



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년07월10일  
(11) 등록번호 10-2132843  
(24) 등록일자 2020년07월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07D 413/04 (2006.01) C07D 263/57 (2006.01)  
C09K 11/06 (2006.01) D06P 1/00 (2006.01)  
H01L 51/00 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
C07D 413/04 (2013.01)  
C07D 263/57 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2018-0115825  
(22) 출원일자 2018년09월28일  
심사청구일자 2018년09월28일  
(65) 공개번호 10-2020-0036322  
(43) 공개일자 2020년04월07일  
(56) 선행기술조사문헌  
JP04093388 A\*  
(뒷면에 계속)

(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

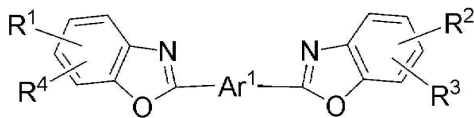
심사관 : 이정국

(54) 발명의 명칭 **벤조옥사졸 유도체 및 이를 포함하는 형광재료**

(57) 요약

본 발명은 하기 구조식 1로 표시되는 벤조옥사졸 유도체에 관한 것이다. 이에 따라, 형광수율이 현저히 개선되고, 염색성과 분산성이 우수하며, 사용량을 저감함으로써 환경오염을 최소화하고 경제성을 향상시킬 수 있는 형광재료를 제공할 수 있다.

[구조식 1]



(52) CPC특허분류

*C09K 11/06* (2013.01)  
*D06P 1/0012* (2013.01)  
*H01L 51/0071* (2013.01)  
*C09K 2211/1033* (2013.01)

(56) 선행기술조사문헌

JP2007191604 A\*  
JP36018530 B\*  
JP63147166 A\*  
US04267343 A\*

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 10070174  
부처명 산업통상자원부  
연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원  
연구사업명 산업소재핵심기술개발  
연구과제명 COD 저감형 고기능성 형광염료 및 친환경 공정기술 개발  
기여율 1/1  
주관기관 삼원산업(주)  
연구기간 2016.11.01 ~ 2019.10.31

---

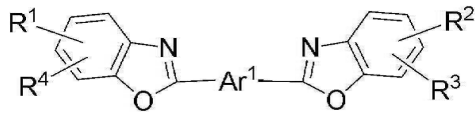
명세서

청구범위

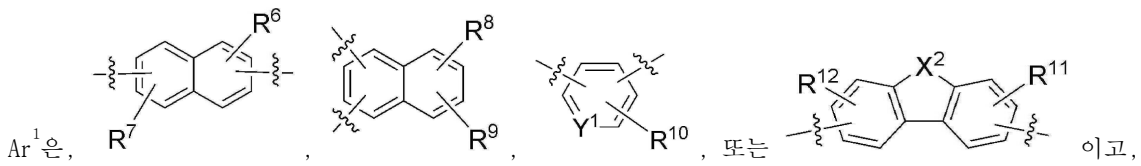
청구항 1

하기 구조식 1로 표시되는 벤조옥사졸 유도체.

[구조식 1]



구조식 1에서,

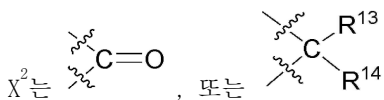


R<sup>6</sup> 및 R<sup>7</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자 또는 할로젠기이고, 동시에 모두 수소원자는 아니고,

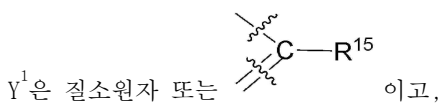
R<sup>8</sup> 및 R<sup>9</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자 또는 할로젠기이고, 동시에 모두 수소원자는 아니고,

R<sup>10</sup>은 할로젠기이고,

R<sup>11</sup> 및 R<sup>12</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,



R<sup>13</sup> 및 R<sup>14</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,



R<sup>15</sup>은 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>은 수소원자이다.

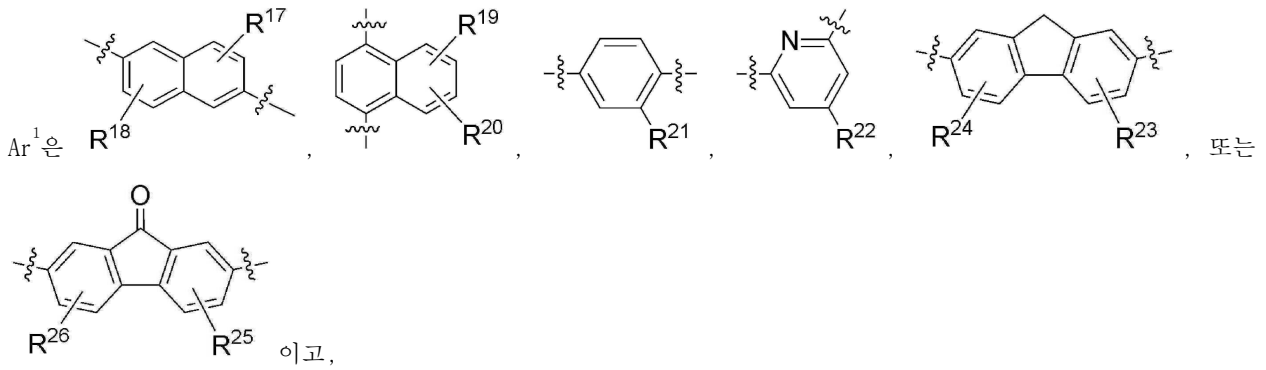
청구항 2

삭제

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 구조식 1에서,



R<sup>17</sup> 및 R<sup>18</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 할로젠기이고, 동시에 모두 수소원자는 아니고,

R<sup>19</sup> 및 R<sup>20</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 할로젠기이고, 동시에 모두 수소원자는 아니고,

R<sup>21</sup> 및 R<sup>22</sup>은 할로젠기이고,

R<sup>23</sup> 내지 R<sup>26</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기인 것을 특징으로 하는 벤조옥사졸 유도체.

**청구항 4**

제3항에 있어서,

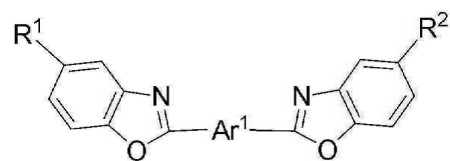
R<sup>21</sup> 및 R<sup>22</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 클로르기 또는 브로모기인 것을 특징으로 하는 벤조옥사졸 유도체.

**청구항 5**

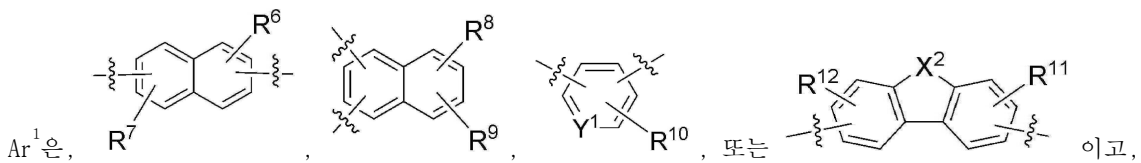
제1항에 있어서,

상기 구조식 1은 하기 구조식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 벤조옥사졸 유도체.

[구조식 2]



구조식 2에서,

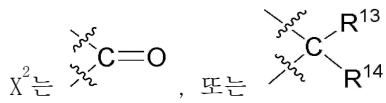


R<sup>6</sup> 및 R<sup>7</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 할로젠기이고, 동시에 모두 수소원자는 아니고,

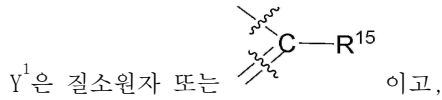
R<sup>8</sup> 및 R<sup>9</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 할로젠기이고, 동시에 모두 수소원자는 아니고,

R<sup>10</sup>은 할로젠기이고,

R<sup>11</sup> 및 R<sup>12</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,



R<sup>13</sup> 및 R<sup>14</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,



R<sup>15</sup>는 수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이다.

**청구항 6**

제5항에 있어서,

상기 구조식 2에서,

R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 서로 같은 치환기인 것을 특징으로 하는 벤조옥사졸 유도체.

**청구항 7**

제5항에 있어서,

상기 구조식 2에서,

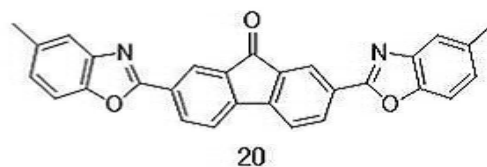
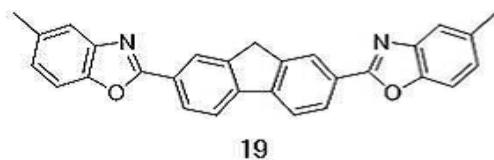
R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 서로 같고, 메틸기, 에틸기, 부틸기, 아이소프로필기, 또는 터셔리부틸기인 것을 특징으로 하는 벤조 옥사졸 유도체.

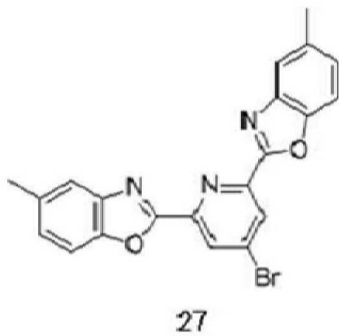
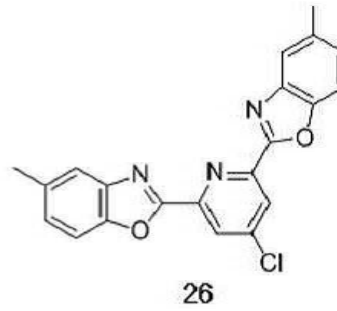
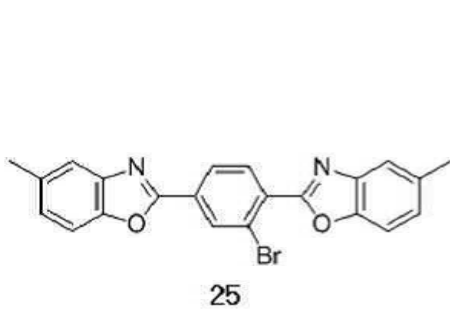
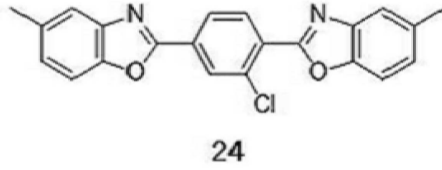
**청구항 8**

제1항에 있어서,

상제1항에 있어서,

상기 구조식 1로 표시되는 벤조옥사졸 유도체는 하기 화합물 19, 20, 24, 25, 26 및 27 중에서 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 하는 벤조옥사졸 유도체.





청구항 9

제1항, 및 제3항 내지 제8항 중에서 선택된 어느 한 항의 벤조옥사졸 유도체를 포함하는 형광재료.

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 형광재료용 화합물 및 이를 포함하는 형광염료에 관한 것으로, 보다 상세하게는 형광재료용 벤조옥사졸 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] 자외선 영역 (330~380 nm) 에서 빛을 흡수하고 가시광선의 청색영역 (400~450 nm) 에서 발광하는 원리를 가지는 형광염료는 섬유, 제지, 세제, 위생용품, 페인트 등 다양한 분야에서 응용되고 있다. 섬유제품의 경우 표백 처리후에도 가시부에서 약간의 흡수가 일어나 옅은 황색을 띠는 것을 청색의 광학작용에 의해 보강하여 백색을 더욱 하얗게 보이게 하는 역할을 한다. 대체로 디아미노스틸벤, 디술폰산, 이미다졸, 옥사졸, 쿠마린계 그리고 피라졸린 등 형태의 구조의 형광염료가 사용되고 있으며, 현재 중국의 대량생산이 시장을 점유하고 있으나, 환경오염문제를 발생시키는 문제로 친환경 재료를 개발이 필요한 상황이다. 기존의 다이사이안스티릴과 벤조옥사졸의 형광염료 재료들은 π-π\* 상호작용(interaction)의 결과로 정렬도가 높은 분자구조를 형성하고 있어서 분쇄공정에 증가에 따른 생산비용의 증가와, 미염착된 염료로 인한 폐수 발생 등 환경적인 문제와 경제적인 문제가 공존하고 있다. 따라서 염료의 사용량을 줄이고, 분산성과 염착성이 우수한 형광염료를 개발할 필요가 있다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

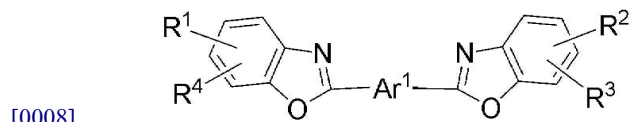
[0004] 본 발명의 목적은 종래 벤조옥사졸계 형광염료를 기반으로 구조적인 다양한 변화를 통해 새로운 형광재료용 화합물을 개발하고, 형광수율을 현저히 개선하여 사용량을 획기적으로 저감함으로써 환경오염을 최소화하고 경제성을 향상시키는 데 있다.

**과제의 해결 수단**

[0005] 본 발명의 하나의 측면에 따르면,

[0006] 하기 구조식 1로 표시되는 벤조옥사졸 유도체가 제공된다.

[0007] [구조식 1]

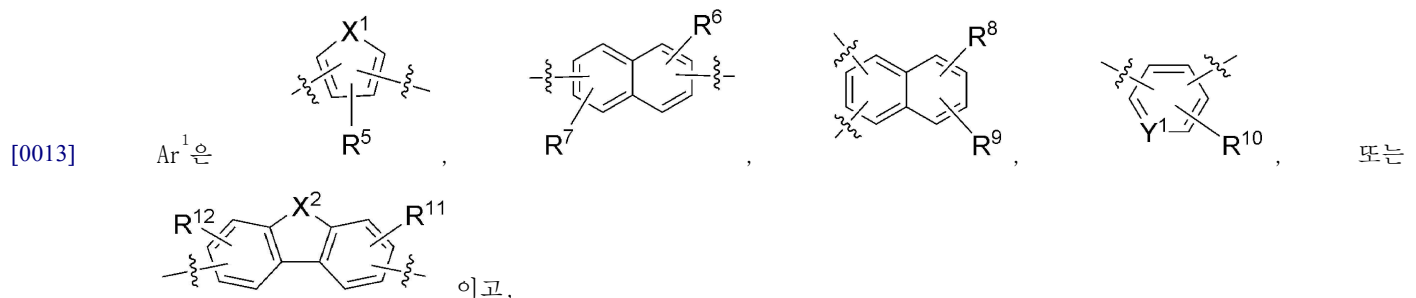


[0009] 구조식 1에서,

[0010] Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

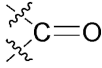
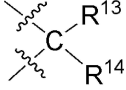
[0011] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기이다.

[0012] 바람직하게는, 상기 구조식 1에서,

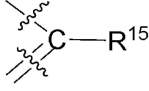


[0014] R<sup>5</sup> 내지 R<sup>12</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0015] X<sup>1</sup>은 황원자 또는 산소원자이고,

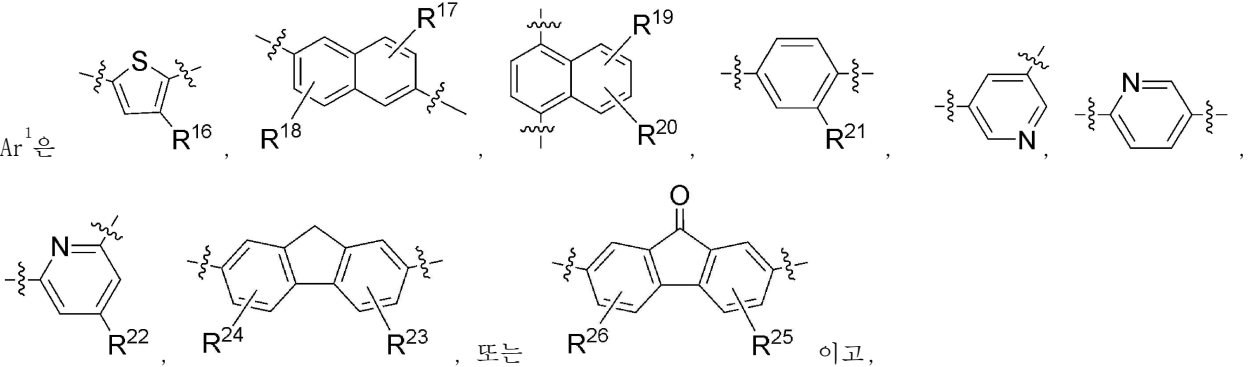
[0016] X<sup>2</sup>는 산소원자, 황원자, , 또는 

[0017] R<sup>13</sup> 및 R<sup>14</sup>는 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 헤테로아릴기이고,

[0018] Y<sup>1</sup>은 질소원자 또는  이고,

[0019] R<sup>15</sup>는 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기일 수 있다.

[0020] 더욱 바람직하게는, 상기 구조식 1에서,

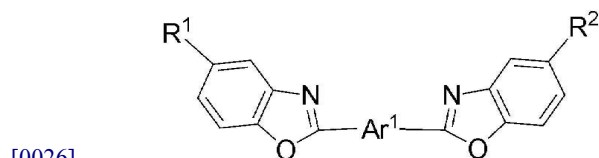
[0021] Ar<sup>1</sup>은 

[0022] R<sup>16</sup> 내지 R<sup>26</sup>은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 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.

[0023] 바람직하게는, R<sup>16</sup>, R<sup>21</sup> 및 R<sup>22</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 클로로기, 브로모기, 아이오도기, 메틸기, 또는 에틸기일 수 있다.

[0024] 바람직하게는, 상기 구조식 1은 하기 구조식 2로 표시될 수 있다.

[0025] [구조식 2]



[0027] 구조식 2에서,

[0028] Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

[0029] R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기,



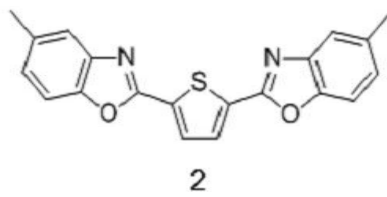
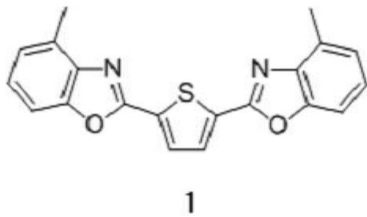
치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기이다.

[0030] 바람직하게는, 상기 구조식 2에서,

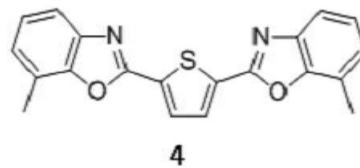
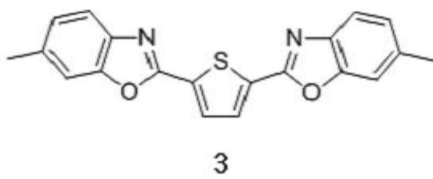
[0031]  $R^1$  및  $R^2$ 는 서로 같은 치환기일 수 있다.

[0032] 더욱 바람직하게는, 상기 구조식 2에서,  $R^1$  및  $R^2$ 는 서로 같고, 수소원자, 플루오로기, 클로로기, 브로모기, 아이오도기, 메틸기, 에틸기, 부틸기, 아이소프로필기, 터셔리부틸기, 메톡시, 또는 에톡시기일 수 있다.

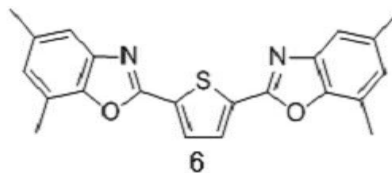
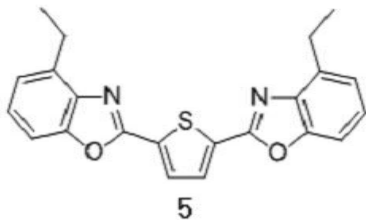
[0033] 상기 구조식 1로 표시되는 벤조옥사졸 유도체는 하기 화합물 1 내지 30 중에서 선택된 어느 하나일 수 있다.



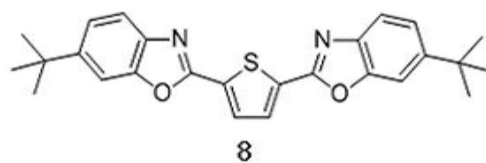
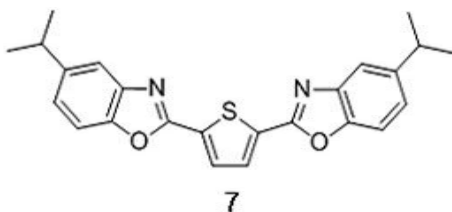
[0034]



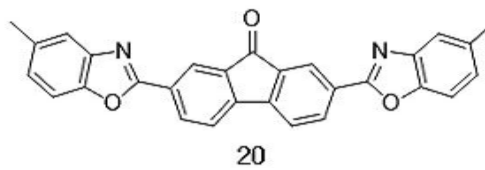
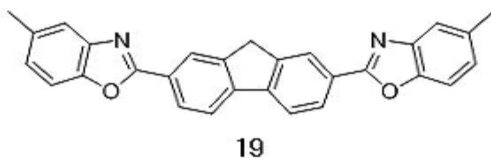
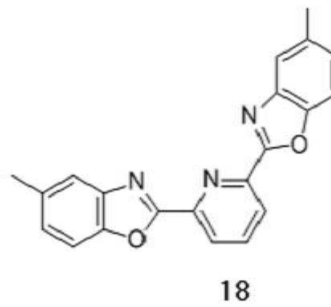
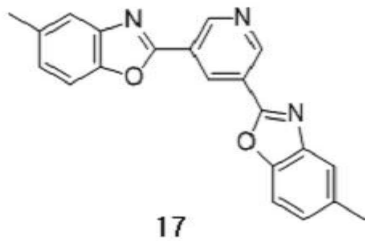
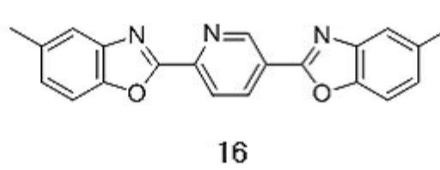
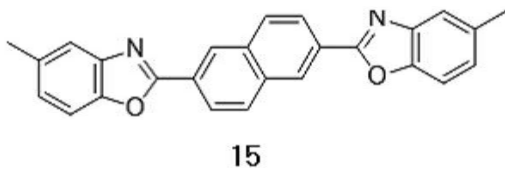
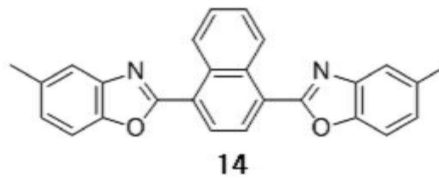
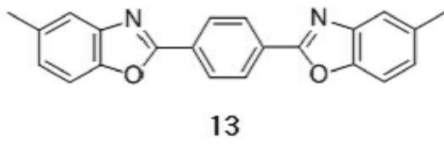
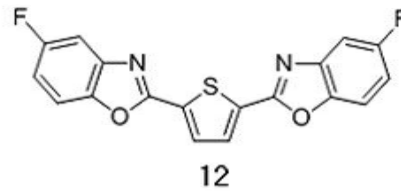
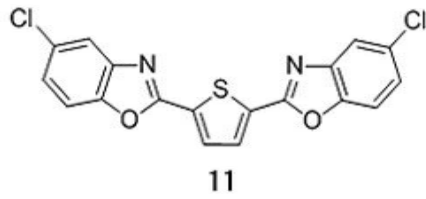
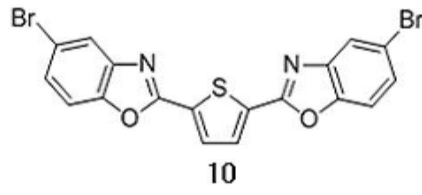
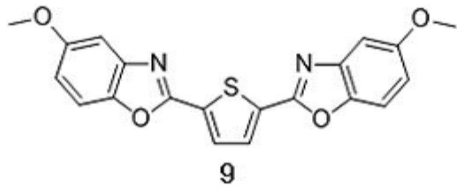
[0035]



[0036]



[0037]



[0038]

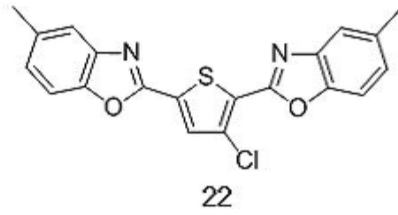
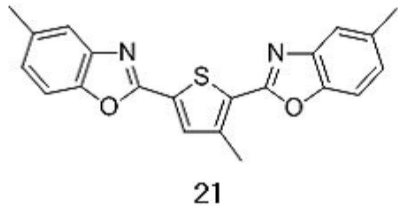
[0039]

[0040]

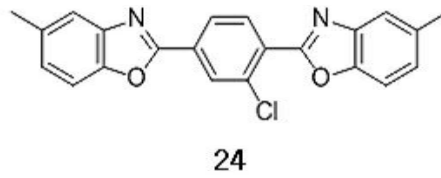
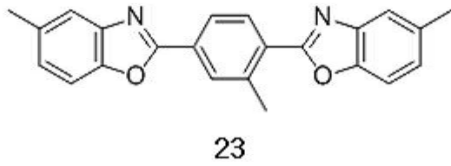
[0041]

[0042]

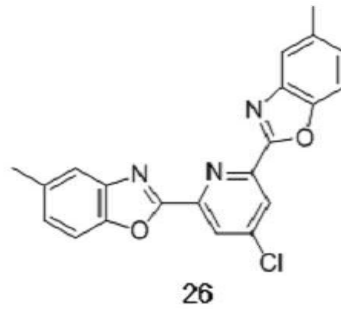
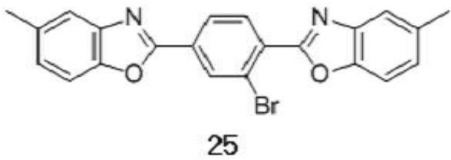
[0043]



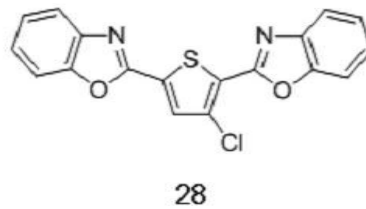
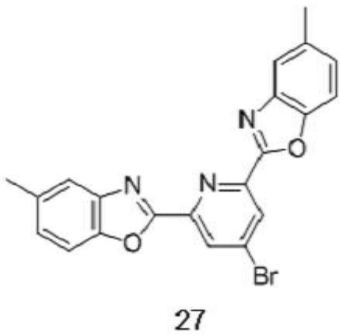
[0044]



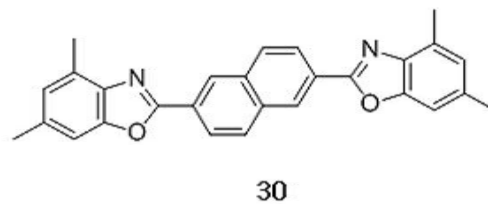
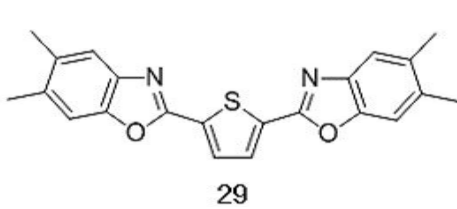
[0045]



[0046]



[0047]



[0048]

[0049] 본 발명의 다른 하나의 측면에 따르면,

[0050] 상기 벤조옥사졸 유도체를 포함하는 형광재료를 제공한다.

[0051] 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.

[0052] 본 발명의 다른 또 하나의 측면에 따르면,

- [0053] 상기 형광재료를 포함하는 섬유제품이 제공된다.
- [0054] 본 발명의 다른 또 하나의 측면에 따르면,
- [0055] 상기 형광재료를 포함하는 전기 및 전자소자가 제공된다.

**발명의 효과**

[0056] 본 발명의 형광염료용 벤조옥사졸 유도체는 벤조옥사졸 유도체의 치환기를 도입하여  $\pi-\pi^*$  상호작용 (interaction)을 억제시킴으로써 분자간 소광효과를 줄여 발광효율을 높이고, 분산성과 염착성이 증가된 형광염료에 사용될 수 있으며, 헤테로아로마틱을 기반으로 파이 콘주게이션이 연결된 구조를 특징으로 발광수율이 형광에서 인광으로 다소 넘어가는 경향을 개선하기 위해 아로마틱 유도체의 연결을 도입하여 형광수율을 증대시킬 수 있다. 또한, 비교적 간단한 한 단계의 반응으로 벤조옥사졸 유도체를 합성을 진행하여 공정의 비용을 절감할 수 있는 효과가 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0057] 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.

[0058] 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(-OSiH<sub>3</sub>), -OSiR<sup>1</sup>H<sub>2</sub>(R<sup>1</sup>은 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>H(R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>R<sup>3</sup>, (R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, 및 R<sup>3</sup>는 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(SiR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>R<sup>3</sup>)(R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, 및 R<sup>3</sup>는 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), 카복실기, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다.

[0059] 또한 상기 치환기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있다.

[0060] 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.

[0061] 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.

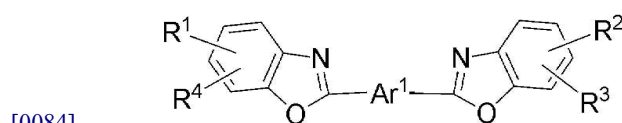
[0062] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0063] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0064] 본 명세서에서 "수소"란 별도의 정의가 없는 한, 일중수소, 이중수소, 또는 삼중수소를 의미한다.

- [0065] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다.
- [0066] 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기" 일 수 있다.
- [0067] 알킬기는 적어도 하나의 이중결합 또는 삼중결합을 포함하고 있는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다.
- [0068] 포화이든 불포화이든 간에 알킬기는 분쇄형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.
- [0069] 알킬기는 C1 내지 C30 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 C1 내지 C20 알킬기, C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.
- [0070] 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.
- [0071] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.
- [0072] "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.
- [0073] "시클로알킬(cycloalkyl)기"는 모노시클릭 또는 융합고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0074] "헤테로시클로알킬(heterocycloalkyl)기"는 시클로알킬기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 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.
- [0075] "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.
- [0076] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0077] "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.
- [0078] 아릴기 및 헤테로아릴기에서 고리의 원자수는 탄소수 및 비탄소원자수의 합이다.
- [0079] "알킬아릴기" 또는 "아릴알킬기"와 같이 조합하여 사용할 때, 상기에 든 각각의 알킬 및 아릴의 용어는 상기 나타난 의미와 내용을 가진다.
- [0080] "아릴알킬기"이란 용어는 벤질과 같은 아릴 치환된 알킬 라디칼을 의미하며 알킬기에 포함된다.
- [0081] "알킬아릴기"이란 용어는 알킬 치환된 아릴 라디칼을 의미하며 아릴기에 포함된다.
- [0082] 이하, 본 발명의 벤조옥사졸 유도체에 대해 설명하기로 한다. 본 발명의 벤조옥사졸 유도체는 하기 구조식 1로 표시될 수 있다.

[0083] [구조식 1]

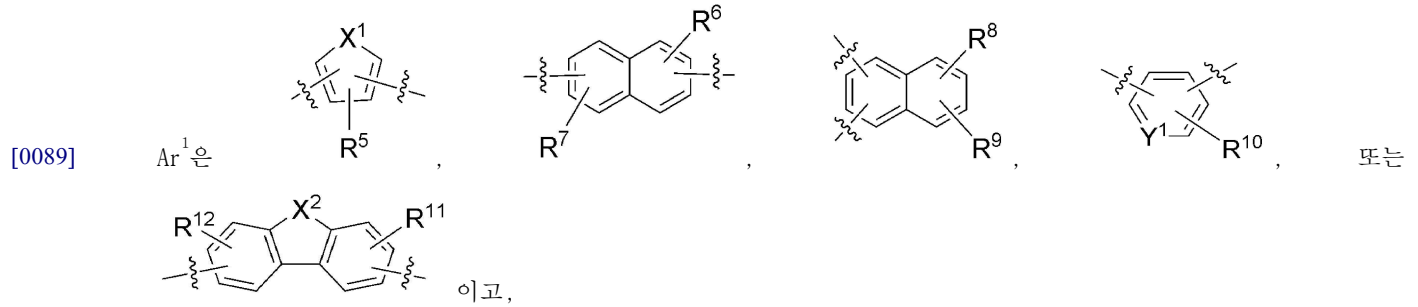


[0085] 구조식 1에서,

[0086] Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

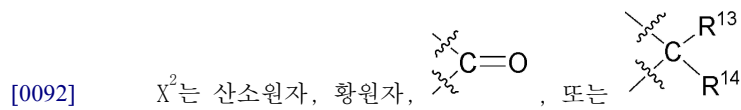
[0087] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기이다.

[0088] 바람직하게는, 상기 구조식 1에서,

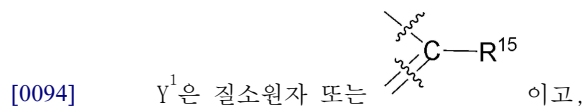


[0090] R<sup>5</sup> 내지 R<sup>12</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0091] X<sup>1</sup>은 황원자 또는 산소원자이고,

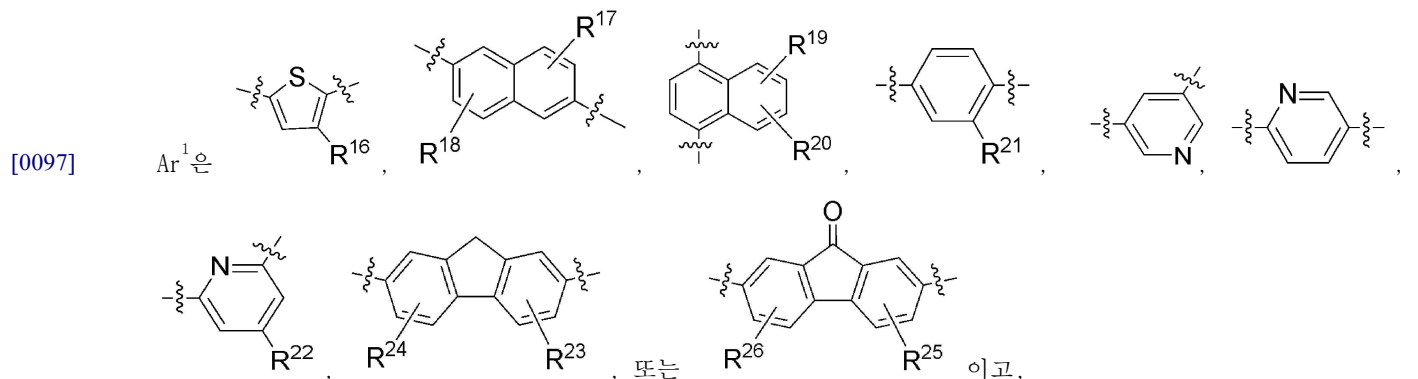


[0093] R<sup>13</sup> 및 R<sup>14</sup>는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,



[0095] R<sup>15</sup>는 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기일 수 있다.

[0096] 더욱 바람직하게는, 상기 구조식 1에서,

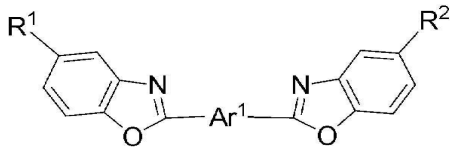


[0098]  $R^{16}$  내지  $R^{26}$ 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0099] 바람직하게는,  $R^{16}$ ,  $R^{21}$  및  $R^{22}$ 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소원자, 클로로기, 브로모기, 아이오도기, 메틸기, 또는 에틸기일 수 있다.

[0100] 바람직하게는, 상기 구조식 1은 하기 구조식 2로 표시될 수 있다. 왜냐하면, 벤조옥사졸의 5번 위치에 치환기가 결합된 화합물이 형광염료에 적용되었을 때 분산성 및 염색성이 향상되는 효과를 갖기 때문이다.

[0101] [구조식 2]



[0102]

[0103] 구조식 2에서,

[0104]  $Ar^1$ 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

[0105]  $R^1$  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, 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 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴옥시기이다.

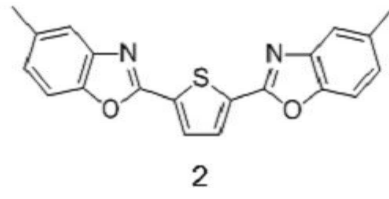
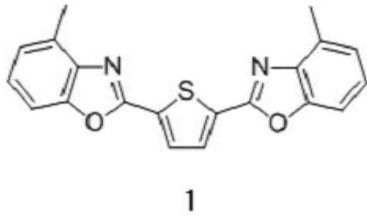
[0106] 바람직하게는, 상기 구조식 2에서,

[0107]  $R^1$  및  $R^2$ 는 서로 같은 치환기일 수 있다.

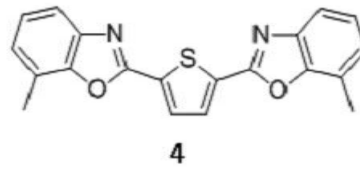
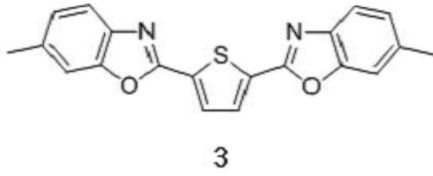
[0108] 더욱 바람직하게는, 상기 구조식 2에서,  $R^1$  및  $R^2$ 는 서로 같고, 수소원자, 플루오로기, 클로로기, 브로모기, 아이오도기, 메틸기, 에틸기, 부틸기, 아이소프로필기, 터셔리부틸기, 메톡시, 또는 에톡시기일 수 있다.

[0109] 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 옥사다리아졸릴기, 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.

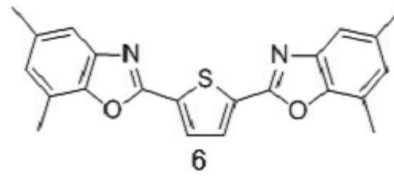
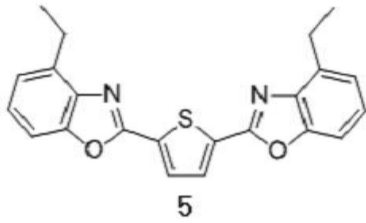
[0110] 상기 구조식 1로 표시되는 벤조옥사졸 유도체는 하기 화합물 1 내지 30 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 본 발명의 범위가 여기에 한정되지 않는다.



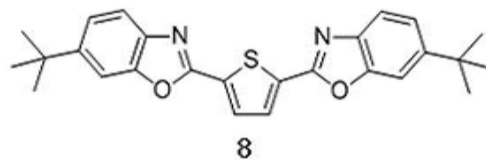
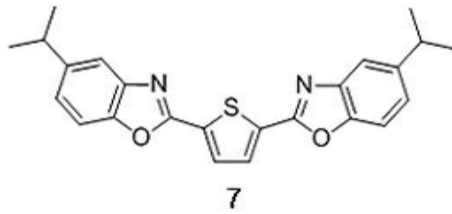
[0111]



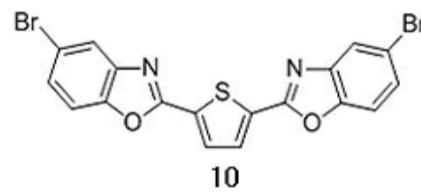
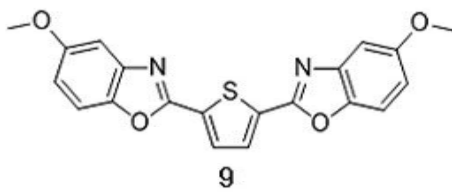
[0112]



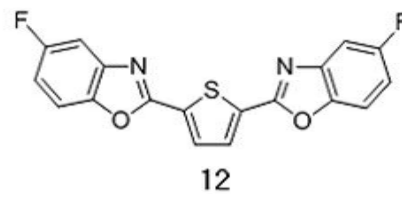
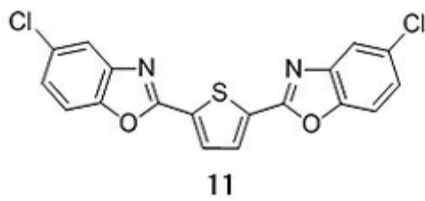
[0113]



[0114]

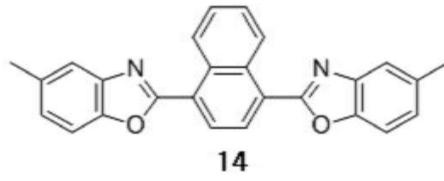
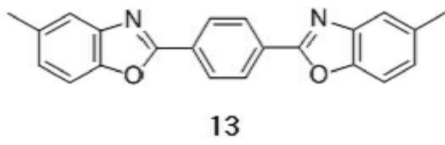


[0115]

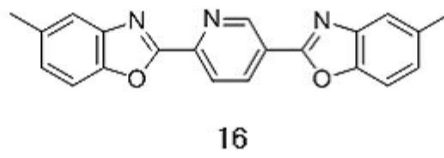
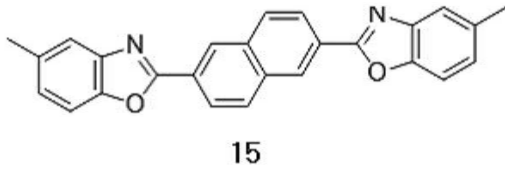


[0116]

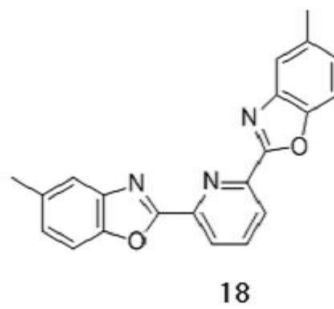
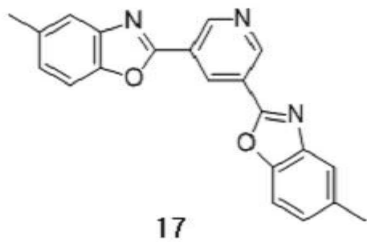




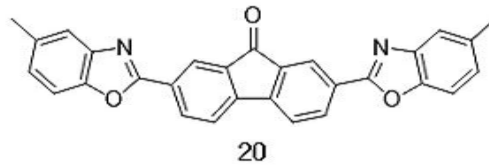
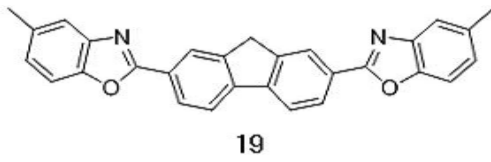
[0117]



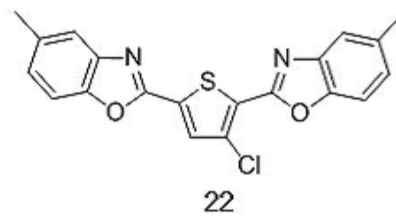
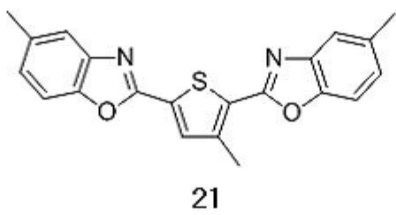
[0118]



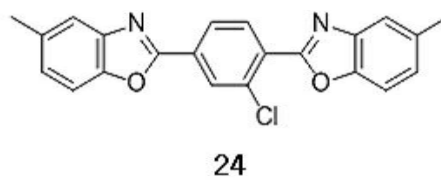
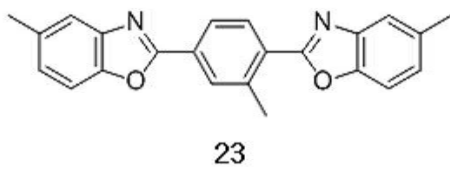
[0119]



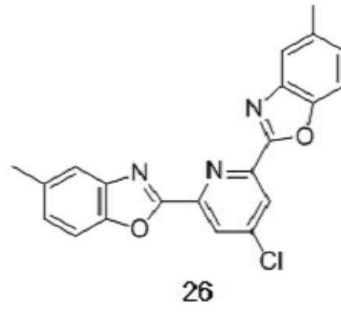
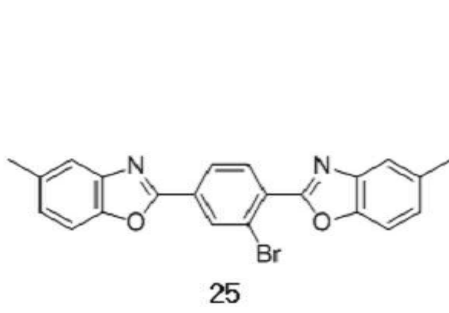
[0120]



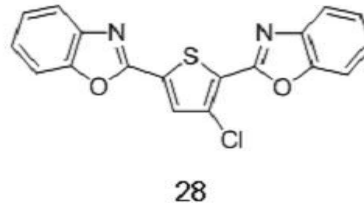
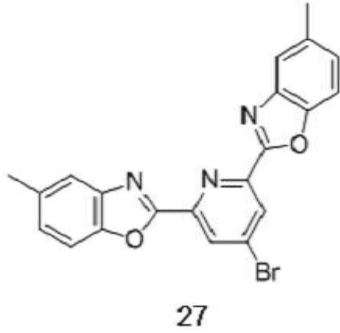
[0121]



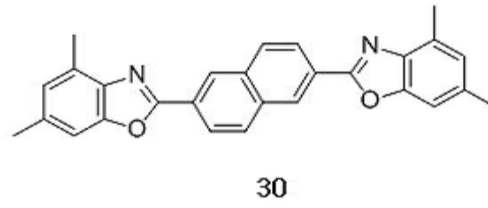
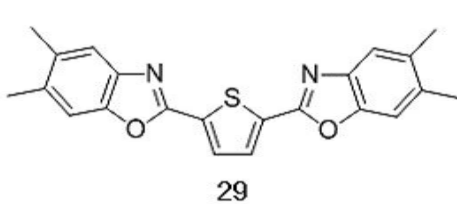
[0122]



[0123]



[0124]



[0125]

[0126] 또한, 본 발명은 상기 벤조옥사졸 유도체를 포함하는 형광재료를 제공한다.

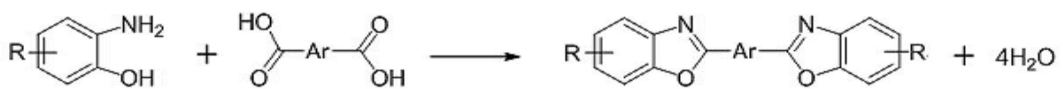
[0127] 상기 형광재료는 섬유염료용 형광재료, 유기전계발광소자용 발광재료, 염료감응형 태양전지용 염료재료, 전기/전자 재료용 잉크 조성물용 잉크재료, 및 표적물질 검출용 형광재료 중에서 선택된 어느 하나의 용도로 사용될 수 있으나, 본 발명의 범위가 여기에 한정되지 않으며 형광재료가 사용될 수 있는 다양한 산업분야에 적용될 수 있다.

[0128] 상기 형광재료는 형광염료가 적용되는 의류 등의 섬유제품에 사용될 수 있다.

[0129] 또한, 상기 형광재료는 유기전계발광소자, 염료감응형 태양전지, 표적물질 검출용 기기, 그 외 형광재료 도입이 가능한 다양한 전기 및 전자 소자에 적용될 수 있다.

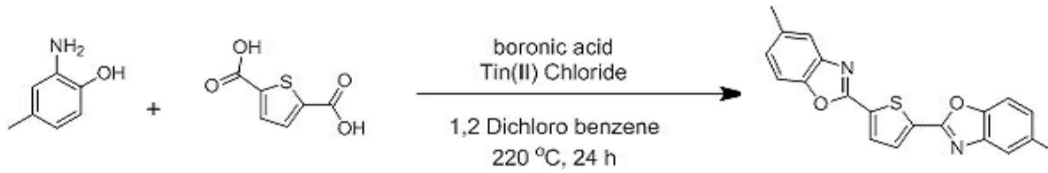
[0130] [실시예]

[0131] 이하, 실시예를 통하여 본 발명에 따른 형광염료용 벤조옥사졸 유도체의 제조방법을 구체적으로 설명한다. 형광염료용 벤조옥사졸 유도체 화합물들은 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이 축합 및 고리화 반응을 통해 제조될 수 있으나 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 이하에서 본 발명의 상세한 이해를 돕기 위하여 대표 화합물들을 들어 본 발명에 따른 벤조옥사졸 기반의 형광염료 화합물들의 제조방법을 설명하나, 이는 단지 그 실시 양태를 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 한정하는 것은 아니다.



[0132] [반응식]

[0133] 실시예 1: 화합물 2의 합성

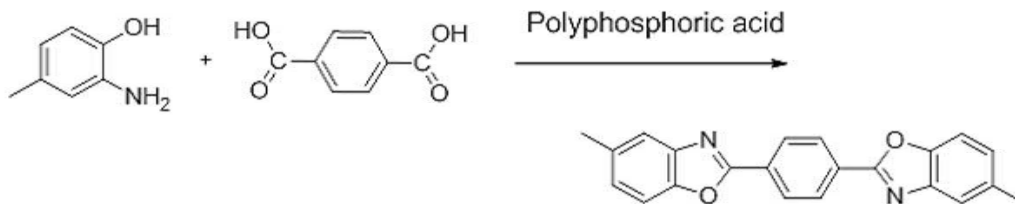


[0134]

[0135] 질소 분위기 하의 반응기에 2,5-티오펜다이카복실산 (10g, 58mmol, 1eq), 2-아미노-4-메틸페놀(20g, 160mmol, 2.75eq)를 1,2-다이클로로벤젠(67ml)에 녹인 후 붕산(1.1g, 17mmol, 0.3eq), 염화제일주석(1.3g 6mmol, 0.1eq)을 첨가하였다. 그 후 덩스탁 장치를 설치한 후 220℃의 온도에서 24시간 동안 교반 가열해주었다. 반응이 완료된 후, 반응기에 남아 있는 1,2-다이클로로벤젠을 감압증류로 제거해주고 반응기에 다이메틸포름아마이드를 넣고 가열 후 냉각시켜 준 후 감압필터하여 고상의 화합물 2을 얻었다(19g, 수율=94%).

[0136] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.98 (s, 2H), 7.25 (dd, J = 4.4, 3.0 Hz, 4H), 7.07 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 2H), 2.40 (s, 6H).

[0137] 실시예 2: 화합물 13의 합성

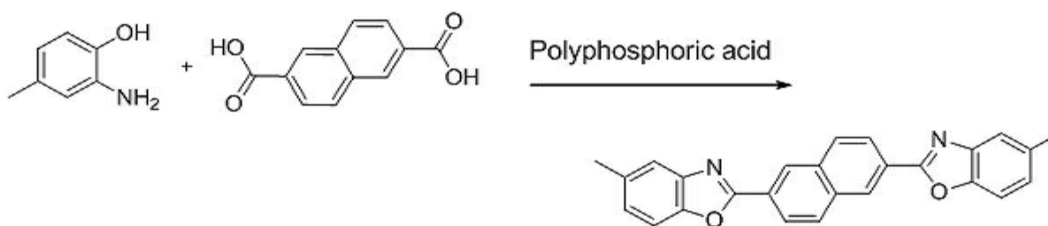


[0138]

[0139] 질소 분위기 하의 반응기에 폴리 인산(144ml)을 넣고 70℃의 온도로 1시간 동안 교반 가열하였다. 그 후 반응기에 테레프탈산 (10g 60mmol, 1eq)를 첨가하고 30분 교반하고 2-아미노-4-메틸페놀(15g, 120mmol, 2eq)를 첨가한 후 30분 동안 교반하였다. 그 후 온도를 150℃까지 올리고 4시간 동안 교반하였다. 반응 완료 후 반응물을 50℃까지 서냉시키고 반응물을 열음물(1.5L)에 넣고 1시간 동안 교반해 준다. 그 후 위 용액을 포화 탄산수소나트륨 수용액으로 중화시킨 후 감압필터하여 고체물질을 얻고 다이메틸포름아마이드에 재결정하여 화합물 13을 수득하였다(18.5g 수율=90%).

[0140] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.83 (s, 4H), 7.30 (dd, J = 4.4, 3.0 Hz, 4H), 7.17 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 2H), 2.41 (s, 6H).

[0141] 실시예 3: 화합물 15의 합성



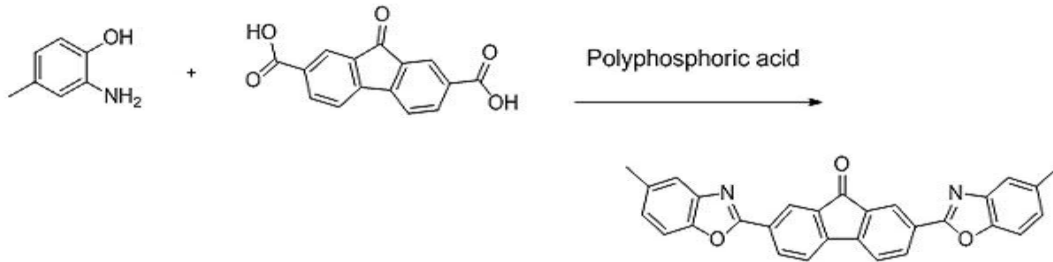
[0142]

[0143] 질소 분위기 하의 반응기에 폴리 인산(111ml)을 넣고 70℃의 온도로 1시간 동안 교반 가열하였다. 그 후 반응기

에 2,6- 나프탈렌 다이카복실산 (10g 46.3mmol, 1eq)를 첨가하고 30분 교반하고, 2-아미노-4-메틸페놀(11.6g, 92.5mmol, 2eq)를 첨가한 후 30분 동안 교반하였다. 그 후 온도를 120℃까지 올리고 3시간 교반 후, 온도를 다시 200℃까지 올리고 3시간 동안 교반하였다. 반응 완료 후 반응물을 100℃까지 냉각시키고 반응물을 얼음물 (1.5L)에 넣고 1시간 동안 교반해준다. 그 후 위 용액을 포화 탄산수소나트륨 수용액으로 중화시켜준 후 감압필터하여 고체물질을 얻고 다이메틸포름아미드에 재결정하여 화합물 15를 수득하였다(17.3g 수율=96%).

[0144] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 8.22 (t, J = 1.4 Hz, 2H), 7.99 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 2H), 7.83 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 2H), 7.27 (dd, J = 4.4, 3.0 Hz, 4H), 7.13 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 2H), 2.39 (s, 6H).

[0145] **실시예 4: 화합물 20의 합성**

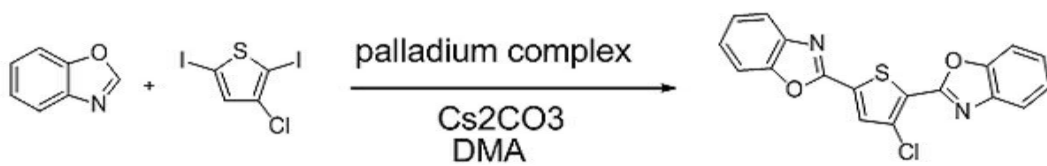


[0146]

[0147] 질소 분위기 하의 반응기에 폴리 인산(77ml)을 넣고 70℃의 온도로 1시간 동안 교반하면서 가열하였다. 그 후 반응기에 9-옥소플루오렌-2,7-다이카복실산 (10g 37.3mmol, 1eq)를 첨가하고 30분 교반하고 2-아미노-4-메틸페놀(9.18g, 74.6mmol, 2eq)를 첨가한 후 30분 동안 교반하였다. 그 후 온도를 120℃까지 올리고 3시간 교반 후, 온도를 다시 200℃까지 올리고 3시간 동안 교반하였다. 반응 완료 후 반응물을 100℃까지 냉각시키고 반응물을 얼음물(1.5L)에 넣고 1시간 동안 교반하였다. 그 후 위 용액을 포화 탄산수소나트륨 수용액으로 중화시켜준 후 감압필터하여 고체물질을 얻고 다이메틸포름아미드에 재결정하여 화합물 20을 얻었다(14.1g 수율=86%).

[0148] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 8.32 (d, J = 1.4 Hz, 2H), 7.97 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 2H), 7.83 (d, J = 7.5 Hz, 2H), 7.26 (t, J = 4.4 Hz, 4H), 7.13 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 2H), 2.38 (s, 6H).

[0149] **실시예 5: 화합물 28의 합성**

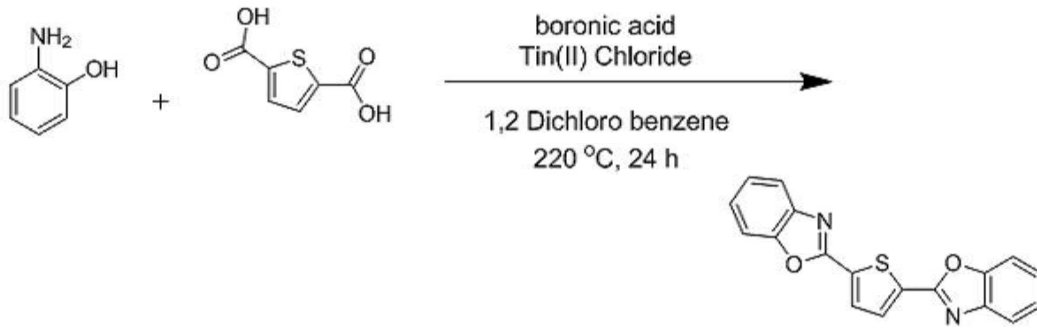


[0150]

[0151] 질소 분위기 하의 반응기에 탄산세슘 (8.8g, 27mmol, 1eq), 3-클로로-2,5-다이아이오도티오펜 (10g, 27mmol, 1eq), 벤조옥사졸(6.7g, 57mmol, 2.1eq) 그리고 비스(1,10-페난트롤린) 팔라듐(II) 비스(헥사플루오로포스페이트)(1g, 1.3mmol, 0.5eq)를 다이메틸아세트아미드(50ml)에 녹이고 150?의 온도로 20시간 교반 가열하였다. 그 후 반응물을 구조토에 필터해주고 헥산:아세트산에틸=10:1의 조건으로 실리카겔 컬럼을 실시하여 화합물 28을 수득하였다(8.8g, 수율=92%).

[0152] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 8.02 (s, 1H), 7.55 - 7.09 (m, 8H).

[0153] 비교예 1: 비교화합물의 합성



[0154]

[0155] 질소 분위기 하의 반응기에 2,5-티오펜다이카복실산 (10g, 58mmol, 1eq), 2-아미노 페놀(17.781g, 159mmol, 2.75eq)를 1,2-다이클로로벤젠(67ml)에 녹인 후 붕산(1.1g, 17mmol, 0.3eq), 염화제일주석(1.3g 6mmol, 0.1eq)을 첨가하였다. 그 후 딘스탁 장치를 설치한 후 220℃의 온도에서 24시간 동안 교반 가열하였다. 반응이 완료된 후, 반응기에 남아 있는 1,2-다이클로로벤젠을 감압증류로 제거해주고 반응기에 다이메틸포름아마이드를 넣고 가열 후 냉각시켜 준 후 감압필터하여 고상의 비교화합물을 수득하였다(16.5g, 수율=89.23%).

[0156] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform) δ 7.95 (s, 2H, Ar) 7.79 (dd, J = 5.7, 3.6 Hz, 2H) 7.59 (dd, J = 5.3, 3.6, 2H) 7.408-7.38 (m, 4H).

[0157] [시험예]

[0158] 시험예 1: 발광특성 분석

[0159] 분석하고자 하는 시료 (A)의 발광 양자효율( $\Phi_{F(A)}$ )은 비교화합물, 화합물 1, 2, 3, 4, 13, 15, 20, 22 및 28의 UV 흡광도(A), PL(Photoluminescence) 세기(면적), 및 해당 용매의 굴절율 ( $n$ )를 대입해 계산하였다. 즉 특정 물질들의 농도에 관계없이 농도와 관련된 흡광도 A값에 대한 상대적인 PL 세기를 비교하는 방식으로 발광 특성을 분석하였다.

[0160] [식]

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

[0161]

[0162] 이에 따른 발광특성 분석 결과를 표 1에 나타내었다.

**표 1**

[0163]

| 구분     | 상대적양자효율 (PLQY) | UV(흡수) | PL(면적)   | PL(강도)   |
|--------|----------------|--------|----------|----------|
| 비교화합물  | 1.00           | 0.9083 | 980929   | 13155.19 |
| 화합물 1  | 0.84           | 0.8277 | 753086   | 9817.36  |
| 화합물 2  | 0.82           | 0.9167 | 817928   | 10710.77 |
| 화합물 3  | 0.70           | 0.9308 | 708720   | 9145.91  |
| 화합물 4  | 0.84           | 0.9298 | 742953   | 9752.54  |
| 화합물 13 | 0.85           | 1.0607 | 969810   | 14140.31 |
| 화합물 15 | 0.87           | 1.2123 | 1145054  | 18225.28 |
| 화합물 20 | 0.59           | 0.7714 | 494061   | 8138.92  |
| 화합물 22 | 1.17           | 0.9422 | 11938424 | 19453.89 |
| 화합물 28 | 1.24           | 0.8992 | 1201232  | 21038.18 |

[0164] 이에 따르면, 유사한 농도조건하에서 벤조옥사졸 유도체 형태의 각 형광염료용 화합물들은 비교예의 화합물과 비교하여 상대적인 발광세기 및 효율을 분석한 것으로 메틸기 위치에 따라 상이 달라지는 것을 알 수 있었고, 인광으로의 발광수율 손실을 막아 형광의 수율을 높여지는 것을 확인할 수 있다. 또한, 분자코어의 티오펜에 클로라이드를 치환시킴으로써, 발광수율이 향상되었다.

[0165] 시험예 2: 분산특성 분석

[0166] 분석하고자 하는 시료의 분산특성은 비교화합물, 화합물 1, 2, 3, 4, 13, 15, 20 및 28을 볼밀을 이용하여 분쇄 시키기 전과 후의 입자사이즈를 비교하고 분산특성을 분석하였다. 이에 따른 결과를 아래의 표 2 및 표 3에 나타내었다.

표 2

| 분산 전   | D [4, 3] -<br>Volume weighted<br>mean | Uniformity | Specific<br>surface area | D [3, 2] -<br>Surface<br>weighted mean |
|--------|---------------------------------------|------------|--------------------------|--|
| 비교 화합물 | 100.27                                | 0.875      | 0.102                    | 58.993                                 |
| 화합물 1  | 175.715                               | 1.39       | 0.344                    | 17.457                                 |
| 화합물 2  | 56.826                                | 0.671      | 0.184                    | 32.537                                 |
| 화합물 3  | 39.905                                | 0.45       | 0.24                     | 25.015                                 |
| 화합물 4  | 164.819                               | 1.28       | 0.335                    | 18.822                                 |
| 화합물 13 | 20.364                                | 1.04       | 1.20                     | 4.988                                  |
| 화합물 15 | 45.668                                | 1.19       | 1.39                     | 11.551                                 |
| 화합물 20 | 50.168                                | 0.827      | 0.98                     | 8.266                                  |
| 화합물 28 | 39.92                                 | 1.412      | 0.155                    | 38.111                                 |

[0167]

표 3

| 분산 후   | D [4, 3]-<br>Volume weighted<br>mean | Uniformity | Specific<br>surface area | D [3, 2]-<br>Surface<br>weighted mean |
|--------|--------------------------------------|------------|--------------------------|---------------------------------------|
| 비교 화합물 | 0.341                                | 1.30       | 38.4                     | 0.156                                 |
| 화합물 1  | 0.219                                | 1.22       | 42.1                     | 0.110                                 |
| 화합물 2  | 0.266                                | 1.49       | 50.9                     | 0.118                                 |
| 화합물 3  | 0.13                                 | 0.4        | 58                       | 0.103                                 |
| 화합물 4  | 0.221                                | 1.01       | 41.3                     | 0.107                                 |
| 화합물 13 | 0.331                                | 2.01       | 51.3                     | 0.117                                 |
| 화합물 15 | 0.295                                | 1.62       | 49.6                     | 0.111                                 |
| 화합물 20 | 0.288                                | 1.38       | 45.8                     | 0.141                                 |
| 화합물 28 | 0.274                                | 2.92       | 47.1                     | 0.102                                 |

[0168]

[0169] 시험예 3: 염색특성 분석

[0170] 분석하고자 하는 시료의 염색특성은 표준화한 볼밀 공정을 통해 제조된 분산체로 폴리에스터 섬유에 염색한 결과이다. 비교화합물, 화합물 1, 2, 3, 4, 13, 15, 20 및 28 의 염료와 중량 대비 30%의 고분자 블록 코폴리머 분산체, 물을 볼밀자에 넣고 글래스 비드를 첨가 후 24시간 동안 셰이커를 이용하여 분산체를 제조하고 폴리에스터 섬유에 염색하였다. 이후, 염색특성과 백도를 분석, 비교하고, 이에 따른 결과를 아래의 표 4 및 표 5에 나타내었다.

표 4

| 0.01 % <sup>o</sup> | 백도 <sup>o</sup>     | L* <sup>o</sup>    | A* <sup>o</sup>    | B* <sup>o</sup>    |
|---------------------|---------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| Blank <sup>o</sup>  | 78.25 <sup>o</sup>  | 93.29 <sup>o</sup> | -0.39 <sup>o</sup> | 1.16 <sup>o</sup>  |
| 비교화합물 <sup>o</sup>  | 106.18 <sup>o</sup> | 93.89 <sup>o</sup> | 1.41 <sup>o</sup>  | -4.6 <sup>o</sup>  |
| 화합물 1 <sup>o</sup>  | 102.21 <sup>o</sup> | 93.91 <sup>o</sup> | 0.71 <sup>o</sup>  | -3.76 <sup>o</sup> |
| 화합물 2 <sup>o</sup>  | 113.83 <sup>o</sup> | 94.32 <sup>o</sup> | 0.69 <sup>o</sup>  | -6.16 <sup>o</sup> |
| 화합물 3 <sup>o</sup>  | 78.65 <sup>o</sup>  | 93.53 <sup>o</sup> | -0.33 <sup>o</sup> | 1.11 <sup>o</sup>  |
| 화합물 4 <sup>o</sup>  | 106.54 <sup>o</sup> | 93.25 <sup>o</sup> | 0.61 <sup>o</sup>  | -3.18 <sup>o</sup> |
| 화합물 13 <sup>o</sup> | 86.96 <sup>o</sup>  | 94.25 <sup>o</sup> | 0.58 <sup>o</sup>  | -0.24 <sup>o</sup> |
| 화합물 15 <sup>o</sup> | 121.11 <sup>o</sup> | 95.17 <sup>o</sup> | 0.72 <sup>o</sup>  | -4.21 <sup>o</sup> |
| 화합물 20 <sup>o</sup> | 89.15 <sup>o</sup>  | 91.19 <sup>o</sup> | 0.52 <sup>o</sup>  | -5.93 <sup>o</sup> |
| 화합물 28 <sup>o</sup> | 101.55 <sup>o</sup> | 93.32 <sup>o</sup> | 0.86 <sup>o</sup>  | -2.18 <sup>o</sup> |

[0171]

표 5

| 0.05 % <sup>o</sup> | 백도 <sup>o</sup>     | L* <sup>o</sup>    | A* <sup>o</sup>    | B* <sup>o</sup>    |
|---------------------|---------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 비교화합물 <sup>o</sup>  | 123.71 <sup>o</sup> | 94.24 <sup>o</sup> | 2.39 <sup>o</sup>  | -8.37 <sup>o</sup> |
| 화합물 1 <sup>o</sup>  | 113.21 <sup>o</sup> | 94.15 <sup>o</sup> | 0.89 <sup>o</sup>  | -5.85 <sup>o</sup> |
| 화합물 2 <sup>o</sup>  | 126.27 <sup>o</sup> | 94.6 <sup>o</sup>  | 1.45 <sup>o</sup>  | -8.77 <sup>o</sup> |
| 화합물 3 <sup>o</sup>  | 118.02 <sup>o</sup> | 94.71 <sup>o</sup> | -0.15 <sup>o</sup> | -6.87 <sup>o</sup> |
| 화합물 4 <sup>o</sup>  | 118.13 <sup>o</sup> | 93.99 <sup>o</sup> | 0.73 <sup>o</sup>  | -5.25 <sup>o</sup> |
| 화합물 13 <sup>o</sup> | 98.04 <sup>o</sup>  | 94.24 <sup>o</sup> | 1.73 <sup>o</sup>  | -2.68 <sup>o</sup> |
| 화합물 15 <sup>o</sup> | 132.14 <sup>o</sup> | 95.28 <sup>o</sup> | 1.49 <sup>o</sup>  | -9.12 <sup>o</sup> |
| 화합물 20 <sup>o</sup> | 96.27 <sup>o</sup>  | 94.6 <sup>o</sup>  | 1.45 <sup>o</sup>  | -8.77 <sup>o</sup> |
| 화합물 28 <sup>o</sup> | 119.91 <sup>o</sup> | 94.12 <sup>o</sup> | 1.87 <sup>o</sup>  | -5.69 <sup>o</sup> |

[0172]

[0173] 시험예 2 와 시험예 3의 결과에 따르면, 본 발명의 벤조옥사졸 유도체는 상대적으로 적은 양을 사용하면서도 동일한 형광증백 역할을 하여 친환경적이고 경제성이 향상의 도움이 되는 효과를 얻을 수 있는 것을 확인하였다.