



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2009-0117730  
(43) 공개일자 2009년11월12일

(51) Int. Cl.

C07D 491/06 (2006.01) C07D 471/06 (2006.01)  
C07D 487/04 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2009-7016581

(22) 출원일자 2008년01월07일  
심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2009년08월07일

(86) 국제출원번호 PCT/US2008/000194

(87) 국제공개번호 WO 2008/085942  
국제공개일자 2008년07월17일(30) 우선권주장  
60/879,145 2007년01월08일 미국(US)

(71) 출원인

폴리에라 코퍼레이션

미국 60077 일리노이주 스코키 스위트 140 라몬  
애비뉴 8045

(72) 발명자

파체티, 안토니오

미국 60640 일리노이주 시카고 엔. 글렌우드 애비  
뉴 5412

박스, 토빈, 제이.

미국 60201 일리노이주 에반스톤 센트럴 파크 애  
비뉴 2300

안, 허

미국 60077 일리노이주 스코키 유나이트 211 오크  
턴 스트리트 4953

(74) 대리인

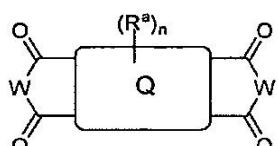
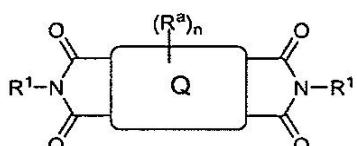
양영준, 양영환

전체 청구항 수 : 총 21 항

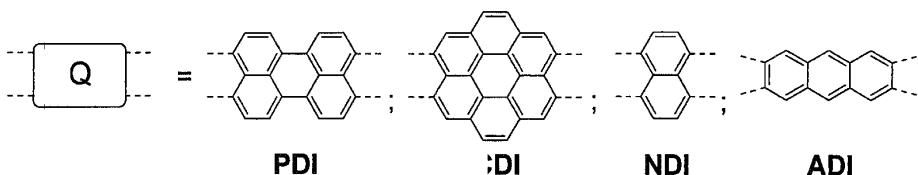
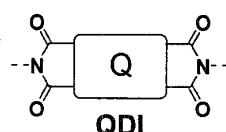
(54) 아렌-비스(디카르복스이미드)-기재 반도체 물질, 및 이를 제조하기 위한 관련된 중간체의 제조 방법

**(57) 요약**

본 발명은 하기 화학식 (I) 및 (II)의 화합물을 제공한다. 본 발명은 또한 화학식 (I)의 화합물로부터 화학식 (II)의 화합물을 제조하는 것을 포함하여, 화학식 (I) 및 (II)의 화합물을 제조하는 방법을 제공한다. 본원에 개시된 화합물은 반도체 물질, 및 관련된 복합체 및 전자 장치를 제조하는데 사용될 수 있다:

**I****II**

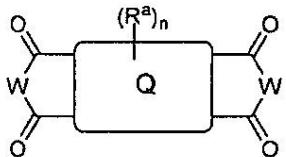
상기 식에서, Q, R<sup>a</sup>, R<sup>1</sup>, W 및 n은 본원에서 정의된 바와 같다.

**대 표 도 - 도1**

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

하기 화학식 (I)의 화합물:



I

상기 식에서,

W는 각각 O 또는 NH이 고;

Q는 융합된 고리 부분이고;

$R^a$ 는 각각 a)  $-CN$ , b)  $-NO_2$ , c)  $-C(O)R^b$ , d)  $-C(O)NHR^b$  e)  $-C(O)OR^b$ , f)  $-S(O)R^b$ , g)  $-S(O)_2R^b$ , h)  $-S(O)_2OH$ , i)  $-(CF_3)_tR^b$ , j)  $-[C(CF_3)_2]_tR^b$ , k) 옥소, 및 1) 1 내지 5개의  $R^c$  기로 치환된 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되고;

$R^b$ 는 각각 a) H, b)  $C_{1-20}$  알킬 기, c)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, d)  $C_{6-14}$  아릴 기, e)  $C_{7-20}$  아릴알킬 기, f) 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 g) 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서 상기  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기,  $C_{7-20}$  아릴알킬 기, 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $R^c$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

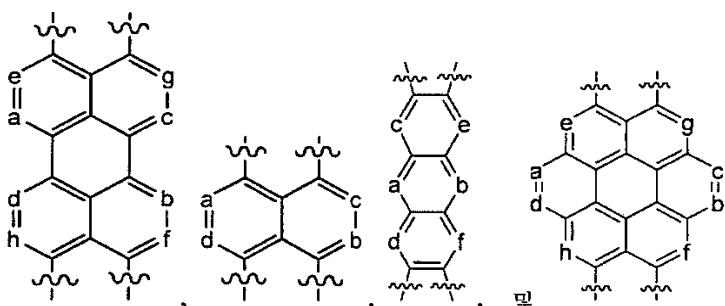
$R^c$ 는 각각 a) 할로겐, b)  $-CN$ , c)  $-NO_2$ , d)  $-C(O)H$ , e)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, f)  $-C(O)NH_2$ , g)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, h)  $-C(O)N(C_{1-20}$  알킬) $_2$ , i)  $-C(O)OH$ , j)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, k)  $-S(O)H$ , l)  $-S(O)-C_{1-20}$  알킬, m)  $-S(O)_2H$ , n)  $-S(O)_2-C_{1-20}$  알킬, 및 o)  $-S(O)_2OH$ 로부터 선택되고;

n은 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 또는 8이고;

t는 각각 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 또는 10이다.

### 청구항 2

제 1 항에 있어서,  $Q-(R^a)_nO$ ,



(상기 식에서, a, b, c, d, e, f, g 및 h는

각각 독립적으로  $CH$ ,  $CR^a$ ,  $SiH$ ,  $SiR^a$ , N 및 P로부터 선택되고; 여기서  $R^a$  및 N은 제 1 항에서 정의된 바와 같다)로부터 선택되는 화합물.

**청구항 3**

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,  $R^3$ 가  $-CN$ ,  $-NO_2$ , 또는  $-C(O)CH_3$ 인 화합물.

**청구항 4**

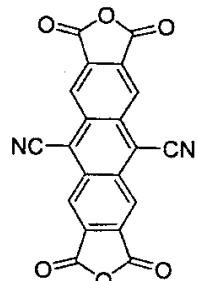
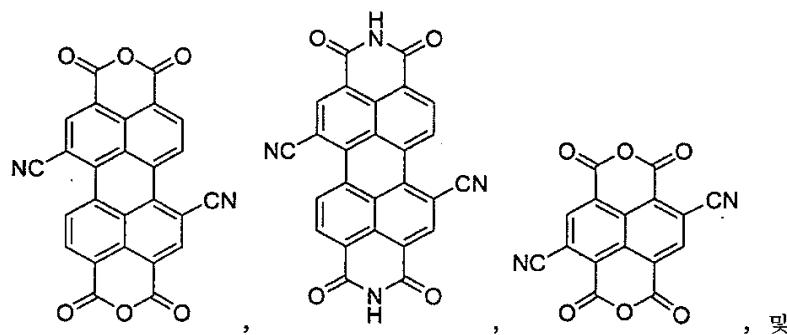
제 2 항 또는 제 3 항에 있어서, a, b, c, d, e, f, g 및 h가 각각 독립적으로  $CH$ ,  $C(CN)$  및  $C[C(O)CH_3]$ 로부터 선택되는 화합물.

**청구항 5**

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,  $n$ 이 2 또는 4인 화합물.

**청구항 6**

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, 화합물이

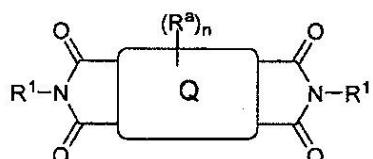


로부터 선택되는 화합물.

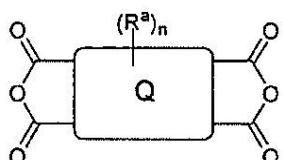
**청구항 7**

화학식 (II)의 화합물을 제조하는 방법으로서,

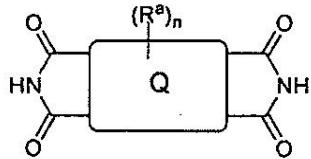
하기 화학식 (Ia)의 화합물을 화학식  $R^1NH_2$ 의 아민과 반응시키거나, 하기 화학식 (Ib)의 화합물을 화학식  $R^1-LG$ 의 화합물과 반응시키는 것을 포함하는 방법:



II;



Ia,

**Ib**

상기 식에서,

Q는 융합된 고리 부분이고;

$R^a$ 는 각각 a)  $-CN$ , b)  $-NO_2$ , c)  $-C(O)R^b$ , d)  $-C(O)NHR^b$  e)  $-C(O)OR^b$ , f)  $-S(O)R^b$ , g)  $-S(O)_2R^b$ , h)  $-S(O)_2OH$ , i)  $-(CF_3)_tR^b$ , j)  $-[C(CF_3)_2]_tR^b$ , k) 옥소, 및 1) 1 내지 5개의  $R^c$  기로 치환된 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되고;

$R^b$ 는 각각 a) H, b)  $C_{1-20}$  알킬 기, c)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, d)  $C_{6-14}$  아릴 기, e)  $C_{7-20}$  아릴알킬 기, f) 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 g) 5 내지 14원 헤�테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서 상기  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기,  $C_{7-20}$  아릴알킬 기, 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $R^c$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

$R^c$ 는 각각 a) 할로겐, b)  $-CN$ , c)  $-NO_2$ , d)  $-C(O)H$ , e)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, f)  $-C(O)NH_2$ , g)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, h)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬), i)  $-C(O)OH$ , j)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, k)  $-S(O)H$ , l)  $-S(O)-C_{1-20}$  알킬, m)  $-S(O)_2H$ , n)  $-S(O)_2-C_{1-20}$  알킬, 및 o)  $-S(O)_2OH$ 로부터 선택되고;

n은 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 또는 8이고;

t는 각각 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 또는 10이고;

$R^1$ 은 각각  $-L-R^2$  또는  $-L-Ar^1-R^2$  이고;

L은 각각 Y 또는  $(CH_2CH_2O)_p$  이고;

Y는 각각 2가  $C_{1-20}$  알킬 기, 2가  $C_{1-20}$  할로알킬 기, 또는 공유 결합이며;

$Ar^1$ 은  $C_{6-14}$  아릴 기 또는 5 내지 14원 헤테로아릴 기이며, 이들 각각은 독립적으로 할로겐,  $-CN$ ,  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{1-20}$  알콕시 기, 및  $C_{1-20}$  할로알킬 기로부터 선택된 1 내지 5개의 치환기로 치환되거나 치환되지 않으며;

$R^2$ 는 각각 a)  $-OR^d$ , b)  $-C(O)OR^d$ , c)  $-C(O)R^e$ , d)  $-C(O)NR^eR^f$ , e)  $-C(S)OR^d$ , f)  $-C(S)R^e$ , g)  $-C(S)NR^eR^f$ , h)  $-SR^d$ , i)  $-S(O)_2OR^d$ , j)  $-S(O)_2R^e$ , k)  $-S(O)_2NR^eR^f$ , l)  $C_{1-20}$  알킬 기, m)  $C_{2-20}$  알케닐 기, n)  $C_{2-20}$  알키닐 기, o)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, p)  $C_{6-14}$  아릴 기, q) 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 r) 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알키닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로溷테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  또는  $-L-Ar^2-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

$R^d$ 는 각각 a) H, b)  $-C(O)R^e$ , c)  $-C(O)NR^eR^f$ , d)  $-C(S)R^e$ , e)  $-C(S)NR^eR^f$ , f)  $C_{1-20}$  알킬 기, g)  $C_{2-20}$  알케닐 기, h)  $C_{2-20}$  알키닐 기, i)  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기, j)  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기, k)  $-Y-3$  내지 12원 시클로溷테로알킬 기, 및 l)  $-Y-5$  내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알키닐 기,

$C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헵테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

$R^e$  및  $R^f$ 는 각각 독립적으로 a) H, b) -OH, c) -SH, d)  $-S(O)_2OH$ , e)  $-C(O)OH$ , f)  $-C(O)NH_2$ , g)  $-C(S)NH_2$ , h)  $-OC_{1-20}$  알킬, i)  $-O-Y-C_{6-14}$  아릴, j)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, k)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, l)  $-C(S)N(C_{1-20})_2$ , m)  $-C(S)NH-C_{1-20}$  알킬, n)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, o)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬, p)  $-S(O)_m-C_{1-20}$  알킬, q)  $-S(O)_m-OC_{1-20}$  알킬, r)  $-C(O)-Y-C_{6-14}$  아릴, s)  $-C(O)-O-Y-C_{6-14}$  아릴, t)  $-C(S)N(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , u)  $-C(S)N(C_{1-20})_2$  알킬)  $-Y-C_{6-14}$  아릴, v)  $-C(S)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, w)  $-C(O)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, x)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬)  $-Y-C_{6-14}$  아릴, y)  $-C(O)N(Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , z)  $-S(O)_m-Y-C_{6-14}$  아릴, aa)  $-S(O)_m-O-Y-C_{6-14}$  아릴, ab)  $C_{1-20}$  알킬 기, ac)  $C_{2-20}$  알케닐 기, ad)  $C_{2-20}$  알카닐 기, ae)  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기, af)  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기, ag)  $-Y-3$  내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 ah)  $-Y-5$  내지 14원 헵테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알카닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헵테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

$Ar^2$ 는 각각  $C_{6-14}$  아릴 기 또는 5 내지 14원 헵테로아릴 기이며, 이들은 각각 독립적으로 할로겐, -CN,  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{1-20}$  할로알킬 기, 및  $C_{1-20}$  알콕시 기로부터 선택된 1 내지 5개의 치환기로 치환되거나 치환되지 않고;

$R^3$ 은 각각 a) 할로겐, b) -CN, c)  $-NO_2$ , d) 옥소, e)  $-OR^g$ , f)  $-SR^g$ , g)  $-NR^gR^h$ , h)  $-N(O)R^gR^h$ , i)  $-S(O)_mR^g$ , j)  $-S(O)_mOR^g$ , k)  $-S(O)_mNR^gR^h$ , l)  $-C(O)R^g$ , m)  $-C(O)OR^g$ , n)  $-C(O)NR^gR^h$ , o)  $-C(S)NR^gR^h$ , p)  $-SiH_3$ , q)  $-SiH(C_{1-20})_2$  알킬), r)  $-SiH_2(C_{1-20})_2$  알킬), s)  $-Si(C_{1-20})_3$  알킬), t)  $C_{1-20}$  알킬 기, u)  $C_{2-20}$  알케닐 기, v)  $C_{2-20}$  알카닐 기, w)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, x)  $C_{6-14}$  아릴 기, y) 3 내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 또는 z) 5 내지 14원 헵테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알카닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헵테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^4$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

$R^g$  및  $R^h$ 는 각각 독립적으로 a) H, b) -OH, c) -SH, d)  $-S(O)_2OH$ , e)  $-C(O)OH$ , f)  $-C(O)NH_2$ , g)  $-C(S)NH_2$ , h)  $-OC_{1-20}$  알킬, i)  $-O-Y-C_{6-14}$  아릴, j)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, k)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, l)  $-C(S)N(C_{1-20})_2$ , m)  $-C(S)NH-C_{1-20}$  알킬, n)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, o)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬, p)  $-S(O)_m-C_{1-20}$  알킬, q)  $-S(O)_m-OC_{1-20}$  알킬, r)  $-C(O)-Y-C_{6-14}$  아릴, s)  $-C(O)-O-Y-C_{6-14}$  아릴, t)  $-C(S)N(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , u)  $-C(S)N(C_{1-20})_2$   $-Y-C_{6-14}$  아릴, v)  $-C(S)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, w)  $-C(O)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, x)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$   $-Y-C_{6-14}$  아릴, y)  $-C(O)N(Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , z)  $-S(O)_m-Y-C_{6-14}$  아릴, aa)  $-S(O)_m-O-Y-C_{6-14}$  아릴, ab)  $C_{1-20}$  알킬 기, ac)  $C_{2-20}$  알케닐 기, ad)  $C_{2-20}$  알카닐 기, ae)  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기, af)  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기, ag)  $-Y-3$  내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 ah)  $-Y-5$  내지 14원 헵테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알카닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헵테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^4$  기로 치환되거나 치환되지 않고;

$R^4$ 는 각각 a) 할로겐, b) -CN, c)  $-NO_2$ , d) 옥소, e)  $-OH$ , f)  $-NH_2$ , g)  $-NH(C_{1-20})_2$  알킬), h)  $-N(C_{1-20})_2$  알킬), i)  $-N(C_{1-20})_2$   $-Y-C_{6-14}$  아릴, j)  $-N(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , k)  $-S(O)_mH$ , l)  $-S(O)_mC_{1-20}$  알킬, m)  $-S(O)_2OH$ , n)  $-S(O)_m-OC_{1-20}$  알킬, o)  $-S(O)_m-O-Y-C_{6-14}$  아릴, p)  $-CHO$ , q)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, r)  $-C(O)-C_{6-14}$  아릴, s)  $-C(O)OH$ , t)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, u)  $-C(O)-O-Y-C_{6-14}$  아릴, v)  $-C(O)NH_2$ , w)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, x)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬), y)  $-C(O)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, z)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$   $-Y-C_{6-14}$  아릴, aa)  $-C(O)N(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , ab)  $-C(S)NH_2$ , ac)

-C(S)NH-C<sub>1-20</sub> 알킬, ad) -C(S)N(C<sub>1-20</sub> 알킬)<sub>2</sub>, ae) -C(S)N(-Y-C<sub>6-14</sub> 아릴)<sub>2</sub>, af) -C(S)N(C<sub>1-20</sub> 알킬)-Y-C<sub>6-14</sub> 아릴, ag) -C(S)NH-Y-C<sub>6-14</sub> 아릴, ah) -S(O)<sub>m</sub>NH<sub>2</sub>, ai) -S(O)<sub>m</sub>NH(C<sub>1-20</sub> 알킬), aj) -S(O)<sub>m</sub>N(C<sub>1-20</sub> 알킬)<sub>2</sub>, ak) -S(O)<sub>m</sub>NH(-Y-C<sub>6-14</sub> 아릴), al) -S(O)<sub>m</sub>N(C<sub>1-20</sub> 알킬)-Y-C<sub>6-14</sub> 아릴, am) -S(O)<sub>m</sub>N(-Y-C<sub>6-14</sub> 아릴)<sub>2</sub>, an) -SiH<sub>3</sub>, ao) -SiH(C<sub>1-20</sub> 알킬)<sub>2</sub>, ap) -SiH<sub>2</sub>(C<sub>1-20</sub> 알킬), ar) -Si(C<sub>1-20</sub> 알킬)<sub>3</sub>, as) C<sub>1-20</sub> 알킬 기, at) C<sub>2-20</sub> 알케닐 기, au) C<sub>2-20</sub> 알키닐 기, av) C<sub>1-20</sub> 알콕시 기, aw) C<sub>1-20</sub> 할로알킬 기, ax) C<sub>3-10</sub> 시클로알킬 기, ay) C<sub>6-14</sub> 아릴 기, az) 3 내지 12원 시클로헥테로알킬 기, 및 ba) 5 내지 14원 헥테로아릴 기로부터 선택되고;

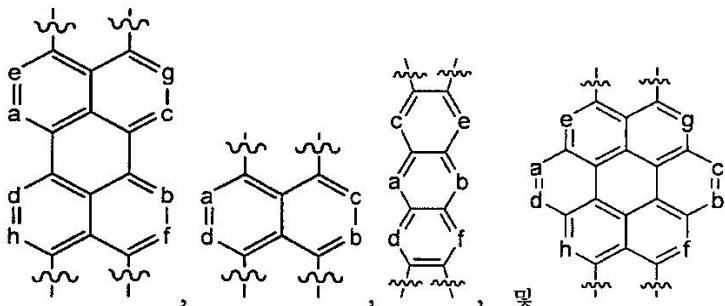
m은 각각 0, 1 또는 2이고;

p는 각각 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 또는 20이고;

LG는 Cl, Br, I, N<sub>3</sub>, OTs, OMs, NO<sub>2</sub>, SCN, 및 CN으로부터 선택된다.

### 청구항 8

제 7 항에 있어서, Q-(R<sup>a</sup>)<sub>n</sub>○],



(상기 식에서, a, b, c, d, e, f, g 및 h는

각각 독립적으로 CH, CR<sup>a</sup>, SiH, SiR<sup>a</sup>, N 및 P로부터 선택되고; R<sup>a</sup> 및 n은 제 7 항에서 정의된 바와 같다)로부터 선택되는 방법.

### 청구항 9

제 7 항 또는 제 8 항에 있어서, R<sup>a</sup>가 -CN, -NO<sub>2</sub>, 또는 -C(O)CH<sub>3</sub>인 방법.

### 청구항 10

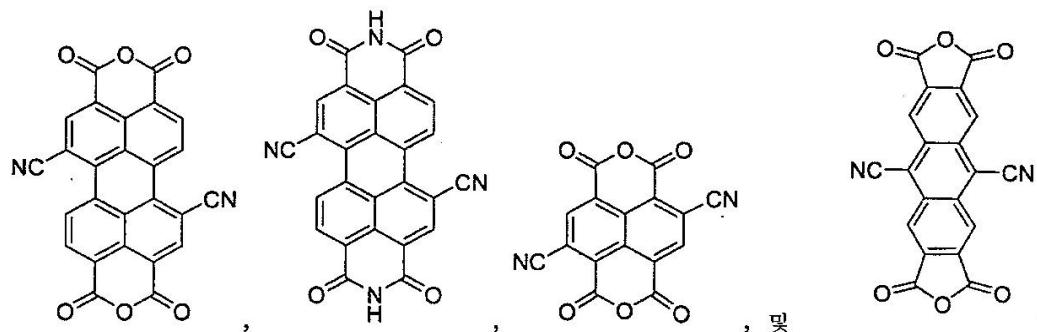
제 8 항 또는 제 9 항에 있어서, a, b, c, d, e, f, g 및 h가 각각 독립적으로 CH, C(CN) 및 C[C(O)CH<sub>3</sub>]로부터 선택되는 방법.

### 청구항 11

제 7 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 있어서, n이 2 또는 4인 방법.

### 청구항 12

제 7 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (Ia) 또는 (Ib)의 화합물이

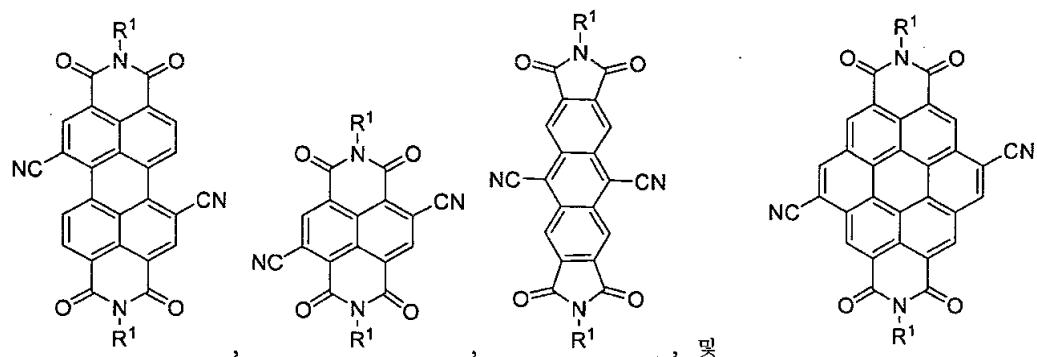


로부터 선택되는

방법.

## 청구항 13

제 7 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (II)의 화합물이,



(상기 식에서,

 $R^1$ 은 제 7 항에서 정의된 바와 같다)로부터 선택되는 방법.

## 청구항 14

제 7 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 있어서,  $R^1$ 이 직쇄형  $C_{1-20}$  알킬 기, 분지쇄형  $C_{1-20}$  알킬 기, 분지쇄형  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기,  $-Y-3$  내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및  $-Y-5$  내지 14원 헵테로아릴 기로부터 선택되고, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헵테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않으며, 여기서  $L$  및  $R^3$ 은 제 7 항에서 정의된 바와 같은 방법.

## 청구항 15

제 7 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 있어서,  $R^1$ 이  $n$ -옥틸 기, (3S)-3,7-디메틸-6-옥테닐 기, (3S)-3,7-디메틸옥틸 기, 4- $n$ -헥실페닐 기, 4-피콜릴 기, 6-3차-부틸옥시카르보닐아미노헥실 기, 9-안트라세닐 기, 안트라센-9-일메틸 기, 및 2-(안트라센-9-일)-에틸 기로부터 선택되는 방법.

## 청구항 16

제 7 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (II)의 화합물이,

 $N,N'$ -비스[ $n$ -옥틸]-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드), $N,N'$ -비스[ $n$ -옥틸]-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드), $N,N'$ -비스[(3S)-3,7-디메틸-6-옥테닐]-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드), $N,N'$ -비스[(3S)-3,7-디메틸-6-옥테닐]-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),

N,N'-비스[(3S)-3,7-디메틸옥틸]-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스[(3S)-3,7-디메틸옥틸]-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(2-에틸헥실)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(2-에틸헥실)-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(4-n-헥실페닐)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(4-n-헥실페닐)-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(4-피콜릴)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(4-피콜릴)-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(6-3차-부틸옥시카르보닐아미노헥실)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(6-3차-부틸옥시카르보닐아미노헥실)-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(9-안트라세닐)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(9-안트라세닐)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(안트라센-9-일메틸)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(안트라센-9-일메틸)-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(2-(안트라센-9-일)-에틸)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-비스(2-(안트라센-9-일)-에틸)-1,6-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-디옥틸-2,6-디시아노나프탈렌-1,4:5,8-비스(디카르복스이미드),  
 N,N'-{4-[(3S)-3,7-디메틸-6-옥테닐]페닐}-2,6-디시아노나프탈렌-1,4:5,8-비스(디카르복스이미드), 및  
 N,N'-디옥틸-9,10-디시아노안트라센-2,3:6,7-비스(디카르복스이미드)로부터 선택되는 방법.

### 청구항 17

제 7 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 있어서, R<sup>1</sup>이 치환되거나 치환되지 않은 아릴 기, 치환되거나 치환되지 않은 비아릴 기, 치환되거나 치환되지 않은 아릴알킬 기, 및 치환되거나 치환되지 않은 비아릴알킬 기로부터 선택되는 방법.

### 청구항 18

제 7 항 내지 제 17 항 중 어느 한 항에 있어서, 반응 단계가 보조 용매 시스템 중에서 실시되는 방법.

### 청구항 19

제 18 항에 있어서, 보조 용매 시스템이 극성 양성자 용매, 및 비-극성 또는 저-극성 용매를 포함하는 방법.

### 청구항 20

제 7 항 내지 제 19 항 중 어느 한 항에 있어서, 반응 단계가 크실렌 및 프로판산 중에서 실시되는 방법.

### 청구항 21

제 7 항 내지 제 20 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (II)의 화합물이 반도체 물질을 제작하는데 사용되는 방법.

## 명세서

&lt;1&gt;

### 서문

&lt;2&gt;

아렌-비스(디카르복스이미드) 기재의 유기 분자(QDI)는 진보된 광 및 전자 물질에서 중요 요소일 수 있다. QDI

의 예로는 페릴렌-비스(디카르복스이미드)(PDI), 코로넨-비스(디카르복스이미드)(CDI), 나프탈렌-비스(디카르복스이미드)(NDI) 및 안트라센-비스(디카르복스이미드)(ADI)가 포함되는데, 이의 구조는 도 1에 도시되어 있다[참조: Law, *Chem. Rev.*, 93: 449 (1993); Langhals et al., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 44: 2427 (2005); Malenfant et al., *Appl. Phys. Lett.*, 80: 2517 (2002); Herrmann et al., *Chem. Lett.*, 35: 978 (2006); Ilhan et al., *Chem. Mater.*, 16: 2978 (2004); Bhattacharyya et al., *Synlett*, 1361 (2003); Langhals et al., *Chemistry*, 12: 2815 (2006); Kelley et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 128: 4779 (2006); Adachi et al., *Appl. Phys. Lett.*, 56: 799 (1990); and Katz et al. *J Am. Chem. Soc.*, 122: 7787 (2000)]. 이들 QDI의 특징은 예를 들어, 이미드 기의 질소 원자 및/또는 아렌 코어 상에서의 분자 작용화로 조절될 수 있다.

<3> 작용화된 QDI의 용도는 광-수확(light-harvesting) 어레이, 광기전력 전지, 유기 전계효과 트랜지스터, 및 유기 발광 다이오드에서 확인되었다. 이를 분자는 또한 초분자 또는 거대분자 시스템을 구성하기 위한 빌딩 블록인 것으로 보고되었다. 코어 치환된 QDI 중에서, 시안산염화된(cyanated) PDI, NDI 및 ADI가 전계효과 트랜지스터, 상보형 회로, 고리 발진기 및 D-플립플롭(flipflops)을 포함하는 다수의 유기 반도체 기재 장치, 및 솔라 셀의 제작에 대해 중요한 물질인 것으로 입증되었다[참조: Jung et al., *Appl. Phys. Lett.*, 88: 183102/1 (2006); and Yoo et al., *Appl. Phys. Lett.*, 88: 082104 (2006)].

<4> 일반적으로, N,N'-이치환된 코어-치환된 아렌-비스(디카르복스이미드)의 제조는 도 2에 도시된 합성 경로를 따른다. 제 1 단계는 대개 이미드 질소 원자에서의 작용화이다. 예를 들어, 적합한 이무수물(QDA)이 1차 아민 ( $R^1-NH_2$ )과 반응하여 상응하는 디카르복스이미드(QDIR<sup>1</sup>)를 제공할 수 있다[참조: Osswald et al., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 44: 250 (2005); Segura et al., *Org. Lett.*, 7: 2345 (2005); Rohr et al., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 37: 1434 (1998); Qu et al., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 43: 1528 (2004); Mueller et al., *Chem. Commun.*, 4045 (2005); Rybtchinski et al., *J. Phys. Chem.*, 108: 7497 (2004); and Vysotsky et al., *Org. Lett.*, 4: 2901 (2002)]. 대안적인 방법은 이무수물을 암모니아(NH<sub>3</sub>)를 이용하여 치환되지 않은 디카르복스이미드(QDIH)로 전환시킨 다음, R<sup>1</sup>-LG를 이용하여 이미드 질소를 작용화시키는 것이다[참조: Pasaogullari et al., *Dyes and Pigments*, 69: 118 (2006); Patrick et al., *Dyes and Pigments*, 55: 123 (2002); Chernick et al., *J Org. Chem.*, 70: 1486 (2005); Fan et al., *Synth. Met.*, 145: 203 (2004)].

<5> 제 2 단계는 상응하는 할로겐화된 QDI 전구체(QDI-X<sub>n</sub>)의 촉매화되지 않거나 금속 촉매화된 치환을 통해 코어 위치(QDI-R<sup>a</sup><sub>n</sub>)를 작용화시키는 것이다. 예를 들어, QDI-X<sub>n</sub> 전구체 중의 할로 기는 아릴, 시아노, 폐녹시, 및/또는 아미노 기로 치환되어 상응하는 QDI-R<sup>a</sup><sub>n</sub>을 제공한다[참조: Wuerthner et al., *J Org. Chem.*, 69: 7933 (2004); 및 독일 특허 출원 제 DE 3434059호 및 DE 19547209호].

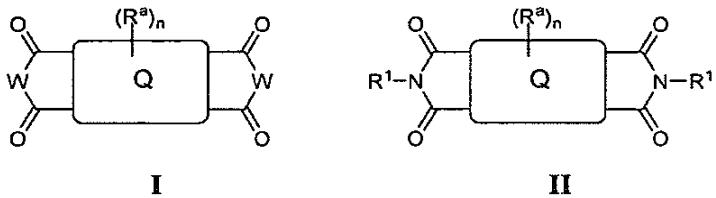
<6> 도 2에 도시된 바와 같이, 양자의 합성은 임의의 코어 위치에 앞서 이미드 질소 원자의 작용화를 요한다. 상이한 이미드 질소 치환을 제외하고 동일한 작용화된 코어를 이용하여 N,N'-이치환된 QDI-R<sup>a</sup><sub>n</sub> 유도체를 효율적으로 스크리닝할 수 있기 위해서는, 더욱 효과적인 합성 방법이 필요하다. 상기 방법의 예에는 이무수물 출발 물질의 코어 위치 상에서 작용화시킨 다음, 이 이무수물을 이치환된 디이미드로 전환시키는 것이 포함될 수 있다. 실시에서, 극소수의 코어 치환된 이무수물(QDA-R<sup>a</sup><sub>n</sub>) 또는 코어 치환된 디이미드(QDIH-R<sup>a</sup><sub>n</sub>)는 공지되어 있으나, QDA-R<sup>a</sup><sub>n</sub> 및 QDIH-R<sup>a</sup><sub>n</sub>(여기서, R<sup>a</sup>는 전자 끌게 기(electron-withdrawing group)이다)의 어떠한 예도 보고되어 있지 않다. 또한, 대부분의 QDA 및 QDIH는 코어 내에서 전자 끌게 기로 치환되는 경우, 표준 반응 조건 하에서 1차 아민과 같은 강력한 친핵체와의 반응시에 불안정해지기 쉽다.

## 개요

<7> 상술한 견지에서, 본 발명은 코어 작용화된 QDI 및 상응하는 N,N'-이치환된 유도체를 제조하기 위한 새로운 합성 경로를 제공하며, 이로써 상기 약술된 것들을 포함하는 선행 기술의 다양한 결점 및 단점을 해소할 수 있다.

<8> 더욱 구체적으로, 본 발명은 코어에 다양한 전자 끌게 치환기를 갖는 QDA 및 QDIH, 및 이러한 코어 치환된 QDA 및 QDIH를 N,N'-이치환된 QDI로 전환하는 방법을 제공한다.

<10> 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식 (I) 또는 (II)의 화합물을 제공한다:



<11>

<12> 상기 식에서, Q,  $R^a$ ,  $R^1$ , W 및 n은 본원에서 정의된 바와 같다.

<13>

다른 일면에서, 본 발명은 화학식 (I)의 화합물로부터 화학식 (II)의 화합물을 제조하는 것을 포함하여, 화학식 (I) 및 (II)의 화합물을 제조하는 방법을 제공한다.

<14>

상기한 특징 및 본 발명의 다른 특징 및 이점은 하기 도면, 상세한 설명 및 청구범위로부터 더욱 완전하게 이해될 것이다.

### 도면의 간단한 설명

<15>

당업자는 이하에 기재된 도면이 단지 예시를 위한 것임을 이해할 것이다. 도면은 어떠한 방식으로든 본 발명의 범위를 제한하려는 것은 아니다.

<16>

도 1은 QDI의 다양한 예의 화학 구조를 도시한다.

<17>

도 2는 코어 치환된 N,N'-이치환된 QDI(QDIR- $R^a_n$ )으로의 공지된 합성 경로를 나타낸다.

<18>

도 3은 본 발명의 화합물(PDA-CN<sub>2</sub>)의 MS MALDI(질량 분광/매트릭스 보조된 레이저 탈착/이온화) 스펙트럼을 나타낸다.

<19>

도 4는 본 발명의 화합물(NDA-CN<sub>2</sub>)의 MS MALDI 스펙트럼을 나타낸다.

<20>

도 5는 본 발명의 화합물(PDIH-CN<sub>2</sub>)의 MS MALDI 스펙트럼을 나타낸다.

<21>

도 6은 CDCl<sub>3</sub> 중에서의 본 발명의 화합물(PD16NHBoc-CN<sub>2</sub>)의 <sup>1</sup>H NMR 스펙트럼을 나타낸다.

<22>

도 7은 본 발명의 화합물(PDI1Py-CN<sub>2</sub>)의 MS MALDI 스펙트럼을 나타낸다.

<23>

도 8은 CDCl<sub>3</sub> 중에서의 본 발명의 화합물(PDICytr-CN<sub>2</sub>)의 <sup>1</sup>H NMR 스펙트럼을 나타낸다.

<24>

도 9는 CDCl<sub>3</sub> 중에서의 본 발명의 화합물(PDIRCytr-CN<sub>2</sub>)의 <sup>1</sup>H NMR 스펙트럼을 나타낸다.

<25>

도 10은 CDCl<sub>3</sub> 중에서의 본 발명의 화합물(PDI2EH-CN<sub>2</sub>)의 <sup>1</sup>H NMR 스펙트럼을 나타낸다.

<26>

### 상세한 설명

<27>

조성물이 특정 성분을 갖거나 포함하거나, 또는 공정이 특정 공정 단계를 갖거나 포함하는 것으로 기재된 상세한 설명 전체를 통하여, 본 발명의 조성물은 인용된 성분을 필수 성분으로 포함하거나 이 성분으로 구성되는 것으로, 그리고 본 발명의 공정은 또한 인용된 공정 단계들을 필수적으로 포함하거나 이 단계들로 구성되는 것으로 고찰된다.

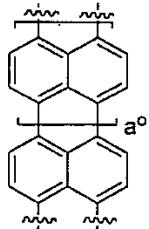
<28>

용어 "포함한다", "포함하는", "갖는다" 또는 "갖는"은 구체적으로 다른 것을 언급하지 않는 한, 개방된 말단 및 비 제한적인 것으로 일반적으로 이해되어야 한다.

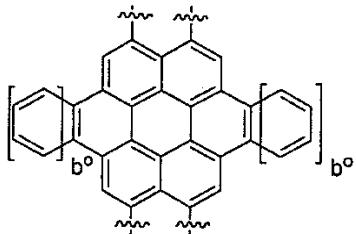
<29>

적용에서, 원소 또는 성분이 일반적으로 인용된 원소 또는 성분들의 리스트에 포함되고/되거나 이로부터 선택되는 경우에, 상기 원소 또는 성분은 인용된 원소 또는 성분 중 임의의 하나일 수 있고, 이는 인용된 원소 또는 성분의 둘 이상으로 이루어지는 군으로부터 선택될 수 있음이 이해되어야 한다.

- <30> 본원에서 단수의 사용은, 구체적으로 다른 것으로 언급되지 않는 한, 복수(및 그 반대)를 포함한다. 또한, 용어 "약"이 정량적인 수치 앞에 사용되는 경우에, 구체적으로 다르게 언급되지 않는 한, 본 발명은 또한 구체적인 정량값 그 자체를 포함한다. 본원에 사용된 용어 "약"은 명목 값으로부터 ±10% 편차를 의미한다.
- <31> 특정 작용을 실시하는 순서 또는 단계의 순서는 본 발명이 조작가능하게 유지되는 한 중요하지 않은 것으로 이해되어야 한다. 또한, 둘 이상의 단계 또는 작용은 동시에 실시될 수 있다.
- <32> 본원에 사용된 "아렌" 또는 "융합된 고리 부분"은 고리 중 하나 이상이 방향족이고 그러한 방향족 고리(카르보시클릭 또는 헤테로시클릭)가 방향족 또는 비 방향족, 및 카르보시클릭 또는 헤�테로시클릭일 수 있는 하나 이상의 다른 고리와 공통으로 하나의 결합을 갖는 둘 이상의 고리를 갖는 폴리시클릭 고리 시스템을 의미한다. 이

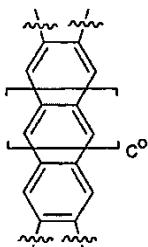


들 폴리시클릭 고리 시스템은 고도로  $\pi$ -공역화될 수 있고, 제한없이 화학식:



0 내지 3 범위 내의 정수일 수 있다)의 릴렌, 화학식

(상기 식에서,  $a^0$ 은



지 3 범위 내의 정수일 수 있다)의 코로넨, 및 화학식 (상기 식에서,  $c^0$ 은 0 내지 4 범위 내의 정수일 수 있다)의 선형 아센을 포함할 수 있다. 본원에 개시된 화합물은 전형적으로 아렌 또는 융합된 고리 부분 코어를 갖는데, 상기 코어는 4가이고,  $-C(O)-O-C(O)-$ ,  $-C(O)-NH-C(O)-$  및  $-C(O)-NR^1-C(O)-$ (상기 식에서,  $R^1$ 은 본원에서 정의된 바와 같다)로부터 선택된 2개의 부분과 공유 결합을 형성할 수 있다. 상기한 아렌 또는 융합된 고리 부분 코어는 1 내지 8개의  $R^a$  기로 치환될 수 있으며, 여기서  $R^a$ 는 본원에서 정의된 바와 같다.

- <33> 본원에 사용된 "디카르복스이미드"는  $-C(O)-NH-C(O)-$  기를 의미하며, 여기서 질소 원자는 본원에서 정의된 바와 같은  $R^1$ 기로 치환될 수 있다.

- <34> 본원에 사용된 "할로" 또는 "할로겐"은 플루오로, 클로로, 브로모 및 요오도를 의미한다.

- <35> 본원에 사용된 "아미노" 또는 "아민"은  $-NRR'$ 을 의미하는데, 여기서  $R$  및  $R'$ 는 독립적으로 H, 알킬 기, 아릴알킬 기, 아릴 기, 시클로알킬 기, 헤테로아릴 기, 및 시클로헤테로알킬 기로부터 선택될 수 있으며, 알킬 기, 아릴알킬 기, 아릴 기, 시클로알킬 기, 헤테로아릴 기, 및 시클로헤테로알킬 기의 각각은 본원에 기재된 바와 같이 치환되거나 치환되지 않을 수 있다.

- <36> 본원에 사용된 "알콕시"는  $-O-$ 알킬 기를 의미한다. 알콕시 기의 예로는 이들로 제한되는 것은 아니나 메톡시, 에톡시, 프로포록시(예를 들어, n-프로포록시 및 이소프로포록시), t-부톡시 기 등이 포함된다.

- <37> 본원에 사용된 "알킬티오"는  $-S-$ 알킬 기를 의미한다. 알킬티오 기의 예에는 이들로 제한되는 것은 아니나 메틸

티오, 에틸티오, 프로필티오(예를 들어, n-프로필티오 및 이소프로필티오), t-부틸티오 기 등이 포함된다.

<38> 본원에 사용된 "옥소"는 이중 결합 산소(즉, =O)를 의미한다.

<39> 본원에 사용된 "알킬"은 직쇄 또는 분지쇄의 포화 탄화수소 기를 의미한다. 알킬 기의 예에는 메틸(Me), 에틸(Et), 프로필(예를 들어, n-프로필 및 이소프로필), 부틸(예를 들어, n-부틸, 이소부틸, 2차-부틸, 3차-부틸), 펜틸 기(예를 들어, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸) 등이 포함된다. 다양한 구체예에서, 알킬 기는 1 내지 20개의 탄소수를 가질 수 있으며, 즉  $C_{1-20}$  알킬 기일 수 있다. 몇몇의 구체예에서, 알킬 기는 1 내지 6개의 탄소수를 가질 수 있으며, 이는 "저급 알킬 기"로 지칭될 수 있다. 저급 알킬 기의 예에는 메틸, 에틸, 프로필(예를 들어, n-프로필 및 이소프로필), 및 부틸 기(예를 들어, n-부틸, 이소부틸, 2차-부틸, 3차-부틸)가 포함된다. 몇몇의 구체예에서, 알킬 기는 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다. 알킬 기는 일반적으로 다른 알킬 기 또는 알케닐 기 또는 알키닐 기로 치환되지 않는다.

<40> 본원에 사용된 "할로알킬"은 하나 이상의 할로겐 치환기를 갖는 알킬기를 의미한다. 할로알킬 기의 예에는 이들로 제한되는 것은 아니나  $CF_3$ ,  $C_2F_5$ ,  $CHF_2$ ,  $CH_2F$ ,  $CCl_3$ ,  $CHCl_2$ ,  $CH_2Cl$ ,  $C_2Cl_5$  등이 포함된다. 퍼할로알킬 기, 즉, 수소 원자 전부가 할로겐 원자로 치환된 알킬 기(예를 들어,  $CF_3$  및  $C_2F_5$ )가 "할로알킬"의 정의에 포함된다. 예를 들어,  $C_{1-20}$  할로알킬 기는 화학식  $-C_iX_{2i+1}$  또는  $-C_iH_{2i+1-j}X_j$ 로 표시될 수 있으며, 상기 식에서 X는 F, Cl, Br 또는 I이고, i는 1 내지 20의 범위 내 정수이고, j는 0 내지 41의 범위 내 정수이고, 단 j는  $2i+1$ 보다 작거나 그와 동등하다.

<41> 본원에 사용된 "아릴알킬"은 -알킬-아릴 기를 의미하며, 여기서 아릴알킬 기는 알킬 기를 통해 규정된 화학 구조로 공유결합으로 연결된다. 아릴알킬 기는  $-L-C_{6-14}$  아릴 기 또는  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기의 정의 내에 있으며, 상기 식에서 L 및 Y는 독립적으로 2가  $C_{1-20}$  알킬 기이다. 아릴알킬 기의 예로는 벤질 기( $-CH_2-C_6H_5$ )가 있다. 아릴알킬 기는 치환되거나 치환되지 않을 수 있는데, 즉 아릴 기 및/또는 알킬 기가 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다.

<42> 본원에 사용된 "알케닐"은 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬 기를 의미한다. 알케닐 기의 예에는 이들로 제한되는 것은 아니나 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥사닐, 부타디에닐, 펜타디에닐, 헥사디에닐 기 등이 포함된다. 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합은 중간(예컨대 2-부텐에서와 같이)에 위치할 수 있고 말단(예컨대 1-부텐에서와 같이)에 위치할 수 있다. 다양한 구체예에서, 알케닐 기는 2 내지 20개의 탄소수를 지닐 수 있으며, 즉  $C_{2-20}$  알케닐 기일 수 있다. 몇몇의 구체예에서, 알케닐 기는 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다. 알케닐 기는 일반적으로 다른 알케닐 기 또는 알킬 기 또는 알키닐 기로 치환되지 않는다.

<43> 본원에 사용된 "알키닐"은 하나 이상의 삼중 탄소-탄소 결합을 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬 기를 의미한다. 알키닐 기의 예로는 이들로 제한되지 않으나, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐 등이 포함된다. 하나 이상의 삼중 탄소-탄소 결합은 중간(2-부틴에서와 같이)에 위치할 수 있거나 말단(1-부틴에서와 같이)에 위치할 수 있다. 다양한 구체예에서, 알키닐 기는 2 내지 20개의 탄소수를 지닐 수 있으며, 즉  $C_{2-20}$  알키닐 기일 수 있다. 몇몇의 구체예에서, 알키닐 기는 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다. 알키닐 기는 일반적으로 다른 알키닐 기 또는 알킬 기 또는 알케닐 기로 치환되지 않는다.

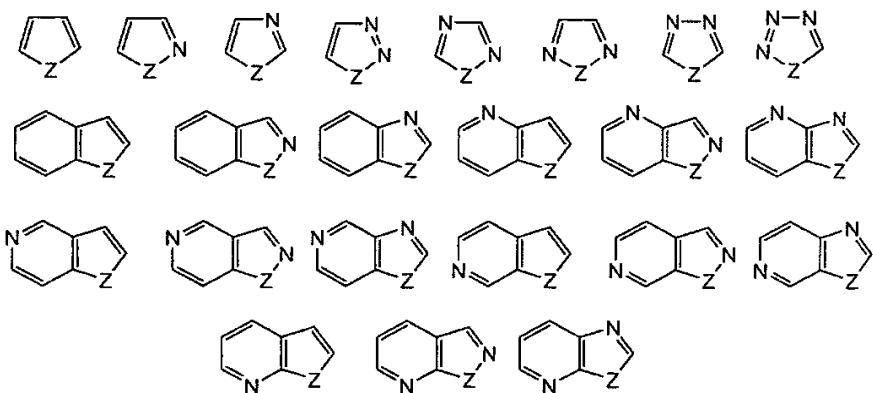
<44> 본원에 사용된 "시클로알킬"은 고리화된 알킬, 알케닐, 및 알키닐 기를 포함하는 비방향족 카르보시클릭 기를 의미한다. 시클로알킬 기는, 탄소 원자가 고리 시스템의 내부 또는 외부에 위치하는 모노시클릭(예를 들어, 시클로헥실) 또는 폴리시클릭(예를 들어, 융합되거나, 가교되고/되거나 스파로 고리 시스템을 포함하는)일 수 있다. 시클로알킬 기의 임의의 적합한 고리 위치는 규정된 화학 구조에 공유 결합으로 연결될 수 있다. 시클로알킬 기의 예에는 이들로 제한되는 것은 아니나 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로펜테닐, 시클로헥세닐, 시클로헥사디에닐, 시클로헵타트리에닐, 노르보르닐, 노르피닐, 노르카릴, 어다만틸, 및 스파로[4.5]데카닐 기, 및 이들의 동종체, 이성질체 등이 포함된다. 다양한 구체예에서, 시클로알킬 기는 3 내지 10개의 탄소수(즉,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기)를 포함하여 3 내지 14개의 탄소수를 지닐 수 있다. 몇몇의 구체예에서, 시클로알킬 기는 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다.

<45> 본원에 사용된 "헤테로원자"는 탄소 또는 수소 이외의 임의 원소의 원자를 의미하는데, 여기에는 예를 들어, 질소, 산소, 실리콘, 황, 인 및 셀레늄이 포함된다.

<46> 본원에 사용된 "시클로헥테로알킬"은 0, N, 및 S로부터 선택된 하나 이상의 고리 헥테로원자를 함유하며, 하나 이상의 이중 또는 삼중 결합을 함유하거나 함유하지 않는 비-방향족 시클로알킬기를 의미한다. 다양한 구체예에서, 시클로헥테로알킬 기는 3 내지 14개의 고리 원자(즉, 3 내지 14원 시클로헥테로알킬 기)를 포함하여 3 내지 20개의 고리 원자를 지닐 수 있다. 시클로헥테로알킬 고리 내의 하나 이상의 N 또는 S 원자는 산화될 수 있다(예를 들어, 모르풀린 N-옥사이드, 티오모르풀린 S-옥사이드, 티오모르풀린 S,S-디옥사이드). 몇몇의 구체예에서, 시클로헥테로알킬 기의 질소 원자는 치환기, 예를 들어 수소 원자, 알킬 기, 또는 본원에 기재된 다른 치환기를 포함할 수 있다. 시클로헥테로알킬 기는 또한 하나 이상의 옥소 기, 예컨대 옥소페리딜, 옥소옥사졸리딜, 디옥소-(1H,3H)-페리미딜, 옥소-2(1H)-페리딜 등을 포함할 수 있다. 시클로헥테로알킬 기의 예에는 특히 모르풀리닐, 티오모르풀리닐, 피라닐, 이미다졸리디닐, 이미다졸리닐, 옥사졸리디닐, 피라졸리디닐, 피라졸리닐, 피롤리디닐, 페트라히드로푸라닐, 테트라히드로티오페닐, 피페리디닐, 피페라지닐 등이 포함된다. 몇몇의 구체예에서, 시클로헥테로알킬 기는 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다.

<47> 본원에 사용된 "아릴"은 둘 이상의 방향족 탄화수소 고리가 함께 융합(즉, 공통된 결합을 갖는)되거나 하나 이상의 방향족 모노시클릭 탄화수소 고리가 하나 이상의 시클로알킬 및/또는 시클로헥테로알킬 고리에 융합되는 방향족 모노시클릭 탄화수소 고리 시스템 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 의미한다. 아릴 기는 이의 고리 시스템 중에 6 내지 16개의 탄소수를 지닐 수 있으며, 상기 고리 시스템은 다수개의 융합 고리를 포함할 수 있다. 몇몇의 구체예에서, 폴리시클릭 아릴 기는 7 내지 16개의 탄소수를 지닐 수 있다. 아릴 기는 임의의 안정한 고리 위치에서 규정된 화학 구조에 공유결합으로 연결되어 안정한 구조를 형성할 수 있다. 단독의 방향족 카르보시클릭 고리(들)를 갖는 아릴 기의 예로는 이들로 제한되는 것은 아니나 페닐, 1-나프틸(비시클릭), 2-나프틸(비시클릭), 안트라세닐(트리시클릭), 페난트레닐(트리시클릭) 등이 포함된다. 하나 이상의 방향족 카르보시클릭 고리가 하나 이상의 시클로알킬 및/또는 시클로헥테로알킬 고리에 융합되는 폴리시클릭 고리 시스템의 예에는, 특히 시클로펜탄(즉, 5,6-비시클릭 시클로알킬/방향족 고리 시스템인 인다닐 기), 시클로헥산(즉, 6,6-비시클릭 시클로알킬/방향족 고리 시스템인 테트라히드로나프틸 기), 이미다졸린(즉, 5,6-비시클릭 시클로헥테로알킬/방향족 고리 시스템인 벤즈이미다졸리닐 기), 및 피란(즉, 6,6-비시클릭 시클로헥테로알킬/방향족 고리 시스템인 크로메닐 기)의 벤조 유도체가 포함된다. 아릴 기의 다른 예로는 이들로 제한되는 것은 아니나, 벤조디옥사닐, 벤조디옥솔릴, 크로마닐, 인돌리닐 기 등이 포함된다. 몇몇의 구체예에서, 아릴 기는 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다. 몇몇의 구체예에서, 아릴 기는 하나 이상의 할로겐 치환기를 지닐 수 있으며, 이는 "할로아릴" 기로 지칭될 수 있다. 퍼할로아릴 기, 즉 수소 원자 전부가 할로겐 원자로 치환된 아릴 기(예를 들어, -C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)가, "할로아릴"의 정의에 포함된다. 특정 구체예에서, 아릴 기는 다른 아릴 기로 치환되며, 이는 비아릴(biaryl) 기로 지칭될 수 있다. 비아릴 기 내의 아릴 기의 각각은 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다.

<48> 본원에 사용된 "헥테로아릴"은 0, N, 및 S로부터 선택된 1개 이상의 고리 헥테로원자를 포함하는 방향족 모노시클릭 고리 시스템, 또는 고리 시스템 내에 존재하는 고리 중 하나 이상이 방향족이고 하나 이상의 고리 헥테로원자를 함유하는 폴리시클릭 고리 시스템을 의미한다. 폴리시클릭 헥테로아릴 기는 함께 융합된 둘 이상의 헥테로아릴 고리, 및 하나 이상의 방향족 카르보시클릭 고리, 비방향족 카르보시클릭 고리 및/또는 비 방향족 시클로헥테로알킬 고리에 융합된 모노시클릭 헥테로아릴 고리를 포함한다. 헥테로아릴 기는 일반적으로 예를 들어, 5 내지 16개의 고리 원자를 포함하고, 1 내지 5개의 헥테로원자를 포함할 수 있다. 이 헥테로아릴 기는 임의의 헥테로원자 또는 탄소원자에서 규정된 화학 구조에 부착되어 안정된 구조를 형성할 수 있다. 일반적으로, 헥테로아릴 고리는 0-0, S-S, 또는 S-O 결합을 포함하지 않는다. 그러나, 헥테로아릴 기 중 하나 이상의 N 또는 S 원자는 산화될 수 있다(예를 들어, 퍼리딘 N-옥사이드, 티오펜 S-옥사이드, 티오펜 S,S-디옥사이드). 헥테로아릴 기의 예에는, 하기 도시된 5원 모노시클릭 및 5 내지 6원 비시클릭 고리 시스템이 포함된다:



&lt;49&gt;

&lt;50&gt;

상기 식에서, Z는 O, S, NH, N-알킬, N-아릴, 또는 N-(아릴알킬)(예를 들어, N-벤질)이다. 헤테로아릴 기의 예에는, 피롤릴, 푸릴, 티에닐, 피리딜, 피리미딜, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 이소티아졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 인돌릴, 이소인돌릴, 벤조푸릴, 벤조티에닐, 퀴놀릴, 2-메틸퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 퀴녹살릴, 퀴나졸릴, 벤조트리아졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤즈이소티아졸릴, 벤즈이속사졸릴, 벤즈옥사디아졸릴, 벤즈옥사졸릴, 신놀리닐, 1H-인다졸릴, 2H-인다졸릴, 인돌리지닐, 이소벤조푸일, 나프티리디닐, 프탈라지닐, 프테리디닐, 푸리닐, 옥사졸로피리디닐, 티아졸로피리디닐, 이미다조피리디닐, 푸로피리디닐, 티에노피리디닐, 피리도피리미디닐, 피리도피라지닐, 피리도피리다지닐, 티에노티아졸릴, 티엔옥사졸릴, 티에노이미다졸릴 등이 포함된다. 헤테로아릴 기의 추가 예에는 이들로 제한되는 것은 아니나, 4,5,6,7-테트라히드로인돌릴, 테트라히드로퀴놀릴, 벤조티에노피리딜, 벤조푸로피리딜 등이 포함된다. 몇몇의 구체예에서, 헤테로아릴 기는 본원에 기재된 바와 같이 치환될 수 있다.

&lt;51&gt;

본원에 사용된 "2가 기"는 2개의 다른 부분과 함께 공유 결합을 형성할 수 있는 연결 기를 의미한다. 예를 들어, 본 발명의 화합물은 2가의 C<sub>1-20</sub> 알킬 기, 예컨대 메틸렌 기를 포함할 수 있다.

&lt;52&gt;

본원에 사용된 "이탈 기"("LG")는 예를 들어 치환 또는 제거 반응의 결과로 안정한 종으로 변화(displace)될 수 있는 하전되거나 하전되지 않는 원자(또는 원자의 기)를 의미한다. 이탈 기의 예에는 이들로 제한되는 것은 아니나 할라이드(예를 들어, Cl, Br, I), 아지드(N<sub>3</sub>), 티오시아네이트(SCN), 니트로(NO<sub>2</sub>), 시아네이트(CN), 토실레이트(톨루엔설포네이트, OTs), 메실레이트(메탄설포네이트, OMs), 브로실레이트(p-브로모벤젠설포네이트, OBs), 노실레이트(4-니트로벤젠설포네이트, ONs), 물(H<sub>2</sub>O), 암모니아(NH<sub>3</sub>), 및 트리플레이트(트리플루오로메탄설포네이트, OTf)가 포함된다.

&lt;53&gt;

모든 공통 부류의 치환기에 나타나는 가장 일반적인 치환기의 수백개의 전자 주계 또는 전자 끝계 특징이 측정되고, 정량화되고, 공표되었다. 전자 주계 및 전자 끝계 특징의 가장 일반적인 정량화는 해머트 σ 값을 표시된다. 수소는 0의 해머트 σ 값을 갖는 반면, 다른 치환기들은 이들의 전자 끝계 또는 전자 받계 특징과 직접적으로 관련하여 양으로 또는 음으로 증가하는 해머트 σ 값을 갖는다. 음의 해머트 σ 값을 갖는 치환기는 전자 주계로 간주되며, 양의 해머트 σ 값을 갖는 것들은 전자 끝계로 간주된다[참조: Lange's Handbook of Chemistry, 12th ed., McGraw Hill, 1979, Table 3-12, pp. 3-134 to 3-138, 상기 문헌은 대부분의 일반적으로 직면하는 치환기에 대한 해머트 σ 값을 나열하고 있으며, 본원에 참고로 포함된다]. 용어 "전자-받계 기"는 "전자 억셉터" 및 "전자-끌계 기"와 본원에서 동의어로 사용될 수 있다. 구체적으로, "전자-끌계 기"("EWG") 또는 "전자-받계 기" 또는 "전자-억셉터"는 전자를 그 자신쪽으로 끌어당기는 작용기를 의미하는데, 이것이 분자 내에서 동일한 위치를 점유하는 경우에 하나 초과의 수소 원자일 것이다. 전자-끌계 기의 예에는 이들로 제한되는 것은 아니나, 할로겐 또는 할라이드(예를 들어, F, Cl, Br, I), -NO<sub>2</sub>, -CN, -OH, -OR<sup>0</sup>, -SH, -SR<sup>0</sup>, -S(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub><sup>+</sup>, -NH<sub>2</sub>, -NHR<sup>0</sup>, -NR<sub>2</sub><sup>0</sup>, -N(R<sup>0</sup>)<sub>3</sub><sup>+</sup>, -SO<sub>3</sub>H, -SO<sub>2</sub>R<sup>0</sup>, -SO<sub>3</sub>R<sup>0</sup>, -SO<sub>2</sub>NHR<sup>0</sup>, -SO<sub>2</sub>N(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>, -COOH, -COR<sup>0</sup>, -COOR<sup>0</sup>, -CON(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>, C<sub>1-10</sub> 할로알킬 기, C<sub>6-14</sub> 아릴 기, 및 5 내지 14원 헤테로아릴 기가 포함되는데, 여기서 R<sup>0</sup>는 C<sub>1-10</sub> 알킬 기, C<sub>2-10</sub> 알케닐 기, C<sub>2-10</sub> 알키닐 기, C<sub>1-10</sub> 할로알킬 기, C<sub>1-10</sub> 알콕시 기, C<sub>1-14</sub> 아릴 기, C<sub>1-14</sub> 시클로알킬 기, 3 내지 14원 시클로헤테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤테로아릴 기이며, 이들 각각은 본원에 기재된 바와 같이 치환되거나 치환되지 않을 수 있다.

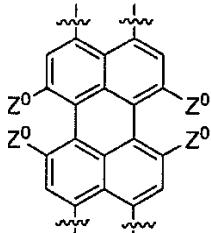
&lt;54&gt;

본 명세서의 여러 개소에서, 화합물의 치환기가 그룹 또는 범위로 기재되어 있다. 관련 설명은, 상기 그룹 및

범위의 성분들의 각각 및 모든 개별의 하위조합을 포함하는 것으로 특별히 의도된다. 예를 들어, 용어 "C<sub>1-6</sub> 알킬"은 C<sub>1</sub>, C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub>, C<sub>6</sub>, C<sub>1-C<sub>6</sub></sub>, C<sub>1-C<sub>5</sub></sub>, C<sub>1-C<sub>4</sub></sub>, C<sub>1-C<sub>3</sub></sub>, C<sub>1-C<sub>2</sub></sub>, C<sub>2-C<sub>6</sub></sub>, C<sub>2-C<sub>5</sub></sub>, C<sub>2-C<sub>4</sub></sub>, C<sub>2-C<sub>3</sub></sub>, C<sub>3-C<sub>6</sub></sub>, C<sub>3-C<sub>5</sub></sub>, C<sub>3-C<sub>4</sub></sub>, C<sub>4-C<sub>6</sub></sub>, C<sub>4-C<sub>5</sub></sub>, 및 C<sub>5-C<sub>6</sub></sub> 알킬을 개별적으로 나타내는 것으로 구체적으로 의도된다. 다른 예로서, 0 내지 40 범위 내의 정수는 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 및 40을 개별적으로 나타내도록 구체적으로 의도되며, 1 내지 20 범위 내의 정수는 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 및 20을 개별적으로 나타내도록 구체적으로 의도된다.

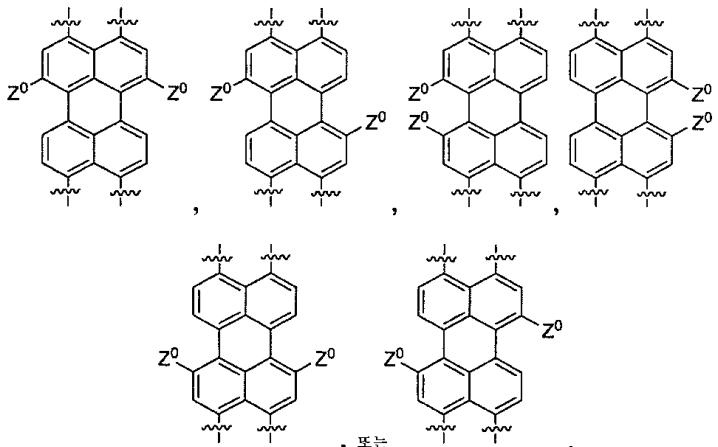
&lt;55&gt;

본원에 기재된 화합물은 비대칭 원자(이는 또한 키랄 중심으로도 칭해짐)를 포함할 수 있으며, 화합물의 일부는 하나 이상의 비대칭 원자 또는 중심을 포함할 수 있어서, 이에 따라 광학 이성질체(거울상이성질체) 및 부분입체이성질체가 생성될 수 있다. 본 발명은 그러한 광학 이성질체(거울상이성질체) 및 부분입체이성질체(기하 이성질체), 및 라세미 및 분할된, 거울상이성질체 순수 (+) 및 (-) 입체이성질체, 및 (+)와 (-) 부분입체이성질체의 다른 혼합물을 포함한다. 몇몇의 구체예에서, 광학 이성질체는, 예를 들어 키랄 분리, 부분입체이성질체 염형성, 운동성 분할, 및 비대칭 합성을 포함하는 당업자에게 공지된 표준 과정에 의해 거울상이성질체 풍부 또는 순수 형태로 얻어질 수 있다. 본 발명은 또한 알케닐 부분을 포함하는 화합물(예를 들어, 알켄 및 이민)의 시스- 및 트랜스-이성질체를 포함한다. 본 발명은 순수 형태의 모든 가능한 위치이성질체 및 이의 혼합물을 하는데, 이들은 예를 들어 컬럼 크로마토그래피, 박층 크로마토그래피, 모의의된(simulated) 이동상 크로마토그래피, 및 고성능 액체 크로마토그래피를 포함하는 당업자에게 공지된 표준 분리 과정을 이용하여 얻어질 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 페릴렌 화합물은 이들의 각각의 순수한 형태의 임의의 페릴렌 유도체 또는 이의 혼합물을 포함할 수 있는데, 페릴렌 유도체는 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 또는 8개의 R<sup>a</sup> 기로 치환될 수 있고, 여기서 R<sup>a</sup>는 본원에서 정의된 바와 같다. 구체적으로, 페릴렌 유도체는 하기 부분을 갖는 화합물을 포함할 수 있다:



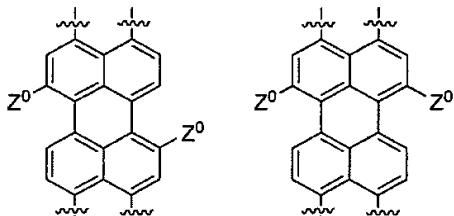
&lt;56&gt;

<57> 상기 식에서, Z<sup>0</sup>는 각각 H, 전자 끌게 기, 또는 이탈 기일 수 있으며, 전자 끌게 기 및 이탈기는 본원에서 정의된 바와 같다. 다양한 구체예에서, Z<sup>0</sup> 기 중 2개는 H일 수 있고 나머지 2개의 Z<sup>0</sup> 기는 독립적으로 전자-끌게 기 또는 이탈 기일 수 있다. 따라서, Z<sup>0</sup> 기 중 2개가 H이고 나머지 2개가 독립적으로 전자-끌게 기 또는 이탈기인 구체예에서, 본 발명의 화합물은 하기 부분을 갖는 위치이성질체를 지닐 수 있다:



&lt;58&gt;

<59> 특정 구체예에서, 본 발명의 화합물은 하기 부분을 갖는 위치이성질체, 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있다:



i, 또는

ii,

&lt;60&gt;

<61> 상기 식에서,  $Z^0$ 은 독립적으로 전자-끌게 기 또는 이탈기, 예를 들어 할로겐, 예컨대 Br 또는 CN 기일 수 있다. 특정 구체예에서,  $Z^0$ 은  $R^a$ 일 수 있는데, 여기서  $R^a$ 는 본원에서 정의된 바와 같다. 또한, 특별히 다르게 언급되지 않는 한, 하나의 위치이성질체의 설명에는 다른 위치이성질체와 임의의 위치이성질체의 혼합물이 포함됨이 구체적으로 고찰된다. 따라서, 화학식 i의 화합물의 사용은, 화학식 ii의 화합물(및 그 반대의), 및 화학식 i과 ii의 화합물의 혼합물을 포함한다.

<62> 본원에 사용된 "p-타입 반도체 물질" 또는 "p-타입 반도체"는 주 전류 캐리어로 구멍(holes)을 갖는 반도체 물질을 의미한다. 몇몇의 구체예에서, p-타입 반도체 물질이 기재 상에 증착되는 경우에, 이것은 약  $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  초과의 구멍 이동성을 제공할 수 있다. 전계 효과 장치의 경우에, p-타입 반도체는 또한 약 10 초과의 전류 온/오프 비를 나타낼 수 있다.

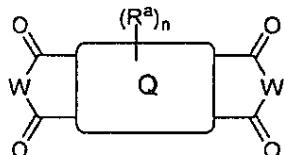
<63> 본원에 사용된 "n-타입 반도체 물질" 또는 "n-타입 반도체"는 주 전류 캐리어로 전자를 갖는 반도체 물질을 의미한다. 몇몇의 구체예에서, n-타입 반도체 물질이 기재 상에 증착되는 경우에, 이것은 약  $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  초과의 전자 이동성을 제공할 수 있다. 전계 효과 장치의 경우에, n-타입 반도체는 또한 약 10 초과의 전류 온/오프 비를 나타낼 수 있다.

<64> 본원에 사용된 "전계 효과 이동성"은 전하 캐리어, 예를 들어 p-타입 반도체 물질의 경우에 구멍(또는 양 전하의 단위) 및 n-타입 반도체 물질의 경우에 전자가 전기장의 영향 하에서 상기 물질을 통해 이동하는 경우에 속도의 측정수단(measure)을 의미한다.

<65> 본 명세서의 여러 개소에서 온도가 범위로 나타나 있다. 기재가 그러한 범위 내의 더 좁은 범위의 온도, 및 그 온도 범위를 포함하는 최대 및 최소 온도를 포함함이 구체적으로 의도된다.

<66> 명세서 전체를 통해, 구조들은 화학명으로 표시되거나 표시되지 않을 수 있다. 명명법에 대해 조금이라도 의문이 있는 경우에는, 구조가 우선이다.

<67> 한 일면에서, 본 발명은 다양한 아렌 유도체를 제공한다. 다양한 구체예에서, 본 발명은 하기 화학식 (I)의 화합물을 제공한다:



I

&lt;68&gt;

상기 식에서,

&lt;69&gt;

W는 각각 0 또는 NH이고;

&lt;70&gt;

Q는 융합된 고리 부분이고;

&lt;71&gt;

$R^a$ 는 각각 a) -CN, b) -NO<sub>2</sub>, c) -C(O)R<sup>b</sup>, d) -C(O)NHR<sup>b</sup> e) -C(O)OR<sup>b</sup>, f) -S(O)R<sup>b</sup>, g) -S(O)<sub>2</sub>R<sup>b</sup>, h) -S(O)<sub>2</sub>OH, i)

$-(CF_2)_t R^b$ , j)  $-[C(CF_3)_2]_t R^b$ , k) 옥소, 및 1) 1 내지 5개의  $R^c$  기로 치환된 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되고;

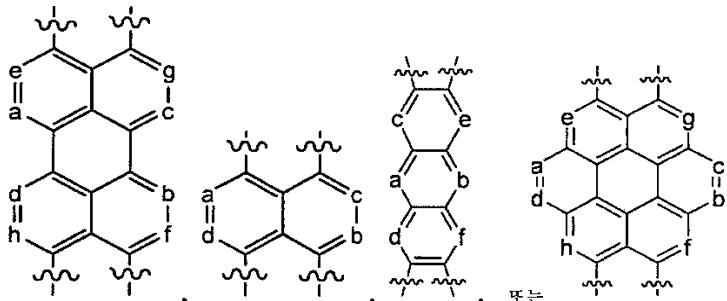
<73>  $R^b$ 는 각각 a) H, b)  $C_{1-20}$  알킬 기, c)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, d)  $C_{6-14}$  아릴 기, e)  $C_{7-20}$  아릴알킬 기, f) 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 g) 5 내지 14원 헤�테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서 상기  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기,  $C_{7-20}$  아릴알킬 기, 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $R^c$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

<74>  $R^c$ 는 각각 a) 할로겐, b)  $-CN$ , c)  $-NO_2$ , d)  $-C(O)H$ , e)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, f)  $-C(O)NH_2$ , g)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, h)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬), i)  $-C(O)OH$ , j)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, k)  $-S(O)H$ , l)  $-S(O)-C_{1-20}$  알킬, m)  $-S(O)_2H$ , n)  $-S(O)_2-C_{1-20}$  알킬, 및 o)  $-S(O)_2OH$ 로부터 선택되고;

<75> n은 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 또는 8이고;

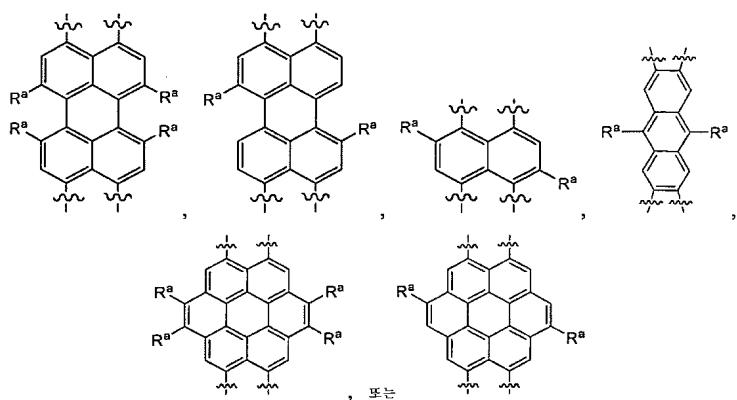
<76> t는 각각 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 또는 10이다.

<77> 몇몇의 구체예에서,  $Q-(R^a)_n$ 은 하기 화학식으로 표시될 수 있다:



<78>

<79> 상기 식에서, a, b, c, d, e, f, g, 및 h는 각각 독립적으로  $CH$ ,  $CR^a$ ,  $SiH$ ,  $SiR^a$ , N, 또는 P이고, 여기서  $R^a$ 는 본원에서 정의된 바와 같다. 예를 들어,  $R^a$ 는  $-CN$ ,  $-NO_2$ , 또는  $-C(O)CH_3$ 일 수 있고, a, b, c, d, e, f, g 및 h는 각각 독립적으로  $CH$ ,  $C(CN)$ , 또는  $C[C(O)CH_3]$ 일 수 있다. 몇몇의 구체예에서, Q는 2 내지 4개의  $R^a$  기로 치환될 수 있다. 특정 구체예에서, Q는 중심 "베이(bay)" 위치에서 치환될 수 있으며, 즉  $Q-(R^a)_n$ 은 하기 화학식으로 표시될 수 있다:

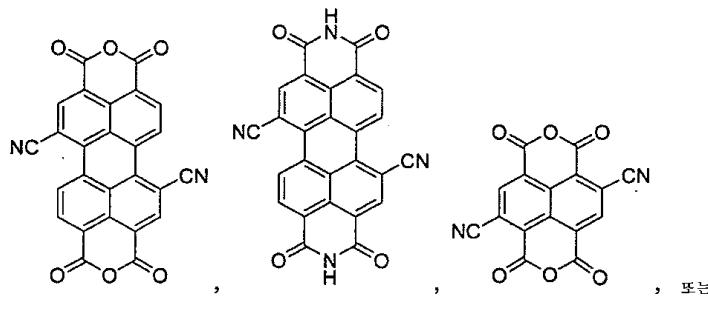
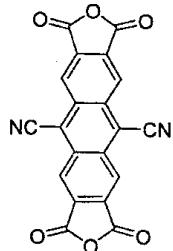


<80>

<81> 상기 식에서,  $R^a$ 는 본원에서 정의된 바와 같다. 예를 들어,  $R^a$ 는  $-CN$ 일 수 있다.

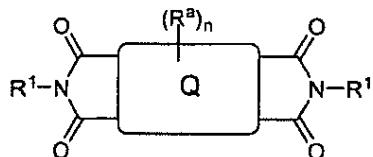
&lt;82&gt;

특정 구체예에서, 본 발명의 화합물은 하기 화학식으로 표시될 수 있다:

**PDA-CN<sub>2</sub>****PDIH-CN<sub>2</sub>****NDA-CN<sub>2</sub>****ADA-CN<sub>2</sub>**

&lt;83&gt;

다양한 구체예에서, 본 발명은 하기 화학식 (II)의 화합물을 제공한다:

**II**

&lt;85&gt;

상기 식에서,

&lt;86&gt;

Q는 융합된 고리 부분이고;

&lt;87&gt;

R<sup>a</sup>는 각각 a) -CN, b) -NO<sub>2</sub>, c) -C(O)R<sup>b</sup>, d) -C(O)NHR<sup>b</sup>, e) -C(O)OR<sup>b</sup>, f) -S(O)R<sup>b</sup>, g) -S(O)<sub>2</sub>R<sup>b</sup>, h) -S(O)<sub>2</sub>OH, i) -(CF<sub>2</sub>)<sub>t</sub>R<sup>b</sup>, j) -[C(CF<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sub>t</sub>R<sup>b</sup>, k) 옥소, 및 1) 1 내지 5개의 R<sup>c</sup> 기로 치환된 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되고;

&lt;88&gt;

R<sup>b</sup>는 각각 a) H, b) C<sub>1-20</sub> 알킬 기, c) C<sub>3-10</sub> 시클로알킬 기, d) C<sub>6-14</sub> 아릴 기, e) C<sub>7-20</sub> 아릴알킬 기, f) 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 g) 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서 상기 C<sub>1-20</sub> 알킬 기, C<sub>3-10</sub> 시클로알킬 기, C<sub>6-14</sub> 아릴 기, C<sub>7-20</sub> 아릴알킬 기, 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤�테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의 R<sup>c</sup> 기로 치환되거나 치환되지 않으며;

&lt;89&gt;

R<sup>c</sup>는 각각 a) 할로겐, b) -CN, c) -NO<sub>2</sub>, d) -C(O)H, e) -C(O)-C<sub>1-20</sub> 알킬, f) -C(O)NH<sub>2</sub>, g) -C(O)NH-C<sub>1-20</sub> 알킬, h) -C(O)N(C<sub>1-20</sub> 알킬)<sub>2</sub>, i) -C(O)OH, j) -C(O)-OC<sub>1-20</sub> 알킬, k) -S(O)H, l) -S(O)-C<sub>1-20</sub> 알킬, m) -S(O)<sub>2</sub>H, n) -S(O)<sub>2</sub>-C<sub>1-20</sub> 알킬, 및 o) -S(O)<sub>2</sub>OH로부터 선택되고;

&lt;90&gt;

n은 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 또는 8이고;

&lt;91&gt;

t는 각각 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 또는 10이고;

- <93>  $R^1$ 은 각각  $-L-R^2$  또는  $-L-Ar^1-R^2$ 이고;
- <94> L은 각각 Y 또는  $(CH_2CH_2O)_p$ 이고;
- <95> Y는 각각 2가  $C_{1-20}$  알킬 기, 2가  $C_{1-20}$  할로알킬 기, 또는 공유 결합이며;
- <96>  $Ar^1$ 은  $C_{6-14}$  아릴 기 또는 5 내지 14원 헤테로아릴 기이며, 이들 각각은 독립적으로 할로겐, -CN,  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{1-20}$  알콕시 기, 및  $C_{1-20}$  할로알킬 기로부터 선택된 1 내지 5개의 치환기로 치환되거나 치환되지 않으며;
- <97>  $R^2$ 는 각각 a)  $-OR^d$ , b)  $-C(O)OR^d$ , c)  $-C(O)R^e$ , d)  $-C(O)NR^eR^f$ , e)  $-C(S)OR^d$ , f)  $-C(S)R^e$ , g)  $-C(S)NR^eR^f$ , h)  $-SR^d$ , i)  $-S(O)_2OR^d$ , j)  $-S(O)_2R^e$ , k)  $-S(O)_2NR^eR^f$ , l)  $C_{1-20}$  알킬 기, m)  $C_{2-20}$  알케닐 기, n)  $C_{2-20}$  알키닐 기, o)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, p)  $C_{6-14}$  아릴 기, q) 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 r) 5 내지 14원 헤테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알키닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤�테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  또는  $-L-Ar^2-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;
- <98>  $R^d$ 는 각각 a) H, b)  $-C(O)R^e$ , c)  $-C(O)NR^eR^f$ , d)  $-C(S)R^e$ , e)  $-C(S)NR^eR^f$ , f)  $C_{1-20}$  알킬 기, g)  $C_{2-20}$  알케닐 기, h)  $C_{2-20}$  알키닐 기, i)  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기, j)  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기, k)  $-Y-3$  내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 l)  $-Y-5$  내지 14원 헤�테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알키닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤�테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;
- <99>  $R^e$  및  $R^f$ 는 각각 독립적으로 a) H, b)  $-OH$ , c)  $-SH$ , d)  $-S(O)_2OH$ , e)  $-C(O)OH$ , f)  $-C(O)NH_2$ , g)  $-C(S)NH_2$ , h)  $-OC_{1-20}$  알킬, i)  $-O-Y-C_{6-14}$  아릴, j)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, k)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, l)  $-C(S)N(C_{1-20})_2$  알킬, m)  $-C(S)NH-C_{1-20}$  알킬, n)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, o)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬, p)  $-S(O)_m-C_{1-20}$  알킬, q)  $-S(O)_m-OC_{1-20}$  알킬, r)  $-C(O)-Y-C_{6-14}$  아릴, s)  $-C(O)-O-Y-C_{6-14}$  아릴, t)  $-C(S)N(-Y-C_{6-14})_2$  아릴, u)  $-C(S)N(C_{1-20})_2$  알킬)- $Y-C_{6-14}$  아릴, v)  $-C(S)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, w)  $-C(O)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, x)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$  알킬)- $Y-C_{6-14}$  아릴, y)  $-C(O)N(Y-C_{6-14})_2$  아릴, z)  $-S(O)_m-Y-C_{6-14}$  아릴, aa)  $-S(O)_m-O-Y-C_{6-14}$  아릴, ab)  $C_{1-20}$  알킬 기, ac)  $C_{2-20}$  알케닐 기, ad)  $C_{2-20}$  알키닐 기, ae)  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기, af)  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기, ag)  $-Y-3$  내지 12원 시클로헤테로알킬 기, 및 ah)  $-Y-5$  내지 14원 헤�테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알키닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헤�ete로알킬 기, 및 5 내지 14원 헤�ete로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;
- <100>  $Ar^2$ 는 각각  $C_{6-14}$  아릴 기 또는 5 내지 14원 헤�ete로아릴 기이며, 이들은 각각 독립적으로 할로겐, -CN,  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{1-20}$  할로알킬 기, 및  $C_{1-20}$  알콕시 기로부터 선택된 1 내지 5개의 치환기로 치환되거나 치환되지 않고;
- <101>  $R^3$ 은 각각 a) 할로겐, b) -CN, c)  $-NO_2$ , d) 옥소, e)  $-OR^g$ , f)  $-SR^g$ , g)  $-NR^gR^h$ , h)  $-N(O)R^gR^h$ , i)  $-S(O)_mR^g$ , j)  $-S(O)_mOR^g$ , k)  $-S(O)_mNR^gR^h$ , l)  $-C(O)R^g$ , m)  $-C(O)OR^g$ , n)  $-C(O)NR^gR^h$ , o)  $-C(S)NR^gR^h$ , p)  $-SiH_3$ , q)  $-SiH(C_{1-20})_2$  알킬, r)  $-SiH_2(C_{1-20})_2$  알킬, s)  $-Si(C_{1-20})_3$  알킬, t)  $C_{1-20}$  알킬 기, u)  $C_{2-20}$  알케닐 기, v)  $C_{2-20}$  알키닐 기, w)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, x)  $C_{6-14}$  아릴 기, y) 3 내지 12원 시클로헤�ete로알킬 기, 또는 z) 5 내지 14원 헤�ete로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알키닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기,

3 내지 12원 시클로헥테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헥테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^4$  기로 치환되거나 치환되지 않으며;

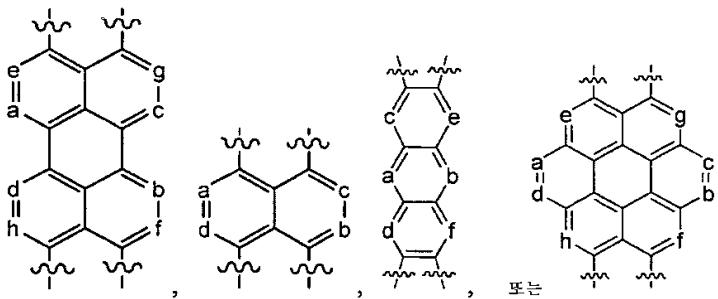
<102>  $R^g$  및  $R^h$ 는 각각 독립적으로 a) H, b)  $-OH$ , c)  $-SH$ , d)  $-S(O)_2OH$ , e)  $-C(O)OH$ , f)  $-C(O)NH_2$ , g)  $-C(S)NH_2$ , h)  $-OC_{1-20}$  알킬, i)  $-O-Y-C_{6-14}$  아릴, j)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, k)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, l)  $-C(S)N(C_{1-20})_2$ , m)  $-C(S)NH-C_{1-20}$  알킬, n)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, o)  $-C(O)N(C_{1-20})_2$ , p)  $-S(O)_m-C_{1-20}$  알킬, q)  $-S(O)_m-OC_{1-20}$  알킬, r)  $-C(O)-Y-C_{6-14}$  아릴, s)  $-C(O)-O-Y-C_{6-14}$  아릴, t)  $-C(S)N(-Y-C_{6-14})_2$ , u)  $-C(S)N(C_{1-20} 알킬)-Y-C_{6-14}$  아릴, v)  $-C(S)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, w)  $-C(O)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, x)  $-C(O)N(C_{1-20} 알킬)-Y-C_{6-14}$  아릴, y)  $-C(O)N(Y-C_{6-14})_2$ , z)  $-S(O)_m-Y-C_{6-14}$  아릴, aa)  $-S(O)_m-O-Y-C_{6-14}$  아릴, ab)  $C_{1-20}$  알킬 기, ac)  $C_{2-20}$  알케닐 기, ad)  $C_{2-20}$  알키닐 기, ae)  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기, af)  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기, ag) 3 내지 12원 시클로헥테로알킬 기, 및 ah) 5 내지 14원 헥테로아릴 기로부터 선택되며, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{2-20}$  알키닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헥테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헥테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^4$  기로 치환되거나 치환되지 않고;

<103>  $R^4$ 는 각각 a) 할로젠, b)  $-CN$ , c)  $-NO_2$ , d) 옥소, e)  $-OH$ , f)  $-NH_2$ , g)  $-NH(C_{1-20} 알킬)$ , h)  $-N(C_{1-20} 알킬)_2$ , i)  $-N(C_{1-20} 알킬)-Y-C_{6-14}$  아릴, j)  $-N(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , k)  $-S(O)_mH$ , l)  $-S(O)_mC_{1-20}$  알킬, m)  $-S(O)_2OH$ , n)  $-S(O)_m-OC_{1-20}$  알킬, o)  $-S(O)_m-O-Y-C_{6-14}$  아릴, p)  $-CHO$ , q)  $-C(O)-C_{1-20}$  알킬, r)  $-C(O)-C_{6-14}$  아릴, s)  $-C(O)OH$ , t)  $-C(O)-OC_{1-20}$  알킬, u)  $-C(O)-O-Y-C_{6-14}$  아릴, v)  $-C(O)NH_2$ , w)  $-C(O)NH-C_{1-20}$  알킬, x)  $-C(O)N(C_{1-20} 알킬)_2$ , y)  $-C(O)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, z)  $-C(O)N(C_{1-20} 알킬)-Y-C_{6-14}$  아릴, aa)  $-C(O)N(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , ab)  $-C(S)NH_2$ , ac)  $-C(S)NH-C_{1-20}$  알킬, ad)  $-C(S)N(C_{1-20} 알킬)_2$ , ae)  $-C(S)N(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , af)  $-C(S)N(C_{1-20} 알킬)-Y-C_{6-14}$  아릴, ag)  $-C(S)NH-Y-C_{6-14}$  아릴, ah)  $-S(O)_mNH_2$ , ai)  $-S(O)_mNH(C_{1-20} 알킬)$ , aj)  $-S(O)_mN(C_{1-20} 알킬)_2$ , ak)  $-S(O)_mNH(-Y-C_{6-14} 아릴)$ , al)  $-S(O)_mN(C_{1-20} 알킬)-Y-C_{6-14}$  아릴, am)  $-S(O)_mN(-Y-C_{6-14} 아릴)_2$ , an)  $-SiH_3$ , ao)  $-SiH(C_{1-20} 알킬)_2$ , ap)  $-SiH_2(C_{1-20} 알킬)$ , ar)  $-Si(C_{1-20} 알킬)_3$ , as)  $C_{1-20}$  알킬 기, at)  $C_{2-20}$  알케닐 기, au)  $C_{2-20}$  알키닐 기, av)  $C_{1-20}$  알콕시 기, aw)  $C_{1-20}$  할로알킬 기, ax)  $C_{3-10}$  시클로알킬 기, ay)  $C_{6-14}$  아릴 기, az) 3 내지 12원 시클로헥테로알킬 기, 및 ba) 5 내지 14원 헥테로아릴 기로부터 선택되고;

<104> m은 각각 0, 1 또는 2이고;

<105> p는 각각 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 또는 20이다.

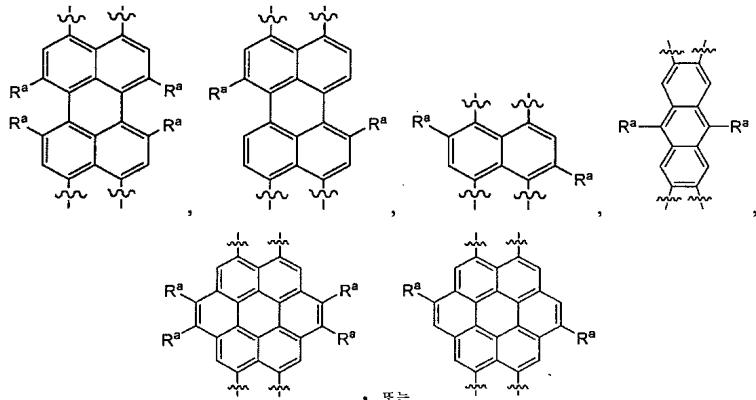
<106> 몇몇의 구체예에서,  $Q-(R^a)_n$ 는 하기 화학식으로 표시될 수 있다:



<107>

<108> 상기 식에서, a, b, c, d, e, f, g, 및 h는 각각 독립적으로  $CH$ ,  $CR^a$ ,  $SiH$ ,  $SiR^a$ , N, 또는 P이고, 여기서  $R^a$ 는 본원에서 정의된 바와 같다. 예를 들어,  $R^a$ 는  $-CN$ ,  $-NO_2$ , 또는  $-C(O)CH_3$ 일 수 있고, a, b, c, d, e, f, g 및 h는 각각 독립적으로  $CH$ ,  $C(CN)$ , 또는  $C[C(O)CH_3]$ 일 수 있다. 몇몇의 구체예에서, Q는 2 내지 4개의  $R^a$  기로 치환될 수 있다. 특정의 구체예에서, Q는 "베이" 위치에서 치환될 수 있고, 즉  $Q-(R^a)_n$ 는 하기 화학식으로 표시될

수 있다:

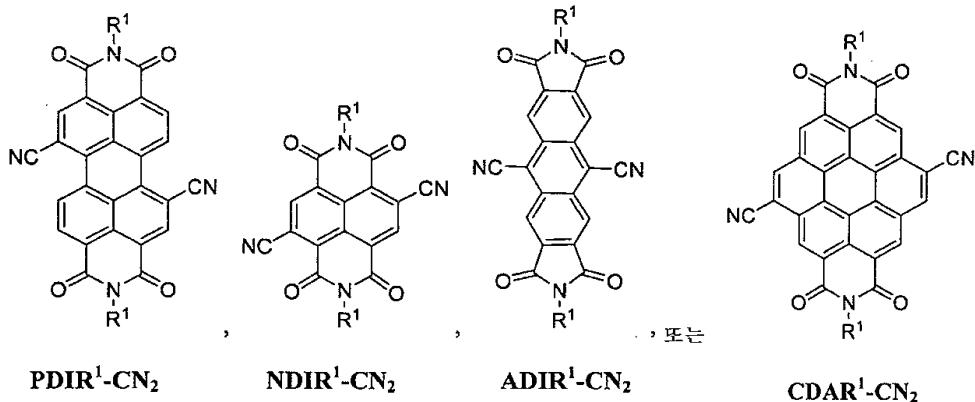


&lt;109&gt;

상기 식에서,  $R^a$ 는 본원에서 정의된 바와 같다. 예를 들어,  $R^a$ 는  $-CN$ 일 수 있다.

&lt;110&gt;

특정 구체예에서, 본 발명의 화합물은 하기 화학식으로 표시될 수 있다:



&lt;112&gt;

상기 식에서,  $R^1$ 은 본원에서 정의된 바와 같다.

&lt;113&gt;

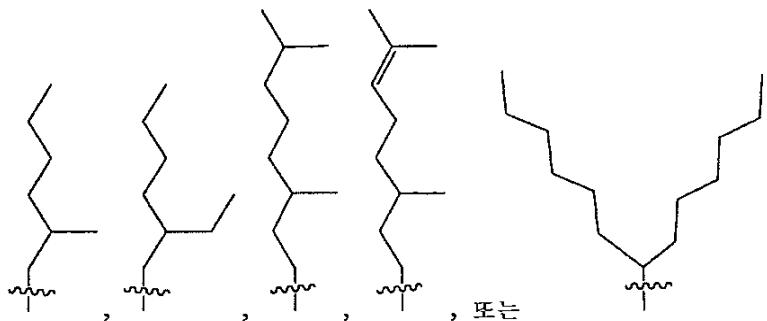
몇몇의 구체예에서,  $R^1$ 은 직쇄형  $C_{1-20}$  알킬 기, 분지쇄형  $C_{1-20}$  알킬 기, 분지쇄형  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $-Y-C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $-Y-C_{6-14}$  아릴 기,  $-Y-3$  내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및  $-Y-5$  내지 14원 헵테로아릴 기로부터 선택될 수 있고, 여기서  $C_{1-20}$  알킬 기,  $C_{2-20}$  알케닐 기,  $C_{3-10}$  시클로알킬 기,  $C_{6-14}$  아릴 기, 3 내지 12원 시클로헵테로알킬 기, 및 5 내지 14원 헵테로아릴 기의 각각은 1 내지 5개의  $-L-R^3$  기로 치환되거나 치환되지 않을 수 있으며, 여기서  $L$  및  $R^3$ 은 본원에서 정의된 바와 같다.

&lt;114&gt;

특정 구체예에서,  $R^1$ 은  $n$ -옥틸 기, (3S)-3,7-디메틸-6-옥테닐 기, (3S)-3,7-디메틸옥틸 기, 4- $n$ -헥실페닐 기, 4-페놀릴 기, 6-3차-부틸옥시카르보닐아미노헥실 기, 9-안트라세닐 기, 안트라센-9-일메틸 기, 및 2-(안트라센-9-일)-에틸 기로부터 선택될 수 있다.

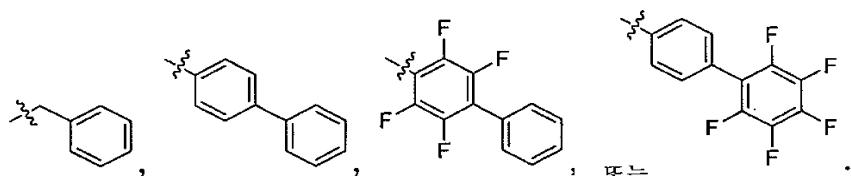
&lt;115&gt;

몇몇의 구체예에서,  $R^1$ 은 분지쇄형  $C_{1-20}$  알킬 기 또는 분지쇄형  $C_{2-20}$  알케닐 기일 수 있다. 특정 구체예에서,  $R^1$ 은 하기 화학식으로 표시될 수 있다:



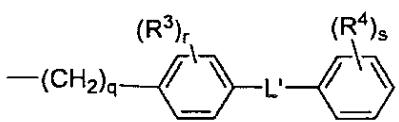
&lt;117&gt;

다양한 구체예에서, R<sup>1</sup>은 -L-R<sup>2</sup> 또는 -L-Ar<sup>1</sup>-R<sup>2</sup>일 수 있고, 여기서 R<sup>2</sup>는 C<sub>6-14</sub> 아릴 기 또는 5 내지 14원 헤테로아릴 기일 수 있으며, 이를 각각은 1 내지 5개의 -L-R<sup>3</sup> 또는 -L-Ar<sup>2</sup>-R<sup>3</sup> 기로 치환되거나 치환되지 않을 수 있고; Ar<sup>1</sup>은 C<sub>6-14</sub> 아릴 기 또는 5 내지 14원 헤�테로아릴 기일 수 있고, 이를 각각은 독립적으로 할로겐, -CN, C<sub>1-6</sub> 알킬 기, C<sub>1-6</sub> 알콕시 기, 및 C<sub>1-6</sub> 할로알킬 기로부터 선택된 1 내지 5개의 치환기로 치환되거나 치환되지 않고; 여기서 L, Ar<sup>2</sup>, 및 R<sup>3</sup>은 본원에서 정의된 바와 같다. 예를 들어, R<sup>2</sup> 및 Ar<sup>1</sup>은 독립적으로 본원에 기재된 바와 같이 치환된 C<sub>6-14</sub> 아릴 기일 수 있다. 몇몇의 구체예에서, R<sup>2</sup> 및 Ar<sup>1</sup> 각각은 독립적으로 할로겐, C<sub>1-20</sub> 알킬 기, C<sub>2-20</sub> 알케닐 기, C<sub>1-20</sub> 할로알킬 기, 및 C<sub>1-20</sub> 알콕시 기로부터 선택된 1 내지 5개의 치환기로 치환되거나 치환되지 않은 페닐 기일 수 있다(즉, R<sup>2</sup> 및 Ar<sup>1</sup>은 함께 비아릴 기를 형성할 수 있다). 몇몇의 구체예에서, L은 2가 C<sub>1-10</sub> 알킬 기, 2가 C<sub>1-10</sub> 할로알킬 기, 또는 공유 결합일 수 있다. 특정 구체예에서, R<sup>1</sup>은 하나 이상의 퍼할로아릴 기를 포함할 수 있다. 예를 들어, R<sup>1</sup>은 이하에 도시된 바와 같은 벤질 기, 비페닐 기, 또는 플루오로-치환된 비페닐 기일 수 있다:



&lt;119&gt;

특정 구체예에서, R<sup>1</sup>은 -L'-C<sub>6-14</sub> 아릴 기 또는 -L'-비(C<sub>6-14</sub> 아릴) 기로 치환되거나 치환되지 않을 수 있고, 여기서 L'는 2가 C<sub>1-10</sub> 알킬 기, -C(O)-, -O-, -S-, 또는 -S(O)-일 수 있고, C<sub>6-14</sub> 아릴 기의 각각은 독립적으로 R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>로부터 선택된 1 내지 5개의 기로 치환되거나 치환되지 않을 수 있다. 특정 구체예에서, R<sup>1</sup>은 하기 화학식으로 표시될 수 있다:

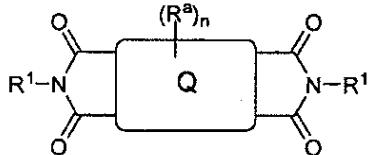


&lt;121&gt;

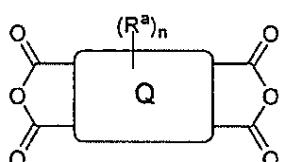
상기 식에서, q는 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 또는 10일 수 있고, r은 0, 1, 2, 3, 또는 4일 수 있거나, s는 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5일 수 있고, L', R<sup>3</sup>, 및 R<sup>4</sup>는 본원에서 정의된 바와 같다. 예를 들어, q는 0, 1, 또는 2일 수 있고, R<sup>3</sup>은 할로겐(예를 들어, F)일 수 있고, r은 0, 1, 2, 3, 또는 4일 수 있고, s는 0, 1, 2, 3, 또는 4일 수 있고, L'는 -CH<sub>2</sub>-, -CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-, -C(O)-, -O-, -S-, 또는 -S(O)-일 수 있고, R<sup>4</sup>는 할로겐(예를 들어 F) 또는 메틸 기일 수 있다.

<123> 다른 일면에서, 본 발명은 하기 화학식 (II)의 화합물을 제조하는 방법으로서,

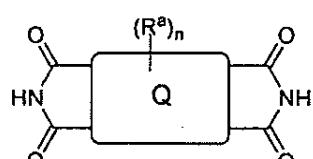
<124> 하기 화학식 (Ia)의 화합물을 화학식  $R^1NH_2$ 의 아민과 반응시키거나, 하기 화학식 (Ib)의 화합물을 화학식  $R^1-LG$ (여기서, LG는 이탈기이다)의 화합물과 반응시키는 것을 포함할 수 있는 방법을 제공한다:



II;



Ia,



Ib

<125>

상기 식에서, Q,  $R^a$ ,  $R^1$  및 n은 상기 정의된 바와 같다.

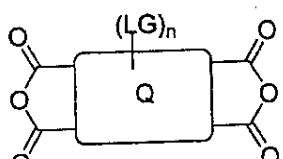
<126> 몇몇의 구체예에서, LG는 Cl, Br, I,  $N_3$ , OTs, OMs,  $NO_2$ , SCN, 및 CN으로부터 선택될 수 있다.

<127>

다양한 구체예에서, 화학식 (Ib)의 화합물은 화학식 (Ia)의 화합물을 질소 공급원과 반응시킴으로써 제조될 수 있다. 예를 들어 질소 공급원은  $NH_3$ 일 수 있다.

<128>

다양한 구체예에서, 화학식 (Ia)의 화합물은 하기 화학식 (III)의 화합물을 시아나이드와 반응시킴으로써 제조될 수 있다:



<129>

상기 식에서, LG는 이탈기이고, n은 본원에서 정의된 바와 같다.

<130>

특정 구체예에서, LG는 할라이드,  $N_3$ , -OTs, -OMs, -ONs, -OBs, 및 -OTf로부터 선택될 수 있다. 특정 구체예에서, LG는 Br일 수 있다.

<131>

특정 구체예에서, 시아나이드는 LiCN, NaCN, KCN, CuCN, AgCN, 또는 트리메틸실릴 시아나이드(TMSCN)일 수 있다. 예를 들어, 시아나이드는 CuCN 또는 AgCN일 수 있다. 특정 구체예에서, 시아나이드는 CuCN일 수 있다.

<132>

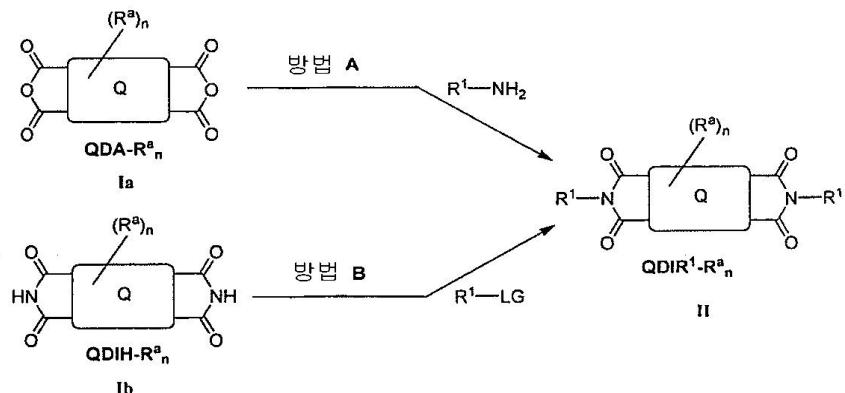
본 발명의 화합물은 하기 반응식 1에 개요된 절차에 따라서 시판되는 출발 물질, 문헌에 공지된 화합물 또는 용

이하게 제조된 중간체로부터 표준 합성 방법 및 당업자에게 공지된 절차를 적용시켜 제조될 수 있다. 표준 합성 방법 및 유기 분자의 제조 및 작용기 변형 및 조작에 대한 절차는 관련된 과학 문헌 또는 당 분야의 표준 교과서로부터 용이하게 수득될 수 있다. 통상적이거나 바람직한 공정 조건 (즉, 반응 온도, 시간, 반응물의 몰비, 용매, 압력 등)이 주어진 경우, 달리 언급되지 않는 한 다른 공정 조건도 이용될 수 있음을 이해할 것이다. 최적의 반응 조건은 사용된 특정 반응물 또는 용매에 따라 변화될 수 있으나, 이러한 조건은 통상의 최적화 절차에 의해 당업자에 의해 결정될 수 있다. 유기 합성 분야의 당업자는 제시된 합성 단계의 특성 및 순서가 본원에 개시된 화합물의 형성을 최적화하기 위해 변화될 수 있음을 인식할 것이다.

<137> 본원에 개시된 공정은 당 분야에 공지된 임의의 적합한 방법에 따라 모니터링될 수 있다. 예를 들어, 생성물 형성은 분광 방법, 예컨대 핵 자기 공명 분광학 (NMR, 예컨대  $^1\text{H}$  또는  $^{13}\text{C}$ ), 적외선 분광학(IR), 분광광도학 (예컨대, UV-가시), 질량 분광학(MS), 또는 고압 액체 크로마토그래피(HPLC), 기체 크로마토그래피(GC), 겔-투과 크로마토그래피(GPC) 또는 박층 크로마토그래피(TLC)와 같은 크로마토그래피에 의해 모니터링될 수 있다.

<138> 본원에 개시된 반응 또는 공정은 유기 합성 분야의 당업자에 의해 용이하게 선택될 수 있는 적합한 용매로 수행될 수 있다. 적합한 용매는 통상적으로 반응이 수행되는 온도, 즉 용매의 동결 온도 내지 용매의 비동 온도 사이일 수 있는 온도에서 반응물, 중간체 및/또는 생성물에 실제로 비반응성이다. 주어진 반응은 하나의 용매 또는 하나를 초과하는 용매의 혼합물에서 수행될 수 있다. 특정 반응 단계에 따라서, 특정 반응 단계에 적합한 용매가 선택될 수 있다.

### 반응식 1



&lt;140&gt;

<141> 반응식 1에 도시된 대로, 일부 구체예에서, 화학식 (II)의 화합물은 화학식 (Ia)의 화합물을 화학식  $\text{R}^1\text{NH}_2$ 의 애민과 반응시켜 제조될 수 있다. 다른 구체예에서, 화학식 (II)의 화합물은 화학식 (Ib)의 화합물을 화학식  $\text{R}^1\text{-LG}$ 의 화합물과 반응시켜 제조될 수 있고, 여기에서 LG는 본원에서 정의된 이탈기이다. 예를 들어, LG는 Cl, Br, I, N<sub>3</sub>, -SCN, OTs, OMs, NO<sub>2</sub>, 및 CN으로부터 선택될 수 있다.

<142> 일부 구체예에서, 화학식 (Ia) 또는 (Ib)의 화합물을 보조-용매 시스템에서  $\text{R}^1\text{NH}_2$  또는  $\text{R}^1\text{-LG}$ 와 각각 반응시킬 수 있다. 특정 구체예에서, 보조-용매 시스템은 극성 용매 및 저-극성/비-극성 용매를 포함할 수 있다. 예를 들어, 극성 용매는 양성자성 용매일 수 있다. 특정 구체예에서, 보조-용매 시스템은 크실렌 및 프로판산을 포함할 수 있다.

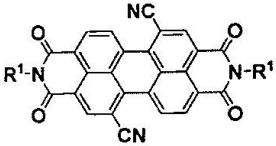
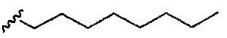
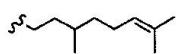
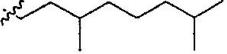
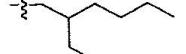
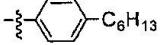
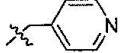
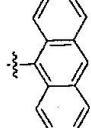
&lt;143&gt;

본 발명의 화합물은 표 1 및 표 2에 제시된 화합물을 포함하나 이로 제한되지 않는다.

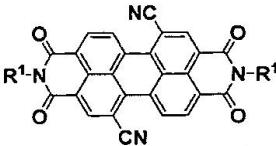
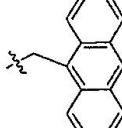
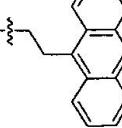
| Cpd # | 명칭  | 구조 |
|-------|---|----|
| 1     | 1,7- 디시아노페닐렌 - 3,4:9,10- 디안하이드라이드 (PDA-CN <sub>2</sub> )  |    |
| 2     | 2,6- 디시아노나프탈렌 - 1,4:5,8-디안하이드라이드 (NDA-CN <sub>2</sub> )   |    |
| 3     | 9,10- 디시아노안트라센 - 2,3:6,7-디안하이드라이드 (ADA-CN <sub>2</sub> )  |    |
| 4     | 1,7- 디시아노페닐렌 - 3,4:9,10- 비스(디카르복스아미드) (PDIH-CN <sub>2</sub> )                                       |    |
| 14    | N,N'-디옥틸 -2,6- 디시아노나프탈렌 - 1,4:5,8- 비스(디카르복스아미드) (NDI8-CN <sub>2</sub> )                             |    |
| 15    | N,N'-{4-[{(3S)-3,7- 디메틸 -6- 옥테닐 }-2,6- 디시아노나프탈렌 - 1,4:5,8- 비스(디카르복스아미드) (PDICytr-CN <sub>2</sub> )} |    |
| 16    | N,N'-디옥틸 -9,10- 디시아노안트라센 - 2,3:6,7-비스(디카르복스아미드) (ADI8-CN <sub>2</sub> )                             |    |

&lt;146&gt;

표 2

| Cpd<br># |                       |   |
|----------|--|---|
|          | 명칭   | R <sup>1</sup>  |
| 5a       | N,N'-비스[n- 옥틸]-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI8-CN<sub>2</sub>)</b>                    |     |
| 5b       | N,N'-비스[n- 옥틸]-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI8-CN<sub>2</sub>)</b>                    |     |
| 6        | N,N'-비스[(3S)-3,7- 디메틸옥틸]-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDICytr-CN<sub>2</sub>)</b>       |    |
| 7a       | N,N'-비스[(3S)-3,7- 디메틸옥틸]-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDIRCytr-CN<sub>2</sub>)</b>      |     |
| 7b       | N,N'-비스[(3S)-3,7- 디메틸옥틸]-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDIRCytr-CN<sub>2</sub>)</b>      |     |
| 7c       | N,N'-비스[2- 애틸헥실]-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI2EH-CN<sub>2</sub>)</b>                |    |
| 8        | N,N'-비스(4-n- 헥실페닐)-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDIPh6-CN<sub>2</sub>)</b>              |  |
| 9        | N,N'-비스(4- 피콜릴)-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI1Py-CN<sub>2</sub>)</b>                 |  |
| 10       | N,N'-비스(6- 3차-부틸옥시카르보닐아미노헥실)-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI6NHBoC-CN<sub>2</sub>)</b> |  |
| 11       | N,N'-비스(9- 안트라세닐)-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI0A-CN<sub>2</sub>)</b>                |  |

&lt;147&gt;

| Cpd<br># |                |   |
|----------|---|---|
|          | 명칭  | R <sup>1</sup>  |
| 12       | N,N'-비스( 안트라센-9- 일메틸)-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI1A-CN<sub>2</sub>)</b>       |  |
| 13       | N,N'-비스(2-( 안트라센-9- 일)- 에틸)-1,7- 디시아노페릴렌 -3,4:9,10- 비스(디카르복스이미드)<br><b>(PDI2A-CN<sub>2</sub>)</b> |  |

&lt;148&gt;

&lt;149&gt; 화학식 (II)의 화합물 및 화학식 (Ia) 및 (Ib)의 화합물은 박막 반도체, 전계-효과 장치, 유기 발광 다이오드

(OLED), 유기 광기전, 커패시터, 및 센서와 같은 반도체 물질 및 관련 전기 장치를 제작하는데 이용될 수 있다. 일부 구체예에서, 화학식 (I) 및 (II)의 화합물은 일반적인 용매 (예컨대, 물 및 일반적인 유기 용매)에서 만족스러운 용해성을 지닐 수 있고, 이것은 제조 비용을 감소시키고 이들 장치를 제작하는 있어서 가공 이점을 제공하는 것을 도울 수 있다.

<150> 본 교시를 추가로 예시하고 본 교시의 이해를 돋기 위해 하기 실시예를 제공하며 이는 어떠한 방식으로든 본 발명을 제한하지 않는다.

<151> 달리 언급되지 않는 한, 모든 시약은 상업적인 공급원으로부터 구입하였고 추가의 정제 없이 이용하였다. 일부 시약은 공지된 절차에 따라서 합성되었다. 무수 테트라히드로프란(THF)을 나트륨/벤조페논으로부터 증류시켰다. 달리 언급되지 않는 한 질소하에 반응을 수행하였다. UV-가시 스펙트럼을 캐리 모델(Cary Model) 1 UV-vis 분광광도계 상에서 기록하였다. NMR 스펙트럼을 배리안 유니티 플러스(Variian Unity Plus) 500 광도계 ( $^1\text{H}$ , 500 MHz;  $^{13}\text{C}$ , 125 MHz) 상에서 기록하였다. 전기분무 질량 분광학을 써모 피네간 모델 LCQ 어드밴티지 (Thermo Finnegan model LCQ Advantage) 질량 분광계 상에서 수행하였다.

<152> **실시예 1: 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드의 제조.** 디메틸포름아미드 (DMF, 70 mL) 중 1,7-디브로모페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (1.5 g, 2.73 mmol) 및 구리 (I) 시아나이드 (CuCN, 4.43 g, 49.5 mmol)의 혼합물을 탈기시키고, 150°C에서 6.5시간 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, 침전물을 여과에 의해 수집하고, 메탄올로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 미정제 생성물을 시안화칼륨 (KCN, 100 mmol)의 수용액과 뜨거운 물로 세척하여 생성물을 짙은 적색 고형물 (65% 수율)로서 수득하였다. MS-MALDI (계산치 442.34) 442.7 (도 3). M.p. > 300°C.

<153> **실시예 2: 2,6-디시아노나프탈렌-1,4:5,8-디안하이드라이드의 제조.** DMF (25 mL) 중 2,6-디브로모나프탈렌-1,4:5,8-디안하이드라이드 (0.58 g, 1.40 mmol) 및 CuCN (2.22 g, 25.0 mmol)의 혼합물을 탈기시키고, 150°C에서 4시간 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, 침전물을 여과에 의해 수집하고, 메탄올로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 미정제 생성물을 KCN (50 mmol)의 수용액과 뜨거운 물로 세척하여 생성물을 엷은 황색 고형물 (58% 수율)로서 수득하였다. MS-MALDI (계산치 317.99) 318.1 (도 4). M.p. > 300 °C.

<154> **실시예 3: 9,10-디시아노안트라센-2,3:6,7-디안하이드라이드의 제조.** DMF (30 mL) 중 2,6-디브로모나프탈렌-1,4:5,8-디안하이드라이드 (0.67 g, 1.40 mmol) 및 CuCN (2.22 g, 25.0 mmol)의 혼합물을 탈기시키고, 150°C에서 5시간 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, 침전물을 여과에 의해 수집하고, 메탄올로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 미정제 생성물을 KCN (50 mmol)의 수용액과 뜨거운 물로 세척하여 생성물을 엷은 황색 고형물 (44.1% 수율)로서 수득하였다. MS-MALDI 계산치 368.01 실측치 369.0. M.p. > 300 °C.

<155> **실시예 4: 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조.** 프로판산 (25 mL) 중 암모늄 아세테이트 (3.62 g, 47.03 mmol) 및 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (100 mg, 0.226 mmol)의 혼합물을 145°C에서 1시간 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, 침전물을 여과에 의해 수집하고, 물 및 MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다 (79% 수율). MS-MALDI (계산치 440.37) 440.9 (도 5). EI-MS: 실측치 441.0. M.p. > 300 °C.

<156> **실시예 5a: N,N'-비스(n-옥틸)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 A).** n-옥틸아민 (117 mg, 0.9 mmol)을 크실렌 (3 mL) 및 프로판산 (0.7 mL) 중 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (200 mg, 0.45 mmol)의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 5분 동안 교반하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (8 mL)를 첨가하여 침전물을 형성하고, 이것을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 짙은 적색 고형물 (218 mg, 73% 수율)로서 수득하였다.  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CHCl}_3$ , 500 MHz):  $\delta$  9.71 (d, 2H), 8.99 (s, 2H), 8.94 (d, 2H), 4.23 (t, 4H), 1.77 (m, 4H), 1.56-1.3 (m, 20H), 0.90 (t, 6H). M.p. > 300 °C.

<157> **실시예 5b: N,N'-비스(n-옥틸)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 B).** t-BuOH (3.6 mmol)를 무수 DMF (10 mL) 중 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드) (200 mg, 0.45 mmol)의 혼탁액에 첨가하였다. 실온에서 6시간 동안 교반시킨 후, 1-브로모옥탄 (468 mg, 3.6 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 16시간 동안 교반하였다. MeOH를 첨가하고 (40 mL) 침전물을 여과에 의해 수집하고, 물 및 MeOH로 세척하여 생성물을 적색 고형물 (38% 수율)로서 수득하였다.

<158> **실시예 6: N,N'-비스[(3S)-3,7-디메틸옥텐-6-일]-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조.**

(방법 A). 시트로넬릴아민 (5.00 g, 31.8 mmol)을 크실렌 (45 mL) 및 프로판산 (10.5 mL) 중 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (7.07 g, 15.9 mmol)의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 10분 동안 교반하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (160 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켜 생성물을 짙은 적색 고형물 (74% 수율)로서 제공하였다. M.p. = 278 °C (DMF). EA: C<sub>46</sub>H<sub>44</sub>N<sub>4</sub>O<sub>4</sub>에 대한 계산치: C, 77.07; H, 6.19; N, 7.82; 실측치 C, 77.39; H, 6.18; N, 7.99; <sup>1</sup>H NMR은 도 8을 참조한다.

<159> 실시예 7a: N,N'-비스[(3S)-3,7-디메틸옥틸]-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 A). (3S)-3,7-디메틸옥틸아민 (2.37 g, 15.0 mmol)을 크실렌 (20 mL) 및 프로판산 (5 mL) 중 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (3.00 mg, 7.54 mmol)의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 10분 동안 교반하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (160 mL)를 첨가하고, 여과에 의해 수집된 침전물을 MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 짙은 적색 고형물 (79% 수율)로서 수득하였다. EA: 계산치 C, 76.64; H, 6.71; N, 7.77; 실측치 C, 76.72; H, 6.86; N, 7.59; <sup>1</sup>H NMR은 도 9를 참조한다.

<160> 실시예 7b: N,N'-비스[(3S)-3,7-디메틸옥틸]-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 B). t-BuOH (3.6 mmol)를 무수 DMF (10 mL) 중 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드) (200 mg, 0.45 mmol)의 혼탁액에 첨가하였다. 실온에서 6시간 동안 교반시킨 후, 시트로넬릴브로마이드 (3.6 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 16시간 동안 교반하였다. MeOH를 첨가하고 (50 mL), 침전물을 여과에 의해 수집하고, 물 및 MeOH로 세척하여 생성물을 적색 고형물 (31% 수율)로서 수득하였다.

<161> 실시예 7c: N,N'-비스(2-에틸헥실)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 A). 2-에틸헥실아민 (117 mg, 0.9 mmol)을 크실렌 (3 mL) 및 프로판산 (0.7 mL) 중 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (200 mg, 0.45 mmol)의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 10분 동안 교반하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (10 mL)을 첨가하고, 여과에 의해 수집된, 형성된 침전물을 MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 짙은 적색 고형물 (198 mg, 66% 수율)로서 수득하였다. M.p. > 319-321 °C; <sup>1</sup>H NMR은 도 10을 참조한다.

<162> 실시예 8: N,N'-비스(4-n-헥실페닐)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 A). 크실렌 (1.5 mL) 및 프로판산 (0.34 mL) 중 4-헥실페닐 (80.2 mg, 0.452 mmol) 및 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (100 mg, 0.226 mmol)의 혼합물을 145°C에서 5분 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (8 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 71%의 수율로 수득하였다. <sup>1</sup>H NMR (CHCl<sub>3</sub>, 500 MHz): δ 9.77 (d, 2H), 9.04 (s, 2H), 9.00 (d, 2H), 7.42 (d, 4H), 7.26 (d, 4H), 2.73 (t, 4H), 1.72 (m, 4H), 1.55-1.35 (m, 12H), 0.93 (t, 6H). MS-MALDI 계산치 760.88 실측치 760.3. M.p. > 300 °C.

<163> 실시예 9: N,N'-비스(4-파콜릴)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 A). 크실렌 (2.2 mL) 및 프로판산 (0.5 mL) 중 4-파콜릴아민 (73 mg, 0.68 mmol) 및 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (150 mg, 0.34 mmol)의 혼합물을 145°C에서 5분 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (8 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물 (171 mg)을 81%의 수율로 수득하였다. MS-MALDI 계산치 622.59 실측치 622.6; M.p. > 300 °C; <sup>1</sup>H NMR은 도 7을 참조한다.

<164> 실시예 10: N,N'-비스(6-3차-부틸옥시카르보닐아미노헥실)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 A). 10 mL의 크실렌 중 N-부틸옥시카르보닐-1,6-디아미노헥산 (N-BOC-1,6-디아미노헥산, 1.73 g, 8 mmol)의 용액을 크실렌 (30 mL) 중 1,7-디브로모페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (2 g, 3.64 mmol)의 혼탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 10분 동안 교반하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 66%의 수율로 수득하였다. M.p. 210 °C; <sup>1</sup>H NMR은 도 6을 참조한다.

<165> 실시예 11: N,N'-비스(9-안트라세닐)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조. (방법 A). 크실렌 (1.5 mL) 및 프로판산 (0.34 mL) 중 9-아미노안트라센 (87.4 mg, 0.452 mmol) 및 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (100 mg, 0.226 mmol)의 혼합물을 145°C에서 8분 동안 가열하였다. 실온까지 냉각

시킨 후, MeOH (8 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 74%의 수율로 수득하였다. M.p. > 300 °C.

<166> **실시예 12: N,N'-비스(안트라센-9-일메틸)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조.** 크실렌 (1.5 mL) 및 프로판산 (0.34 mL) 중 9-메틸아미노안트라센 (93.7 mg, 0.452 mmol) 및 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (100 mg, 0.226 mmol)의 혼합물을 145°C에서 7분 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (8 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 64%의 수율로 수득하였다. MS-MALDI 계산치 820.85 실측치 820.5. M.p. > 300 °C.

<167> **실시예 13: N,N'-비스(2-(안트라센-9-일)-에틸)-1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복스이미드)의 제조.** (방법 A). 크실렌 (1.5 mL) 및 프로판산 (0.34 mL) 중 9-(2-아미노에틸)안트라센 (100 mg, 0.452 mmol) 및 1,7-디시아노페릴렌-3,4:9,10-디안하이드라이드 (100 mg, 0.226 mmol)의 혼합물을 145°C에서 5분 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (8 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 68%의 수율로 수득하였다. M.p. > 300 °C.

<168> **실시예 14: N,N'-디옥틸-2,6-디시아노나프탈렌-1,4:5,8-비스(디카르복스이미드)의 제조.** (방법 A). n-옥틸아민 (0.42 mg, 3.2 mmol)을 크실렌 (12 mL) 및 프로판산 (2.8 mL) 중 2,6-디시아노나프탈렌-1,4:5,8-디안하이드라이드 (0.51 g, 1.6 mmol)의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 8분 동안 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (30 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 옅은 황색 고형물로서 수득하였다 (69% 수율).

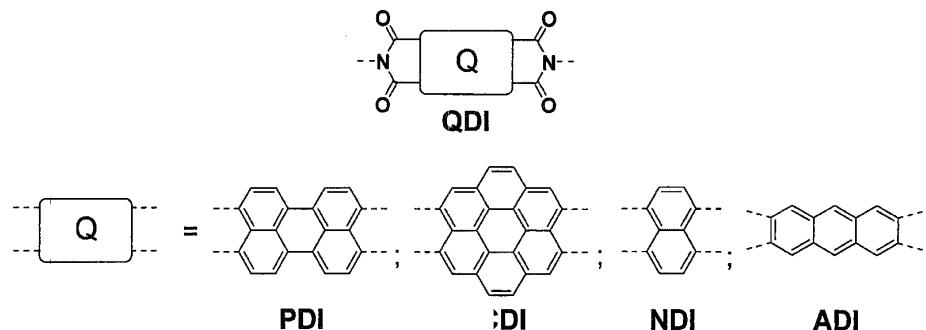
<169> **실시예 15: N,N'-{4-[(3S)-3,7-디메틸-6-옥테닐]-2,6-디시아노나프탈렌-1,4:5,8-비스(디카르복스이미드)의 제조.** (방법 A). 시트로넬릴아민 (0.5 g, 3.2 mmol)을 크실렌 (4.5 mL) 및 프로판산 (1 mL) 중 2,6-디시아노나프탈렌-1,4:5,8-디안하이드라이드 (0.51 g, 1.6 mmol)의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 10분 동안 교반하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (15 mL)를 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, MeOH로 세척하고, 밤새 건조시켰다. 생성물을 황색 고형물 (76% 수율)로서 수득하였다.  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  9.12 (s, 2H), 7.45 (d, 4H,  $J$  = 8.1 Hz), 7.22 (d, 4H,  $J$  = 8.1 Hz), 5.18 (t, 2H,  $J$  = 7.1 Hz), 2.72 (t, 4H,  $J$  = 7.8 Hz), 2.16–1.96 (m, 4H), 1.82–1.40 (m, 6H), 1.66 (s, 6H), 1.64 (s, 6H), 1.40–1.20 (m, 4H), 1.01 (d, 6H,  $J$  = 6.6 Hz). EA  $\text{C}_{48}\text{H}_{48}\text{N}_4\text{O}_4$ 에 대한 계산치: C, 77.39; H, 6.49; N, 7.52; 실측치 C, 77.81; H, 6.12; N, 7.09.

<170> **실시예 16: N,N'-디옥틸-9,10-디시아노안트라센-2,3:6,7-비스(디카르복스이미드)의 제조.** (방법 A). n-옥틸아민 (0.84 mg, 6.4 mmol)을 크실렌 (23 mL) 및 프로판산 (6 mL) 중 9,10-디시아노안트라센-2,3:6,7-디안하이드라이드 (1.2 g, 3.2 mmol)의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 145°C에서 10분 동안 교반하였다. 실온까지 냉각시킨 후, MeOH (60 mL)를 첨가하고, 여과에 의해 수집된, 형성된 침전물을 MeOH로 세척하고, 마지막으로 밤새 건조시켰다. 생성물을 옅은 황색 고형물 (73% 수율)로서 수득하였다.

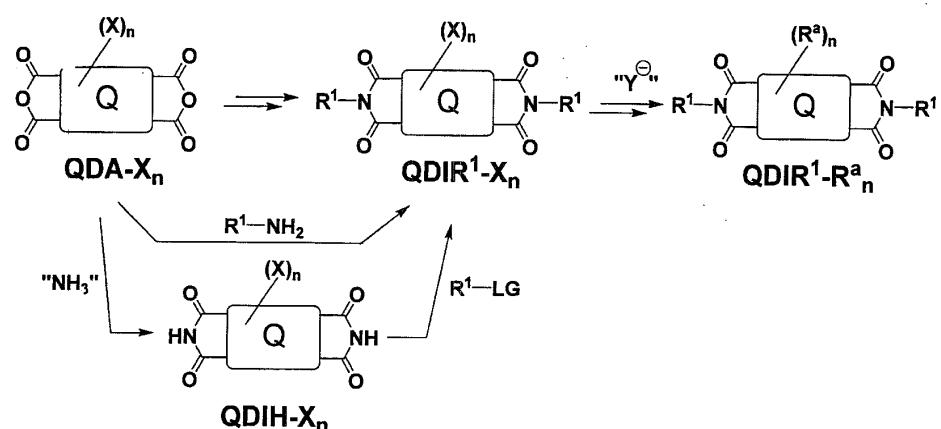
<171> 본 교시는 이의 정신 또는 본질적인 특성에서 벗어나지 않으며 다른 특정 형태의 구체예를 포함한다. 따라서 전술한 구체예는 본원에 개시된 본 교시를 제한한다기보다 예시적인 모든 관련사항으로 고려되어야 한다. 본 발명의 범위는 따라서 전술한 설명이 아니라 첨부된 청구 범위에 의해 보여지며, 청구 범위에 상당하는 효력 및 범위 내에 있는 모든 변형을 여기에 포함하고자 한다.

## 도면

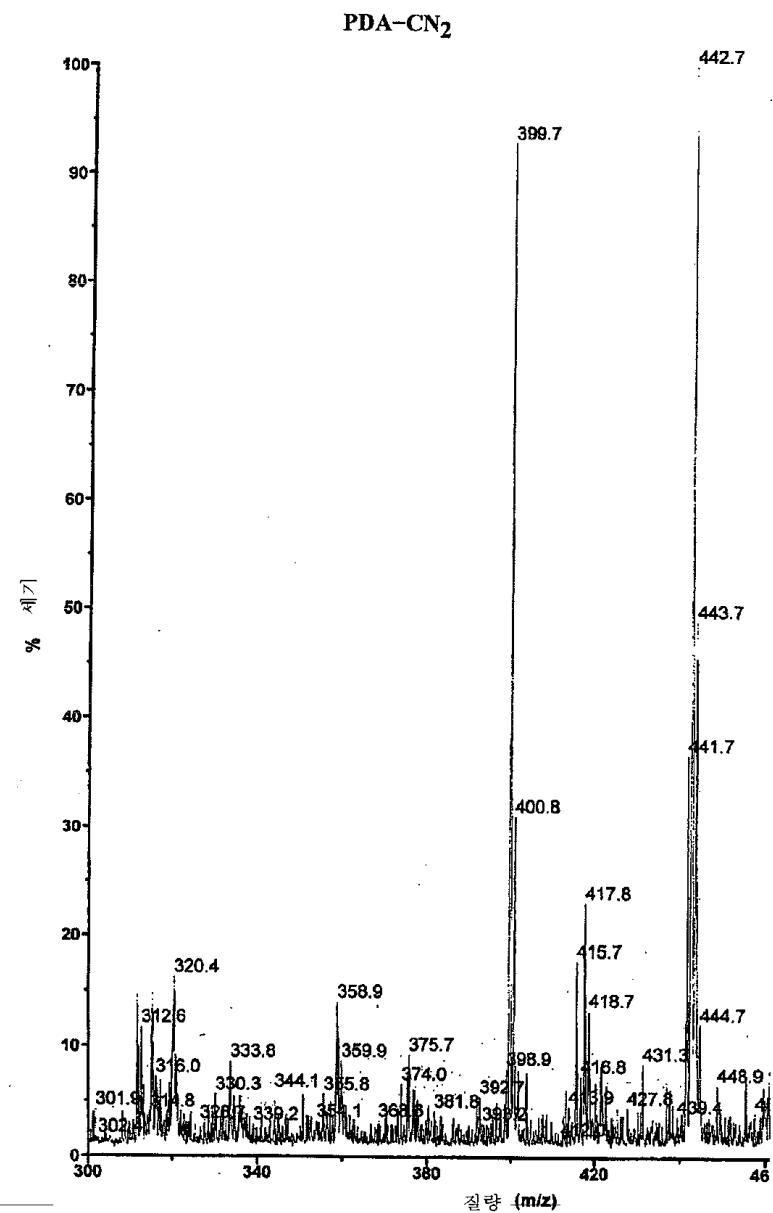
## 도면1



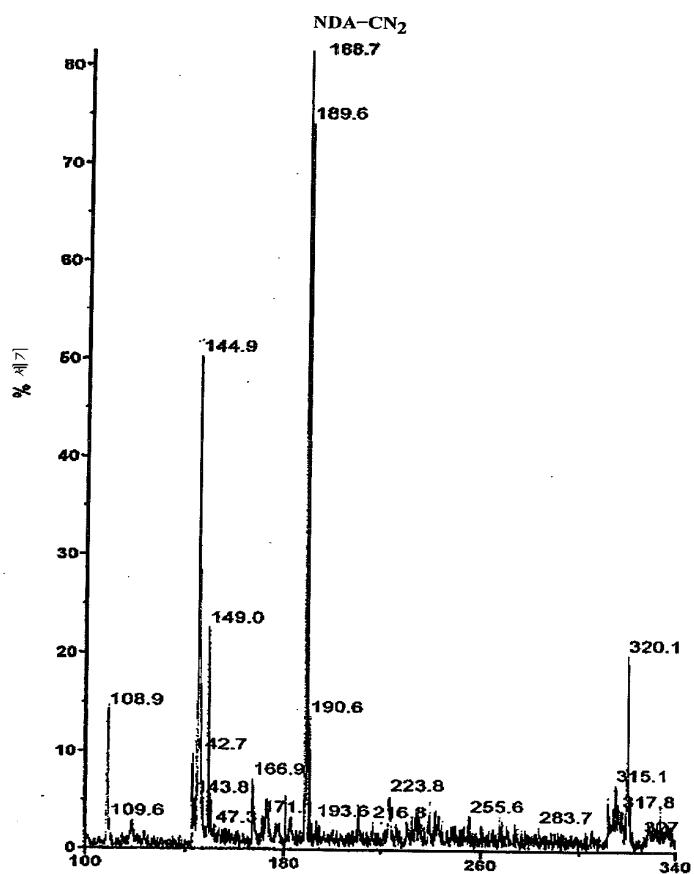
## 도면2



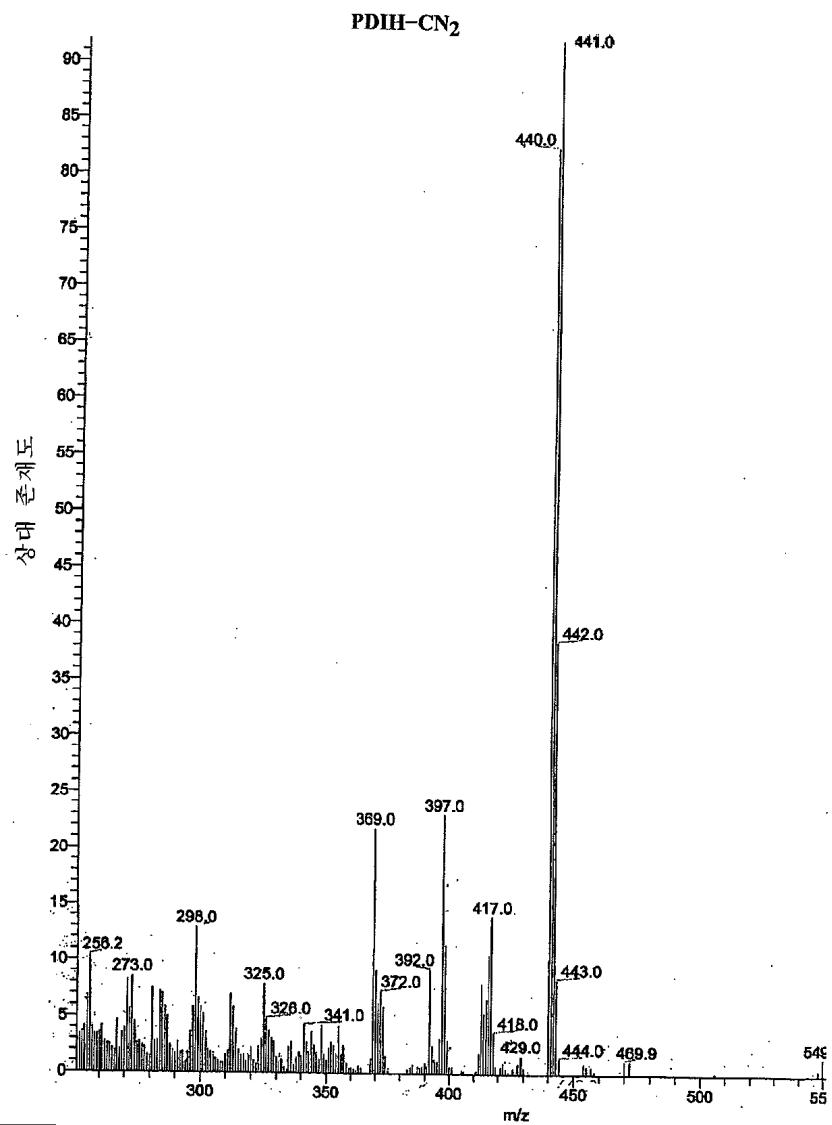
## 도면3



도면4

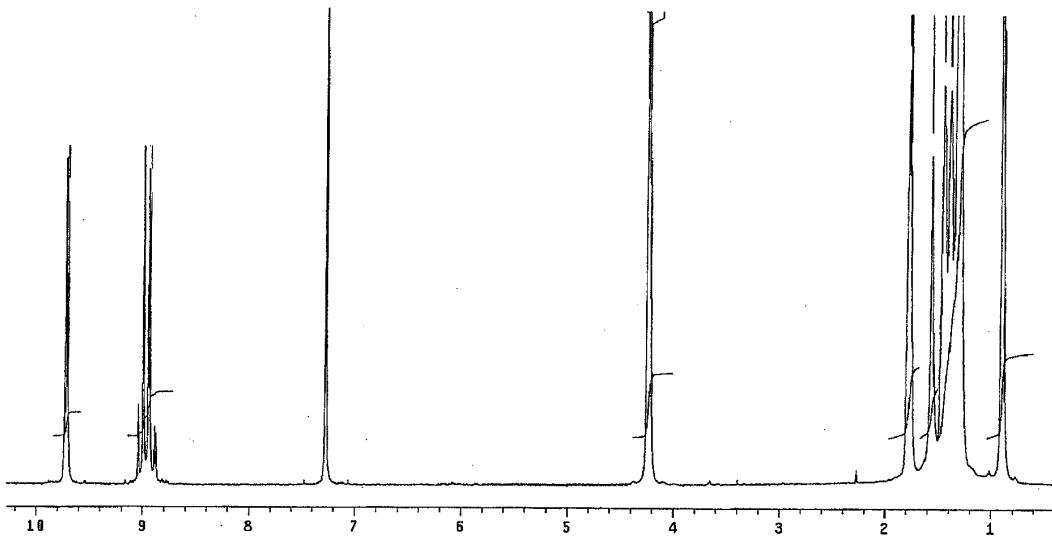


## 도면5

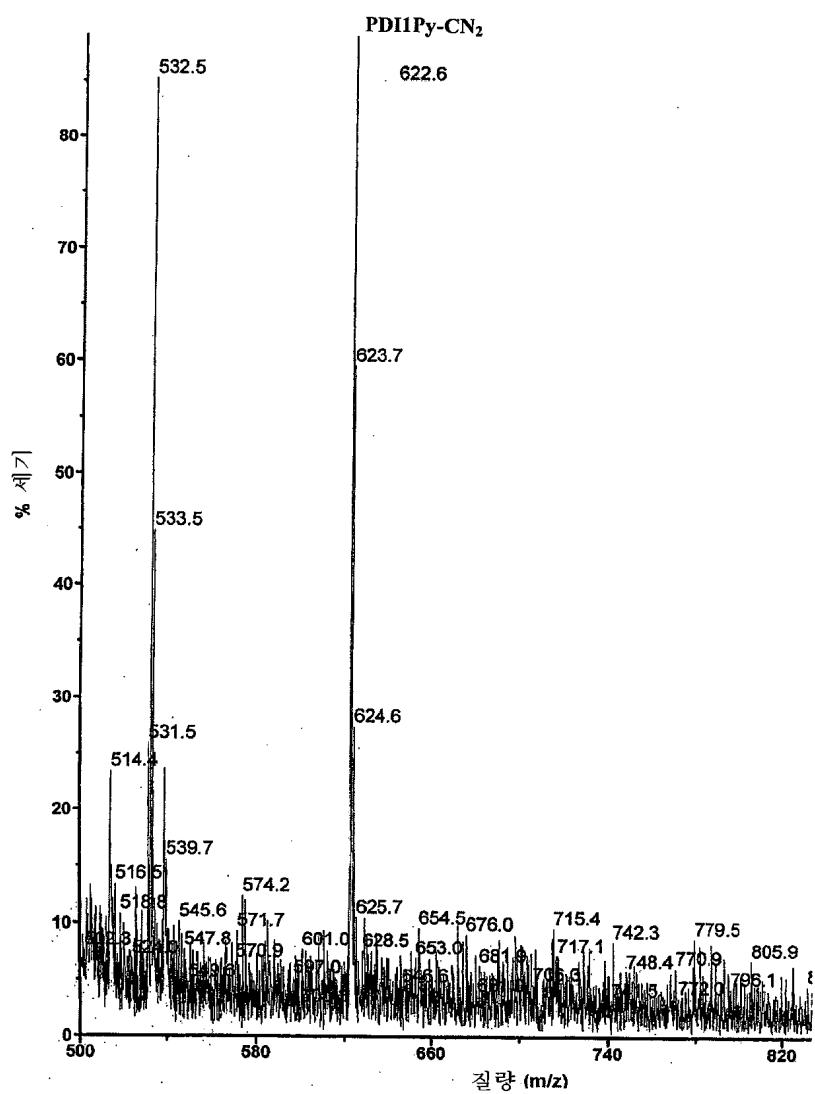


도면6

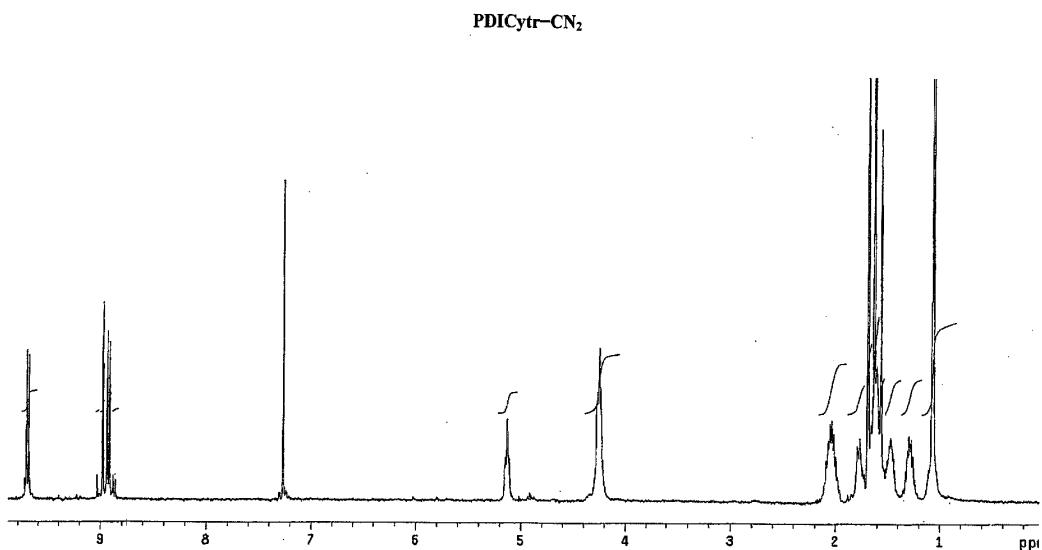
PDI6NHBoc-CN<sub>2</sub>



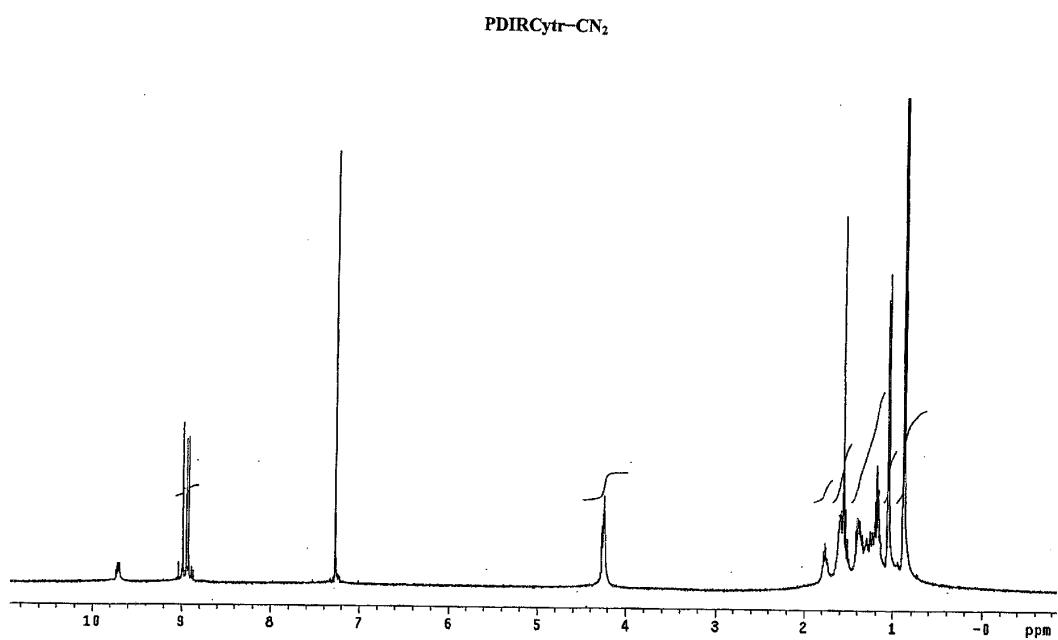
도면7



도면8



도면9



## 도면10

