基鍵結時，穿通共軛被中斷。

於本發明的較佳具體實施例中， L^1 為鏈或具有5至14

個芳族或雜芳族環原子之芳族或雜芳族環系統，較佳具有6至12個碳原子之芳族環系統，且其可經一或多個 R^1 基團取代但較佳未經取代，其中 R^1 可具有上面所給出之定義，尤其是針對式(I)所給出之定義。更佳， L^1 為具有6至10個芳族環原子之芳族環系統或具有6至13個雜芳族環原子之雜芳族環系統，其之各者可經一或多個 R^1 基團取代但較佳未經取代，其中 R^1 可具有上面所給出之定義，尤其是針對式(I)所給出之定義。

更佳，式(QL)所顯示的符號 L^1 尤其在各情況下係相同或不同且為鍵或具有5至24個環原子，較佳6至13個環原子，更佳6至10個環原子之伸芳基或雜伸芳基，而使得芳族或雜芳族環系統的芳族或雜芳族基係直接鍵結到(亦即經由芳族或雜芳族基的原子)又一基團的各別原子。

可能額外地情況是，式(QL)所顯示的符號 L^1 基包含具有不大於二個稠合芳族及/或雜芳族六員環之芳族環系統；較佳，其不包含任何稠合芳族或雜芳族環系統。據此，萘結構比蒽結構為佳。此外，萘基、螺聯萘基、二苯并呋喃基及/或二苯并噻吩基結構比萘基結構為佳。

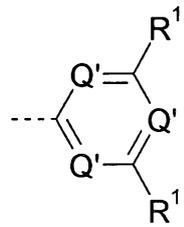
特別偏好的是不具有稠合的結構，例如苯基、聯苯基、聯三苯基及/或聯四苯基結構。

合適之芳族或雜芳族環系統 L^1 的實例係選自下列所組成群組：鄰-、間-或對-伸苯基；鄰-、間-或對-伸聯苯基；伸聯三苯基(terphenylene)，尤其支鏈伸聯三苯基；伸萘基；伸螺聯萘基、伸二苯并呋喃基；伸二苯并噻吩基及

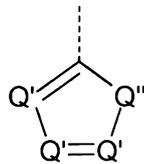
伸咪唑基，其之各者可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代。於 L^1 為伸咪唑基時，當伸咪唑基不是經由氮原子結合時，其較佳在氮原子上經H及D以外的 R^1 基團取代，較佳經芳族或雜芳族 R^1 基團取代。

可能之又一情況為式(QL)所顯示的符號 L^1 基尤其具有不大於1個氮原子，較佳不大於2個雜原子，尤佳不大於一個雜原子且更佳沒有雜原子。

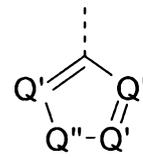
較佳，尤其式(QL)所顯示的Q基，或電子傳輸基，可選自式(Q-1)、(Q-2)、(Q-3)、(Q-3)、(Q-5)、(Q-6)、(Q-7)、(Q-8)、(Q-9)及/或(Q-10)之結構中：



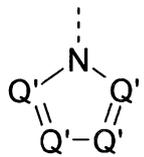
式 (Q-1)



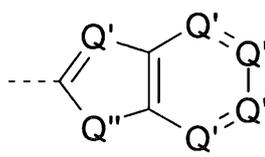
式 (Q-2)



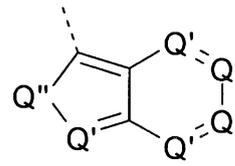
式 (Q-3)



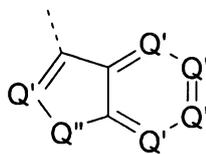
式 (Q-4)



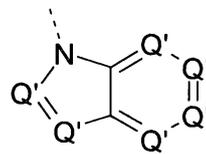
式 (Q-5)



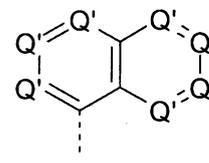
式 (Q-6)



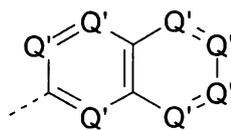
式 (Q-7)



式 (Q-8)



式 (Q-9)



式 (Q-10)

其中虛線鍵標記出附接位置，

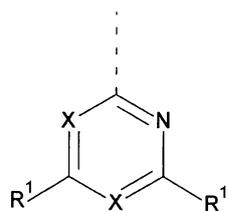
Q' 在各情況下係相同或不同且為 CR^1 或 N ，以及

Q'' 為 NR^1 、 O 或 S ；

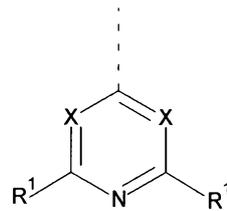
其中至少一個 Q' 為 N ，以及

R^1 係如上揭般定義，尤其係如針對式 (I) 般定義。

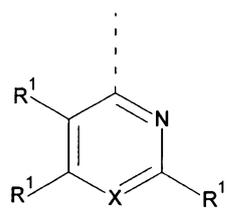
此外，尤其式 (QL) 所顯示的 Q 基，或電子傳輸基，可較佳選自式 (Q-11)、(Q-12)、(Q-13)、(Q-14) 及 / 或 (Q-15) 之結構中：



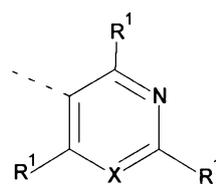
式 (Q-11)



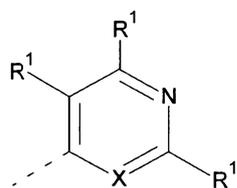
式 (Q-12)



式 (Q-13)



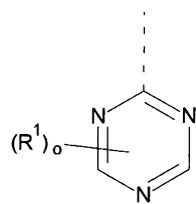
式 (Q-14)



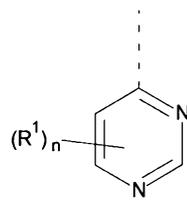
式 (Q-15)

其中符號 R^1 具有上面尤其針對式 (I) 所給予之定義， X 為 N 或 CR^1 且虛線鍵標記出附接位置，其中 X 較佳為氮原子。

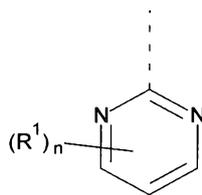
於又一具體實施例中，尤其式 (QL) 所顯示的 Q 基，或電子傳輸基，可選自式 (Q-16)、(Q-17)、(Q-18)、(Q-19)、(Q-20)、(Q-21) 及 / 或 (Q-22) 之結構中：



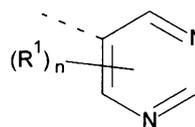
式 (Q-16)



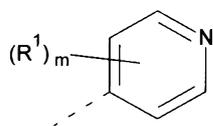
式 (Q-17)



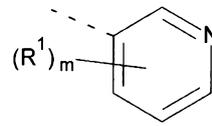
式 (Q-18)



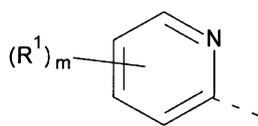
式 (Q-19)



式 (Q-20)



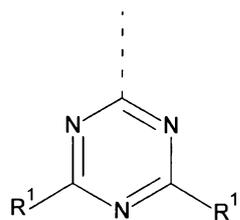
式 (Q-21)



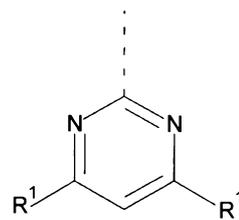
式 (Q-22)

其中符號 R^1 具有上面尤其針對式 (I) 所給予之定義，虛線鍵標記出附接位置，且 m 為 0、1、2、3 或 4，較佳 0、1 或 2， n 為 0、1、2 或 3，較佳 0、1 或 2，以及 o 為 0、1 或 2，較佳 1 或 2。本文中偏好的是式 (Q-16)、(Q-17)、(Q-18) 及 (Q-19) 之結構。

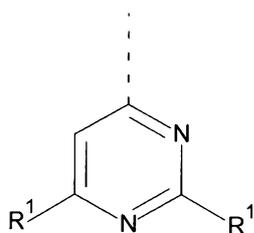
於又一具體實施例中，尤其式 (QL) 所顯示的 Q 基，或電子傳輸基，可選自式 (Q-23)、(Q-24) 及 / 或 (Q-25) 之結構中：



式 (Q-23)



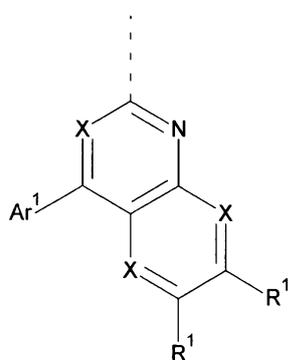
式 (Q-24)



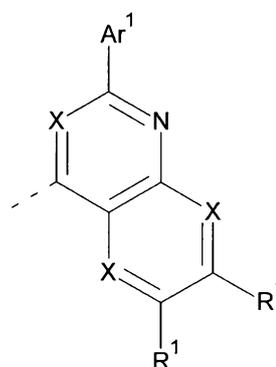
式 (Q-25)

其中符號 R^1 具有上面尤其針對式 (I) 所列之定義，且虛線鍵標記出附接位置。

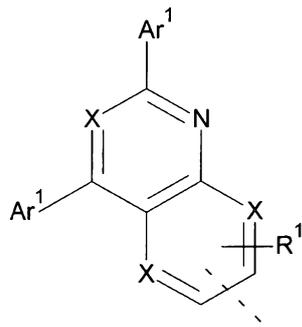
於又一具體實施例中，尤其式 (QL) 所顯示的 Q 基，或電子傳輸基，可選自式 (Q-26)、(Q-27)、(Q-28)、(Q-29) 及 / 或 (Q-30) 之結構中：



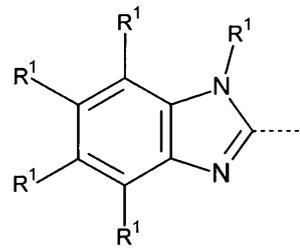
式 (Q-26)



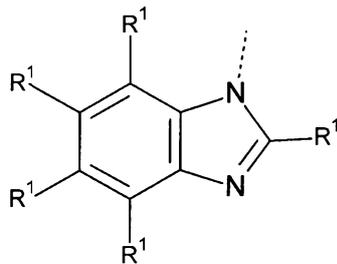
式 (Q-27)



式 (Q-28)



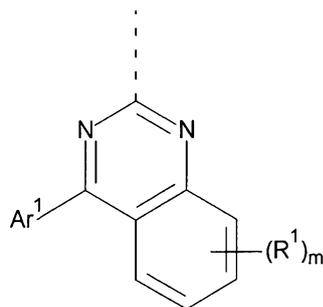
式 (Q-29)



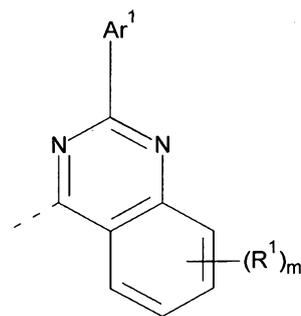
式 (Q-30)

其中符號 X、Ar¹及 R¹具有上面尤其針對式(I)所給予之定義，且虛線鍵標記出附接位置。較佳，於式(Q-26)、(Q-27)及(Q-28)之結構中，恰好一個 X是氮原子。

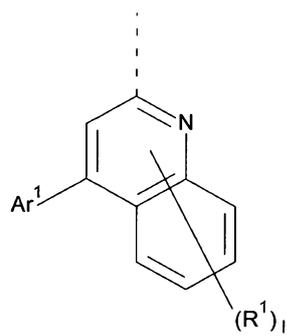
較佳，尤其式(QL)所顯示的 Q基，或電子傳輸基，可選自式(Q-31)、(Q-32)、(Q-33)、(Q-34)、(Q-35)、(Q-36)、(Q-37)、(Q-38)、(Q-39)、(Q-40)、(Q-41)、(Q-42)、(Q-43)及/或(Q-44)之結構中：



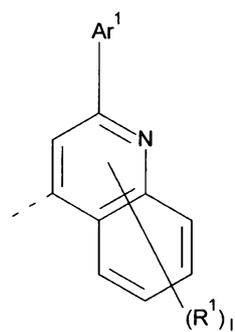
式 (Q-31)



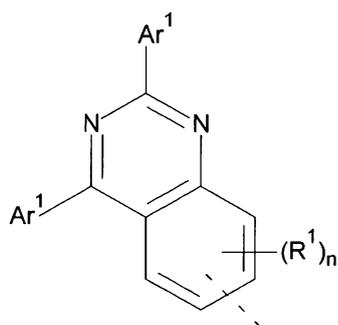
式 (Q-32)



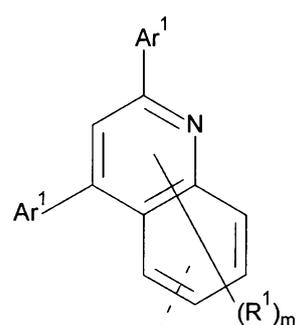
式 (Q-33)



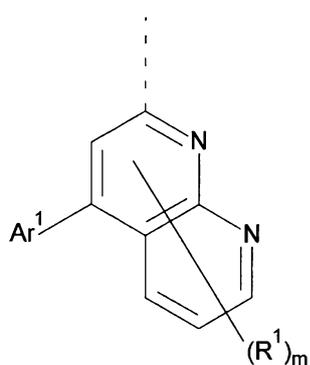
式 (Q-34)



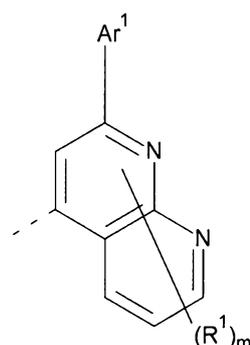
式 (Q-35)



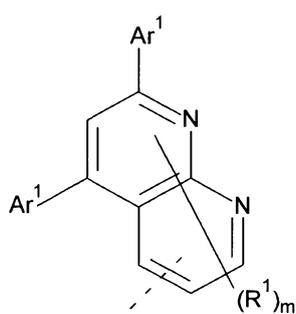
式 (Q-36)



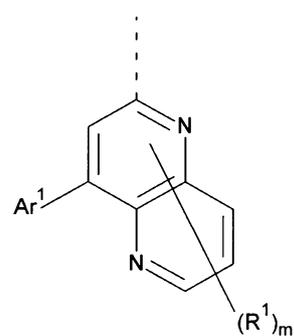
式 (Q-37)



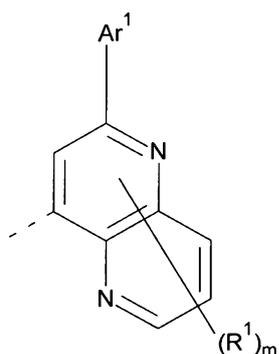
式 (Q-38)



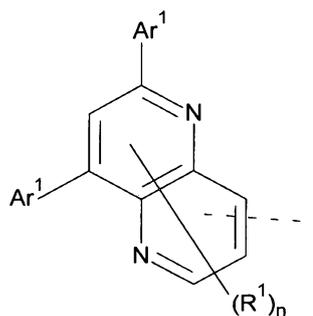
式 (Q-39)



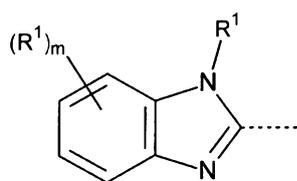
式 (Q-40)



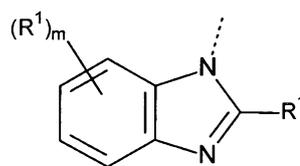
式 (Q-41)



式 (Q-42)



式 (Q-43)



式 (Q-44)

其中符號 Ar^1 及 R^1 具有上面尤其針對式 (I) 所列之定義，虛線鍵標記出附接位置，且 m 為 0、1、2、3 或 4，較佳 0、1 或 2， n 為 0、1、2 或 3，較佳 0 或 1， n 為 0、1、2 或 3，較佳 0、1 或 2，以及 l 為 1、2、3、4 或 5，較佳 0、1 或 2。

上面詳述之式 (Q-1) 至 (Q-44) 之電子傳輸基也構成式 (I) 化合物或此式的較佳具體實施例中之較佳 R^1 基團，其中於此情況，式 (Q-1) 至 (Q-44) 詳述之 R^1 基應被 R^2 基團置換。

也可能的情況是 Ar 基包含電洞傳輸基及電子傳輸基。根據該組態，較佳基可形成自上面詳述之式 (H-1) 至 (H-26) 或 (Q-1) 至 (Q-44)，其中例如 R^1 基可為電洞傳輸或電子傳輸基，其中例如式 (H-1) 至 (H-26) 或 (Q-1) 至 (Q-44) 所顯示的 R^1 基團可被相應 R^2 基團置換。

於本發明之又一較佳具體實施例中， Ar^1 在各情況下

係相同或不同且為芳族或雜芳族環系統，較佳具有5至24個芳族環原子，較佳具有6至18個芳族環原子之芳基或雜芳基，且更佳芳族環系統，較佳具有6至10個芳族環原子之芳基基團、或雜芳族環系統，較佳具有5至13個芳族環原子之雜芳基基團，其之個者可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代，其中 R^2 可具有上面詳述之定義，尤其是針對式(I)詳述之定義。

較佳，符號 Ar^1 是芳基或雜芳基基團，而使得芳族或雜芳族環系統的芳族或雜芳族基係直接鍵結到(亦即經由芳族或雜芳族基的原子)又一基團的各別原子，例如上面所顯示之(H-1)至(H-26)或(Q-26)至(Q-44)基的碳或氮原子。

有利地，(H-1)至(H-26)或(Q-26)至(Q-44)之 Ar^1 為具有6至12個芳族環原子且可經一或多個 R^2 基團取代但較佳未經取代之芳族環系統，其中 R^2 可具有上面詳述之定義，尤其是針對式(I)詳述之定義。

較佳，(H-1)至(H-26)或(Q-1)至(Q-44)之 R^1 或 R^2 基團不與 R^1 或 R^2 基團所鍵結之芳基或雜芳基基團 Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 及/或 Ar^4 的環原子形成稠合環系統。此包括與可能鍵結至 R^1 或 R^2 基團之可能的 R^2 或 R^3 取代基形成稠合環系統。

又一可能的情況是， Ar 、 Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 及/或 Ar^4 基係選自下列所組成群組：苯基；鄰-、間-或對-聯苯基；聯三苯基，尤其鄰-、間-或對-聯三苯基或支鏈聯三苯基；聯四苯基尤其鄰-、間-或對-聯四苯基或支鏈聯四苯基；1-、2-

、3-或4-萸基；1-、2-、3-或4-螺聯萸基；吡啶基；嘧啶基；1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基；1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基；芘基；三嗪基；咪唑基；苯并咪唑基；苯并噁唑基；苯并噻唑基；1-、2-、3-或4-呋唑基；1-或2-萘基；蔥基，較佳9-蔥基；菲基及/或聯伸三苯基(triphenylenyl)，其之各者可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代，特別偏好的是苯基、螺聯萸基、萸基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、蔥基、菲基、聯伸三苯基。

當X為 CR^1 時或當芳族及/或雜芳族基係經 R^1 取代基取代時，此等 R^1 取代基較佳係選自下列所組成群組：H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、具有1至10個碳原子之直鏈烷基或烷氧基或具有3至10個碳原子之支鏈或環狀烷基或烷氧基或具有2至10個碳原子之烯基，其之各者可經一或多個 R^2 基團取代，其中一或多個非相鄰的 CH_2 基團可經O置換且其中一或多個氫原子可經D或F置換、具有5至24個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代之芳族或雜芳族環系統、或具有5至25個芳族環原子且可經一或多個 R^2 基團取代之芳烷基或雜芳烷基；同時，較佳鍵結至相鄰的碳原子的二個 R^1 取代基隨意地可能形成單環或多環的脂族、芳族或雜芳族環系統，其可經一或多個 R^1 基團取代，其中 Ar^1 基具有上面所給予之定義，尤其針對式(I)所給予之定義。

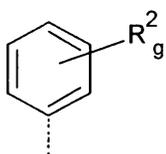
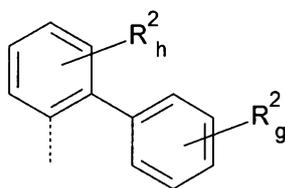
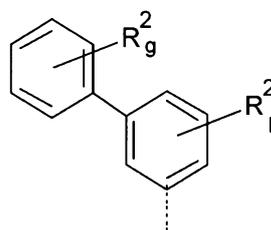
更佳，此等 R^1 取代基選自下列所組成群組：H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、具有1至8個碳原子，較佳具有1、2、3

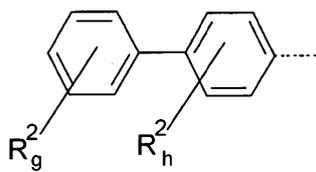
或4個碳原子之直鏈烷基、或具有3至8個碳原子，較佳具有3或4個碳原子之支鏈或環狀烷基、或具有2至8個碳原子，較佳具有2、3或4個碳原子之烯基，其之各者可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代、或具有5至24個芳族環原子，較佳6至18個芳族環原子，更佳6至13個芳族環原子且其在各情況下可經一或多個非芳族 R^1 基團取代，但較佳未經取代之芳族或雜芳族環系統；同時，較佳鍵結至相鄰的碳原子之二個 R^1 取代基可隨意地形成單環或多環脂族環系統，其可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代，其中 Ar^1 可具有上面所列之定義。

最佳， R^1 取代基選自下列所組成群組： H 和具有6至18個芳族環原子，較佳6至13個芳族環原子且在各情況下可經一或多個非芳族 R^2 基團取代，但較佳未經取代之芳族或雜芳族環系統。適當 R^1 取代基的實例選自下列所組成群組：苯基、鄰-聯苯基、間-聯苯基、對-聯苯基、聯三苯基，尤其是支鏈聯三苯基、聯四苯基，尤其是支鏈聯四苯基、1-萸基、2-萸基、3-萸基、4-萸基、1-螺聯萸基、2-螺聯萸基、3-螺聯萸基、4-螺聯萸基、吡啶基、嘧啶基、1-二苯并呋喃基、2-二苯并呋喃基、3-二苯并呋喃基、4-二苯并呋喃基、1-二苯并噻吩基、2-二苯并噻吩基、3-二苯并噻吩基、4-二苯并噻吩基、1-呋唑基、2-呋唑基、3-呋唑基及4-呋唑基，彼等各自可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代。

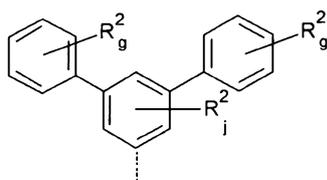
又可能的情況是，於式(I)、(IIa)、(IIb)、(IIc)、

(IIId)、(IIe)、(IIIf)、(III)、(IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)、(IIIe)、(IIIIf)、(IV)、(IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe)、(IVf)、(V)、(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve)、(Vf)、(VI)、(VIa)、(VIb)、(VIc)、(VIId)、(VIf)、(VII)、(VIIa)、(VIIb)、(VIIc)、(VIId)、(VIIe)及/或(VIIIf)之結構中，至少一個 R^1 或 Ar^1 基團為選自式(R¹-1)至(R¹-92)之基，或於式(H-1)至(H-26)、(Q-1)至(Q-44)之結構中，至少一個 Ar^1 或 R^1 基團為選自式(R¹-1)至(R¹-92)之基，

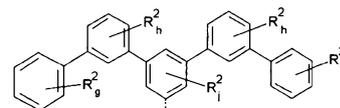
式 (R¹-1)式 (R¹-2)式 (R¹-3)



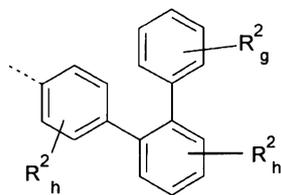
式 (R¹⁻⁴)



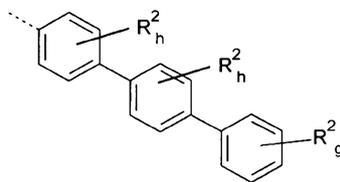
式 (R¹⁻⁵)



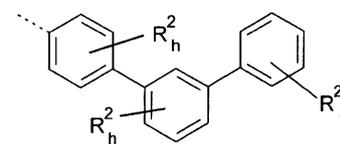
式 (R¹⁻⁶)



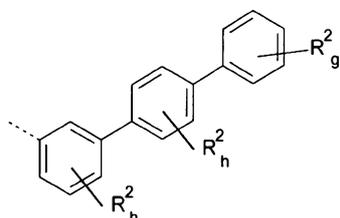
式 (R¹⁻⁷)



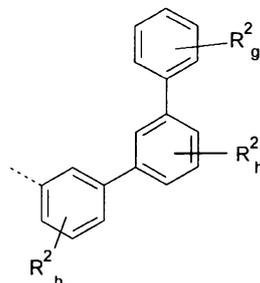
式 (R¹⁻⁸)



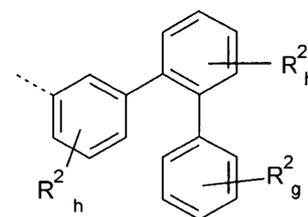
式 (R¹⁻⁹)



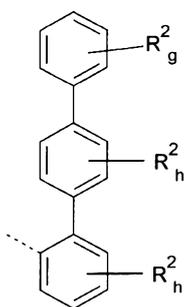
式 (R¹⁻¹⁰)



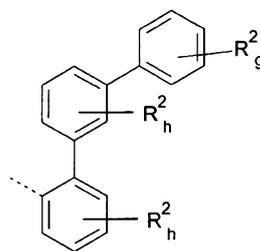
式 (R¹⁻¹¹)



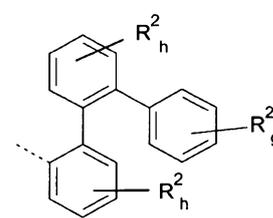
式 (R¹⁻¹²)



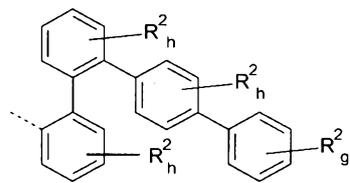
式 (R¹⁻¹³)



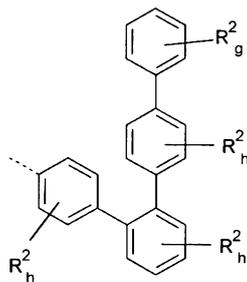
式 (R¹⁻¹⁴)



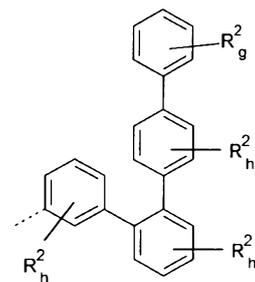
式 (R¹⁻¹⁵)



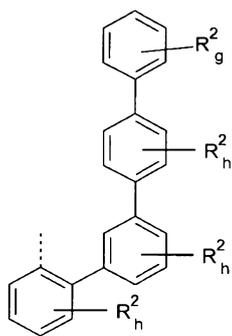
式 (R¹-16)



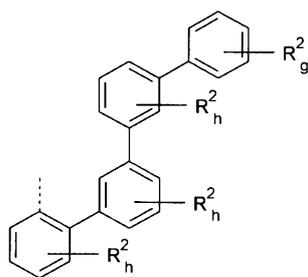
式 (R¹-17)



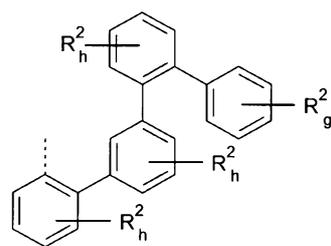
式 (R¹-18)



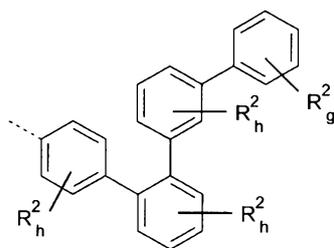
式 (R¹-19)



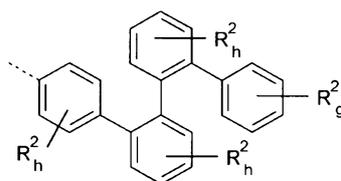
式 (R¹-20)



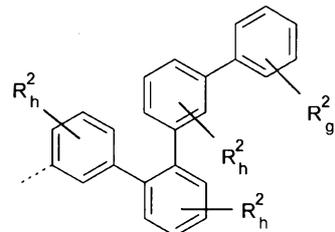
式 (R¹-21)



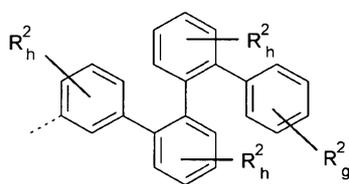
式 (R¹-22)



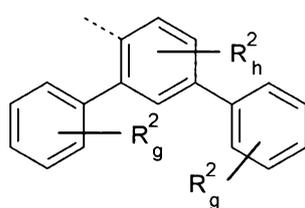
式 (R¹-23)



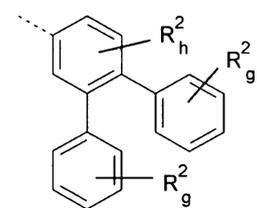
式 (R¹-24)



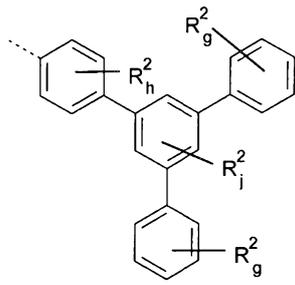
式 (R¹-25)



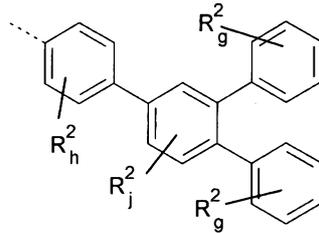
式 (R¹-26)



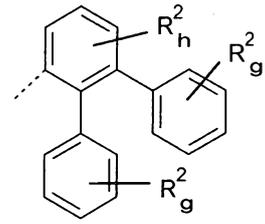
式 (R¹-27)



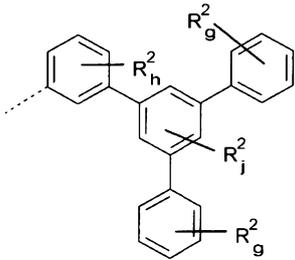
式 (R¹-28)



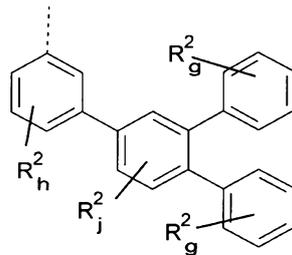
式 (R¹-29)



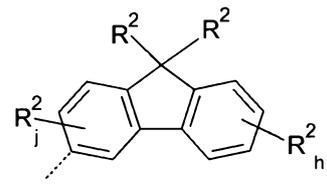
式 (R¹-30)



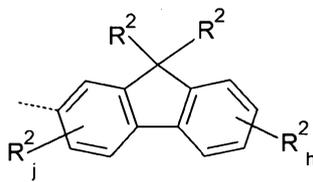
式 (R¹-31)



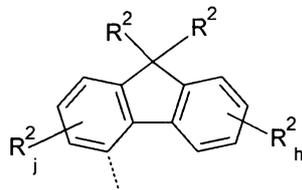
式 (R¹-32)



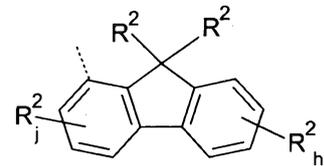
式 (R¹-33)



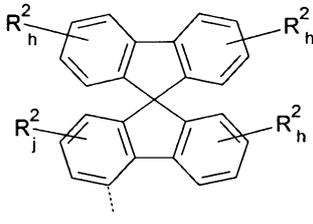
式 (R¹-34)



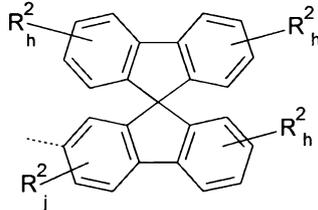
式 (R¹-35)



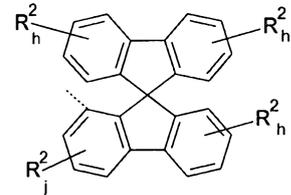
式 (R¹-36)



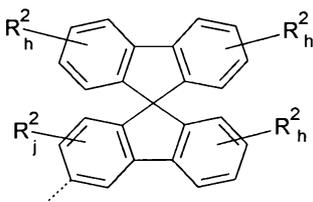
式 (R¹-37)



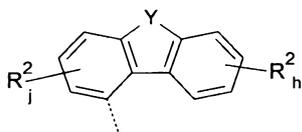
式 (R¹-38)



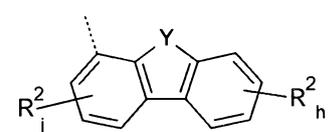
式 (R¹-39)



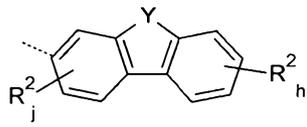
式 (R¹-40)



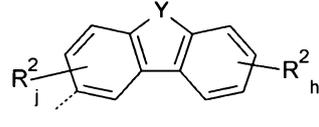
式 (R¹-41)



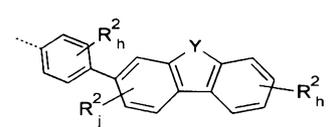
式 (R¹-42)



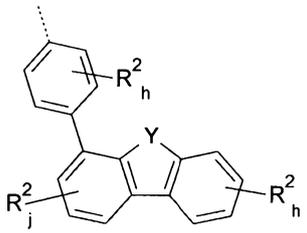
式 (R¹-43)



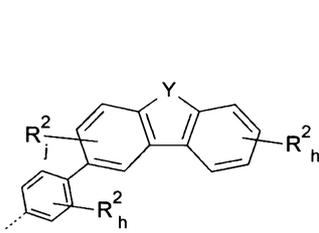
式 (R¹-44)



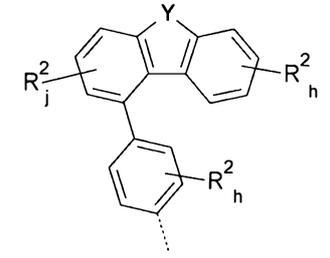
式 (R¹-45)



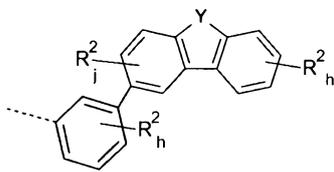
式 (R¹-46)



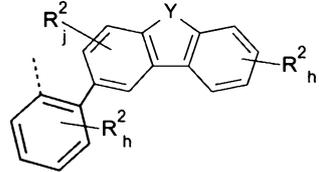
式 (R¹-47)



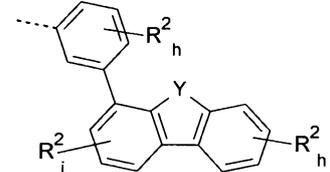
式 (R¹-48)



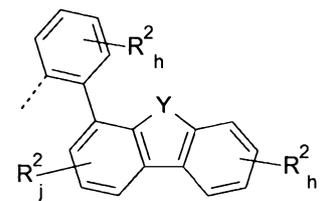
式 (R¹-49)



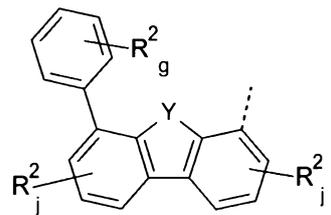
式 (R¹-50)



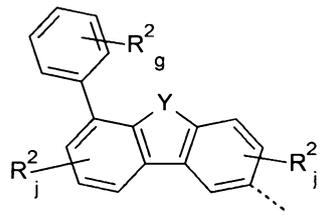
式 (R¹-51)



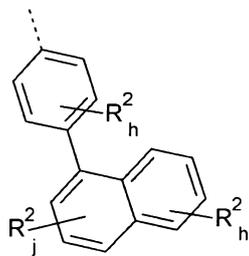
式 (R¹-52)



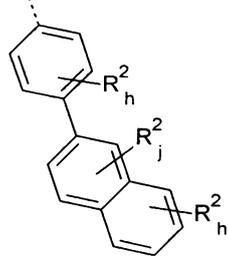
式 (R¹-53)



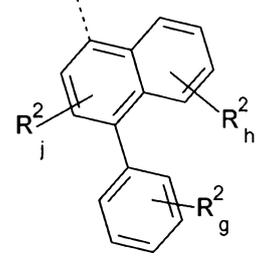
式 (R¹-54)



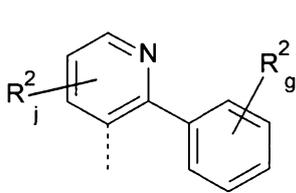
式 (R¹-55)



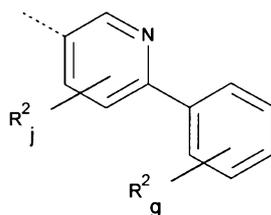
式 (R¹-56)



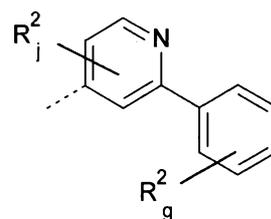
式 (R¹-57)



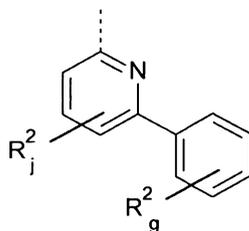
式 (R¹-58)



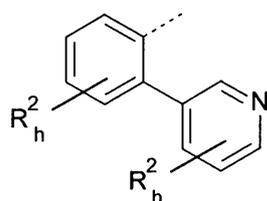
式 (R¹-59)



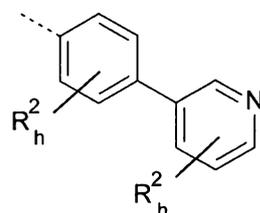
式 (R¹-60)



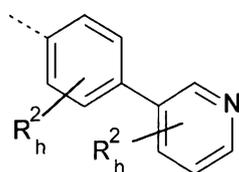
式 (R¹-61)



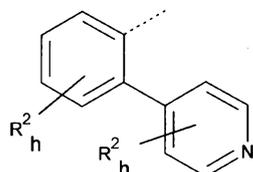
式 (R¹-62)



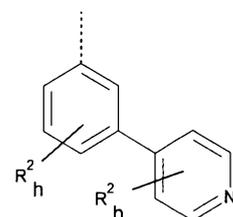
式 (R¹-63)



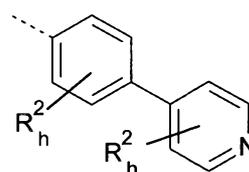
式 (R¹-64)



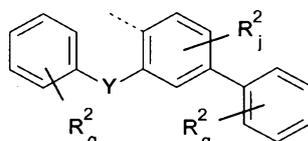
式 (R¹-65)



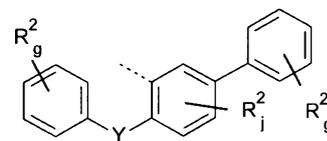
式 (R¹-66)



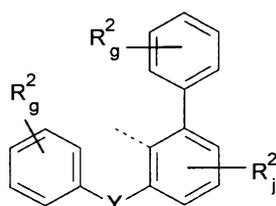
式 (R¹-67)



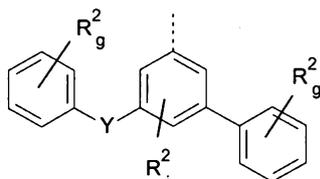
式 (R¹-68)



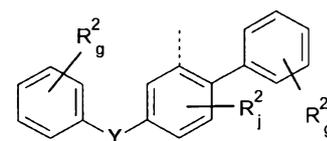
式 (R¹-69)



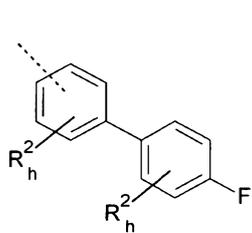
式 (R¹-70)



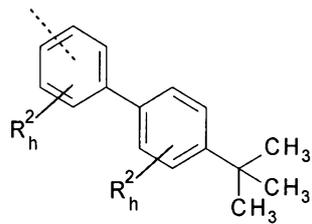
式 (R¹-71)



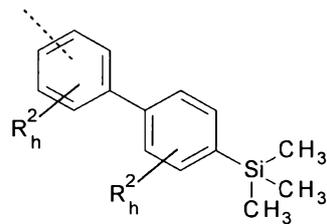
式 (R¹-72)



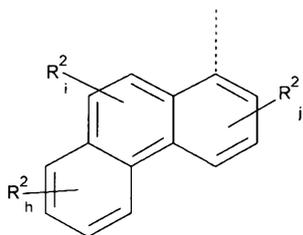
式 (R¹-73)



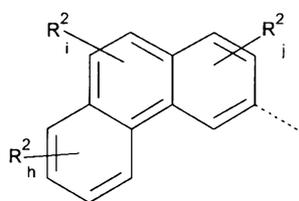
式 (R¹-74)



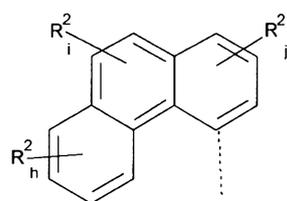
式 (R¹-75)



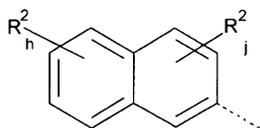
式 (R¹-76)



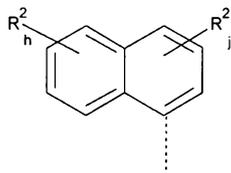
式 (R¹-77)



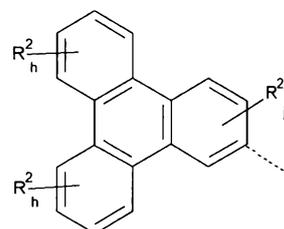
式 (R¹-78)



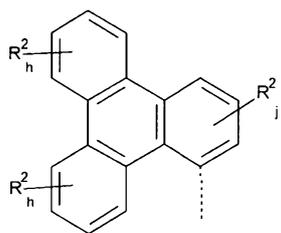
式 (R¹-79)



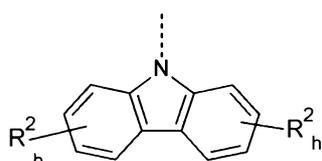
式 (R¹-80)



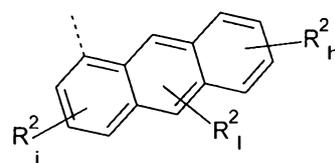
式 (R¹-81)



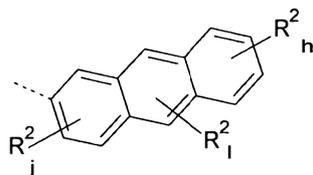
式 (R¹-82)



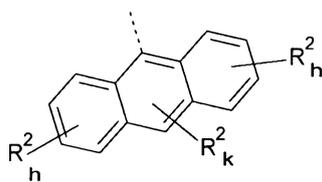
式 (R¹-83)



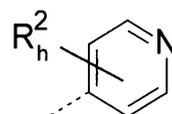
式 (R¹-84)



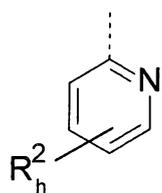
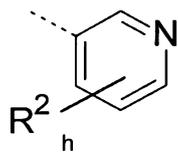
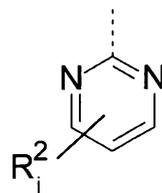
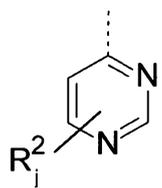
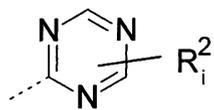
式 (R¹-85)



式 (R¹-86)



式 (R¹-87)

式 (R¹-88)式 (R¹-89)式 (R¹-90)式 (R¹-91)式 (R¹-92)

其中所使用的符號如下：

Y 為 O、S 或 NR²，較佳 O 或 S；

k 在各情況下獨立為 0 或 1；

i 在各情況下獨立為 0、1 或 2；

j 在各情況下獨立為 0、1、2 或 3；

h 在各情況下獨立為 0、1、2、3 或 4；

g 在各情況下獨立為 0、1、2、3、4 或 5；

R² 可具有上面所給予之定義，尤其是針對式 (I) 所給予之定義，及

虛線鍵標記出附接位置。

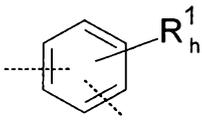
本文中偏好的是式 R¹-1 至 R¹-56 之基，特別偏好的是 R¹-1、R¹-3、R¹-5、R¹-6、R¹-15、R¹-29、R¹-30、R¹-31、R¹-32、R¹-33、R¹-38、R¹-39、R¹-40、R¹-41、R¹-42、R¹-43、R¹-44 及 / 或 R¹-45 基。

可能較佳的情況是式 (R¹-1) 至 (R¹-92) 之結構中的指標 k、i、j、h 和 g 之總數在各情況下為不超過 3，較佳不超過 2 且更佳不超過 1。

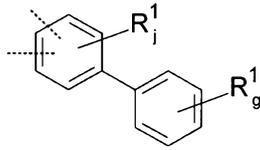
較佳，式(R¹-1)至(R¹-92)中之R²基團與R²基團所鍵結的芳基或雜芳基之環原子不形成稠合芳族或雜芳族環系統，且較佳不形成任何稠合環系統。此包括與可能鍵結至R²基團之可能R³取代基形成稠合環系統。

上面詳述之式(R¹-1)至(R¹-92)的基團為較佳式(I)的Ar基團或式(H-1)至(H-3)的Ar³、Ar⁴基團或這些式的較佳具體例，其中在此情況中，式(R¹-1)至(R¹-92)所示R²基將被R¹基團置換。上面關於式(R¹-1)至(R¹-92)詳述之偏好係相應的適用。

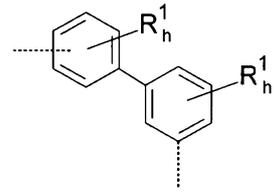
偏好的是包含至少一種式(H-1)至(H-26)結構之化合物，其中Ar²基為選自式(L¹-1)至(L¹-108)之基，及/或偏好的是包含式(QL)結構之化合物其中L¹基為鍵或選自式(L¹-1)至(L¹-108)之基，



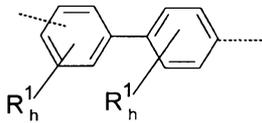
式 (L¹-1)



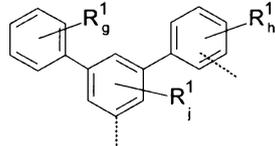
式 (L¹-2)



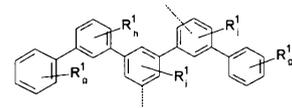
式 (L¹-3)



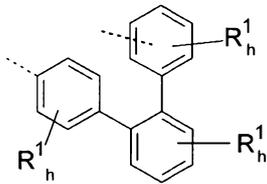
式 (L¹-4)



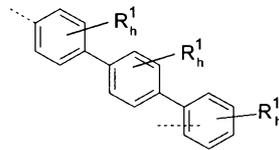
式 (L¹-5)



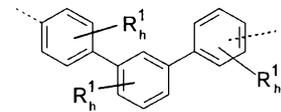
式 (L¹-6)



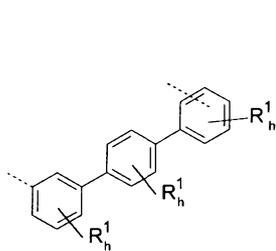
式 (L¹-7)



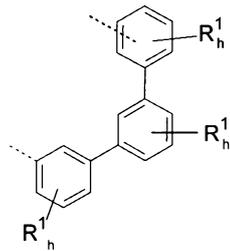
式 (L¹-8)



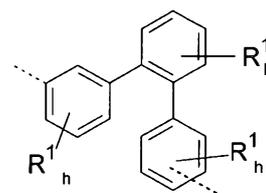
式 (L¹-9)



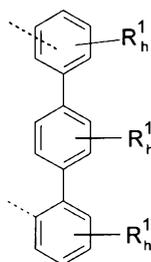
式 (L¹-10)



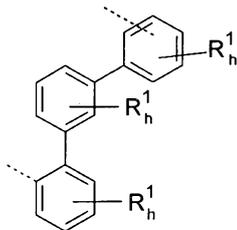
式 (L¹-11)



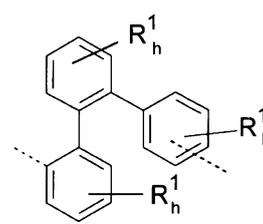
式 (L¹-12)



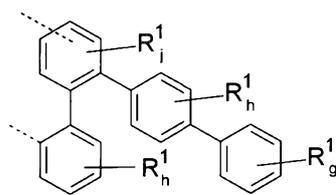
式 (L¹-13)



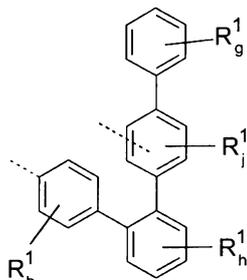
式 (L¹-14)



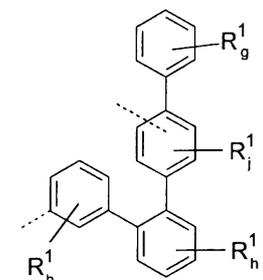
式 (L¹-15)



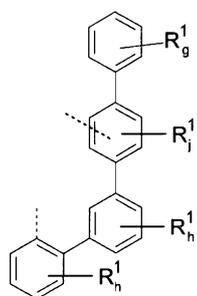
式 (L¹-16)



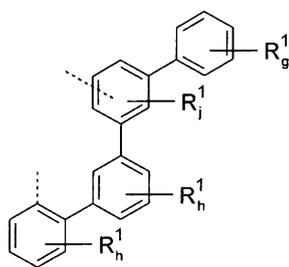
式 (L¹-17)



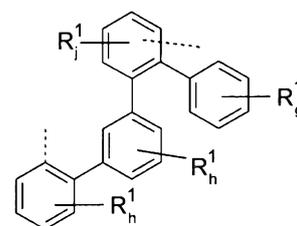
式 (L¹-18)



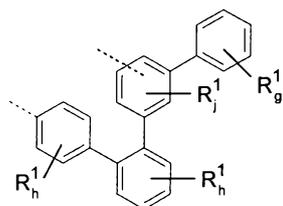
式 (L¹-19)



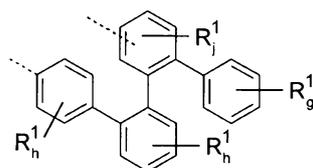
式 (L¹-20)



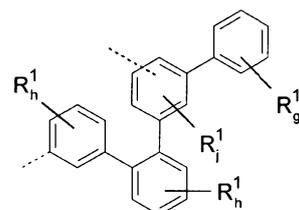
式 (L¹-21)



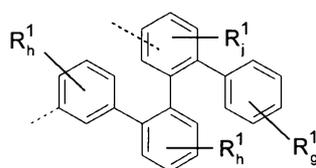
式 (L¹-22)



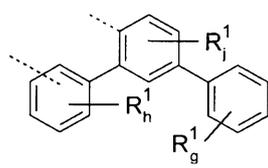
式 (L¹-23)



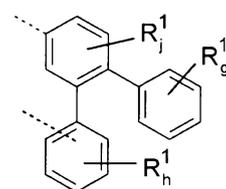
式 (L¹-24)



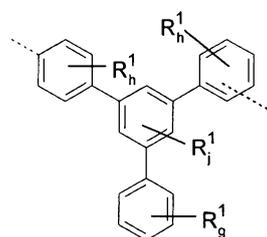
式 (L¹-25)



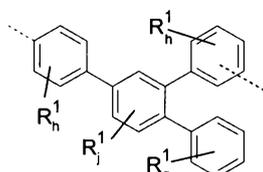
式 (L¹-26)



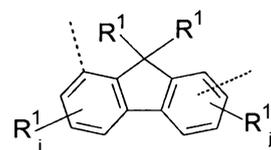
式 (L¹-27)



式 (L¹-28)



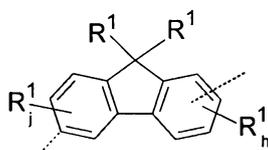
式 (L¹-29)



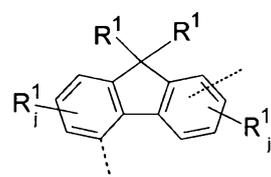
式 (L¹-30)



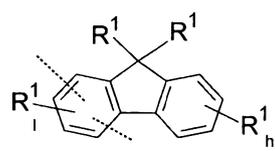
式 (L¹-31)



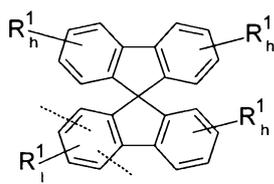
式 (L¹-32)



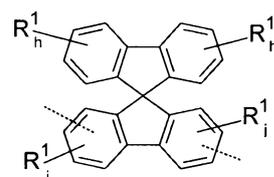
式 (L¹-33)



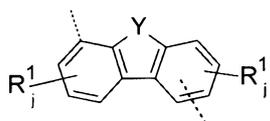
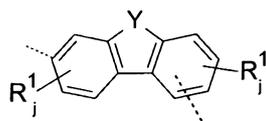
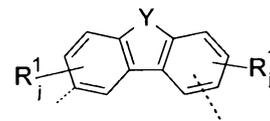
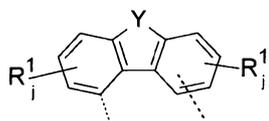
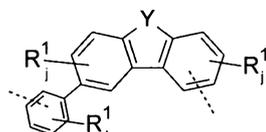
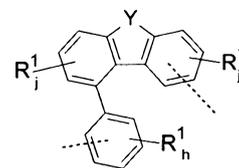
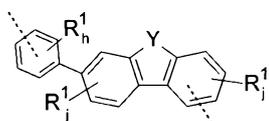
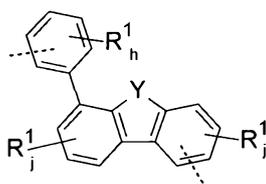
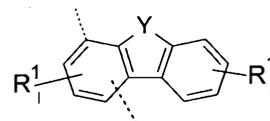
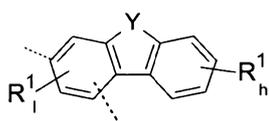
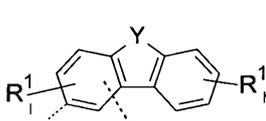
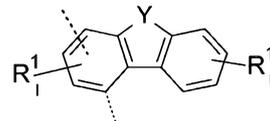
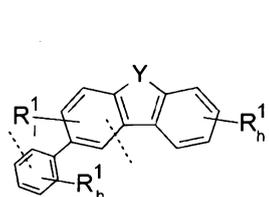
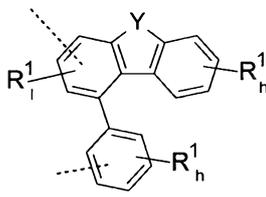
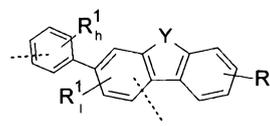
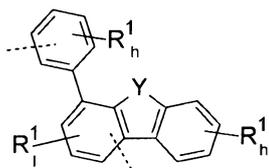
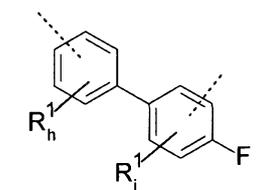
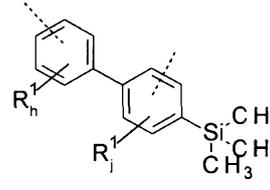
式 (L¹-34)

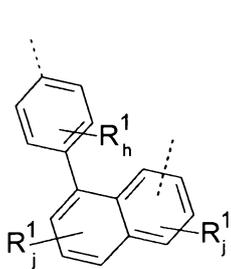


式 (L¹-35)

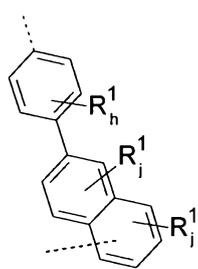


式 (L¹-36)

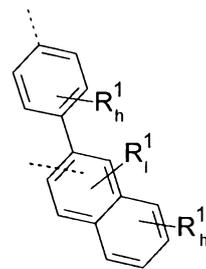
式 (L¹-37)式 (L¹-38)式 (L¹-39)式 (L¹-40)式 (L¹-41)式 (L¹-42)式 (L¹-43)式 (L¹-44)式 (L¹-45)式 (L¹-46)式 (L¹-47)式 (L¹-48)式 (L¹-49)式 (L¹-50)式 (L¹-51)式 (L¹-52)式 (L¹-53)式 (L¹-54)



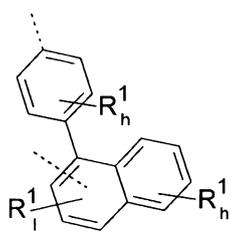
式 (L¹-55)



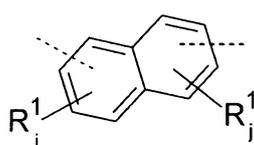
式 (L¹-56)



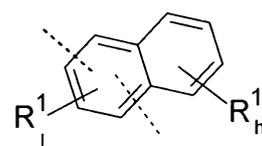
式 (L¹-57)



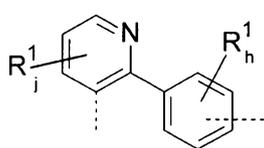
式 (L¹-58)



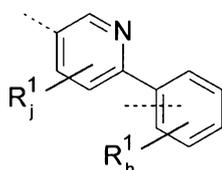
式 (L¹-59)



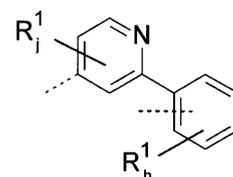
式 (L¹-60)



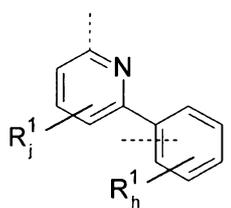
式 (L¹-61)



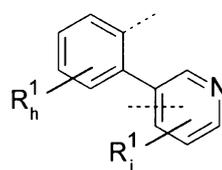
式 (L¹-62)



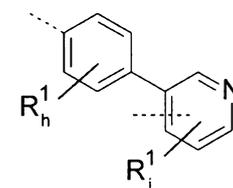
式 (L¹-63)



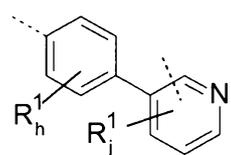
式 (L¹-64)



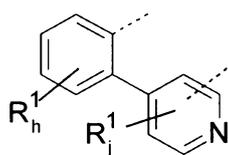
式 (L¹-65)



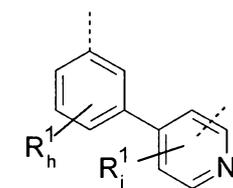
式 (L¹-66)



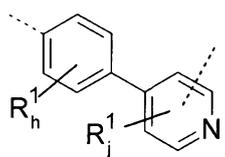
式 (L¹-67)



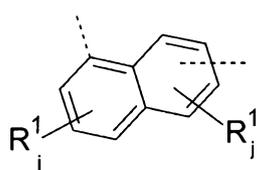
式 (L¹-68)



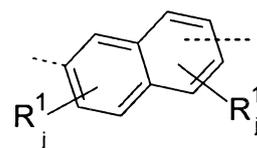
式 (L¹-69)



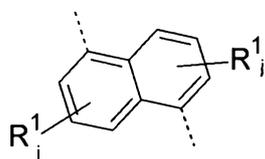
式 (L¹-70)



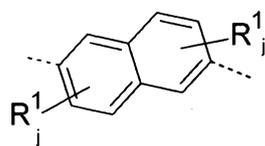
式 (L¹-71)



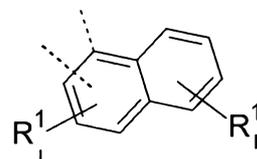
式 (L¹-72)



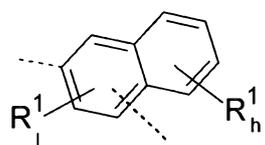
式 (L¹-73)



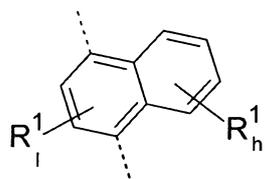
式 (L¹-74)



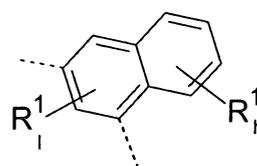
式 (L¹-75)



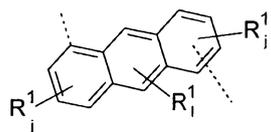
式 (L¹-76)



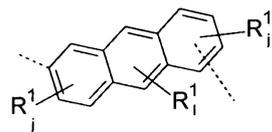
式 (L¹-77)



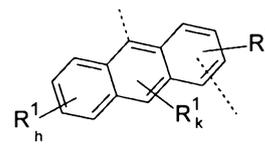
式 (L¹-78)



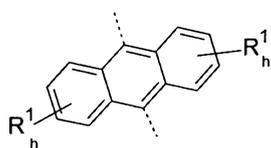
式 (L¹-79)



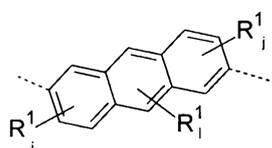
式 (L¹-80)



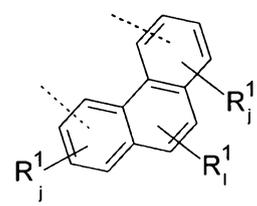
式 (L¹-81)



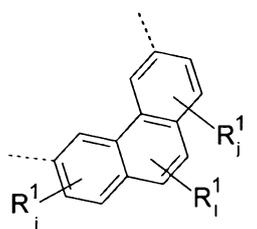
式 (L¹-82)



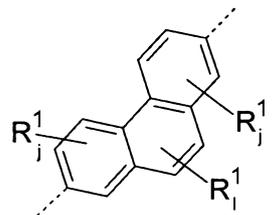
式 (L¹-83)



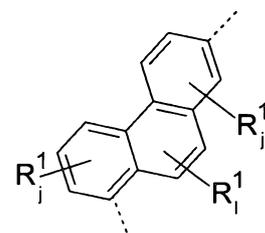
式 (L¹-84)



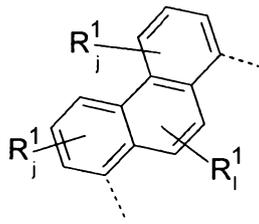
式 (L¹-85)



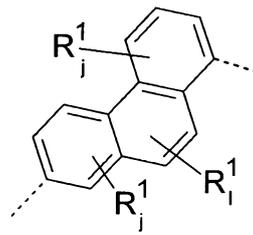
式 (L¹-86)



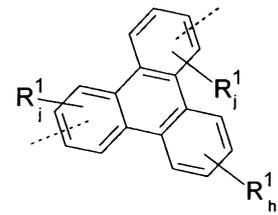
式 (L¹-87)



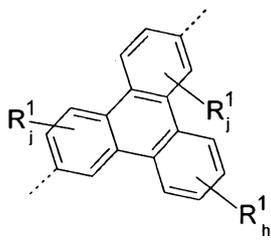
式 (L¹-88)



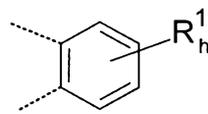
式 (L¹-89)



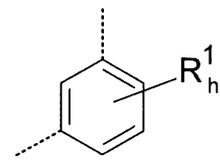
式 (L¹-90)



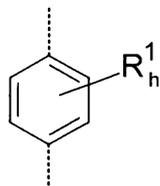
式 (L¹-91)



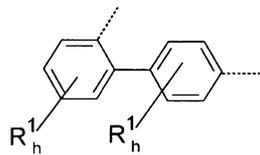
式 (L¹-92)



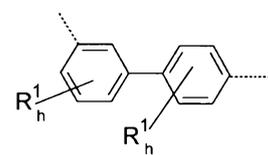
式 (L¹-93)



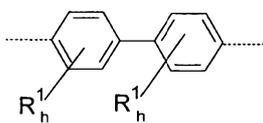
式 (L¹-94)



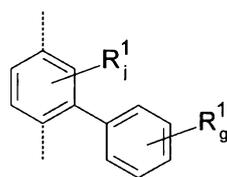
式 (L¹-95)



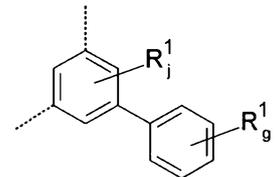
式 (L¹-96)



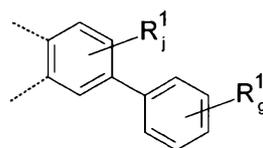
式 (L¹-97)



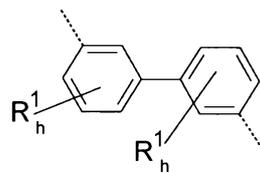
式 (L¹-98)



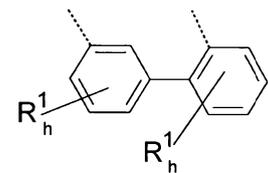
式 (L¹-99)



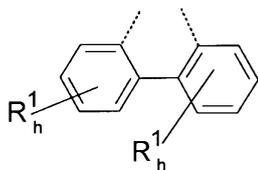
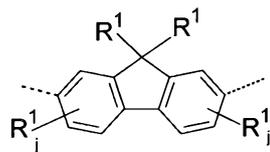
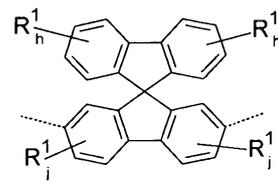
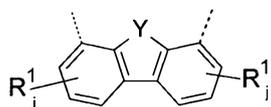
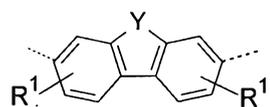
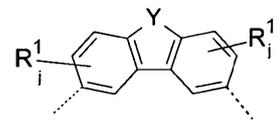
式 (L¹-100)



式 (L¹-101)



式 (L¹-102)

式 (L¹-103)式 (L¹-104)式 (L¹-105)式 (L¹-106)式 (L¹-107)式 (L¹-108)

其中虛線鍵在各情況下標記出附接位置，指標k為0或1，指標l為0、1或2，指標j在各情況下獨立為0、1、2或3；指標h在每次獨立為0、1、2、3或4，指標g為0、1、2、3、4或5；符號Y為O、S或NR¹，較佳O或S；且符號R¹具有上面所給予之定義，尤其是針對式(I)所給予之定義。

可能較佳的情況是式(L¹-1)至(L¹-108)之結構中的指標k、l、g、h和j之總數在各情況下為最多3，較佳最多2且更佳最多1。

具有式(H-1)至(H-26)之基的本發明較佳化合物係包含Ar²基，該Ar²基係選自式(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-108)中之一者，較佳式(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-108)中之一者，尤佳式(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-103)中之一者。有利地，式(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-108)，較佳式(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-108)，尤佳式(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-103)之結構中的的指標k、l、g、h和j之總數在各情況下可為不超過

3，較佳不超過2且更佳不超過1。

具有式(QL)之基的本發明較佳化合物係包含 L^1 基，該 L^1 基代表鍵或係選自式(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-108)中之一者，較佳式(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-108)中之一者，尤佳式(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-103)中之一者。有利地，式(L¹-1)至(L¹-78)及/或(L¹-92)至(L¹-108)，較佳式(L¹-1)至(L¹-54)及/或(L¹-92)至(L¹-108)，尤佳式(L¹-1)至(L¹-29)及/或(L¹-92)至(L¹-103)之結構中的的指標k、l、g、h和j之總數在各情況下可為不超過3，較佳不超過2且更佳不超過1。

較佳，式(L¹-1)至(L¹-108)中之 R^2 基團與 R^2 基團所鍵結之芳基或雜芳基的環原子不形成稠合芳族或雜芳族環系統，且較佳不形成任何稠合環系統。此包括與可能鍵結至 R^2 基團之可能 R^3 取代基形成稠合環系統。

當本發明之化合物經芳族或雜芳族 R^1 或 R^2 基取代時，較佳的是當此等沒有任何具有超過二個彼此直接稠合之芳族六員環的芳基或雜芳基時。更佳，取代基根本沒有任何具有彼此直接稠合之六員環的芳基或雜芳基。此偏好的理由為此等結構的低三重態能量。但儘管如此，根據本發明亦適用的具有超過二個彼此直接稠合之芳族六員環的稠合芳基為菲及聯伸三苯，因為此等亦具有高三重態能階。

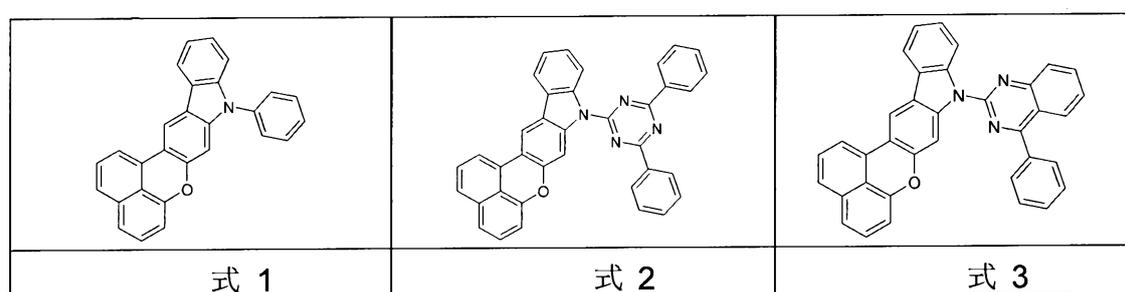
在本發明之又一較佳具體實施例中，例如式(I)之結構和此結構的較佳具體實施例或其中提及此等式子之結構中的 R^2 在各情況下係相同或不同且選自下列所組成群組：

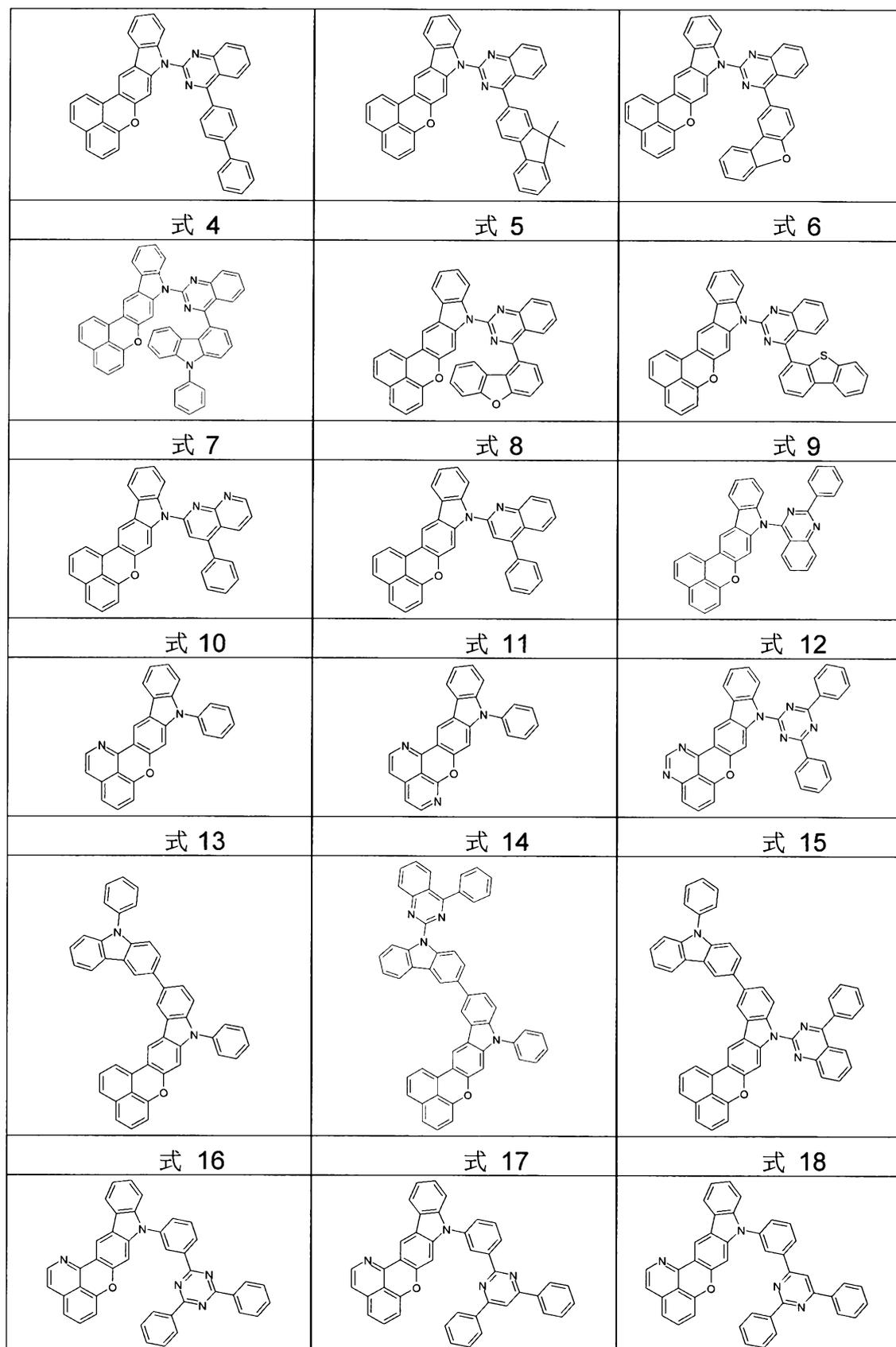
H、D、具有1至10個碳原子，較佳具有1、2、3或4個碳原子之脂族烴基、或其具有5至30個芳族環原子，較佳5至24個芳族環原子，更佳地5至13個芳族環原子且可經一或多個各具有1至4個碳原子之烷基取代，但較佳未經取代之芳族或雜芳族環系統。

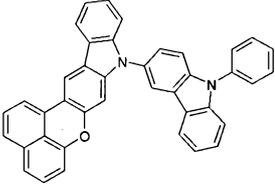
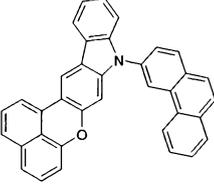
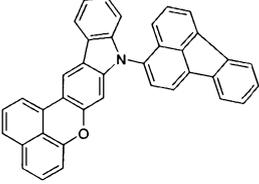
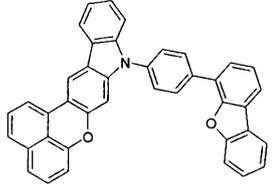
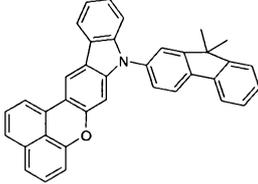
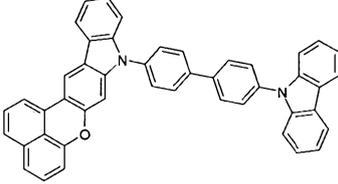
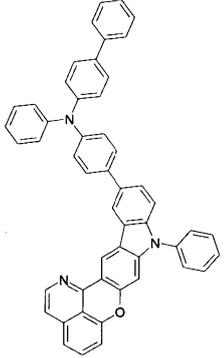
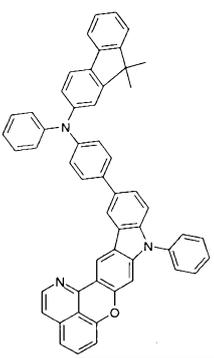
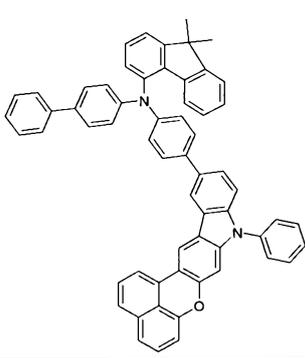
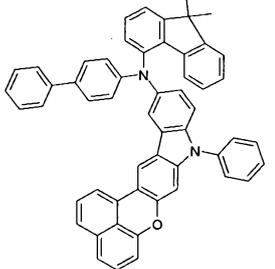
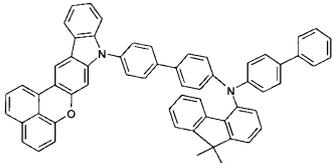
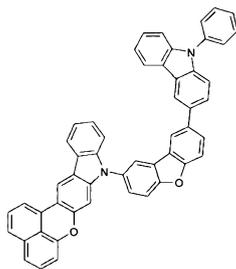
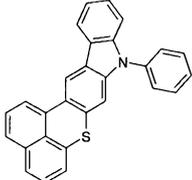
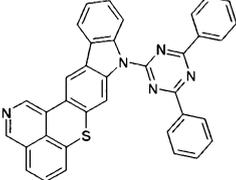
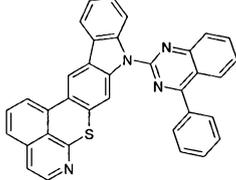
較佳， R^2 基團與 R^2 基團所鍵結之芳基或雜芳基的環原子不形成稠合芳族或雜芳族環系統，且較佳不形成任何稠合環系統。此包括與可能鍵結至 R^2 基團之可能 R^3 取代基形成稠合環系統。

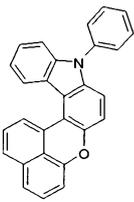
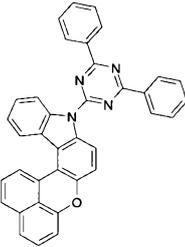
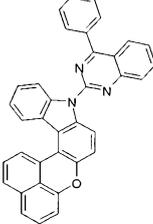
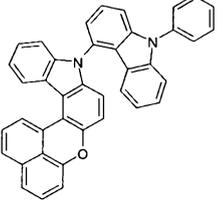
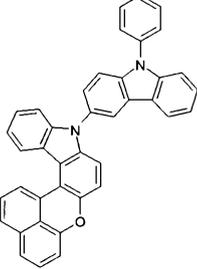
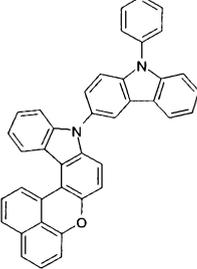
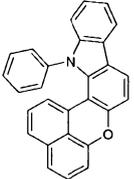
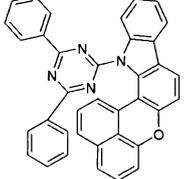
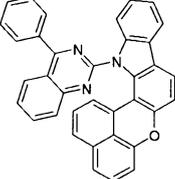
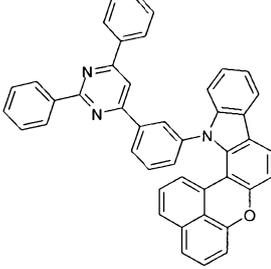
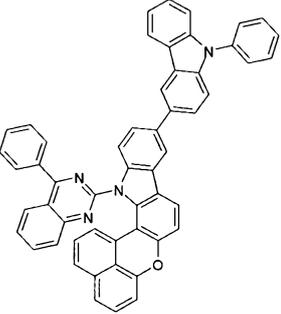
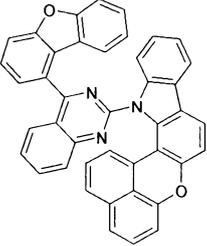
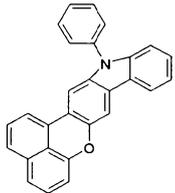
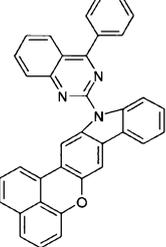
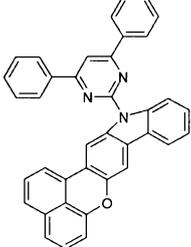
在本發明之又一較佳具體實施例中，例如式(I)之結構和此結構的較佳具體實施例或其中提及此等式子之結構中的 R^3 在各情況下係相同或不同且選自下列所組成群組：H、D、F、CN、具有1至10個碳原子，較佳具有1、2、3或4個碳原子之脂族烴基、或具有5至30個芳族環原子，較佳5至24個芳族環原子，更佳地5至13個芳族環原子且可經一或多個各具有1至4個碳原子之烷基取代，但較佳未經取代之芳族或雜芳族環系統。

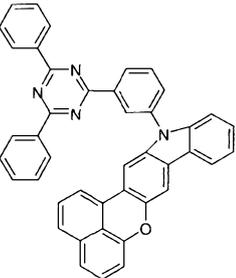
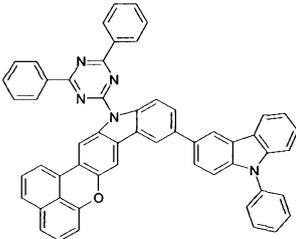
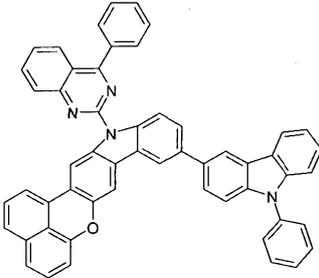
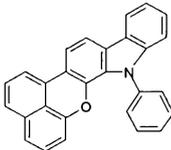
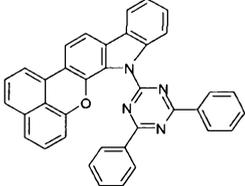
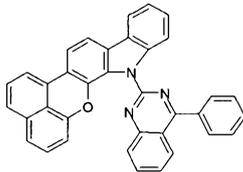
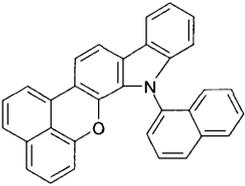
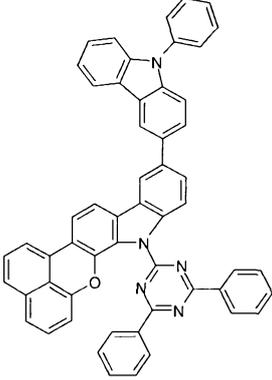
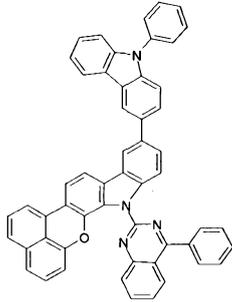
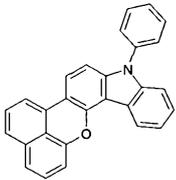
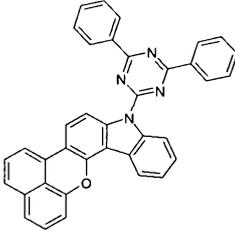
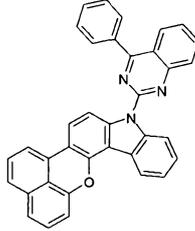
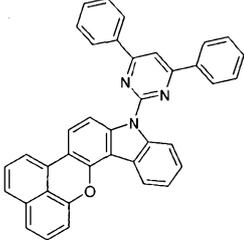
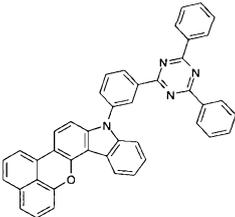
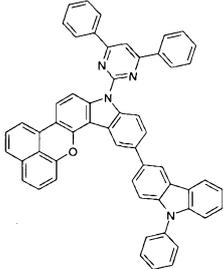
適當的本發明化合物之實例為顯示於下面的下式1至153之結構：

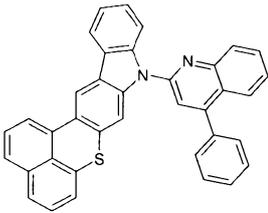
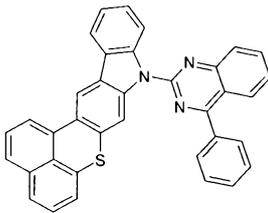
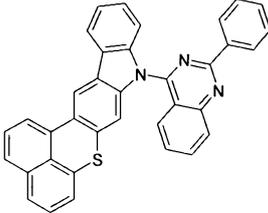
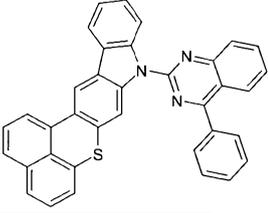
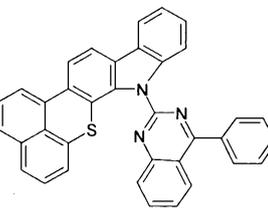
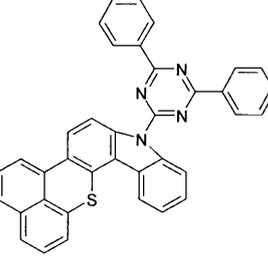
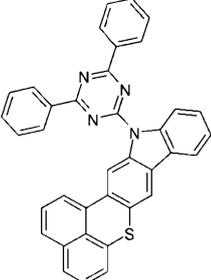
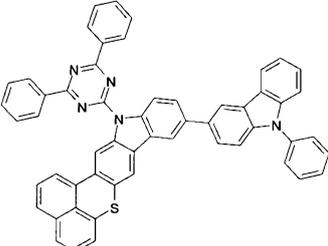
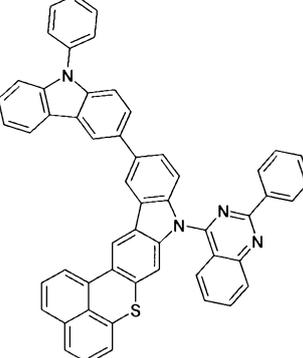
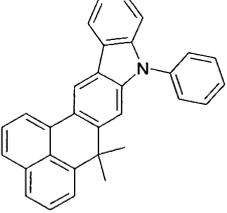
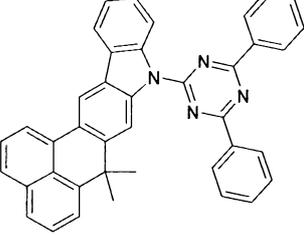
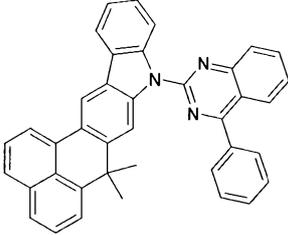
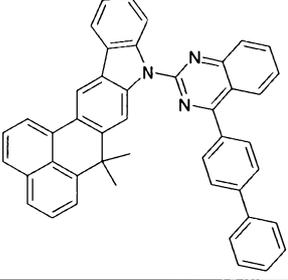
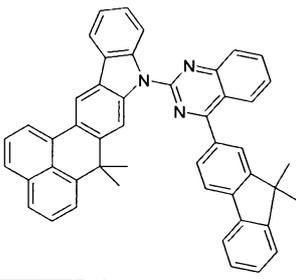
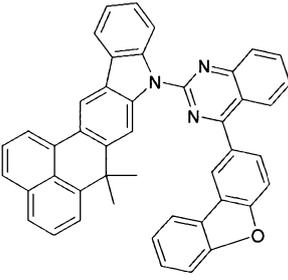


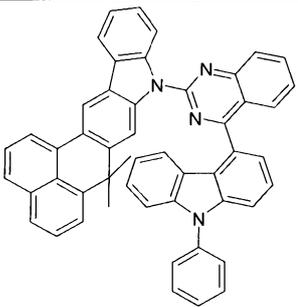
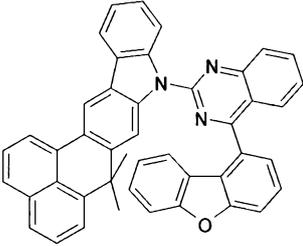
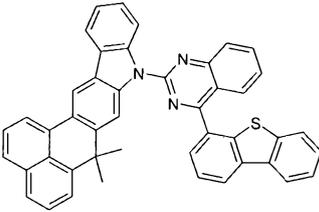
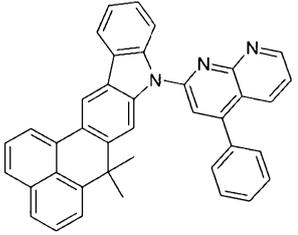
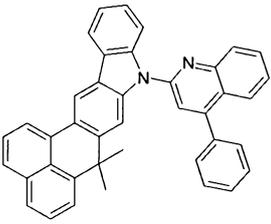
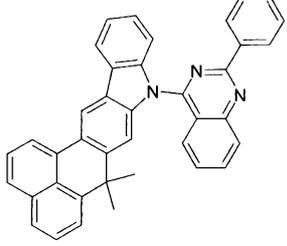
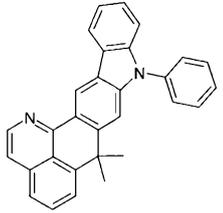
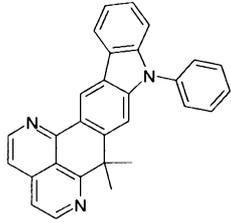
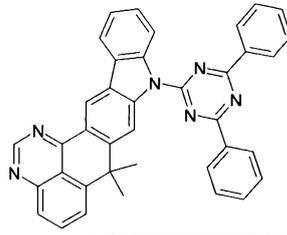
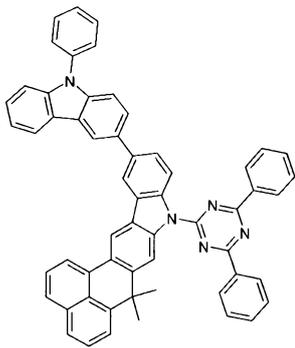
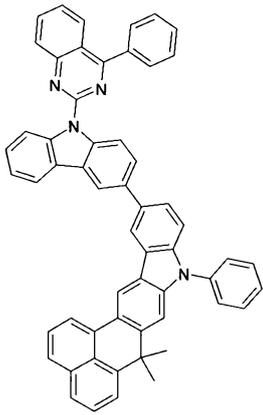
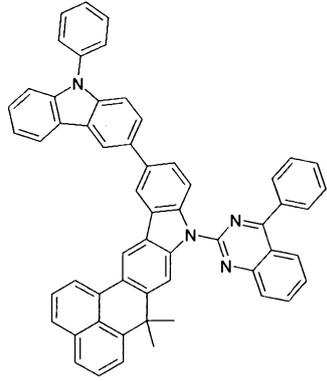


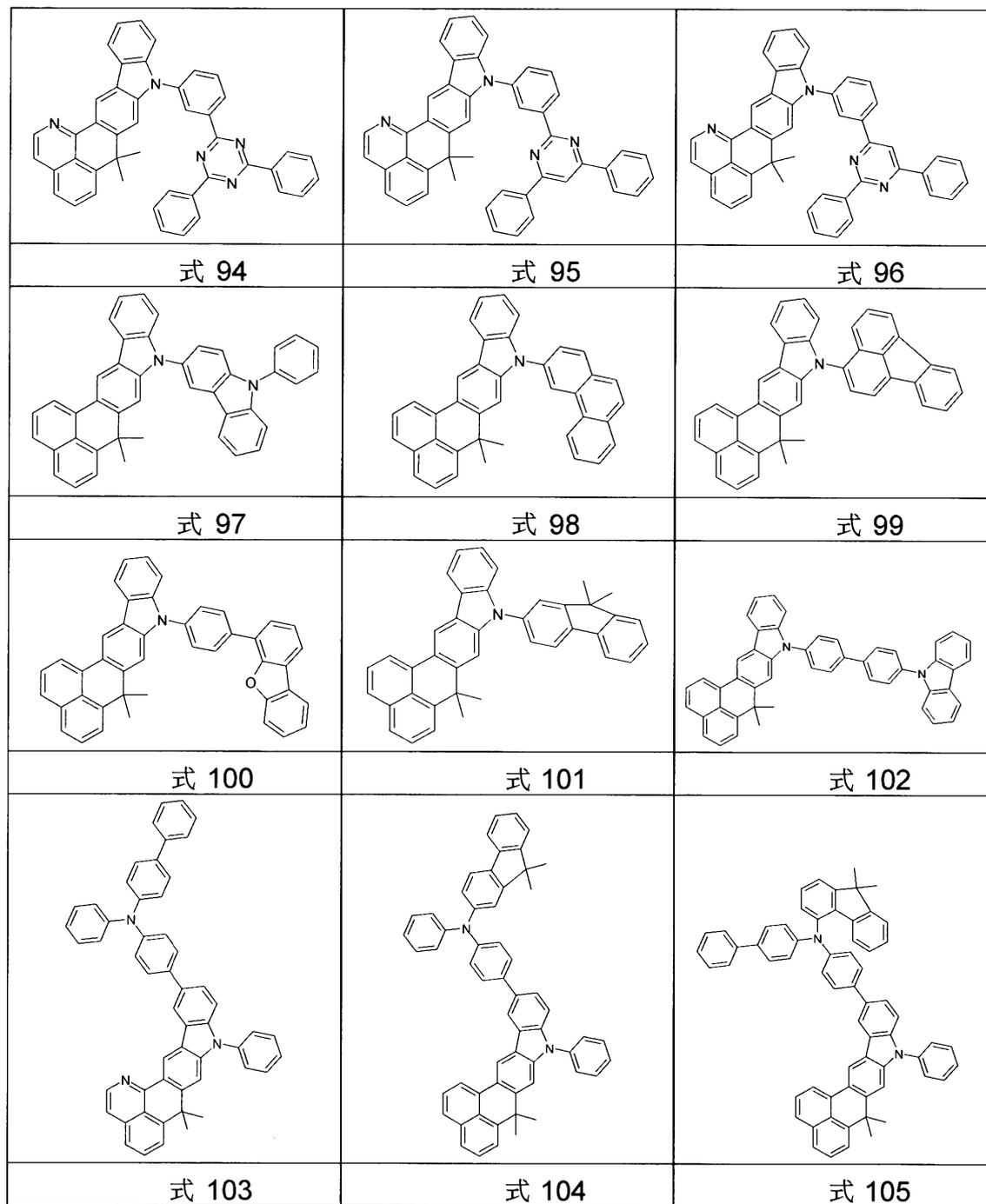
<p style="text-align: center;">式 19</p> 	<p style="text-align: center;">式 20</p> 	<p style="text-align: center;">式 21</p> 
<p style="text-align: center;">式 22</p> 	<p style="text-align: center;">式 23</p> 	<p style="text-align: center;">式 24</p> 
<p style="text-align: center;">式 25</p>	<p style="text-align: center;">式 26</p>	<p style="text-align: center;">式 27</p>
		
<p style="text-align: center;">式 28</p>	<p style="text-align: center;">式 29</p>	<p style="text-align: center;">式 30</p>
		
<p style="text-align: center;">式 31</p>	<p style="text-align: center;">式 32</p>	<p style="text-align: center;">式 33</p>
		
<p style="text-align: center;">式 34</p>	<p style="text-align: center;">式 35</p>	<p style="text-align: center;">式 36</p>

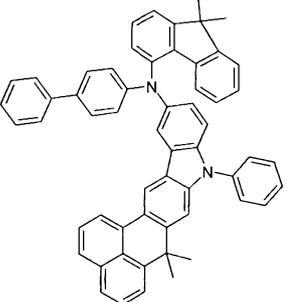
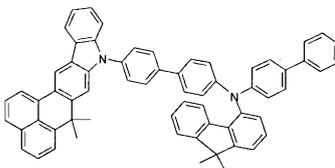
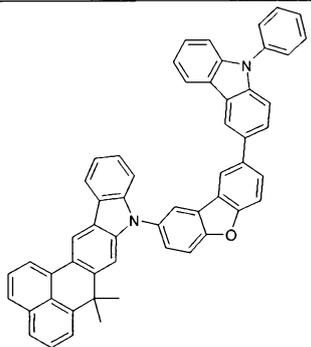
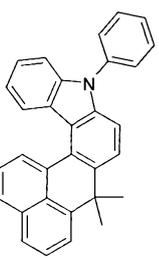
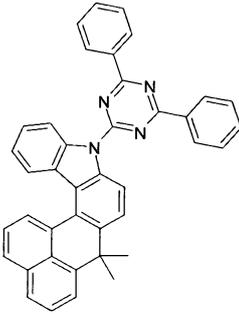
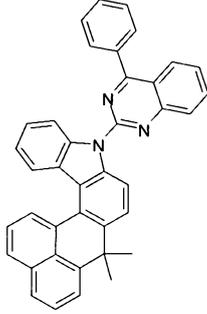
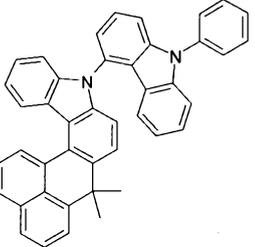
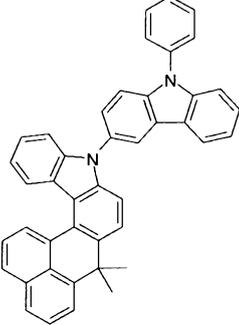
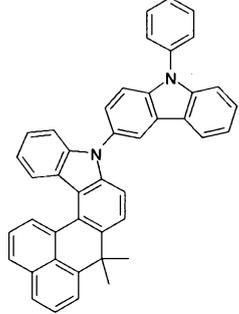
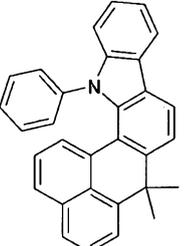
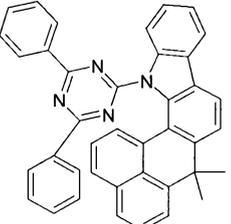
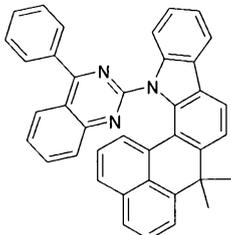
		
式 37	式 38	式 39
		
式 40	式 41	式 42
		
式 43	式 44	式 45
		
式 46	式 47	式 48
		
式 49	式 50	式 51

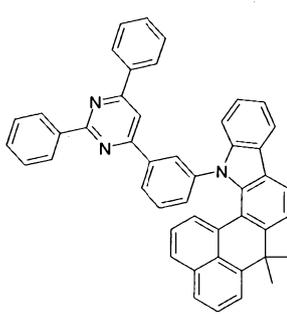
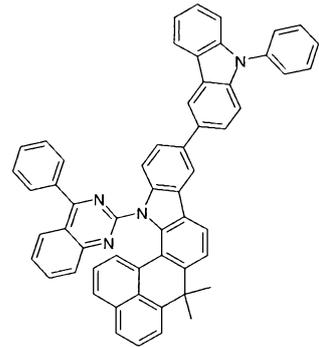
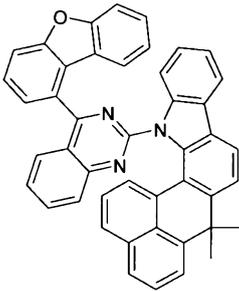
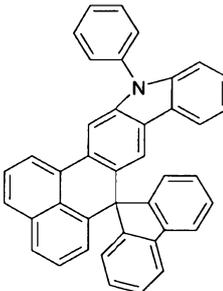
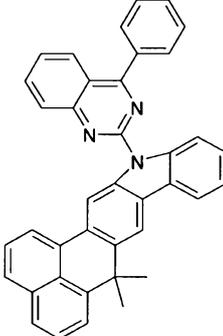
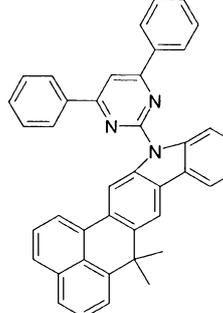
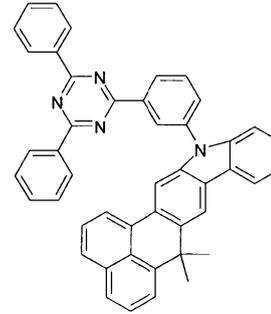
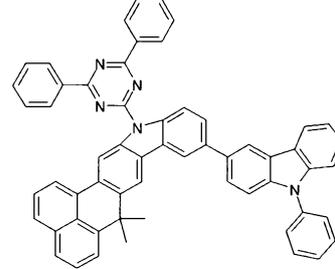
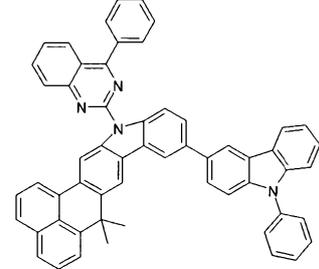
		
式 52	式 53	式 54
		
式 55	式 56	式 57
		
式 58	式 59	式 60
		
式 61	式 62	式 63
		
式 64	式 65	式 66

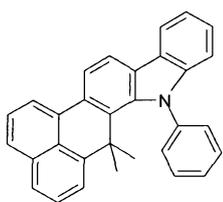
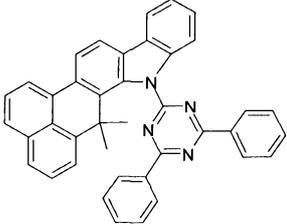
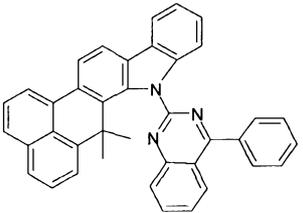
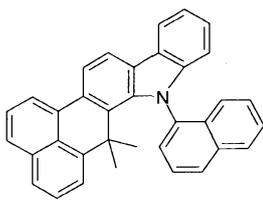
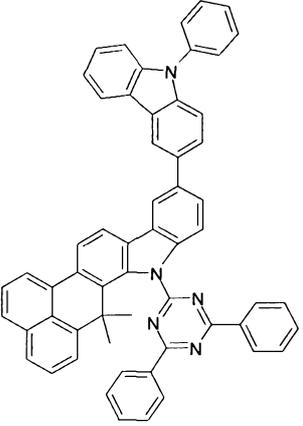
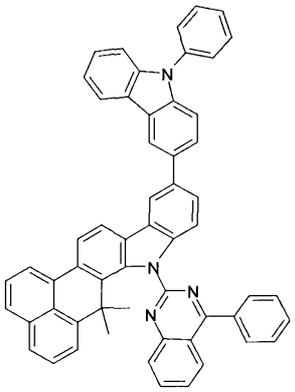
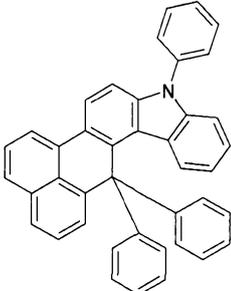
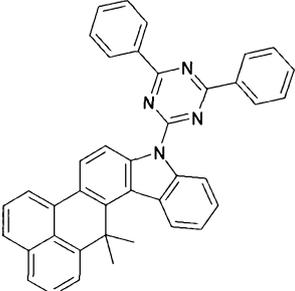
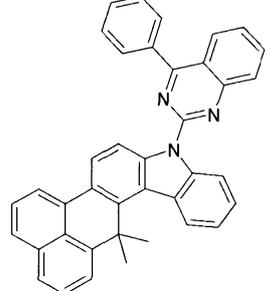
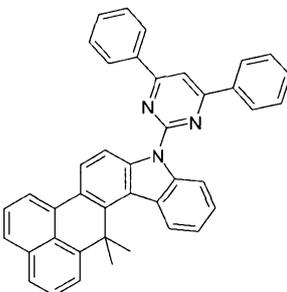
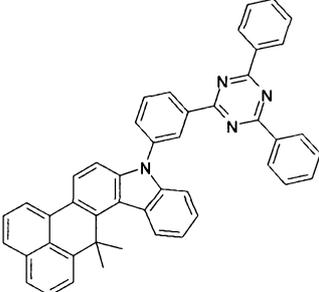
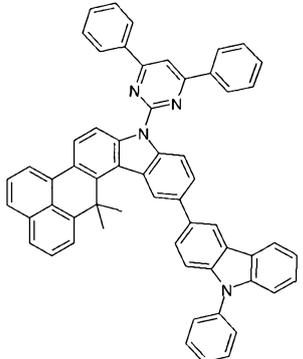
		
式 67	式 68	式 69
		
式 70	式 71	式 72
		
式 73	式 74	式 75
		
式 76	式 77	式 78
		
式 79	式 80	式 81

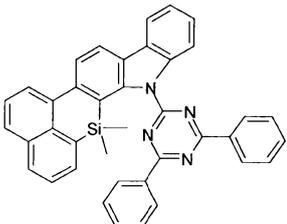
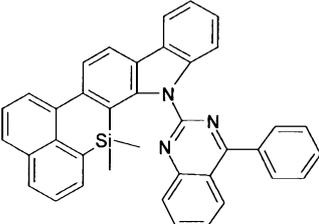
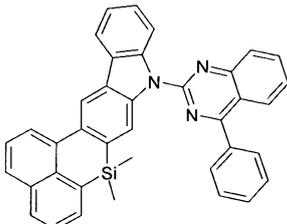
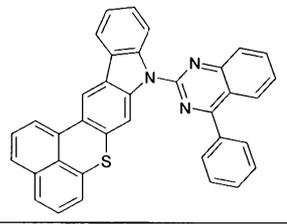
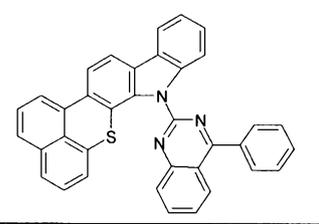
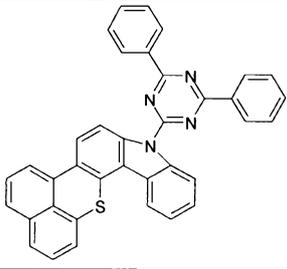
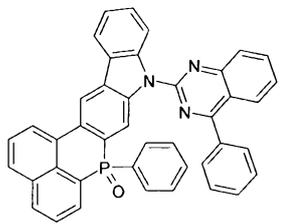
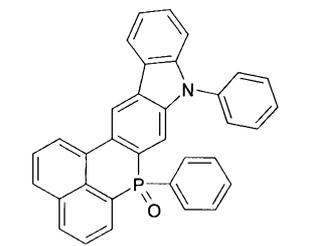
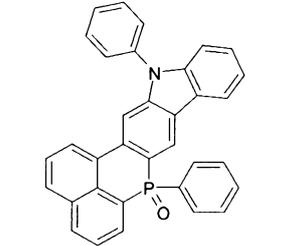
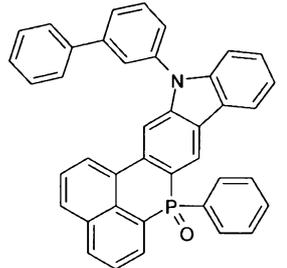
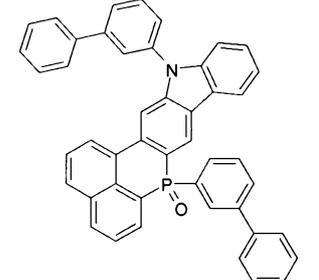
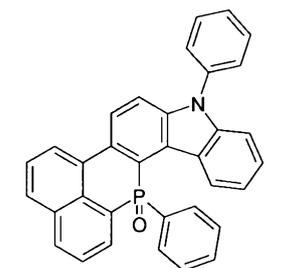
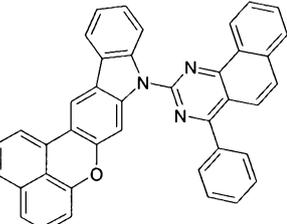
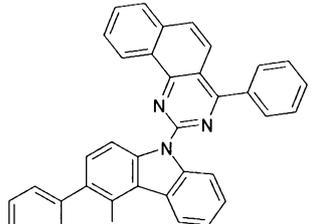
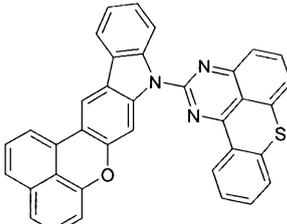
		
式 82	式 83	式 84
		
式 85	式 86	式 87
		
式 88	式 89	式 90
		
式 91	式 92	式 93



		
式 106	式 107	式 108
		
式 109	式 110	式 111
		
式 112	式 113	式 114
		
式 115	式 116	式 117

		
式 118	式 119	式 120
		
式 121	式 122	式 123
		
式 124	式 125	式 126

		
式 127	式 128	式 129
		
式 130	式 131	式 132
		
式 133	式 134	式 135
		
式 136	式 137	式 138

		
式 139	式 140	式 141
		
式 142	式 143	式 144
		
式 145	式 146	式 147
		
式 148	式 149	式 150
		
式 151	式 152	式 153

本發明之化合物的較佳具體實施例具體敘述於實施例中，此等化合物可單獨使用或與另外化合物組合用於本發

明之所有目的。

只要符合了申請專利範圍第1項所指明的條件，則上述較佳具體實施例可依所欲彼此組合。在本發明之特佳具體實施例中，上述較佳具體實施例同時施用。

本發明之化合物原則上可藉由各種方法製備。然而，發現到後文所敘述的方法是特別適合的。

因此，本發明又提供一種用於製備包含式(I)之結構的化合物之方法，其中，在偶合反應中，包含至少一個含氮雜環基之化合物係結合到包含至少一個芳族或雜芳族基之化合物。

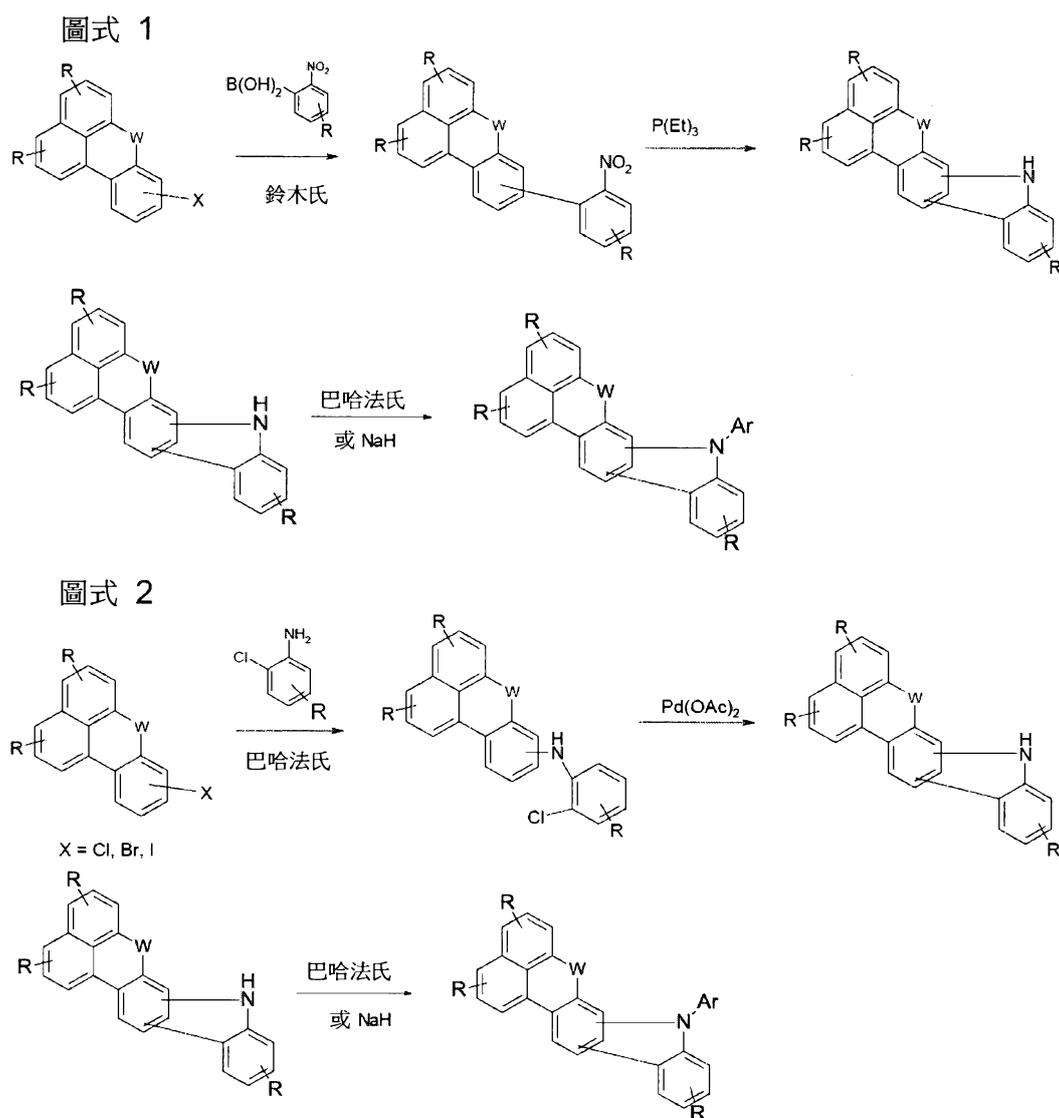
具有呋唑基團的適當化合物於許多情況下為市售的，且詳述於實施例的起始化合物係可藉由已知方法獲得，所以參考彼等方法。

此等化合物可藉由已知的偶合反應與另外芳基化合物反應，為此目的所需的條件為熟習該項技術者已知的，且實施例中的詳細說明有助於熟習該項技術者進行此等反應。

皆導致C-C鍵形成及/或C-N鍵形成之特別適當且較佳的偶合反應為彼等根據巴哈法氏(BUCHWALD)、鈴木氏(SUZUKI)、山本氏(YAMAMOTO)、史帝勒氏(STILLE)、赫克氏(HECK)、根岸氏(NEGISHI)、菌頭氏(SONOGASHIRA)及檜山(HIYAMA)之偶合反應。此等反應為廣為人知的，且實施例將提供熟習該項技術者另外的指示。

在所有下列合成圖式中，係顯示具少數取代基的化合物，以簡化結構。這並未排除任何所欲之另外取代基存在於方法中。

以下列圖式給出說明性實施，而沒有對此等應強加限制之任何意圖。個別圖式的構成步驟可依所欲彼此組合。



圖式 1 與 2 中所使用的符號之定義基本上相應於針對式 (I) 所定義者，為了清楚起見，省略編號。

所示之用於合成本發明化合物之方法應理解為作為實

例。熟習該項技術者將能夠在其技術的普通知識範圍內開發替代的合成路徑。

上面所詳述製備方法的原則係原則上從類似化合物的文獻可得知且熟習該項技術者可輕易地調整以適用於本發明化合物的製備。另外的資訊可於實施例中找到。

可能藉由此等方法，如有必要接著進行純化，例如，再結晶或昇華，而以高純度，較佳超過99%(利用 ^1H NMR及/或HPLC之手段測定)獲得包含式(I)之結構的本發明化合物。

本發明之化合物亦可具有適當的取代基，例如，較長的烷基，約4至20個碳原子，尤其是支鏈烷基；或是隨意地經取代之芳基，例如，二甲苯基、均三甲苯基或支鏈聯三苯基或聯四苯基，其導致於標準有機溶劑中的溶解度而使得化合物在室溫下可溶在甲苯或二甲苯中，例如以充分濃度，以茲該化合物從溶液加工。這些可溶化合物對於從該溶液加工而言有特別良好的適合性，例如藉由印刷方法從該溶液加工。此外，應強調的是，包含至少一種式(I)之結構的本發明化合物在此等溶劑中已具有增強的溶解度。

本發明之化合物亦可與聚合物混合。同樣可能將此等化合物共價併入聚合物中。此在使用經反應性脫離基(諸如，溴、碘、氯、硼酸或硼酸酯)、或反應性可聚合基團(諸如，烯烴類或氧雜環丁烷)取代的化合物下，是尤其可能的。此等可有用於作為生產相應寡聚物、樹枝狀聚合物或聚合物的單體。寡聚合或聚合較佳經由鹵素官能性或硼

酸官能性或經由可聚合的基團來進行。另外可能經由此類基團來交聯聚合物。本發明之化合物及聚合物可以交聯或未交聯層的形式使用。

本發明因此又提供含有一或多種(個)上面所詳述的式(I)之結構或本發明之化合物的寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中有一或多個本發明之化合物或式(I)之結構至聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物的鏈。根據式(I)之結構的鏈聯或化合物的鏈聯，此等因此形成寡聚物或聚合物的側鏈或鏈結於主鏈內。聚合物、寡聚物或樹枝狀聚合物可為共軛、部分共軛或非共軛。寡聚物或聚合物可為直鏈、支鏈或樹枝狀。就寡聚物、樹枝狀聚合物及聚合物中之本發明化合物的重複單元而言，如上所述地適用相同的較佳選擇。

為了製備寡聚物或聚合物，將本發明之單體進行均聚合或與另外單體進行共聚。偏好的是其中式(I)單元或上面和下面所述之較佳具體實施例以0.01至99.9mol%，較佳5至90mol%，更佳20至80mol%之量存在的共聚物。形成聚合物基本骨架之適當且較佳的共聚單體係選自萸類(例如根據EP 842208或WO 2000/22026)、螺聯萸類(例如根據EP 707020、EP 894107或WO 2006/061181)、對-伸苯基類(例如根據WO 92/18552)、吡啶類(例如根據WO 2004/070772或WO 2004/113468)、噻吩類(例如根據EP 1028136)、二氫萸類(例如根據WO 2005/014689)、順-和反-茛苳萸類(例如根據WO 2004/041901或WO 2004/113412)、酮類(例如根據

WO 2005/040302)、菲類(例如根據WO 2005/104264或WO 2007/017066)亦或複數個此等單元。聚合物、寡聚物及樹枝狀聚合物可還含有另外的單元，例如，電洞傳輸單元(尤其是彼等以三芳基胺類為主者)、及/或電子傳輸單元。

另外令人特別感興趣的是以高玻璃轉移溫度為特徵的本發明化合物。就此而言，尤其偏好的是包含通式(I)之結構的本發明化合物或上面和下面所述之較佳具體實施例，彼等具有至少70°C的玻璃轉移溫度，更佳為至少110°C，甚至更佳為至少125°C且尤佳為至少150°C，根據DIN 51005(2005-08版本)測定。

為了從液相加工本發明化合物(例如藉由旋轉塗佈或藉由印刷方法)，需要本發明化合物的調配物。此等調配物可為例如溶液、分散液或乳液。為此目的，較佳可為使用二或更多種溶劑之混合物。適當且較佳的溶劑為，例如甲苯、苯甲醚、鄰-、間-或對-二甲苯、苯甲酸甲酯、均三甲苯、四氫萘、藜蘆醚、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、1,2,3,5-四甲基苯、1,2,4,5-四甲基苯、1-甲基萘、2-甲基苯并噻唑、2-苯氧基乙醇、2-吡咯啉酮、3-甲基苯甲醚、4-甲基苯甲醚、3,4-二甲基苯甲醚、3,5-二甲基苯甲醚、苯乙酮、 α -萜品醇、苯并噻唑、苯甲酸丁酯、異丙苯、環己醇、環己酮、環己基苯、十氫萘、十二烷基苯、苯甲酸乙酯、茚烷、NMP、對-異丙基甲苯、苯基乙基醚、1,4-二異丙基苯、二苯甲基醚、二乙二醇丁基甲基醚、三乙二醇

丁基甲基醚、二乙二醇二丁基醚、三乙二醇二甲基醚、二乙二醇單丁基醚、三丙二醇二甲基醚、四乙二醇二甲基醚、2-異丙基萘、戊基苯、己基苯、庚基苯、辛基苯、1,1-雙(3,4-二甲基苯基)乙烷、六甲基茛烷、2-甲基聯苯、3-甲基聯苯、1-甲基萘、1-乙基萘、辛酸乙酯、癸二酸二乙酯、辛酸辛酯、庚基苯、異戊酸薄荷酯、己酸環己酯或此等溶劑之混合物。

本發明因此又提供一種調配物，其包含本發明之化合物和至少一種又一化合物。該又一化合物可，例如為溶劑，尤其是上述溶劑之一者或此等溶劑之混合物。該又一化合物可替代地為至少一種同樣使用於電子裝置中之又一有機或無機化合物，例如發光化合物，例如螢光摻雜劑、磷光摻雜劑、或展現TADF(熱活化延遲螢光；**thermally activated delayed fluorescence**)之化合物，尤其是磷光摻雜劑、及/或又一基質材料。此又一化合物亦可為聚合的(**polymeric**)。

本發明因此更提供一種組成物，其包含本發明之化合物和至少一種又一有機功能材料。功能材料通常為引入陽極和陰極之間的有機或無機材料。較佳地，有機功能材料係選自下列所組成群組：螢光發射體、磷光發射體、展現TADF(熱活化延遲螢光)之發射體、主體材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞導體材料、電洞注入材料、電子阻擋材料、電洞阻擋材料、寬能隙材料和n-摻雜劑。

本發明因此亦關於一種組成物，其包含至少一種包含

式(I)之結構的化合物或上面和下面所述之較佳具體實施例及至少一種又一基質材料。根據本發明的一特定態樣，該又一基質材料具有電洞傳輸性質。

本發明又提供一種組成物，其包含至少一種包含至少一種式(I)之結構的化合物或上面和下面所述之較佳具體實施例及至少一種寬能隙材料，寬能隙材料係理解為意指就US 7,294,849之揭示的意義而言的材料。此等系統在電致發光裝置中展現特別有利的性能數據。

較佳地，該額外的化合物可具有2.5eV或更大、較佳為3.0eV或更大、非常佳為3.5eV或更大之能隙。計算該能隙的一個方式係經由最高佔用分子軌域(HOMO)和最低未佔用分子軌域(LUMO)之能階。

該等材料之分子軌域，尤其亦最高佔用分子軌域(HOMO)和最低未佔用分子軌域(LUMO)、彼等之能階及最低三重態 T_1 的能量和最低激發單重態 S_1 的能量係經由量子化學計算測定。為了計算沒有金屬之有機物質，首先以"基態/半經驗/預設自旋/AM1/電荷0/自旋單重態"方法進行幾何形狀之最佳化。接著，根據最佳化的幾何形狀進行能量計算。此使用"TD-SFC/DFT/預設自旋/B3PW91"方法與"6-31G(d)"基組(電荷0，自旋單重態)進行。關於含金屬化合物，經由"基態/Hartree-Fock/預設自旋/LanL2MB/電荷0/自旋單重態"方法將幾何形狀最佳化。類似於上述用於有機物質之方法進行能量計算，不同之處在於"LanL2DZ"基組係用於金屬原子及"6-31G(d)"基組係用於配位基。從能

量計算獲得以哈崔(Hartree)單位表示之HOMO能階HEh或LUMO能階LEh。此用於測定由循環伏安法量測校準之以電子伏特表示的HOMO及LUMO能階，如下：

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

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

這些數值係視為在本申請案的情況下之材料的HOMO及LUMO能階。

最低三重態T₁係定義為具有最低能量之三重態的能量，其從所述之量子化學計算是顯而易見的。

最低激發單重態S₁係定義為具有最低能量之激發單重態的能量，其從所述之量子化學計算是顯而易見的。

本文所述之方法與所使用的套裝軟體無關且總是產生相同的結果。為此目的常用之程式的實例為"Gaussian09W"(Gaussian Inc.)及Q-Chem4.1(Q-Chem, Inc.)。

本發明亦關於一種組成物，其包含至少一種包含式(I)之結構的化合物或上面和下面所述之較佳具體實施例以及至少一種磷光發射體，術語"磷光發射體"也理解為意指磷光摻雜劑。

包含基質材料及摻雜劑之系統中的摻雜劑係理解為意指混合物中具有較小比例的組分。相應地，包含基質材料及摻雜劑之系統中的基質材料係理解意指在混合物中具有較大比例的組分。

用於基質系統(較佳為混合基質系統)中之較佳磷光摻

雜劑為下文所指明的較佳磷光摻雜劑。

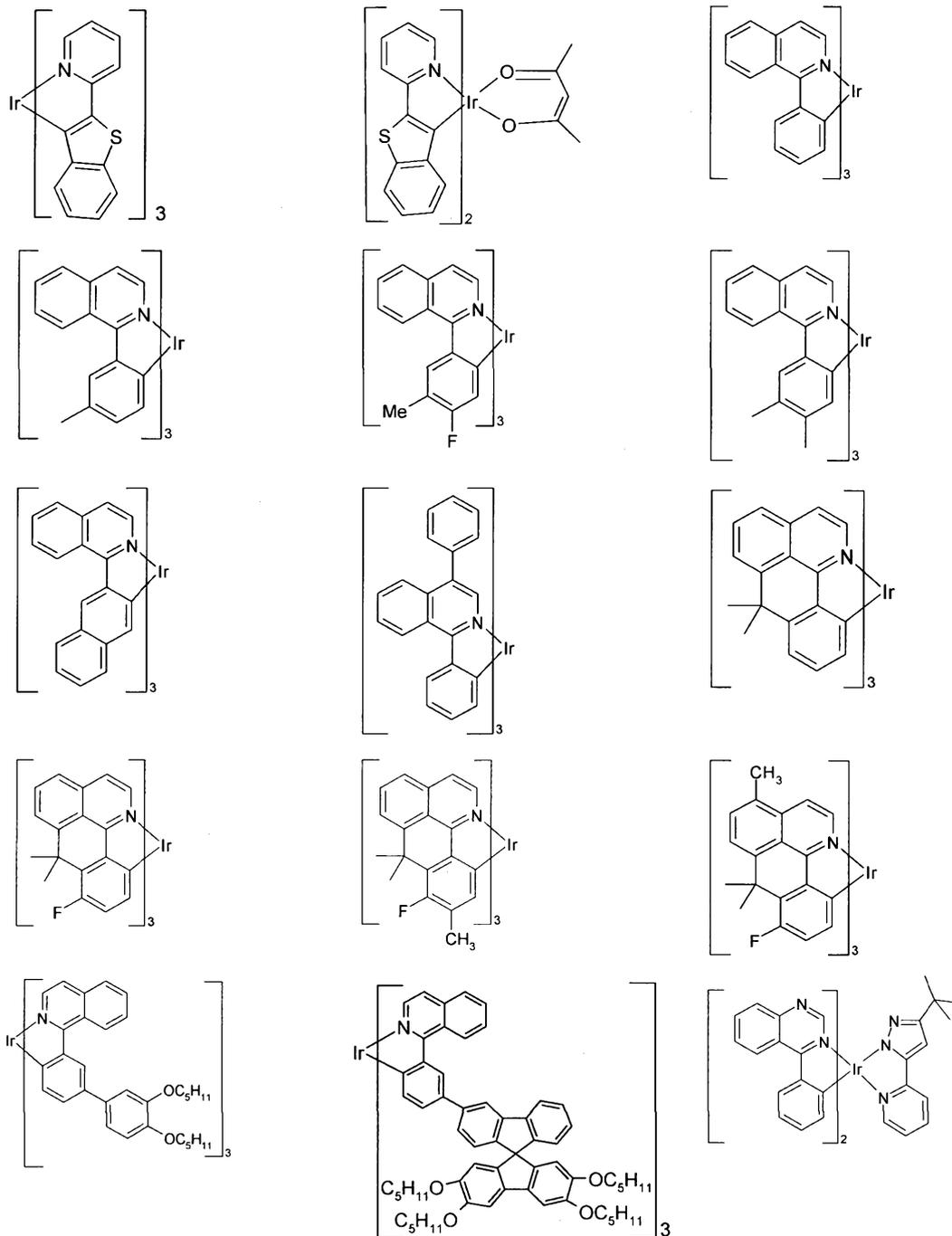
術語"磷光摻雜劑"通常涵蓋其中光的發射係透過自旋禁止躍遷 (spin-forbidden transition)(例如，由激發三重態或具有較高自旋量子數的狀態，例如，五重態的躍遷)來進行的化合物。

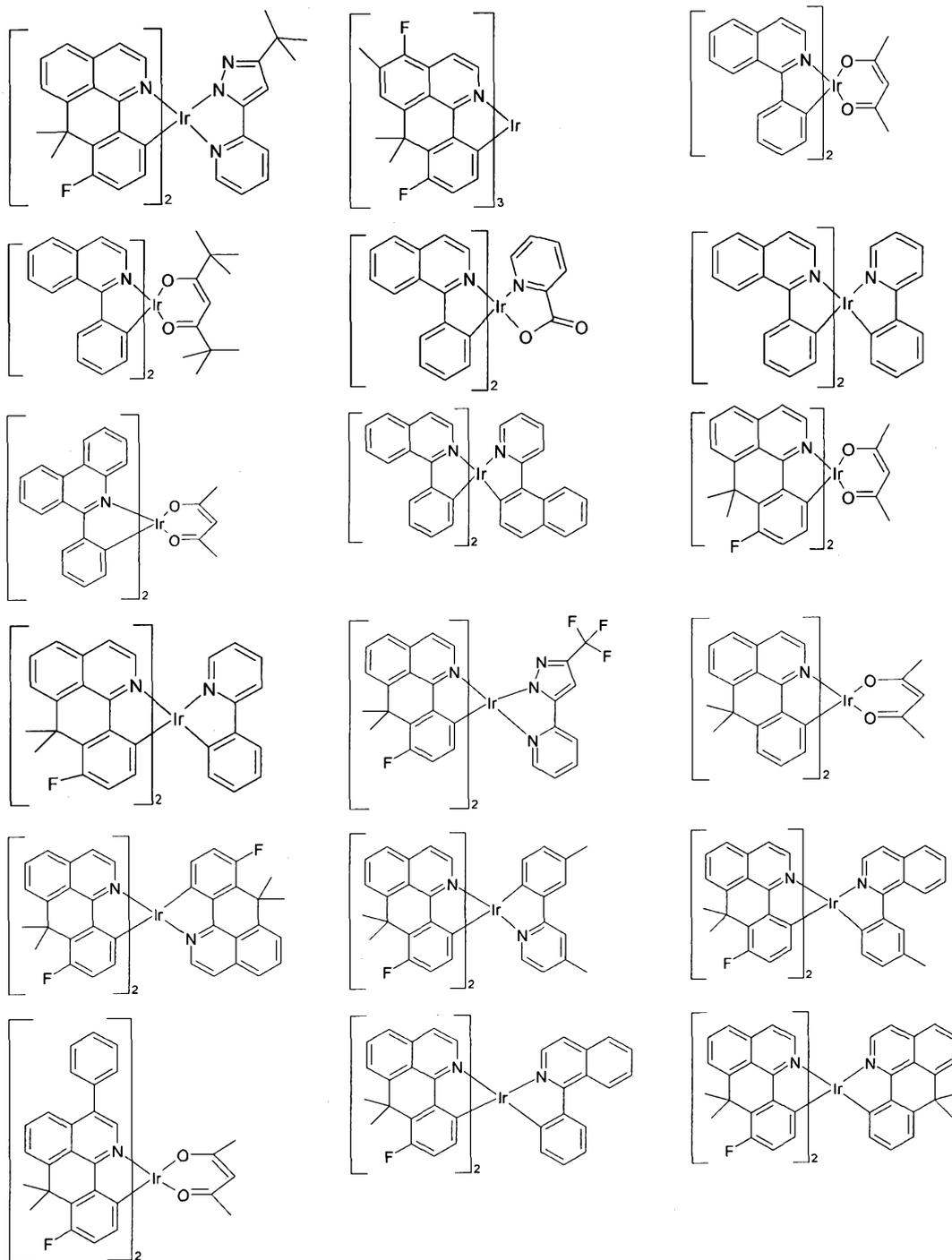
適當磷光化合物(=三重態發射體)尤其為當適當地激發時發光(較佳在可見光區)且亦含有至少一種具有原子序大於20，較佳為大於38且少於84，特佳為大於56且少於80的原子之化合物，尤其是具有此原子序的金屬。所使用之較佳磷光發射體為含有銅、鋁、鎢、銻、釷、鐵、銻、銻、鈹、鉑、銀、金或鎊的化合物，尤其是含有銻或鉑的化合物。在本發明的情況下，含有上述金屬的所有發光化合物皆視為磷光化合物。

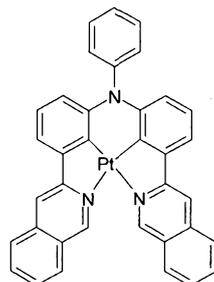
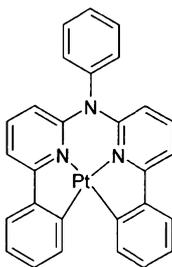
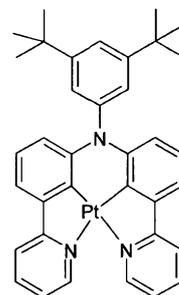
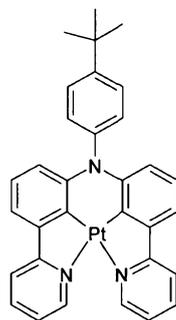
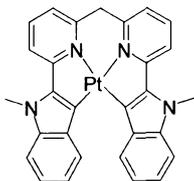
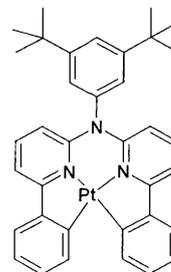
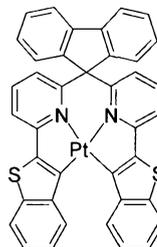
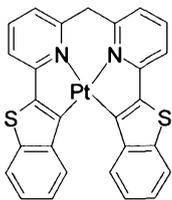
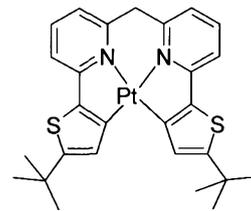
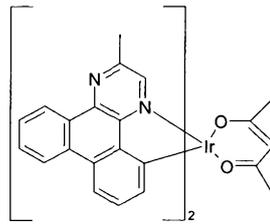
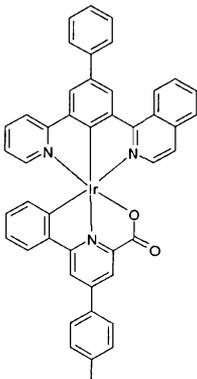
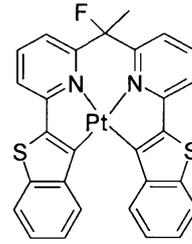
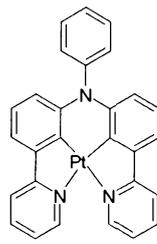
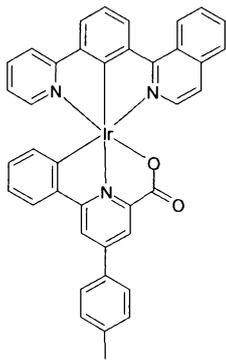
上述發射體的實例可於申請案 WO 00/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373、US 2005/0258742、WO 2009/146770、WO 2010/015307、WO 2010/031485、WO 2010/054731、WO 2010/054728、WO 2010/086089、WO 2010/099852、WO 2010/102709、WO 2011/032626、WO 2011/066898、WO 2011/157339、WO 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及尚未

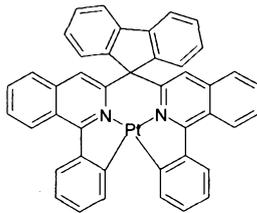
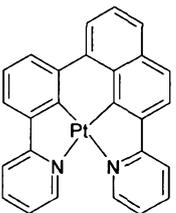
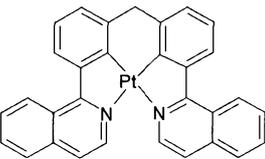
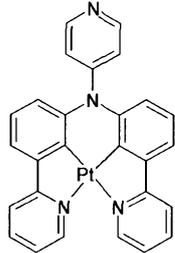
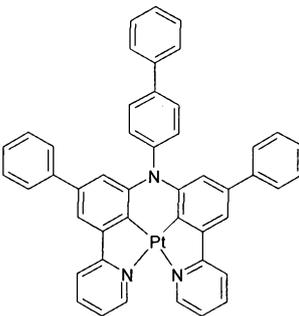
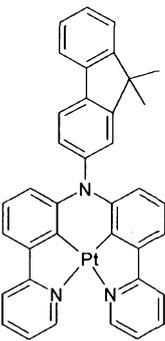
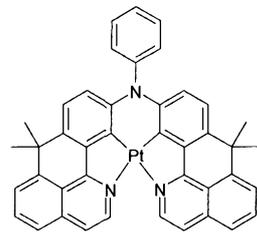
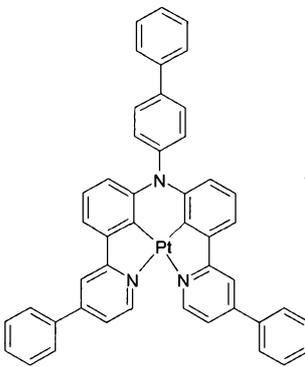
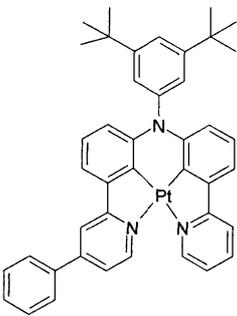
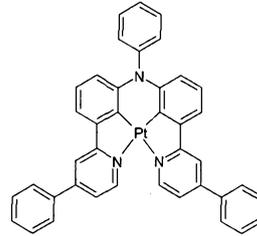
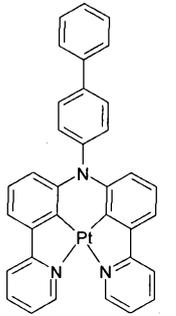
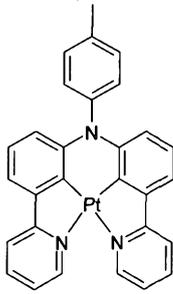
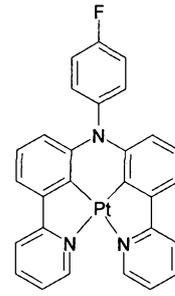
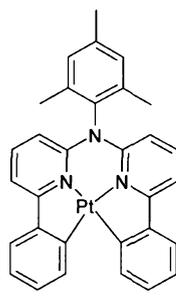
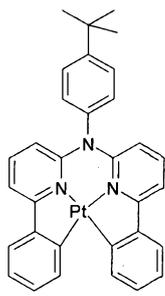
公開的申請案 EP16179378.1 和 EP16186313.9 發現。通常，如根據先前技術用於磷光 OLED 及如熟習有機電致發光裝置領域之技術者已知的所有磷光錯合物均適合，且熟習該項技術者將能夠在未執行創新技藝下使用另外磷光錯合物。

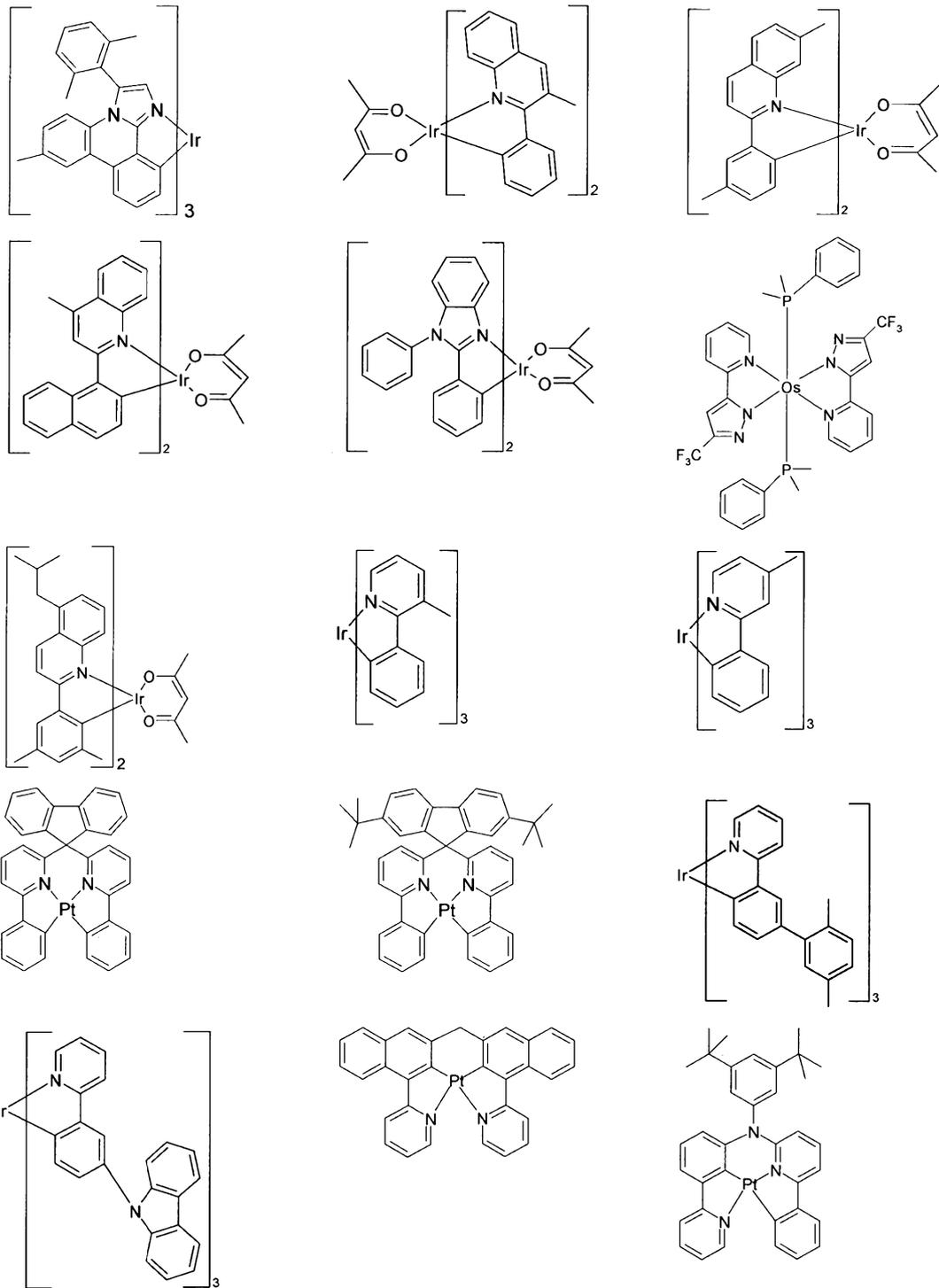
磷光摻雜劑之明確實例係列舉於下表中：

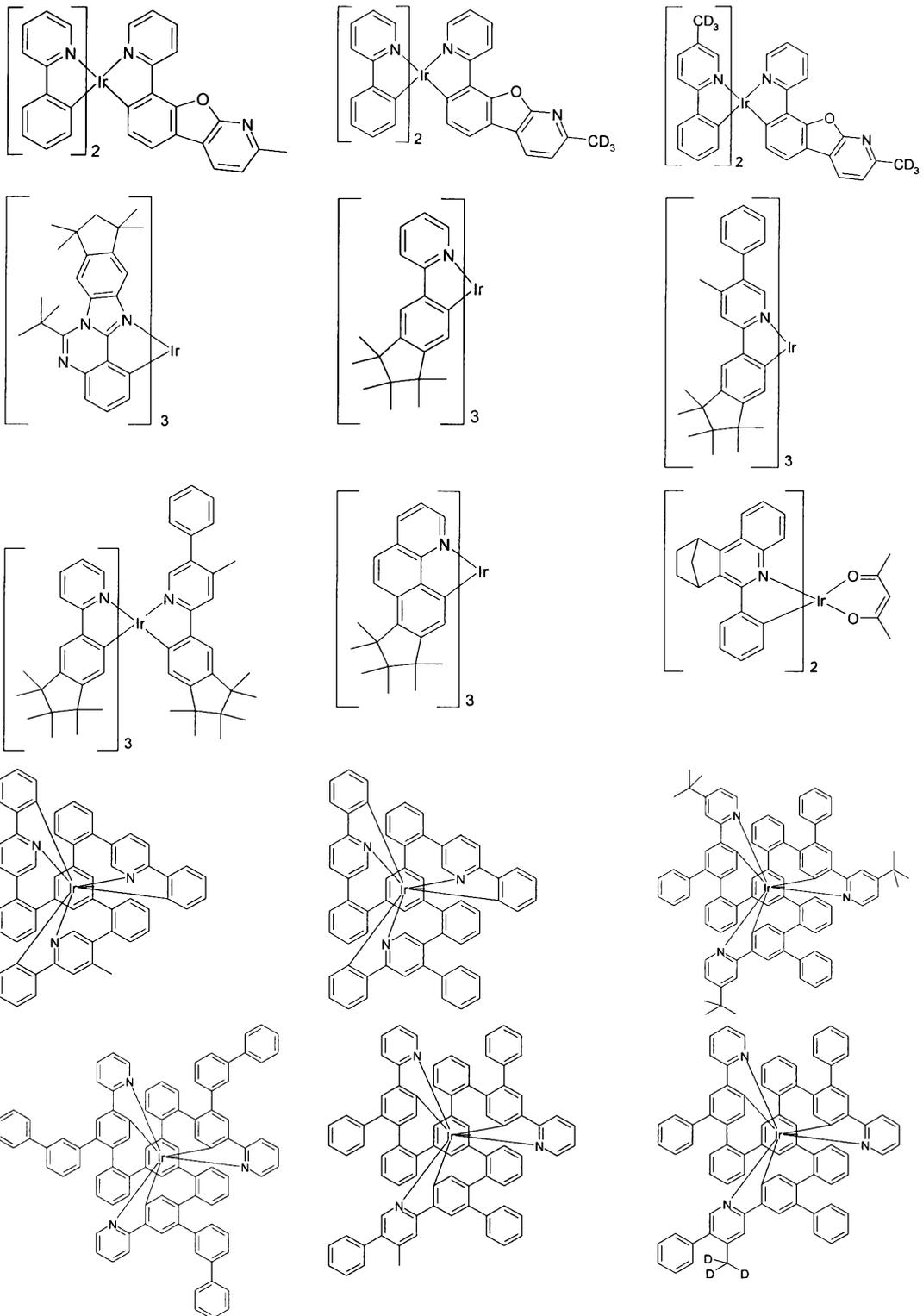












包含式(I)之結構的上述化合物或上面所詳述的較佳具體實施例較佳可用作為電子裝置中的活性組分。電子裝置係理解為意指任何包含陽極、陰極及在陽極和陰極之間的

至少一層之裝置，該層包含至少一種有機或有機金屬化合物。本發明之電子裝置因此包含陽極、陰極及至少一層居間(intervening)層，該層含有至少一種包含式(I)之結構的化合物。較佳電子裝置在此係自由下列所組成之群組：有機電致發光裝置(OLED、PLED)、有機積體電路(O-IC)、有機場效電晶體(O-FET)、有機薄膜電晶體(O-TFT)、有機發光電晶體(O-LET)、有機太陽能電池(O-SC)、有機光學偵測器、有機感光器、有機場猝滅裝置(O-FQD)、有機電感測器、發光電化學電池(LEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機電漿子發光裝置，(D. M. Koller et al.、Nature Photonics 2008、1-4)較佳為有機電致發光裝置(OLED、PLED)，尤其是磷光OLED，其在至少一層中含有至少一種包含式(I)之結構的化合物。特別偏好的是有機電致發光裝置。活性組分通常為引入陽極與陰極之間的有機或無機材料，例如電荷注入、電荷傳輸或電荷阻擋材料，但尤其是發光材料及基質材料。

本發明之一較佳具體實施例為有機電致發光裝置。該有機電致發光裝置包含陰極、陽極及至少一層發光層。除了這些層以外，其可包含另外的層，例如在各情況下一或多層電洞注入層、電洞傳輸層、電洞阻擋層、電子傳輸層、電子注入層、激子阻擋層、電子阻擋層、電荷產生層及/或有機或無機p/n界面。同時，一或多層電洞傳輸層可能經p-摻雜，例如以金屬氧化物諸如MoO₃或WO₃或以(全)氟化缺電子芳族系統摻雜，及/或一或多層電子傳輸層可

能經 n -摻雜。同樣可能在二層發光層之間引入中間層，此等具有，例如激發-阻擋功能及/或在電致發光裝置中控制電荷平衡。然而，應指出的是，不一定需要這些層的每一層都存在。

在此情況下，該有機電致發光裝置可能包含一發光層，或包含多層發光層。若有多層發光層存在時，則此等較佳總體具有數個介於 380nm 與 750nm 之間的發光最大值，使得總體結果為白色發光；換言之，可發螢光或發磷光之各種發光化合物係使用於發光層中。三層系統為尤佳，其中該三層展現藍色、綠色及橙色或紅色發光(針對基本構造請見例如 WO 2005/011013)，或具有多於三層發光層的系統。亦又偏好的是串聯 OLED。該系統亦可為混合系統，其中一或多層發螢光而一或多層另外層發磷光。

在本發明之一較佳具體實施例中，有機電致發光裝置在一或多個發光層中，含有包含式 (I) 之結構的本發明之化合物或上面所詳述的較佳具體實施例作為基質材料，較佳地作為電子傳導基質材料，較佳地與又一基質材料(較佳為電洞傳導基質材料)組合。在本發明之又一較佳具體實施例中，該又一基質材料為電子傳輸化合物。在又另一較佳具體實施例中，又一基質材料為具有大能隙之化合物，其在層中不參與電洞和電子傳輸至顯著的程度，如果有的話。發光層包含至少一種發光化合物。

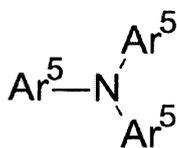
可與式 (I) 化合物或根據較佳具體實施例組合使用之適當基質材料為芳族酮類、芳族氧化磷類、芳族亞砷類與砷

類 (例如根據 WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627 或 WO 2010/006680)、三芳基胺類 (尤其是單胺類, 例如根據 WO 2014/015935)、咪唑衍生物 (例如 CBP(N,N- 雙咪唑基聯苯) 或 WO2005/039246、US2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527 或 WO 2008/086851 中所揭示的咪唑衍生物)、吡啶并咪唑衍生物 (例如根據 WO 2007/063754 或 WO 2008/056746)、茚并咪唑衍生物 (例如根據 WO 2010/136109 和 WO 2011/000455)、氮雜咪唑衍生物 (例如根據 EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160)、雙極性基質材料 (例如根據 WO 2007/137725)、矽烷類 (例如根據 WO 2005/111172)、氮雜硼雜唑 (azaborole) 類或硼酸酯類 (例如根據 WO 2006/117052)、三嗪衍生物 (例如根據 WO 2010/015306、WO 2007/063754 或 WO 2008/056746)、鋅錯合物 (例如根據 EP 652273 或 WO 2009/062578)、二氮雜矽雜唑 (diazasilole) 或四氮雜矽雜唑衍生物 (例如根據 WO 2010/054729)、二氮磷雜唑 (diazaphosphole) 衍生物 (例如根據 WO 2010/054730)、橋接咪唑衍生物 (例如根據 US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877 或 WO 2012/143080)、聯伸三苯衍生物 (例如根據 WO 2012/048781)、內醯胺類 (例如根據 WO 2011/116865、WO 2011/137951 或 WO 2013/064206)、4-螺咪唑衍生物 (例如根據 WO 2014/094963 或 WO 2015/192939)、或二苯并咪喃衍生物 (例如根據 WO

2015/169412、WO 2016/015810、WO 2016/023608、WO 2017/148564或WO 2017/148565。又一發射比與實際發射體短的波長之磷光發射體同樣可能以共主體(co-host)存在於混合物中。

較佳的共主體材料為三芳基胺衍生物，尤其是單胺類、茛苳并咪唑衍生物、4-螺咪唑衍生物、內醯胺類及咪唑衍生物。

與本發明之化合物一起用作為共主體材料之較佳三芳基胺衍生物係選自下式(TA-1)之化合物：



式 (TA-1)

其中 Ar^5 在各情況下係相同或不同且為具有6至40個碳原子且在各種情況下可經一或多個 R^2 基團取代之芳族或雜芳族環系統，其中二或更多個相鄰的 R^2 取代基可隨意地形成單環或多環的脂族環系統，其可經一或多個 R^3 基團取代，其中符號 R^2 係如上面所定義，尤其是針對式(I)所定義者。較佳地， Ar^5 在各情況下係相同或不同且為具有5至24個且較佳5至12個芳族環原子之芳基或雜芳基，且其在各情況下可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代。

適當 Ar^5 基團之實例係選自由下列所組成的群組：苯基、鄰-聯苯基、間-聯苯基、對-聯苯基、聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)、聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)、1-萸

基、2-萸基、3-萸基、4-萸基、1-螺聯萸基、2-螺聯萸基、3-螺聯萸基、4-螺聯萸基、吡啶基、嘧啶基、1-二苯并呋喃基、2-二苯并呋喃基、3-二苯并呋喃基、4-二苯并呋喃基、1-二苯并噻吩基、2-二苯并噻吩基、3-二苯并噻吩基、4-二苯并噻吩基、1-咪唑基、2-咪唑基、3-咪唑基及4-咪唑基，彼等各自可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳為未經取代。

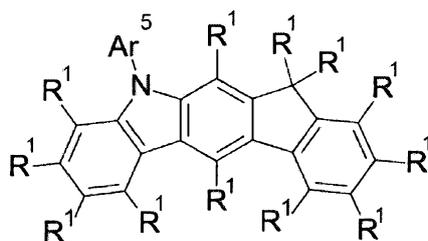
較佳， Ar^5 基在各情況下係相同或不同且係選自上述 R^1-1 至 R^1-92 基團，更佳為 R^1-1 至 R^1-54 。

在式(TA-1)之化合物的一較佳具體實施例中，至少一個 Ar^5 基團係選自聯苯基，其可為鄰-、間-或對-聯苯基。在式(TA-1)之化合物的又一較佳具體實施例中，至少一個 Ar^5 基團係選自萸基團或螺聯萸基團，其中此等基團可各自在1、2、3或4位置鍵結至氮原子。在式(TA-1)之化合物的又另一較佳具體實施例中，至少一個 Ar^5 基團係選自伸苯基或聯苯基團，其中該基團為鄰-、間-或對-鍵結的基團，且經二苯并呋喃基團、二苯并噻吩基團或咪唑基團(尤其是二苯并呋喃基團)取代，其中該二苯并呋喃基團或二苯并噻吩基團經由1、2、3或4位置鍵結至該伸苯基或聯苯基，且其中該咪唑基經由1、2、3或4位置或經由氮原子鍵結至該伸苯基或聯苯基。

在式(TA-1)之化合物的一特佳具體實施例中，一個 Ar^5 基團係選自萸或螺聯萸基團(尤其是4-萸或4-螺聯萸基團)，及一個 Ar^5 基團係選自聯苯基團(尤其是對-聯苯基團)

或萸基團(尤其是2-萸基團)及第三個 Ar^5 基團係選自對-伸苯基或對-聯苯基團，其經二苯并呋喃基團(尤其是4-二苯并呋喃基團)或咔唑基團(尤其是N-咔唑基團或3-咔唑基團)取代。

與本發明之化合物一起用作為共主體材料之較佳茛并咔唑衍生物係選自下式(TA-2)之化合物：

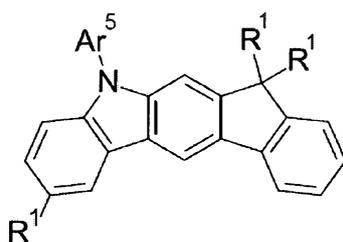


式 (TA-2)

其中 Ar^5 和 R^1 具有上列之定義，尤其是針對式(I)及/或(TA-1)所列之定義。

Ar^5 基團之較佳具體實施例為上列結構 R^1 -1 至 R^1 -92，更佳為 R^1 -1 至 R^1 -54。

式(TA-2)之化合物的一較佳具體實施例為下式(TA-2a)之化合物：



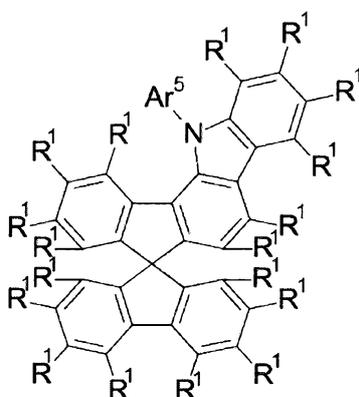
式 (TA-2a)

其中 Ar^5 和 R^1 具有上列之定義，尤其是針對式(I)及/或(TA-1)所列之定義。

在此鍵結至茛苳并基(indeno)碳原子的二個 R^1 基較佳為相同或不同且為具有1至4個碳原子之烷基(尤其是甲基)或具有6至12個碳原子的芳族環系統(尤其是苯基)。更佳地，鍵結至茛苳并基碳原子之二個 R^1 基團為甲基。

又較佳地，鍵結至式(TA-2a)中之茛苳并咪唑基本骨架的 R^1 取代基為H或可經由1、2、3或4位置或經由氮原子(尤其是經由3位置)鍵結至該茛苳并咪唑基本骨架的咪唑基。

與本發明之化合物一起用作為共主體材料之較佳4-螺咪唑衍生物係選自下式(TA-3)之化合物：

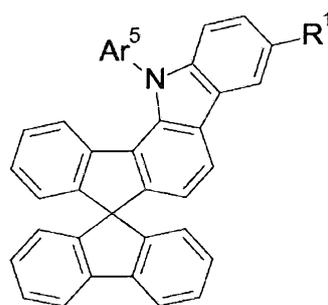


式 (TA-3)

其中 Ar^5 和 R^1 具有上列之定義，尤其是針對式(I)及/或(TA-1)所列之定義。

Ar^5 基團的較佳具體實施例為上列結構 R^1 -1至 R^1 -92，更佳為 R^1 -1至 R^1 -54。

式(TA-3)之化合物的一較佳具體實施例為下式(TA-3a)之化合物：

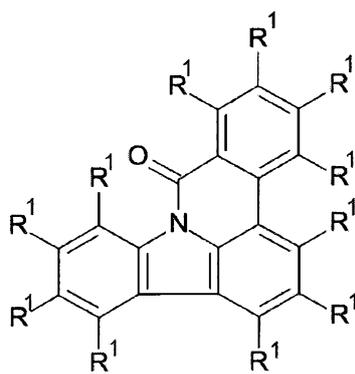


式 (TA-3a)

其中 Ar^5 和 R^1 具有上列之定義，尤其是針對式 (I) 及 / 或 (TA-1) 所列之定義。

Ar^5 基團的較佳具體實施例為上列結構 R^1 -1 至 R^1 -92，更佳為 R^1 -1 至 R^1 -54。

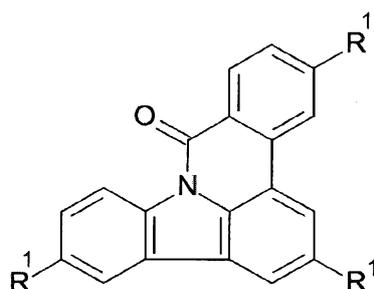
與本發明之化合物一起用作為共主體材料之較佳內醯胺係選自下式 (LAC-1) 之化合物：



式 (LAC-1)

其中 R^1 具有上列之定義，尤其是針對式 (I) 所列之定義。

式 (LAC-1) 之化合物的一較佳具體實施例為下式 (LAC-1a) 之化合物：



式 (LAC-1a)

其中 R^1 具有上述所給出之定義，尤其是針對式 (I) 所給出之定義。本文中 R^1 較佳地在各情況下為相同或不同且為 H 或具有 5 至 40 個芳族環原子且可經一或多個 R^2 基團取代之芳族或雜芳族環系統，其中 R^2 可具有上述所給出之定義，尤其是針對式 (I) 所給出之定義。最佳地， R^1 取代基係選自下列所組成群組：H 和芳族或雜芳族環系統，其具有 6 至 18 個芳族環原子，較佳地 6 至 13 個芳族環原子，及其在各情況下可經一或多個非芳族 R^2 基團取代，但較佳未經取代。適當 R^1 取代基的實例係選自下列所組成群組：苯基、鄰-、間-或對-聯苯基、聯三苯基(尤其是支鏈聯三苯基)、聯四苯基(尤其是支鏈聯四苯基)、1-、2-、3-或4-萘基、1-、2-、3-或4-螺聯萘基、吡啶基、嘧啶基、1-、2-、3-或4-二苯并呋喃基、1-、2-、3-或4-二苯并噻吩基和1-、2-、3-或4-咪唑基，彼等各自可經一或多個 R^2 基團取代，但較佳未經取代。本文中適當 R^1 結構為與上述 R-1 至 R-79，更佳為 R^1-1 至 R^1-51 相同的結構。

較佳亦可為使用複數種不同的基質材料作為混合物，尤其是至少一種電子傳導基質材料及至少一種電洞傳導基

質材料。同樣偏好的是使用電荷傳輸基質材料與即便有亦不顯著地參與電荷傳輸的電惰性基質材料之混合物，如例如 WO 2010/108579 中所述。

又較佳的是使用二或更多種三重態發射體與基質之混合物。在此情況下，具有較短波發射光譜之三重態發射體充當具有較長波發射光譜之三重態發射體的共基質。

更佳地，在較佳的具體實施例中可能使用包含式(I)之結構的本發明化合物作為有機電子裝置的發光層中(尤其在有機電致發光裝置中，例如在 OLED 或 OLEC 中)之基質材料。在此情況下，含有包含式(I)之結構的化合物或上面和下面所述之較佳具體實施例的基質材料係與一或多種摻雜劑(較佳為磷光摻雜劑)組合存在於電子裝置中。

發光層中之基質材料的比例在此情況下就螢光發光層而言係介於 50.0 體積 % 和 99.9 體積 % 之間，較佳係介於 80.0 體積 % 和 99.5 體積 % 之間，及更佳係介於 92.0 體積 % 和 99.5 體積 % 之間，及就磷光發光層而言介於 85.0 體積 % 和 97.0 體積 % 之間。

相應地，摻雜劑的比例就螢光發光層而言係介於 0.1 體積 % 和 50.0 體積 % 之間，較佳係介於 0.5 體積 % 和 20.0 體積 % 之間，及更佳係介於 0.5 體積 % 和 8.0 體積 % 之間，及就磷光發光層而言係介於 3.0 體積 % 和 15.0 體積 % 之間。

有機電致發光裝置之發光層亦可包括包含複數個基質材料(混合基質系統)及/或複數個摻雜劑之系統。亦在此情況下，摻雜劑通常為彼等在系統中具有較少比例的材料，

及基質材料彼等在系統中具有較大比例的材料。然而，在個別情況下，在系統中單一基質材料的比例可小於單一摻雜劑的比例。

在本發明之又一較佳具體實施例中，包含式(I)之結構的化合物或上面和下面所述之較佳具體實施例係用作為混合基質系統之組分。混合基質系統較佳包含二或三種不同基質材料，更佳為二種不同基質材料。較佳地，在此情況下，二種材料中之一者為具有電洞傳輸性質之材料且其他材料為具有電子傳輸性質之材料。然而，混合基質組分之所欲電子傳輸性質和電洞傳輸性質也可主要或完全組合於單一混合基質組分中，在該情況下另外的混合基質組分則滿足其他功能。二種不同基質材料可以1：50至1：1，較佳為1：20至1：1，更佳為1：10至1：1，及最佳為1：4至1：1的比率存在。較佳者為混合基質系統使用於磷光有機電致發光裝置中。關於混合基質系統之更詳細資料的一來源為申請案WO 2010/108579。

本發明又提供一種電子裝置，較佳地一種有機電致發光裝置，其在一或多層電子傳導層中包含一或多種本發明之化合物及/或至少一種本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，作為電子傳導化合物。

較佳的陰極為具有低功函數之金屬、金屬合金或由各種金屬(諸如鹼土金屬、鹼金屬、主族金屬或鑰系元素(例如Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm、等等))所組成之多層結構。額外適合的是由鹼金屬或鹼土金屬與銀所組成

之合金，例如由鎂與銀所組成之合金。在多層結構之情況中，除了所述金屬之外，亦可能使用又一具有比較高的功函數之金屬，例如 Ag，在該情況中，例如通常使用金屬的組合，諸如 Mg/Ag、Ca/Ag 或 Ba/Ag。較佳亦可在金屬陰極和有機半導體之間引入具有高介電常數之材料的薄中間層。有用於此目的之材料的實例為鹼金屬或鹼土金屬氟化物，但亦為相應之氧化物或碳酸鹽（例如 LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃、等等）。同樣可用於此目的之材料為有機鹼金屬錯合物，例如 Liq(喹啉合鋰 (lithium quinolate))。此層之層厚度較佳係介於 0.5 和 5 nm 之間。

較佳陽極為具有高功函數之材料。較佳地，陽極具有相對於真空大於 4.5 eV 之功函數。首先，具有高氧化還原電位之金屬適合於此目的，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）也為較佳的。就某些應用而言，電極中至少一者必須是透明或部分透明的，以能夠照射有機材料 (O-SC) 或能夠發射光 (OLED/PLED、O-雷射)。較佳陽極材料在此為導電性混合型金屬氧化物。特別偏好的是氧化銦錫 (ITO) 或氧化銦鋅 (IZO)。又偏好的是導電性摻雜有機材料，尤其是導電性摻雜聚合物，例如 PEDOT、PANI 或此等聚合物之衍生物。又較佳的是當 p-摻雜之電洞傳輸材料施加於陽極作為電洞注入層時，在該情況下，適當的 p-摻雜劑為金屬氧化物（例如，MoO₃ 或 WO₃）或（全）氟化的缺電子性芳族系統。

另外適當的p-摻雜劑為HAT-CN(六氰基六氮雜聯伸三苯)或來自Novaled之化合物NPD9。該類層簡化具有低HOMO(亦即，就量級而言的大HOMO)之材料的電洞注入。

在另外的層中，一般可能使用根據先前技術用於該等層的所有材料，且熟習該項技術者能夠在未執行創新技藝下將任何此等材料與根據本發明之材料組合於電子裝置中。

該裝置係相應地(根據應用)結構化、接觸連接且最後密封，因為該等裝置的壽命在水及/或空氣存在下嚴重地縮短。

額外較佳的是一種電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)，其特徵在於以昇華方法塗佈一或多層。在此情況下，該等材料係於真空昇華系統中在通常低於 10^{-5} 毫巴，較佳低於 10^{-6} 毫巴之初壓力下藉由蒸氣沉積施加。初壓力也可能甚至更低或甚至更高，例如低於 10^{-7} 毫巴。

同樣偏好的是一種電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)，其特徵在於以OVPD(有機蒸氣相沉積)法或輔以載體氣體昇華法塗佈一或多層。在此情況下，該等材料係在介於 10^{-5} 毫巴與1巴之間的壓力下施加。此方法的一特殊例子為OVJP(有機蒸氣噴墨印刷)方法，其中該等材料係經由噴嘴直接施加且因此結構化(例如M. S. Arnold等人，Appl. Phys. Lett. 2008、92、053301)。

額外偏好的是一種電子裝置(尤其是有機電致發光裝

置)，其特徵在於例如以旋轉塗佈或以任何印刷方法(例如網版印刷、彈性凸板印刷、膠印或噴嘴印刷，但更佳為LITI(光誘導熱成像、熱轉移印刷)或噴墨印刷而從溶液製造一或多層。為此目的，需要可溶性化合物，其可，例如藉由適當取代而獲得。

電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)亦可藉由從溶液施加一或多層及藉由蒸氣沉積施加一或多層其他層而製成混合系統。例如，可能從溶液施加含有式(I)之結構的本發明化合物及基質材料之發光層，及在減壓下藉由真空蒸氣沉積於其上施加電洞阻擋層及/或電子傳輸層。

此等方法一般來說為熟習該項技術者已知且可沒有困難地應用至含有包含式(I)之結構的本發明化合物或上面所詳述的較佳具體實施例的電子裝置(尤其為有機電致發光裝置)。

本發明之電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)係以下列超越先前技術之驚人的優點中之一或多者而值得注意：

1. 包含具有式(I)之結構的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面中所述之較佳具體實施例(尤其是作為電子傳導材料及/或電洞傳導材料或作為主體材料)的電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)具有非常良好的壽命。
2. 包含具有式(I)之結構的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面所述之較佳具體實施例(尤其作為電子傳導材料、電洞導體材料及/

或作為主體材料)的電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)具有優異效率。更特別地，與不含式(I)之結構單元的類似化合物相較，效率要高得多。就此而論，具有式(I)之結構的本發明之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面所述之較佳具體實施例當使用於電子裝置時，導致低操作電壓。在此內文中，這些化合物尤其賦予低滾降(roll-off)，即在高亮度下裝置的功率效率小幅下降。

3. 包含具有式(I)之結構的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面所述之較佳具體實施例作為電子傳導材料、電洞傳導材料及/或作為主體材料的電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)具有優異色純度。
4. 具有式(I)之結構的本發明之化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面所述之較佳具體實施例展現非常高的熱及光化學安定性且導致具有非常長的壽命之化合物。
5. 使用具有式(I)之結構的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面所述之較佳具體實施例，可能避免電子裝置(尤其是有機電致發光裝置)中光損耗通道(optical loss channel)的形成。結果，此等裝置特徵為發射體的高PL效率及因而所生成之高EL效率，以及基質至摻雜劑之優

異能量傳遞。

6. 具有式(I)之結構的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面所述之較佳具體實施例具有優異玻璃膜形成(glass film formation)。
7. 具有式(I)之結構的化合物、寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物或上面和下面所述之較佳具體實施例從溶液形成非常良好的膜。

此等上述優點不伴隨另外電子性質的劣化。

本發明之化合物及混合物適合用於電子裝置。電子裝置係理解為意指含有至少一層含有至少一種有機化合物之層的裝置。此元件亦可包含無機材料或完全由無機材料所形成的層。

本發明因此又提供本發明之化合物或混合物用於電子裝置(尤其是用於有機電致發光裝置)中的用途。

本發明又另提供本發明之化合物及/或本發明之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物用於電子裝置中作為主體材料、電洞導體材料、電子注入材料及/或電子傳輸材料，較佳作為主體材料及/或電子傳輸材料的用途。

本發明又另提供一種電子裝置，其包含上面所詳述的本發明之化合物或混合物中至少一者。在此情況下，上面對於化合物所詳述的偏好亦適用於電子裝置。更佳地，該電子裝置係選自下列所組成群組：有機電致發光裝置(OLED、PLED)、有機積體電路(O-IC)、有機場效電晶體(O-FET)、有機薄膜電晶體(O-TFT)、有機發光電晶體(O-

LET)、有機太陽能電池(O-SC)、有機光學偵測器、有機感光器、有機場猝滅裝置(O-FQD)、有機電感測器、發光電化學電池(LEC)、有機雷射二極體(O-雷射)及有機電漿子發光裝置，較佳為有機電致發光裝置(OLED、PLED)，尤其是磷光OLED。

在本發明又一具體實施例中，本發明之有機電致發光裝置不含任何分開的電洞注入層及/或電洞傳輸層及/或電洞阻擋層及/或電子傳輸層，意指發光層直接結合電洞注入層或陽極，及/或發光層直接結合電子傳輸層或電子注入層或陰極，如，例如WO 2005/053051中所述。額外可能使用與發光層中之金屬錯合物相同或類似的金屬錯合物作為直接與該發光層結合的電洞傳輸或電洞注入材料，如，例如WO 2009/030981中所述。

在本發明之有機電致發光裝置的又一層中，可能使用根據先前技術通常所使用的任何材料。熟習該項技術者因此能夠在未實行創新技藝的情況下，將有機電致發光裝置之已知的任何材料與本發明之式(I)化合物或較佳具體實施例組合使用。

本發明之化合物當使用於有機電致發光裝置時通常具有非常良好的性質。尤其在本發明化合物使用於有機電致發光裝置的情況下，相較於根據先前技術的類似化合物，壽命明顯較佳。同時，有機電致發光裝置的又一性質(尤其是效率及電壓)同樣為較佳或至少可相比擬的。

應指出的是，本發明中所述之具體實施例的變型涵蓋

在本發明的範圍內。本發明中所揭示之任何特徵皆可由用作相同目的、等效或類似目的之替代特徵替換，除非此被明確排除。因此，除非另有說明，本發明中所揭示之任何特徵皆應視為通用系列之一例或視為等效或類似的特徵。

本發明之所有特徵可以任何方式彼此組合，除非有特定特徵及/或步驟係相互排斥的。此對本發明之較佳特徵更是如此。同樣地，非必要組合的特徵可分別(且不組合)使用。

亦應指出的是，本發明之許多特徵且尤其是較佳具體實施例的特徵本身視為創新的且不僅僅視為一些本發明之具體實施例。就此等特徵而言，除了任何目前主張的發明或作為任何目前主張的發明之替代外，可尋求獨立的保護。

以本發明揭示之技術教示可被分出及與其他實例組合。

本發明藉由下列實施例詳細說明，沒有因而限制本發明的任何意圖。熟習該項技術者將能夠在不實行創新技藝的條件下，使用所給予的細節，以製造本發明之其他電子裝置且因而執行在所主張之整個範疇內的發明。

【實施方式】

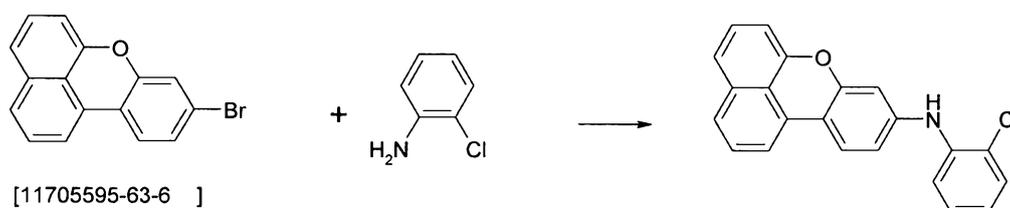
實施例

除非另外說明，否則在保護性氣體氛圍下於乾燥溶劑中進行下列合成。反應物可從ALDRICH獲得。從文獻得

知的反應物之編號(其中一些用方括號表示)係相應於CAS編號。

合成例

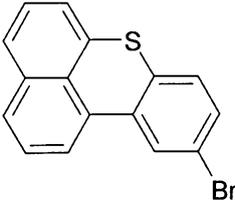
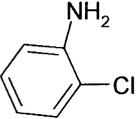
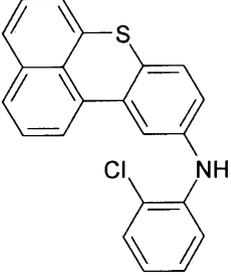
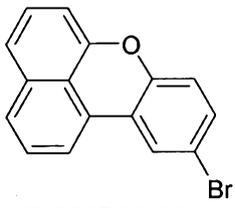
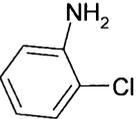
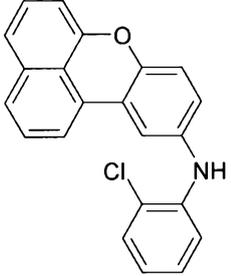
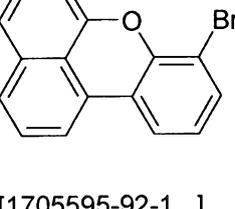
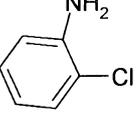
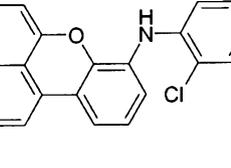
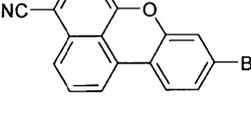
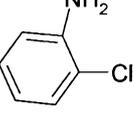
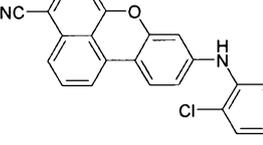
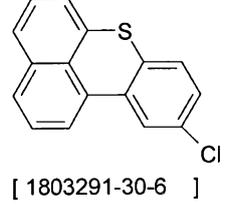
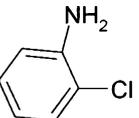
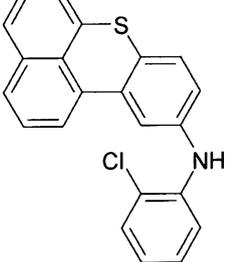
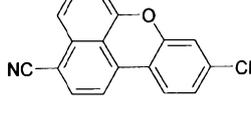
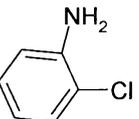
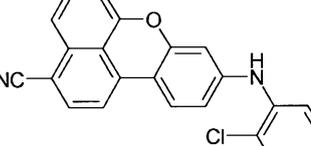
a) 苯并[k1]吡啶-9-基-(2-氯苯基)胺

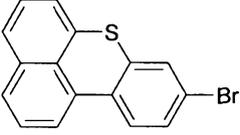
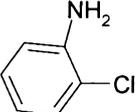
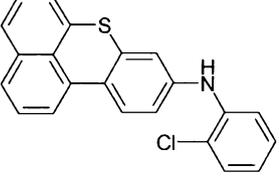
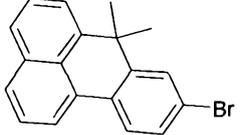
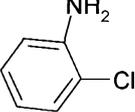
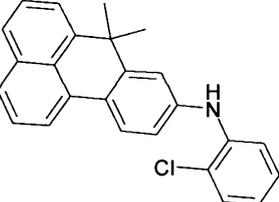
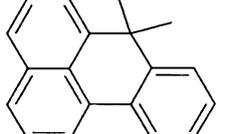
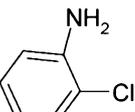
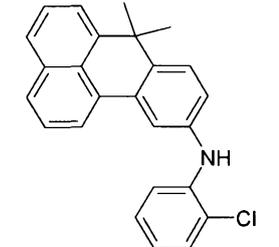
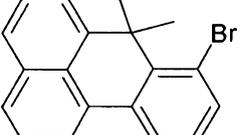
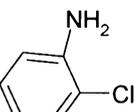
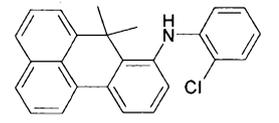
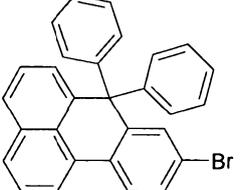
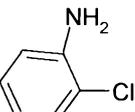
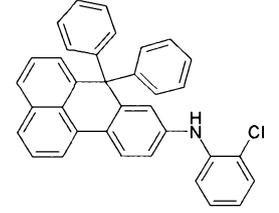
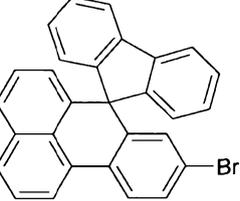
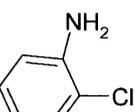
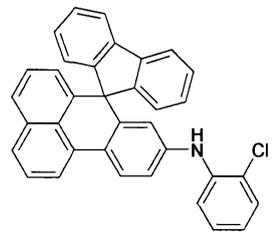


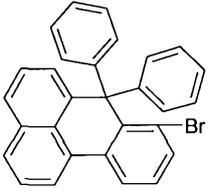
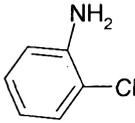
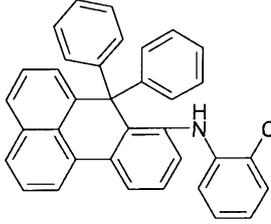
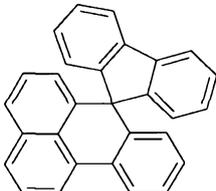
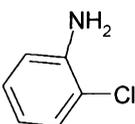
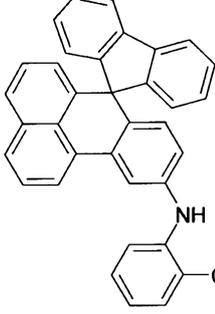
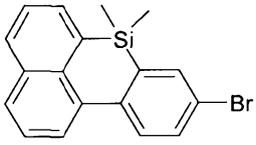
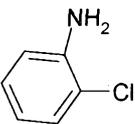
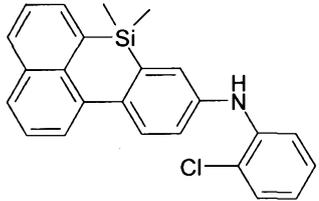
將 40g(137mmol) 的 9- 溴 苯 并 [k1] 吡 啶 、 17.9g(140mmol) 的 2- 氯 苯 胺 、 68.2g(710mmol) 的 第三 丁 醇 鈉 、 613mg(3mmol) 的 乙 酸 鈣 (II) 及 3.03g(5mmol) 的 dppf 溶 解 在 1.3l 的 甲 苯 中 並 在 回 流 下 攪 拌 5h 。 將 反 應 混 合 物 冷 卻 至 室 溫 ， 以 甲 苯 放 大 體 積 並 過 濾 通 過 矽 藻 土 (Celite) 。 濾 液 於 減 壓 下 濃 縮 且 殘 質 以 甲 苯 / 庚 烷 結 晶 。 單 離 出 呈 無 色 固 體 之 產 物 。 產 率 : 39g(109mmol) ; 83% 的 理 論 值 。

下列化合物可用類似的方式製備：

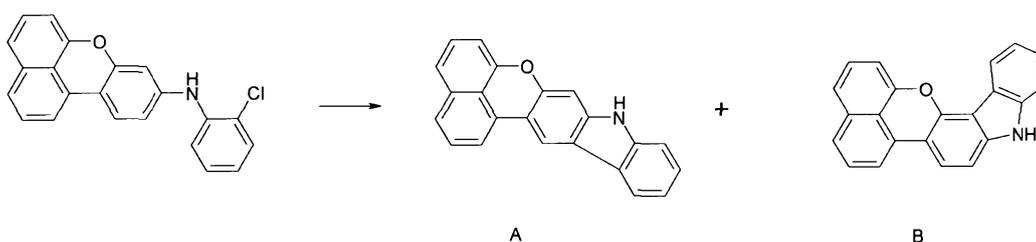
	反應物 1	反應物 2	產物	產率
1a	 [1705595-60-3]	 7285-66-7		81%
2a	 [1705595-57-8]			75%

3a	 [11705595-56-7]			76%
4a	 [1705595-93-2]			72%
5a	 [1705595-92-1]			79%
6a	 [1809903-63-6]			71%
7a	 [1803291-30-6]			73%
8a	 [1643433-77-5]			77%

9a	 [1705595-60-3]			70%
10a	 [1198396-54-1]			70%
11a	 [1705595-69-2]			71%
12a	 [1705595-68-1]			76%
13a	 [1705595-95-4]			70%
14a	 [1705595-96-5]			69%

15a	 [1705595-94-3]			71%
16a	 [1705595-71-6]			67%
17a	 [1612224-62-0]			71%

b)環化

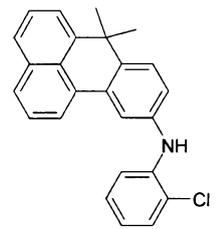
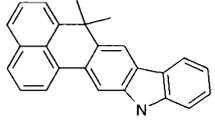
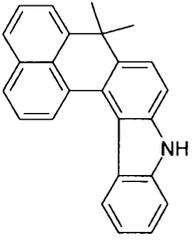
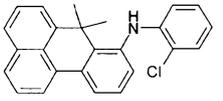
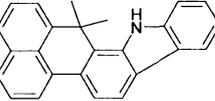
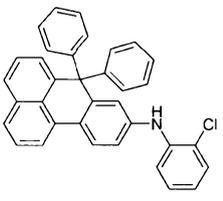
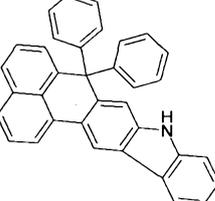
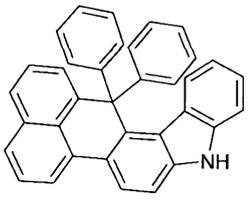
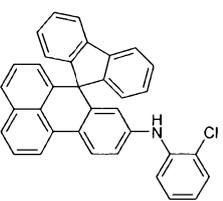
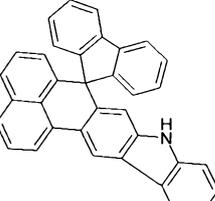
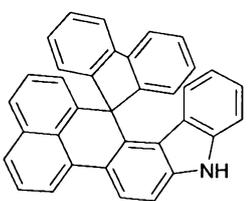
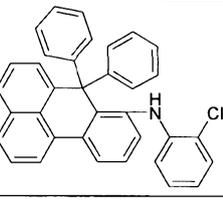
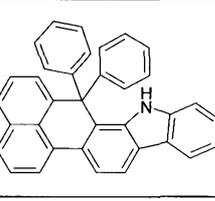
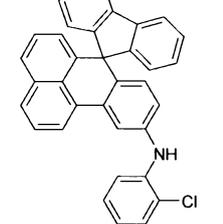
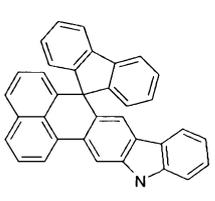
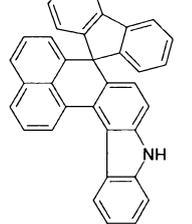
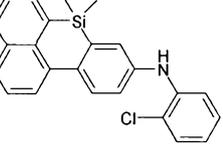
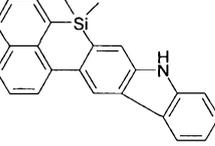
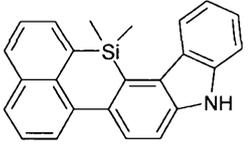


將 35g(102mmol)的苯并[k1]吡啶-9-基-(2-氯苯基)胺、56g(409mmol)的碳酸鉀、4.5g(12mmol)的三環己基磷四氟硼酸鹽及 1.38g(6mmol)的乙酸鈣(II)懸浮在 500ml 的二甲基乙醯胺中並在回流下攪拌 6h。冷卻後，將反應混合物與 300ml 的水及 400ml 的乙酸乙酯混合。再攪拌混合物 30 分鐘，分離掉有機相並過濾通過短矽藻土床，接著於減壓下移除溶劑。使粗製產物歷經以甲苯熱萃取及以甲苯再結

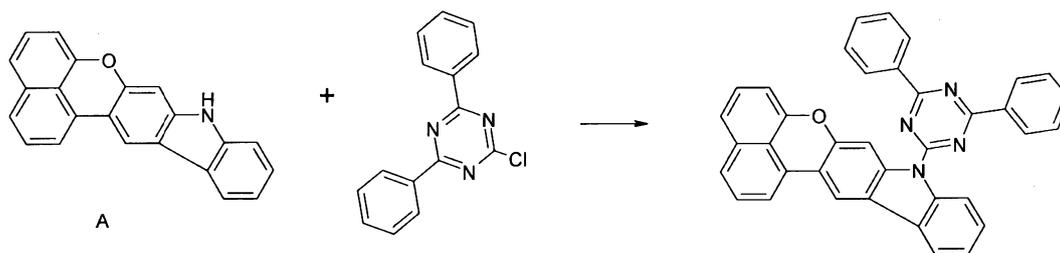
晶。產率：28g(229mmol)的 A+B 混合物；90% 的理論值；
純度：98.0%，藉由 HPLC。以乙酸乙酯/甲苯(1:2)再結晶
後，獲得 62% A 及 23% B。

下列化合物可用類似的方式製備：

	反應物 1	產物	產物	產率
1b				60% / 19%
2b				72%
3b				54% / 22%
4b				59% / 18%
5b				67%
6b				56% / 20%
7b				53% / 19%
8b				50% / 21%
9b				59% / 11%

10b				50% / 20%
11b				77%
12b				61% / 15%
13b				59% / 16%
14b				72%
15b				55% / 22%
16b				41% / 24%

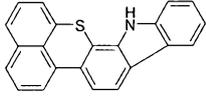
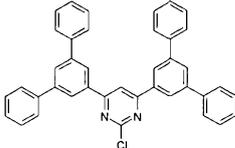
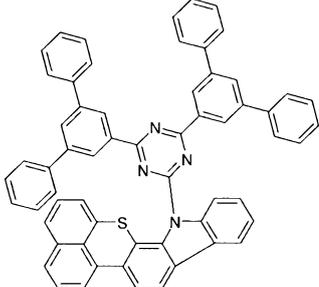
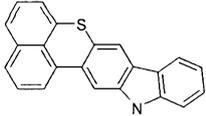
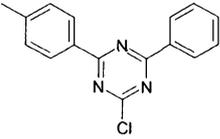
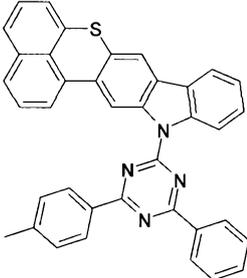
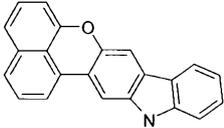
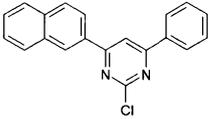
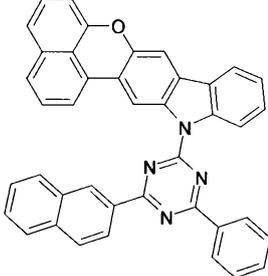
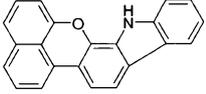
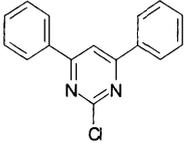
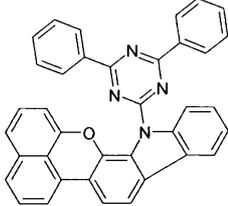
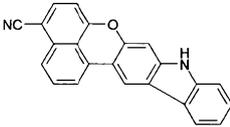
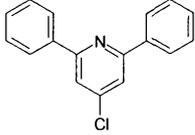
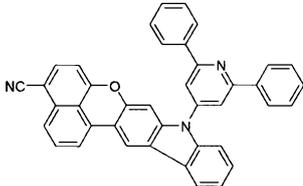
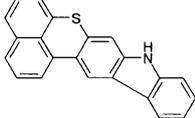
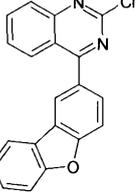
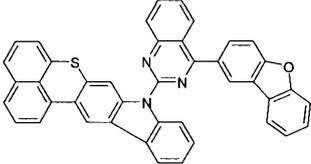
c) 巴哈法氏

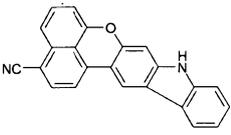
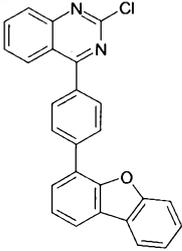
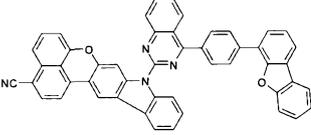
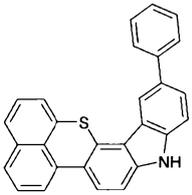
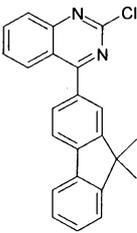
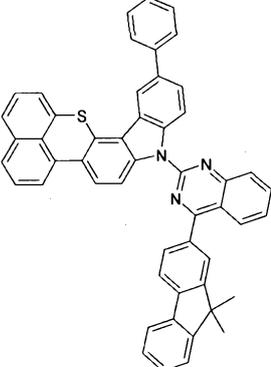
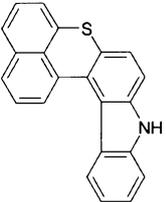
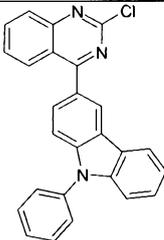
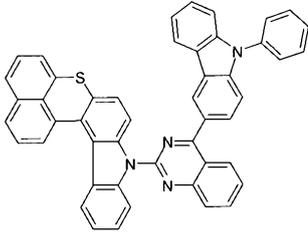
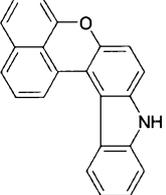
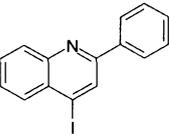
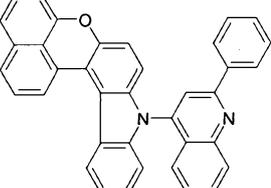
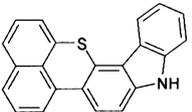
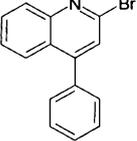
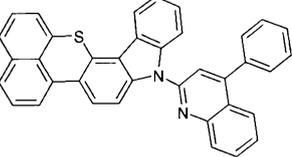
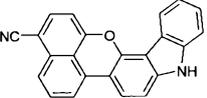
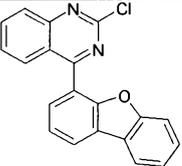
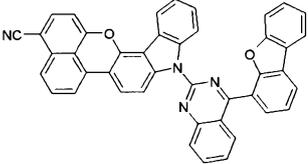


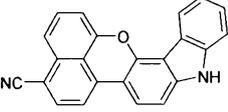
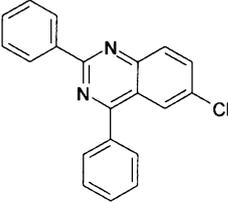
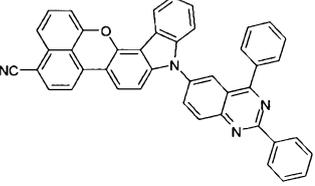
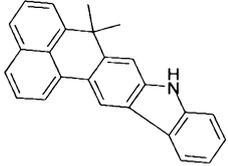
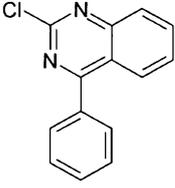
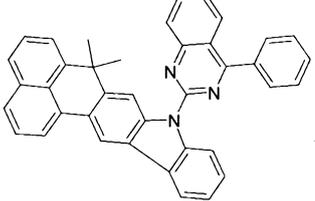
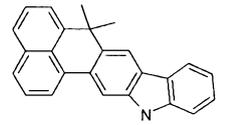
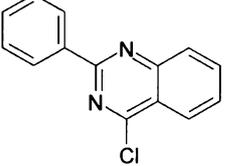
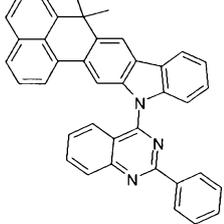
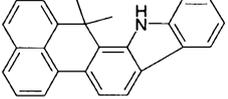
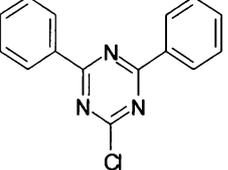
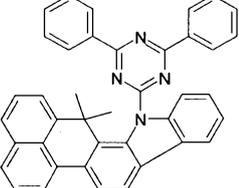
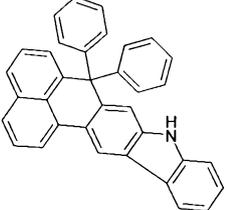
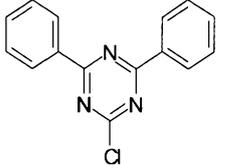
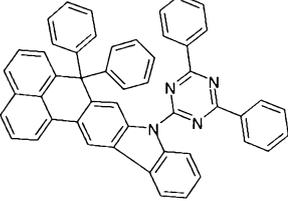
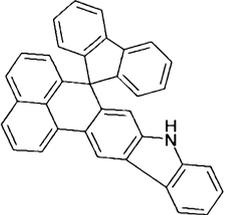
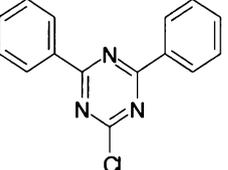
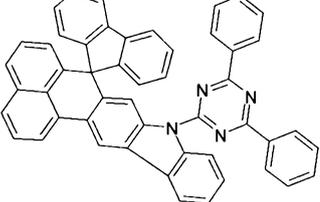
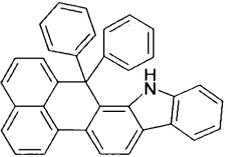
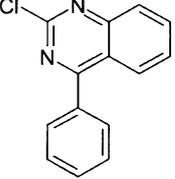
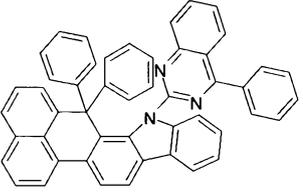
於保護性氣氛下，將 4.3g 的 NaH(107mmol) 之 60% 礦物油溶液溶解在 300ml 的二甲基甲醯胺中。將 32g(107mmol) 的咪唑衍生物 (A) 溶解在 250ml 的 DMF 中並將之滴加到反應混合物中。於室溫 1h 後，滴加於 200ml 的 THF 中之 2-氯-4,6-二苯基-[1,3,5]-三嗪 (34.5g、0.122mol) 的溶液。將反應混合物於室溫攪拌 12h 且接著倒到冰上。回溫至室溫後，將沉澱出之固體過濾並以乙醇及庚烷清洗之。使殘質歷經以甲苯熱萃取、以甲苯/正庚烷再結晶及最終於高真空下昇華。純度為 99.9%。產率為 38g(70mmol)；66% 的理論值。

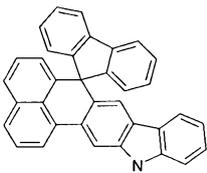
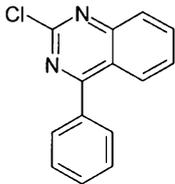
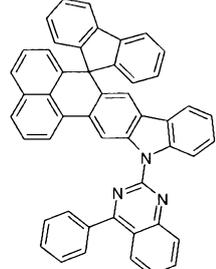
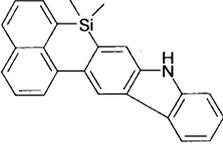
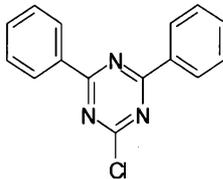
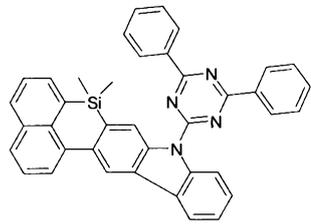
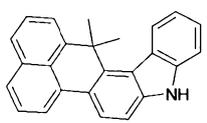
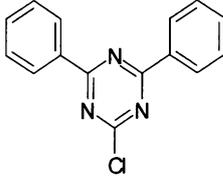
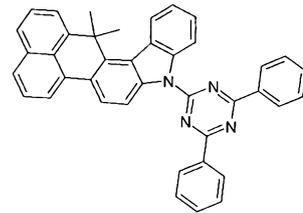
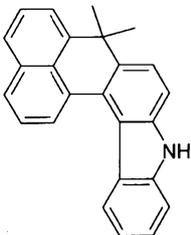
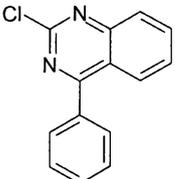
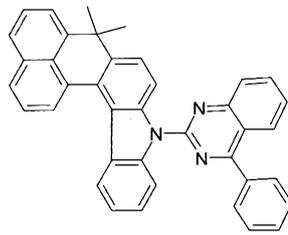
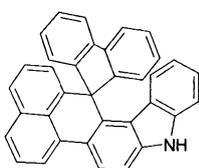
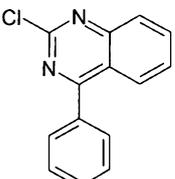
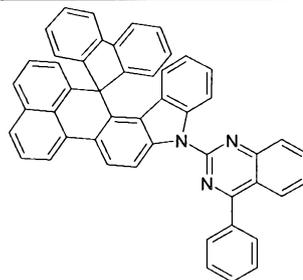
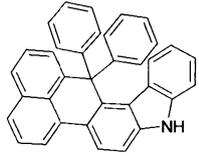
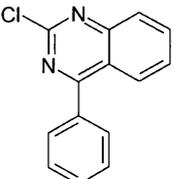
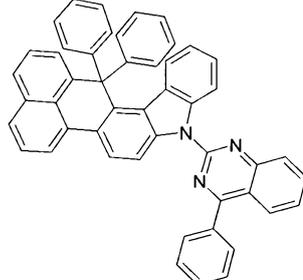
下列化合物可用類似的方式製備：

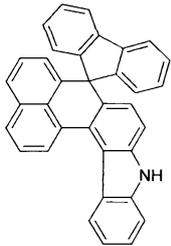
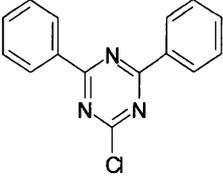
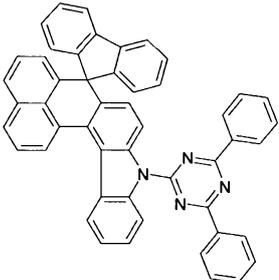
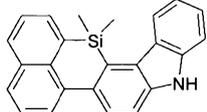
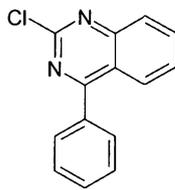
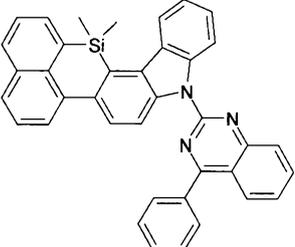
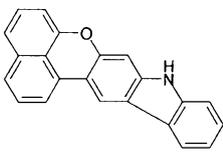
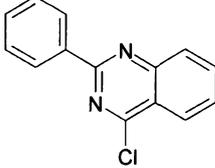
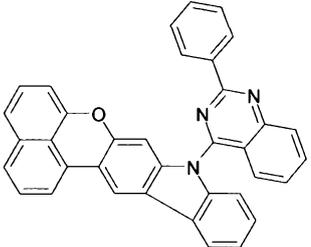
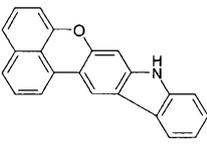
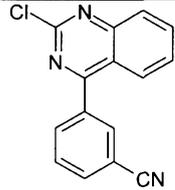
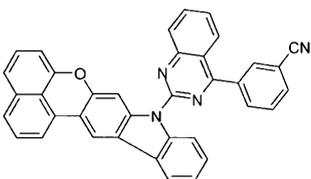
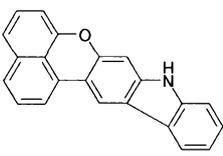
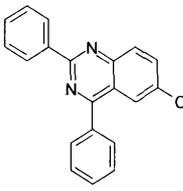
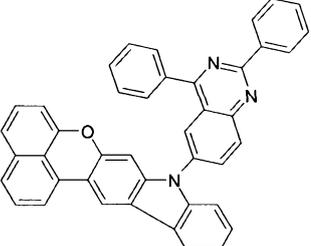
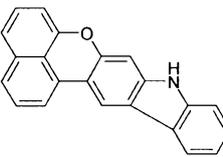
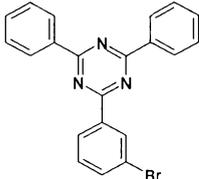
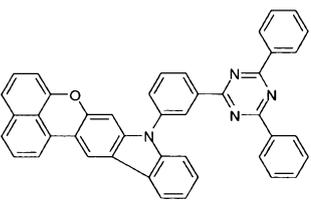
	反應物 1	反應物 2	產物	產率
1c		 [29874-83-7]		66%
2c		 3842-55-5		62%

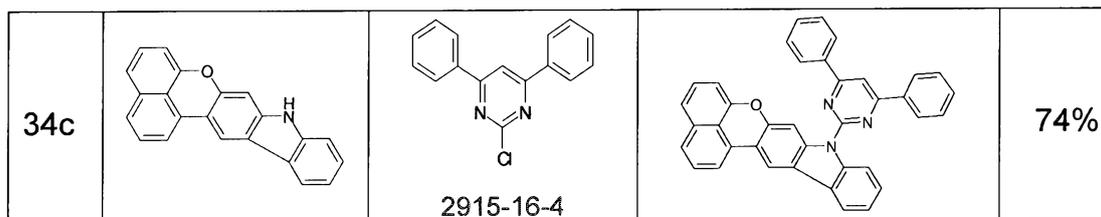
3c		 1384480-21-0		64%
4c		 92853-85-5		57%
5c		 1260393-65-4		61%
6c		 2915-16-4		63%
7c		 133785-60-1		60%
8c		 [1616499-38-7]		68%

9c		 <p>[1403252-58-3]</p>		65%
10c		 <p>[1373265-66-7]</p>		69%
11c		 <p>[1373317-91-9]</p>		67%
12c		 <p>[643017-61-2]</p>		64%
13c		 <p>[857206-12-3]</p>		63%
14c		 <p>[14003252-55-0]</p>		68%

15c		 [30169-34-7]		65%
16c		 [29874-83-7]		62%
17c		 [6484-25-9]		65%
18c		 3842-55-5		71%
19c		 3842-55-5		69%
20c		 3842-55-5		73%
21c		 [29874-83-7]		70%

22c		 [29874-83-7]		63%
23c		 3842-55-5		60%
24c		 3842-55-5		71%
25c		 [29874-83-7]		7%
26c		 [29874-83-7]		69%
27v		 [29874-83-7]		63%

28c		 3842-55-5		64%
29c		 [29874-83-7]		70%
30c		 [6484-25-9]		76%
31c		 [1292317-90-8]		65%
32c		 [30169-34-7]		69%
33c		 864377-31-1		72%



OLED之製造

在下列實施例I1至I19中，秀出各種OLED之數據。

實施例I1至I19之預處理：將塗有厚度50nm之結構化ITO(氧化銦錫)的玻璃板在塗佈前先用氧電漿處理，接著再用氫電漿處理。此等經電漿處理的玻璃板形成施加有OLED之基板。

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)/發光層(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)及最後陰極。陰極係由厚度100nm之鋁層形成。OLED之精確結構可見表1。製造OLED所需之材料係顯示於表2中。

所有材料係在真空室內藉由熱蒸氣沉積施加。在此情況下，發光層總是由至少一種基質材料(主體材料)和發光摻雜劑(發射體)組成，該發光摻雜劑藉由共蒸發而以特定體積比例加至基質材料。以形式如IC5：IC3：TEG2(55%：35%：10%)給予之詳細資料在此意指材料IC5係以55%之體積比例存在於層中，IC3係以35%之比例存在於層中及TEG2係以10%之比例存在於層中。類似地，電子傳輸層亦可由二種材料之混合物所組成。

OLED係以標準方式示性。為此目的，測定電致發光

光譜、電流效率(以 cd/A 測量)、功率效率(以 lm/W 測量)及在假設 Lambert 發光特性下，從電流-電壓-發光強度特性(IUL 特性)計算之以發光強度為函數之外部量子效率(EQE，以百分比測量)，亦測定壽命。電致發光光譜係在 1000cd/m^2 之發光強度下測定，且由此計算 CIE 1931x與y色座標。

本發明之混合物於磷光 OLED 的發光層中之用途

本發明之材料可用於磷光紅 OLED 的發光層中。發明性材料 EG1 係使用在實施例 I1 中作為與磷光發射體 TEG5 組合的主體材料。在 1000cd/m^2 之發光強度下，OLED 具有 $\text{CIE}_x=0.67$ 及 $\text{CIE}_y=0.33$ 的色作標。於實施例 I2 至 I13 中亦然，OLED 發出具有 $\text{CIE}_x=0.67$ 及 $\text{CIE}_y=0.33$ 的色作標之光。這顯示發明性化合物 EG1-EG13 適合於 OLED 中用於作為主體材料。

本發明之混合物於磷光 OLED 的電子傳輸層中之用途

本發明之材料也可用於 OLED 的電子傳輸層中。於實施例 I14 至 I19 中，發明性材料 EG14 至 EG19 係使用在電子傳輸層中。於實施例 I14 至 I19 中，OLED 發出具有 $\text{CIE}_x=0.67$ 及 $\text{CIE}_y=0.33$ 的色作標之光。這顯示發明性化合物 EG14 至 EG19 適合於 OLED 中用於作為電子傳輸材料。

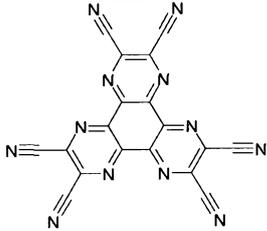
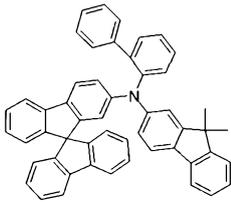
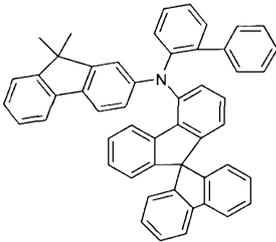
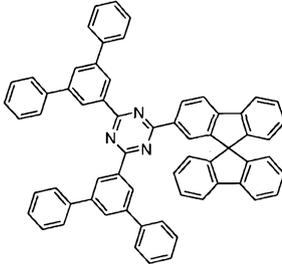
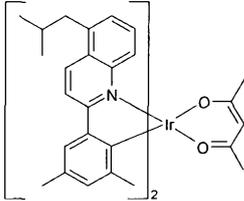
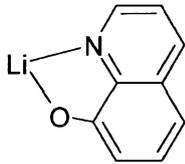
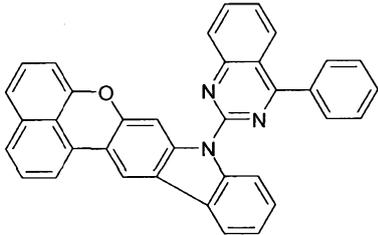
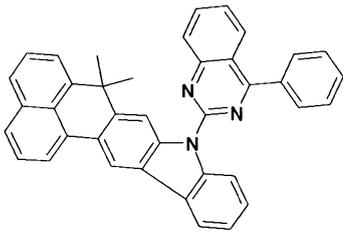
表1：OLED的結構

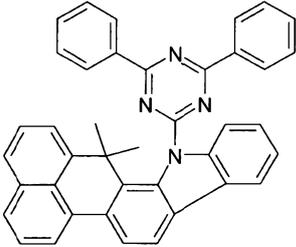
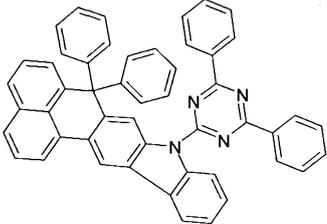
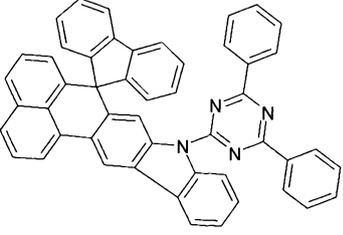
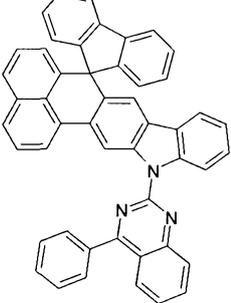
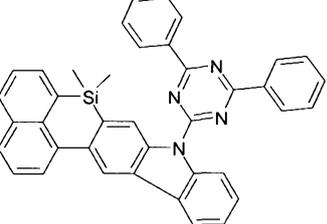
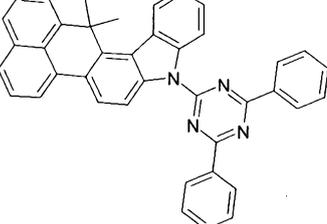
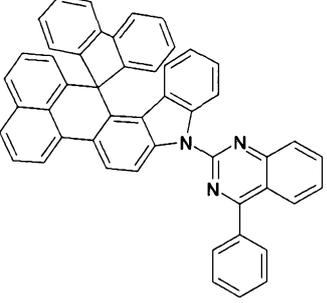
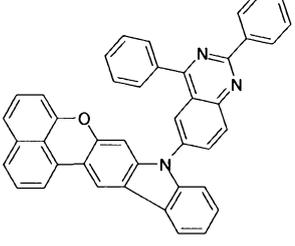
Ex.	HIL 厚度	HTL 厚度	EBL 厚度	EML 厚度	HBL 厚度	ETL 厚度	EIL 厚度
I1	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I2	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG2:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I3	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG3:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I4	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG4:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I5	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG5:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I6	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG6:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I7	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG7:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I8	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG8:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	

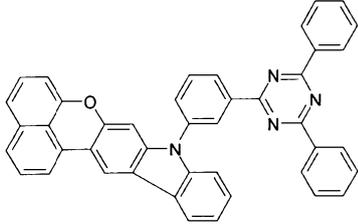
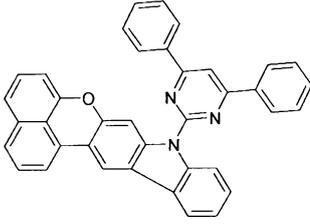
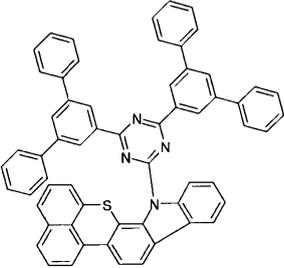
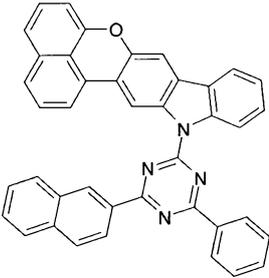
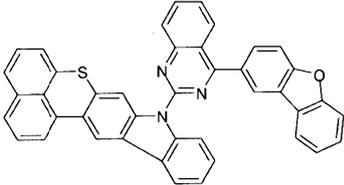
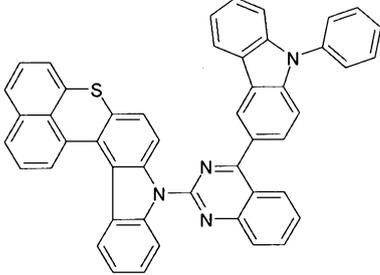
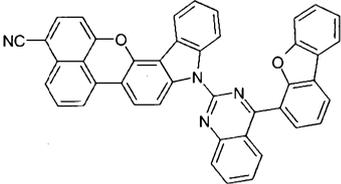
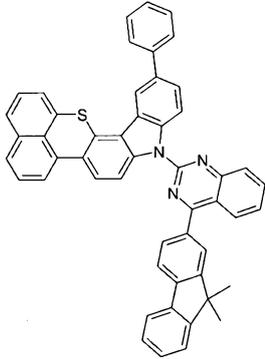
19	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG9:TER 5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
110	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG10:TE R5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
111	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG11:TE R5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
112	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG12:TE R5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
113	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG13 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
114	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG14 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
115	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG15 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
116	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG16 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
117	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG17 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm

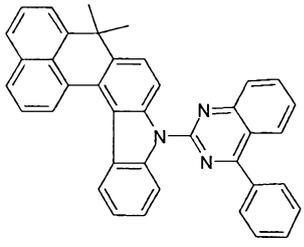
118	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG18 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
119	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER 5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG19 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm

表2：OLED之材料的結構式

	
HATCN	SpMA1
	
SpMA3	ST2
	
TER5	LiQ
	
EG1	EG2

	
<p>EG3</p>	<p>EG4</p>
	
<p>EG5</p>	<p>EG6</p>
	
<p>EG7</p>	<p>EG8</p>
	
<p>EG9</p>	<p>EG10</p>

	
EG11	EG12
	
EG13	EG14
	
EG15	EG16
	
EG17	EG18

 <p>The chemical structure of EG19 is a complex polycyclic molecule. It features a central benzimidazole ring system. One of the benzimidazole nitrogen atoms is substituted with a 2,2-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl group. The other benzimidazole nitrogen atom is substituted with a 1,2,4-triazole ring. The 1,2,4-triazole ring is further substituted with two phenyl groups at the 5-position.</p>	
EG19	



201833300

【發明摘要】

【中文發明名稱】

咔唑衍生物

【英文發明名稱】

Carbazole derivatives

【中文】

本發明關於一種咔唑衍生物，尤其是用於電子裝置者。本發明又關於一種用於製備本發明化合物之方法以及一種包含彼等化合物的電子裝置。

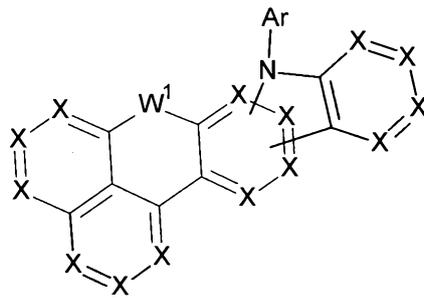
【英文】

The present invention relates to carbazole derivatives, especially for use in electronic devices. The invention further relates to a process for preparing the compounds of the invention and to electronic devices comprising these.

【指定代表圖】無

【代表圖之符號簡單說明】無

【特徵化學式】式(I)

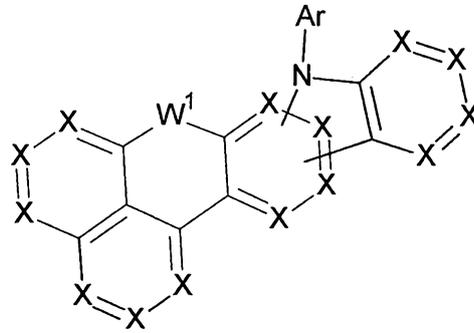


式 (I)

【發明申請專利範圍】

【第1項】

一種化合物，其包含至少一種式(I)之結構：



式 (I)

其中所使用的符號如下：

X 在各情況下係相同或不同且為 N 或 CR¹，較佳 CR¹，或者若吲哚并(indolo)基鍵結至 X 時，則為 C；

W¹ 為 O、S、C(R¹)₂、P(=O)Ar 或 Si(R¹)₂；

R¹ 在各情況下係相同或不同且為 H；D；F；Cl；Br；I；CN；NO₂；N(Ar¹)₂；N(R²)₂；C(=O)Ar¹；C(=O)R²；P(=O)(Ar¹)₂；P(Ar¹)₂；B(Ar¹)₂；B(OR²)₂；Si(Ar¹)₃；Si(R²)₃；具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環狀烷基、烷氧基或烷硫基或具有 2 至 40 個碳原子之烯基，其之各者可經一或多個 R² 基團取代，其中一或多個非相鄰 CH₂ 基可經 -R²C=CR²-、-C≡C-、Si(R²)₂、

$\text{Ge}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、
 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^2-$ 、 NR^2 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^2)$ 、 $-\text{O}-$ 、
 $-\text{S}-$ 、 SO 或 SO_2 置換且其中一或多個氫原子可經
 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換；或具有5至40
 個芳族環原子且在各情況下可經一或多個 R^2 基團
 取代之芳族或雜芳族環系統；或具有5至40個芳
 族環原子且可經一或多個 R^2 基團取代之芳氧基或
 雜芳氧基；或具有5至40個芳族環原子且可經一
 或多個 R^2 基團取代之芳烷基或雜芳烷基；或這些
 系統的組合；同時，二或更多個較佳相鄰之 R^1 基
 團一起可形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族
 或雜芳族環系統；

Ar 在各情況下係相同或不同且為具有5至60個芳族
 環原子且可經一或多個 R^1 基團取代之芳族或雜芳
 族環系統；

Ar¹ 在各情況下係相同或不同且為具有5至30個芳族
 環原子且可經一或多個 R^2 基團取代之芳族或雜芳
 族環系統；同時，鍵結到相同矽原子、氮原子、
 磷原子或硼原子的二個 Ar^1 基團也可經由藉由單
 鍵之橋或選自下列中之橋結合在一起： $\text{B}(\text{R}^2)$ 、
 $\text{C}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 $\text{C}=\text{C}(\text{R}^2)_2$ 、 O 、
 S 、 $\text{S}=\text{O}$ 、 SO_2 、 $\text{N}(\text{R}^2)$ 、 $\text{P}(\text{R}^2)$ 及 $\text{P}(=\text{O})\text{R}^2$ ；

R² 在各情況下係相同或不同且為 H ； D ； F ； Cl ；
 Br ； I ； CN ； $\text{B}(\text{OR}^3)_2$ ； NO_2 ； $\text{C}(=\text{O})\text{R}^3$ ；

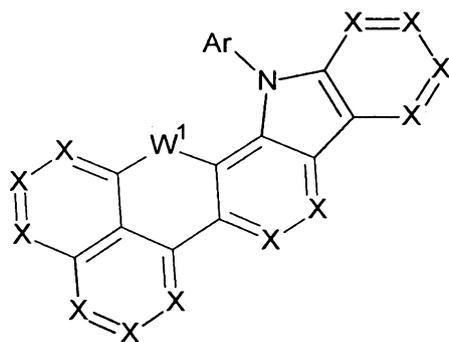
$CR^3=C(R^3)_2$; $C(=O)OR^3$; $C(=O)N(R^3)_2$;
 $Si(R^3)_3$; $P(R^3)_2$; $B(R^3)_2$; $N(R^3)_2$; NO_2 ;
 $P(=O)(R^3)_2$; OSO_2R^3 ; OR^3 ; $S(=O)R^3$;
 $S(=O)_2R^3$; 具有 1 至 40 個碳原子之直鏈烷基、烷
 氧基或烷硫基或具有 3 至 40 個碳原子之支鏈或環
 狀烷基、烷氧基或烷硫基，其之各者可經一或多
 個 R^3 基團取代，其中一或多個非相鄰 CH_2 基可經
 $-R^3C=CR^3-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、
 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^3$ 、 $-C(=O)O-$ 、
 $-C(=O)NR^3-$ 、 NR^3 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 或
 SO_2 置換且其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、 Cl 、
 Br 、 I 、 CN 或 NO_2 置換；或具有 5 至 40 個芳族環原
 子且在各情況下可經一或多個 R^3 基團取代之芳族
 或雜芳族環系統；或具有 5 至 40 個芳族環原子且
 可經一或多個 R^3 基團取代之芳氧基或雜芳氧基；
 或這些系統的組合；同時，二或更多個較佳相鄰
 之 R^2 取代基一起也可形成單環或多環之脂族、雜
 脂族、芳族或雜芳族環系統；

R^3 在各情況下係相同或不同且為選自下列者所組成
 群組： H 、 D 、 F 、 CN 、具有 1 至 20 個碳原子之脂
 族烴基團、或具有 5 至 30 個芳族環原子之芳族或
 雜芳族環系統，其中一或多個氫原子可經 D 、 F 、
 Cl 、 Br 、 I 或 CN 置換且其可經一或多個各具有 1 至
 4 個碳原子之烷基取代；同時，二或更多個較佳

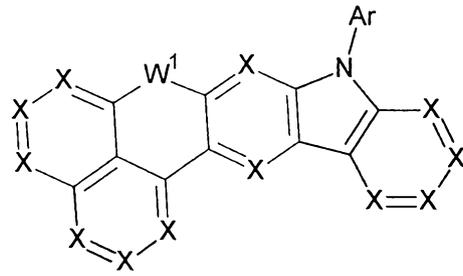
相鄰之 R^3 取代基一起也可形成單環或多環之脂族、雜脂族、芳族或雜芳族環系統。

【第2項】

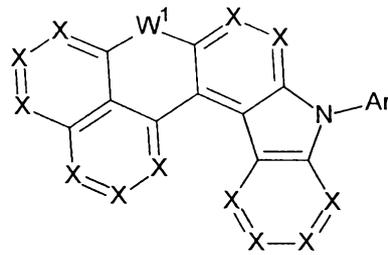
如請求項1之化合物，其包含至少一種式 (IIa)、(IIb)、(IIc)、(IId)、(IIe)或(IIf)之結構：



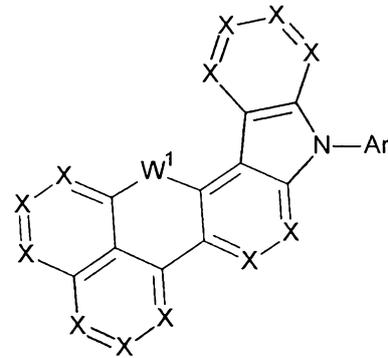
式 (IIa)



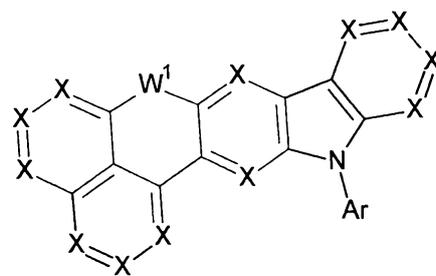
式 (IIb)



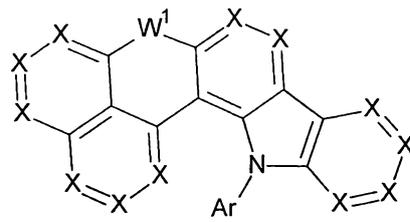
式 (IIc)



式 (II d)



式 (IIe)

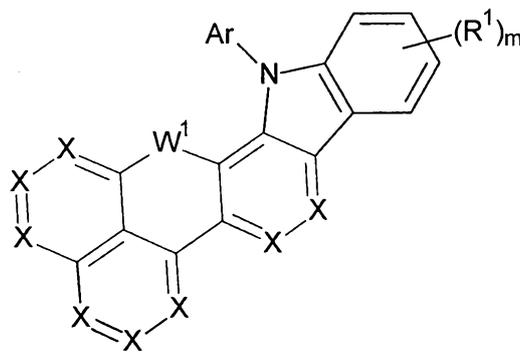


式 (IIf)

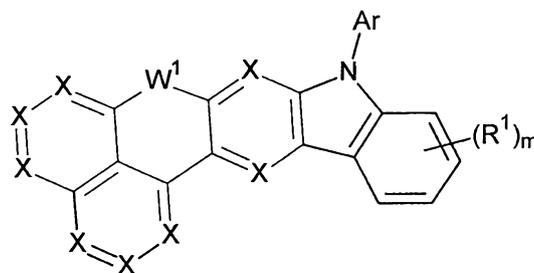
其中所使用的符號 Ar、 W^1 及 X 具有請求項 1 中所給予之定義。

【第 3 項】

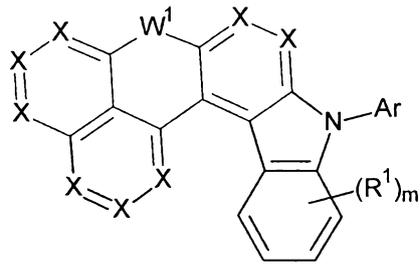
如請求項 1 之化合物，其包含至少一種式 (IIIa)、(IIIb)、(IIIc)、(IIId)、(IIIe) 或 (IIIf) 之結構：



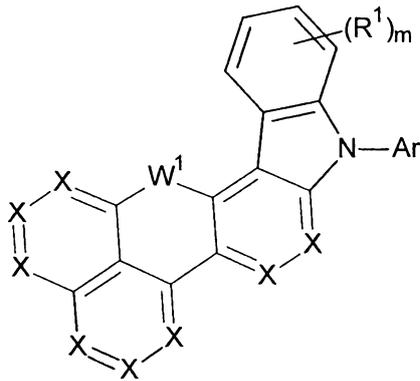
式 (IIIa)



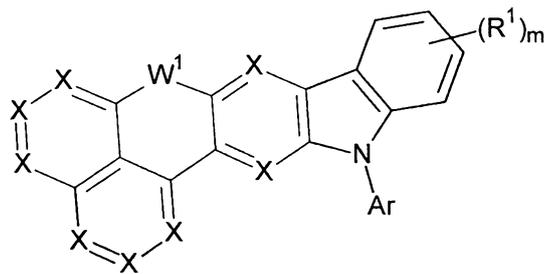
式 (IIIb)



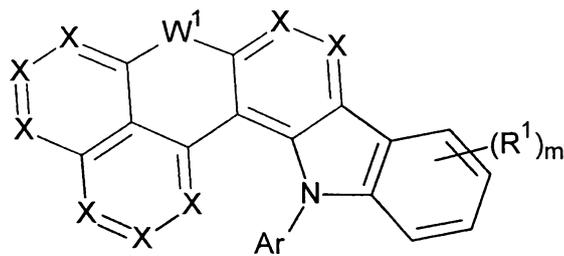
式 (IIIc)



式 (III d)



式 (III e)



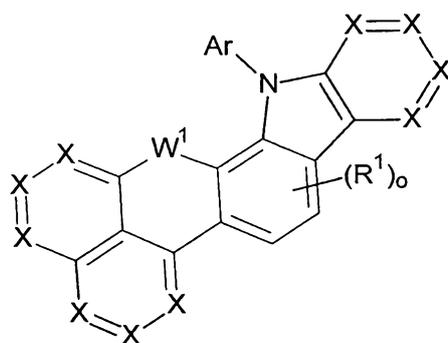
式 (III f)

其中符號 R^1 、Ar、 W^1 及 X具有請求項 1中所給予之定

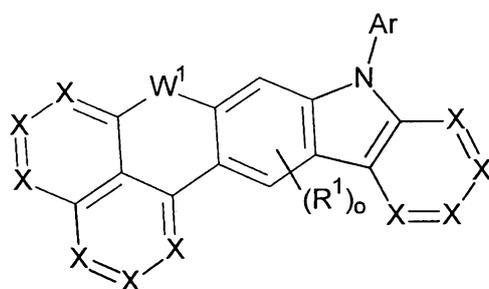
義且 m 為 0、1、2、3 或 4。

【第 4 項】

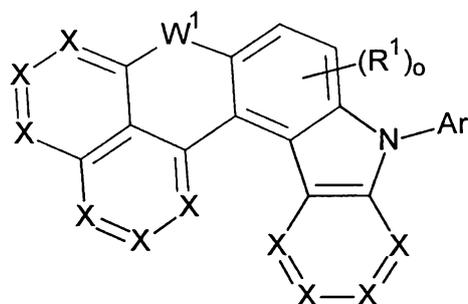
如請求項 1 之化合物，其包含至少一種式 (IVa)、(IVb)、(IVc)、(IVd)、(IVe) 或 (IVf) 之結構：



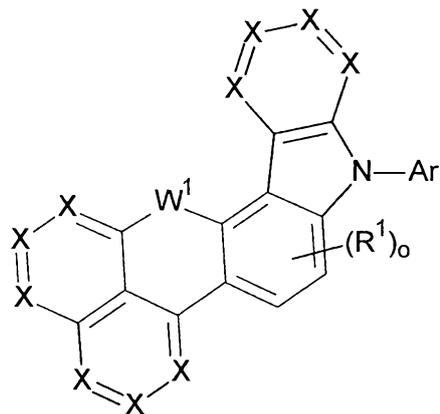
式 (IVa)



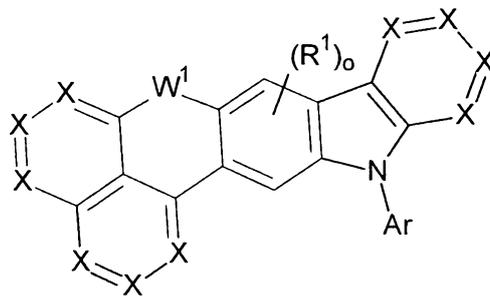
式 (IVb)



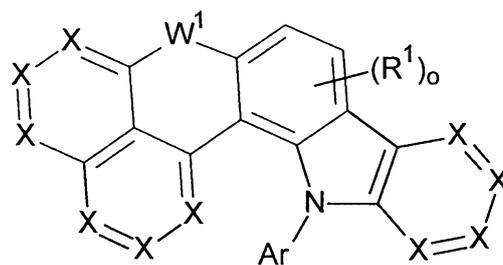
式 (IVc)



式 (IVd)



式 (IVe)

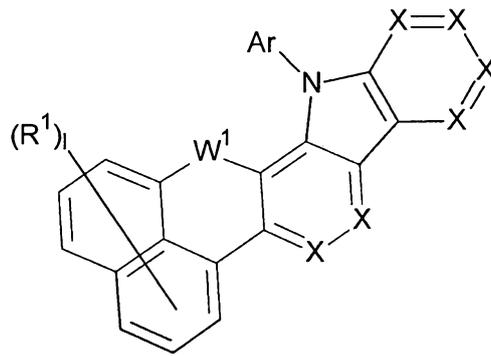


式 (IVf)

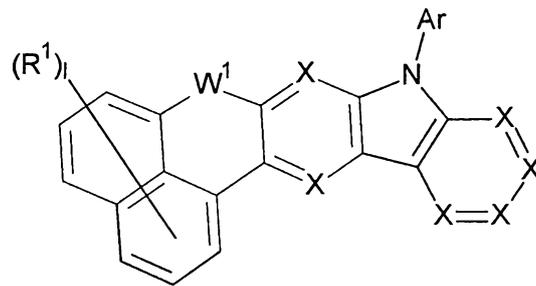
其中符號 R^1 、 Ar 、 W^1 及 X 具有請求項 1 中所給予之定義且 o 為 0、1 或 2。

【第 5 項】

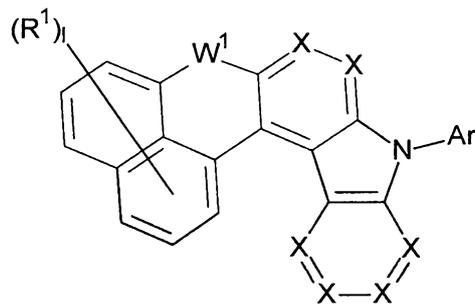
如請求項 1 之化合物，其包含至少一種式 (Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(Ve) 或 (Vf) 之結構：



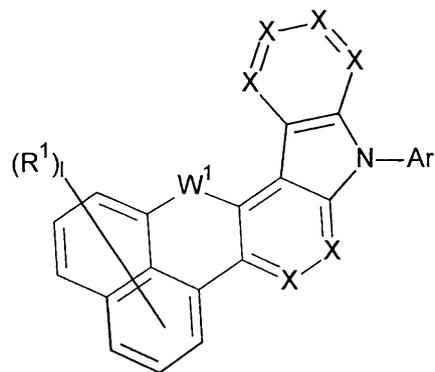
式 (Va)



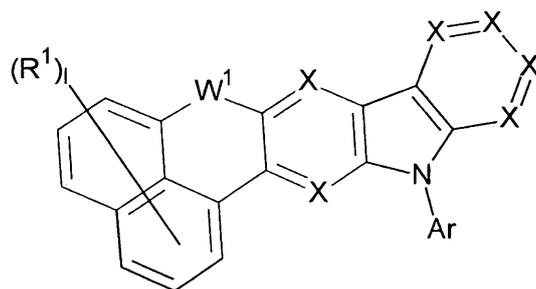
式 (Vb)



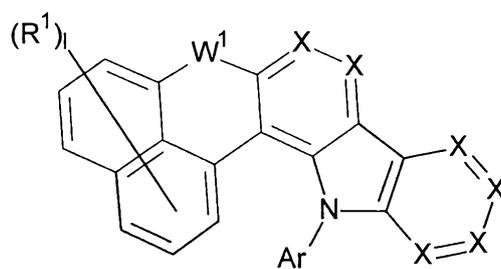
式 (Vc)



式 (Vd)



式 (Ve)

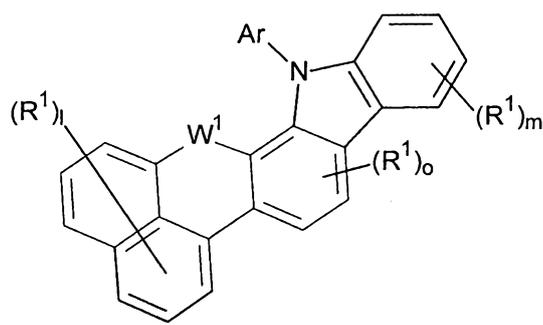


式 (Vf)

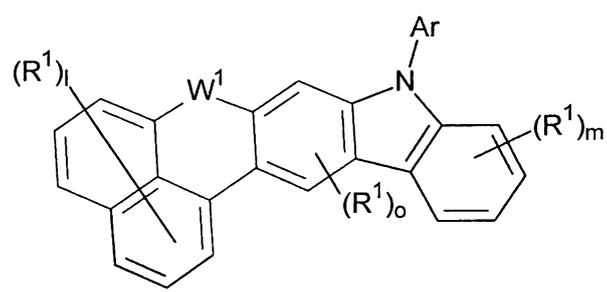
其中所使用的符號 R^1 、Ar、 W^1 及X具有請求項1中所給予之定義且 l 為0、1、2、3、4、5或6。

【第6項】

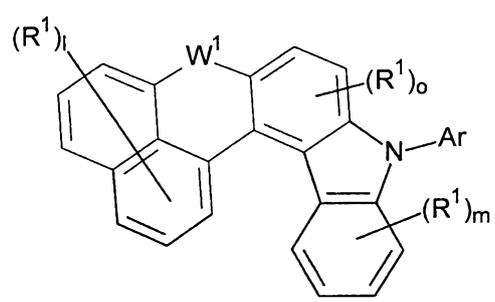
如請求項1之化合物，其包含至少一種式(VIa)、(VIb)、(VIc)、(VIId)、(VIf)或(VIf)之結構：



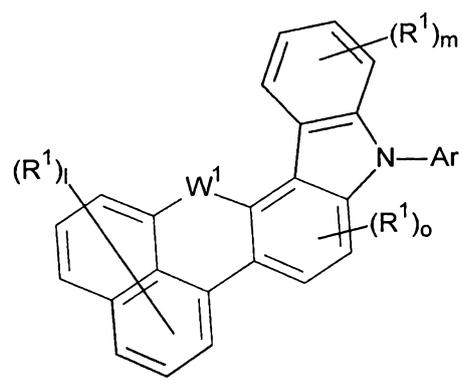
式 (VIa)



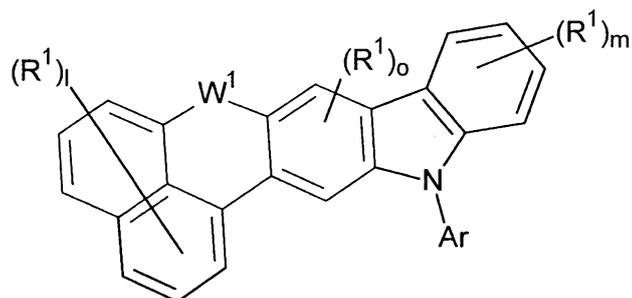
式 (VIb)



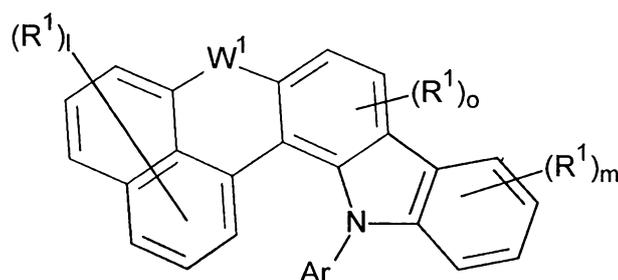
式 (VIc)



式 (VI d)



式 (VIe)



式 (VI f)

其中符號 R^1 、Ar、 W^1 及 X 具有請求項 1 中所給予之定義， l 為 0、1、2、3、4、5 或 6， m 為 0、1、2、3 或 4 且 o 為 0、1 或 2。

【第 7 項】

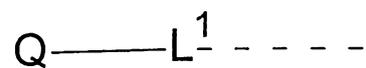
如請求項 1 至 6 中任一項之化合物，其中 Ar 基包含電洞傳輸基或構成電洞傳輸基。

【第 8 項】

如請求項 1 至 6 中任一項之化合物，其中 Ar 基包含電子傳輸基或構成電子傳輸基。

【第 9 項】

如請求項 8 之化合物，其中 Ar 基為可藉由式 (QL) 表示之基：



式 (QL)

其中 L^1 表示一鍵或具有 5 至 40 個芳族環原子且可經一或多個 R^1 基團取代之芳族或雜芳族環系統，且 Q 為電子傳輸基，其中 R^1 基團具有請求項 1 中所給予之定義。

【第 10 項】

一種含有一或多種如請求項 1 至 9 中任一項之化合物之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物，其中該化合物有一或多個鍵而非氫原子或取代基接至該寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物。

【第 11 項】

一種組成物，其包含至少一種如請求項 1 至 9 中一或多項之化合物或如請求項 10 之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物；以及至少一種又一化合物，該又一化合物係選自下列所組成群組：螢光發射體、磷光發射體、展現 TADF 的發射體、主體材料、電子傳輸材料、電子注入材料、電洞導體材料、電洞注入材料、電子阻擋材料及電洞阻擋材料。

【第 12 項】

一種調配物，其包含至少一種如請求項 1 至 9 中一或多項之化合物、或如請求項 10 之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物、或如請求項 11 之組成物；以及至少一種溶劑。

【第 13 項】

一種如請求項1至9的一或多項之化合物、或如請求項10之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物、或如請求項11之組成物於電子裝置中作為主體材料、電洞導體材料或電子傳輸材料之用途。

【第14項】

一種用於製備如請求項1至9中一或多項之化合物或如請求項10之寡聚物、聚合物及/或樹枝狀聚合物之方法，其特徵在於，於偶合反應中，將包含至少一個含氮雜環基之化合物結合到包含至少一個芳族或雜芳族基之化合物。

【第15項】

一種電子裝置，包含至少一種如請求項1至9中一或多項之化合物、或如請求項10之寡聚物、聚合物或樹枝狀聚合物、或如請求項11之組成物，其中該電子裝置較佳選自下列所組成群組：有機電致發光裝置、有機積體電路、有機場效電晶體、有機薄膜電晶體、有機發光電晶體、有機太陽能電池、有機光偵測器、有機感光器 (organic photoreceptor)、有機場猝滅裝置、發光電化學電池及有機雷射二極體。