



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년09월03일
 (11) 등록번호 10-1983796
 (24) 등록일자 2019년05월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 C07C 255/51 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
 D06P 1/00 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)

(52) CPC특허분류
 C07C 255/51 (2013.01)
 C09K 11/06 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-0135680
 (22) 출원일자 2017년10월19일
 심사청구일자 2017년10월19일
 (65) 공개번호 10-2019-0043743
 (43) 공개일자 2019년04월29일
 (56) 선행기술조사문헌
 JP52013522 A*
 Dyes and Pigments, 1988, 9, 351-356, 1부.*
 Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2002, Vol. 377, pp. 153-156, 1부.*
 Thin Solid Films, 2002, Vol.417, pp. 26-31, 1부.*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
 한국교통대학교 산학협력단
 충청북도 충주시 대소원면 대학로 50

(72) 발명자
 이지훈
 충청북도 충주시 연수동산로 26, 101동 1104호(연수동, 연수힐스테이트)
 최용선
 경기도 평택시 서탄면 금암1길 53-8
 신성준
 충청북도 충주시 연원3길 31-1(연수동)

(74) 대리인
 특허법인충현

전체 청구항 수 : 총 8 항

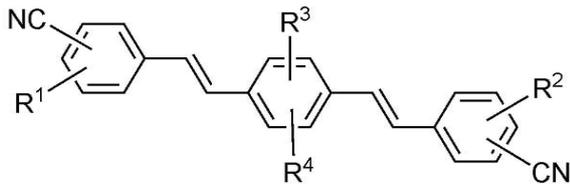
심사관 : 방성철

(54) 발명의 명칭 **다이사이안스티릴 벤젠 유도체 및 이를 포함하는 형광재료**

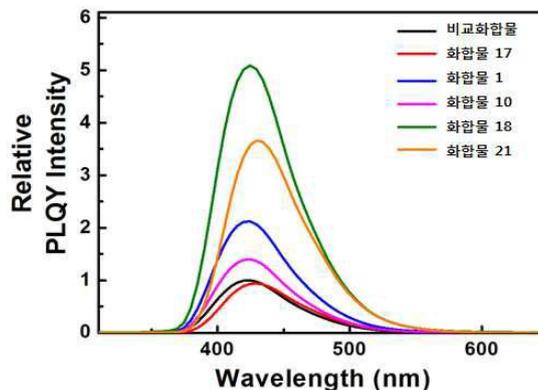
(57) 요약

본 발명은 하기 구조식 1로 표시되는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체에 관한 것이다. 이에 따라, 본 발명의 다이사이안스티릴 벤젠(Dicyanstyryl benzene) 유도체는 형광수율이 현저히 개선되어 사용량을 획기적으로 저감함으로써 환경오염을 최소화하고 경제성을 향상시킬 수 있는 형광재료를 제공할 수 있다.

[구조식 1]



대표도



(52) CPC특허분류

D06P 1/0012 (2013.01)

H01L 51/005 (2013.01)

C09K 2211/1007 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 10070174

부처명 산업통상자원부

연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원

연구사업명 산업핵심기술개발사업

연구과제명 COD 저감형 고기능성 형광염료 및 친환경 공정기술 개발

기여율 1/1

주관기관 삼원산업(주)

연구기간 2016.11.01 ~ 2019.10.31

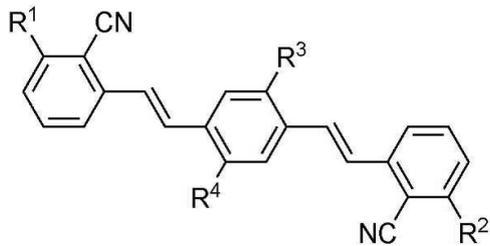
명세서

청구범위

청구항 1

하기 구조식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체.

[구조식 2]



구조식 2에서,

R^1 및 R^2 는 동시에 수소원자는 아니고, R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이다.

청구항 2

삭제

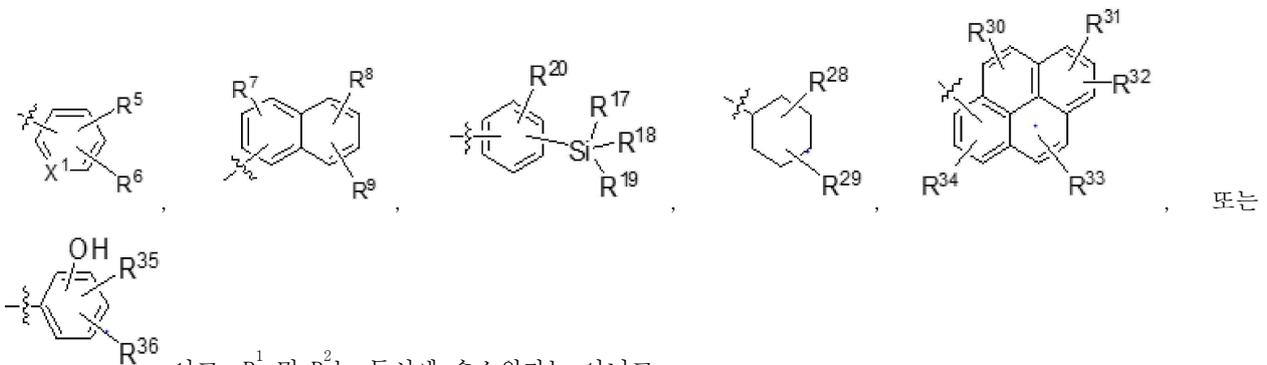
청구항 3

삭제

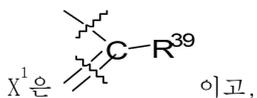
청구항 4

제1항에 있어서,

R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, C1 내지 C4 직쇄 또는 분쇄 알킬기,



이고, R^1 및 R^2 는 동시에 수소원자는 아니고,



R^{39} 는 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

R^5 내지 R^9 , R^{17} 내지 R^{20} , 및 R^{28} 내지 R^{36} 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기인 것을 특징으로 하는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체.

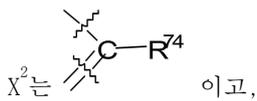
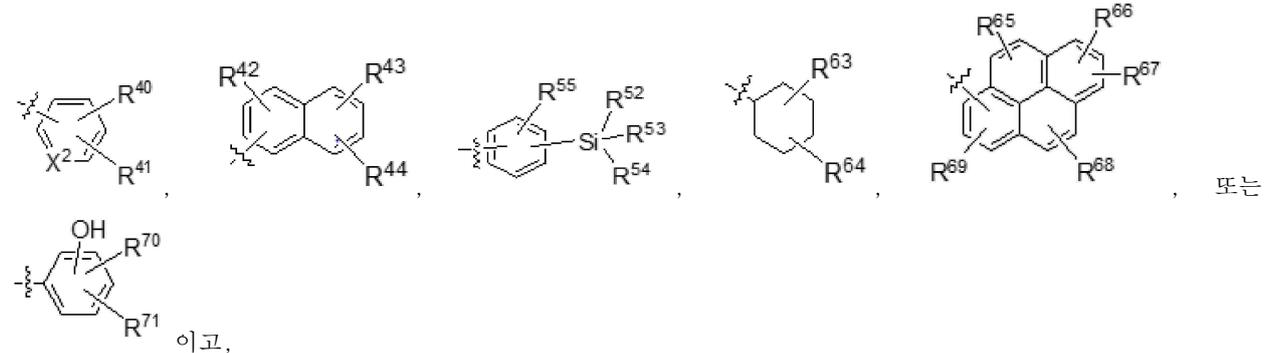
청구항 5

삭제

청구항 6

제1항에 있어서,

R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, C1 내지 C4 직쇄 또는 분쇄 알킬기,

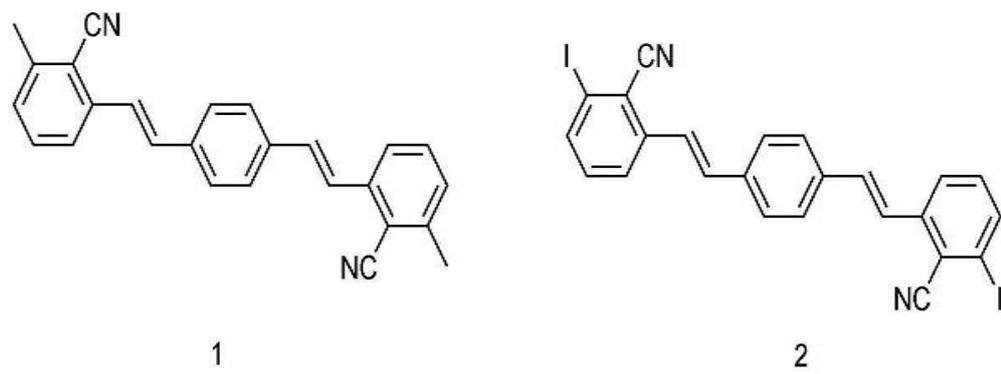


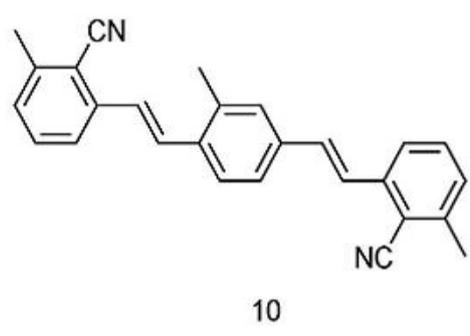
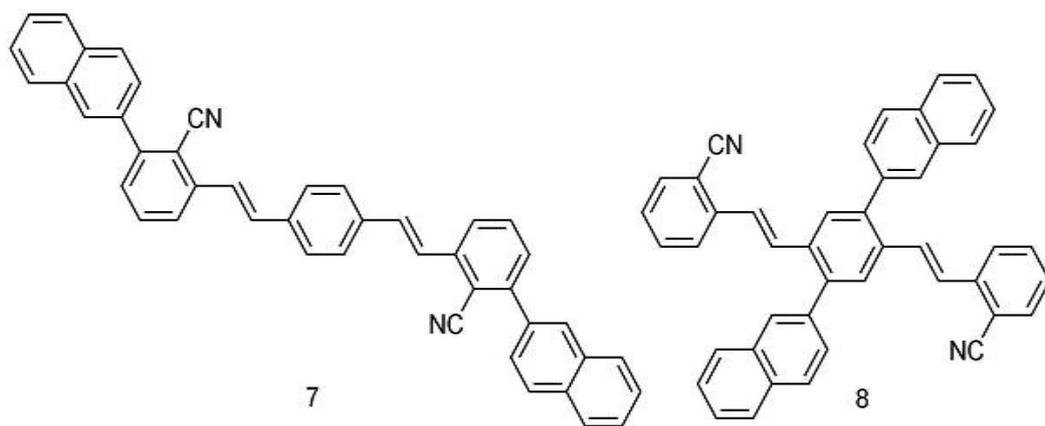
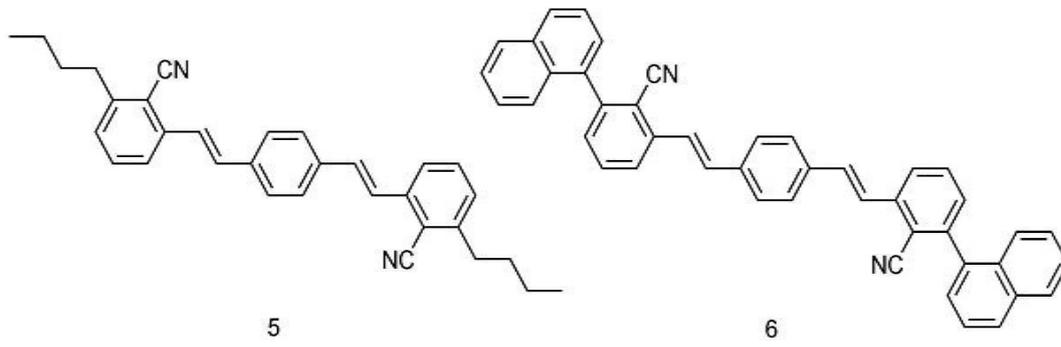
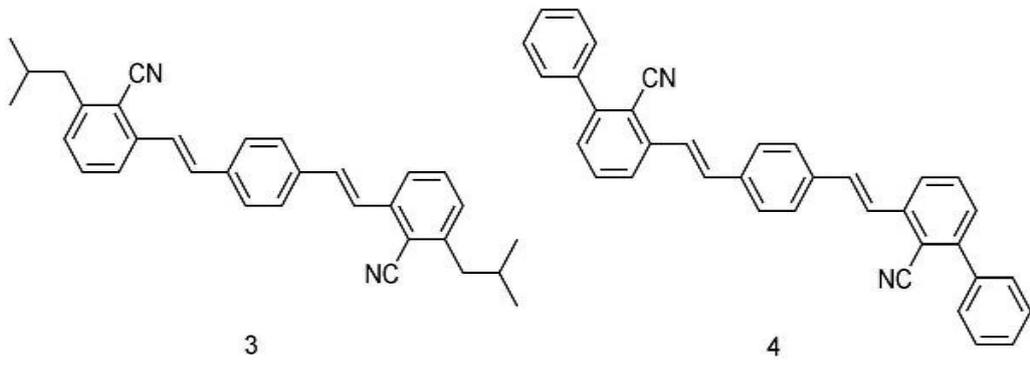
R^{74} 는 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

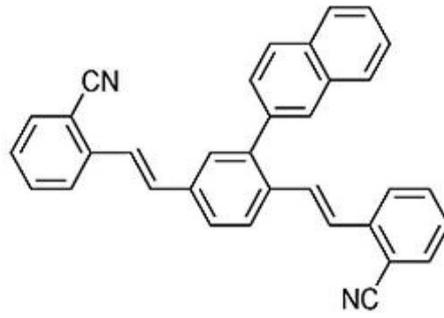
R^{40} 내지 R^{44} , R^{52} 내지 R^{55} , 및 R^{65} 내지 R^{71} 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기인 것을 특징으로 하는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체.

청구항 7

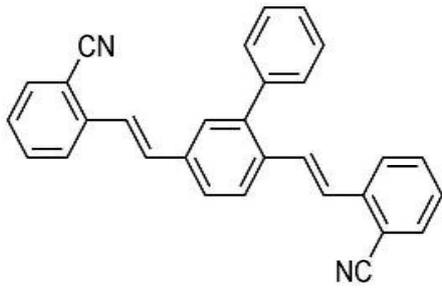
화합물 1 내지 8, 10, 12 내지 14, 17, 20, 21, 24, 25 내지 104, 및 106 내지 125 중에서 선택된 어느 하나인 다이사이안스티릴 벤젠 유도체.



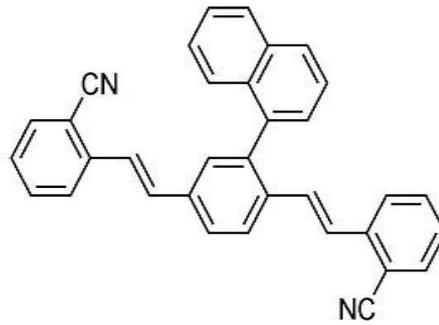




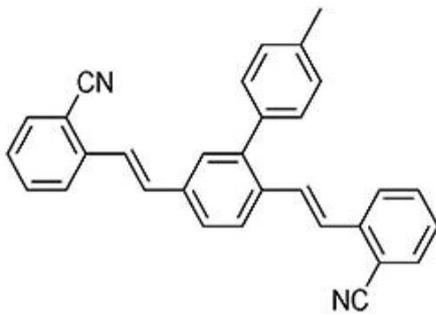
12



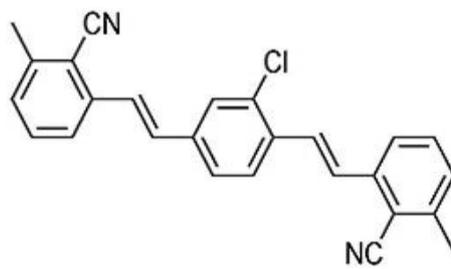
13



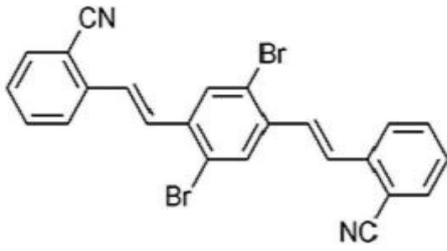
14



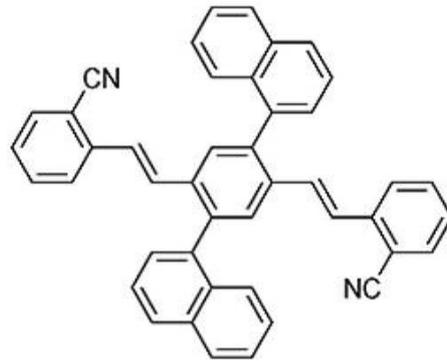
17



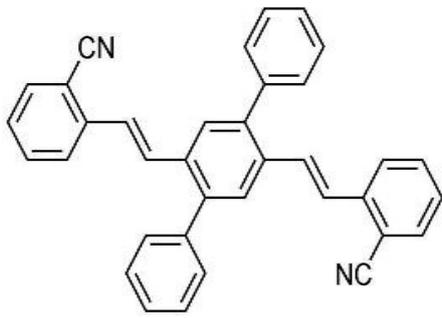
20



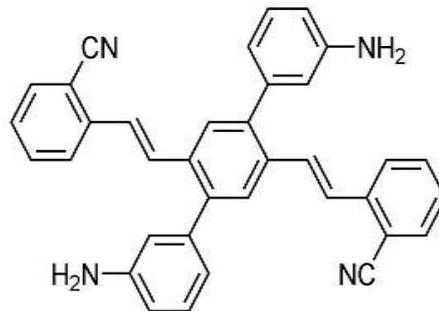
21



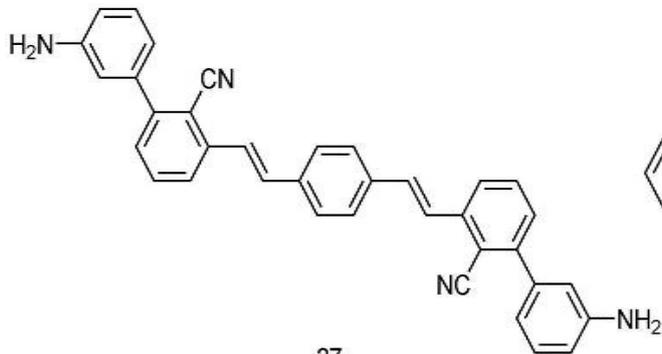
24



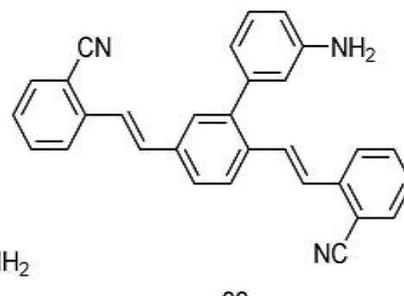
25



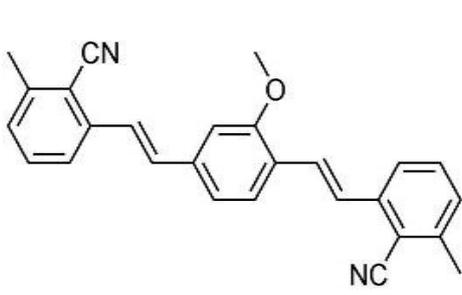
26



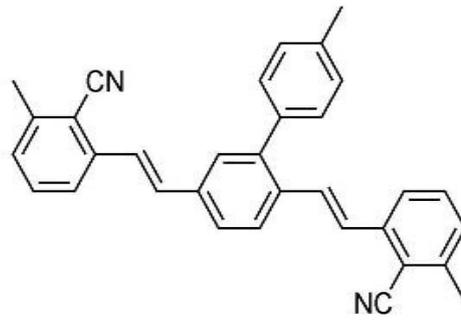
27



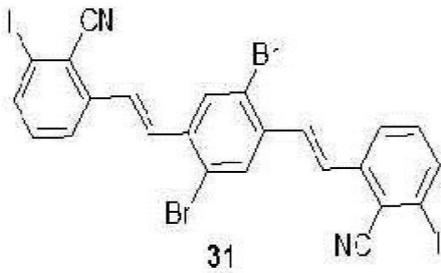
28



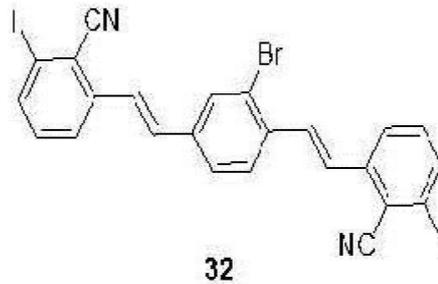
29



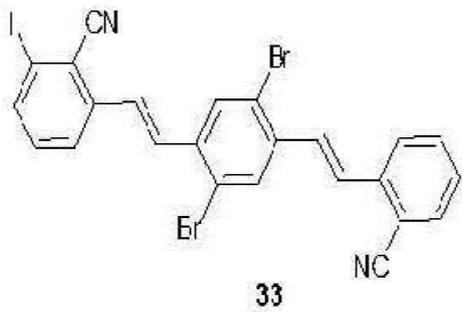
30



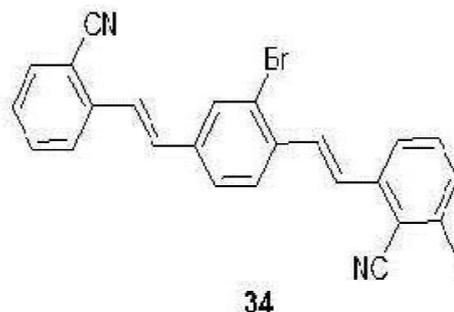
31



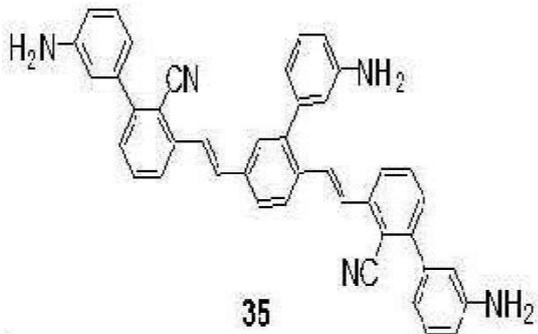
32



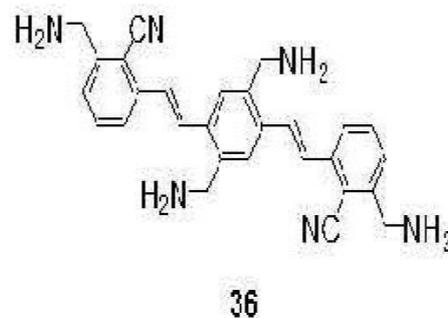
33



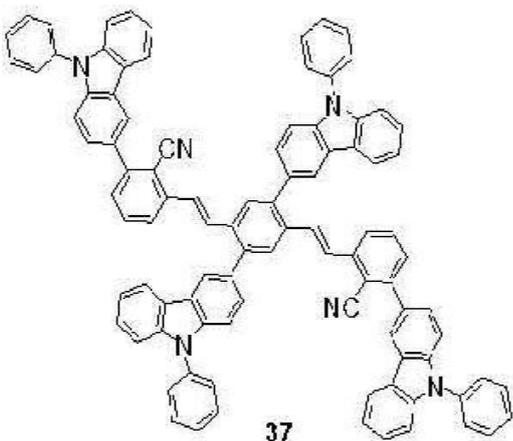
34



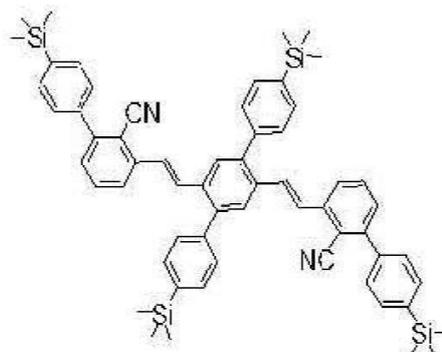
35



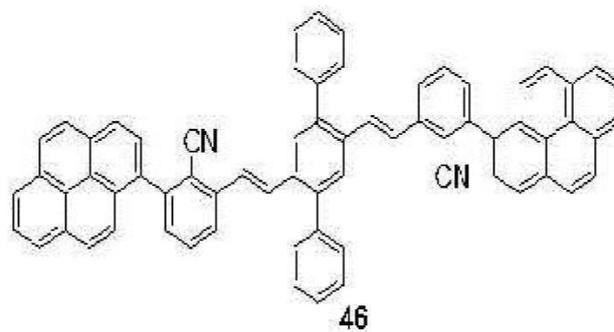
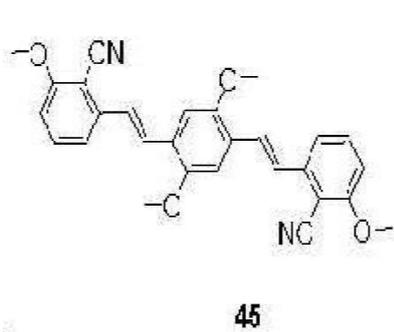
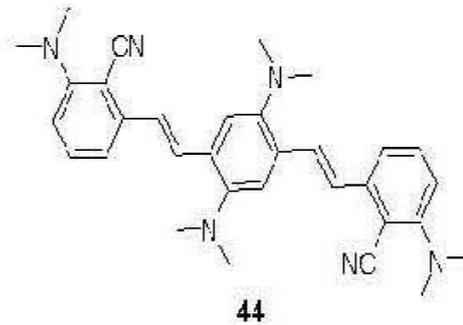
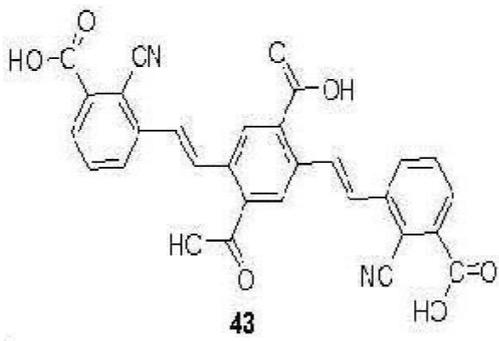
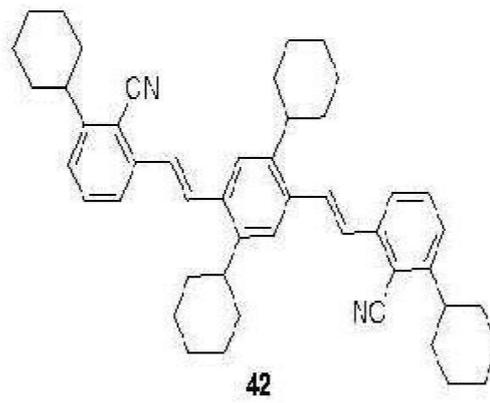
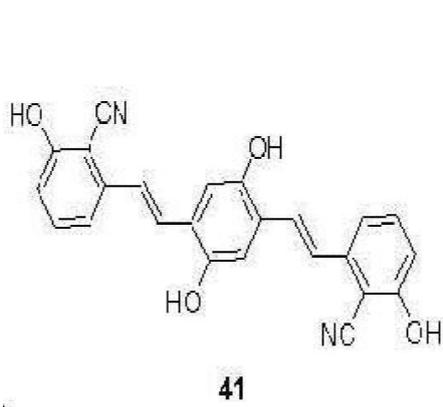
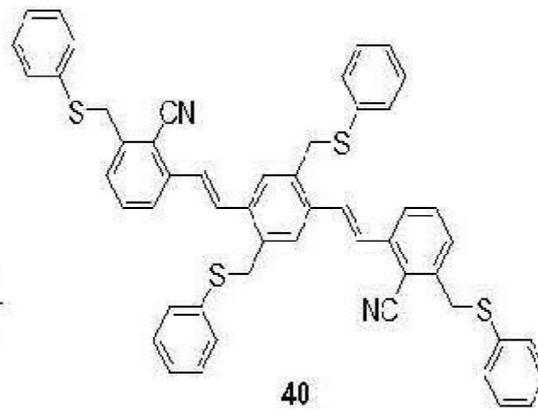
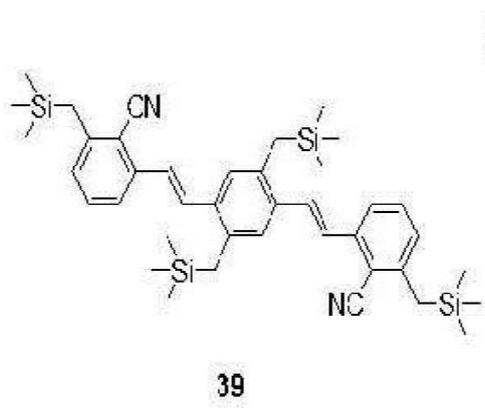
36

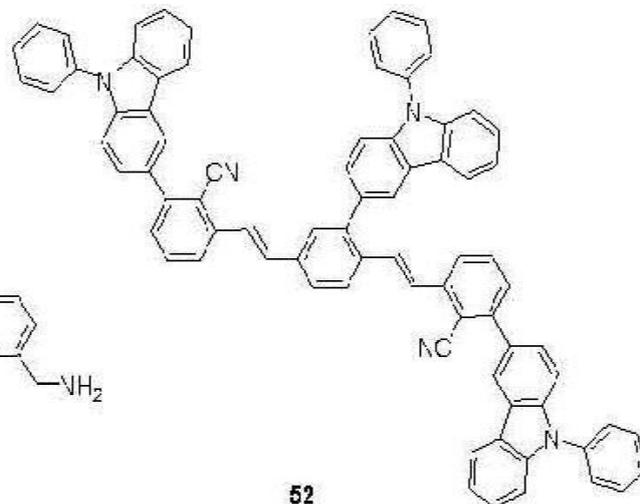
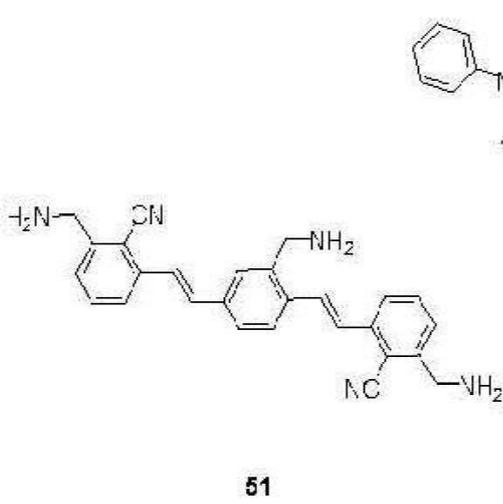
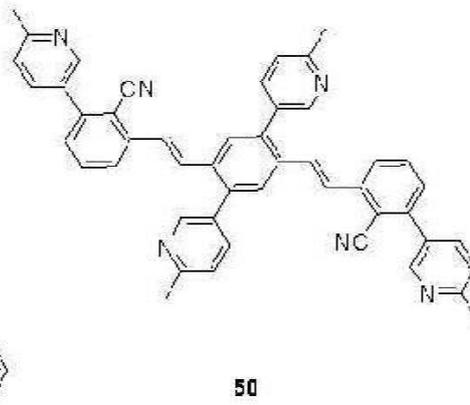
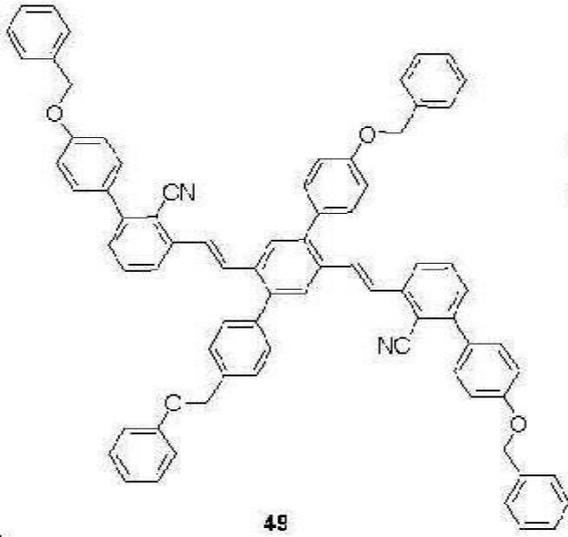
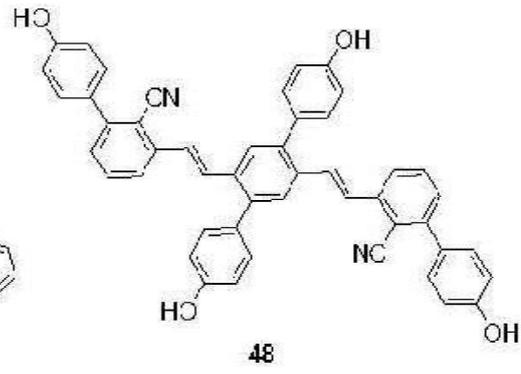
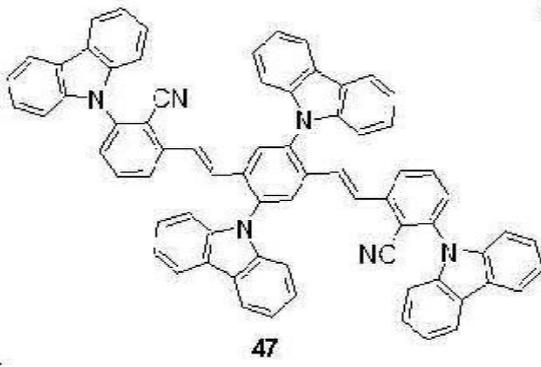


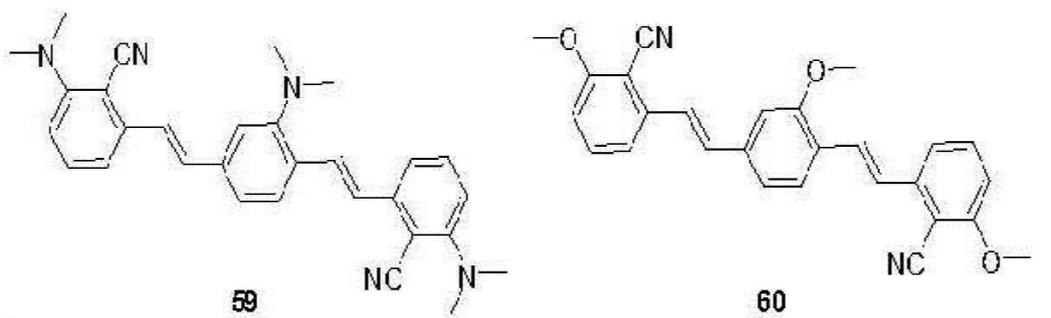
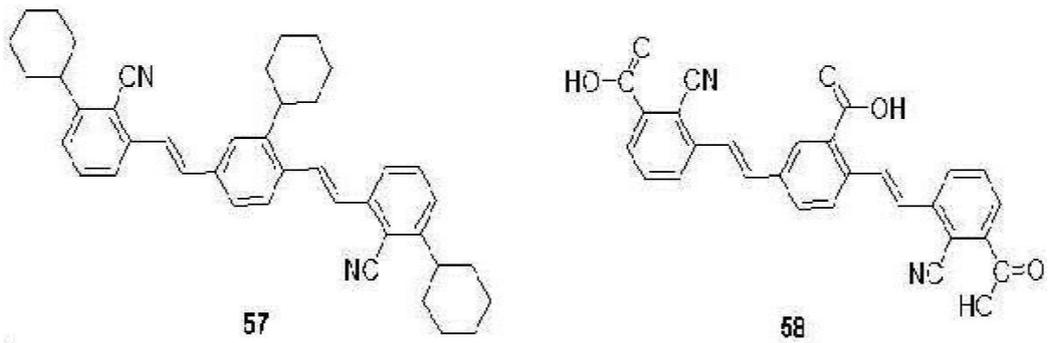
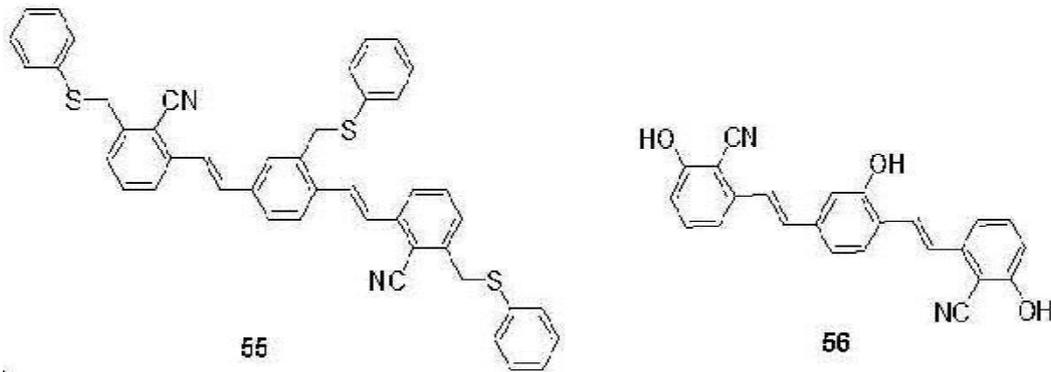
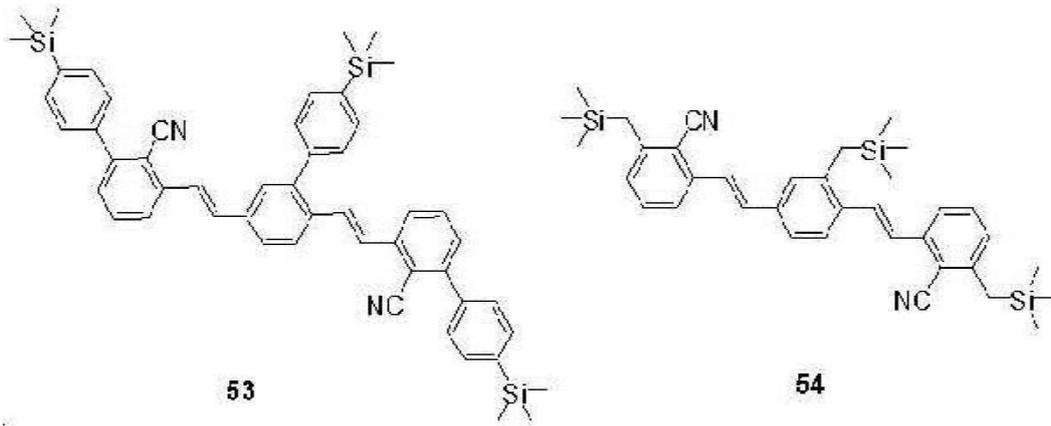
37

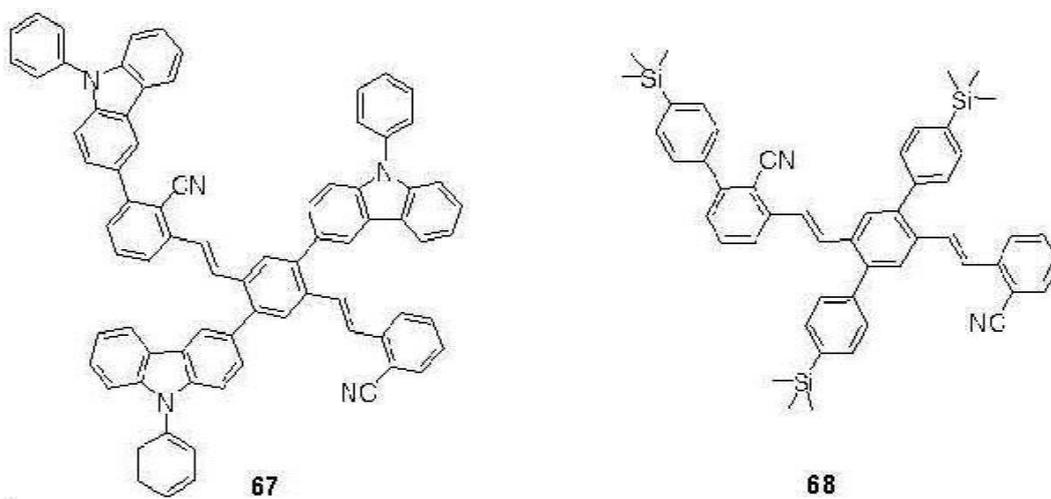
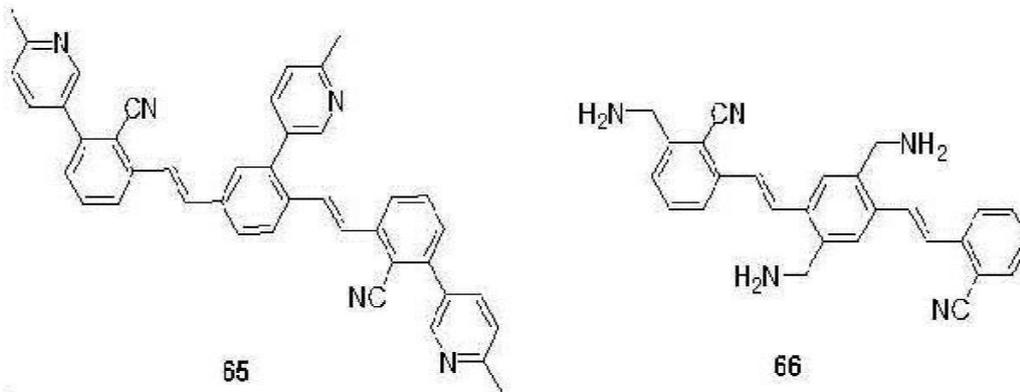
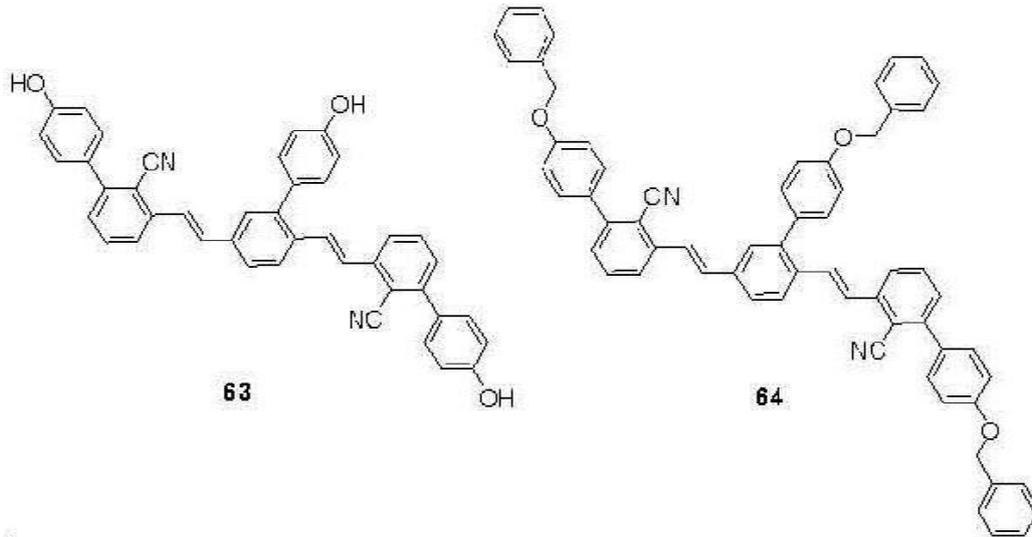
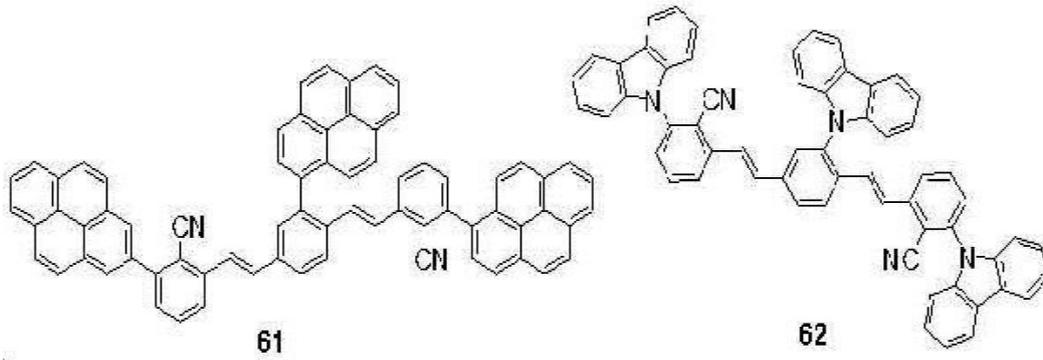


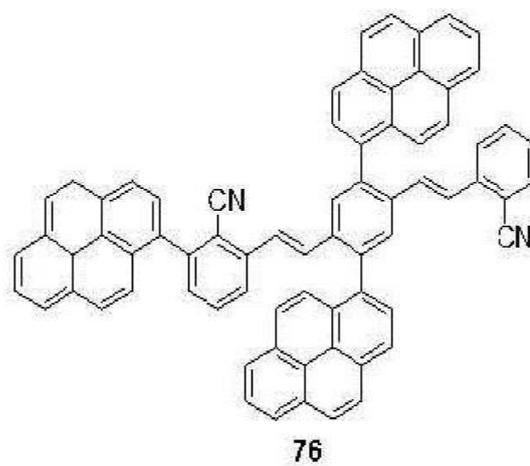
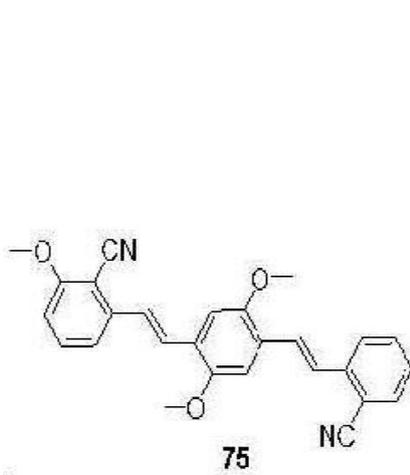
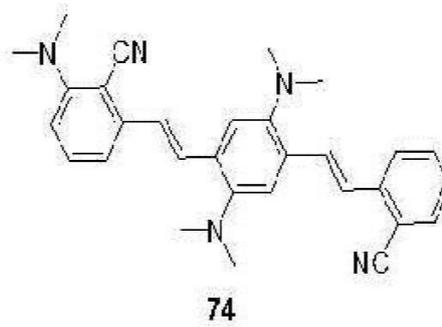
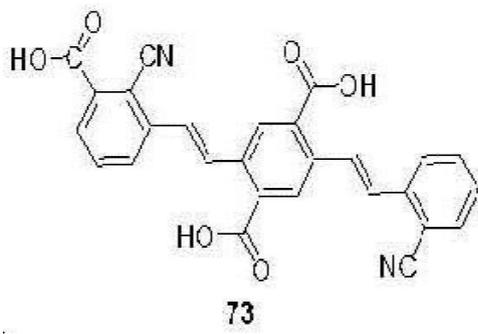
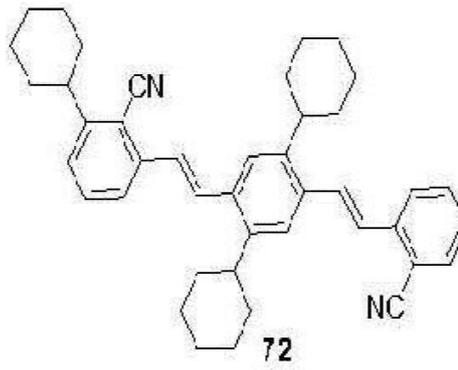
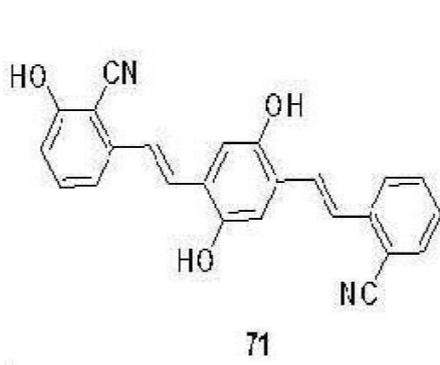
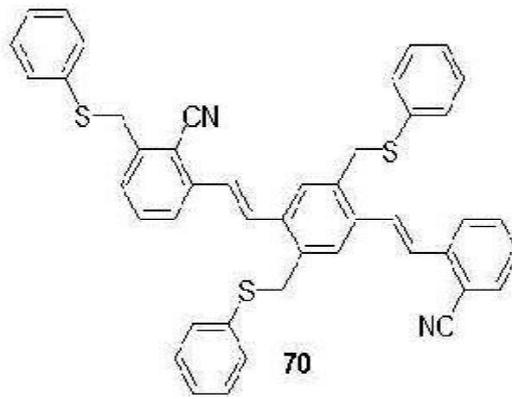
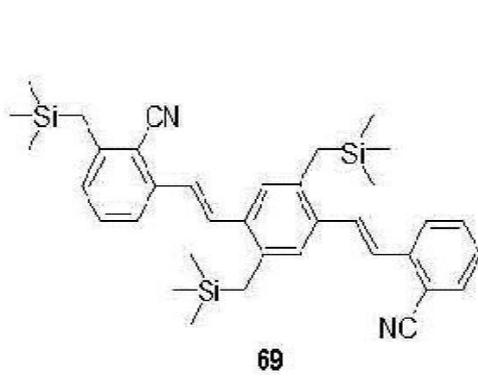
38

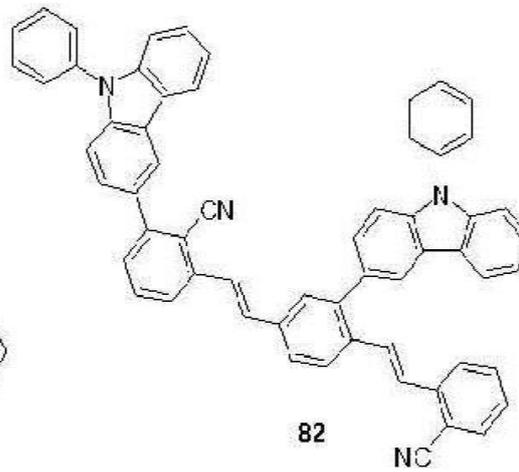
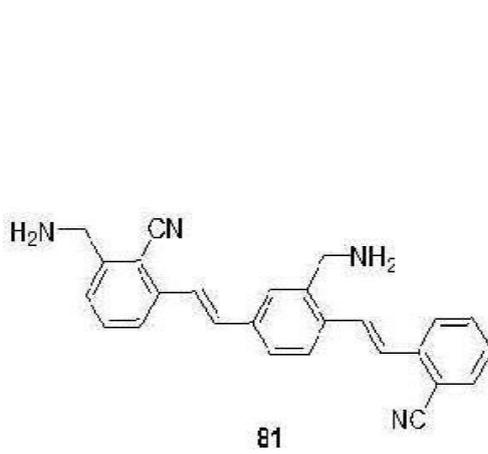
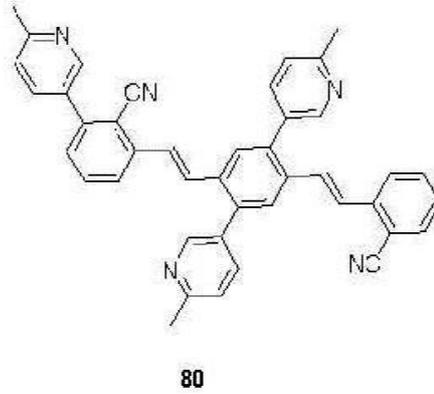
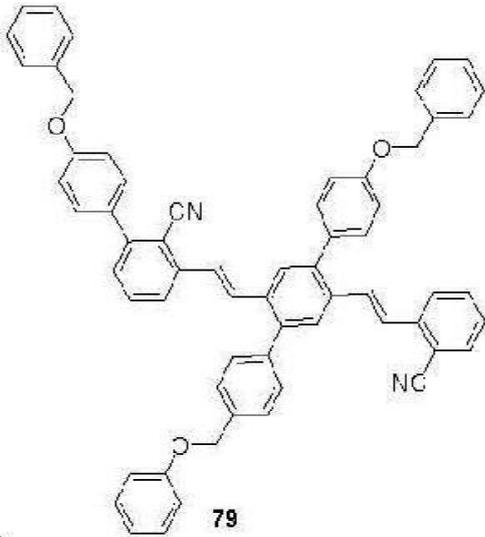
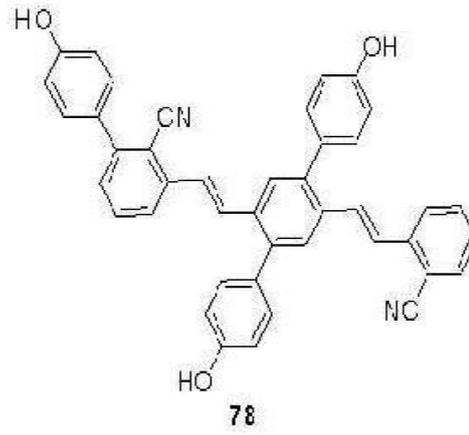
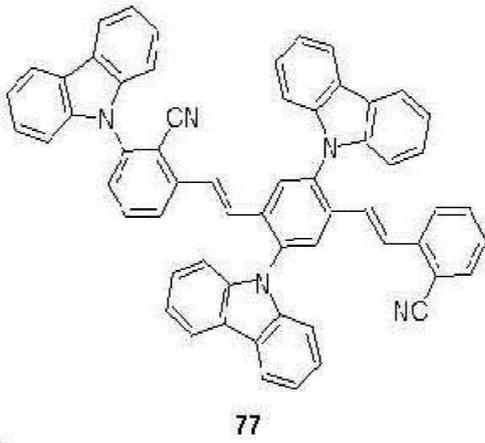


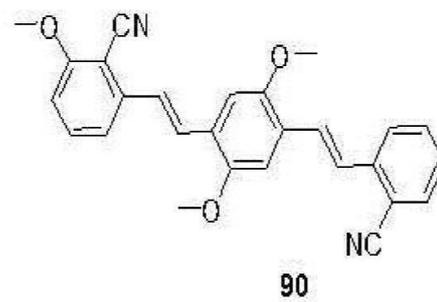
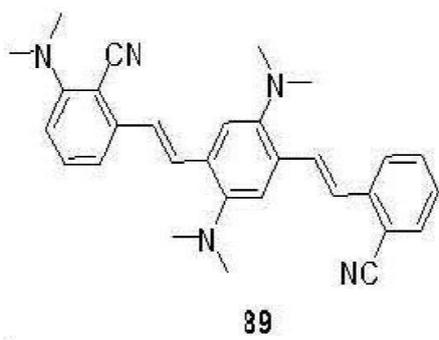
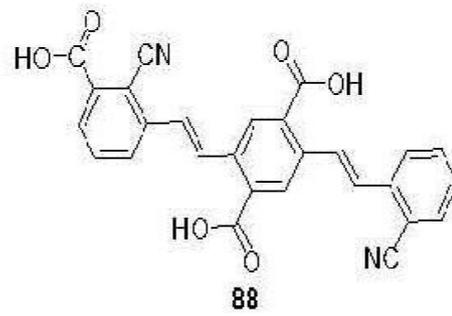
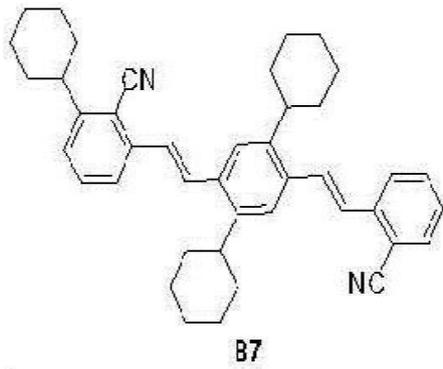
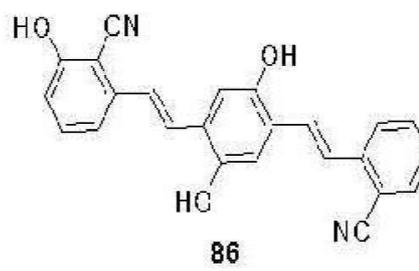
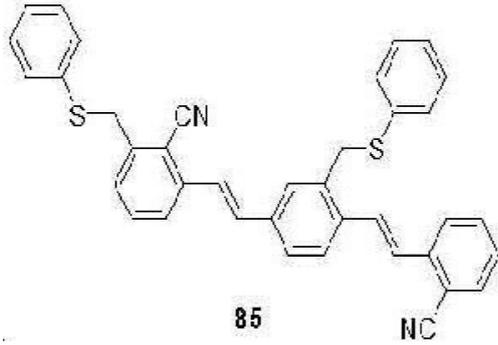
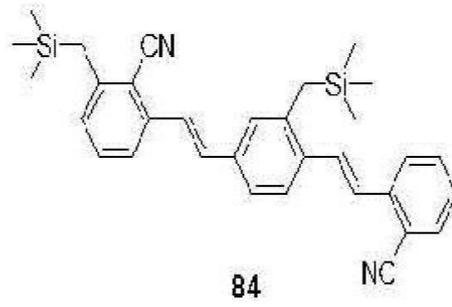
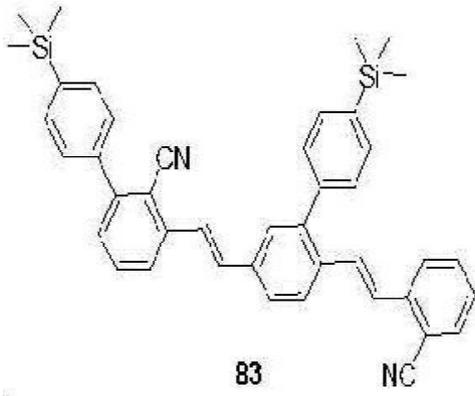


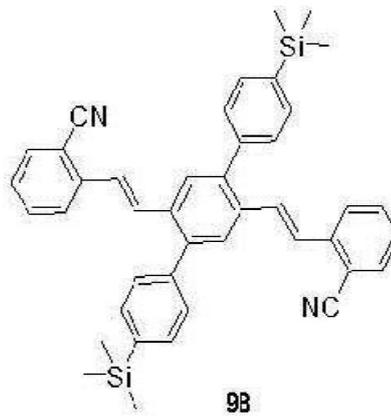
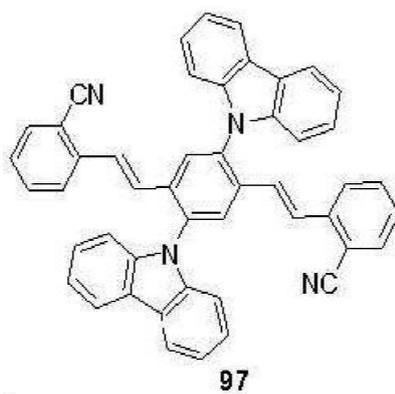
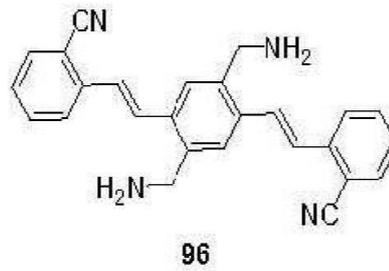
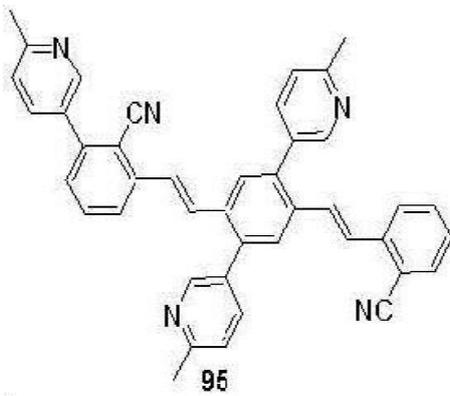
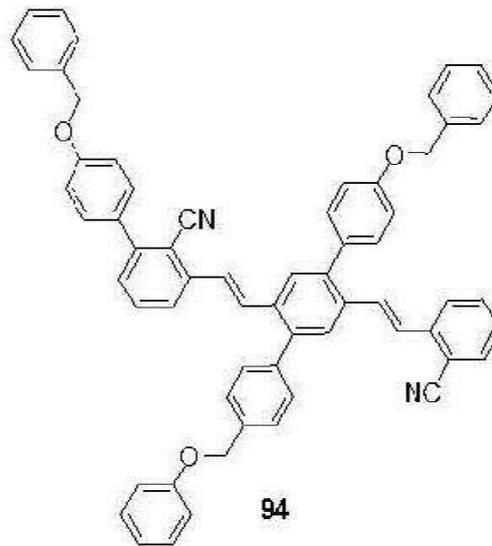
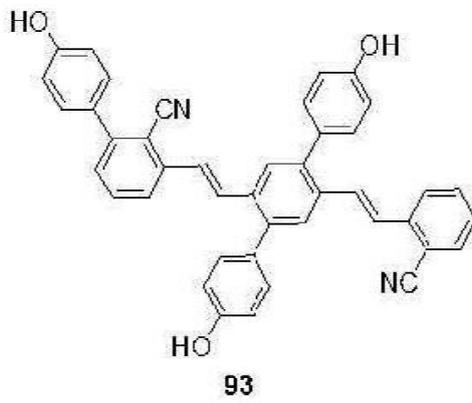
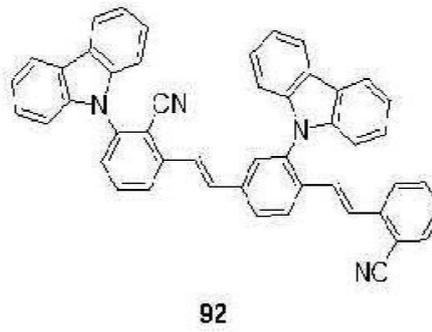
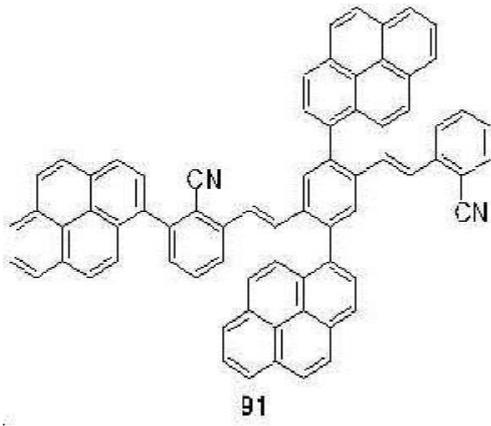


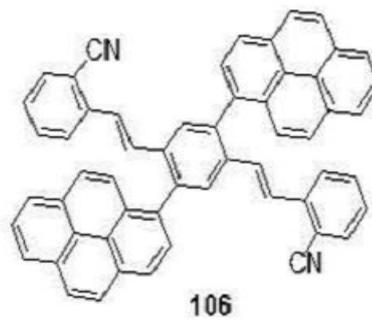
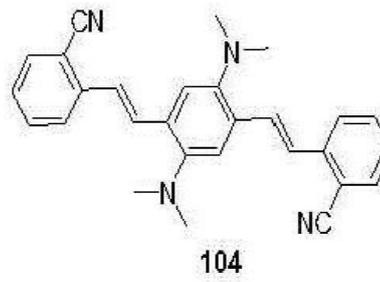
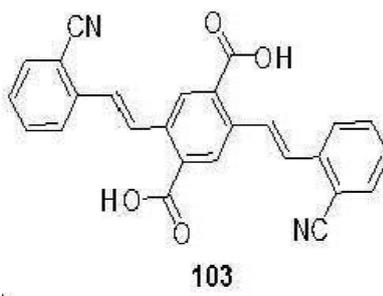
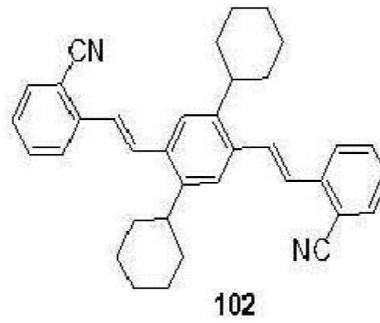
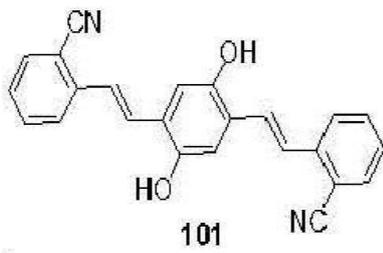
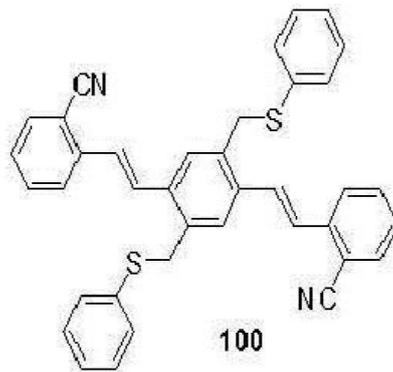
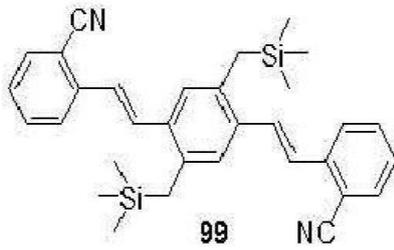


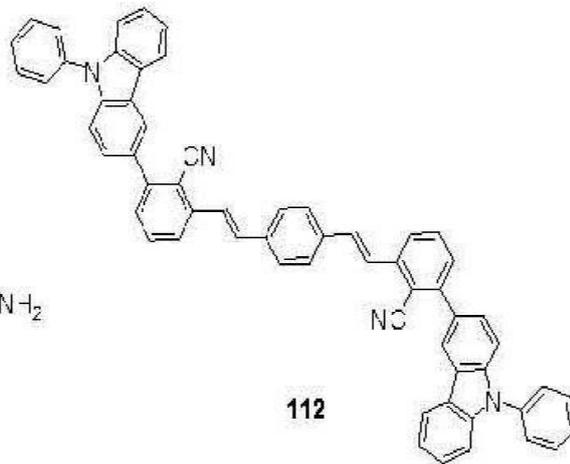
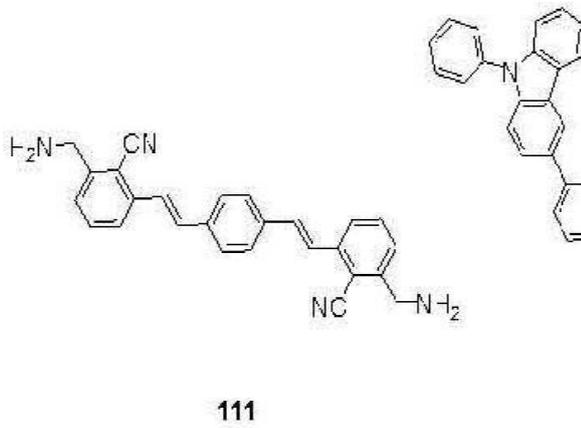
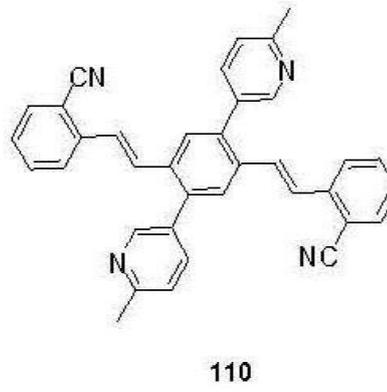
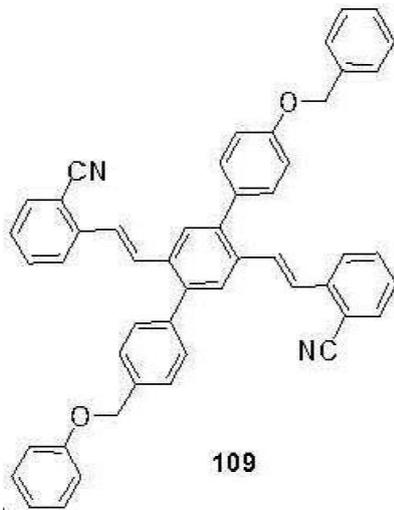
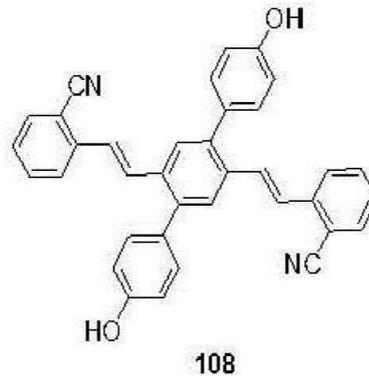
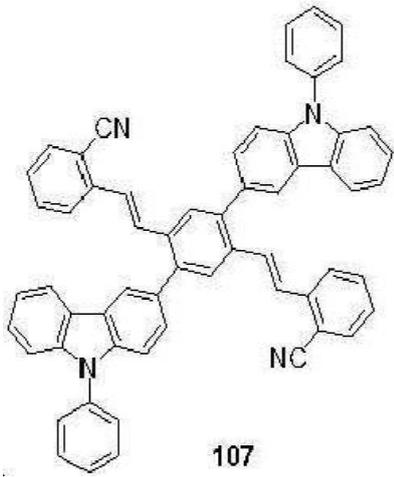


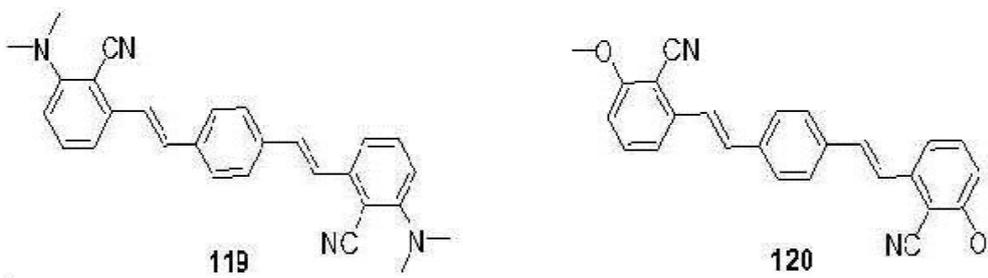
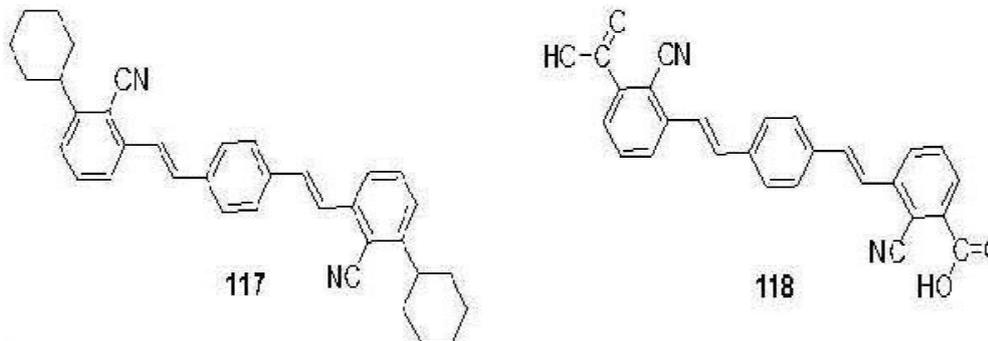
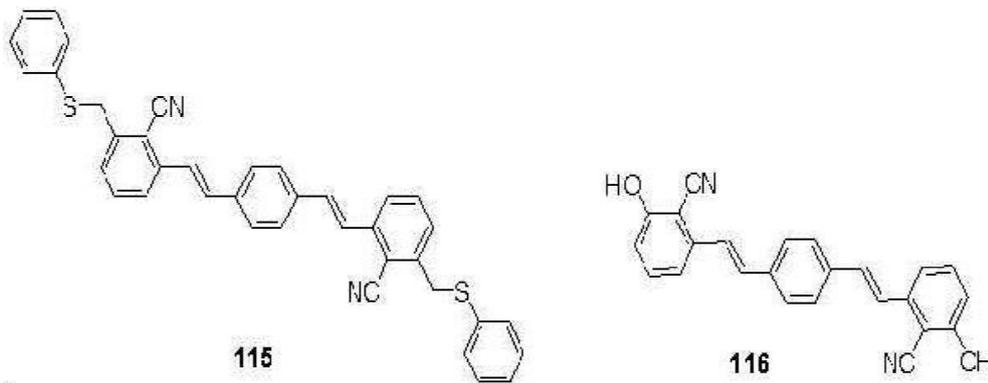
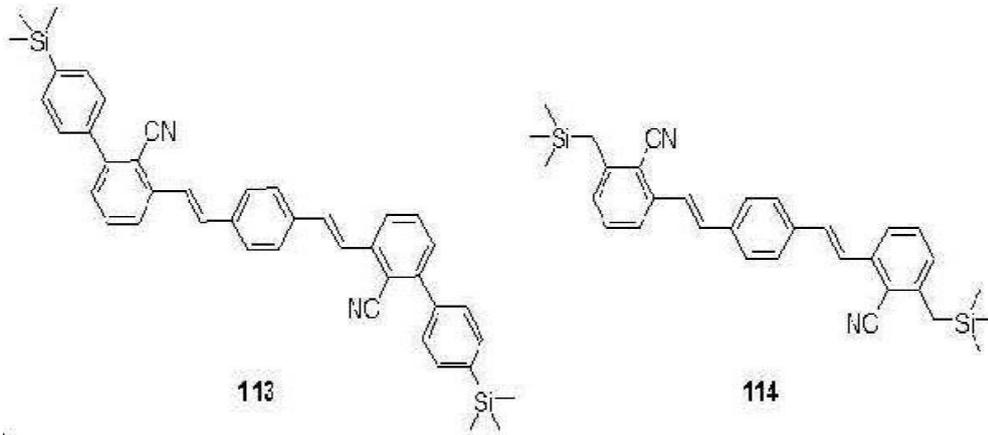


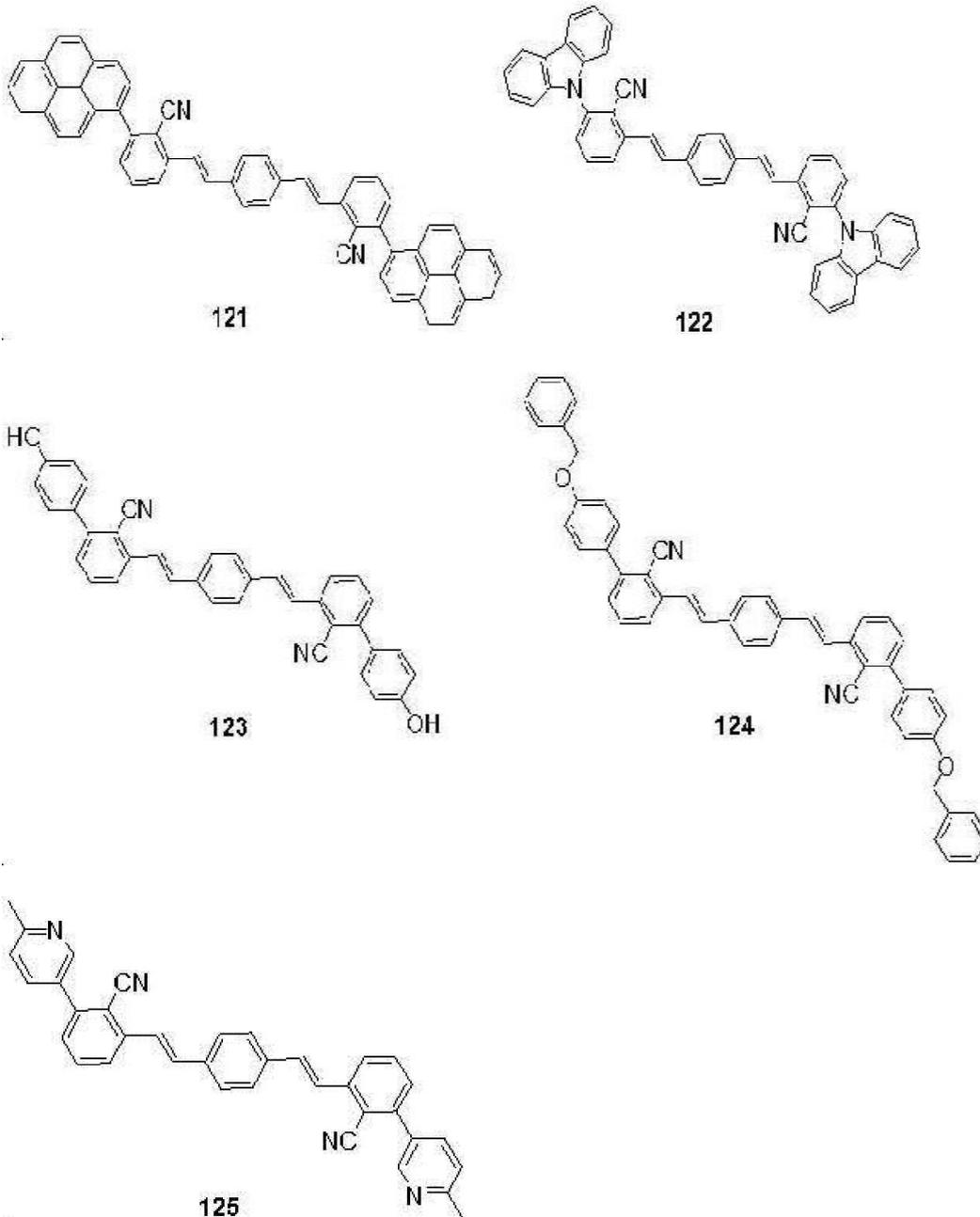












청구항 8

제1항, 제4항, 제6항, 및 제7항 중에서 선택된 어느 하나의 다이사이안스티릴 벤젠 유도체를 포함하는 형광재료.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 형광재료는 섬유염료용 형광재료, 유기전계발광소자용 발광재료, 염료감응형 태양전지용 염료재료, 전기/전자 재료용 잉크 조성물용 잉크재료, 및 표적물질 검출용 형광재료 중에서 선택된 어느 하나의 용도로 사용되는 것을 특징으로 하는 형광재료.

청구항 10

제8항의 형광재료를 포함하는 섬유제품.

청구항 11

제8항의 형광재료를 포함하는 전기소자 또는 전자소자.

발명의 설명

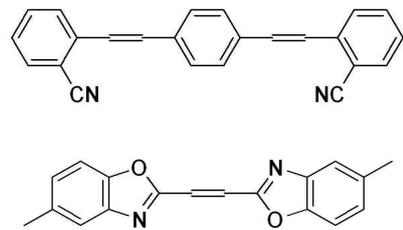
기술 분야

[0001] 본 발명은 형광재료용 화합물 및 이를 포함하는 형광염료에 관한 것으로, 보다 상세하게는 형광재료용 다이사이안스티릴 벤젠 유도체와 이를 포함하는 형광재료에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 세계 염료산업의 동향을 보면, 형광염료의 기술선도기업인 유럽업체들(Ciba-Geigy, Bayer, BASF 등)이 2000년대 초 사업을 재편한 이후, 형광염료 기술개발은 매우 미진한 상황이 지속되고 있으며, 현재 신규 형광염료의 개발은 거의 전무한 상태이다. 형광염료 시장은 크게 중국 등이 주도하고 있는 저가의 범용적인 형광염료 시장으로 변화되었으며, 중국의 규모의 경제에 의한 가격경쟁우위로 국내 염료시장을 위협하고 있는 실정이다. 그러나 섬유제품 관련 해외 바이어들은 저가의 중국산 형광염료들이 친환경 섬유제품을 생산하는데 충족시키지 못하기 때문에 환경인증을 받은 염료 시장으로 눈을 돌리고 있으며, 이에 대한 요구가 꾸준히 증가하고 있으므로 새로운 혁신 소재기술 개발이 필요한 실정이다.

[0003] 폴리에스터와 같은 합성섬유에 사용되는 다이사이안스티릴 벤젠(Dicyanstyryl benzene) 또는 벤조옥사졸(Benzoxazole) 분산형광염료들은 이들 분자에 존재하는 방향족화합물의 $\pi-\pi^*$ 상호작용(interaction)의 결과로 인해 아래에 나타낸 바와 같이 입체 구조학적으로 안정성을 유지하여 정렬도가 높은 분자 구조를 형성하고 있다.



[0004] 이러한 이유로 현재의 물리적인 분쇄로 이들 염료들을 수 마이크로미터 (0.1~1 μ m)사이의 크기까지 분쇄하기 위한 공정시간이 20~24시간 정도 소요되어 생산비용 증가를 초래하고 있으며, 이들 제품들의 분산성 및 저장 안정성을 높이기 위해 다량의 분산제와 증점제를 사용하기 때문에 미염착된 염료와 더불어 폐수 발생의 주원인이 되고 있다.

[0006] 또한 종래 형광재료용 화합물인 다이사이안스티릴 벤젠(Dicyanstyryl benzene) 또는 벤조옥사졸(Benzoxazole)의 경우에는 형광수율이 개선이 더욱 더 필요한 상황이다. 형광 수율이 크게 개선된 형광염료는 필요 사용량을 줄일 수 있어 환경오염을 줄이고 경제성을 크게 향상시킬 수 있으므로, 종래 개발된 형광재료용 화합물의 형광 수율을 향상시킬 필요가 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

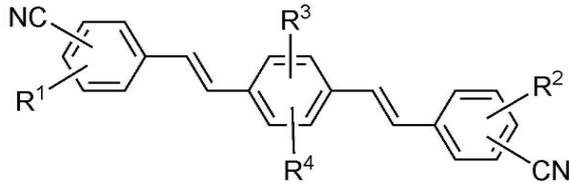
[0007] 본 발명의 목적은 새로운 형광재료용 화합물의 개발에 따라 형광수율을 현저히 개선하여 사용량을 획기적으로 저감함으로써 환경오염을 최소화하고 경제성을 향상시키는 데 있다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명의 하나의 측면에 따르면,

[0009] 하기 구조식 1로 표시되는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체가 제공된다.

[0010] [구조식 1]



[0011]

[0012] 구조식 1에서,

[0013]

R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이거나, 또는 R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하고,

[0014]

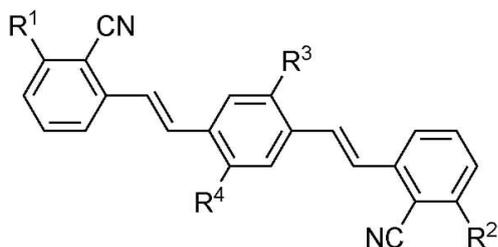
R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이거나, 또는 R^3 및 R^4 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성한다.

[0015]

바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체는 하기 구조식 2로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[0016]

[구조식 2]



[0017]

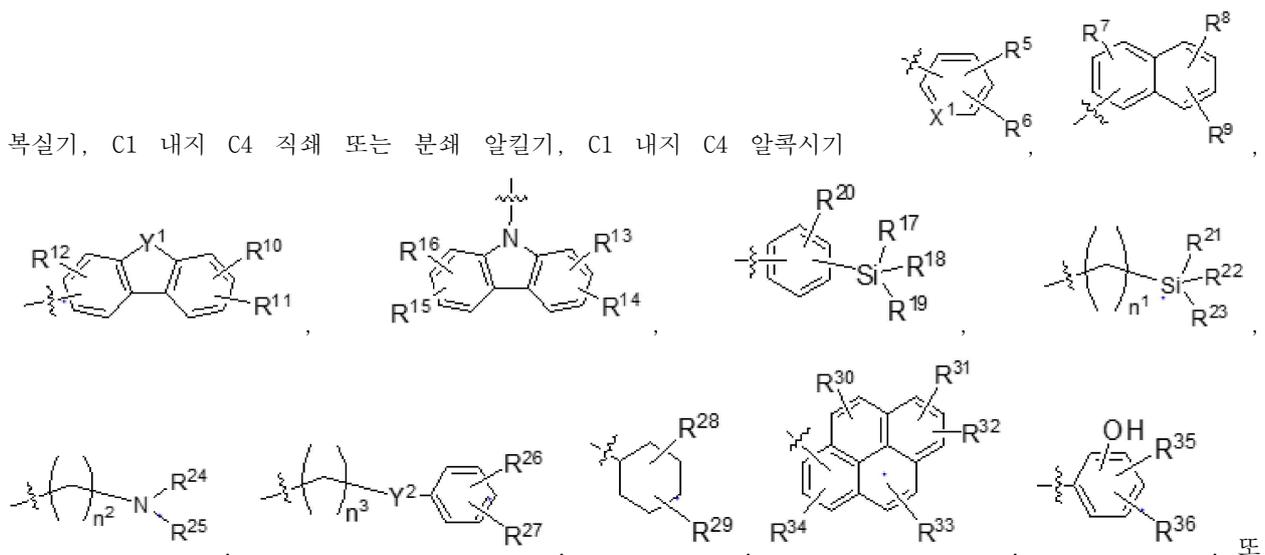
[0018] 구조식 2에서,

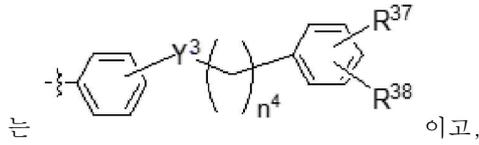
[0019] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이고,

[0020] R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이다.

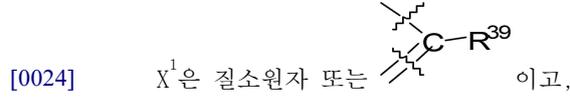
[0021] 바람직하게는, 구조식 2에서 R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기인 것을 특징으로 한다.

[0022] 더욱 바람직하게는, R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르

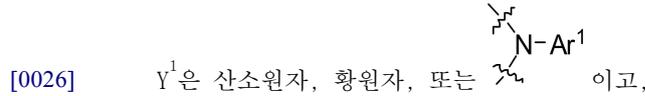




[0023] n^1 내지 n^4 는 각각 독립적으로 0 내지 4 중에서 선택된 어느 하나의 정수이고,



[0025] R^{39} 는 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,



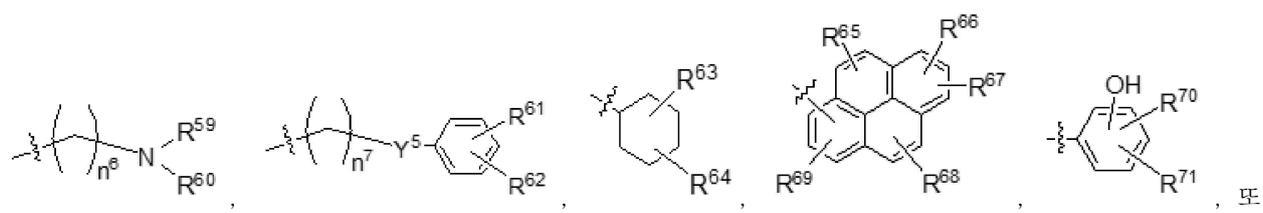
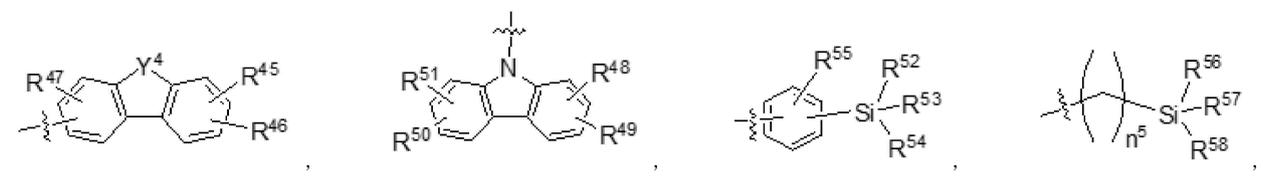
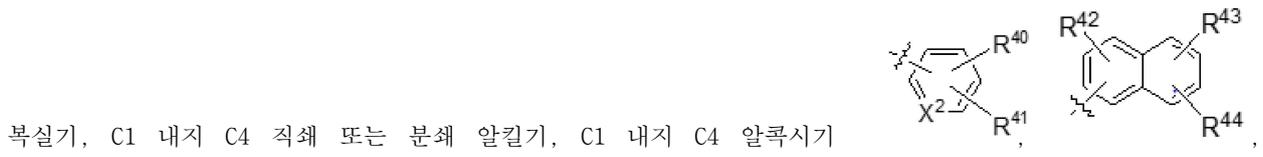
[0027] Ar^1 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

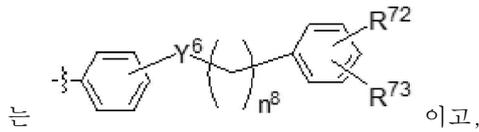
[0028] Y^2 및 Y^3 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 산소원자 또는 황원자이고,

[0029] R^5 내지 R^{38} 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 한다.

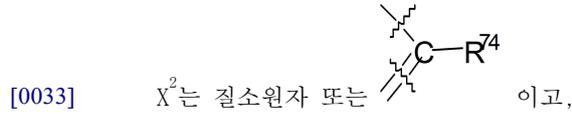
[0030] 바람직하게는, 구조식 2에서 R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기인 것을 특징으로 한다.

[0031] 더욱 바람직하게는, R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르

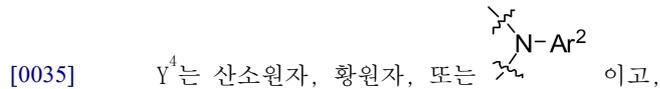




[0032] n^5 내지 n^8 은 각각 독립적으로 0 내지 4 중에서 선택된 어느 하나의 정수이고,



[0034] R^{74} 는 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

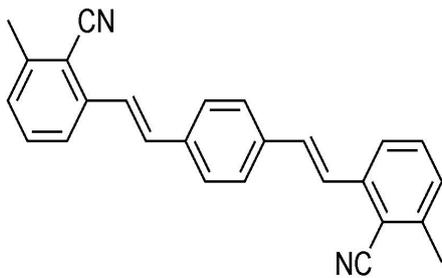


[0036] Ar^2 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

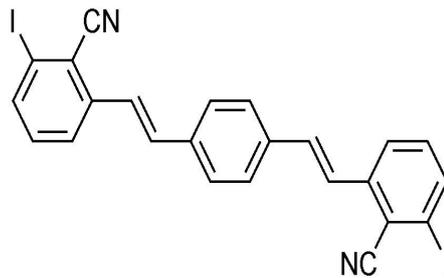
[0037] Y^5 및 Y^6 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 산소원자 또는 황원자이고,

[0038] R^{40} 내지 R^{73} 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 한다.

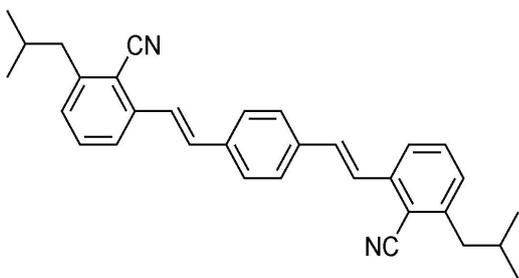
[0039] 상기 구조식 2로 표시되는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체는 하기 화합물 1 내지 125 중에서 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 한다.



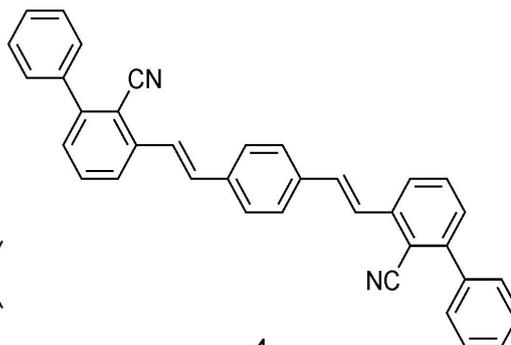
1



2



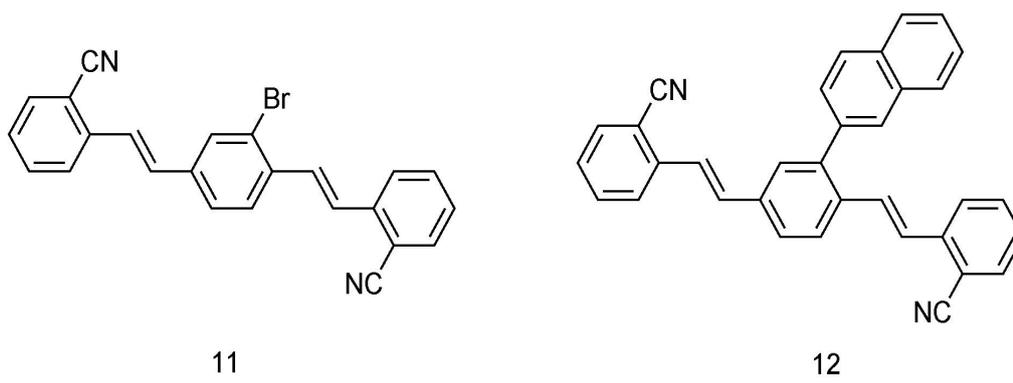
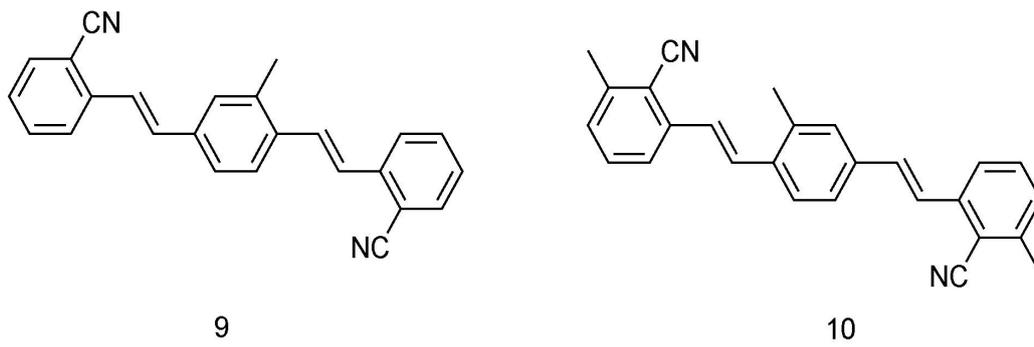
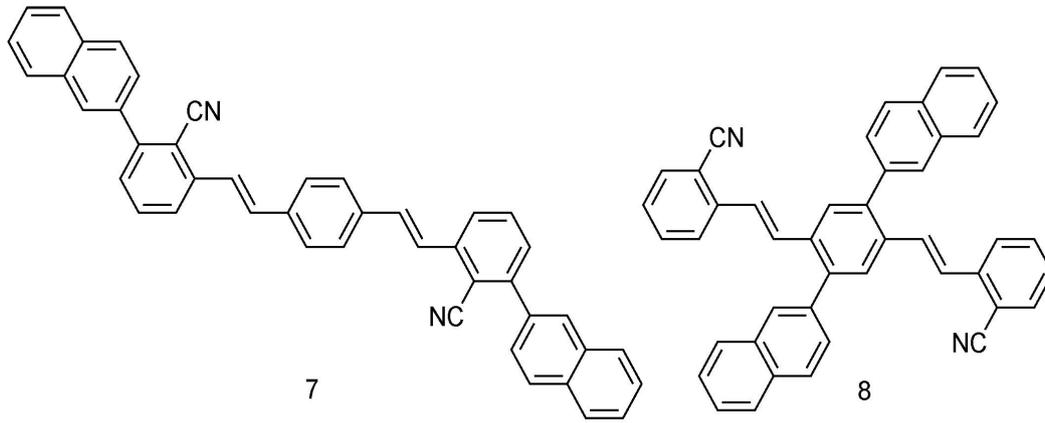
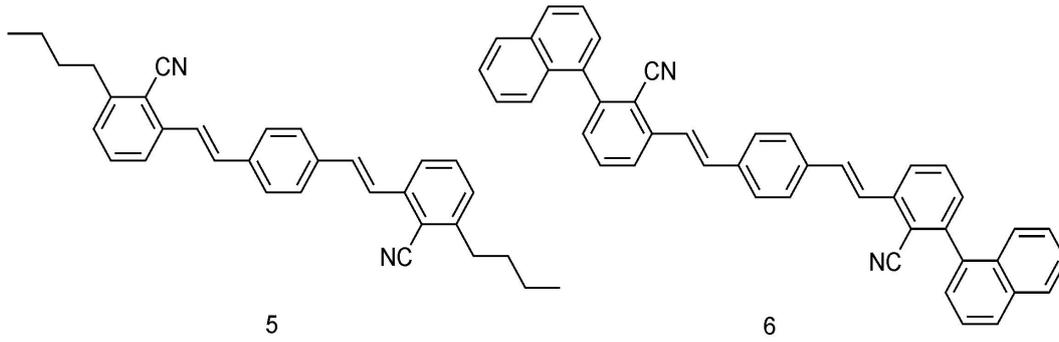
3

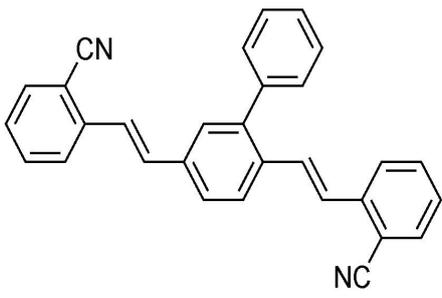


4

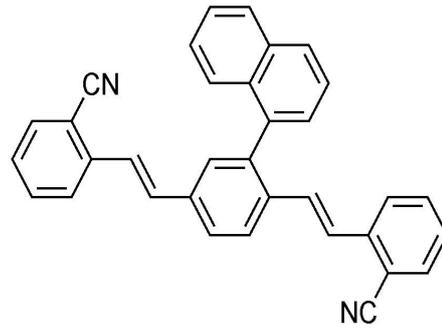
[0040]

[0041]



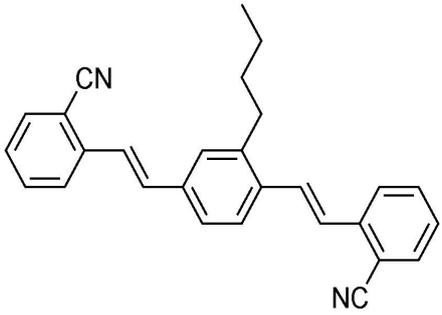


13

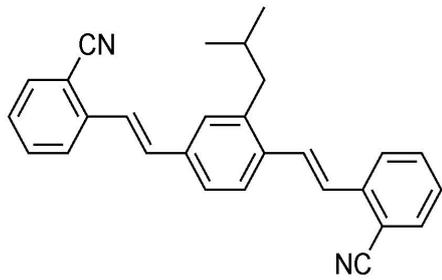


14

[0046]

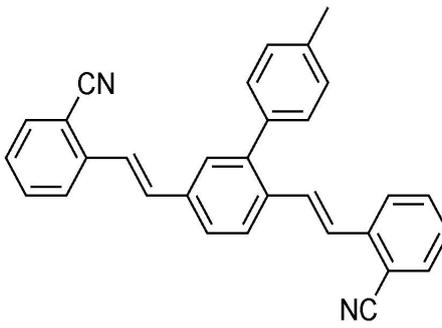


15

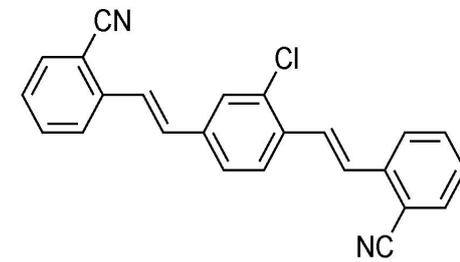


16

[0047]

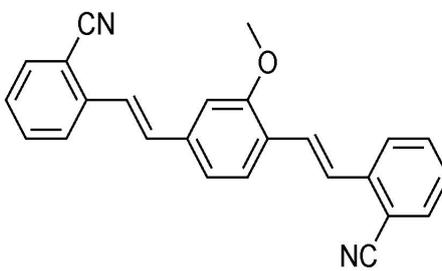


17

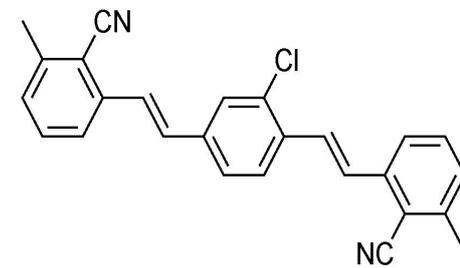


18

[0048]

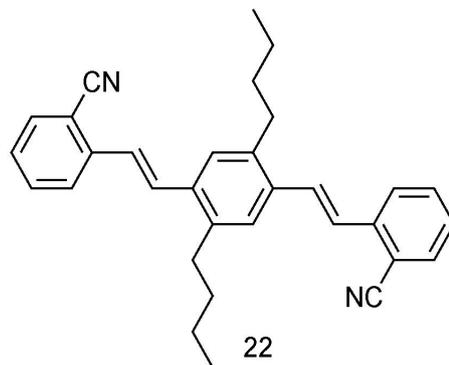
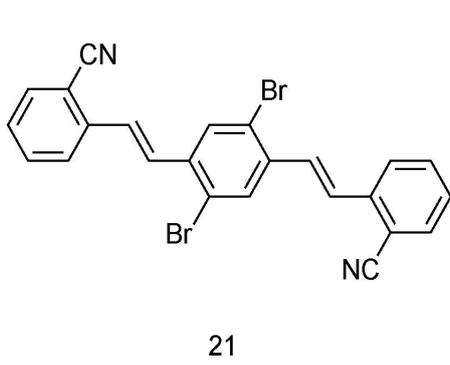


19

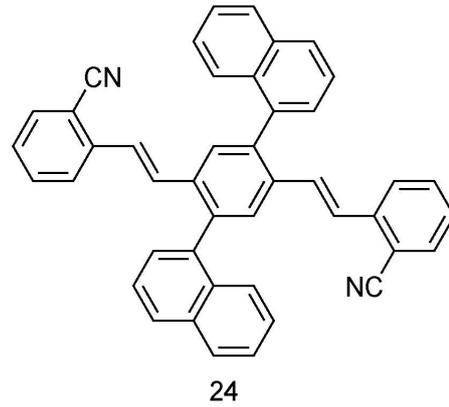
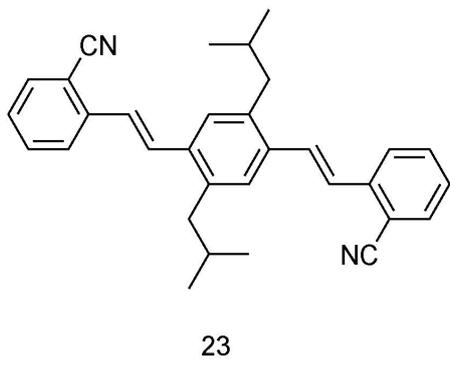


20

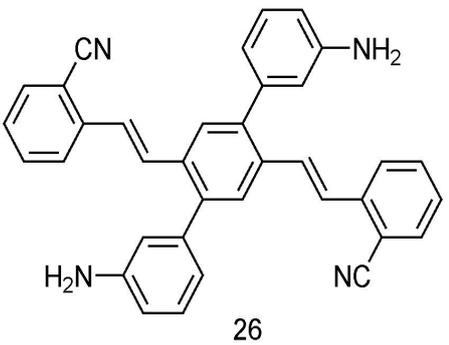
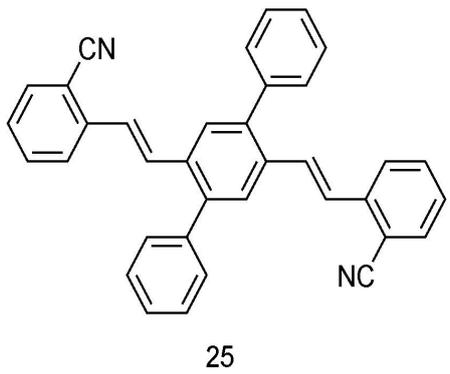
[0049]



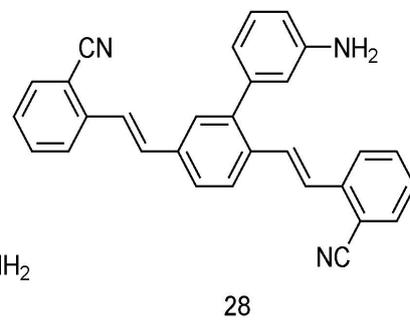
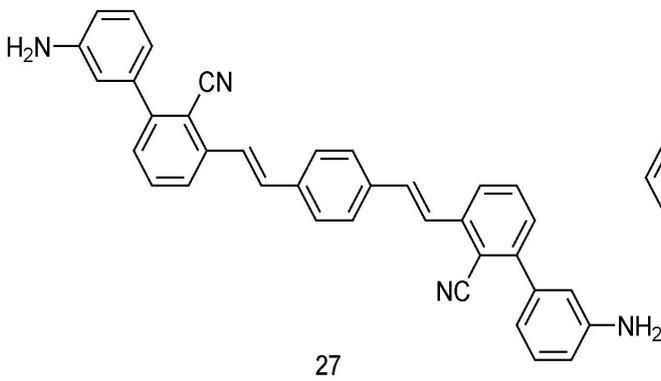
[0050]



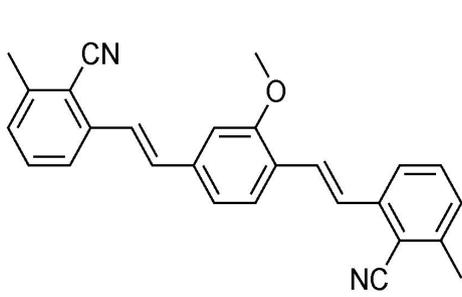
[0051]



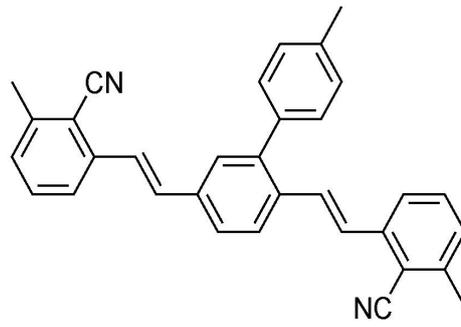
[0052]



[0053]

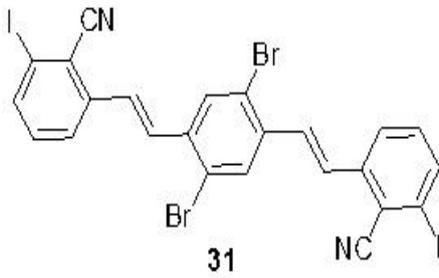


29

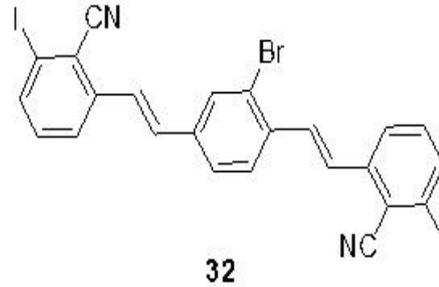


30

[0054]

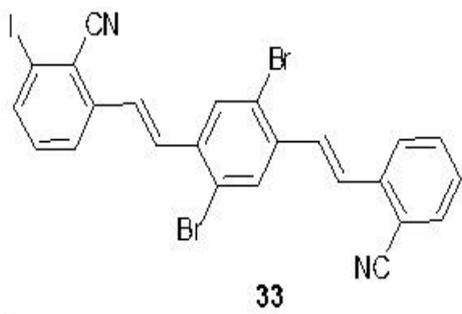


31

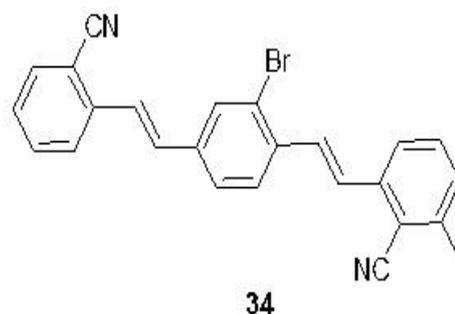


32

[0055]

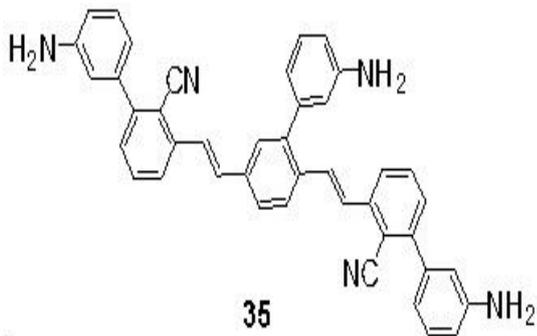


33

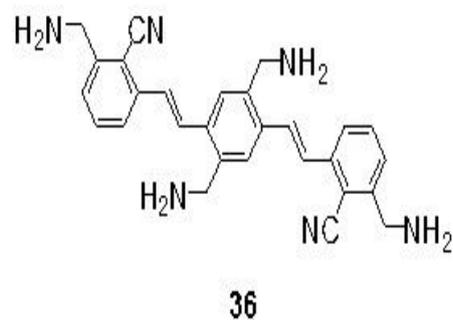


34

[0056]

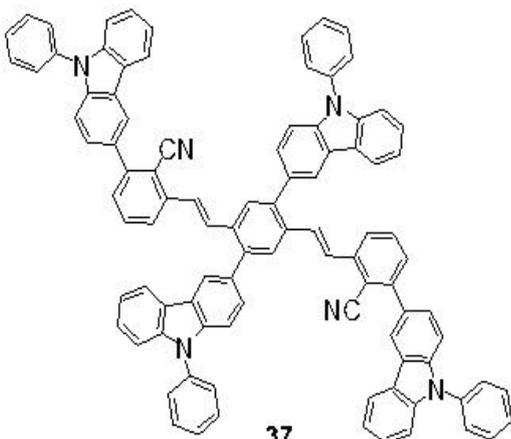


35

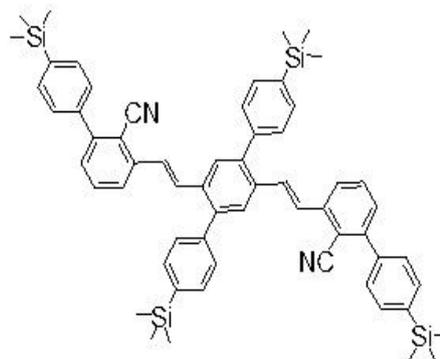


36

[0057]

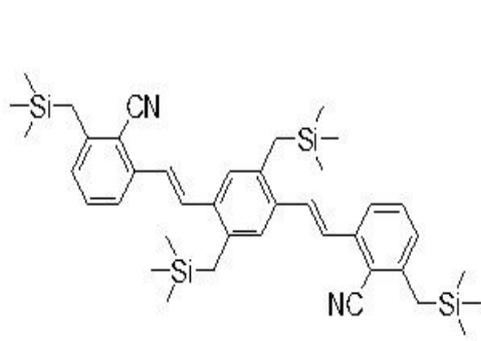


37

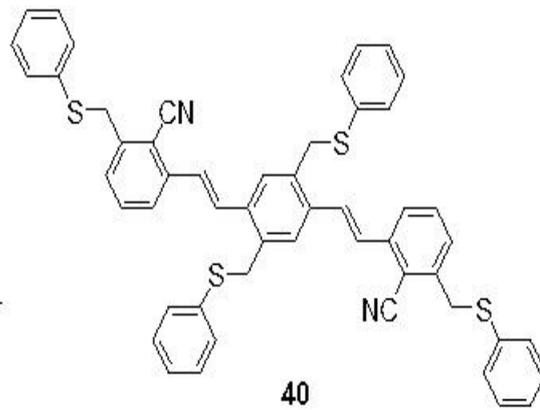


38

[0058]

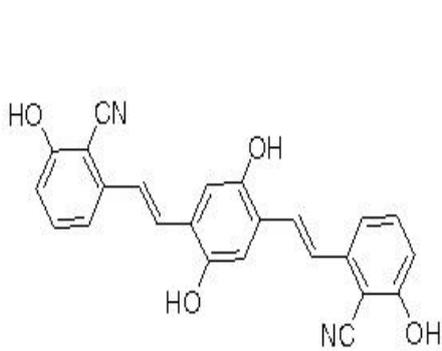


39

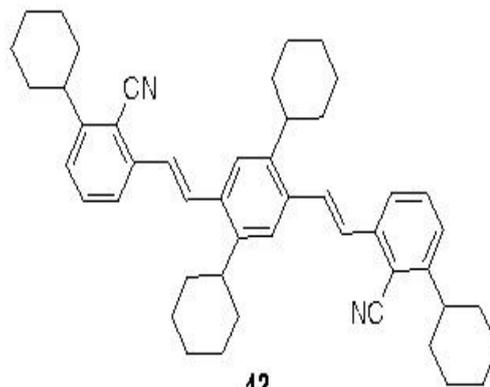


40

[0059]

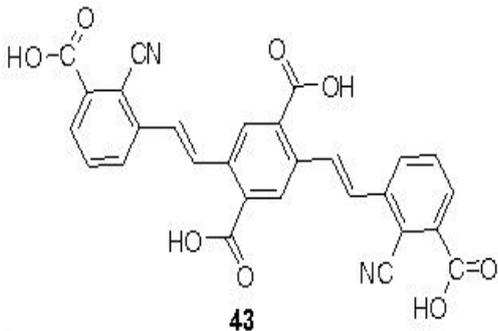


41

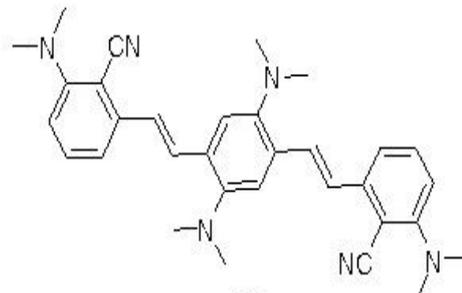


42

[0060]

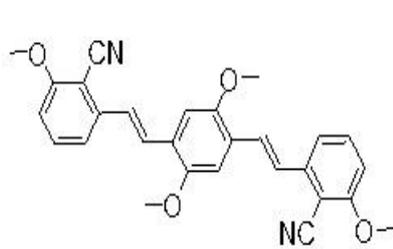


43

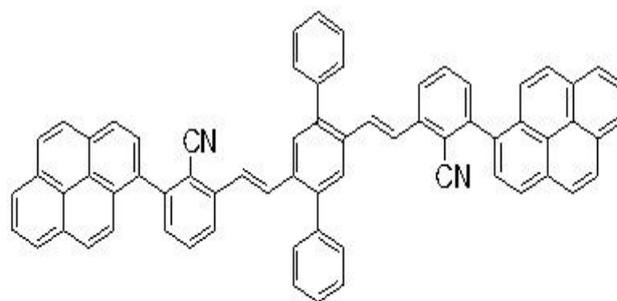


44

[0061]

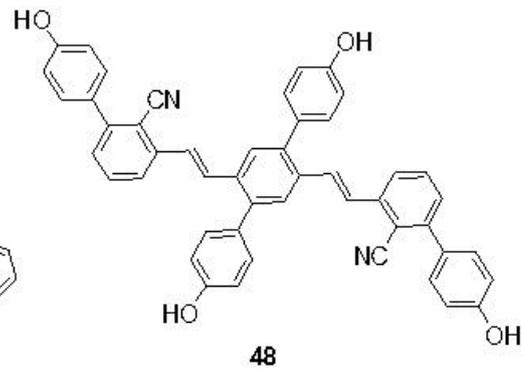
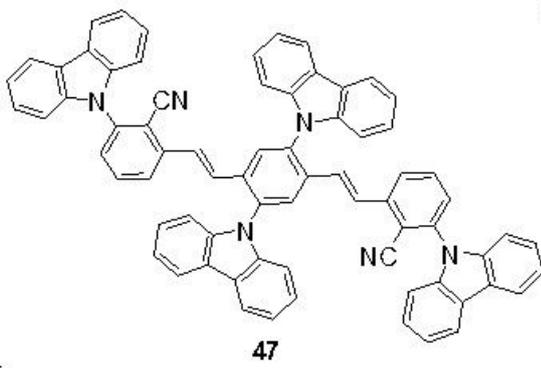


45

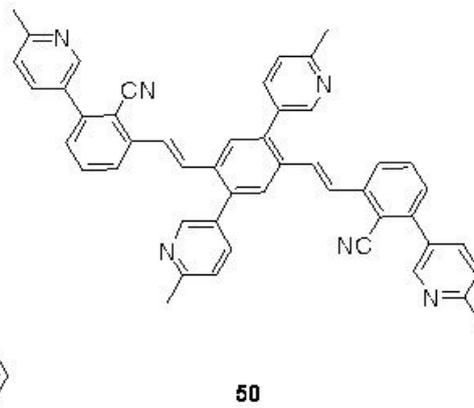
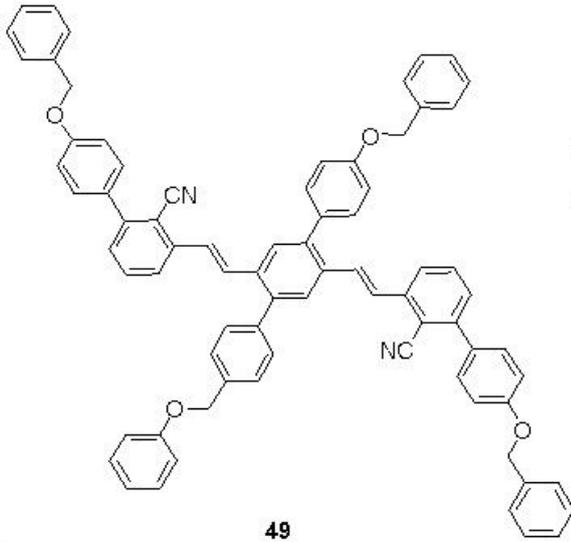


46

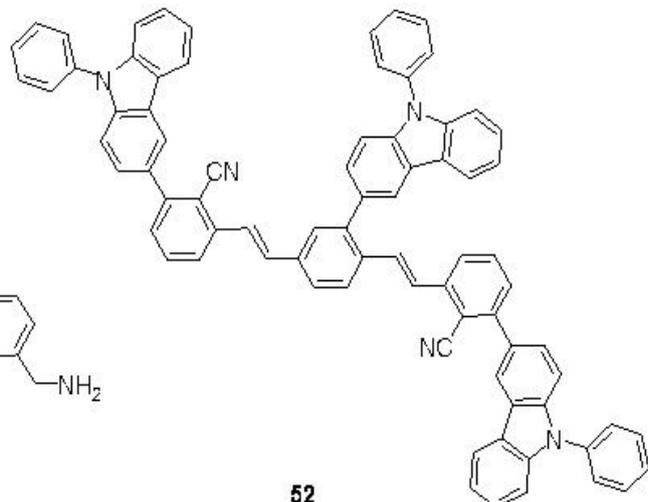
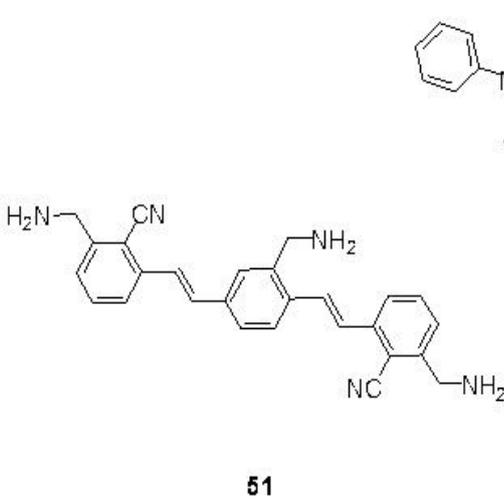
[0062]



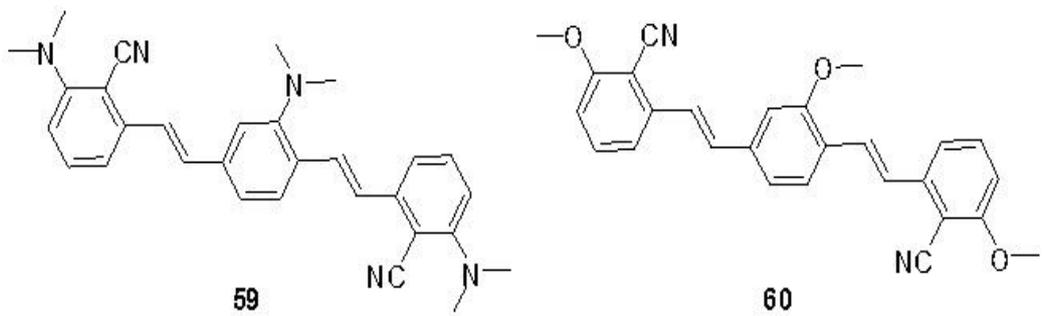
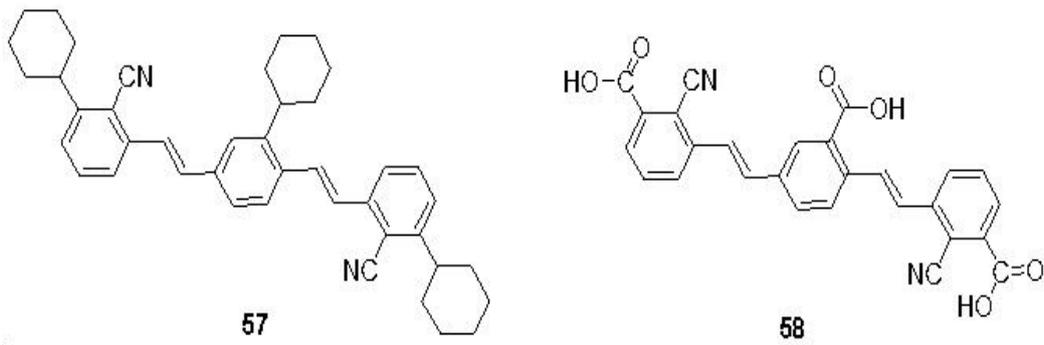
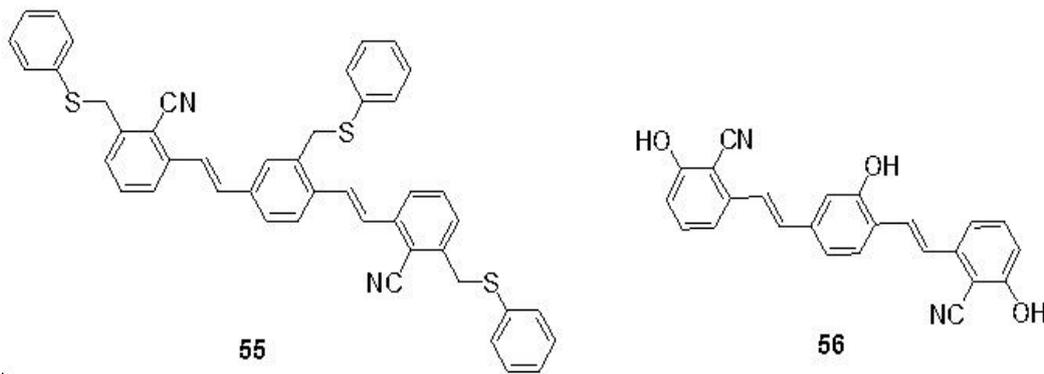
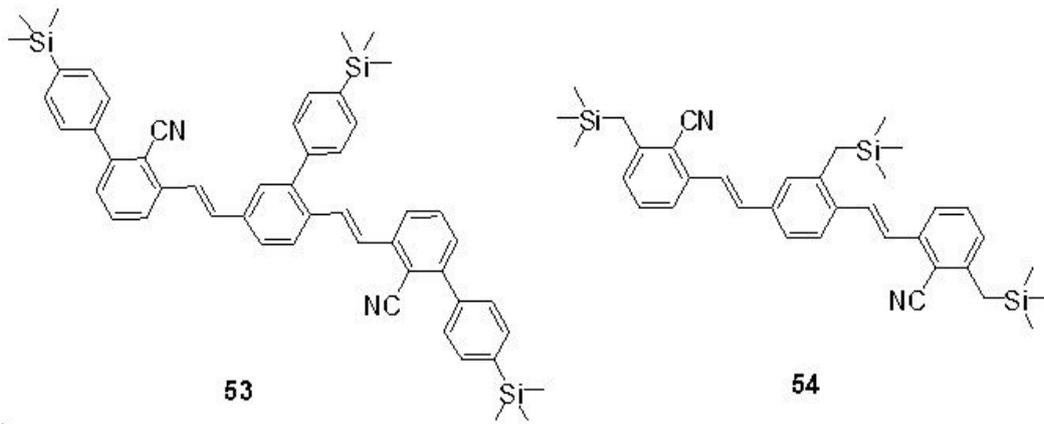
[0063]

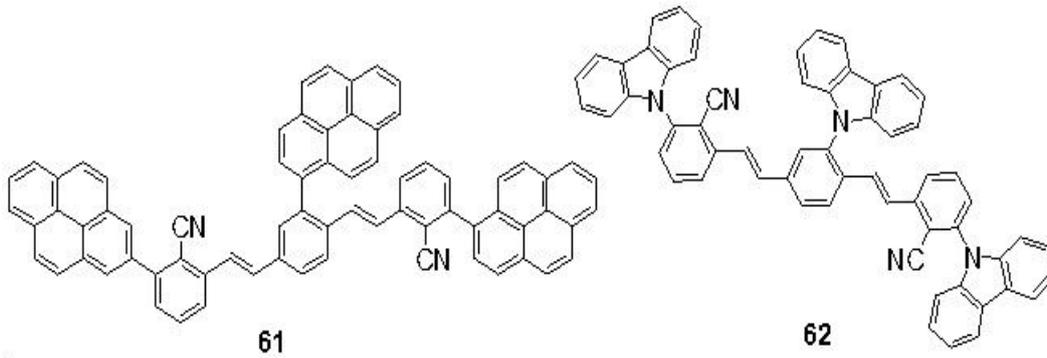


[0064]

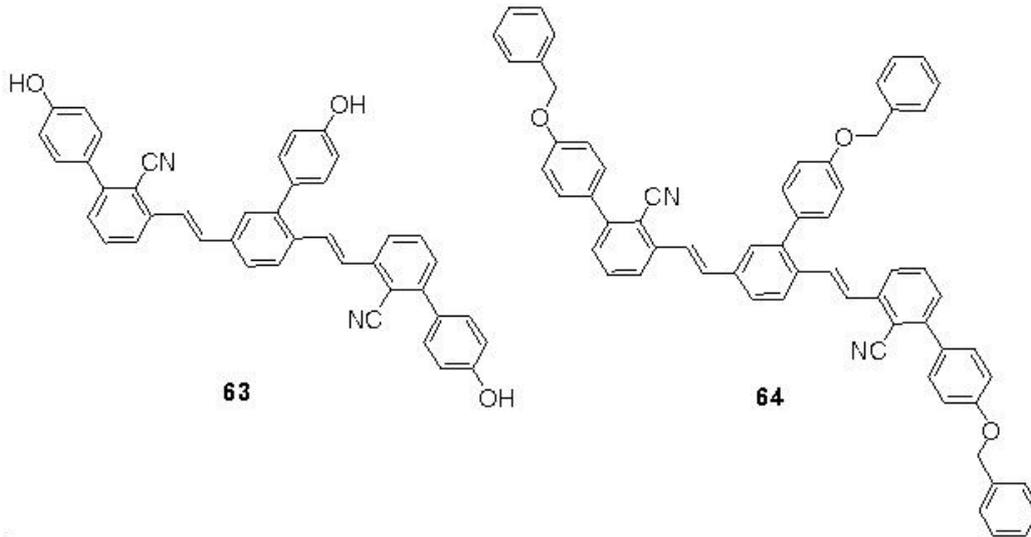


[0065]

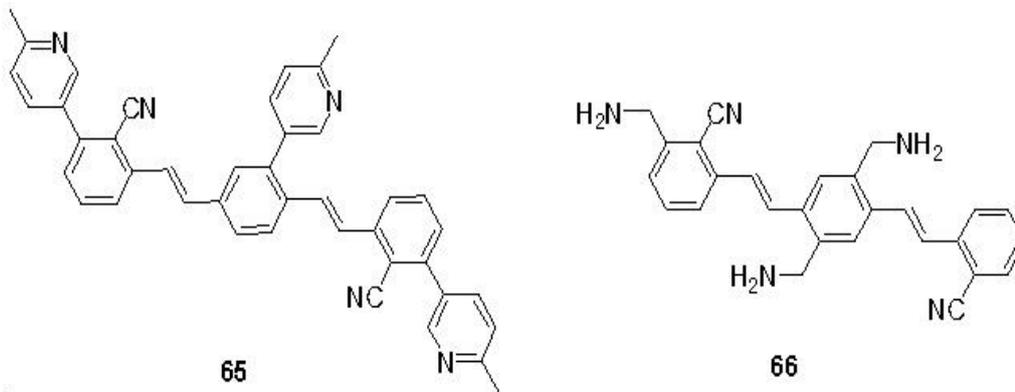




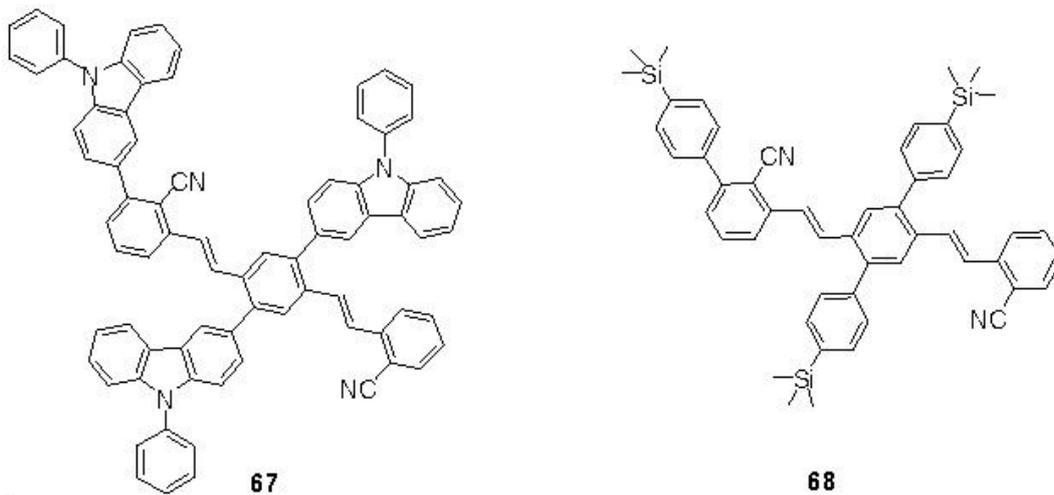
[0070]



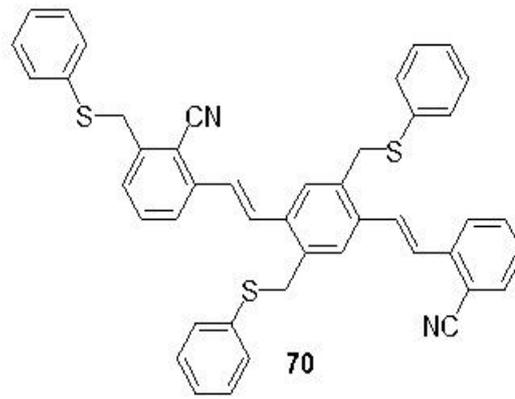
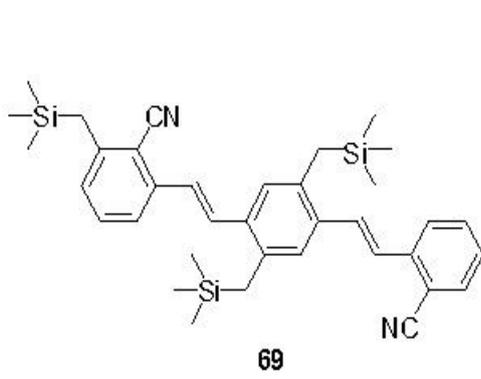
[0071]



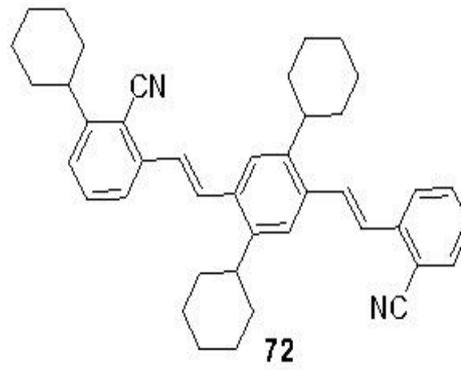
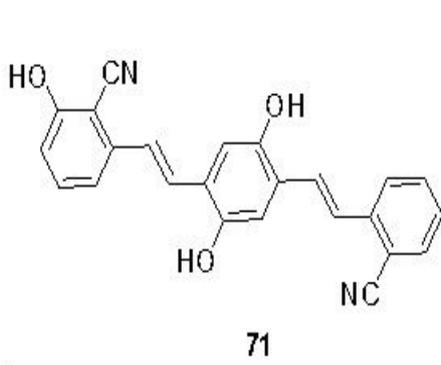
[0072]



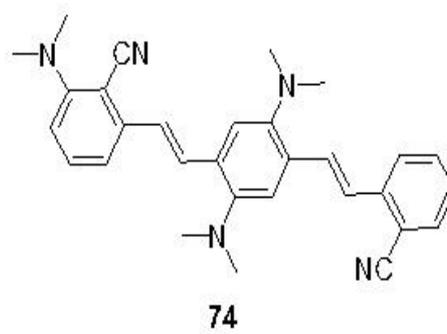
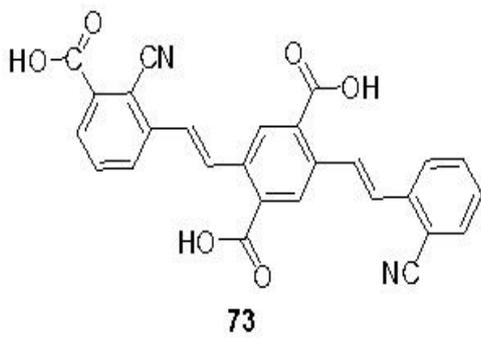
[0073]



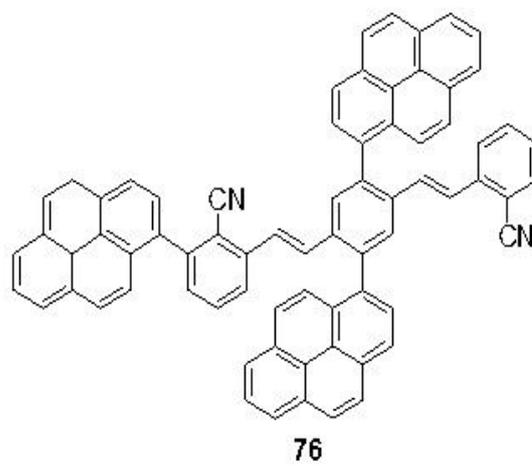
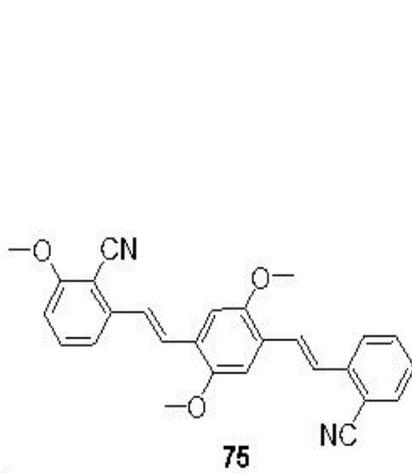
[0074]



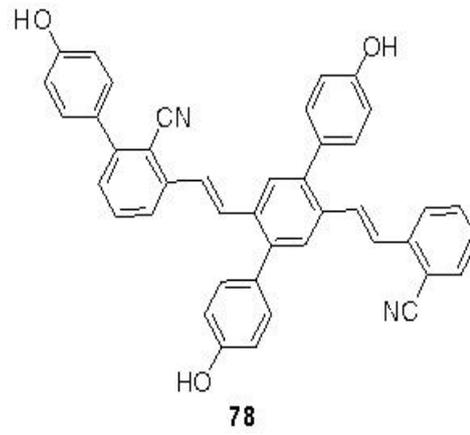
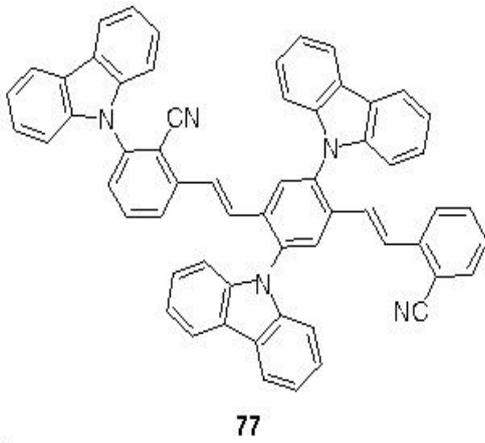
[0075]



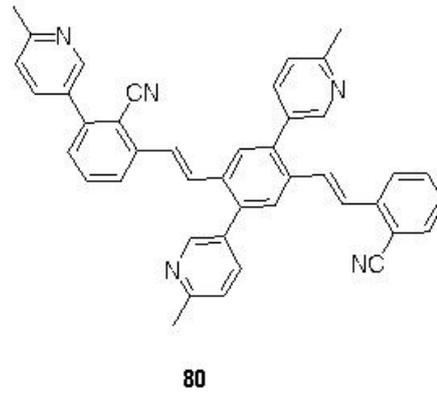
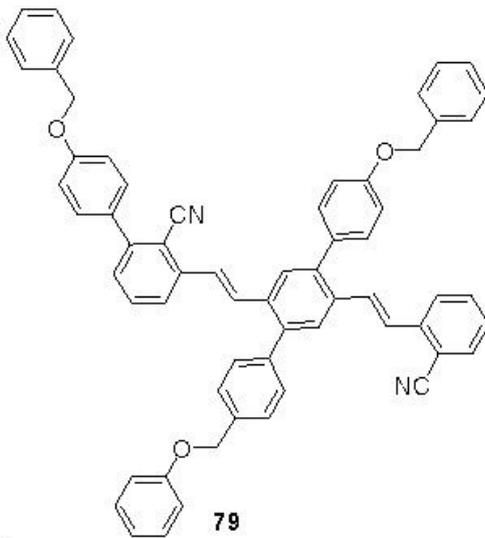
[0076]



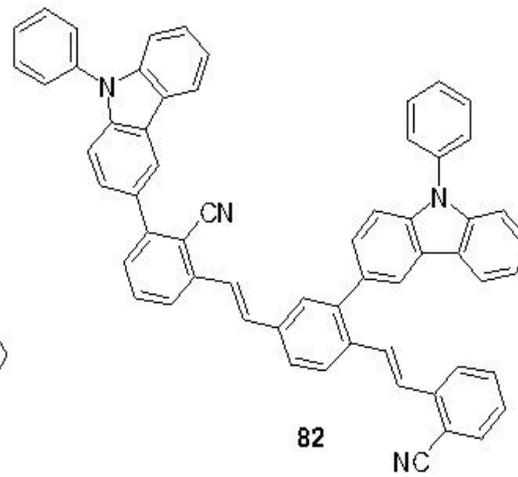
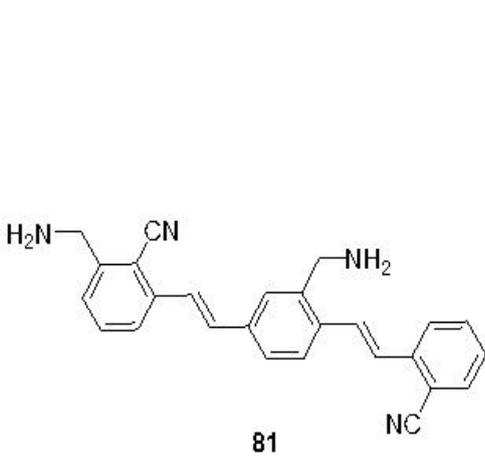
[0077]



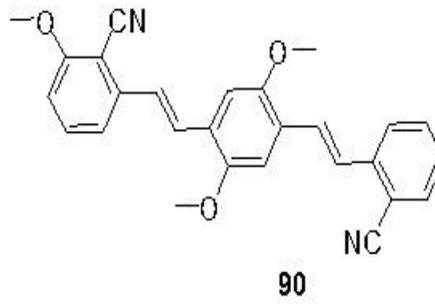
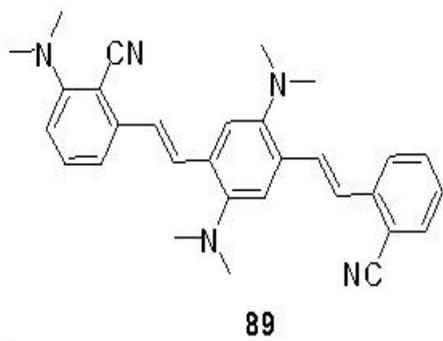
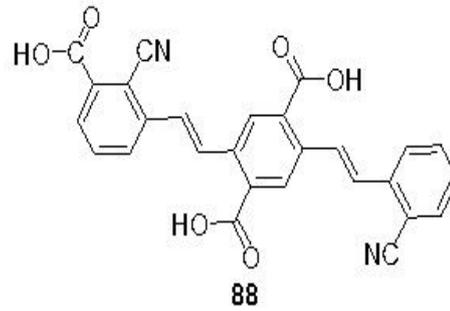
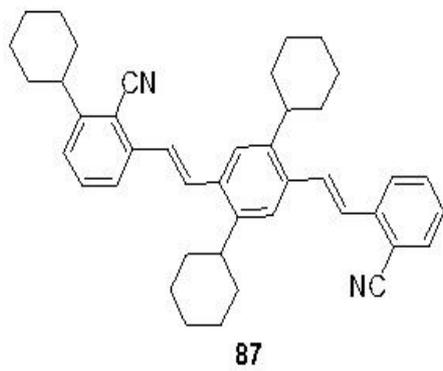
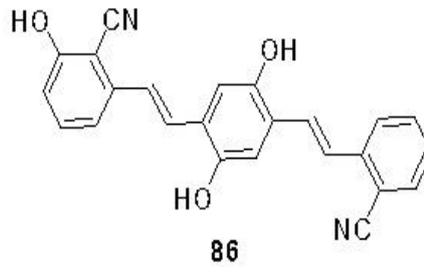
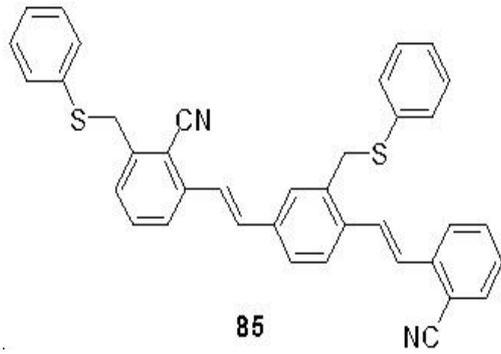
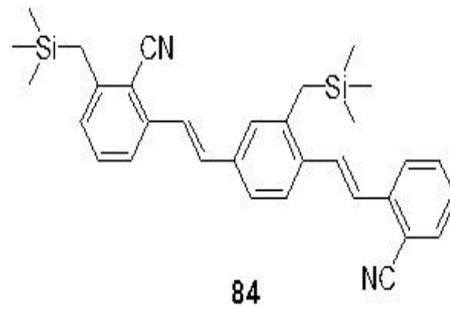
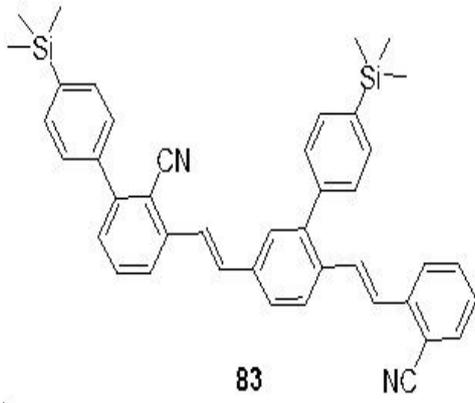
[0078]



[0079]



[0080]

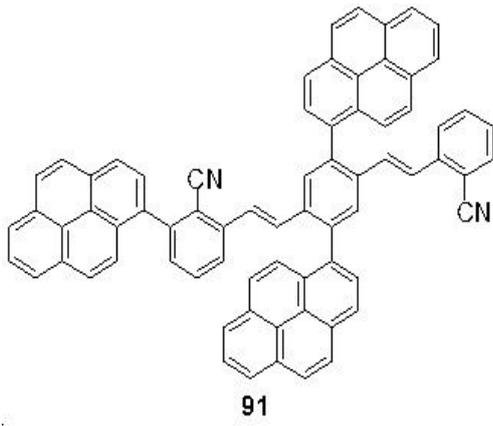


[0081]

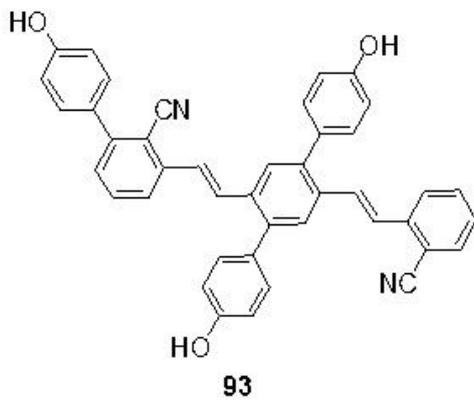
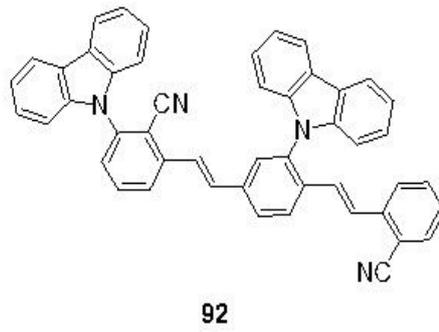
[0082]

[0083]

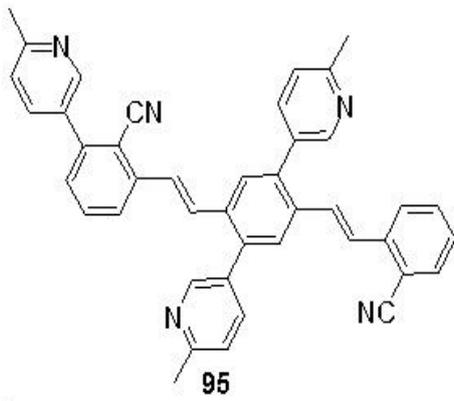
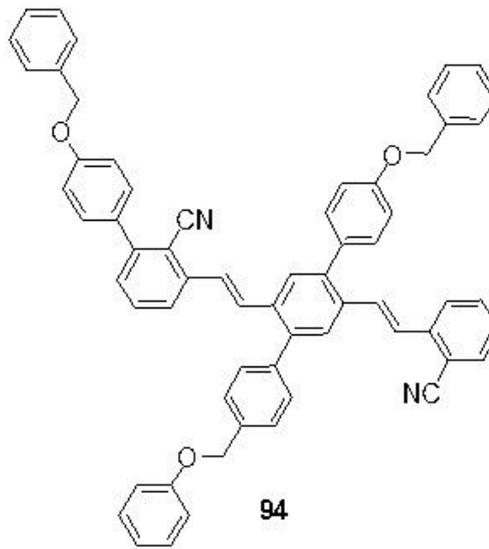
[0084]



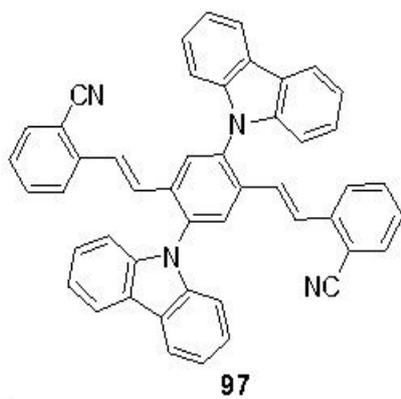
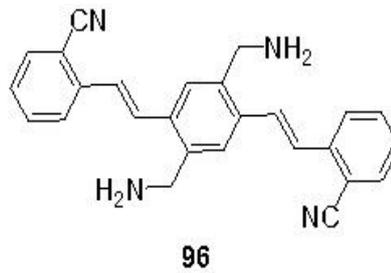
[0085]



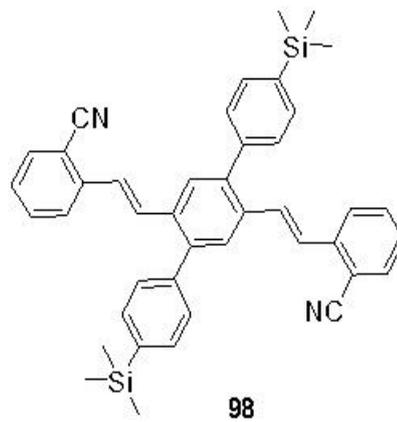
[0086]

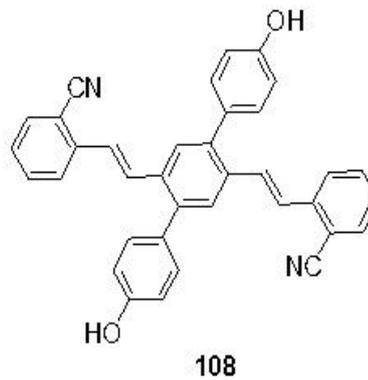
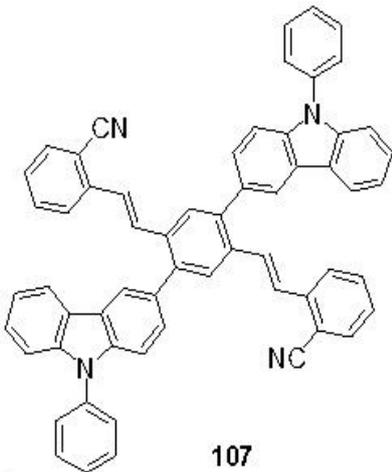
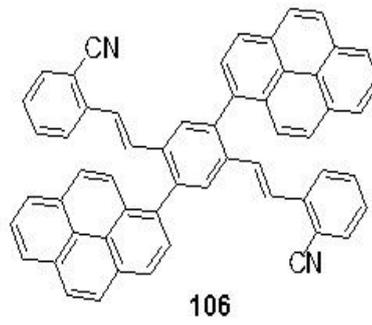
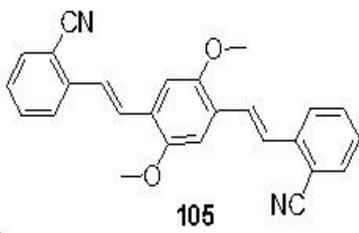
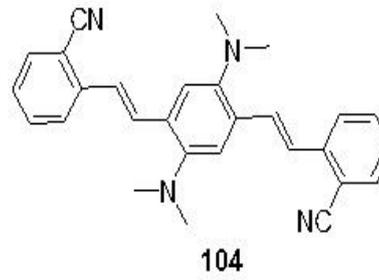
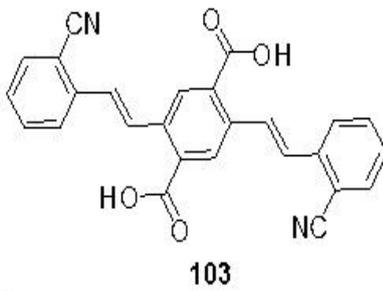
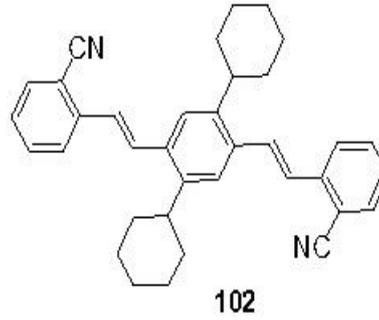
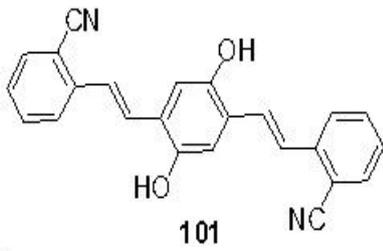
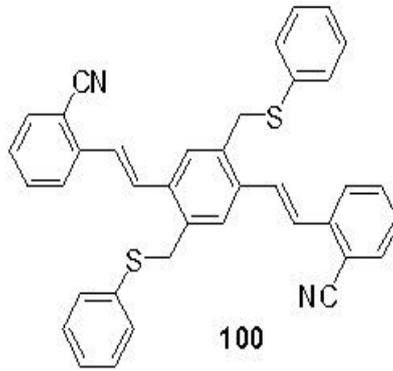
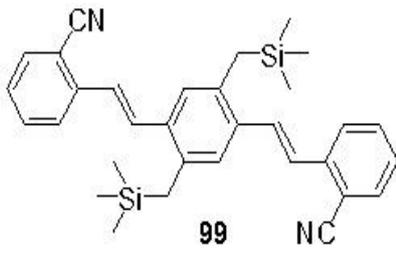


[0087]



[0088]





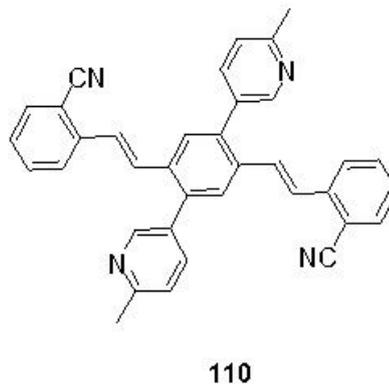
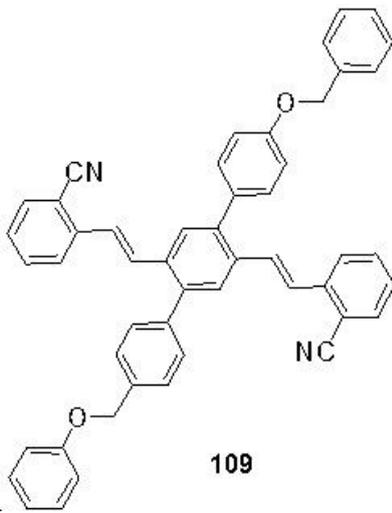
[0089]

[0090]

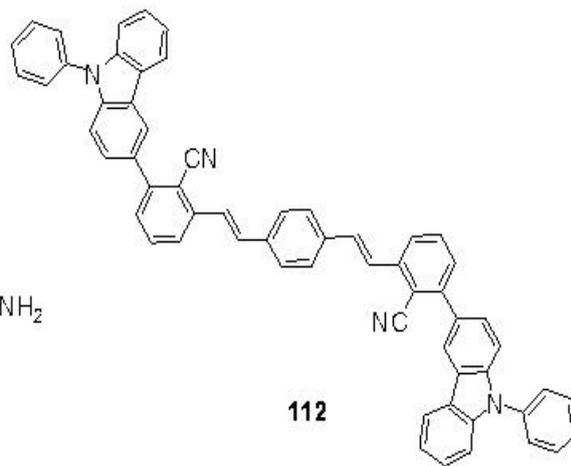
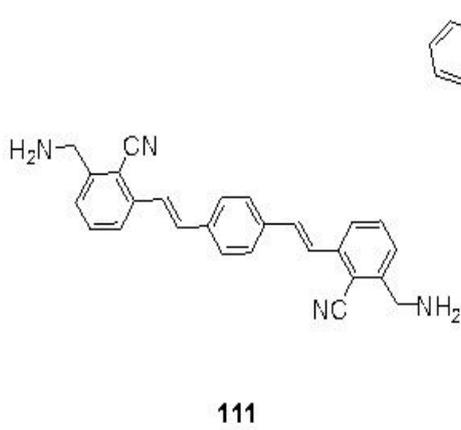
[0091]

[0092]

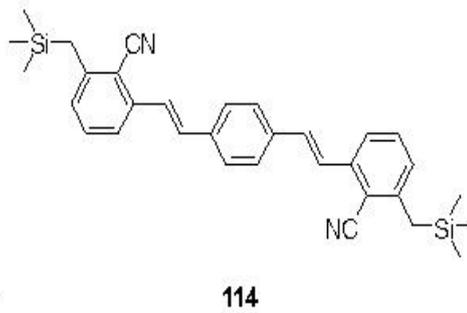
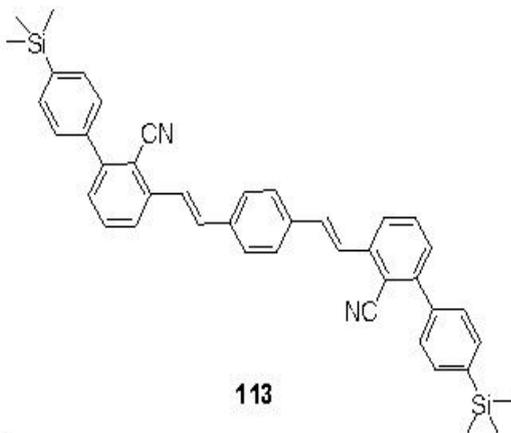
[0093]



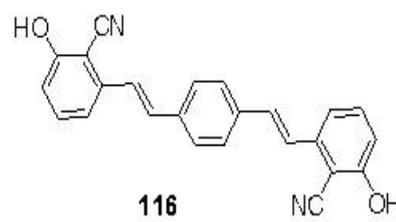
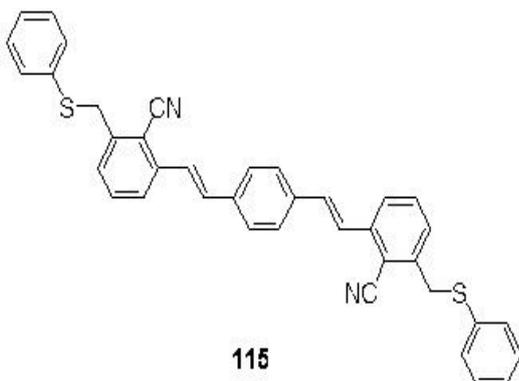
[0094]



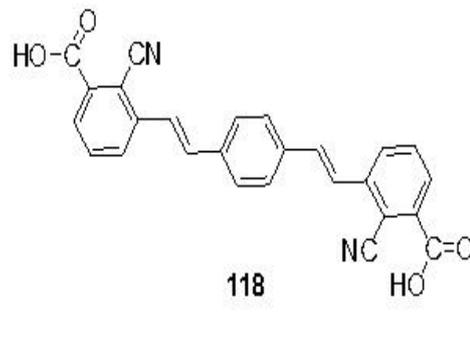
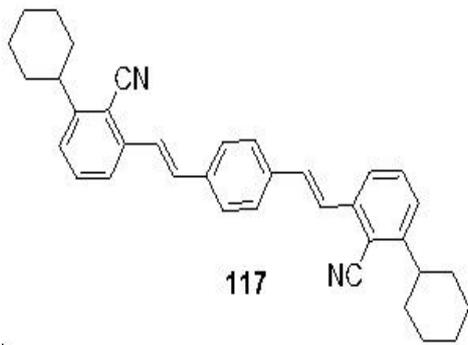
[0095]



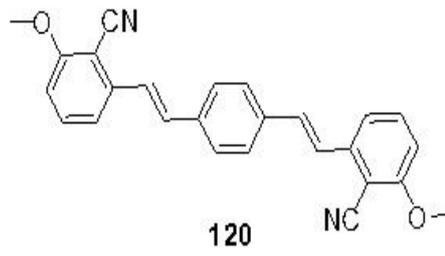
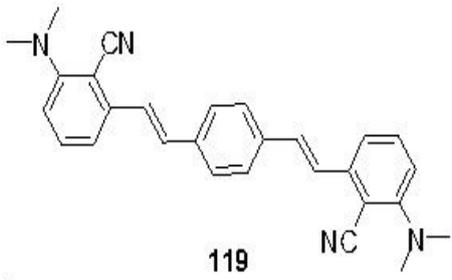
[0096]



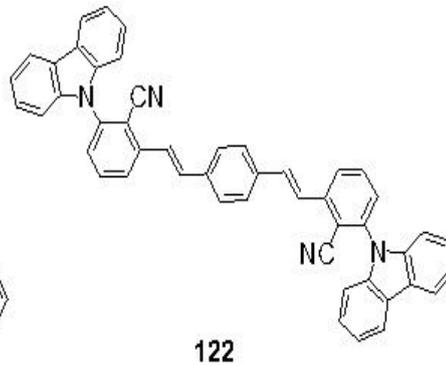
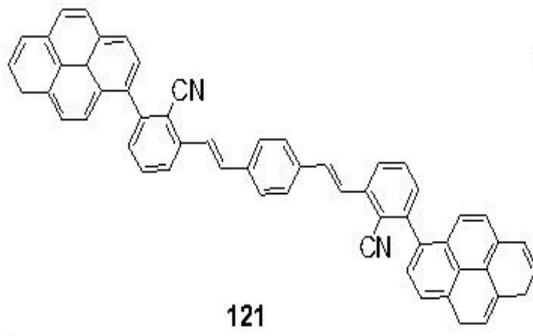
[0097]



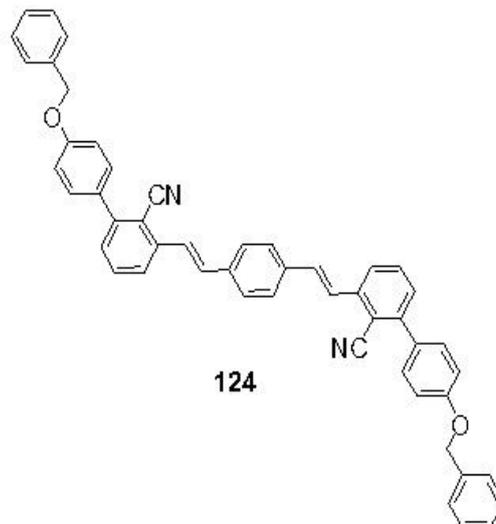
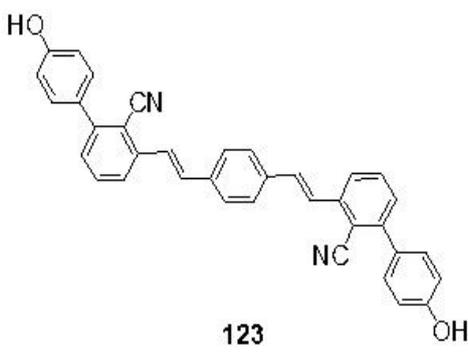
[0098]



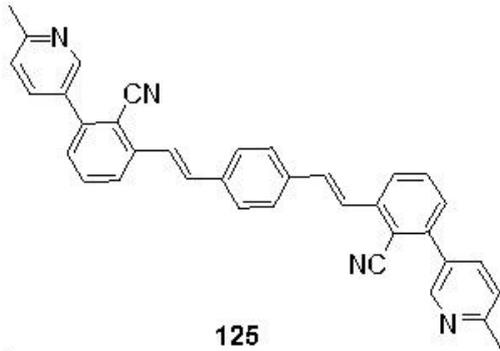
[0099]



[0100]



[0101]



- [0102]
- [0103] 본 발명의 다른 하나의 측면에 따르면,
- [0104] 상기 다이사이안스티릴 벤젠 유도체를 포함하는 형광재료를 제공한다.
- [0105] 상기 형광재료는 섬유염료용 형광재료, 유기전계발광소자용 발광재료, 염료감응형 태양전지용 염료재료, 전기/전자 재료용 잉크 조성물용 잉크재료, 및 표적물질 검출용 형광재료 중에서 선택된 어느 하나의 용도로 사용될 수 있다.
- [0106] 본 발명의 다른 또 하나의 측면에 따르면,
- [0107] 상기 형광재료를 포함하는 섬유제품을 제공한다.
- [0108] 또한, 상기 형광재료를 포함하는 전기 및 전기소자를 제공한다.

발명의 효과

- [0109] 본 발명의 형광재료용 다이사이안스티릴 벤젠(Dicyanstyryl benzene) 유도체는 형광수율이 현저히 개선되어 사용량을 획기적으로 저감함으로써 환경오염을 최소화하고 경제성을 향상시키는 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

- [0110] 도 1은 본 발명의 시험예 1에 따른 발광특성 분석결과를 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0111] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변환, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.
- [0112] 상기 "치환된"이란 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C1 내지 C30 할로겐화알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C3 내지 C30 시클로알콕시기, C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C2 내지 C30 알키닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 실릴옥시기(-OSiH₃), -OSiR¹H₂(R¹은 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR¹R²H(R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR¹R²R³, (R¹, R², 및 R³는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지 C30 술폰닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C3 내지 C30 시클로알킬티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, 실릴기(SiR¹R²R³)(R¹, R², 및 R³는 각각 독립적으로 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), 아민기(-NRR')(여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다.

- [0113] 또한 상기 치환기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있다.
- [0114] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기" 또는 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기" 등에서의 상기 알킬기 또는 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때의 알킬 부분 또는 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다. 예컨대, 파라 위치에 부틸기가 치환된 페닐기는 탄소수 4의 부틸기로 치환된 탄소수 6의 아릴기에 해당하는 것을 의미한다.
- [0115] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 융합된 아릴기" 등에서 상기 융합된 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때 융합되어 부가적으로 새롭게 형성된 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다.
- [0116] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.
- [0117] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.
- [0118] 본 명세서에서 "수소"란 별도의 정의가 없는 한, 일중수소, 이중수소, 또는 삼중수소를 의미한다.
- [0119] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다.
- [0120] 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기" 일 수 있다.
- [0121] 알킬기는 적어도 하나의 이중결합 또는 삼중결합을 포함하고 있는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다.
- [0122] 포화이든 불포화이든 간에 알킬기는 분쇄형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.
- [0123] 알킬기는 C1 내지 C30 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 C1 내지 C20 알킬기, C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.
- [0124] 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자, 즉, 알킬쇄는 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, iso-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.
- [0125] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.
- [0126] "아민기"는 아미노기, 아릴아민기, 알킬아민기, 아릴알킬아민기, 또는 알킬아릴아민기를 포함하고, -NRR'로 표현될 수 있고, 여기에서 R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이다.
- [0127] "시클로알킬(cycloalkyl)기"는 모노시클릭 또는 융합고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0128] "헤테로시클로알킬(heterocycloalkyl)기"는 시클로알킬기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로시클로알킬기가 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.
- [0129] "방향족(aromatic)기"는 고리 형태인 작용기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 작용기를 의미한다. 구체적인 예로 아릴기와 헤테로아릴기가 있다.
- [0130] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0131] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.
- [0132] 아릴기 및 헤테로아릴기에서 고리의 원자수는 탄소수 및 비탄소원자수의 합이다.
- [0133] "알킬아릴기" 또는 "아릴알킬기"와 같이 조합하여 사용할 때, 상기에 든 각각의 알킬 및 아릴의 용어는 상기 나

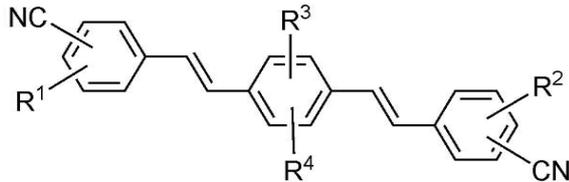
타낸 의미와 내용을 가진다.

[0134] "아릴알킬기"이란 용어는 벤질과 같은 아릴 치환된 알킬 라디칼을 의미하며 알킬기에 포함된다.

[0135] "알킬아릴기"이란 용어는 알킬 치환된 아릴 라디칼을 의미하며 아릴기에 포함된다.

[0136] 이하, 본 발명의 다이사이안스티릴 벤젠 유도체에 대해 설명하기로 한다. 본 발명의 다이사이안스티릴 벤젠 유도체는 하기 구조식 1로 표시될 수 있다.

[0137] [구조식 1]



[0138]

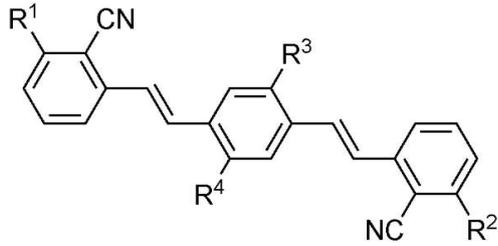
[0139] 구조식 1에서,

[0140] R¹ 및 R²는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이거나, 또는 R¹ 및 R² 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하고,

[0141] R³ 및 R⁴는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이거나, 또는 R³ 및 R⁴ 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성한다.

[0142] 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되는 화합물일 수 있다.

[0143] [구조식 2]



[0144]
[0145] 구조식 2에서,

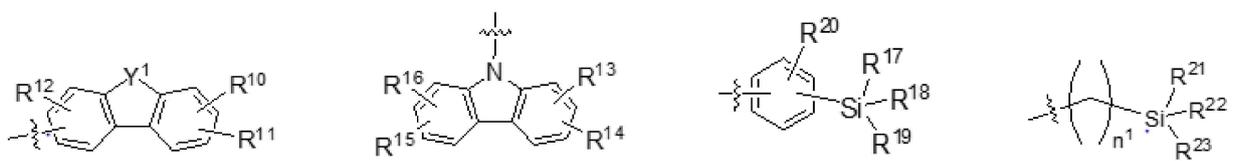
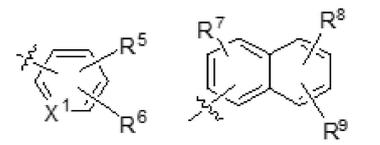
[0146] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이고,

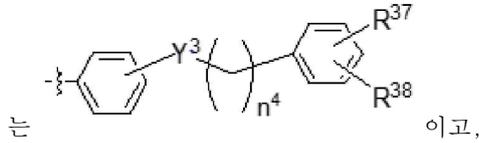
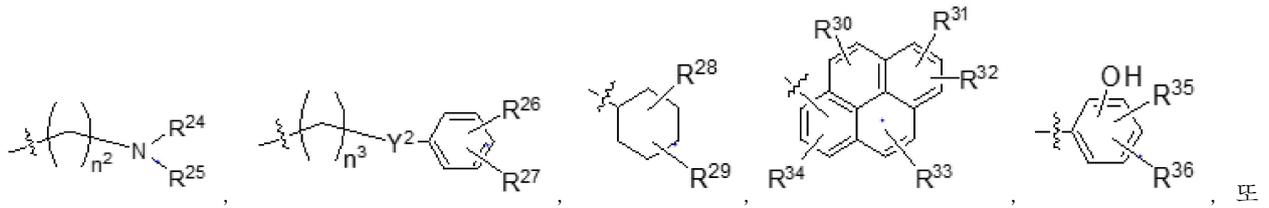
[0147] R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴실릴기이다.

[0148] 또한 바람직하게는, 구조식 2에서 R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기일 수 있고,

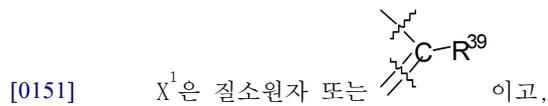
[0149] 더욱 바람직하게는, R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르

복실기, C1 내지 C4 직쇄 또는 분쇄 알킬기, C1 내지 C4 알콕시기

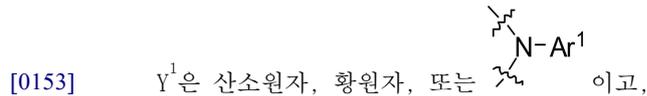




[0150] n^1 내지 n^4 는 각각 독립적으로 0 내지 4 중에서 선택된 어느 하나의 정수이고,



[0152] R^{39} 는 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,



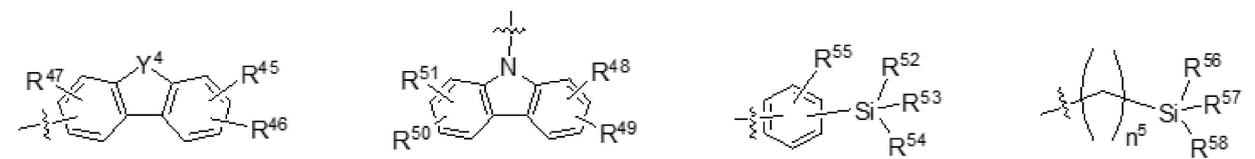
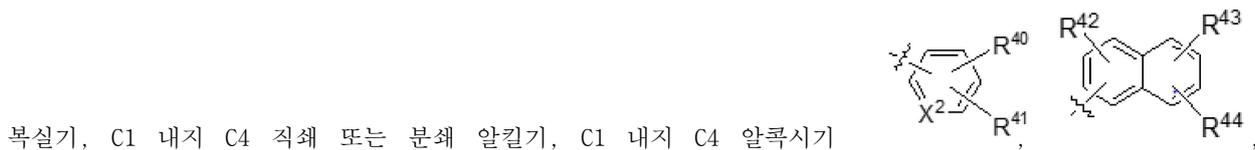
[0154] Ar^1 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

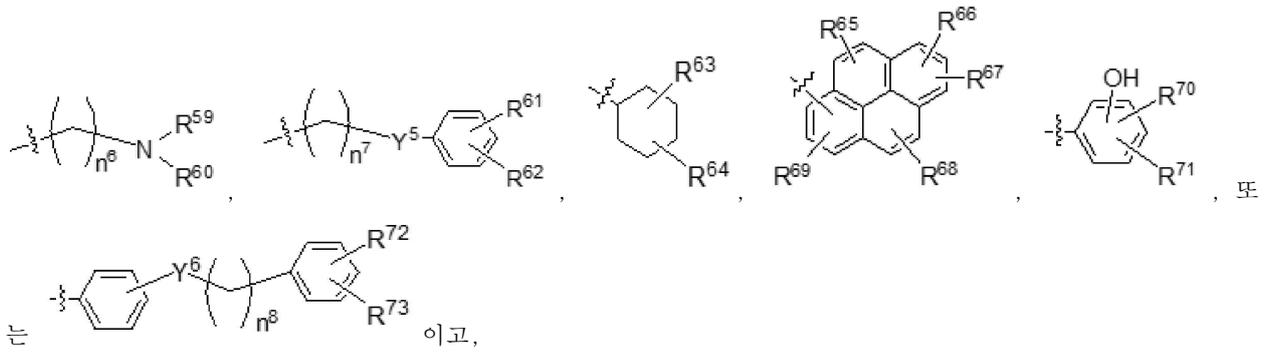
[0155] Y^2 및 Y^3 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 산소원자 또는 황원자이고,

[0156] R^5 내지 R^8 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

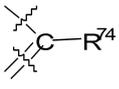
[0157] 또한 바람직하게는, 구조식 2에서 R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기일 수 있다.

[0158] 더욱 바람직하게는, R^3 및 R^4 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 하이드록시기, 카르

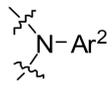




[0159] n^5 내지 n^8 은 각각 독립적으로 0 내지 4 중에서 선택된 어느 하나의 정수이고,

[0160] X^2 는 질소원자 또는  이고,

[0161] R^{74} 는 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0162] Y^4 는 산소원자, 황원자, 또는  이고,

[0163] Ar^2 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0164] Y^5 및 Y^6 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 산소원자 또는 황원자이고,

[0165] R^{40} 내지 R^{73} 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0166] 상기 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기의 예는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조 [1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 싸이아트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퓨리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프피리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조 [1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오페닐기일 수 있다.

[0167] 상기 구조식 2로 표시되는 다이사이안스티릴 벤젠 유도체는 상기 화합물 1 내지 125 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 본 발명의 범위가 여기에 한정되지 않는다.

[0168] 또한, 본 발명은 상기 다이사이안스티릴 벤젠 유도체를 포함하는 형광재료를 제공한다.

[0169] 상기 형광재료는 섬유염료용 형광재료, 유기전계발광소자용 발광재료, 염료감응형 태양전지용 염료재료, 전기/전자 재료용 잉크 조성물용 잉크재료, 및 표적물질 검출용 형광재료 중에서 선택된 어느 하나의 용도로 사용될 수 있으나, 본 발명의 범위가 여기에 한정되지 않으며 형광재료가 사용될 수 있는 다양한 산업분야에 적용될 수 있다.

[0170] 상기 형광재료는 형광염료가 적용되는 의류 등의 섬유제품에 사용될 수 있다.

[0171] 또한, 상기 형광재료는 유기전계발광소자, 염료감응형 태양전지, 표적물질 검출용 기기, 그 외 형광재료 도입이 가능한 다양한 전기 및 전자 소자에 적용될 수 있다.

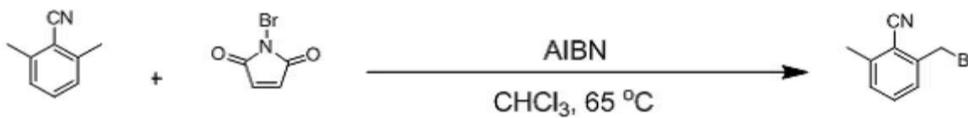
[0172] [실시예]

[0173] 이하, 실시예를 통하여 본 발명에 따른 다이사이안스티릴 벤젠 유도체를 더욱 구체적으로 설명한다. 그러나 이는 예시를 위한 것으로서 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것이 아니다.

[0174]

[0175] **실시예 1: 화합물 1의 합성**

[0176] 단계 1

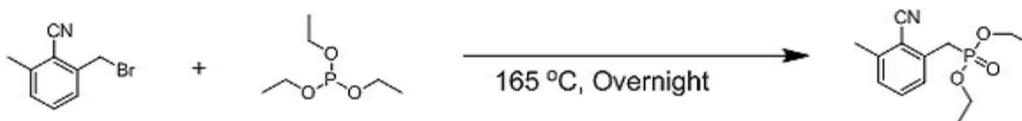


[0177]

[0178] 2,6- 디메틸 벤조 니트릴 (10 g, 76.2 mmol), 노르말-브로모숙신이미드 (12.074 g, 68.6 mmol) 그리고 아조비스소부티로니트릴 (0.563 g, 3 mmol)를 무수 클로로포름 (241.42 mL) 에 녹여 65 °C에서 4 시간 동안 반응시킨 후 디클로로메탄 으로 추출한 뒤 무수황산마그네슘으로 건조 후, 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO₂, n-Hexane : THF = 9 : 1) 에 의해 정제를 하여 부 반응물을 제거하여 생성물을 얻었다.

[0179] ¹H NMR (400 MHz, CH₂Cl₂) δ 7.50 - 7.45 (m, 1H), 7.37 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 7.30 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.65 (s, 2H), 2.55 (s, 3H).

[0180] 단계 2

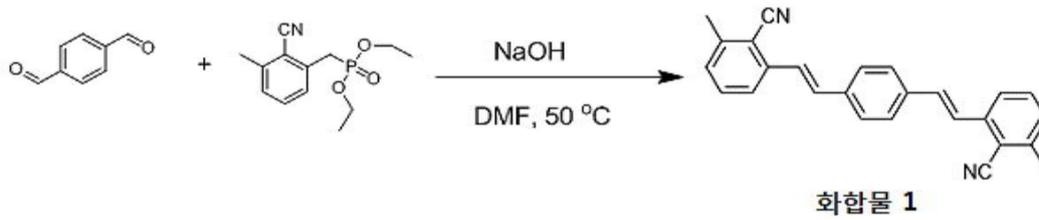


[0181]

[0182] 상기 단계 1에서 제조된 2-(브로모 메틸)-6-메틸벤조니트릴 (10 g, 47.6 mmol) 와 과량의 트리에틸인산염 (40.81 mL, 23.8 mmol)를 165°C에서 24시간 반응시킨 후 증류정제를 통해 과량의 트리에틸인산염을 제거하였다. 이후 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 1 : 5) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0183] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.38 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.30 (dd, J = 7.5, 2.4 Hz, 1H), 7.20 - 7.14 (m, 1H), 4.14 - 3.97 (m, 4H), 3.36 (d, J = 22.3 Hz, 2H), 1.29 - 1.17 (m, 6H).

[0184] 단계 3



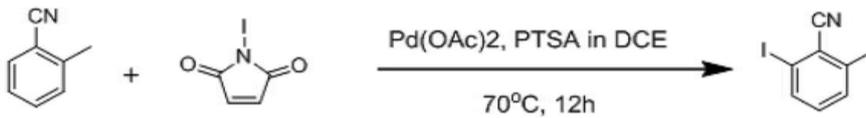
[0185]

[0186] 테레프탈 알데히드 (5 g, 37 mmol) 와 상기 단계 2에서 제조된 디에틸 2-시아노-3-메틸벤질포스포네이트 (19.925 g, 74 mmol)를 디메틸포름아미드 (111 mL) 에 용해 시킨 후 수산화 나트륨 (4.47 g, 111.8 mmol)를 천천히 떨어뜨린 후 50 °C 까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터 하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 디메틸 술폭시드로 재결정하여 화합물 1을 수득하였다.

[0187] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.64 (d, J = 8.0 Hz, 2H), 7.60 (s, 4H), 7.52 (d, J = 16.2 Hz, 2H), 7.46 (t, J = 7.8 Hz, 2H), 7.28 (s, 1H), 7.24 (s, 1H), 7.21 (d, J = 7.5 Hz, 2H), 2.58 (s, 6H).

[0188] **실시예 2: 화합물 2의 합성**

[0189] 단계 1

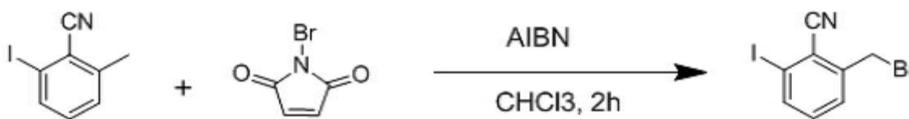


[0190]

[0191] 2-메틸벤조니트릴(10 g, 85.4 mmol), 노르말-요오도숙신이미드(20.9 g, 93.9 mmol), 팔라듐(II)아세테이트(0.9 g, 4.3 mmol), 파라-톨루엔술포산일수화물(8 g, 42.7 mmol)을 1,2-디클로로에탄(358 mL)에 용해시킨 후 70 °C에서 12시간 교반시켰다. 반응 종결 후 냉각하고 용매 제거 후 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 5: 1) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0192] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.73 (dd, J = 7.3, 1.6 Hz, 1H), 7.30 (dd, J = 7.5, 1.6 Hz, 1H), 7.24 (t, J = 7.4 Hz, 1H), 2.42 (s, 3H).

[0193] 단계 2

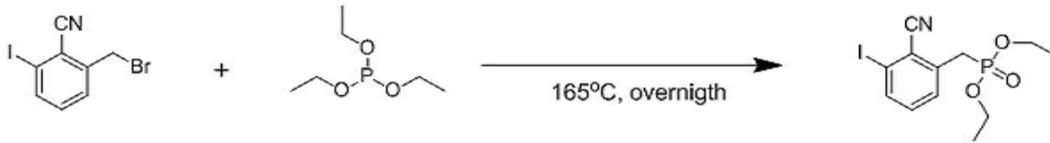


[0194]

[0195] 단계 1에서 제조된 2-요오도-6-메틸벤조니트릴 (10 g, 41.1 mmol), 노르말-브로모숙신이미드 (8.69 g, 49.4 mmol) 및 아조비스소부티로니트릴 (0.3 g, 1.9 mmol)를 무수 클로로포름(150 mL)에 녹여 65 °C에서 4 시간 동안 반응시킨 후 디클로로메탄으로 추출하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후, 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 3: 1) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0196] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.80 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.42 (dd, J = 7.5, 1.6 Hz, 1H), 7.32 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 4.93 (s, 2H).

[0197] 단계 3

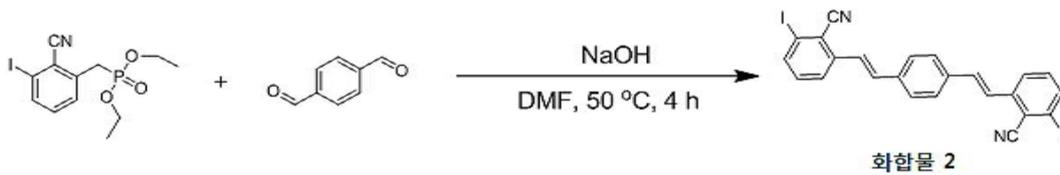


[0198]

[0199] 단계 2에서 제조된 2-(브로모 메틸)-6-요오드벤조니트릴 (10 g, 31.1 mmol)과 과량의 트리에틸인산염(26 mL, 15.53 mmol)을 165 °C에서 24 시간 반응시킨 후 증류 정제를 통해 과량의 트리에틸인산염을 제거하였다. 이후 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 2 : 5) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0200] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.75 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.36 (dd, J = 7.5, 1.6 Hz, 1H), 7.25 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 4.06 (dq, J = 8.5, 5.8 Hz, 4H), 3.05 (d, J = 11.8 Hz, 2H), 1.20 (q, J = 5.7 Hz, 6H).

[0201] 단계 4



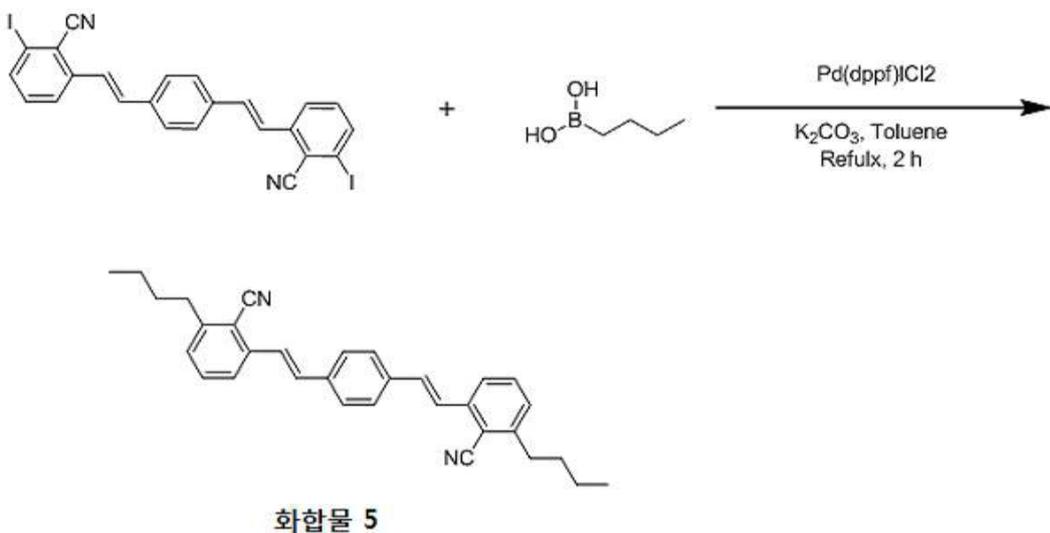
[0202]

[0203] 테레프탈알데히드(5 g, 37 mmol)와 단계 3에서 제조된 디에틸 2-시아노-3-요오도벤질포스포네이트(28.27 g, 74 mmol)를 디메틸포름아미드(111 mL)에 용해 시킨 후 수산화나트륨(4.47 g, 111.8 mmol)을 천천히 떨어트린 후 50°C까지 승온시키고, 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압 필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어 주고 얻은 화합물을 디메틸술포시드로 재결정하여 화합물 2를 수득하였다.

[0204] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.74 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.59 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.44 (s, 2H), 7.38 (d, J = 15.1 Hz, 1H), 7.31 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.03 (d, J = 15.1 Hz, 1H).

[0205] 실시예 3: 화합물 5의 합성

[0206] 단계 1



[0207]

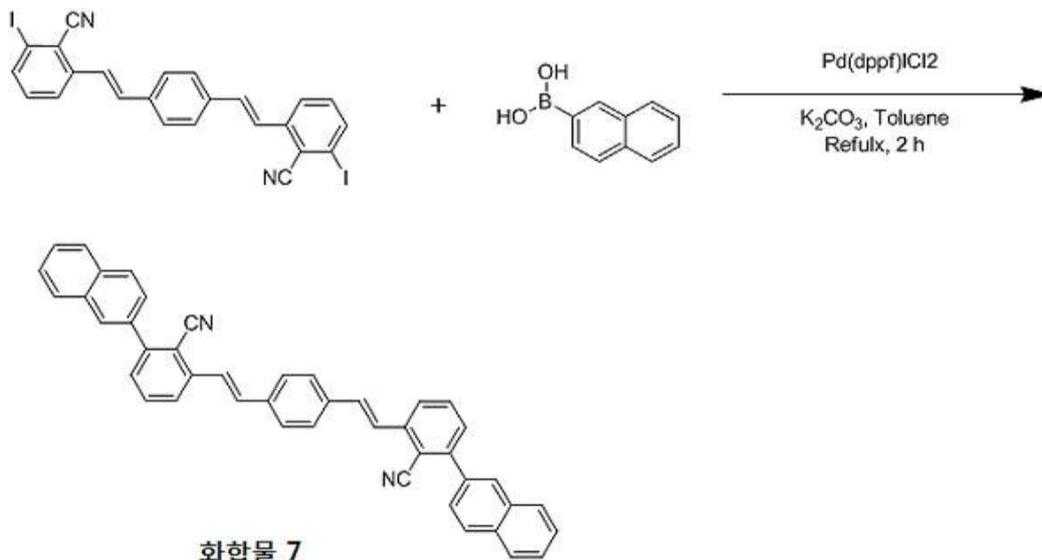
[0208] 실시예 2의 화합물 2(5 g, 8.6 mmol), 노르말부틸보론산(1.92 g, 18.8 mmol) 과 탄산칼륨(7.1 g, 51.4 mmol)을

무수톨루엔(54.78 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(0.626 g, 0.9 mmol)를 넣고 120°C로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 5를 수득하였다.

[0209] ^1H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.54 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.47 (dd, J = 7.5, 1.6 Hz, 1H), 7.44 (s, 2H), 7.41 (d, J = 15.2 Hz, 1H), 7.25 (dd, J = 7.5, 1.6 Hz, 1H), 7.00 (d, J = 15.1 Hz, 1H), 2.64 (t, J = 7.7 Hz, 2H), 1.68 (p, J = 7.7 Hz, 2H), 1.53 - 1.33 (m, 2H), 0.99 (t, J = 6.6 Hz, 3H).

[0210] **실시예 4: 화합물 7의 합성**

[0211] 단계 1

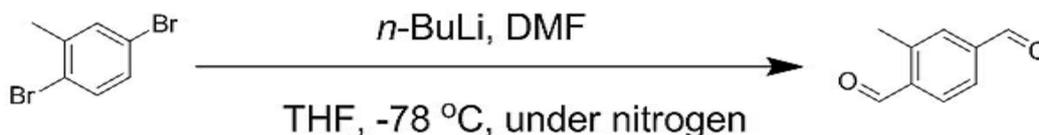


[0212] 실시예 2의 화합물 2(5 g, 8.6 mmol), 노르말부틸보론산(3.238 g, 18.8 mmol) 과 탄산칼륨(7.1 g, 51.4 mmol)을 무수톨루엔(54.78 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(0.626 g, 0.9 mmol)를 넣고 120°C로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 7을 수득하였다.

[0214] ^1H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 8.17 - 8.13 (m, 1H), 8.10 - 8.05 (m, 1H), 7.95 - 7.84 (m, 2H), 7.78 - 7.69 (m, 3H), 7.66 - 7.60 (m, 1H), 7.58 - 7.50 (m, 3H), 7.45 - 7.40 (m, 2H), 7.17 - 7.08 (m, 1H).

[0215] **실시예 5: 화합물 10의 합성**

[0216] 단계 1



[0217] 2,5-디브로모톨루엔(10 g, 40 mmol)을 무수테트라하이드로퓨란(40 mL)에 녹인 후 -78°C에서 노르말부틸리튬(10g, 160 mmol)을 천천히 떨어트린 후 2 시간 30 분 동안 온도를 유지하면서 교반하였다. 이후 디메틸포름아마이드(15.5 mL, 200 mmol)를 넣은 후 1 시간 교반하였다. 이후 3 노르말염산을 넣고, 무수 테트라하이드로퓨란을 제거 후 클로로포름으로 추출하고 무수황산마그네슘으로 건조 후 실리카겔을 이용한 크로마토그래피(SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 5 : 1) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

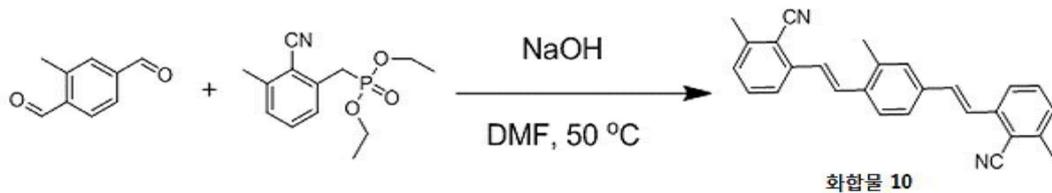
[0219] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.38 (s, 1H), 10.09 (s, 1H), 7.98 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.89 - 7.81 (d, 1H), 7.77 - 7.72 (m, 1H), 2.76 (s, 3H).

[0220] 단계 2

[0221] 실시예 1의 단계 2, 단계 3과 동일한 합성방법으로 중간체를 수득하였다.

[0222]

[0223] 단계 3



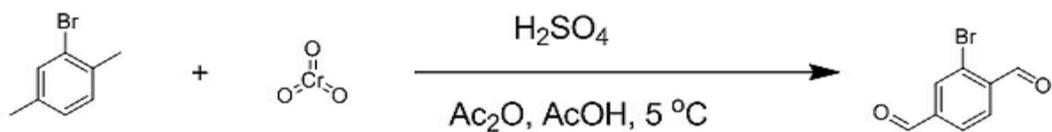
[0224]

[0225] 단계 1에서 제조된 2-메틸테레프탈알데히드(5 g, 33.7 mmol)과 단계 2에서 제조된 디에틸 2-시아노-3-메틸벤질 포스포네이트(18 g, 67.5 mmol) 디메틸포름아미드(101 mL)에 수산화나트륨(4 g, 101 mmol)을 천천히 떨어트린 후, 50°C까지 승온시키고 4 시간 반응 후, 상온에서 냉각한 후 감압필터 하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 디메틸술폭시드로 재결정하여 화합물 10을 수득하였다.

[0226] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.72 - 7.69 (m, 1H), 7.65 - 7.60 (m, 2H), 7.45 (d, $J = 20.8$ Hz, 7H), 7.25 - 7.18 (m, 3H), 2.58 (s, 6H), 2.50 (s, 3H).

[0227] **실시예 6: 화합물 11의 합성**

[0228] 단계 1

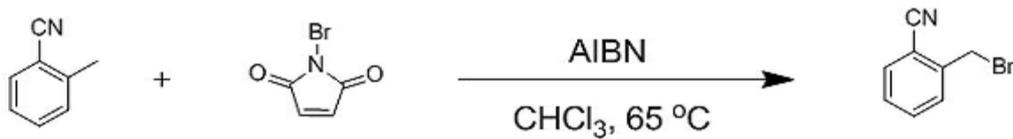


[0229]

[0230] 0~5°C에서 2-브로모-1,4-디메틸벤젠(10 g, 54 mmol)를 아세트산(65 mL), 아세트산무수물(130 mL)에 녹인 후 황산 (48 mL)를 떨어트리고, 이 후 온도를 유지하면서 혼합물에 삼산화크롬(17.29 g, 172 mmol)를 넣어주었다. 5 시간 반응 후 초록색의 혼합물을 얼음물(1000 mL)에 부어 넣고, 클로로포름으로 추출하고 유기층을 염화 나트륨 수용액으로 씻어주고 무수황산마그네슘으로 건조시켰다. 이후 혼합물에 증류수 (70 mL), 에탄올 (70 mL), 황산 (7 mL)를 넣고 5시간 가열하였다. 이후 혼합물을 상온에서 냉각시키고, 증류수(500 mL)를 넣어주고, 클로로포름으로 추출하고 무수황산마그네슘으로 건조 후 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO_2 , n-Hexane : Ethyl acetate = 4 : 1) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0231] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.44 (s, 1H), 10.06 (s, 1H), 8.16 (d, $J = 1.4$ Hz, 1H), 8.07 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H), 7.96 - 7.90 (m, 1H).

[0232] 단계 2

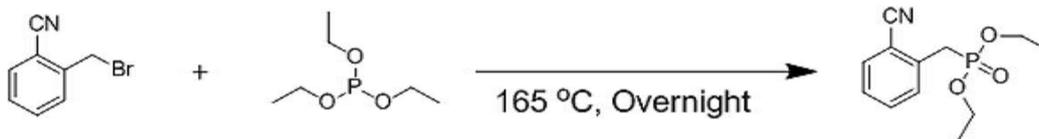


[0233]

[0234] 2-메틸벤조니트릴(10 g, 85.4 mmol), 노르말-브로모수크시미드(16.52 g, 94 mmol) 및 아조비스소부티로니트릴(0.63 g, 3.8 mmol)을 무수 클로로포름(256 mL)에 녹여 65°C에서 4시간 동안 반응시킨 후 디클로로메탄 로 추출한 뒤 무수황산마그네슘 으로 건조 후, 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 4 : 1) 정제를 통해 부반응물을 제거하여 생성물을 얻었다.

[0235] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.68 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.62 - 7.57 (m, 1H), 7.56 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 7.46 - 7.40 (m, 1H), 4.64 (s, 2H).

[0236] 단계 3

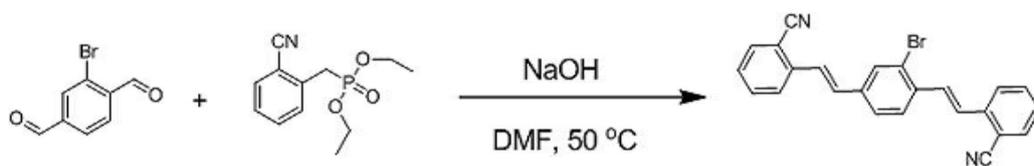


[0237]

[0238] 단계 2에서 제조된 2-(브로모메틸)벤조니트릴(10 g, 51 mmol)과 과량의 트리 에틸인산염(44 mL, 25.5 mmol)을 165°C에서 24시간 반응시킨 후 증류 정제를 통해 과량의 트리에틸인산염을 제거하였다. 실리카겔을 이용한 크로마토그래피 (SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 2 : 2) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0239] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.67 - 7.62 (m, 1H), 7.58 - 7.50 (m, 2H), 7.40 - 7.31 (m, 1H), 4.14 - 4.01 (m, 4H), 3.40 (d, J = 22.3 Hz, 2H), 1.26 (q, J = 7.0 Hz, 6H).

[0240] 단계 4



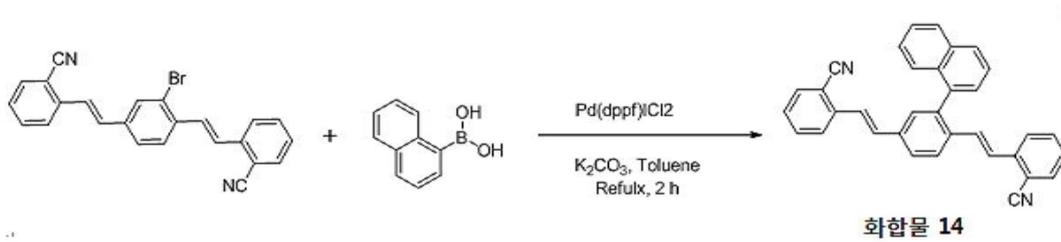
화합물 11

[0241]

[0242] 단계 1에서 제조된 2-브로모테레프탈알데히드(5 g, 23.5 mmol), 단계 3에서 제조된 2-시아노벤질포스포네이트(12 g, 46.9 mmol)를 디메틸포름아마이드(70 mL)에 용해시킨 후 수산화나트륨(2.8 g, 70.4 mmol)을 천천히 떨어트린 후, 50°C까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주어 화합물을 디메틸술폭시드로 재결정하여 화합물 11을 수득하였다.

[0243] ¹H NMR (400 MHz, DMSO) δ 8.02 (dd, J = 8.0, 2.7 Hz, 9H), 8.00 (d, J = 1.4 Hz, 5H), 7.96 (d, J = 8.2 Hz, 5H), 7.90 (t, J = 8.2 Hz, 10H), 7.81 - 7.74 (m, 15H), 7.68 (d, J = 16.1 Hz, 5H), 7.60 - 7.55 (m, 3H), 7.55 - 7.48 (m, 16H), 7.45 (d, J = 16.1 Hz, 6H).

[0244] **실시예 7: 화합물 14의 합성**



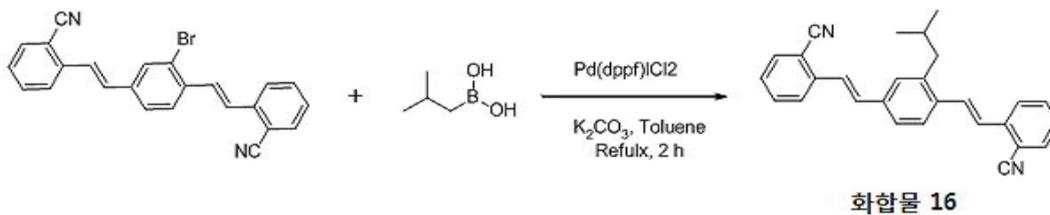
[0245]

[0246] 실시예 6의 화합물 11(5 g, 12.16 mmol), 나프탈렌-1-일붕소산 (2.3 g, 13.37 mmol)과 탄산칼륨(5.041 g, 36.47 mmol)을 무수톨루엔(51.06 mL)에 용해시킨 후, 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(0.445 g, 0.61 mmol)를 넣고 120°C로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거 한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 14를 제조하였다.

[0247] ¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.83 (d, *J* = 1.4 Hz, 1H), 7.82 - 7.79 (m, 1H), 7.78 - 7.74 (m, 1H), 7.72 (dd, *J* = 6.9, 2.0 Hz, 1H), 7.61 (d, *J* = 7.5 Hz, 1H), 7.57 (td, *J* = 6.4, 3.1 Hz, 3H), 7.85 - 6.77 (m, 22H), 7.54 - 7.39 (m, 7H), 7.39 - 7.24 (m, 5H), 7.16 (d, *J* = 15.2 Hz, 1H), 7.14 (dd, *J* = 19.5, 15.2 Hz, 2H), 7.14 (dd, *J* = 19.5, 15.2 Hz, 2H), 7.11 (d, *J* = 15.2 Hz, 1H).

[0248] **실시예 8: 화합물 16의 합성**

[0249] 단계 1



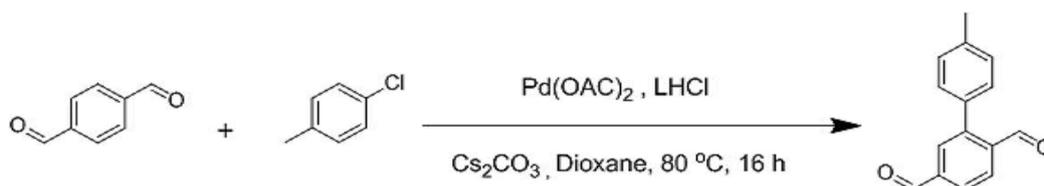
[0250]

[0251] 실시예 6의 화합물 11(5 g, 12.16 mmol), 아이소부틸보론산(1.363 g, 13.37 mmol)과 탄산칼륨(5.04 g, 36.47 mmol)을 무수톨루엔(51.06 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매 (0.445 g, 0.61 mmol)를 넣고 120°C로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거 한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 16을 수득하였다.

[0252] ¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.63 (d, *J* = 0.4 Hz, 2H), 7.60 (d, *J* = 1.4 Hz, 2H), 7.53 (t, *J* = 10.6 Hz, 3H), 7.41 (s, 1H), 7.32 (t, *J* = 10.3 Hz, 3H), 7.22 (s, 1H), 7.16 (d, *J* = 3.9 Hz, 1H), 7.14 (s, 2H), 2.72 - 2.65 (m, 2H), 2.23 (s, 1H), 1.10 - 1.03 (m, 6H).

[0253] **실시예 9: 화합물 17의 합성**

[0254] 단계 1



[0255]

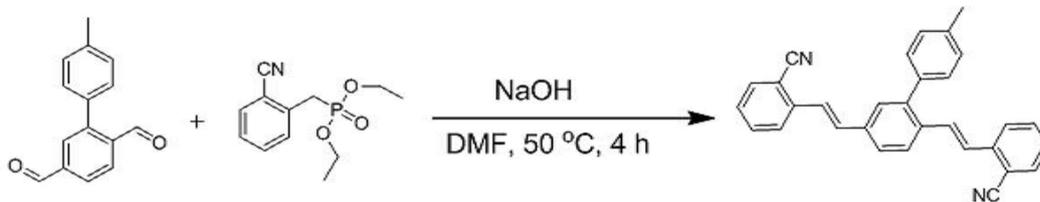
[0256] 테레프탈알데히드(10 g, 74.5 mmol), 1-클로로-4-메틸벤젠(9 mL, 74.5 mmol) 무수 1,4-디옥산(213 mL)에 녹인 후 팔라듐(II)아세테이트(0.167 g, 0.75 mmol), 1,3-비스(1-아다만틸)이미다졸륨클로라이드(0.056 g, 0.15 mmol), 탄산세슘(48 g, 149 mmol)을 넣고 80°C에서 16시간 동안 반응시킨 후 디클로로메탄으로 추출한 뒤 무수 황산마그네슘으로 건조 후, 실리카겔을 이용한 크로마토그래피(SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 3 : 1) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0257] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.12 (s, 1H), 9.95 (s, 1H), 8.41 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 8.18 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 8.06 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.59 (d, J = 7.4 Hz, 2H), 7.34 (d, J = 7.4 Hz, 2H), 2.36 (s, 3H).

[0258] 단계 2

[0259] 실시예 6에서의 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0260] 단계 3



화합물 17

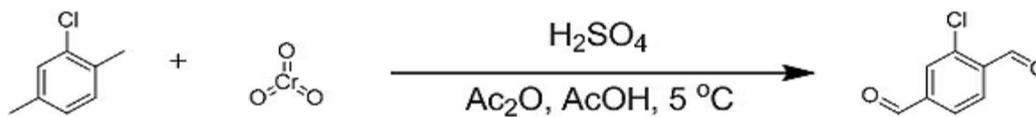
[0261]

[0262] 단계 1에서 제조된 4'-메틸-[1,1'-비페닐]-2,5-디카르보알데히드(5 g, 22.3 mmol)와 실시예 6 화합물 1의 단계 2, 단계 3에서 제조된 2-시아노벤질포스포네이트 (12 g, 49.1 mmol) 디메틸포름아마이드(71.35 mL)에 수산화나트륨(2.7 g, 66.9 mmol)를 천천히 떨어트린 후, 50°C까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압 필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 디메틸 술폭시드로 재결정하여 화합물 17을 수득하였다.

[0263] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.85 (s, 3H), 7.66 - 7.51 (m, 29H), 7.48 (s, 4H), 7.39 (s, 3H), 7.33 (dd, J = 9.2, 1.4 Hz, 12H), 7.22 (s, 3H), 7.17 (s, 3H), 2.41 - 2.30 (m, 9H).

[0264] 실시예 10: 화합물 18의 합성

[0265] 단계 1



[0266]

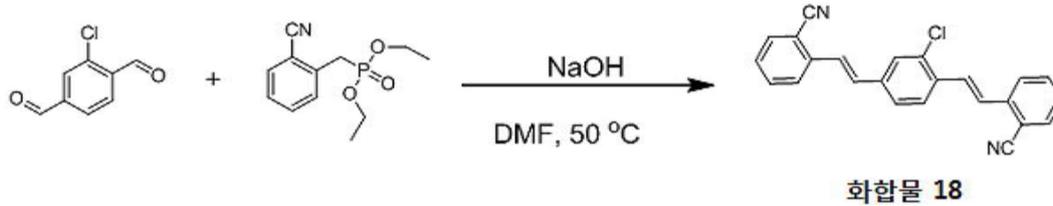
[0267] 0~5°C에서 2-클로로-1,4-디메틸 벤젠(10 g, 71.1 mmol)을 아세트산(85 mL), 아세트산무수물(170 mL)에 녹인 후 황산(63.2 mL)을 떨어뜨리고, 이후 온도를 유지하면서 혼합물에 삼산화크롬(22.759 g, 228 mmol)을 넣어주었다. 5시간 반응 후 초록색의 혼합물을 얼음물(1000 mL)에 부어 넣고, 클로로포름으로 추출하고 유기층을 염화나트륨 수용액으로 씻어주고 무수황산마그네슘으로 건조시켰다. 이후 혼합물에 증류수(70 mL), 에탄올(70 mL), 황산(7 mL)을 넣고 5시간 가열하였다. 이후 혼합물을 상온에서 냉각시키고, 증류수(500 mL)를 넣어주고, 클로로포름으로 추출하고 무수황산마그네슘으로 건조 후, 실리카겔을 이용한 크로마토그래피(SiO₂, n-Hexane : Ethyl acetate = 4 : 1) 정제를 통해 생성물을 얻었다.

[0268] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.55 (s, 1H), 10.07 (s, 1H), 8.09 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H), 7.97 (d, $J = 1.4$ Hz, 1H), 7.91 - 7.85 (m, 1H).

[0269] 단계 2

[0270] 실시예 6 에서의 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0271] 단계 3



[0272]

[0273] 단계 1에서 제조된 2-클로로테레프탈알데히드(5 g, 29.7 mmol), 실시예 6 화합물 11 제조에서 단계 2, 단계 3에서 제조된 2-시아노벤질포스포네이트(15 g, 59.3 mmol)를 디메틸포름아미드(89 mL)에 용해시킨 후 수산화나트륨(3.56 g, 89 mmol)을 천천히 떨어뜨린 후, 50°C까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압 필터 하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 화합물을 디메틸술폭시드로 재결정하여 화합물 18을 수득하였다.

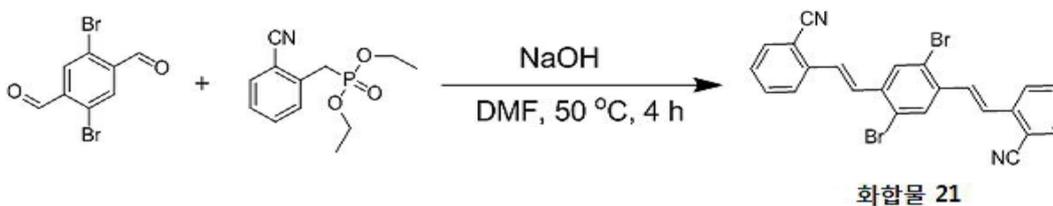
[0274] ^1H NMR (400 MHz, DMSO) δ 8.03 (t, $J = 7.3$ Hz, 2H), 7.98 (d, $J = 8.2$ Hz, 1H), 7.89 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 7.83 (d, $J = 1.5$ Hz, 1H), 7.80 - 7.69 (m, 4H), 7.60 - 7.45 (m, 5H).

[0275] **실시예 11: 화합물 21의 합성**

[0276] 단계 1

[0277] 실시예 3에서의 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0278] 단계 2

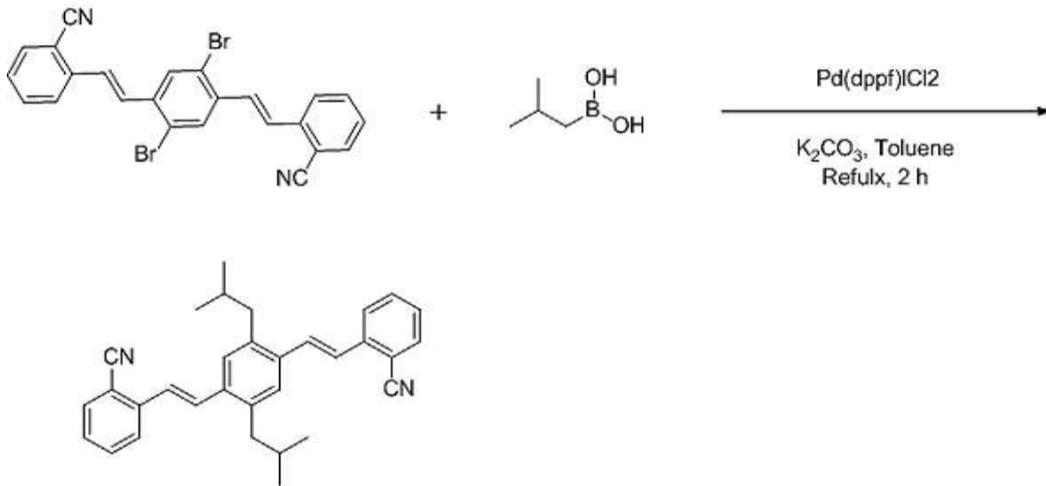


[0279]

[0280] 2,5-디브로모테레프탈알데히드 (5 g, 17.1 mmol), 단계 1에서 제조된 2-시아노벤질포스포네이트(8.675 g, 34.3 mmol)를 디메틸포름아미드(51 mL)에 용해시킨 후 수산화나트륨(2 g, 51.4 mmol)을 천천히 떨어뜨린 후, 50°C 까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터 하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 화합물을 디메틸술폭시드로 재결정하여 화합물 21을 수득하였다.

[0281] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.68 - 7.60 (m, 3H), 7.55 (td, $J = 7.5, 1.4$ Hz, 1H), 7.35 (td, $J = 7.5, 1.4$ Hz, 1H), 7.29 (d, $J = 15.1$ Hz, 1H), 7.22 (d, $J = 14.9$ Hz, 1H).

[0282] 실시예 12: 화합물 23의 합성



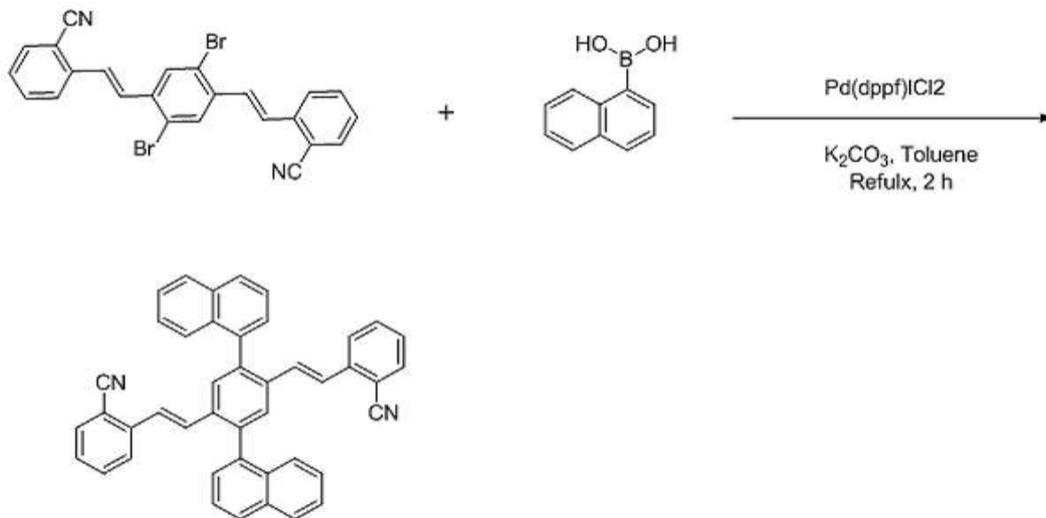
화합물 23

[0283]

[0284] 실시예 11의 화합물 21 (5 g, 10.20 mmol), 이소부틸붕소산(2.29 g, 22.44 mmol)과 탄산칼륨(8.459 g, 61.2 mmol)을 무수톨루엔(65.28 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매 (0.746 g, 1.02 mmol) 를 넣고 120℃로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 23을 수득하였다.

[0285] ¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.61 (ddd, *J* = 7.5, 6.2, 1.5 Hz, 2H), 7.54 (td, *J* = 7.4, 1.5 Hz, 1H), 7.42 (s, 1H), 7.34 (td, *J* = 7.3, 1.6 Hz, 1H), 7.29 - 7.18 (m, 2H), 2.58 (d, *J* = 7.5 Hz, 2H), 2.25 - 2.05 (m, 1H), 1.05 (d, *J* = 6.3 Hz, 6H).

[0286] 실시예 13: 화합물 24의 합성



화합물 24

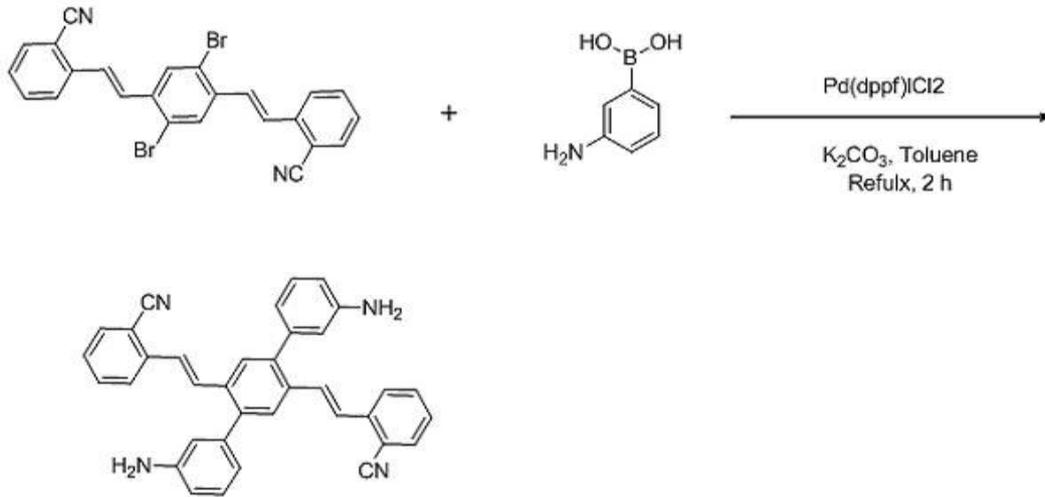
[0287]

[0288] 실시예 11의 화합물 21(5 g, 10.20 mmol), 나프탈렌-1-일붕소산(3.86 g, 22.44 mmol)과 탄산칼륨(8.459 g, 61.2 mmol)을 무수톨루엔(65.28 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(0.746 g, 1.02 mmol)를 넣고 120℃로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 24를 수득하였다.

[0289] ¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 8.11 (s, 1H), 7.96 - 7.91 (m, 1H), 7.91 - 7.87 (m, 1H), 7.86 (dd, *J* =

7.1, 1.8 Hz, 1H), 7.63 - 7.58 (m, 2H), 7.57 (d, $J = 4.8$ Hz, 2H), 7.52 (td, $J = 7.4, 1.4$ Hz, 1H), 7.50 - 7.41 (m, 3H), 7.33 (td, $J = 7.6, 1.7$ Hz, 1H), 7.28 (d, $J = 14.9$ Hz, 1H).

[0290] **실시예 14: 화합물 26의 합성**



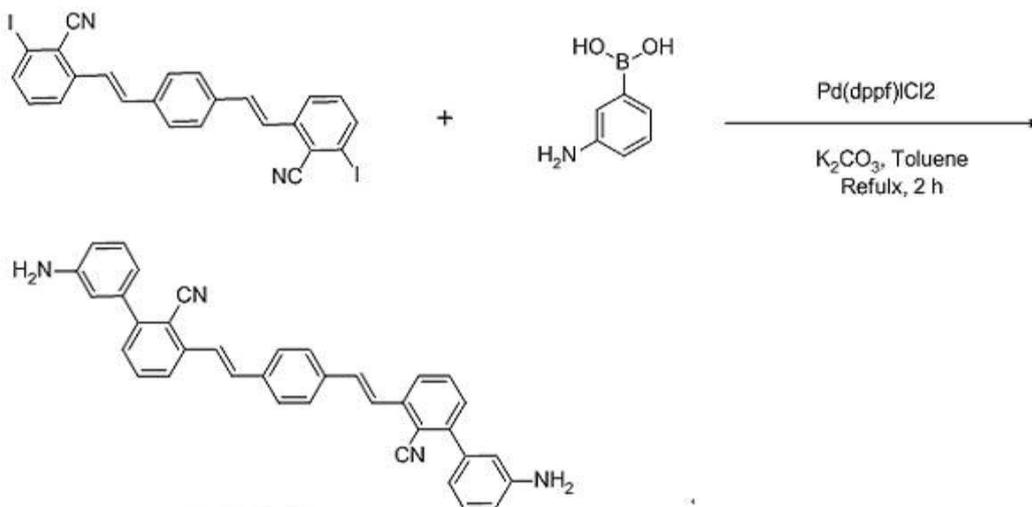
화합물 26

[0291]

[0292] 실시예 11의 화합물 21(5 g, 10.20 mmol), (3-아미노페닐)보론산(3.86 g, 22.44 mmol)과 탄산칼륨(8.459 g, 61.2 mmol)을 무수톨루엔(65.28 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(0.746 g, 1.02 mmol)를 넣고 120°C로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 26을 수득하였다.

[0293] ^1H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 8.06 (s, 1H), 7.62 (ddd, $J = 7.4, 4.3, 1.5$ Hz, 2H), 7.54 (td, $J = 7.5, 1.5$ Hz, 1H), 7.39 - 7.25 (m, 3H), 7.15 (d, $J = 14.9$ Hz, 1H), 7.09 (dt, $J = 7.7, 1.5$ Hz, 1H), 6.99 (t, $J = 1.5$ Hz, 1H), 6.70 (dt, $J = 7.5, 1.4$ Hz, 1H), 3.94 (s, 2H).

[0294] **실시예 15: 화합물 27의 합성**



화합물 27

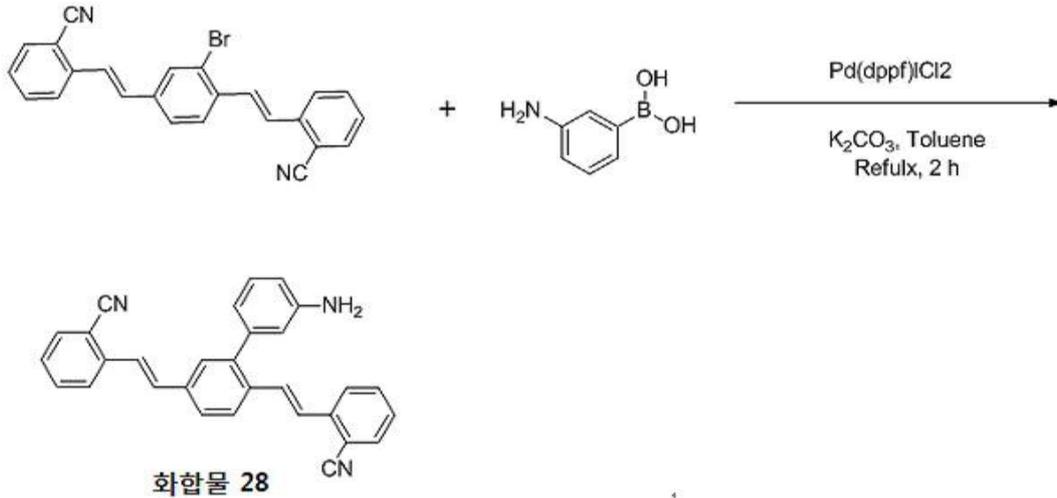
[0295]

[0296] 실시예 2의 화합물 2(5 g, 8.6 mmol), (3-아미노페닐)보론산(2.58 g, 18.8 mmol)과 탄산칼륨(7.1 g, 51.4 mmol)을 무수톨루엔(54.78 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(0.626 g, 0.9 mmol)를 넣고 120°C로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음

메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 27을 수득하였다.

[0297] ^1H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.77 - 7.64 (m, 3H), 7.53 (d, J = 15.1 Hz, 1H), 7.45 (s, 2H), 7.25 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.16 (d, J = 15.1 Hz, 1H), 7.06 (dt, J = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 6.97 (t, J = 1.4 Hz, 1H), 6.67 (dt, J = 7.5, 1.5 Hz, 1H), 3.89 (s, 2H).

[0298] **실시예 16: 화합물 28의 합성**



[0299] 실시예 6의 화합물 11(5 g, 12.16 mmol), (3-아미노페닐)보론산(1.831 g, 13.37 mmol)과 탄산칼륨(5.04 g, 36.47 mmol)을 무수톨루엔(51.06 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(0.445 g, 0.61 mmol)를 넣고 120°C로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거 한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 28을 수득하였다.

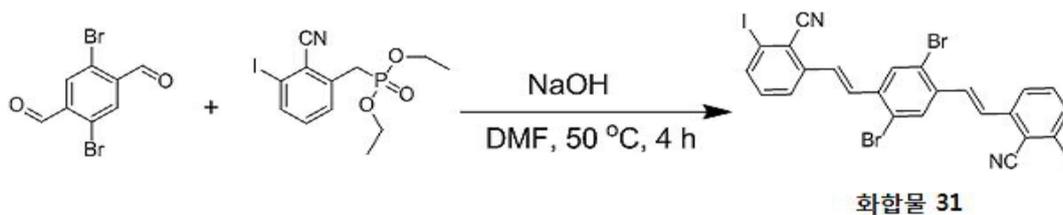
[0300] ^1H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.88 (s, 2H), 7.60 (ddd, J = 25.8, 9.8, 6.0 Hz, 16H), 7.42 (s, 2H), 7.35 (d, J = 2.6 Hz, 4H), 7.28 (d, J = 8.1 Hz, 3H), 7.15 - 7.04 (m, 6H), 6.98 (s, 2H), 6.70 (s, 2H), 4.00 - 3.85 (m, 4H).

[0302] **실시예 17: 화합물 31 합성**

[0303] 단계1

[0304] 실시예 2 화합물 2의 합성에서의 단계 1, 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0305] 단계 2



[0306] 2,5-디브로모테레프탈알데히드(5 g, 17.1 mmol)와 단계 1에서 제조된 디에틸 2-시아노-3-요오도 벤질포스포네이트(13 g, 34.3 mmol)를 디메틸포름아마이드(51.38 mL)에 용해시킨 후 수산화나트륨(2.05 g, 51.4 mmol)을 천천히 떨어트린 후 50°C까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 디메틸설폭시드로 재결정하여 화합물 31을 수득하였다.

[0308] ^1H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.74 (dd, $J = 7.5, 1.4$ Hz, 2H), 7.60 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.59 (s, 2H), 7.58 (d, $J = 1.4$ Hz, 1H), 7.33 (d, $J = 7.6$ Hz, 2H), 7.29 (s, 4H).

[0309] **실시예 18: 화합물 32의 합성**

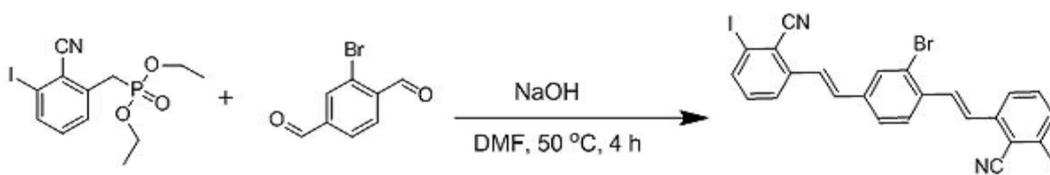
[0310] 단계 1

[0311] 실시예 5의 단계 1과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0312] 단계 2

[0313] 실시예 2의 단계 1, 단계 2, 단계 3 방법과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0314] 단계 3



화합물 32

[0315]

[0316] 단계 1의 2-브로모 테레프탈 알데히드(5 g, 23.5 mmol)와 단계 2의 디에틸 2-시아노-3-요오도벤질포스포네이트(17.78 g, 46.9 mmol)를 디메틸포름아미드(70.41 mL)에 용해시킨 후 수산화나트륨(2.82 g, 70.4 mmol)을 천천히 떨어뜨린 후 50°C까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 디메틸술폰으로 재결정하여 화합물 32를 수득하였다.

[0317] ^1H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.74 (dd, $J = 7.5, 1.4$ Hz, 2H), 7.65 (d, $J = 1.4$ Hz, 1H), 7.61 (ddd, $J = 7.4, 3.9, 1.4$ Hz, 2H), 7.49 - 7.41 (m, 2H), 7.40 - 7.26 (m, 5H), 7.11 (d, $J = 15.1$ Hz, 1H).

[0318] **실시예 19: 화합물 33의 합성**

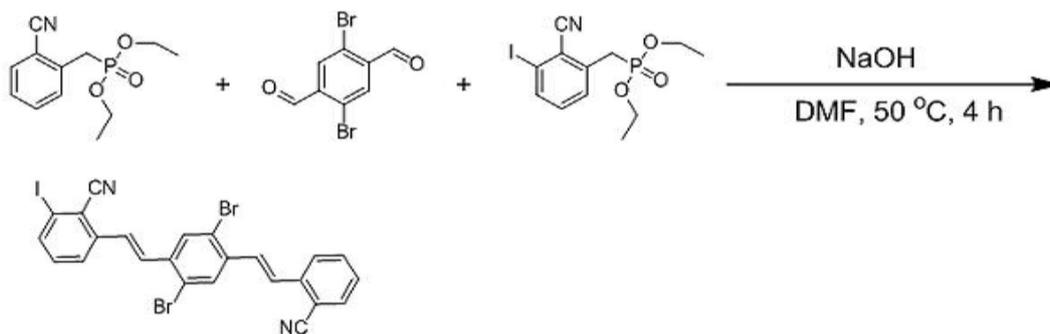
[0319] 단계 1

[0320] 실시예 6에서의 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0321] 단계 2

[0322] 실시예 2의 단계 1, 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0323] 단계 3



화합물 33

[0324]

[0325] 2,5-디브로모테레프탈알데히드(5 g, 17.1 mmol), 단계 1에서 제조된 2-시아노 벤질포스포네이트(6.49 g, 17.1 mmol)와 단계 2에서 제조된 디에틸 2-시아노-3-요오도벤질포스포네이트(4.38 g, 17.1 mmol)를 디메틸포름아마이드(51.38 mL)에 용해시킨 후 수산화나트륨(2.05 g, 51.4 mmol)을 천천히 떨어뜨린 후 50℃까지 승온시키고 4 시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 디메틸술폭시드로 재결정하여 화합물 33을 수득하였다.

[0326] ¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.74 (dd, *J* = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.63 (s, 1H), 7.61 (dt, *J* = 7.4, 1.7 Hz, 2H), 7.59 - 7.52 (m, 3H), 7.37 - 7.23 (m, 6H).

[0327] **실시예 20: 화합물 34의 합성**

[0328] 단계 1

[0329] 실시예 6에서의 단계 1과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

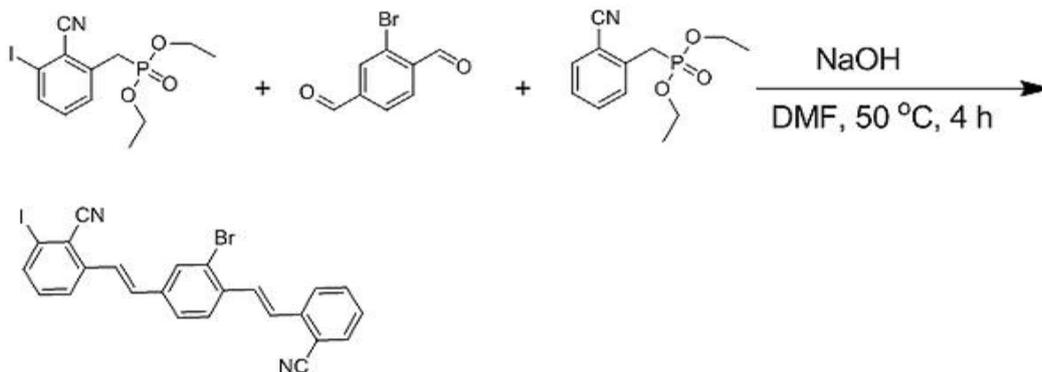
[0330] 단계 2

[0331] 실시예 6에서의 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0332] 단계 3

[0333] 실시예 2의 단계 1, 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0334] 단계 4



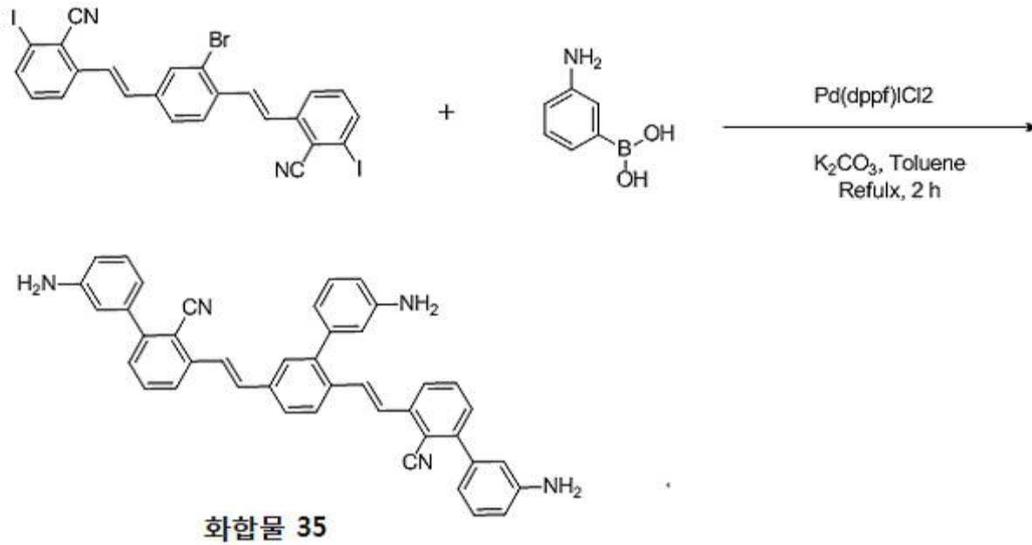
화합물 34

[0335]

[0336] 단계 1에서 제조된 2-브로모테레프탈알데히드(5 g, 23.5 mmol), 단계 2에서 제조된 2-시아노벤질포스포네이트(9 g, 23.5 mmol)와 단계 3에서 제조된 디에틸 2-시아노-3-요오도벤질포스포네이트 (6 g, 23.5 mmol)를 디메틸포름아마이드(70.41 mL)에 용해시킨 후 수산화나트륨 (2.82 g, 70.4 mmol)를 천천히 떨어뜨린 후 50℃까지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 디메틸술폭시드로 재결정하여 화합물 34를 수득하였다.

[0337] ¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.74 (dd, *J* = 7.6, 1.5 Hz, 1H), 7.66 - 7.59 (m, 4H), 7.56 (td, *J* = 7.4, 1.4 Hz, 1H), 7.47 (d, *J* = 15.2 Hz, 1H), 7.43 (dd, *J* = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.42 - 7.26 (m, 5H), 7.11 (d, *J* = 15.1 Hz, 1H).

[0338] 실시예 21: 화합물 35의 합성



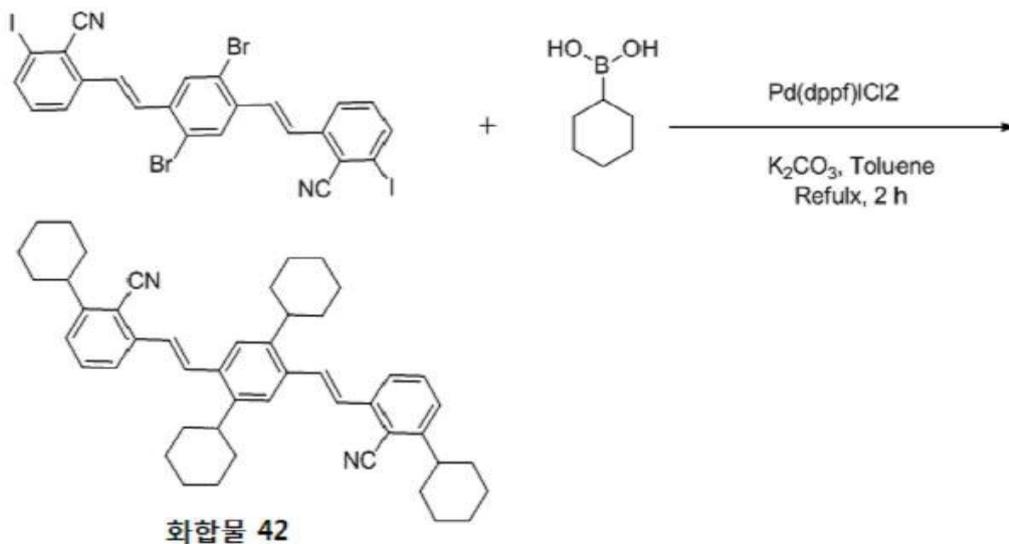
[0339]

[0340] 화합물 32 (5 g, 7.54 mmol), (3-아미노페닐) 보론산(3.41 g, 24.9 mmol)과 탄산칼륨(9.4 g, 67.86 mmol)을 무수톨루엔(64.85 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매 (0.828 g, 1.13 mmol) 를 넣고 120℃로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 35를 수득하였다.

[0341]

¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.84 (d, *J* = 1.3 Hz, 1H), 7.75 - 7.70 (m, 3H), 7.67 (ddd, *J* = 6.6, 4.8, 2.6 Hz, 3H), 7.61 (d, *J* = 7.7 Hz, 1H), 7.59 (dd, *J* = 7.6, 1.2 Hz, 1H), 7.46 (d, *J* = 15.1 Hz, 1H), 7.30 - 7.20 (m, 4H), 7.13 (d, *J* = 15.2 Hz, 1H), 7.10 - 7.06 (m, 2H), 7.04 (dt, *J* = 7.5, 1.5 Hz, 2H), 7.00 (t, *J* = 1.4 Hz, 1H), 6.96 (t, *J* = 1.3 Hz, 2H), 6.71 - 6.63 (m, 3H), 4.20 (s, 2H), 3.90 (s, 4H).

[0342] 실시예 22: 화합물 42의 합성



[0343]

[0344] 화합물 32(5 g, 7.54 mmol), 시클로헥실보론산(4.246 g, 33.18 mmol)과 탄산칼륨(12.5 g, 90.49 mmol)을 무수톨루엔(81.44 mL)에 용해시킨 후, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드 촉매(1.1 g, 1.5 mmol)를 넣고 120℃로 승온시켰다. 2시간 반응 후 상온에서 냉각시킨 후 용매를 제거한 다음 메탄올로 씻어주고 얻은 화합물을 클로로포름으로 재결정하여 화합물 42를 수득하였다.

[0345]

¹H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.57 - 7.52 (m, 4H), 7.52 - 7.47 (m, 2H), 7.39 - 7.34 (m, 2H), 7.26 -

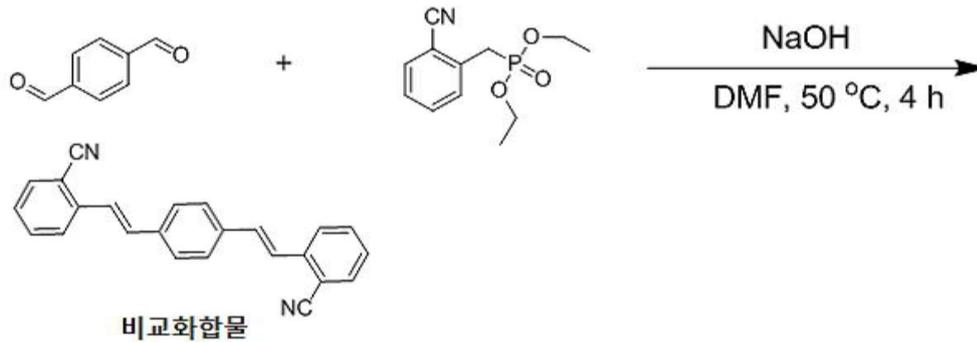
7.19 (m, 2H), 7.17 - 7.11 (m, 2H), 3.27 (s, 1H), 3.13 (s, 1H), 2.69 - 2.54 (m, 2H), 2.25 - 2.08 (m, 8H), 1.78 - 1.62 (m, 20H), 1.47 - 1.30 (m, 12H).

[0346] **비교예 1: 비교화합물의 합성**

[0347] 단계 1

[0348] 실시예 3에서의 단계 2, 단계 3과 동일한 방법으로 중간체를 수득하였다.

[0349] 단계 2



[0350]

[0351] 테레프탈알데히드 (5 g, 37.3 mmol), 단계 1에서 제조된 2-시아노벤질포스포 네이트(18.88 g, 74.6 mmol)를 디 메틸포름아마이드(111.85 mL)에 용해시킨 후 수산화 나트륨(4.47 g, 111.8 mmol)을 천천히 떨어뜨린 후, 50°C까 지 승온시키고 4시간 반응 후 상온에서 냉각한 후 감압필터하여 케이크 형태의 화합물을 메탄올로 씻어주어 화 합물을 디메틸술폭시드로 재결정하여 비교화합물을 제조하였다.

[0352] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.82 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.67 (dd, J = 7.8, 1.0 Hz, 1H), 7.61 (s, 2H), 7.59 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 7.50 (d, J = 16.2 Hz, 1H), 7.35 (td, J = 7.6, 0.9 Hz, 1H), 7.29 (d, J = 16.2 Hz, 1H).

[0353] [시험예]

[0354] 발광특성 분석

[0355] 분석하고자 하는 시료 (A)의 발광 양자효율(Φ_{F(A)})은 비교예 1에 따라 제조된 다이사이안스티릴 벤젠과 화합물 1, 10, 17, 18 및 21의 UV 흡광도(A), PL(Photoluminescence) 세기(면적), 및 해당 용매의 굴절율 (n)를 대입 해 계산하였다. 즉 특정 물질들의 농도에 관계없이 농도와 관련된 흡광도 A값에 대한 상대적인 PL 세기를 비교 하는 방식으로 발광특성을 분석하였다.

[0356] [식]

$$\Phi_{F(A)} = \Phi_{F(ref)} \times \frac{PL_A}{UV_A} \times \frac{UV_{ref}}{PL_{ref}} \times \left(\frac{\eta_A}{\eta_{ref}} \right)^2$$

[0357]

[0358] 이에 따른 발광특성 분석 결과를 표 1과 도 1에 나타내었다.

표 1

[0359]

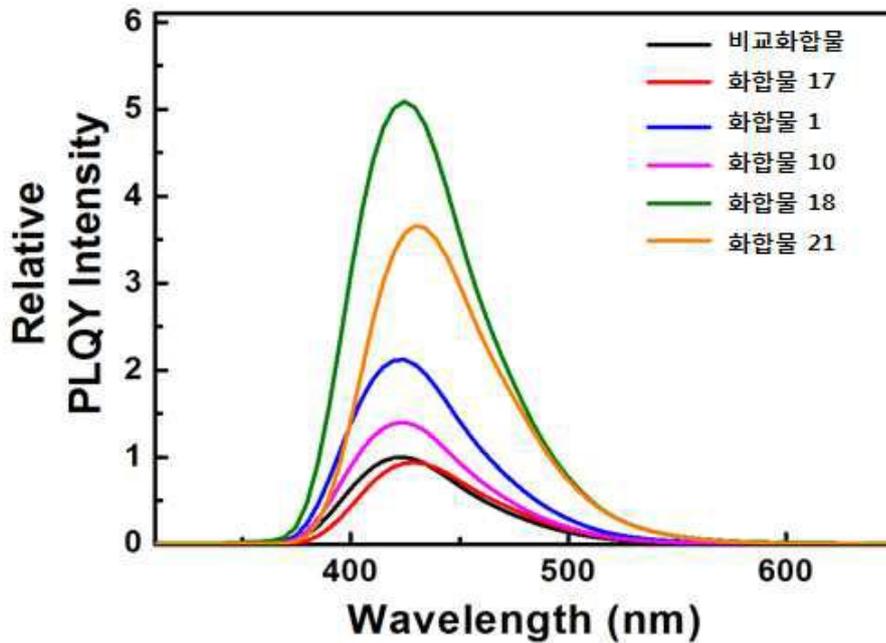
구분	상대적양자효율 (PLQY)	UV(흡수)	PL(면적)	PL(강도)
비교화합물	1.00	1.1696	1436400	19670.84

화합물 1	5.09	0.1797	1122294	15083.02
화합물 5	1.87	0.8251	1892105	23221.62
화합물 7	3.91	0.9189	4414981	48521.18
화합물 9	0.95	0.9495	1102821	14942.46
화합물 10	3.66	0.3154	1417284	19116.61
화합물 17	1.09	0.9051	1211981	20981.79
화합물 18	2.12	0.9906	2574984	35190.20
화합물 21	1.40	0.9557	1646578	22604.14
화합물 27	3.63	0.8516	3797862	41982.91
화합물 42	1.97	0.9105	2199876	26181.13

[0360] 이에 따르면, 유사한 농도조건에서의 각 형광재료용 화합물들을 비교예 1의 비교화합물과 비교하여 상대적으로 발광 세기를 분석한 것으로, 메틸기가 하나 치환되어 있는 화합물 17을 제외하고는 본 발명의 화합물 1, 5, 7, 9, 10, 18, 21, 27 및 42는 비교화합물에 비하여 상대적으로 높은 형광수율을 나타내었다. 특히, 메틸기가 두 개 치환된 화합물 1의 경우 비교화합물 보다 무려 5배 이상 발광세기가 현저히 증가됨을 알 수 있었다. 이러한 결과는 본원발명의 형광재료용 화합물은 상대적으로 적은 양을 사용하면서도 동일한 형광증백 특성을 나타낼 수 있으므로, 환경적 측면이나 경제적 측면에서 매우 유리한 신규물질임을 나타내는 것이다.

도면

도면1



【심사관 직권보정사항】

【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 청구항 제11항

【변경전】

제8항의 형광재료를 포함하는 전기 및 전자소자.

【변경후】

제8항의 형광재료를 포함하는 전기소자 또는 전자소자.