

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017년 8월 3일 (03.08.2017)



(10) 국제공개번호
WO 2017/131406 A1

(51) 국제특허분류:

G02B 5/28 (2006.01) B01J 20/22 (2006.01)
H01L 51/52 (2006.01) C07C 43/164 (2006.01)
C07C 15/28 (2006.01) C07C 43/20 (2006.01)
C07C 15/38 (2006.01) B01J 20/28 (2006.01)
G02B 1/00 (2006.01)

(21) 국제출원번호:

PCT/KR2017/000803

(22) 국제출원일:

2017년 1월 24일 (24.01.2017)

(25) 출원언어:

한국어

(26) 공개언어:

한국어

(30) 우선권정보:

10-2016-0011018 2016년 1월 28일 (28.01.2016) KR
10-2016-0056767 2016년 5월 10일 (10.05.2016) KR
10-2016-0061682 2016년 5월 19일 (19.05.2016) KR

(71) 출원인: 한양대학교 산학협력단 (INDUSTRY-UNIVERSITY COOPERATION FOUNDATION HANYANG UNIVERSITY) [KR/KR]; 04763 서울시 성동구 왕십리로 222, Seoul (KR).

(72) 발명자: 서동학 (SUH, Donghac); 13603 경기도 성남시 분당구 불정로 195, 정든마을 우성 6 단지아파트 609 동 1601 호, Gyeonggi-do (KR). 최경환 (CHOI, Kyoungwan); 02709 서울시 성북구 솔샘로 12 길 26, Seoul (KR).

(74) 대리인: 특허법인 이상 (E-SANG PATENT & TRADE-MARK LAW FIRM); 06747 서울시 서초구 바우피로 188, 3층, Seoul (KR).

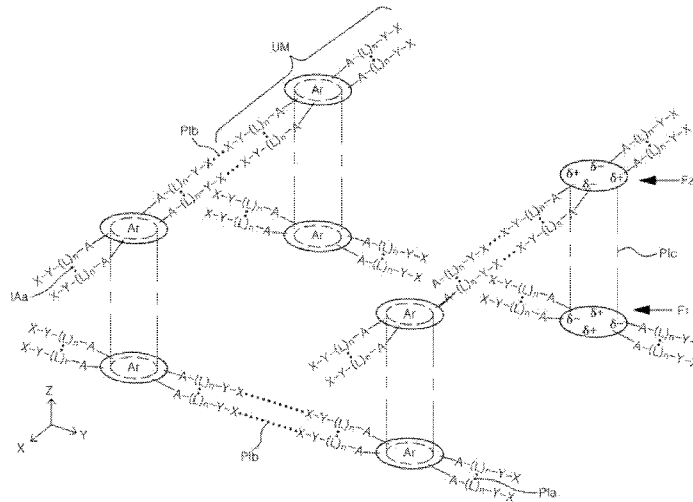
(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM,

[다음 쪽 계속]

(54) Title: ORGANIC COMPOUND, THREE-DIMENSIONAL ORGANIC FRAMEWORK FORMED BY USING ORGANIC COMPOUND, SEPARATION SIEVE AND OPTICAL LAYER, WHICH COMPRISE ORGANIC FRAMEWORK, AND OPTICAL DEVICE COMPRISING OPTICAL LAYER AS OPTICAL AMPLIFICATION LAYER

(54) 발명의 명칭: 유기 화합물, 이 유기 화합물을 사용하여 형성된 3차원 유기 구조체, 이 유기 구조체를 구비하는 분리체 및 광학층, 및 이 광학층을 광증폭층으로 구비하는 광학소자



(57) Abstract: Provided are: an organic compound; a three-dimensional organic framework formed by using the organic compound; a separation sieve and an optical layer, which comprise the organic framework; and an optical device comprising the optical layer as an optical amplification layer. The organic framework comprises a plurality of organic molecules self-assembled by noncovalent bonding. Each organic molecule comprises: an aromatic ring; a first pair of substituents respectively coupled at positions immediately adjacent to each other among the substitutable positions of the aromatic ring; and a second pair of substituents respectively coupled at positions immediately adjacent to each other among the remaining substitutable positions. The organic molecules are self-assembled by a Van Der Waals interaction, a London dispersion interaction or hydrogen bonding between the first and second pairs of substituents, and a π - π interaction between the aromatic rings.

(57) 요약서:

[다음 쪽 계속]

WO 2017/131406 A1



KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK,

SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

유기 화합물, 이 유기 화합물을 사용하여 형성된 3차원 유기 구조체, 이 유기 구조체를 구비하는 분리체 및 광학층, 및 이 광학층을 광증폭층으로 구비하는 광학소자를 제공한다. 상기 유기 구조체는 비공유 결합에 의해 자기조립된 다수 개의 유기 분자들을 포함한다. 각 유기 분자는 방향족 고리와 상기 방향족 고리의 치환가능한 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 치환기들의 제 1 쌍과 나머지 치환가능한 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 치환기들의 제 2 쌍을 구비한다. 상기 유기 분자들은 상기 치환기들의 제 1 쌍과 제 2 쌍 사이의 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용, 런던 분산력(London dispersion interaction) 또는 수소 결합(hydrogen bonding)과 방향족 고리들 사이의 파이-파이 상호작용에 의해 자기 조립된다.

명세서

발명의 명칭: 유기 화합물, 이 유기 화합물을 사용하여 형성된 3차원 유기 구조체, 이 유기 구조체를 구비하는 분리체 및 광학층, 및 이 광학층을 광증폭층으로 구비하는 광학소자

기술분야

- [1] 본 발명은 3차원의 다공성 구조체에 관한 것으로, 구체적으로는 유기 화합물을 사용하여 형성된 3차원 다공성 유기 구조체에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 제올라이트(zeolite)는 결정성 알루미늄 규산염의 총칭인데, 예로부터 자연에서 얻을 수 있는 제올라이트는 경수 연화제로서 사용되어 왔다. 하지만 1950년대에 제올라이트가 수열반응(hydrothermal reaction)을 통해 알칼리성 반응물로부터 천연물과는 다른 구조체가 형성된 후, 구조의 공업적 용도의 연구가 활발해졌다. 더욱이 제올라이트의 결정구조가 밝혀지고 세공크기에 의해 선택적으로 크기가 다른 분자를 흡착할 수 있다는 것이 밝혀지면서, 흡착제와 촉매 분야에서 많은 연구가 진척되었다.
- [3] 이러한 미세세공 물질이 갖는 다양한 장점들 때문에 제올라이트의 다양한 합성법[International Journal of Mineral Processing 64.1 (2002): 1-17]과 미세세공 크기의 조절[Occelli, Mario L., and Harry E. Robson. "Zeolite synthesis." (1989)]에 관한 연구가 진행되는 한편 비슷한 물성을 갖는 유기 구조체에 관한 연구가 빠르게 진행되었는데 그 중 가장 대표적인 것이 금속유기구조체(Metal Organic Framework, MOF)[Nature 402.6759 (1999): 276-279]이다.
- [4] 금속유기구조체(Metal Organic Framework, MOF)는 전이금속 이온이나 금속집합체(metal cluster)를 3차원적 구조물 형성의 중심으로 설정하고 배위결합을 통하여 다양한 유기리간드를 연결하는 구조체이다. 그러나, 이러한 금속유기구조체는 금속을 함유함에 따라 수분에 취약하여 공기 중에 노출될 경우 빠르게 3차원 구조가 붕괴되는 단점이 있다.
- [5] 이러한 금속 유기구조체는 수계 환경에서 분리체로 사용되기에는 불가능한 상황이다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [6] 본 발명의 해결하고자 하는 과제는 수분과 대기 중에서 안정하며, 필요에 의해 용해 또는 용융이 가능하고, 용해 또는 용융된 후에도 다시 다공성 구조체를 형성할 수 있는 유기 화합물 및 이를 사용하여 형성된 3차원 유기 구조체를 제공함에 있다.
- [7] 본 발명의 해결하고자 하는 다른 과제는 수계 환경에서 충분히 안정하며 높은

분리능을 나타낼 수 있는 분리체를 제공함에 있다.

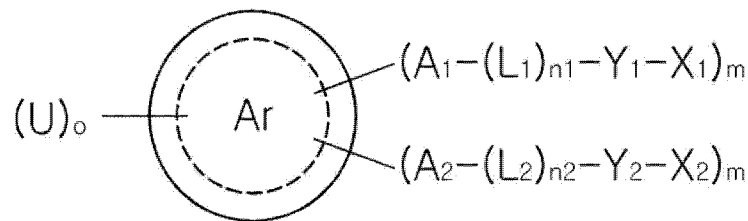
- [8] 본 발명의 해결하고자 하는 또 다른 과제는 금속 또는 무기반도체가 아닌 유기물을 사용하여 투명하면서 0에 가까운 유전율을 나타내고 위상학적 절연체로서 디락 전자에 의한 플라즈몬을 통해 광증폭이 가능한 층을 제공함에 있다.

과제 해결 수단

- [9] 상기 과제를 이루기 위하여 본 발명의 일 측면은 유기 화합물의 일 실시예를 제공한다. 상기 유기 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[10] [화학식 1]

[11]



- [12] 상기 화학식 1에서,

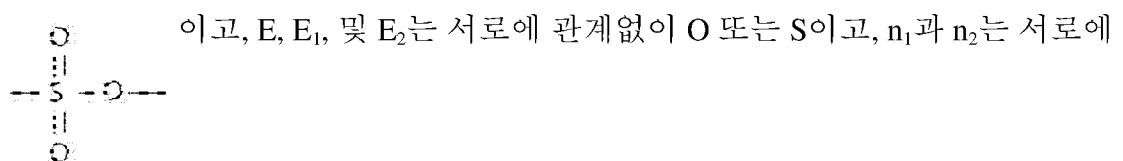
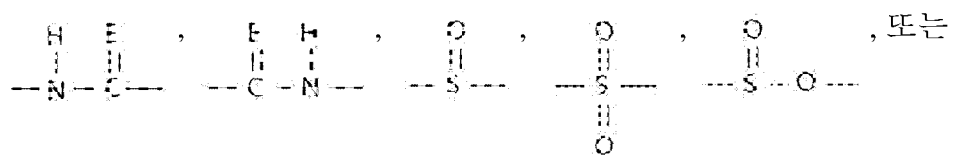
- [13] Ar은 6 내지 46 멤버의 호모사이클릭 방향족 고리 또는 헤테로사이클릭 방향족 고리이고,

- [14] $-A_1-(L_1)_{n_1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n_2}-Y_2-X_2$ 은 상기 Ar의 치환 위치들(substitution positions) 중 바로 인접한 위치들에 결합되어 있고,

- [15] m은 1 내지 8의 정수이고,

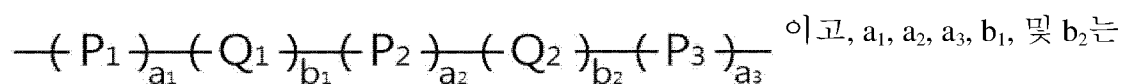
- [16] A₁과 A₂는 서로에 관계없이, $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고,

- [17] L₁과 L₂는 서로에 관계없이, $-\text{E}-$, $\begin{array}{c} \text{E} \\ || \\ -\text{C}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{E}_1 \\ || \\ -\text{C}-\text{E}_2 \end{array}$, 또는



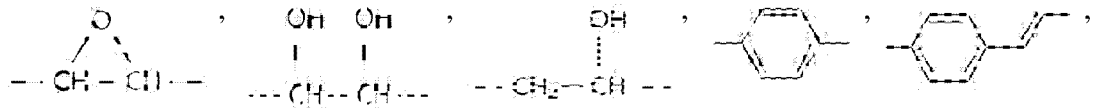
관계없이 0 또는 1이고,

- [18] Y₁과 Y₂는 서로에 관계없이



서로에 관계없이 0 내지 30의 정수이며, $a_1+a_2+a_3+b_1+b_2$ 는 3 내지 30의 정수이고,

- [19] P_1, P_2 , 및 P_3 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_a\text{R}_b-$ 또는 $-(\text{CR}_a\text{R}_b)_r\text{O}-$ 이고, r 은 1 내지 3의 정수이고,
- [20] Q_1 및 Q_2 는 서로에 관계없이 $q_1-(p_1)_{c_1}-q_2-(p_2)_{c_2}-q_3$ 이고, q_1 과 q_3 는 서로에 관계없이 $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고, q_2 는 탄소에 결합된 수소기가 F, Cl, Br, 또는 I로 치환되거나 혹은 비치환된 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{N}=\text{N}-$,



또는 이고, p_1 과 p_2 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_a\text{R}_b-$ 이고, c_1 과 c_2 는

서로에 관계없이 0 내지 2의 정수이고,

- [21] X_1 과 X_2 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{CHO}$, $-\text{SH}$, $-\text{COCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{COOCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{CR}_c=\text{CR}_d\text{R}_e$, $-\text{CN}$, $-\text{N}=\text{C}=\text{O}$, $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{C}\equiv\text{CR}_a$, $-\text{NHCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, 또는 $-\text{NH}_2$ 이고,
- [22] R_a 와 R_b 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,
- [23] R_c, R_d , 및 R_e 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,
- [24] U는 시아노기, 히드록실기, 불소, 염소, 아이오드, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 15의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 15의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬메르캅토기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬티오시안기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 또는 15의 알킬인산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소티오시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 및 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느

하나이고,

[25] o는 0 내지 16 사이의 정수이다.

[26] 상기 과제를 이루기 위하여 본 발명의 일 측면은 3차원 유기 구조체의 일 실시예를 제공한다. 상기 3차원 유기 구조체는 3차원 구조를 형성하는 다수 개의 단위 유기분자들을 포함한다. 각 단위 유기분자는 방향족 고리와 상기 방향족 고리의 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 치환기들의 제1 쌍과 나머지 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 치환기들의 제2 쌍을 구비하고, 상기 치환기들은 그의 말단들에 서로에 관계없이 $-CR_cR_dR_e$, $-OH$, $-COOH$, $-CHO$, $-SH$, $-COCR_cR_dR_e$, $-COOCR_cR_dR_e$, $-CR_c=CR_dR_e$, $-CN$, $-N=C=O$, $-C=N=N-CR_cR_dR_e$, $-C\equiv CR_a$, $-NHCR_cR_dR_e$, 또는 $-NH_2$ 의 말단기들(X)을 포함한다. 상기 3차원 구조의 하나의 층 내에 포함된 상기 단위 유기분자들 중 하나의 단위 유기분자의 상기 제1 쌍에 포함된 치환기들의 말단기들과 다른 하나의 단위 유기분자의 상기 제2 쌍에 포함된 치환기들의 말단기들은 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용, 런던 분산력(London dispersion interaction) 또는 수소 결합(hydrogen bonding)에 의해 자기 조립된다. 상기 3차원 구조의 하나의 층 내에 포함된 상기 단위 유기분자들과 이에 인접한 다른 층 내에 포함된 상기 단위 유기분자들은 방향족 고리들 사이의 파이-파이 상호작용에 의해 자기 조립된다.

[27] 상기 과제를 이루기 위하여 본 발명의 다른 일 측면은 분리체를 제공한다. 상기 분리체는 상기 3차원 유기 구조체를 포함한다. 상기 분리체는 펠렛 또는 필름 형태일 수 있다. 상기 분리체는 고분자를 더 포함할 수 있다. 상기 혼합액은 공비 혼합물일 수 있다. 상기 제1 액체는 물일 수 있다.

[28] 상기 과제를 이루기 위하여 본 발명의 다른 일 측면은 광학층을 제공한다. 상기 광학층은 상기 3차원 유기 구조체를 포함한다.

[29] 상기 광학층은 광증폭층으로서 광학소자 내에 구비될 수 있고, 상기 광학소자의 광경로 상에 배치될 수 있다. 상기 광학소자는 발광층을 구비하는 발광소자이고, 상기 광증폭층은 상기 발광층과 외부 사이에 배치될 수 있다. 상기 광학소자는 광흡수층을 구비하는 태양전지이고, 상기 광증폭층은 상기 광흡수층과 외부 사이에 배치될 수 있다. 상기 광학소자는 발광층 또는 발광소자를 구비하는 디스플레이이고, 상기 광증폭층은 상기 발광층 또는 상기 발광소자와 외부 사이에 배치될 수 있다. 상기 광학소자는 발광층 또는 발광소자를 구비하는 조명장치이고, 상기 광증폭층은 상기 발광층 또는 상기 발광소자와 외부 사이에 배치될 수 있다. 상기 광학층은 슈퍼렌즈 또는 파장가변 광증폭기의 광경로 상에 포함될 수 있다.

발명의 효과

[30] 이와 같은 다공성 3차원 유기 구조체 즉, 다공성 유기 결정은 단위 유기분자들 사이의 비공유결합을 기초로 자기 조립되어 형성됨에 따라, 쉽고 간단하게 넓은

- 공극용적과 완전히 규칙적이고 주기적인 구조를 갖는 구조체를 형성할 수 있다.
- [31] 또한, 화학적 가교결합 없이 순수한 화합물간의 물리적 상호작용 또는 물리적 결합을 이용하여 형성되기 때문에 용융과 용해가 언제든지 가능하여 용융 또는 용해된 상태에서 코팅이 가능하고, 용융과 용해 후에도 다시 재결정화를 통해 3차원 구조체를 형성할 수 있다.
- [32] 또한, 금속유기구조체(Metal Organic Framework, MOF)와는 달리 금속을 사용하지 않으므로 수분 및 대기 중의 환경 내에서도 구조적 특징을 유지할 수 있다.
- [33] 다공성 3차원 유기 구조체 즉, 다공성 유기 결정을 함유하는 분리체는 금속유기구조체(Metal Organic Framework, MOF)와는 달리 금속을 사용하지 않으므로 수계 환경에서 사용할 수 있고, 단위 유기분자들 사이의 비공유결합을 기초로 자기 조립되어 형성됨에 따라, 넓은 공극용적과 완전히 규칙적이고 주기적인 구조로 인해 기존 분리하기 힘들었던 공비 혼합물 조차도 효과적으로 분리할 수 있다.
- [34] 한편, 다공성 3차원 유기 구조체 즉, 다공성 유기 결정을 함유하는 광학층은 금속 또는 무기반도체가 아닌 유기물을 사용하여 투명하면서 0에 가까운 유전율을 나타내고 위상학적 절연체로서 디락 전자에 의한 플라즈몬을 통해 광증폭이 가능할 수 있다.
- [35] 본 발명의 효과는 상기한 효과로 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 상세한 설명 또는 특허청구범위에 기재된 발명의 구성으로부터 추론 가능한 모든 효과를 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

도면의 간단한 설명

- [36] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 자가 조립 3차원 유기 구조체를 나타낸 개략도이다.
- [37] 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 분리체와 흡수 또는 흡착 가능한 유체 사이의 상관관계를 한센 스페이스를 사용하여 모식도이다.
- [38] 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 발광다이오드를 나타낸 단면도이다.
- [39] 도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 유기발광다이오드 패널을 나타낸 단면도이다.
- [40] 도 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 액정디스플레이를 나타낸 단면도이다.
- [41] 도 6은 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 태양전지를 나타낸 단면도이다.
- [42] 도 7은 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비한 염료감응 태양전지를 나타낸 단면도이다.
- [43] 도 8은 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌의 CDCl_3

용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

- [44] 도 9는 제조예 1B에 따른 4,5,9,10-테트라키스(테트라테실옥시)-파이렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [45] 도 10은 제조예 1C에 따른 4,5,9,10-테트라키스(옥타테실옥시)-파이렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [46] 도 11은 제조예 1D에 따른 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [47] 도 12는 제조예 1E에 따른 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌-9,10-다이온의 DMSO-d_6 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [48] 도 13은 제조예 2A에 따른 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [49] 도 14는 제조예 2B에 따른 2,3-비스(도데실옥시)안트라센의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [50] 도 15는 제조예 2B에 따른 2,3-비스(도데실옥시)안트라센-6,7-다이온의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [51] 도 16은 제조예 3A에 따른 1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [52] 도 17은 제조예 3B에 따른 1,2-비스(도데실옥시)코로네네의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [53] 도 18은 제조예 3C에 따른 7,8-비스(도데실옥시)코로네네-1,2-다이온의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [54] 도 19는 제조예 4A에 따른 1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [55] 도 20은 제조예 4B에 따른 1,2-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [56] 도 21은 제조예 4C에 따른 5,6-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이온의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [57] 도 22는 제조예 5A에 따른 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [58] 도 23은 제조예 15A에 따른 화합물 151의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [59] 도 24는 제조예 15B에 따른 화합물 152의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.
- [60] 도 25는 제조예 15C에 따른 화합물 153의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

- [61] 도 26a 및 도 26b은 화합물 제조예에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 결정을 촬영한 광학사진들이다.
- [62] 도 27은 화합물 제조예에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [63] 도 28은 화합물 제조예에 따른 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센(화합물 21)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [64] 도 29는 화합물 제조예에 따른 1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네(화합물 31)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [65] 도 30은 화합물 제조예에 따른 1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[f,g]아세나프탈렌(화합물 41)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [66] 도 31은 화합물 제조예에 따른 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌(화합물 51)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [67] 도 32a 및 도 32b는 각각 도 27의 X-선 스펙트럼으로부터 유추된 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌의 결정구조의 사시도와 상면도이다.
- [68] 도 33은 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌 결정, 4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌 결정, 및 4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌 결정의 질소 등온 흡착-탈착 그래프이다.
- [69] 도 34는 분리체 제조예 1에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)를 펠렛타이징한 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [70] 도 35는 분리체 제조예 4에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)를 패키징한 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [71] 도 36은 분리체 제조예 6에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)의 균질 용액을 스핀코팅하여 형성한 필름 형태 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [72] 도 37은 분리체 제조예 10에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)와 PMMA의 균질 용액을 스핀코팅하여 형성한 필름 형태 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [73] 도 38은 분리체 제조예 11에 따른 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌(화합물 51)을 패키징한 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

- [74] 도 39는 서로 다른 용매를 담지한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 온도에 따른 중량 변화를 나타낸 그래프이다.
- [75] 도 40은 서로 다른 용매에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 가장자리 젖음성을 나타낸 그래프이다.
- [76] 도 41은 물과 에탄올의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [77] 도 42는 물과 아세톤의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [78] 도 43은 물과 부탄올의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [79] 도 44는 물과 1,4-다이옥세인의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [80] 도 45는 화합물 제조예에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 결정에 광을 조사하여 촬영한 사진들이다.
- [81] 도 46은 광증폭층이 도입된 발광소자 제조예 1에서 얻어진 광증폭층의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [82] 도 47a는 본 발명의 일 실시예 따른 광증폭층의 정상축(ordinary axis)에서의 굴절율과 유전율을 나타낸 그래프이고, 도 47b는 본 발명의 일 실시예 따른 광증폭층의 이상축(extra-ordinary axis)에서의 굴절율과 유전율을 나타낸 그래프이다.
- [83] 도 48은 본 발명의 일 실시예 따른 광증폭층의 광투과도를 나타낸 그래프이다.
- [84] 도 49는 광증폭층 제조예에 따른 광증폭층의 정규화된 페르미 레벨과 정규화된 플라즈몬 진동수 사이의 관계를 나타낸 그래프이다.
- [85] 도 50은 본 발명의 일 실시예 따른 광증폭층의 광발광 강도를 나타낸 그래프이다.
- [86] 도 51은 레이저의 입사 에너지에 따른 증폭정도를 나타낸 그래프이다.

발명의 실시를 위한 형태

- [87] 이하에서는 첨부한 도면을 참조하여 본 발명을 설명하기로 한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며, 따라서 여기에서 설명하는 실시예로 한정되는 것은 아니다. 그리고 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 유사한 도면 부호를 붙였다.
- [88] 명세서 내에서 "N 내지 N+X의 정수"라는 표현은 N과 N+X 사이의 모든 정수를 포함하는 것 즉, N, N+1, N+2 ... N+X-1, 및 N+X를 모두 기재한 것으로 해석되어야 한다(이 때, N과 X는 임의의 정수).
- [89] 본 명세서에서 "알킬기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다. 알킬기는 적어도 하나의 이중결합 또는

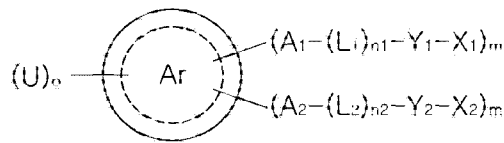
삼중결합을 포함하고 있는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다. 포화이든 불포화이든 간에 알킬기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.

[90] 이하 본 발명의 실시예를 상세히 설명하기로 한다.

[91] **3차원 유기 구조체를 구성하는 유기화합물**

[92] [화학식 1]

[93]

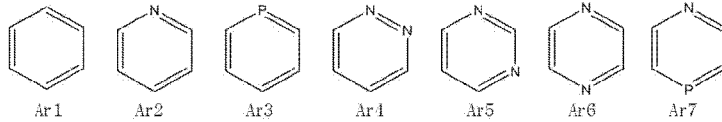


[94] 상기 화학식 1에서, Ar은 6 내지 46 멤버의 방향족 고리로서, 모든 멤버가 탄소인 호모사이클릭 방향족 고리거나 혹은 N, P, B 또는 Si 에서 선택되는 어느 하나 이상을 갖는 헤테로사이클릭 방향족 고리일 수 있다. 또한, Ar은 하나의 고리로 이루어진, 일 예로서 6 멤버의, 모노사이클릭 방향족 고리이거나 혹은 방향족 고리 2개 이상이 서로 접합되어 축합고리를 형성한, 일 예로서 10 내지 46 멤버의, 2 내지 14개의 고리들을 갖는 폴리사이클릭 방향족 고리일 수 있다.

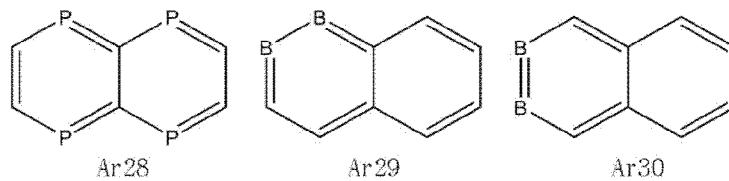
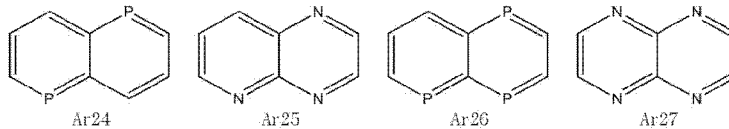
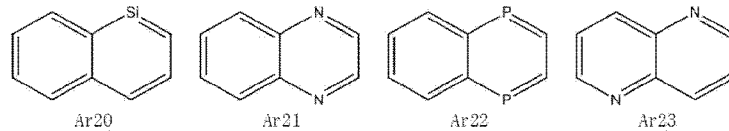
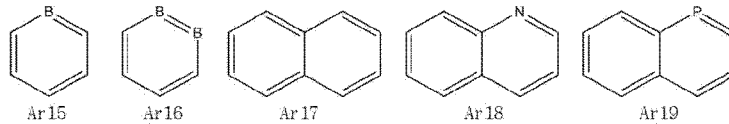
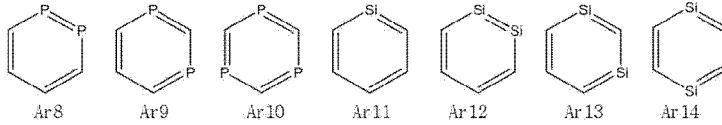
[95] 구체적으로 상기 Ar은 하기 방향족 고리 중 어느 하나일 수 있으나, 여기에 한정되는 것은 아니다. 구체적으로, 모노사이클릭 방향족인 벤젠 또는 헤테로 원자를 함유하는 벤젠의 방향족 유사체(heteroatom containing aromatic analogues of benzene)를 포함하는 Ar1 내지 Ar16의 벤젠 그룹; 2개의 고리들을 갖는 나프탈렌 또는 헤테로 원자를 함유하는 나프탈렌의 방향족 유사체를 포함하는 Ar17 내지 Ar30의 나프탈렌 그룹; 3개의 고리들을 갖는, 안트라센 또는 헤테로 원자를 함유하는 안트라센의 방향족 유사체를 포함하는 Ar31 내지 Ar45의 안트라센 그룹, 페닐렌 또는 헤테로 원자를 함유하는 페닐렌의 방향족 유사체를 포함하는 Ar46 내지 Ar51의 페닐렌(phenylene) 그룹, 및 페난트라센 또는 헤테로 원자를 함유하는 페난트라센의 방향족 유사체를 포함하는 Ar52 내지 Ar69의 페난트라센(phenanthrene) 그룹; 4개의 고리들을 갖는, 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌 또는 헤테로 원자를 함유하는 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 방향족 유사체를 포함하는 Ar70 내지 Ar71의 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌(cyclopenta[fg]acenaphthylene) 그룹, 테트라센 또는 헤테로 원자를 함유하는 테트라센의 방향족 유사체를 포함하는 Ar72 내지 Ar86의 테트라센(tetracene) 그룹, 파이렌 또는 헤테로 원자를 함유하는 파이렌의 방향족 유사체를 포함하는 Ar87 내지 Ar100의 파이렌(pyrene) 그룹, 벤즈[de]안트라센 또는 헤테로 원자를 함유하는 벤즈[de]안트라센의 방향족 유사체를 포함하는 Ar101 내지 Ar115의 벤즈[de]안트라센(benz[de]anthracene) 그룹, 및 트라이페닐렌 또는 헤테로 원자를 함유하는 트라이페닐렌의 방향족 유사체를 포함하는 Ar116 내지 Ar130의 트라이페닐렌(triphenylene) 그룹; 5개의 고리들을 갖는, 펜타센 또는 헤테로 원자를 함유하는 펜타센의 방향족 유사체를 포함하는 Ar131 내지 Ar140의 펜타센(pentacene) 그룹; 6개의

외곽-융합된(peri-fused) 고리들을 갖는, 코로네네 또는 헤테로 원자를 함유하는 코로네네의 방향족 유사체를 포함하는 Ar141 내지 Ar148의 코로네네(coronene) 그룹; 또는 7개 이상이 고리들을 갖는 Ar149 내지 Ar152일 수 있다.

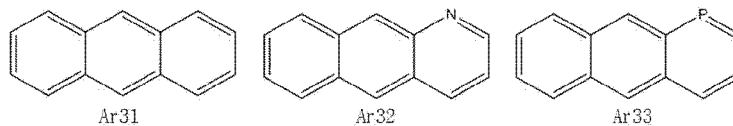
[96]



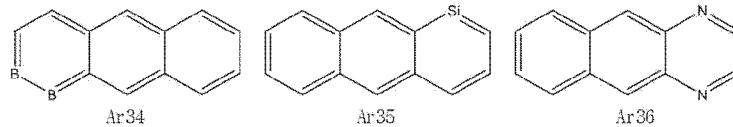
[97]



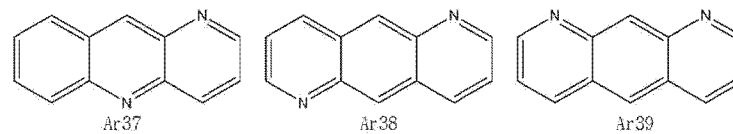
[98]



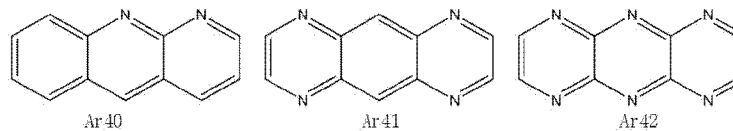
[99]



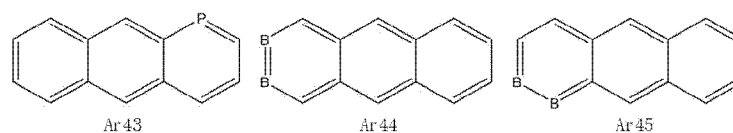
[100]



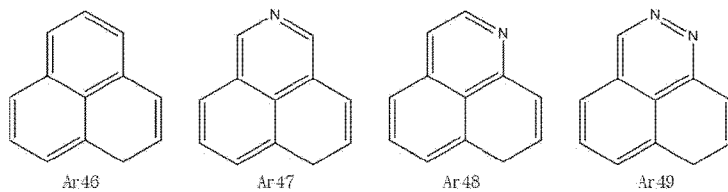
[101]



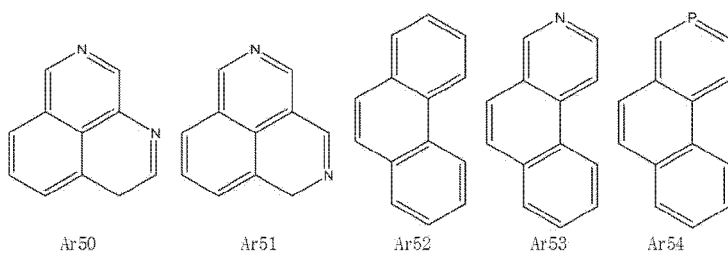
[102]



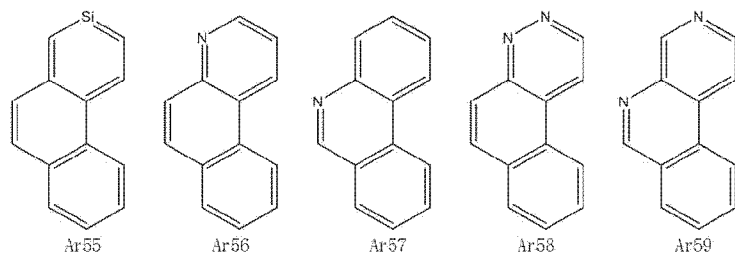
[103]



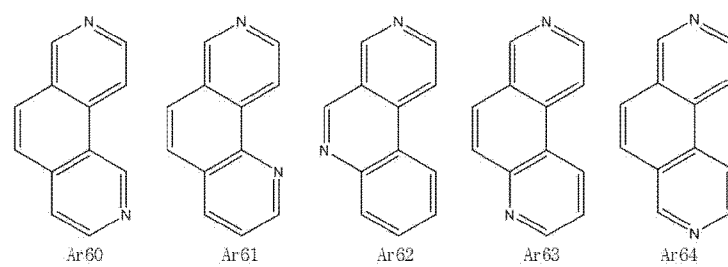
[104]



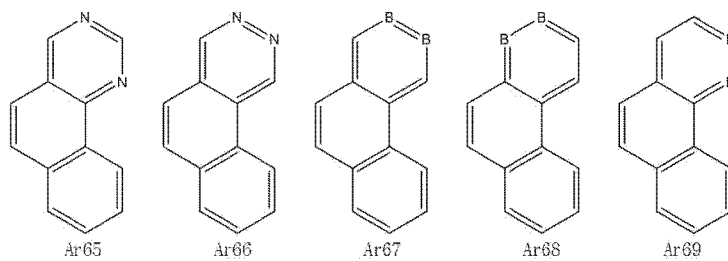
[105]



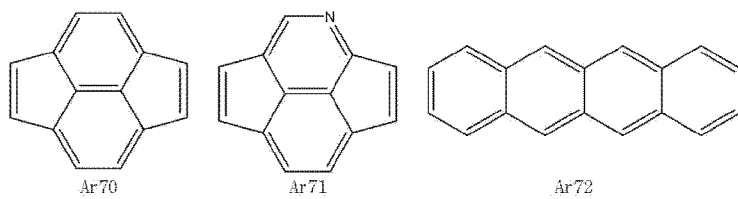
[106]



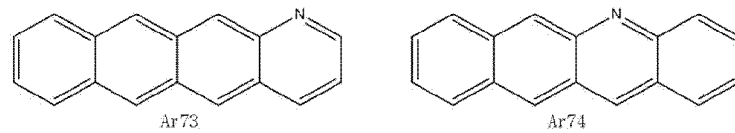
[107]



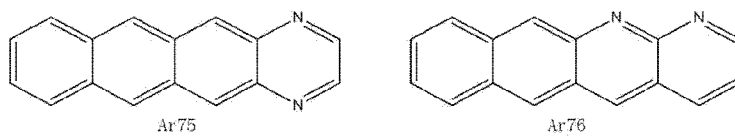
[108]



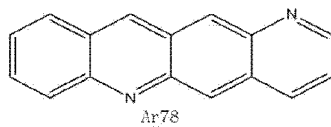
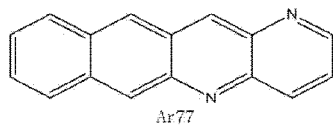
[109]



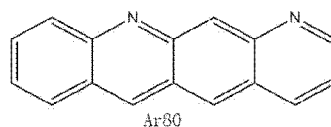
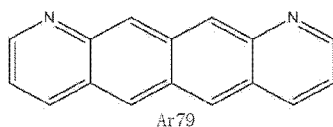
[110]



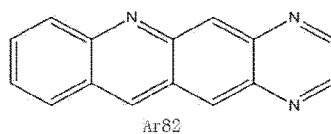
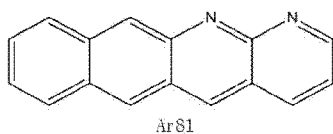
[111]



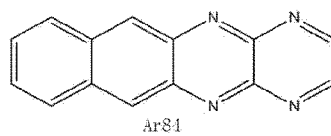
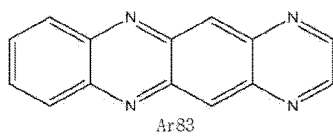
[112]



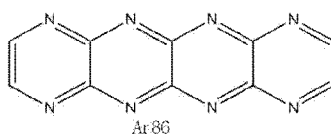
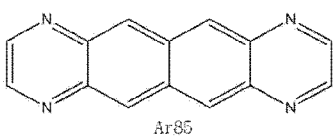
[113]



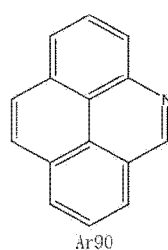
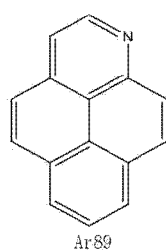
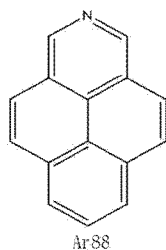
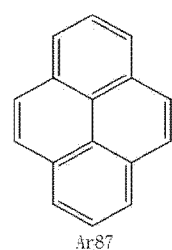
[114]



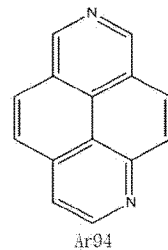
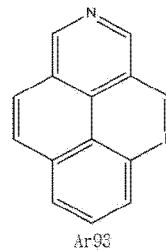
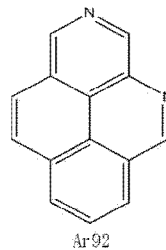
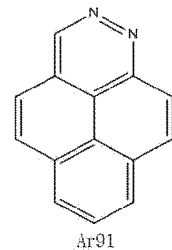
[115]



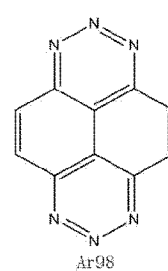
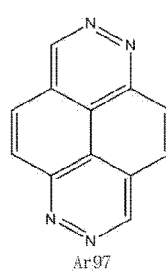
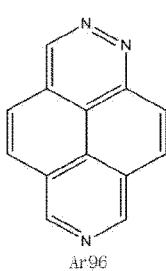
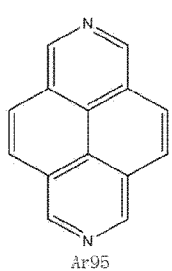
[116]



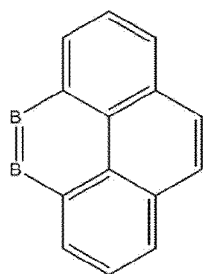
[117]



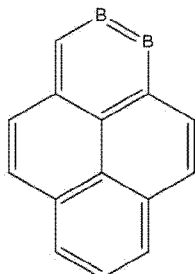
[118]



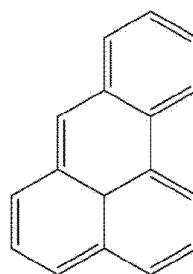
[119]



Ar99

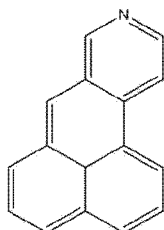


Ar100

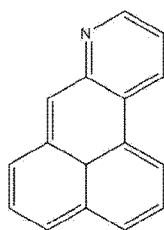


Ar101

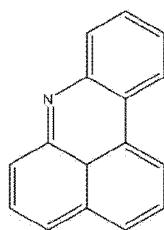
[120]



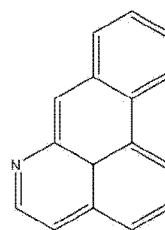
Ar102



Ar103

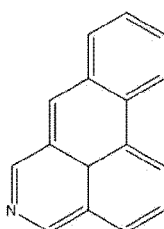


Ar104

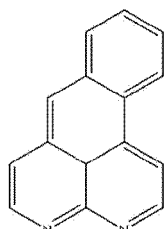


Ar105

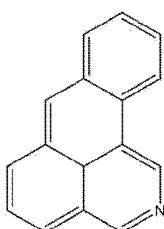
[121]



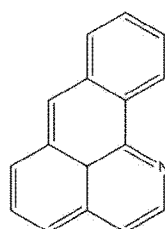
Ar106



Ar107

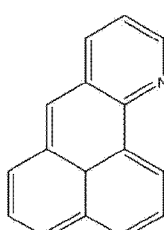


Ar108

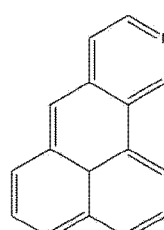


Ar109

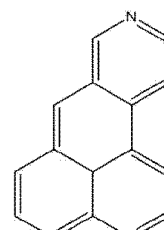
[122]



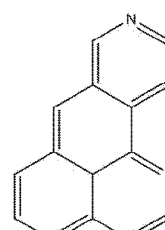
Ar110



Ar111

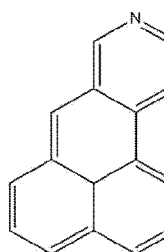


Ar112

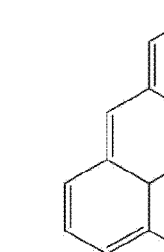


Ar113

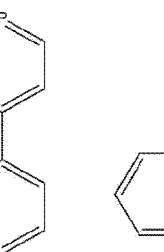
[123]



Ar114

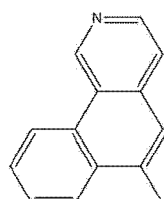


Ar115

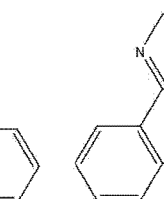


Ar116

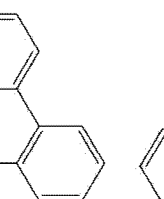
[124]



Ar117

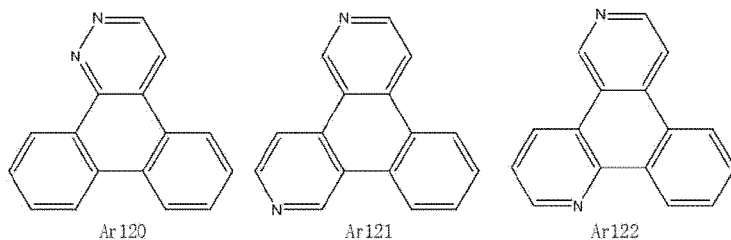


Ar118

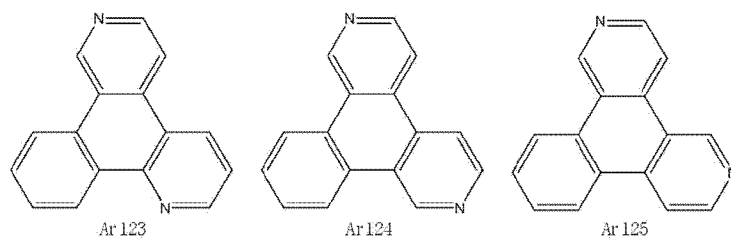


Ar119

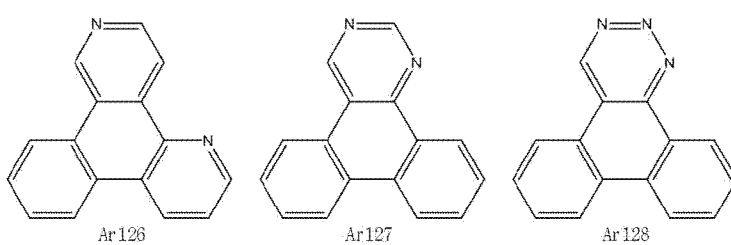
[125]



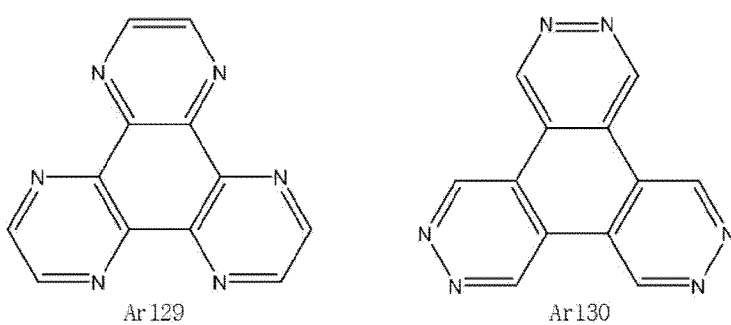
[126]



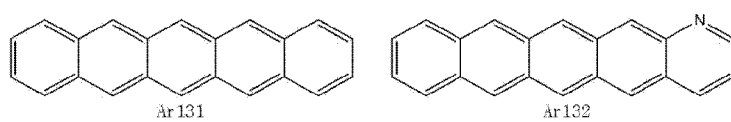
[127]



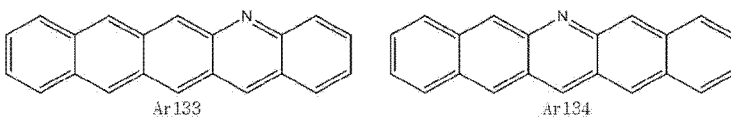
[128]



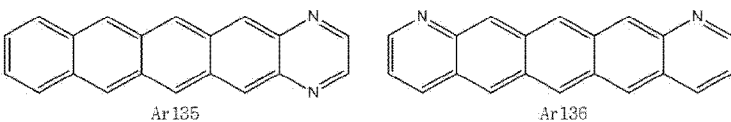
[129]



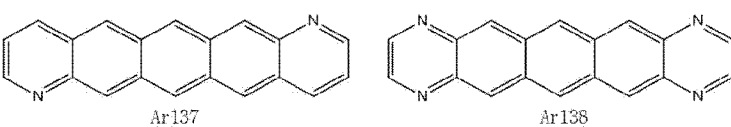
[130]



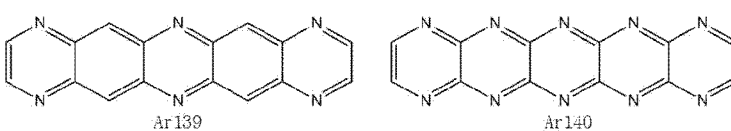
[131]



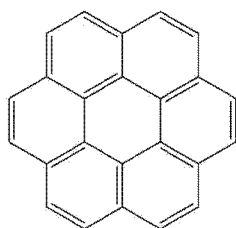
[132]



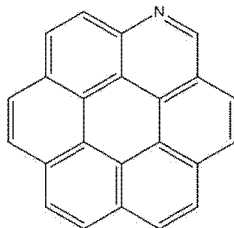
[133]



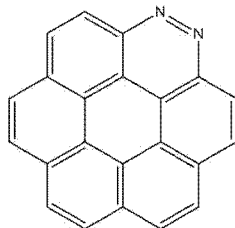
[134]



Ar141

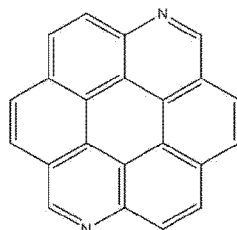


Ar142

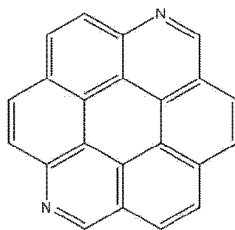


Ar143

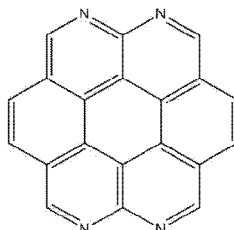
[135]



Ar144

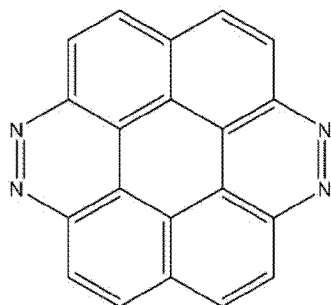


Ar145

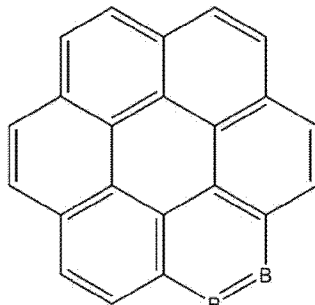


Ar146

[136]

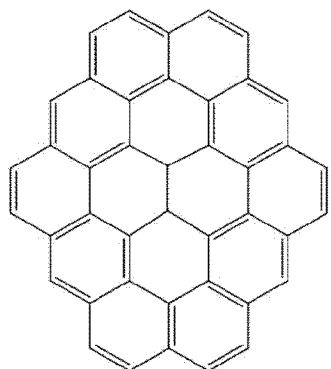


Ar147

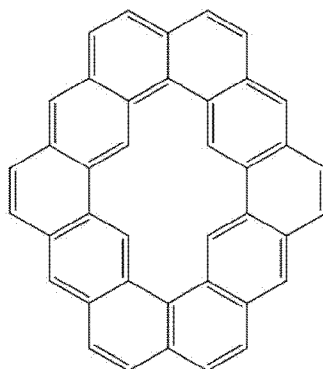


Ar148

[137]

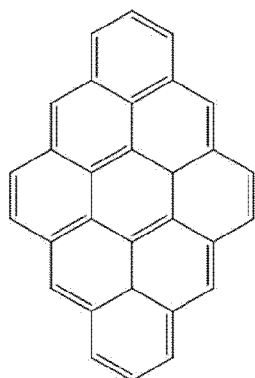


Ar149

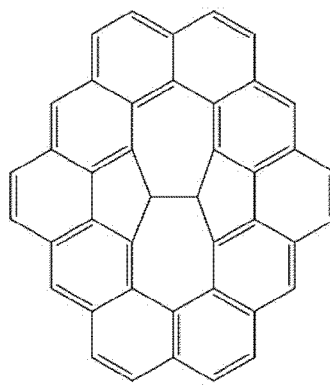


Ar150

[138]



Ar151



Ar152

[139] 일 예로서, 상기 Ar은 C_n (n 은 2 내지 6의 정수), 일 예로서 C_2 (180° 대칭), C_3 (120° 대칭), C_4 (90° 대칭), 또는 C_6 (60° 대칭)의 분자 대칭축(molecular symmetry axis)을 갖는 방향족 고리일 수 있다. 이 때, 상기 Ar의 모든 멤버가 탄소인 것으로 가정한다.

[140] 구체적으로, 상기 예시된 Ar들 중 Ar1 내지 Ar16의 벤젠 그룹, Ar17 내지 Ar30의 나프탈렌 그룹, Ar31 내지 Ar45의 안트라센 그룹, Ar70 내지 Ar71의 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌 그룹, Ar72 내지 Ar86의 테트라센 그룹, Ar87 내지 Ar100의 파이렌 그룹, Ar131 내지 Ar140의 펜타센 그룹, Ar141 내지 Ar148의 코로네네 그룹, 및 Ar149 내지 Ar159는 C_2 (180°) 대칭을 갖고; Ar1 내지 Ar16의 벤젠 그룹, A46 내지 A51의 페날렌 그룹, Ar116 내지 Ar130의 트라이페닐렌(triphenylene) 그룹, 및 Ar141 내지 Ar148의 코로네네 그룹은 C_3 (120°) 대칭을 갖고; Ar1 내지 Ar16의 벤젠 그룹 및 Ar141 내지 Ar148의 코로네네 그룹은 C_6 (60°) 대칭을 갖는다.

[141] 상기 화학식 1에서, A_1 과 A_2 는 칼코젠 원소(chalcogen element)로서, —O— 또는 —S— 일 수 있고, 서로 같거나 다를 수 있다. A_1 과 A_2 는 비공유

전자쌍을 가지고 있어 이들이 결합된 방향족 고리(Ar)에 전자를 공여(electron donating)할 수 있다. 이에 따라 방향족 고리(Ar)의 파이(π)-전자 구조 내 전자 밀도의 편재화가 유도될 수 있다. 구체적으로, A_1 과 A_2 가 결합된 위치에 인접한 영역의 전자 밀도가 다른 영역에 비해 상대적으로 높을 수 있으며, 그 외 부분은 상대적으로 낮을 수 있다.

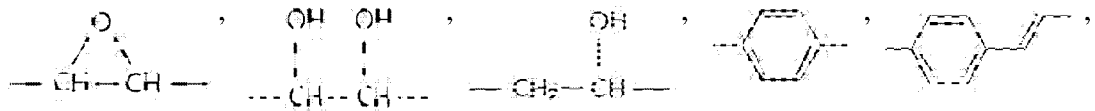
[142] L_1 과 L_2 는 연결기로서, 서로 같거나 다를 수 있으며, —E— , —C(=O)— , —C(=O)—C(=O)— , —C(=O)—N— , —N—C(=O)— , —C(=O)—N—C(=O)— , —S— , —S(=O)— , —S(=O)—O— , 또는 —S(=O)—O—S(=O)— 일 수 있다. 이 때, E, E_1 , 및 E_2 는 서로에 관계없이 O 또는 S일 수 있고, E_1 및 E_2 는 서로 같거나 다를 수 있다. n_1 과 n_2 는 서로 같거나 다를 수 있고, 0 또는 1일 수 있다.

[143] Y_1 과 Y_2 는 유기기, 일 예로서 선형 유기기로서 서로에 관계없이 $\text{—(P}_1\text{)}_{a_1}\text{—(Q}_1\text{)}_{b_1}\text{—(P}_2\text{)}_{a_2}\text{—(Q}_2\text{)}_{b_2}\text{—(P}_3\text{)}_{a_3}\text{—}$ 일 수 있다. Y_1 과 Y_2 는 서로 같거나 다를 수 있다. a_1 , a_2 , a_3 , b_1 , 및 b_2 는 서로에 관계없이 0 내지 30의 정수이며, $a_1+a_2+a_3+b_1+b_2$ 는 3 내지 30의 정수일 수 있다. a_1 , a_2 , a_3 , b_1 , 및 b_2 의 각각

그리고 $a_1+a_2+a_3+b_1+b_2$ 는 P_1 , P_2 , P_3 , Q_1 및 Q_2 를 구성하는 작용기의 종류에 따라 달라질 수 있다. 다만, Y_1 과 Y_2 사이에 충분한 물리적 상호작용이 미칠 수 있도록, Y_1 과 Y_2 각각의 주쇄를 구성하는 원소의 수가 6 내지 30일 수 있다.

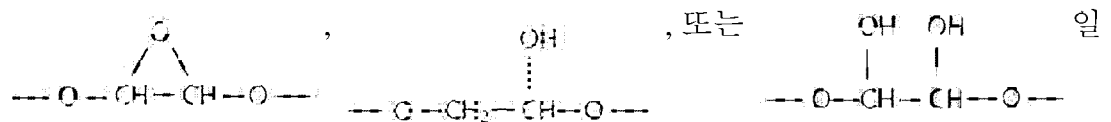
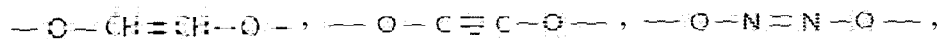
[144] 상기 P_1 , P_2 , 및 P_3 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_a\text{R}_b-$ 또는 $-(\text{CR}_a\text{R}_b)_r\text{O}-$ 일 수 있다. 이 때, R_a 와 R_b 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I일 수 있고, r 은 1 내지 3의 정수일 수 있다. 구체적으로, P_1 , P_2 , 및 P_3 는 서로에 관계없이 $-(\text{CH}_2)-$, $-(\text{CF}_2)-$, $-(\text{CH}_2\text{O})-$, $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})-$, 또는 $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})-$ 일 수 있다.

[145] 상기 Q_1 및 Q_2 는 $q_1-(p_1)_{c_1}-q_2-(p_2)_{c_2}-q_3$ 일 수 있고, 서로 같거나 다를 수 있다. q_1 과 q_3 는 서로에 관계없이 $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 일 수 있고, 서로 같거나 다를 수 있다. q_2 는 탄소에 결합된 수소가 다른 작용기 예를 들어, F, Cl, Br, 또는 I로 치환되거나 혹은 비치환된 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{N}=\text{N}-$,



또는 일 수 있다. p_1 과 p_2 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_a\text{R}_b-$ 일 수

있고, R_a 와 R_b 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I일 수 있고, c_1 과 c_2 는 0 내지 2의 정수일 수 있다. 일 예로서, Q_1 및 Q_2 는 서로에 관계없이



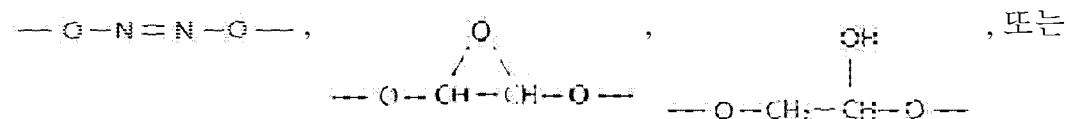
일 수 있다.

[146] 일 구체예에서, Y_1 과 Y_2 는 서로에 관계없이 $-(P_1)_{a_1}$ (즉, 위에서 a_2 , a_3 , b_1 , 및

b_2 는 모두 0), 더 구체적으로는 $-(\text{CH}_2)_{a_1}$ (a_1 은 6 내지 30의 정수) 또는 $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_{a_1}$ (a_1 은 3 내지 10의 정수)일 수 있다.

[147] 다른 구체예에서, Y_1 과 Y_2 는 서로에 관계없이 $-(P_1)_{a_1}-(Q_1)_{b_1}-(P_2)_{a_2}$ (즉,

위에서 a_3 및 b_2 는 모두 0)이고, 더 구체적으로는 P_1 은 $-(\text{CH}_2)-$ 이고, a_1 은 3 내지 15의 정수이고, Q_1 은 $-\text{O}-\text{CH}=\text{CH}-\text{O}-$, $-\text{O}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{O}-$,



이고, b_1 은 1이고, P_2 은 $-(\text{CH}_2)-$ 이고, a_2 은 1 내지 3의

정수일 수 있다.

[148]

[149] X_1 과 X_2 는 말단기로서 서로에 관계없이 -H, -F, -Cl, -Br, -I, $-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, -OH, -COOH, -CHO, -SH, $-\text{COCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{COOCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{CR}_c=\text{CR}_d\text{R}_e$, -CN, $\text{N}=\text{C}=\text{O}$, $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{C}\equiv\text{CR}_a$, $-\text{NHCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, 또는 $-\text{NH}_2$ 일 수 있고, 서로 같거나 다를 수 있다. 이 때, R_c , R_d , 및 R_e 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I일 수 있다. 일 예로서, $-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ 은 $-\text{CH}_3$ 또는 $-\text{CF}_3$ 일 수 있고, $-\text{COCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ 는 $-\text{COCH}_3$ 일 수 있고, $-\text{COOCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ 는 $-\text{COOCH}_3$ 일 수 있고, $-\text{CR}_c=\text{CR}_d\text{R}_e$ 는 $-\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}=\text{CF}_2$, $-\text{CF}=\text{CH}_2$, $-\text{CF}=\text{CF}_2$, $-\text{CF}=\text{CH}_2$, $-\text{CF}=\text{CFH}$, 또는 $-\text{CF}=\text{CF}_2$ 일 수 있고, $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ 는 $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CH}_3$ 일 수 있고, $-\text{C}\equiv\text{CR}_a$ 는 $-\text{C}\equiv\text{CH}$ 일 수 있고, $-\text{NHCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ 는 $-\text{NHCH}_3$ 일 수 있다.

[150]

본 명세서 내에서 상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 각각은 스트레인(strain)으로 불리워질 수도 있다. 상기 한 쌍의 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 은 상기 방향족 고리(Ar)의 치환 위치들(substitution positions) 중 바로 인접한 위치들 즉, 서로에 대해 오르소(ortho) 위치들(예를 들어, 하기 구조식 2의 G_4 와 G_5 위치들) 또는 페리(peri) 위치들(예를 들어, 하기 구조식 2의 G_1 와 G_3 위치들)에 결합될 수 있다. 더 구체적으로, 상기 한 쌍의 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 은 서로에 대해 상기 방향족 고리(Ar)의 오르소(ortho) 위치들에 결합될 수 있다. 이 경우, 상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$, 구체적으로는 이들에 포함된 Y_1 과 Y_2 는 사이에는 물리적 상호작용, 일 예로서 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용에 의한 인력이 있을 수 있고, 이에 의해 안정화되어 스트레인들의 강직성이 증가될 수 있다.

[151]

상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 쌍 즉, 스트레인들의 쌍은 하나($m=1$) 또는 2 개 내지 8 개($m=2\sim 8$)일 수 있다. 즉, 상기 화학식 1에서 m 은 1 내지 8의 정수일 수 있다. 하나의 방향족 고리(Ar)에 결합할 수 있는 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 쌍의 수의 최대값은 Ar의 멤버수 및 형태에 따라 달라질 수 있다.

[152]

상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 쌍이 2개 이상인 경우 즉, m 이 2 이상인 경우에, 상기 Ar에 상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 쌍들이 연결되는 위치들은 상기 Ar의 C_n (n 은 2 내지 6의 정수) 대칭을 유지시키는 위치들 즉, 상기 Ar의 치환 위치들 중 동등한 대칭성을 갖는 위치들(symmetry-equivalent positions)일 수 있다. 상기 Ar이 C_n (n 은 2 내지 6의 정수) 대칭인 경우, 상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 쌍의 개수 m 은 n 과 같을 수 있다. 구체적으로 상기 Ar이 C_2 (180°) 대칭인 경우, 상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 쌍의 개수 m 은 2일 수 있고, 상기 Ar에 두 쌍의 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 이 연결되는 위치들은 상기 Ar의 C_2 (180°) 대칭을 유지시키는 위치들일 수 있다. 다른 예에서, 상기 Ar이 C_3 (120°) 대칭인 경우, 상기 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 의 쌍의 개수 m 은 3일 수 있고, 상기 Ar에 세 쌍의 $-\text{A}_1-(\text{L}_1)_{n1}-\text{Y}_1-\text{X}_1$ 과 $-\text{A}_2-(\text{L}_2)_{n2}-\text{Y}_2-\text{X}_2$ 이 연결되는 위치들은 상기 Ar의 C_3

(120°) 대칭을 유지시키는 위치들일 수 있다. 또 다른 예에서, 상기 Ar이 C₄ (90°) 대칭인 경우, 상기 -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂의 쌍의 개수 m은 4일 수 있고, 상기 Ar에 네 쌍의 -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂이 연결되는 위치들은 상기 Ar의 C₄ (90°) 대칭을 유지시키는 위치들일 수 있다. 다시 말해서, -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂의 쌍의 수가 두 개 이상인 경우, 이들 쌍들 사이의 간격 즉, 상기 Ar의 중심에 대해 이들 쌍들이 이루는 각은 동일할 수 있다.

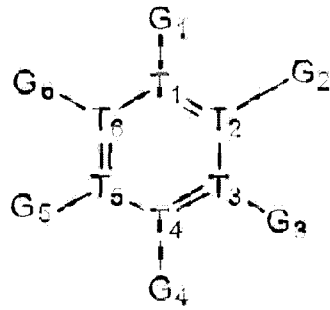
[153] 이에 더하여, -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂의 쌍들 사이에는 -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁ 또는 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂가 결합되지 않은 치환 위치가 위치하여, 방향족 고리 내 전자 밀도의 편재화를 강화시킬 수 있다. 나아가, -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁ 또는 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂가 결합되지 않은 치환가능 위치들 중 적어도 일부에 U가 결합될 수 있다.

[154] U는 시아노기, 히드록실기, 불소, 염소, 아이오드, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 15의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 15의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬메르캅토기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬티오시안기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 또는 15의 알킬인산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소티오시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 및 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다. o는 0 내지 x 사이의 정수일 수 있고, 이 때 x는 상기 Ar의 치환가능한 위치들의 개수에서 2m을 뺀 정수이다. 일 예로서, x는 최대 16일 수 있다.

[155] 상기 화학식 1로 나타낸 화합물은 하기 구조식 1 내지 구조식 15 중 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 하기 구조식에 한정되는 것은 아니다.

[156] [구조식 1]

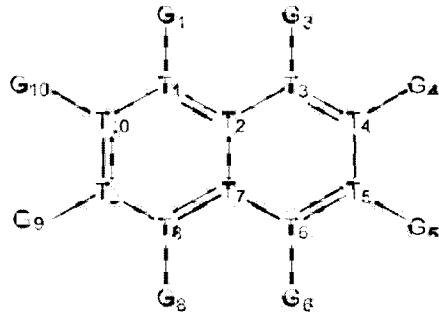
[157]



[158]

[구조식 2]

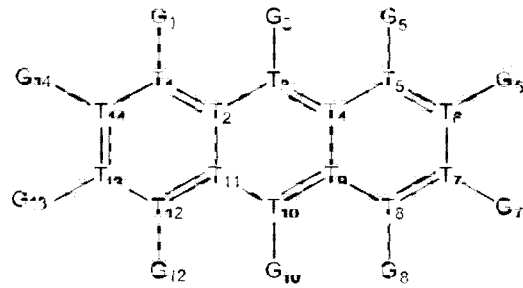
[159]



[160]

[구조식 3]

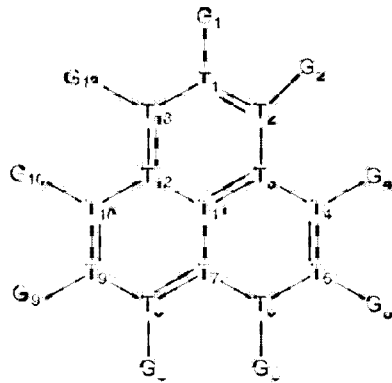
[161]



[162]

[구조식 4]

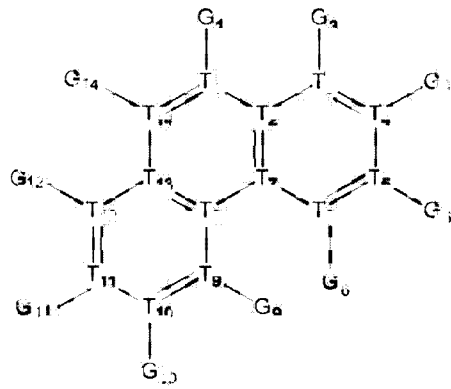
[163]



[164]

[구조식 5]

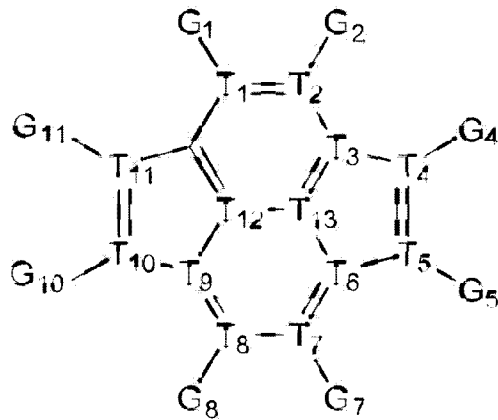
[165]



[166]

[구조식 6]

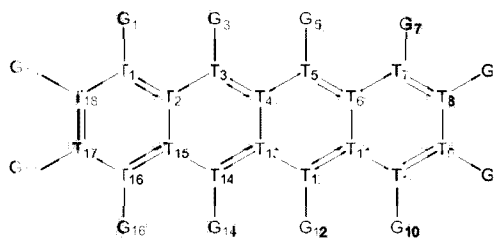
[167]



[168]

[구조식 7]

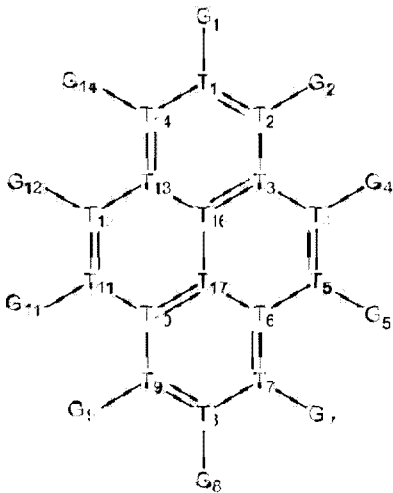
[169]



[170]

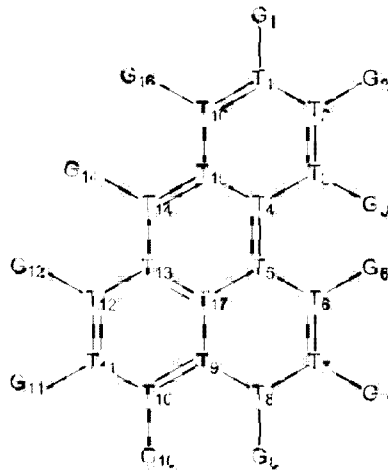
[구조식 8]

[171]



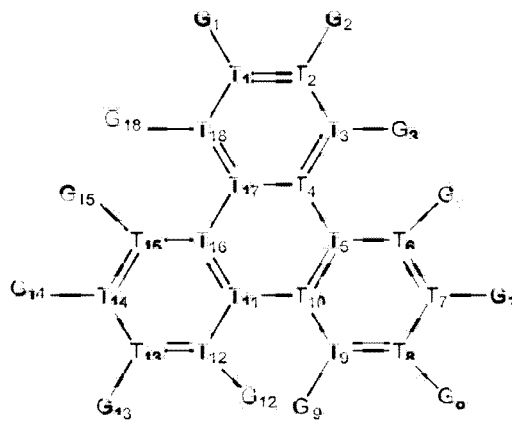
[172] [구조식 9]

[173]



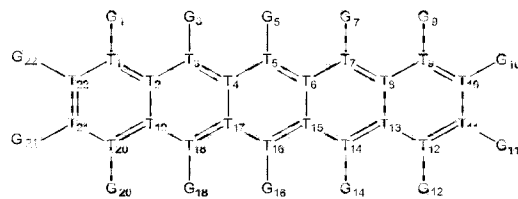
[174] [구조식 10]

[175]



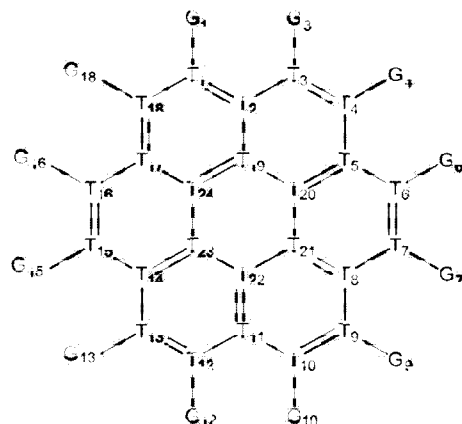
[176] [구조식 11]

[177]



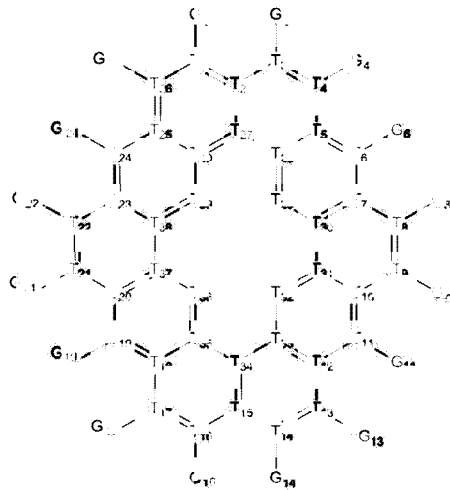
[178] [구조식 12]

[179]



[180] [구조식 13]

[181]

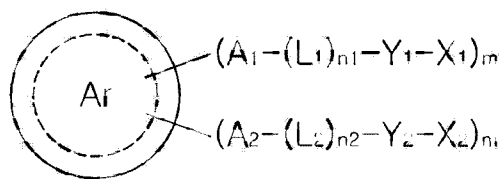


[182] 상기 구조식 1 내지 구조식 13에서, T_1 내지 T_{40} 는 모두 C이거나; T_1 내지 T_{40} 중 일부는 서로에 관계없이 N, P, B 또는 Si일 수 있고, 나머지는 C일 수 있다. 또한, Gn들은 방향족 고리(상기 화학식 1의 Ar)의 치환 위치들을 나타낸다.

[183] 상기 화학식 1으로 나타낸 화합물은 하기 화학식 1a 내지 1e 중 어느 하나의 화합물일 수 있다.

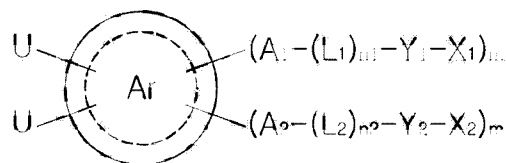
[184] [화학식 1a]

[185]



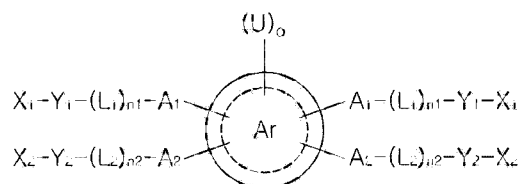
[186] [화학식 1b]

[187]



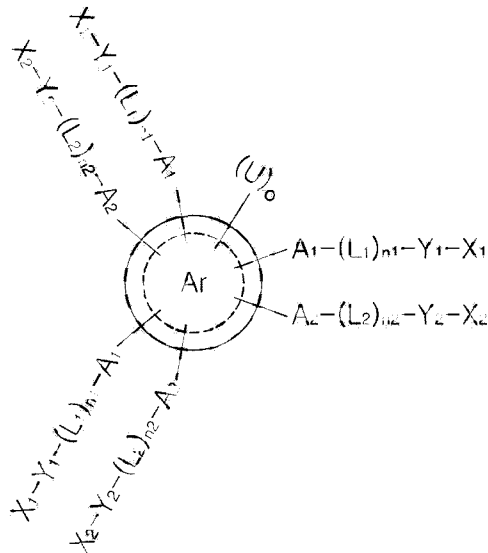
[188] [화학식 1c]

[189]



[190] [화학식 1d]

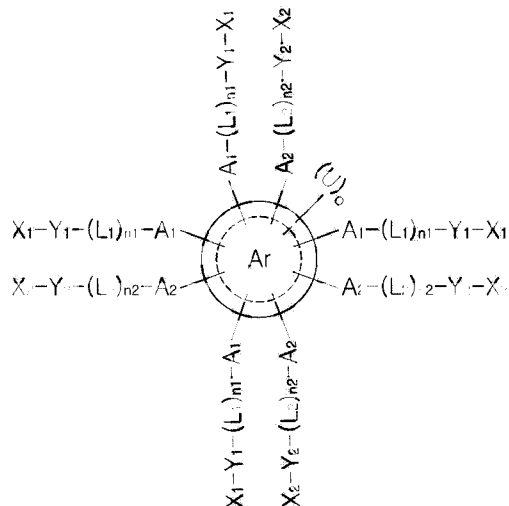
[191]



[192]

[화학식 1e]

[193]



[194] 상기 화학식들 1a 내지 1e에서, Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, m, U 및 o는 상기 화학식 1에서 설명한 Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, m, U 및 o와 각각 동일할 수 있다. 각 화학식들에서 다수의 A₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 A₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 L₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 L₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 n₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 n₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 Y₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 Y₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 X₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 X₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 U들은 서로 같거나 다를 수 있다.

[195] 특히, 상기 화학식 1으로 나타낸 화합물은 상기 화학식 1c 내지 1e 중 어느 하나의 화합물일 수 있다.

[196] 구체적으로, 상기 화학식 1c의 화합물은 -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂의 쌍 즉, 스트레인의 쌍이 두 개(화학식 1에서 m=2)인 화합물이다. 상기 화학식

1c에서 Ar은 C_2 (180°) 대칭을 가질 수 있고, 구체적으로 상기 Ar은 상기 Ar1 내지 Ar16의 벤젠 그룹, Ar17 내지 Ar30의 나프탈렌 그룹, Ar31 내지 Ar45의 안트라센 그룹, Ar70 내지 Ar71의 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌 그룹, Ar72 내지 Ar86의 테트라센 그룹, Ar87 내지 Ar100의 파이렌 그룹, Ar131 내지 Ar140의 펜타센 그룹, Ar141 내지 Ar148의 코로네네 그룹, 및 Ar149 내지 Ar159로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 방향족 고리일 수 있다. 또한, 상기 Ar에 상기 스트레인들이 연결되는 위치들은 C_2 (180°) 대칭이 유지되는 위치들 즉, 상기 Ar의 치환 위치들 중 동등한 대칭성을 갖는 위치들일 수 있다. 나아가, 상기 Ar에 상기 한 쌍의 스트레인들이 연결되는 위치들은 서로 오르소 위치에 있을 수 있다. 또한, 상기 쌍들 사이에는 상기 스트레인이 연결되지 않은 치환 위치가 위치할 수 있다.

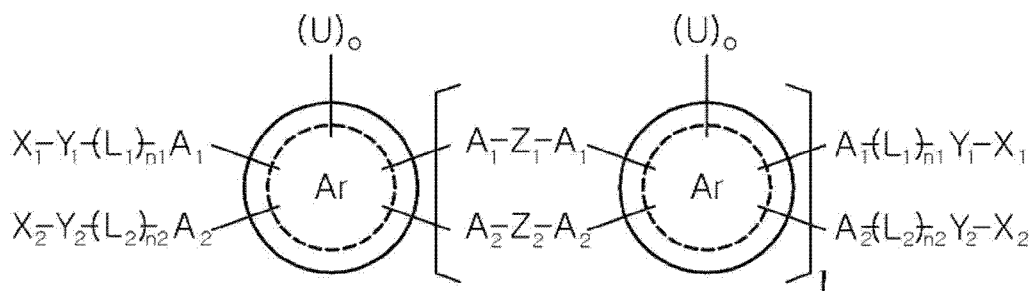
- [197] 구체적으로, 상기 Ar이 상기 구조식 1의 벤젠 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_1 과 G_2 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_4 와 G_5 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_3 또는 G_6 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 2의 정수일 수 있다.
- [198] 상기 Ar이 상기 구조식 2의 나프탈렌 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_4 와 G_5 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_9 와 G_{10} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_1 , G_3 , G_6 , 또는 G_8 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 4의 정수일 수 있다.
- [199] 상기 Ar이 상기 구조식 3의 안트라센 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_6 와 G_7 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{13} 와 G_{14} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_1 , G_3 , G_5 , G_8 , G_{10} , 또는 G_{12} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 6의 정수일 수 있다.
- [200] 상기 Ar이 상기 구조식 6의 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_1 과 G_2 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_7 와 G_8 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_4 , G_5 , G_{10} , 또는 G_{11} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 4의 정수일 수 있다. 상기 Ar이 상기 구조식 6의 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌 그룹인 경우의 다른 예에서, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_4 와 G_5 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{10} 와 G_{11} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_1 , G_2 , G_7 , 또는 G_8 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 4의 정수일 수 있다.
- [201] 상기 Ar이 상기 구조식 7의 테트라센 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_8 와 G_9 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{17} 와 G_{18} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_1 , G_3 , G_5 , G_7 , G_{10} , G_{12} , G_{14} , 또는 G_{16} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 8의 정수일 수 있다.
- [202] 상기 Ar이 상기 구조식 8의 파이렌 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_4 와 G_5 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은

- G_{11} 와 G_{12} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_1, G_2, G_7, G_8, G_9 , 또는 G_{14} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 6의 정수일 수 있다.
- [203] 상기 Ar이 상기 구조식 11의 펜타센 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{10} 과 G_{11} 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{21} 와 G_{22} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 $G_1, G_3, G_5, G_7, G_9, G_{12}, G_{14}, G_{16}, G_{18}$, 또는 G_{20} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 10의 정수일 수 있다.
- [204] 상기 Ar이 상기 구조식 12의 코로네네 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_6 과 G_7 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{15} 와 G_{16} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 $G_1, G_3, G_4, G_9, G_{10}, G_{12}, G_{13}$, 또는 G_{18} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 8의 정수일 수 있다.
- [205] 상기 Ar이 상기 구조식 13의 방향족 고리인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_8 과 G_9 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{21} 와 G_{22} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 $G_1, G_3, G_4, G_6, G_{11}, G_{13}, G_{14}, G_{16}, G_{17}, G_{19}, G_{24}$, 또는 G_{26} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 12의 정수일 수 있다.
- [206] 상기 화학식 1d의 화합물은 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 의 쌍 측, 스트레인들의 쌍이 세 개(화학식 1에서 $m=3$)인 화합물이다. 상기 화학식 1d에서 Ar은 C_3 (120°) 대칭을 가질 수 있고, 구체적으로 상기 Ar은 상기 A46 내지 A51의 페닐렌 그룹, Ar116 내지 Ar130의 트라이페닐렌(triphenylene) 그룹, 및 Ar141 내지 Ar148의 코로네네 그룹으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 방향족 고리일 수 있다. 또한, 상기 Ar에 상기 스트레인들이 연결되는 위치들은 C_3 (120°) 대칭이 유지되는 위치들 즉, 상기 Ar의 치환 위치들 중 동등한 대칭성을 갖는 위치들일 수 있다. 나아가, 상기 Ar에 상기 한 쌍의 스트레인들이 연결되는 위치들은 서로 오르소 위치에 있을 수 있다. 또한, 상기 쌍들 사이에는 상기 스트레인이 연결되지 않은 치환 위치가 위치할 수 있다.
- [207] 상기 Ar이 상기 구조식 4의 페닐렌 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_1 과 G_2 위치에, 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_5 와 G_6 위치에 결합될 수 있고, 또 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_9 와 G_{10} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 G_4, G_8 , 또는 G_{13} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 3의 정수일 수 있다.
- [208] 상기 Ar이 상기 구조식 10의 트라이페닐렌 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_1 과 G_2 위치에, 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_7 와 G_8 위치에 결합될 수 있고, 또 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{13} 와 G_{14} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 $G_3, G_6, G_9, G_{12}, G_{15}$, 또는 G_{18} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 6의 정수일 수 있다.

- [209] 상기 Ar이 상기 구조식 12의 코로네네 그룹인 경우, 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_6 과 G_7 위치에 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{12} 와 G_{13} 위치에 결합될 수 있고, 또 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_1 와 G_{18} 위치에 결합될 수 있고, 나머지 $G_3, G_4, G_9, G_{10}, G_{15}$, 또는 G_{16} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않을 수 있다. 이 때, o는 0 내지 6의 정수일 수 있다.
- [210] 상기 화학식 1e의 화합물은 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 의 쌍 즉, 스트레인들의 쌍이 세 개(화학식 1에서 $m=4$)인 화합물이다. 상기 화학식 1e에서 Ar은 $C_4(90^\circ)$ 대칭을 가질 수 있다. 또한, 상기 Ar에 상기 스트레인들이 연결되는 위치들은 $C_4(90^\circ)$ 대칭이 유지되는 위치들 즉, 상기 Ar의 치환 위치들 중 동등한 대칭성을 갖는 위치들일 수 있다. 나아가, 상기 Ar에 상기 한 쌍의 스트레인들이 연결되는 위치들은 서로 오르소 위치에 있을 수 있다. 또한, 상기 쌍들 사이에는 상기 스트레인이 연결되지 않은 치환 위치가 위치할 수 있다.
- [211] 다른 실시예에서, 자가 조립 3차원 구조체를 구성하는 유기화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[212] [화학식 2]

[213]



- [214] 상기 화학식 2에서, Ar, A_1 , A_2 , L_1 , L_2 , n_1 , n_2 , Y_1 , Y_2 , X_1 , X_2 , U 및 o는 상기 화학식 1에서 설명한 Ar, A_1 , A_2 , L_1 , L_2 , n_1 , n_2 , Y_1 , Y_2 , X_1 , X_2 , U 및 o과 각각 동일할 수 있다. 각 화학식들에서 다수의 A_1 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 A_2 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 L_1 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 L_2 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 n_1 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 n_2 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 Y_1 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 Y_2 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 X_1 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 X_2 들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 U들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 o들은 서로 같거나 다를 수 있다.
- [215] 상기 화학식 2에서 Z_1 및 Z_2 는 서로에 관계없이 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 15의 시클로 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 15의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지

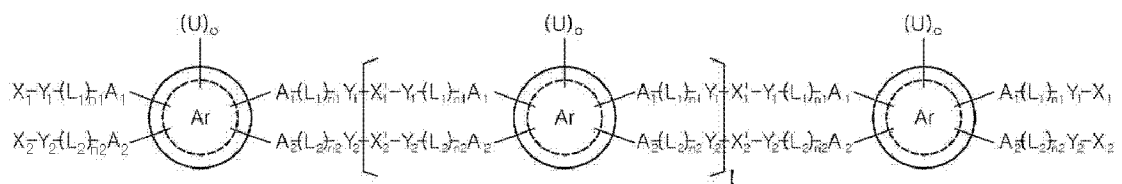
15의 알킬메르캅토기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬티오시안기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 또는 15의 알킬인산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소티오시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[216] 상기 화학식 2에서 ℓ 은 1 내지 4의 정수일 수 있다.

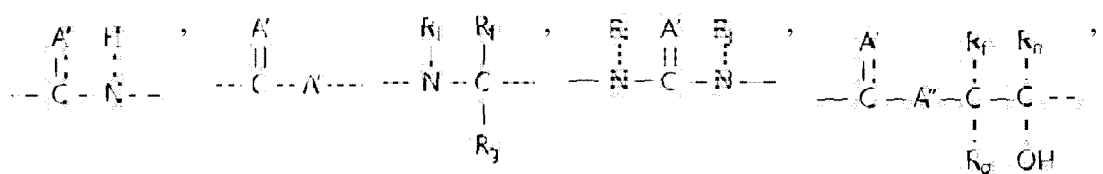
[217] 다른 실시예에서, 자가 조립 3차원 구조체를 구성하는 유기화합물은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

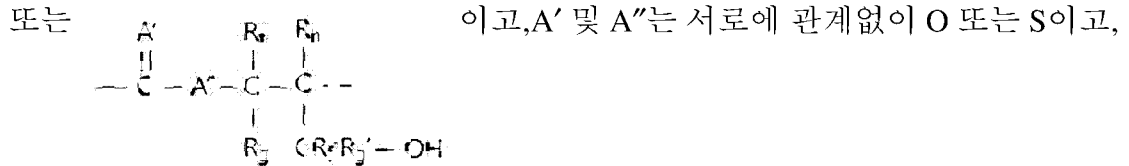
[218] [화학식 3]

[219]



[220] 상기 화학식 3 에서 Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, U 및 o는 상기 화학식 1에서 설명한 Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, U 및 o과 각각 동일할 수 있다. 각 화학식들에서 다수의 A₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 A₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 L₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 L₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 n₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 n₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 Y₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 Y₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 X₁들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 X₂들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 U들은 서로 같거나 다를 수 있고, 다수의 o들은 서로 같거나 다를 수 있다.

[illegible]



R_f, R_g, R_h, R_i, R_j, R_f', 및 R_g'는 서로에 관계없이 H 또는 C1 내지 C3의 알킬기일 수 있다.

[222] 또한, ℓ 은 1 내지 4의 정수일 수 있다.

[223]

[224] 자가 조립 3차원 유기 구조체

[225] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 자가 조립 3차원 유기 구조체를 나타낸 개략도이다.

[226] 도 1을 참고하면, 화학식 1 내지 화학식 3으로 나타낸 화합물들 즉, 단위 유기분자들(UM)은 자가 조립되어 3차원 유기 구조체 즉, 유기 결정을 형성할 수 있다. 도 1은 화학식 1c에 도시된 단위 유기분자를 사용한 유기 구조체를 나타내나 이에 한정되는 것은 아니다.

[227] 하나의 단위 유기분자(UM) 내에서 방향족 고리에 연결된 한 쌍의 치환기들인 -A-(L)_n-Y-X들은 방향족 고리의 치환가능한 위치들 중 바로 인접한 위치들, 예를 들어 오르소(ortho) 위치 또는 페리(peri) 위치에 결합되어 있을 수 있다. 이 경우 한 쌍의 -A-(L)_n-Y-X들 구체적으로 이들 각자에 포함된 Y기들은 물리적 상호작용(Physical Interaction, PIa)에 의해 구체적으로, 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용에 의해 안정화될 수 있다. 그 결과, 한 쌍의 -A-(L)_n-Y-X들 즉, 한 쌍의 스트레인들(strains)은 한 스트레인의 -A-(L)_n-Y-X에 비해 유연성이 감소하여 보다 강직해질(rigid) 수 있다.

[228] 한편, A는 비공유 전자쌍을 가지고 있어 결합된 방향족 고리(Ar)에 전자 공여(electron donating)할 수 있다. 그 결과 방향족 고리(Ar) 내에 파이(π)-전자 구조의 전자 밀도가 편재화되어 전자 밀도가 상대적으로 높은 영역과 또한 상대적으로 낮은 영역이 배치될 수 있다. 다시 말해서, 방향족 고리(Ar)에 결합된 A는 방향족 고리(Ar) 내 전자 밀도의 편재화를 유도할 수 있다.

[229] 구체적으로, -A-(L)_n-Y-X들(스트레인) 쌍의 개수(화학식 1의 m)의 두 배에 해당하는 전기다중극자가 강화될 수 있다. 일 예로서, 화학식 1a 및 화학식 1b로 나타낸 1 배위형 유기 분자의 경우, 방향족 고리(Ar) 내에 사중극자(quadrupole)가 강화될 수 있으며, 화학식 1c로 나타낸 2 배위형 즉, 직선형 유기 분자의 경우, 방향족 고리(Ar) 내에 사중극자(quadrupole)가 더욱 강화될 수 있다. 또한, 화학식 1d로 나타낸 3 배위형 유기 분자의 경우, 방향족 고리(Ar) 내에 헥사폴(hexapole)이 강화될 수 있고, 또한 화학식 1e로 나타낸 4 배위형 유기 분자의 경우, 방향족 고리(Ar) 내에 옥타폴(octapole)이 강화될 수 있다.

[230] 이러한 단위 유기분자들(UM)이 다수개 위치할 때, 일 방향(예를 들어 X 방향)으로 인접하는 단위 유기분자들(UM) 사이의 X기들은 물리적 상호작용,

구체적으로 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용, 런던 분산력(London dispersion interaction) 또는 수소 결합(hydrogen bonding)에 의해 비공유 결합(PIb)될 수 있다. 일 예로서, X기들 중 $-\text{CF}_3$, $-\text{SH}$, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, $-\text{CH}=\text{CF}_2$, $-\text{CF}=\text{CH}_2$, $-\text{CF}=\text{CF}_2$, $-\text{CF}=\text{CH}_2$, $-\text{CF}=\text{CFH}$, $-\text{CF}=\text{CF}_2$, $-\text{COCH}_3$, $-\text{COOCH}_3$, $-\text{CHO}$, $-\text{CN}$, $-\text{N}=\text{C}=\text{O}$, 및 $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CH}_3$ 은 반 데르 발스 상호작용에 의해 결합할 수 있고, $-\text{H}$, $-\text{CH}_3$, $-\text{CH}=\text{CH}_2$, 및 $-\text{C}\equiv\text{CH}$ 는 런던 분산력에 의해 결합할 수 있고, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{NH}_2$, 또는 $-\text{NHCH}_3$ 는 수소 결합에 의해 결합할 수 있다.

[231] 또한, 다른 방향(예를 들어 Z 방향)으로 인접하는 또는 하나의 층(F_1)과 다른 층(F_2) 내에 포함된 단위 유기분자들(UM) 각자에 포함된 방향족 고리기들은 파이-파이 상호작용(PIc)에 의해 자기 조립 혹은 적층될 수 있다. 구체적으로, 앞서 설명한 바와 같이, 방향족 고리기(Ar) 내에 A기에 의해 유도된 전자 풍부 영역(electron-rich region, δ^-)와 전자 결핍 영역(electron-deficient region, δ^+)이 발생할 수 있는데, Y방향으로 인접하는 방향족 고리기들 사이에 전자 풍부 영역(δ^-)과 전자 결핍 영역 사이(δ^+)의 인력으로 인해 제1층(F_1)의 화합물이 연장되는 방향(X)에 비해 제2층(F_2)의 단위 유기분자(UM)가 연장되는 방향은 소정 각도 틀어질 수 있다. 일 예로서, 제1층(F_1)의 단위 유기분자(UM)가 연장되는 방향(X)에 비해 제2층(F_2)의 단위 유기분자(UM)가 연장되는 방향은 90도 틀어질 수 있고 따라서, 제2층(F_2)의 단위 유기분자(UM)가 연장되는 방향은 Y 방향일 수 있다.

[232] 또한, 제2층(F_2)의 단위 유기분자들(UM) 사이의 X기들은 또한 물리적 상호작용, 구체적으로 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용, 런던 분산력(London dispersion interaction) 또는 수소 결합(hydrogen bonding)에 의해 끌려 비공유 결합(PIb)될 수 있다.

[233] 이와 같이, 본 실시예에 따른 다공성 3차원 유기 구조체 즉, 다공성 유기 결정은, 비공유결합 구체적으로 물리적 상호작용, 더욱 구체적으로는 파이-파이 상호작용(π - π interaction), 쌍극자-쌍극자 상호작용, 유도쌍극자-쌍극자 상호작용과 유도쌍극자-유도쌍극자 상호작용을 통해 단위 유기분자들이 자가 조립(self-assembly)되어 형성될 수 있다.

[234] 또한, 이러한 유기 결정은 규칙성과 주기성을 가져 삼사정계(triclinic), 단사정계(monoclinic), 사방정계(orthorhombic), 정방정계(tetragonal), 육방정계(hexagonal), 또는 입방정계(cubic)의 기본 격자 구조를 갖는 것을 특징으로 한다. 구체적으로, 화학식 1a 및 화학식 1b로 나타낸 1 배위형 유기 분자와 화학식 1c로 나타낸 2 배위형 즉, 직선형 유기 분자의 경우, 삼사정계(triclinic), 사방정계(orthorhombic), 정방정계(tetragonal), 입방정계(cubic)를 구성할 수 있으며, 화학식 1d로 나타낸 3 배위형 유기 분자의 경우, 육방정계(hexagonal), 단사정계(monoclinic)의 구성이 가능하다.

[235] 구체적으로, 도 1의 경우 사방정계의 격자 구조를 나타낸다.

[236] 이와 같은 다공성 3차원 유기 구조체 즉, 다공성 유기 결정은 단위 유기분자들

사이의 비공유결합 구체적으로 약한 유기-유기 상호작용을 기초로 자기조립되어 형성됨에 따라, 쉽고 간단하게 구조체를 형성하게 되며, 화학적 가교결합 없이 순수한 화합물간의 물리적 결합을 이용하여 형성되기 때문에 용융과 용해가 언제든지 가능하며, 넓은 공극용적과 완전히 규칙적이고 주기적인 구조를 확보할 수 있다. 또한, 금속유기구조체(Metal Organic Framework, MOF)와는 달리 금속을 사용하지 않음에 따라 수분 및 대기 중의 환경 내에서도 구조적 특징을 유지할 수 있다. 또한, 본 실시예에 따른 화합물은 구조체를 형성하는 자가조립 과정이 상당히 빠르게 진행되나, 빠른 속도에도 불구하고 정교하고 질서가 높은 복합 및 계층구조(hierarchical structure)를 만들어 내는 장점이 있다.

[237]

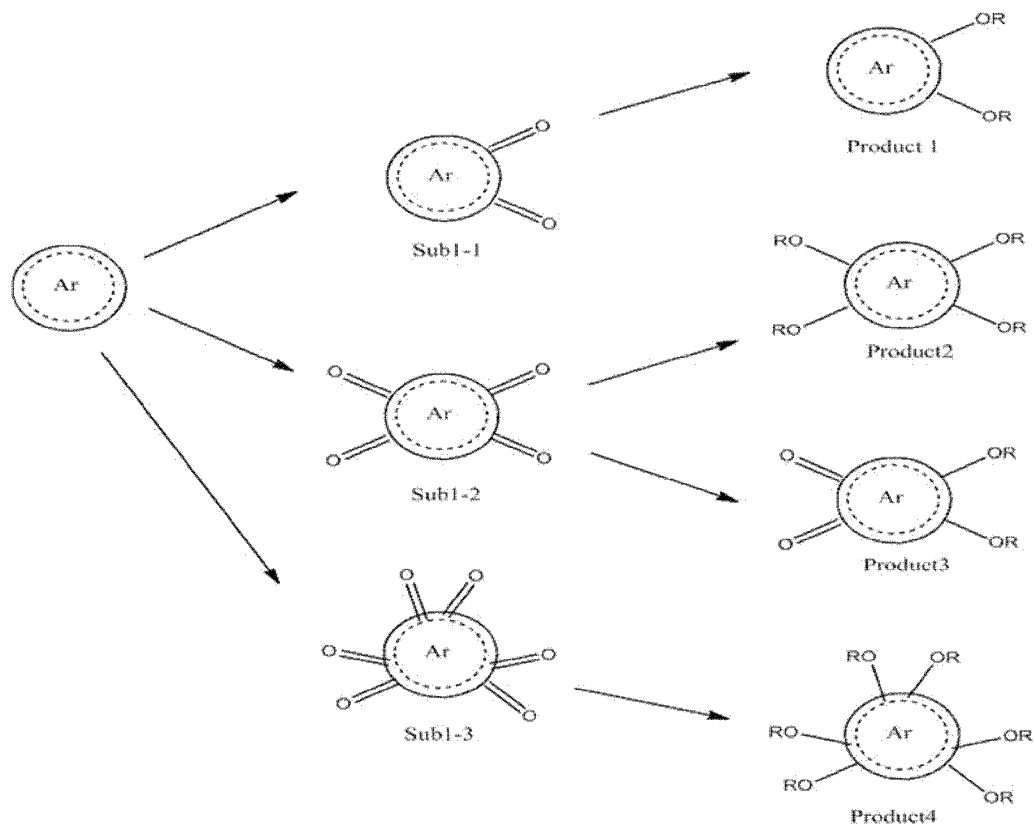
[238] 자가조립 3차원 유기 구조체를 구성하는 유기화합물 제조방법

[239] 화학식 1에 따른 화합물 제조방법

[240] 일 실시예에서, 상기 화학식 1에 따른 화합물은 하기 [반응식 1]내지 [반응식 2]와 같은 방법으로 제조할 수 있다. 그러나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[241] [반응식 1]

[242]



[243] (1) Sub 1-1, Sub1-2, 및 Sub1-3의 합성

[244] 방향족 고리(Ar)를 디클로로메탄과 아세토니트릴(acetonitrile) 용액에 녹여 염화 루테늄(III) 수화물(ruthenium(III) chloride hydrate)과 소듐

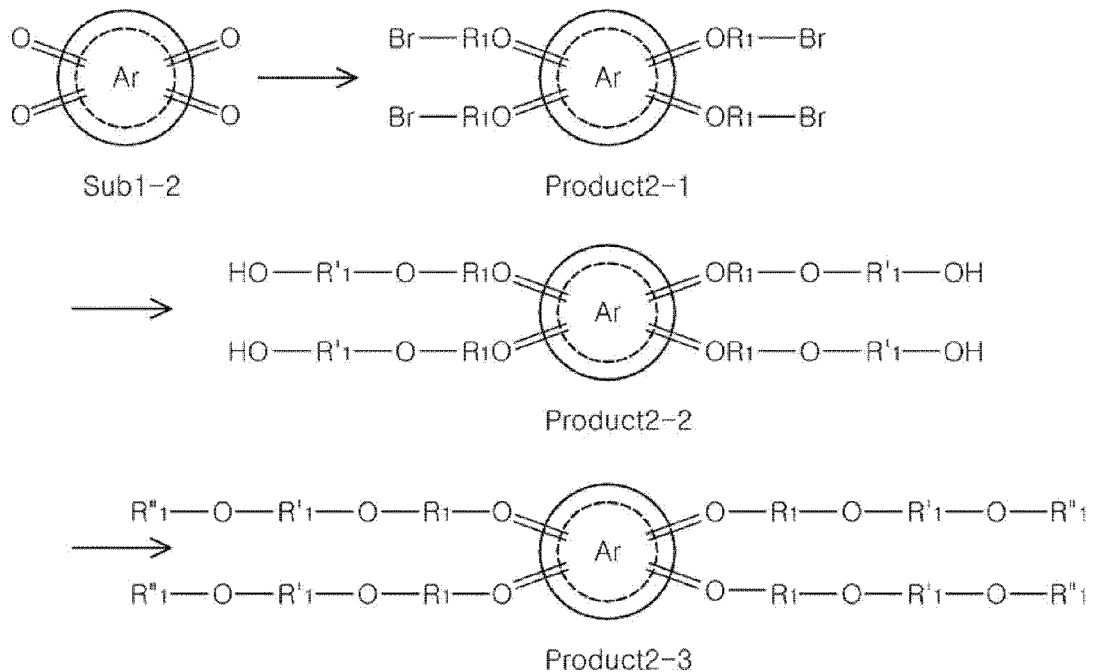
메타페리오데이트(NaIO_4)와 함께 증류수 내에서 소정온도와 소정시간동안 환류시켜 Sub1-1, Sub1-2, 및 Sub1-3을 얻을 수 있다. 이 때, 환류 온도에 따라 Sub1-1, Sub1-2, 및 Sub1-3를 구분하여 얻을 수 있다.

[245] (2) Product 1 내지 4의 합성

[246] Sub1-1, Sub1-2, 및 Sub1-3 중 어느 하나를 브로모 테트라뷰틸암모늄(Bu_4NBr), 소듐 하이드로설파이트($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$)와 함께, 증류수, 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹여 소정온도에서 소정시간 동안 환류시킨 후 $\text{X}'\text{-R}$ (이 때, X' 는 할라이드 일 예로서 Br이고, -R 은 $\text{-(L}_1\text{)}_{n_1}\text{-Y}_1\text{-X}_1$ 일 수 있다. 여기서, L_1 , n_1 , Y_1 , X_1 은 화학식 1에 대한 설명에서 정의한 바와 같을 수 있다, 구체적으로 X_1 은 $\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ 또는 -OH 일 수 있고, 이 때 R_c , R_d , 및 R_e 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I일 수 있다)과 KOH를 증류수에 녹여서 만든 수용액을 첨가한 후 소정시간 동안 소정온도에서 환류시키면 최종 생성물인 Product 1 내지 4 중 어느 하나를 얻을 수 있다. 이 때, Sub1-1, Sub1-2, 및 Sub1-3의 각각에 대한 $\text{X}'\text{-R}$ 의 물비를 조절하면 Product 1 내지 4 중 어느 하나를 구분하여 얻을 수 있다.

[247] [반응식 2]

[248]



[249] (1) Product 2-1의 합성

[250] 상기 반응식 1에서, $\text{X}'\text{-R}$ 대신에 $\text{X}'\text{-R}_1\text{-X}''$ (이 때, X' 와 X'' 는 할라이드 일 예로서 Br이고, -R_1 은 $\text{-L}_1\text{-(P}_1\text{)}_{a_1}\text{-}$ 일 수 있다. 여기서, L_1 , P_1 , a_1 은 화학식 1에 대한 설명에서 정의한 바와 같을 수 있다)를 사용한 것을 제외하고는 product 2의 합성법과 동일한 방법을 수행하여, product 2-1을 얻을 수 있다.

[251] (2) Product 2-2의 합성

[252] product 2-1과 $\text{HO-R}'_1\text{-OH}$ (이 때, $\text{-R}'_1$ 은 상기 화학식 1에서 설명한 -q_2 -일 수 있다)을 다이메틸포름아마이드에 녹인 후 소정온도에서 환류시키며

소정시간동안 반응시킨 후, 클로로포름으로 추출하고 마그네슘설파이트로 수분을 제거한 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 product2-2를 얻을 수 있다.

[253] (3)Product 2-3의 합성

[254] Product 2-2와 X'-R₁''(이 때, X'는 할라이드 일 예로서 Br이고, -R₁''은 -(P₂)_{a2}-CH₃ 일 수 있다. 여기서, P₂ 및 a2는 화학식 1에 대한 설명에서 정의한 바와 같을 수 있다)을 테트라하이드로퓨란에 넣고 소정온도에서 소정시간동안 환류시키며 반응하고 클로로포름을 전개액으로 하여 컬럼 크로마토그래피를 실시하면 product 2-3을 얻을 수 있다.

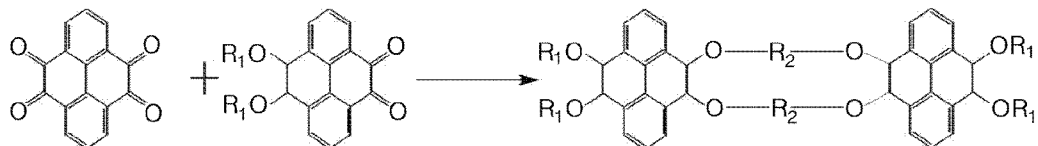
[255]

[256] 화학식 2의 화합물 제조방법

[257] 일 실시예에서, 상기 화학식 2에 따른 화합물은 하기 [반응식 3]과 같은 방법으로 제조할 수 있다. 그러나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[258] [반응식 3]

[259]



[260] Sub 1-2 와 Product 3(Sub 1-2와 Product 3의 몰비=1:2)을 혼합하여 브로모 테트라부틸암모늄(Bu₄NBr), 소듐 하이드로설파이트(Na₂S₂O₄)와 함께, 증류수, 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹여 소정온도에서 소정시간 동안 환류 시킨 후 X'-R(이 때, X'는 할라이드 일 예로서 Br이고, -R은 -(L₁)_{n1}-Y₁-X₁일 수 있다. 여기서, L₁, n₁, Y₁, X₁은 화학식 1에 대한 설명에서 정의한 바와 같을 수 있다, 구체적으로 X₁은 CR_cR_dR_e 또는 -OH일 수 있고, 이 때 R_c, R_d, 및 R_e는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I일 수 있다)과 KOH을 증류수에 녹여서 만든 수용액을 첨가한 후 소정온도에서 소정시간 동안 환류시키면 최종 생성물인 product 5을 얻을 수 있다.

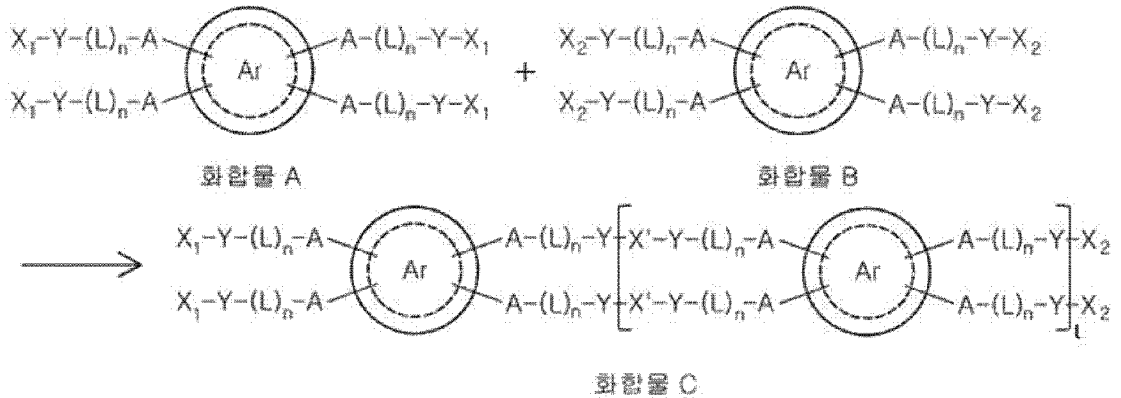
[261]

[262] 화학식 3의 화합물 제조방법

[263] 일 실시예에서, 상기 화학식 3에 따른 화합물은 하기 [반응식 4]와 같은 방법으로 제조할 수 있다. 그러나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[264] [반응식 4]

[265]



[266] 화학식 1c로 나타낸 화합물들 중 말단기들(X_1 , X_2)이 서로 반응할 수 있는 둘 이상의 화합물들(화합물 A와 화합물 B)을 선택하여 증류수와 클로로벤젠에 녹인 용액에 KOH를 증류수에 녹여서 만든 수용액을 첨가한 후 소정시간 동안 소정온도에서 환류시키면 최종 생성물로서 화합물 3을 얻을 수 있다.

[267] 상기 반응식 4에서 Ar, A, L, n, Y, l, 및 X' 는 화학식 3에서 설명한 Ar, A_1 , L_1 , n_1 , Y_1 , l, 및 X'_1 과 각각 동일할 수 있다. 한편, X_1 과 X_2 는 그들 사이의 반응에 의해 X' 를 형성할 수 있도록, 화학식 1의 X_1 의 예시들 중 적절히 선택될 수 있다.

[268]

[269] 자가 조립 3차원 구조체 제조방법

[270] 앞서 설명한 유기화합물 또는 유기분자를 적절한 유기 용매 내에 녹인 후 재결정화시키고, 건조하여 상기 유기 분자의 자가 조립에 따른 3차원 구조체를 얻을 수 있다. 상기 건조는 진공 건조일 수 있다. 구체적으로 하기 제1 내지 제4 방법을 통해 자가 조립 3차원 구조체 입자들을 함유하는 파우더를 얻을 수 있다. 상기 자가 조립 3차원 구조체 입자들은 나노 로드 형태를 가질 수 있다.

[271] 또한, 하기 제5 및 제6 방법을 통해 특정 형태를 가진 자가 조립 3차원 구조체 구체적으로 하기 제5 방법을 통해 자가 조립 3차원 구조체를 함유하는 파이버를 얻을 수 있으며 하기 제6 방법을 통해 자가 조립 3차원 구조체를 함유하는 박막을 얻을 수 있다.

[272] 제1 방법: 유기용매 증발법을 이용한 3차원 구조체를 함유하는 파우더 형성 방법

[273] 1) 상기 유기분자를 중간정도의 용해도를 갖는 유기용매에 녹여 균질한 용액을 형성하는 단계

[274] 2) 상기 용액에서 용매만 서서히 증발시켜서 점차적으로 진한 농도의 균질 용액으로 변화하는 단계

[275] 3) 임계 농도에서 상기 유기 분자의 자가 조립에 따른 3차원 구조체가 형성되는 단계

[276] 4) 상기 구조체를 필터링하고 진공에서 잔여 유기용매를 제거하는 단계

[277] 제2 방법: 냉각법을 이용한 3차원 구조체를 함유하는 파우더 형성 방법

[278] 1) 상기 유기분자를 가열된 불용성 유기용매에 녹여 낮은 농도의 균질한

용액을 만드는 단계

- [279] 2) 균질한 용액을 외부와 물질의 이동을 차단한 상태로 생각하는 단계
- [280] 3) 임계 온도에서 상기 유기 분자가 자가 조립에 따른 3차원 구조체가 형성되는 단계
- [281] 4) 상기 구조체를 필터링하고 진공에서 잔여 유기용매를 제거하는 단계
- [282] 제3 방법: 용해도가 다른 멀티 용매를 이용한 3차원 구조체를 함유하는 파우더 형성 방법
- [283] 1) 밀폐된 공간 내 서로 다른 두 개의 계를 마련하고, 하나의 계에는 상기 유기 분자에 대해 용해도가 높은 제1 유기용매 내에 상기 유기 분자를 녹인 균질 용액을 배치하고, 또한 다른 하나의 계에는 증발이 잘되고 상기 유기 분자에 대해 용해도가 매우 낮으나 상기 제1 유기용매에 대해 섞임성이 좋은 제2 유기용매를 배치하는 단계
- [284] 2) 상기 제2 유기용매가 증발되고 증발된 제2 유기용매가 상기 균질 용액 내로 섞이면서 상기 유기 분자의 용해도가 낮아지는 단계
- [285] 3) 임계 용해도에서 상기 유기 분자가 자가 조립에 따른 3차원 구조체가 형성되는 단계
- [286] 4) 상기 구조체를 필터링하고 진공에서 잔여 유기용매들을 제거하는 단계
- [287] 제4 방법: 용해도가 다른 멀티 용매를 이용한 3차원 구조체를 함유하는 파우더 형성 방법
- [288] 1) 상기 유기 분자를 용해도가 높은 제1 유기용매에 대하여 포화용해도로 녹여 균질 용액을 얻는 단계
- [289] 2) 상기 유기 분자가 매우 낮은 용해도를 나타내는 제2 유기용매에 상기 균질 용액을 적하하여 상기 유기 분자의 용해도가 낮아지는 단계
- [290] 3) 임계 용해도에서 상기 유기 분자가 자가 조립에 따른 3차원 구조체가 형성되는 단계
- [291] 4) 상기 구조체를 필터링하고 진공에서 잔여 유기용매들을 제거하는 단계
- [292] 제5 방법: 3차원 구조체를 함유하는 파이버 형성방법
- [293] 1) 용해도가 높은 유기용매에 대하여 상기 유기분자를 용해하여 방사 용액을 얻는 단계
- [294] 2) 상기 방사 용액을 전기방사하여 파이버를 형성하는 단계
- [295] 3) 형성된 파이버를 필터링하고, 진공에서 잔여 유기용매를 제거하는 단계
- [296] 제6 방법: 3차원 구조체를 함유하는 박막 형성방법
- [297] 1) 용해도가 높고 휘발성이 높은 유기용매에 유기분자를 용해하여 균질한 용액을 얻는 단계
- [298] 2) 상기 용액을 스핀 코팅하여 박막을 얻는 단계
- [299] 이에 더하여, 상기 제1 내지 제4 방법들 구체적으로 단계 3)에서, 상기 유기 분자의 자가 조립을 위한 핵들이 생성되고 이 후 성장이 일어나는 시점에, 상기 유기 분자와는 다른 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 첨가할 수 있다. 그

결과, 한 구조체 내에 서로 다른 종류의 유기 분자들을 갖는 구조체를 형성할 수 있다.

[300]

[301] 자가 조립 3차원 유기 구조체의 용도

[302] 이러한 자가 조립 3차원 유기 구조체는 유기 분자들 사이의 미세기공을 사용한 물질의 흡수 및 흡착이 가능할 수 있다.

[303] 구체적으로, 3차원 유기 구조체는 상기 미세 기공 내에 유기 용매를 함유하는 유기 젤레이터로서도 사용될 수 있다.

[304] 다른 실시예에서, 3차원 유기 구조체는 상기 미세 기공 내에 무기 입자를 함유하는 유무기 복합체로도 사용될 수 있다. 상기 무기 입자는 상기 유기 구조체 내에 흡착 또는 흡수가 가능한 유기 용매를 매개체로 하여 상기 미세 기공 내에 도입될 수 있다. 이러한 무기 입자는 1 내지 4nm의 타이타늄 옥사이드(TiO_2), 실리콘 옥사이드(SiO_2), 알루미늄 옥사이드(Al_2O_3), 지르코늄 옥사이드(ZrO_2) 등의 세라믹 나노 입자, 금(Au), 은(Ag), 백금(Pt), 팔라듐(Pd) 등의 금속나노입자, 황화카드뮴(CdS), 세레나이드화 카드뮴(CdSe), 황화납(PbS), 황화아연(ZnS) 등의 반도체 나노입자, 산화철(II)(Fe_3O_4), 산화철(III)(Fe_2O_3) 등의 자성 나노입자일 수 있다. 이러한 무기 입자들은 솔-젤법을 사용하여 도입될 수도 있다.

[305] 또 다른 실시예에서, 3차원 유기 구조체는 친화성이 있는 물질과 친화성이 없는 물질 사이의 선택적 분리가 가능할 수 있다. 일 예로서, 수계 환경으로부터 유해물질의 선택적 분리에 이용할 수 있다.

[306]

[307] 자가 조립 3차원 유기 구조체를 함유하는 분리체

[308] 본 실시예에 따른 분리체는 상기 화학식 1 내지 3으로 나타낸 유기 화합물의 자가 조립에 의해 형성된 3차원 유기 구조체 즉, 유기 결정, 일 예로서 도 1을 참조하여 설명한 3차원 유기 구조체를 함유할 수 있다.

[309]

[310] 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체 제조방법

[311] 앞서 기술된 3차원 유기 구조체 제조방법에 의해 얻어진 3차원 유기 구조체를 사용하여 분리체를 제조할 수 있다.

[312] 분리체를 제조하는 구체적 방법은 다음과 같을 수 있다.

[313] 일 예에서, 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 가압하여 펠렛 또는 필름 형태의 분리체를 제조할 수 있다. 가압은 1,000 내지 15,000 kgf/cm^2 의 압력 범위 내에서 수행할 수 있고, 가압과정에서 3차원 구조체가 추가적으로 자기조립되면서 결정이 커질 수 있다. 구체적으로, 펠렛 형태는 펠렛 다이 내에 파우더를 충전시킨 상태에서 가압하여 제조할 수 있고, 필름 형태는 지지체 상에 파우더를 고르게 편 상태에서 가압하여 제조할 수 있다.

[314] 다른 예에서, 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 지지체 내에 충전하여

분리체와 지지체를 포함하는 분리체 패키지를 제조할 수 있다. 상기 지지체는 예를 들어, 판 형태, 다공성 바닥을 구비하는 바스켓 형태, 또는 다공성 파우치 형태를 가질 수 있다.

[315] 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 용해할 수 있는 제1 용매와 상기 제1 용매와 섞임성 있는 제2 용매의 혼합 용매 내에, 상기 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 넣어 용액을 만든 후, 상기 용액을 지지체 상에 코팅하여 박막 형태의 분리체를 형성할 수 있다. 이 때, 제1 용매와 상기 제2 용매는 1:1 내지 7:1, 구체적으로는 1:1 내지 4:1, 일 예로는 1.5:1 내지 2.5:1의 부피비로 혼합될 수 있으며, 상기 용액은 5mM 내지 40mM의 농도를 가질 수 있다. 또한, 상기 코팅은 스핀코팅, 바코팅, 슬롯다이 코팅, 스프레이코팅, 롤투롤코팅, 또는 인버스롤코팅일 수 있다.

[316] 또 다른 예에서, 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 용해할 수 있는 제1 용매와 상기 제1 용매와 섞임성 있는 제2 용매의 혼합 용매 내에, 상기 3차원 구조체와 혼화성이 있는 선택된 고분자를 넣어 제1 용액을 형성한 후, 상기 제1 용액 내에 상기 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 넣어 제2 용액을 형성하고, 상기 제2 용액을 지지체 상에 코팅하여 박막 형태의 분리체를 형성할 수 있다. 이러한 분리체는 그 내부에 상기 3차원 구조체를 함유하는 영역과 상기 고분자를 함유하는 영역으로 미세 상분리될 수 있다. 이 때, 제1 용매와 상기 제2 용매는 1:1 내지 7:1, 구체적으로는 1:1 내지 4:1, 일 예로는 1.5:1 내지 2.5:1의 부피비로 혼합될 수 있으며, 상기 제1 용액은 1mM 내지 20mM의 농도를 가질 수 있고, 상기 제2 용액은 5mM 내지 40mM의 농도를 가질 수 있다. 또한, 상기 코팅은 스핀코팅, 바코팅, 슬롯다이 코팅, 스프레이코팅, 롤투롤코팅, 또는

인버스롤코팅일 수 있다. 상기 고분자는 PVC(Polyvinyl chloride), PA(Polyamide), PE(polyethylene), PES(Polyethersulfone), PTFE(Polytetrafluoroethylene), PMMA(Poly(methyl methacrylate)), HDPE(high-density polyethylene), LDPE(low-density polyethylene), PP(Polypropylene), PS(polystyrene), PVAC(Polyvinyl acetate), PEO(polyethylene oxide), NYLON, PET(polyethylene terephthalate), PI(polyimide), 또는 이들 중 둘 이상의 조합일 수 있다. 이러한

[317] 상기 분리체는 50 내지 500nm 두께를 가질 수 있고, 구체적으로는 100 내지 200nm의 두께를 가질 수 있다.

[318]

[319] 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체를 사용한 유체 분리방법

[320] 본 실시예에 따른 분리체는 유기 분자들 사이 다시 말해서, 3차원 유기 구조체 내의 미세기공을 사용한 물질, 구체적으로 유체, 일 예로서, 기체 또는 액체의 흡수 또는 흡착이 가능할 수 있다. 기체 또는 액체의 흡수 또는 흡착을 가능하게 하는 분리체의 기공 사이즈는 작게는 2nm에서 크게는 9nm로 구성될 수 있으며 일 예로서, 3 내지 6nm일 수 있다.

[321] 상기 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체를 사용하여 분리할 수 있는 혼합

유체는 둘 이상의 액체가 혼합된 혼합 액체일 수 있고, 상기 혼합된 둘 이상의 액체는 상기 분리체로의 선택적인 흡수 또는 흡착, 또는 흡수 정도 또는 흡착 정도의 차이에 기인하는 상기 분리체를 투과하는 투과시간의 차이에 의해 서로 분리될 수 있다. 이 때, 상기 분리체 내에 흡수 또는 흡착 정도가 큰 제1 액체는 흡수 또는 흡착 정도가 상대적으로 낮은 제2 액체에 대비하여 상기 분리체와의 상호작용이 큰 액체일 수 있다. 상기 상호작용은 젖음성, 표면장력, 입체 이성질체 상호작용일 수 있다. 이를 위해, 혼합 액체의 종류에 따라 상기 화학식 1에 나타낸 화합물의 Y_1 과 Y_2 들 구체적으로,

$-(P_1)_{a_1}-(Q_1)_{b_1}-(P_2)_{a_2}-(Q_2)_{b_2}-(P_3)_{a_3}$ 의 극성, 및/또는 입체 이성질체 특성을

조절할 수 있다. 일 예로서, Y_1 과 Y_2 들이 CH_2 체인인 경우 가장 낮은 극성을 나타낼 수 있고, Y_1 과 Y_2 들이 CF_2O 체인인 경우 가장 높은 극성을 나타낼 수 있다.

[322] 또한, Y_1 과 Y_2 들의 길이를 조절하는 경우 분리체의 기공도를 조절할 수 있다.

[323] 구체적으로, 상기 분리체 내에 흡수 또는 흡착이 되는 제1 액체는 흡수 또는 흡착이 되지 않는 제2 액체에 대비하여 상기 분리체에 대해 젖음성이 클 수 있다. 더 구체적으로, 상기 제1 액체는 상기 분리체의 임계 표면장력에 대해 갖거나 작은 표면장력을 가질 수 있고, 상기 제2 액체는 상기 분리체의 임계 표면장력에 대해 큰 표면장력을 가질 수 있다.

[324] 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 분리체와 흡수 또는 흡착 가능한 유체 사이의 상관관계를 한센 스페이스를 사용하여 모식도이다. 한센 스페이스는 한센 용매 파라미터들(Hansen Solubility Parameters) 중 수소결합 파라미터(hydrogen bonding parameter, δ_h)을 X축으로, 극성 파라미터(polar parameter, δ_p)을 Y축으로, 및 분산 파라미터(dispersion parameter, $2\delta_d$)의 2배를 Z축으로 나타낸 좌표계이다.

[325] 도 2를 참조하면, 일 실시예에 따른 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체의 수소 결합 파라미터(δ_{hl}), 극성 파라미터(δ_{pl}), 및 분산 파라미터(δ_{dl})으로 정의된 중심점(cp (δ_{hl} , δ_{pl} , $2\delta_{dl}$))과 상호작용 반지름(R_0)에 의해 한센 용해 구(Hansen solubility sphere)가 정의될 수 있다.

[326] 분리체의 한센 용해 파라미터들과 상호작용 반지름(R_0)은 상기 3차원 유기 구조체를 이루는 상기 화학식 1로 나타낸 유기 분자를 구성하는 여러 작용기들에 의해 영향을 받을 수 있으나, 주로 상기 화학식 1에 나타낸 화합물의 Y_1 과 Y_2 들 구체적으로, $-(P_1)_{a_1}-(Q_1)_{b_1}-(P_2)_{a_2}-(Q_2)_{b_2}-(P_3)_{a_3}$ 에 의해 영향을 받을 수 있다.

[327] 일 예로서, 상기 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체는 0 내지 11의 수소 결합 상호작용(δ_{hl}), 0 내지 19의 극성 상호작용(δ_{pl}), 및 15 내지 20의 분산력(δ_{dl})을 나타낼 수 있고, 약 2.5 내지 약 4, 구체적으로 약 3.2 내지 약 3.6의 상호작용 반지름(R_0)을 나타낼 수 있다.

- [328] 상기 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체는 둘 이상의 액체들 즉, 제1 액체와 제2 액체가 혼합된 혼합액으로부터 제1 액체 또는 제2 액체를 흡수 또는 흡착할 수 있다. 이 때, 제1 액체와 제2 액체는 상기 분리체를 용해시키지 않아야 한다. 다시 말해서, 상기 한센 스페이스 내에서 상기 제1 액체와 상기 제2 액체의 한센 용해 파라미터들에 의해 각각 정의된 A점(δ_{hA} , δ_{pA} , $2\delta_{dA}$)과 B점(δ_{hB} , δ_{pB} , $2\delta_{dB}$)은 상기 한센 용해 구 외부에 배치될 수 있다. 부연하면, 상기 분리체와 상기 액체들 사이의 한센 상대 에너지 차이(Hansen Relative Energy Difference, RED)가 1보다 클 수 있다. 한센 상대 에너지 차이는 하기와 같이 정의될 수 있다.

[329] $RED = R_d / R_0$

[330]
$$R_d = \sqrt{(2\delta_{h2} - 2\delta_{h1})^2 + (\delta_{p2} - \delta_{p1})^2 + (\delta_{d2} - \delta_{d1})^2}$$

- [331] 상기 식에서, R_0 는 분리체의 상호작용 반지름이고, δ_{h1} 은 분리체의 수소 결합 상호작용이고, δ_{p1} 은 분리체의 극성 상호작용이고, δ_{d1} 은 분리체의 분산력이고, δ_{h2} 은 액체의 수소 결합 상호작용이고, δ_{p2} 은 액체의 극성 상호작용이고, δ_{d2} 은 액체의 분산력이다.

- [332] 한편, 상기 한센 스페이스 내에서 상기 제1 액체와 상기 제2 액체의 한센 용해 파라미터들에 의해 각각 정의된 A점(δ_{hA} , δ_{pA} , $2\delta_{dA}$)과 B점(δ_{hB} , δ_{pB} , $2\delta_{dB}$)은, 상기 X축과 상기 Y축으로 이루어진 XY 평면에 대해 0.05 내지 0.5π , 구체적으로 0.1 내지 0.45π 의 이면각(θ)을 갖고 상기 한센 용해 구의 중심점(cp)을 지나는 기준 평면(RP)에 의해 분리된 두 개의 영역에 분리 배치될 수 있다. 구체적으로, 제1 액체의 한센 용해 파라미터들에 의해 각각 정의된 A점(δ_{hA} , δ_{pA} , $2\delta_{dA}$)는 상기 기준 평면(RP)의 일측 즉, 왼편에 배치될 수 있고, 제2 액체의 한센 용해 파라미터들에 의해 각각 정의된 B점(δ_{hB} , δ_{pB} , $2\delta_{dB}$)는 상기 기준 평면(RP)의 타측 즉, 오른편에 배치될 수 있다.

- [333] 일 예로서, 상기 분리체가 구체적으로는 상기 화학식 1에 나타난 화합물의 Y_1 과 Y_2 들 구체적으로, $-(P_1)_{a_1}-(Q_1)_{b_1}-(P_2)_{a_2}-(Q_2)_{b_2}-(P_3)_{a_3}$ 이 1 내지 15 미만의 유전상수 값을 갖는 극성이 비교적 낮은 경우, 상기 기준평면의 오른편에 위치한 제2 액체보다는 상기 기준평면의 왼편에 위치한 제1 액체를 더 잘 흡착 또는 흡수할 수 있다. 나아가, 상기 분리체는 상기 제2 액체를 전혀 흡착 또는 흡수하지 않을 수 있다.

- [334] 다른 예에서, 상기 분리체가 구체적으로는 상기 화학식 1에 나타난 화합물의 Y_1 과 Y_2 들 구체적으로, $-(P_1)_{a_1}-(Q_1)_{b_1}-(P_2)_{a_2}-(Q_2)_{b_2}-(P_3)_{a_3}$ 이 15 이상의 유전상수 값을 갖는 극성이 비교적 높은 경우, 상기 기준평면의 왼편에 위치한 제1 액체보다는 상기 기준평면의 오른편에 위치한 제2 액체를 더 잘 흡착 또는 흡수할 수 있다. 나아가, 상기 분리체는 상기 제1 액체를 전혀 흡착 또는 흡수하지 않을 수 있다.

- [335] 상기 혼합 액체는 물, 아세트알데하이드, 아세탈다이옥심, 아세트아민, 아세타릴라이드, 아세트산, 아세틱 안하이드라이드, 아세톤, 아세톤메틸옥심, 아세토나이트릴, 아세토펜, 아세톡심, 1-아세톡시-1,3-부타디엔, N-아세틸 카프로락탐, N-아세틸몰포라인, N-아세틸 피페리딘, N-아세틸 피롤리돈, 2-아세틸 사이오펜, 아시텔아세톤, 아세틸프로마이드, 아세틸렌, 아세틸플로오라이드, 아크로레인, 아크릴아마이드, 아크릴릭산, 아크릴로나이트릴, 아크릴클로라이드, 아릴아세테이트, 아릴아세트산, 아릴아세포아세테이트, 아릴아세토니트릴, 아릴알콜, 아릴아민, 아릴프로마이드, 아릴클로라이드, 아릴사이아나이드, 아릴에틸이서, 아릴플루오라이드, 아릴포르메이트, 아릴아이오다이드, 아릴아이소사이아나이드, 아릴멀캡탄, 아릴 메틸에테르, 암모니아, 아밀아세테이트, 아네티올, 아닐릴 p-아니시다인, 아니솔, 아키도에탄, 3-아지도프로펜, 펜잘디하이드, 1,3-벤젠다이올, 벤조익산, 벤조나이트릴, 벤조페논, 벤조일 클로라이드, 벤질 알콜, 벤질 부틸 프탈레이트, 벤질 클로라이드, 벤질 테트아크릴레이트, N-벤질 피롤리돈, 바이페닐, 보리네카보닐, 2-브로모아릴알콜, 2-브로모프로펜, 1-프로모프로펜, 4-브로모-1-부탄, 4-브로모-1,2-부타디엔, 5-브로모-2-니트로벤조트리플로라이드, 1-브로모-4-에톡시벤젠, 브로모아세티렌, o-브로모아니솔, 브로모벤젠, p-브로모벤제노나이트릴, p-브로모벤조일 클로라이드, 2-브로모부탄, o-브로모클로로벤젠, 브로모크롤로메탄, 브로모클로로메탄, 브로모에틸렌, 브로모포름, 브로모메틸 메틸 에테르, 1-프로모나프탈렌, p-니트로벤젠, 브로모프렌, 3-브로모프로피네, o-브로모스티렌, 2-브로모티오펜, o-브로모톨루엔, p-브로모톨루엔, 1,2-부타디엔, 1,3-부타디엔-1-클로로, 2,3-부타디엔-1-올, 1,3-부타디엔-1,2-다이클로로, 부타디엔-4-시아노, 부타디온, 1,4-부타디올 다이아크릴레이트, 1,3-부탄다이올, 1,4-부탄다이올, 1-부탄올, 2-부탄올, 1-부텐, 2-부텐, 부톡시 에톡시 프로판올, n-부틸 아세토 아세테이트, n-부틸 아크릴레이트, t-부틸알콜, n-부틸 사이클로펜테인, 2,부틸 옥탄올, n-부틸벤젠, 부틸렌옥사이드, 부틸알데하이드, 부티릭산, 부티릭안하이드라이드, 부티로나이트릴, 부티릴클로라이드, 클로라인, 클로로아세트알데하이드, 클로로아세트산, 3-클로로 아릴알콜, 1-클로로메틸아크릴레이트, 1-클로로-1-니트로에탄, 3-클로로-1-프로판올, 1-클로로-2-부텐, 1-클로로-2-메틸 프로펜, 4-클로로-2-니트로톨루엔, 클로로아세톤, 클로로아세토니트릴, 클로로아세틸클로라이드, 1,2-클로로브로모에틸렌, 1-클로로부탄, 2-클로로부탄, 2-클로로사이클로헥산온, 클로로사이클로프로펜, 클로로다이플루오로메탄, 비스(클롤로메틸)이서, 클로로메틸설파이드, p-클로로니트로벤젠, 클로로니트로메탄, 2-클로로프로펜알, 클로로프로펜, p-클로로스티렌, o-클로로프티렌, 4-클로로사이오펜올, o-클로로사이오펜올, m-크레소느 크로톤알데하이드,

크로토닉산, 크로톤락톤, 사이아노젠, 사이아노젠브로마이드, 1-데칸올, 2-데칸올, 1-데칸, 다이부틸에스터, 다이부틸푸마레이트, 다이-아이소부틸 설펑사이드, 다이-아이소프로필 설펑사이드, 다이-n-부틸 에테르, 다이-n-부틸 설펑사이드, 다이-n-프로필 설펑사이드, 다이-p-토릴 설펑사이드, 다이-2-메톡시에틸에테르, 다이-(2-클로로-아이소프로필)에테르, 다이아릴아민, 다이아조메탄, 다이벤질에테르, 1,1-다이브로모에틸렌, 다이브로모 메탄, 다이부틸프탈레이트, 다이부틸 세바케이트, 1,3-다이클로로-2-프로판올, N,N-다이클로로에틸 아민, 2,5-다이클로로페놀, 2,6-다이클로로페놀, 2,3-다이클로로프로판올, 다이에탄올아민, N,N-다이다이에틸아세트아마이드, N,N-다이에틸 포름아마이드, 다이에틸 케톤, 다이에틸 프탈레이트, 다이에틸 설펑사이드, 2-(다이에틸아미노)에탄올, 다이에틸렌글리콜, 다이에틸렌글리콜 헥실 에테르, 다이에틸렌 글리콜 모노 부틸 에테르, 다이에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 다이헥실프탈레이트, 다이-아이소부틸카비놀, 다이케텐, 다이메틸아민, 다이메틸 다이케톤, 다이메틸 에탄올 아민, 다이메틸 포름아마이드, 1,1-다이메틸 하이드라진, 2,6-다이메틸페놀, 3,4-다이메틸페놀, 다이메틸설펑사이드, 다이프로필렌글라이콜, 에탄올, 에탄올아민, 1-에톡시 에톡시-2-프로판올, 3-에톡시 프로피온알데하이드, 에톡시에틸 프로피오네이트, 에틸 아세테이트, 에틸아민, 에틸카바메이트, 에틸락테이트, 2-에틸-1-부탄올, 2-에틸-헥산올, 에틸렌클로로하이드린, 에틸렌 사이아노하이드린, 에틸렌글라이콜, 에틸렌다이아민, 에틸렌옥사이드, 1-플루오로 아크릴릭산, 포름아마이드, 포름산, 펄프릴 알콜, 글리세롤, 글리옥살-에탄다이알, 헥사플루오로 아이소프로판올, 헥사플루오로헥산올, 헥사메틸포스포라마이드, 헥실렌글라이콜, 하이드록시에틸 아크릴레이트, 아이소부틸알콜, 아이소사이아닉 산, 아이소옥틸 알코올, 아이소사졸, 락틱산, 메트아크릴아마이드, 메트아크릴릭산, 메탄올, o-메톡시페놀, 3-메톡시프로피오니트릴, 2-메틸 아크릴릭산, 메틸 아세테이트, 3-메틸 아릴 알코올, 메틸아민, 메틸포르메이트, 메틸하이드라진, 메틸하이드로필옥사이드, 메틸 아이소부틸 카비놀, 메틸아이소사시오사이아네이트, 3-메틸 아이소사졸, 메틸살리시레이트, 2-메틸-1-부탄올, 2-메틸-1-프로판올, N,N,N,N-테트라메틸메틸사이오유레아, 노닐 페놀, 1-펜탄올, 펜타클로로펜올, 2-프로판올, β -프로피오락톤, 프로피온알데하이드-2,3-에폭시, 프로피온아미드, 프로피오닉산, 프로필아민, 피리다진, 2-피롤리돈, 피롤, 퀴놀라인, 살리실알데하이드, 숙신알데하이드, 숙시닉 안하이드라이드, 설펑다이옥사이드, 테트라메틸렌 설펑, 테트라하이드로과이란, 테트라메틸유레아, 사이아졸, 사이오아세트아마이드, 사이오사이아닉 산, 사이오페놀, 사이오유레아, 1,2,3-트리아아졸, 트리아클로로아세틱 산, 2,4,6-트리아클로로페놀, 트라이에탄올아민, 트라이에틸렌 글라이콜, 트라이에틸렌 글라이콜 모노메틸 에테르, 테트라메틸 포스페이트, 유레아, 비닐

아세트산, 비닐아세틸렌, 및 비닐아민으로 이루어진 군에서 선택되는 둘 이상의 액체를 함유할 수 있다

- [336] 상기 혼합 액체는 더 구체적으로는 분별증류에 의해 분리가 어려운 수계 공비혼합물일 수 있다. 상기 수계 공비혼합물은 물과 다음 액체들 중 적어도 어느 하나를 공비점을 나타낼 수 있는 성분비로 함유할 수 있다: 포르믹 산(bp 100.8°C), 나이트로메탄(bp 100°C), 카본 다이설파이드(bp 46.24°C), 아세토나이트릴(bp 81°C), 나이트로에탄(bp 112°C), 에틸아세테이트(bp 77.1°C), 1-부탄올(bp 117.7°C), 2-부탄올(bp 98°C), t-부탄올(bp 82°C), 1-부테닐에틸 에테르(bp 55°C), 1-부옥시-2-프로판올(bp 171°C), 부틸 아세테이트(bp 126°C), 부틸 아세토아세테이트(bp 71°C), 부틸 아크릴레이트(bp 126°C), 부탈아민(bp 77°C), n-부틸 아닐린(bp 236°C), 부틸 벤조에이트(bp 249°C), 부틸 부티레이트(bp 164°C), 부틸-2-에톡시에탄올(bp 124°C), 부틸 클로라이드(bp 78°C), 부틸 에테르(bp 142°C), 부틸아이소프로필렌 에테르, 2-부틸 옥탄올(bp 145°C), 부틸 살리크릴레이트(bp 268°C), 부틸알데하이드(bp 74°C), 부티릭 산(bp 163°C), 부티로나이트릴(bp 117°C), 사염화탄소(bp 76.72°C), 클로랄(bp 100.8°C), 클로로벤젠(bp 131°C), 2-클로로에틸 에테르(bp 178°C), 클로로아이소프로필 에테르(bp 187°C), 1-클로로-2-프로판올(bp 126°C), 크로톤 알데하이드, 사이클로헥산올(bp 161°C), 사이클로헥산온(bp 155°C), 사이클로헥실아민(bp 134°C), 사이클로펜탄올(bp 139°C), 사이클로펜타온(bp 130°C), 다이아릴아세탈, 다이아릴아민, 다이부틸아세탈, 다이부틸아민(bp 159°C), 다이부틸에탄올아민(bp 134°C), 다이부틸포르말, 다이부틸푸마레이트(bp 285°C), 다이부틸말레이트(bp 281°C), 다이(2-클로로에탈)포르말, 2,3-다이클로로프로판올(bp 183°C), 다이사이클로로펜타디엔(bp 170°C), 다이에틸 아세탈, 다이에틸아미노데틸 아민(bp 54°C), 다이에틸 부티랄, 다이에틸렌글리콜 다이부틸 에테르, 다이에틸 에탄올아민(bp 161°C), 다이에틸 푸마레이트(bp 192°C), 다이(2-에틸헥실)아세테이트(bp 199°C), 다이에틸아이소프로판올아민(bp 66°C), 다이에틸 프탈레이트(bp 295°C), 다이에틸 푸마레이트(bp 192°C), 다이에틸 숙시네이트(bp 218°C), 다이헥실 아민(bp 192°C), 다이아이소부틸렌(bp 101°C), 다이아이소부틸케톤(bp 163°C), 다이아이소프로필 아민(bp 83°C), 다이아이소프로필에탄올아민, 다이아이소프로필말레이트(bp 195°C), 1,2-다이에틸부틸아민(bp 94°C), 다이에틸부티랄, 다이에틸에탄올아민(bp 134°C), 2,5-다이에틸 푸란(bp 92°C), 2,6-다이에틸-4-헵탄올(bp 176°C), 다이에틸 아이소부티랄, 2,6-다이에틸 몰포라인(bp 147°C), 다이에틸프탈레이트(bp 282°C), 다이에틸 피메레이트(bp 192°C), 1,4-다이옥센(1,4-dioxane)(bp 101°C), 1,3-다이옥소레인(bp 75°C), 다이프로필 아세탈, 다이프로필 케톤(bp 144°C), 에피클로로하이드린(bp 117°C), 2-에톡시에탄올(bp 135°C), 1-에톡시-2-프로판올(bp 132°C), 에틸벤젠(bp 34°C), 2-에틸 부탄올(bp 146°C), 2-에틸부틸 아세테이트(bp 160°C),

2-에틸부틸부티레이트, 에틸부틸에테르, 에틸부틸케톤(bp 146°C),
 2-에틸부틸알데하이드(bp 117°C), 2-에틸부티릭 산(bp 100°C), 에틸
 크로토네이트, n-에틸사이클로헥실 아민(bp 165°C), 에틸렌 클로로하이드린,
 에틸렌 다이아민(bp 118°C), 에틸렌 다이클로라이드(bp 83°C), 에틸-3-에톡시
 프로피오네이트(bp 166°C), 에틸 포르메이트(bp 52°C), 2-에틸헥사오닉 산, 2-에틸
 헥산올(bp 183°C), 2-에틸헥실 아세테이트(bp 199°C), 2-에틸헥실아민(bp 169°C),
 n-에틸헥실 아닐린, 2-에틸헥실 클로라이드, 2-에틸헥실 에테르, 2-에틸 헥실
 헥사오네이트, 에틸리딘 아세톤, N-에틸 몰포라인(bp 139°C), 4-에틸 옥탄올,
 에틸 프로피오네이트, 글리콜 다이아세테이트(bp 193°C), 헥사오닉 산,
 2-헥센알(bp 47°C), 헥실 아세테이트(bp 168°C), 헥실 아민(bp 131°C), 헥실
 클로라이드(bp 135°C), 헥실-2-에틸 부티레이트, 헥실 헥사오네이트, 10vol.%
 염산(bp 103°C), 브롬산(bp 101°C), 불산, 아이오드산, 질산, 아이소밀 알코올(bp
 131°C), 아이소부틸알콜(bp 107°C), 아이소프로온(bp 215°C), 아이소프로필
 아세테이트(bp 88°C), 아이소프로필 알콜(bp 82°C), 아이소프로필 벤젠(bp 152°C),
 아이소프로필 클로라이드(bp 35°C), 아이소프로필 에테르(bp
 68°C), 메트아크릴알데하이드(bp 69°C), 1-에톡시-1,3-부타다이엔(bp 110°C),
 3-메톡시부틸 아세테이트, 2-메톡시 에탄올(bp 124°C), 1-메톡시-2-프로판올(bp
 118°C), 메틸 아세테이트(bp 57°C), 메틸알(bp 41°C), 메틸아밀 케톤(bp 149°C),
 α-메틸 벤질아민(bp 185°C), α-메틸벤질에테르(bp 174°C), n-메틸부틸아민(bp
 90°C), n-메틸다이부틸 아민(bp 49°C), 메틸렌 클로라이드, 메틸에틸 케톤(bp
 80°C), 2-메틸-5-에틸피리딘(bp 178°C), 5-메틸-2-헥사온, 메틸아이소부틸 케톤(bp
 117°C), 메틸아이소프로페닐 케톤, N-메틸 몰포라인(bp 115°C), 2-메틸 펜타날(bp
 119°C), 2-메틸펜타오닉 산, 2-메틸 펜탄올(bp 148°C), 4-메틸-2-펜탄올(bp 134°C),
 4-메틸-2-펜타온, 4-메틸-2-펜텐(bp 58°C), 4-메틸-2-펜틸 아세테이트(bp 144°C),
 4-메틸-2-펜틸 부티레이트, 메틸페닐 카비놀(bp 204°C), 메틸페닐 케톤(bp 202°C),
 2-메틸프로필 아세테이트(bp 116°C), 메틸프로필 케톤(bp 101°C), 메틸비닐
 클로라이드, 메틸비닐 케톤(bp 80°C), 노네인(bp 151°C), 1-옥탄올(bp 196°C),
 파라알데하이드, 펜타인, 2,4-펜탄다이온(bp 140°C), 3-펜탄올(bp 141°C),
 펜탄올(bp 137°C), 3-펜탄올(bp 115°C), 2-펜탄올(bp 119°C), 4-펜탄알, 페놀(bp
 182°C), 페닐 에테르(bp 259°C), γ-피코라인(bp 145°C), 프로판올(bp 97°C),
 프로피온알데하이드, 프로피오닉 산(bp 141°C), 프로피오니트릴(bp 97°C),
 프로필 아세테이트(bp 102°C), 프로필 클로라이드(bp 46°C), 프로필렌
 클로로하이드린(bp 126°C), 프로필렌 다이클로라이드(bp 95°C), 프로필렌
 옥사이드(bp 34°C), 스티렌(bp 145°C), 테트라클로로에틸렌(bp 121°C),
 1,2,3,6-테트라하이드로벤젠알데하이드, 테트라하이드로벤조니트릴, 톨루엔(bp
 111°C), 트리아릴아민, 트리부틸 아민(bp 214°C), 1,1,2-트라이클로로에탄,
 1,1,2-트라이클로로에틸렌(bp 87°C), 1,1,2-트라이클로로트라이플로로에탄(bp
 47°C), 트라이데칸올(bp 155°C), 트라이데실 아크릴레이트(bp 150°C),

1,1,3-트라이클로로트라이플로로에탄(bp 47°C), 트라이데칸올(bp 155°C),
 프라이데실 아크릴레이트(bp 150°C), 1,1,3-트라이에톡시에탄,
 1,1,3-트라이에톡시프로판, 트라이에틸 아민(bp 88°C), 트라이글라이콜
 다이클로라이드(bp 265°C), 바렐알데하이드, 발레릭 산(bp 110°C), 비닐
 아세테이트(bp 72°C), 비닐아릴 에테르, 비닐 벤조에이트(bp 95°C), 비닐부틸
 에테르(bp 94°C), 비닐-2-클로로에틸(bp 109°C), 에테르(bp 34°C), 비닐
 크로토네이트(bp 133°C), 비닐에틸 에테르(bp 33°C), 비닐-2-에틸
 헥사오네이트(bp 128°C), 비닐-2-에틸헥실 에테르(bp 177°C), 2-비닐-5-에틸
 피리딘, 비닐아이소부틸 에테르(bp 83°C), 비닐 아이소부티레이트, 비닐
 아이소프로필 에테르, 비닐-2-메틸펜타오네이트(bp 193°C), 비닐
 프로필 에테르(bp 65°C), 피리딘(bp 115°C), 피페리딘(bp 106°C),
 1,3-다이메틸벤젠(bp 139°C), 다이뷰틸이서(bp 142°C), 트라이뷰틸아민(bp 214°C),
 에탄올(bp 78°C), 메탄올(bp 64°C), 노말-프로판올(bp 97°C), 아이소프로판올(bp
 82°C), 노말부탄올(bp 117°C), 아이소부탄올(bp 107°C), 테트라부탄올(bp 82°C),
 벤질알콜(bp 205°C), 벤젠(bp 80°C), 아세톤사이아노하이드린(bp 95°C),
 아크로레인(bp 53°C), 및 아크릴로나이트릴(bp 77°C).

- [337] 나아가, 상기 혼합 액체는 하기에 예시로 든 3 성분계 수계 공비혼합물일 수
 있다: 물/아세톤/X1 (X1: 카본다이설파이드, 아이소프렌, 아이소프로필 에테르 중
 어느 하나), 물/에탄올/X2 (X2: 아세탈, 아크릴로나이트릴, 벤젠,
 브로모다이클로로메탄, 1-브로모프로판, 부테닐메틸 에테르,
 부테닐메틸 에테르, 부틸아민, 부틸알데하이드, 카본다이설파이드,
 카보테트라클로라이드, 클로로폼, 1-클로로-2-메틸프로펜, 크로톤알데하이드,
 사이클로헥산, 사이클로헥산, 1,2-다이클로로에탄, 시스-1,2다이클로로에틸렌,
 트랜스-1,2-다이클로로에틸렌, 다이에톡시메탄, 다이에틸포름알,
 에틸아크릴레이트, 에틸부틸 에테르, 에틸클로로아세테이트,
 에틸렌다이클로라이드, 에틸아이소부틸 에테르, 헵탄, 헥산,
 아이소부틸클로라이드, 아이소프로필아세테이트, 아이소프로필 에테르,
 메틸부틸 에테르, 메틸에틸케톤, 프로필아이소프로필 에테르, 톨루엔,
 트라이에틸아민, 비닐아이소부 에테르, 비닐프로필 에테르, 아세토니트릴 중
 어느 하나), 물/아세토니트릴/X3 (X3 : 벤젠, 트라이클로로에틸렌,
 트라이에틸아민 중 어느 하나), 물/아릴알콜/X4 (X4 : 아릴 에테르, 벤젠,
 카보테트라클로라이드, 사이클로헥센, 헥센, 톨루엔, 트라이클로로 에틸렌 중
 어느 하나), 물/벤젠/X5 (X5 : 아이소프로판올, 아이소프로판올, 2-부탄올,
 2-메틸-2-프로판올, 프로판올, 프로필알콜 중 어느 하나), 물/1-부탄올/X6 (X6 :
 부틸아세테이트, 부틸아크릴레이트, 부틸이서, 비닐부틸이서 중 어느 하나),
 물/2-부탄올/X7 (X7 : 부틸이서, 사이클로헥센, 다이아이소부틸렌, 헥센,
 카보테트라클로라이드, 헥센, 카보테트라클로라이드, 사이클로헥산 중 어느
 하나), 물/t-부틸알콜/카보테트라클로라이드, 물/메탄올/X8 (X8 :

카본다이설파이드, 클로로폼, 메틸클로로아세테이트 중 어느 하나),
 물/프로판올/X9 (X9 : 카본테트라클로라이드, 1,3-사이클로헥세다이엔, 다이에틸
 케톤, 다이프로필아세탈, 프로필에테르, 프로필아세테이트,
 트라이클로로에틸렌, 아이소프로필에테르, 사이클로헥산 중 어느 하나),
 물/아이소프로판올/X10 (X10 : 다이아이소부틸렌, 에틸부틸에테르,
 에틸렌다이클로라이드, 아이소프로필에테르, 메틸에틸케톤,
 아이소프로필에테르, 메틸에틸케톤, 톨루엔, 사이클로헥산 중 어느 하나),
 물/사이클로 헥산/2-메틸-2-프로판올, 물/비닐-2-에틸헥실에테르/X11 (X11:
 2-메톡시에탄올, 2-에톡시에탄올), 물/플루오실리식산/하이드로플루오릭산,
 물/포름산/m-자일렌, 물/아이소아밀아세테이트/아이소프로필아세테이트,
 물/3-펜탄온/n-프로필알콜.

[338] 이에 더하여, 상기 혼합액체는 물과 환경호르몬의 혼합액일 수 있다. 상기
 환경호르몬은 1,4-다이옥세인, 17 β -에스트라디올, 에스트론, 에스트리올,
 β -시토스테롤, 제니스테인, 다이드제인 또는 제라레온(zeraleon),
 17 α -에티닐에스트라디올(EE2), 메스트라놀(ME), 디에틸스틸베스트롤(DES),
 4-노닐 페놀(NP), 4-tert-옥틸 페놀(OP), 비스페놀 A(BPA), 트리부틸틴(TBT),
 메틸수은, 프탈레이트, PAK 또는 PCB일 수 있다.

[339] 다른 예에서, 상기 혼합액체는 물과 휘발성 유기 화합물의 혼합액일 수 있다.
 상기 휘발성 유기 화합물은 아세트알데하이드, 아세틸렌, 아세틸렌
 다이클로라이드, 아크로레인, 아크릴로니트릴, 1,3-부타디엔, 사염화탄소,
 1,2-다이클로로에탄, 포름알데하이드, 메틸에틸케톤, 또는 프로필렌 옥사이드일
 수 있다.

[340] 또 다른 예에서, 상기 혼합액체는 라세미 혼합물일 수도 있다.

[341] 상기 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체를 사용하는 경우, 상기 서로 섞임성
 있는 다수의 액체들을 함유하는 다성분계 혼합액체 나아가, 기존 분리가 매우
 어렵다고 알려진 수계 공비혼합물을 ppb(part per billion)이하의 분리능으로
 효과적으로 분리가 가능할 수 있다. 특히, 수계 환경으로부터 부탄올, 메탄올,
 아세톤을 분리하는 것은 최근 석유산업 및 바이오매스 공정에서 중요한
 핵심기술들 중 하나인데, 상기 3차원 유기 구조체를 구비하는 분리체를
 사용하는 경우, 이러한 물질을 pb(part per billion)이하의 분리능으로 매우 빠른
 시간 내에 효과적으로 분리할 수 있다.

[342]

[343] 자가 조립 3차원 유기 구조체를 함유하는 광학층

[344] 본 실시예에 따른 광학층은 상기 화학식 1 내지 3으로 나타낸 유기 화합물의
 자가 조립에 의해 형성된 3차원 유기 구조체 즉, 유기 결정, 일 예로서 도 1을
 참조하여 설명한 3차원 유기 구조체를 함유할 수 있다.

[345]

[346] 3차원 유기 구조체를 구비하는 광학층 제조방법

- [347] 앞서 기술된 3차원 유기 구조체 제조방법에 의해 얻어진 3차원 유기 구조체를 사용하여 광학층을 제조할 수 있다. 광학층을 제조하는 구체적 방법은 다음과 같을 수 있다.
- [348] 제1 실시예에 따른 광학층 제조방법
- [349] 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 용해할 수 있는 제1 용매와 상기 제1 용매와 섞임성 있는 제2 용매의 혼합 용매 내에, 상기 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 넣어 용액을 만든 후, 상기 용액을 지지체 상에 코팅하여 광학층을 형성할 수 있다. 이 때, 제1 용매와 상기 제2 용매는 1:1 내지 7:1, 구체적으로는 1:1 내지 4:1, 일 예로는 1.5:1 내지 2.5:1의 부피비로 혼합될 수 있으며, 상기 용액은 5mM 내지 50mM 일 예로서, 5mM 내지 40mM, 다른 예로서, 1mM 내지 30mM의 농도를 가질 수 있다. 또한, 상기 코팅은 스핀코팅, 딥코팅, 바코팅, 슬롯다이 코팅, 스프레이코팅, 롤투롤코팅, 또는 인버스롤코팅일 수 있다. 상기 제1 용매는 일 예로서, 클로로포름일 수 있고, 상기 제2 용매는 일 예로서, 에틸아세테이트일 수 있다.
- [350] 제2 실시예에 따른 광학층 제조방법
- [351] 또 다른 예에서, 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 용해할 수 있는 제1 용매와 상기 제1 용매와 섞임성 있는 제2 용매의 혼합 용매 내에, 상기 3차원 구조체와 혼화성이 있는 선택된 고분자를 넣어 제1 용액을 형성한 후, 상기 제1 용액 내에 상기 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 넣어 제2 용액을 형성하고, 상기 제2 용액을 지지체 상에 코팅하여 광학층을 형성할 수 있다. 상기 제1 용매는 일 예로서, 클로로포름일 수 있고, 상기 제2 용매는 일 예로서, 에틸아세테이트일 수 있다. 이러한 분리체는 그 내부에 상기 3차원 구조체를 함유하는 영역과 상기 고분자를 함유하는 영역으로 미세 상분리될 수 있다. 이 때, 제1 용매와 상기 제2 용매는 1:1 내지 7:1, 구체적으로는 1:1 내지 4:1, 일 예로는 1.5:1 내지 2.5:1의 부피비로 혼합될 수 있으며, 상기 제1 용액은 1mM 내지 20mM의 농도를 가질 수 있고, 상기 제2 용액은 5mM 내지 50mM 일 예로서, 5mM 내지 40mM의 농도를 가질 수 있다. 또한, 상기 코팅은 스핀코팅, 딥코팅, 바코팅, 슬롯다이 코팅, 스프레이코팅, 롤투롤코팅, 또는 인버스롤코팅일 수 있다. 일 수 있다. 상기 고분자는 PVC(Polyvinyl chloride), PA(Polyamide), PE(polyethylene), PES(Polyethersulfone), PTFE(Polytetrafluoroethylene), 폴리다이메틸실록산(PDMS), PMMA(Poly(methyl methacrylate)), HDPE(high-density polyethylene), LDPE(low-density polyethylene), PP(Polypropylene), PS(polystyrene), PVAC(Polyvinyl acetate), PEO(polyethylene oxide), NYLON, PET(polyethylene terephthalate), PI(polyimide), 또는 이들 중 둘 이상의 조합일 수 있다.
- [352] 제3 실시예에 따른 광학층 제조방법
- [353] 상기 제1 및 제2 실시예에서, 제1 용매와 상기 제1 용매의 혼합 용매를 사용하는 대신에, 3차원 구조체를 함유하는 파우더를 용해 또는 분산할 수 있는 단일

용매를 사용할 수도 있다.

[354] 제4 실시예에 따른 광학층 제조방법

[355] 상기 제1, 제2, 및 제3 실시예들의 용액들 또는 분산액들은 산화방지제를 더 함유할 수 있다. 상기 산화방지제는 상기 용액 내에 0.5 내지 3 중량%, 일 예로서 1 내지 2 중량%로 함유될 수 있다. 상기 산화방지제는 1차 산화방지제와 2차 산화방지제일 수 있다. 이 때, 1차 산화방지제는 라디칼 포착제(radical scavenger)일 수 있고, 2차 산화방지제는 과산화물 분해제(hydroperoxide decomposer)일 수 있다. 상기 1차 산화방지제와 2차 산화방지제는 1:1 내지 1:3의 중량비로 함유될 수 있다.

[356] 상기 1차 산화 방지제는 페놀계(phenolics-), 모노페놀계(monophenolics-), 비스페놀계(bisphenolics-), 고분자형 페놀 산화 방지제(polyphenol antioxidants), 아민계 산화 방지제(amine-based antioxidants), 또는 이들의 조합일 수 있다. 또한, 상기 2차 산화 방지제는 황계(phosphoric-based antioxidants), 인계 산화 방지제(phosphates-based antioxidants), 또는 이들의 조합일 수 있다.

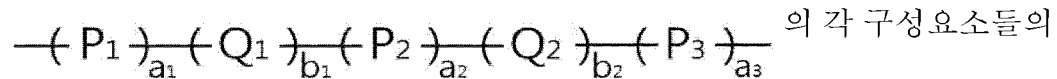
[357] 페놀계 산화 방지제는 페놀계, 모노페놀계, 바이페놀계, 폴리페놀계 및 티오비스페놀계 또는 힌더드 페놀계(hindered phenolics)일 수 있다. 고분자 폴리페놀계로는 테트라키스(메틸렌-3,5-디-*t*-부틸-4-하이드록시페닐하이드로시나메이트)메탄(tetrakis(methylene-3,5-di-*t*-butyl-4-hydroxyphenyl)hydrocinnamate)methane) 또는 옥타데실-3-(3,5-디-3급-부틸-4-하이드록시페닐)-프로피오네이트(octadecy-3-(3,5-di-*tert*-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate)일 수 있다. 아민계 산화 방지제는 상기 페놀계와 유사하게 수소 공여(Hydrogen donation)의 역할을 하며, 높은 온도에서는 과산화 분해제(Peroxide decomposer)의 역할도 한다. 이러한 아민계 산화 방지제로는 알킬 치환 페닐아민(alkyl-substituted phenylamine), 디아릴-*p*-페닐렌디아민(diaryl-*p*-phenylene amine) 혹은 그 치환체 등의 *p*-페닐렌의 아민의 N 치환체, 또는 6-에톡시-2,2'-4-트리메틸-1,2-디히드록시노린(6-ethoxy-2,2'-4-trimethyl-1,2-dihydroxynorine) 등의 치환된 크놀린, 2,2', 6,6'-테트라알킬피페리진(2,2', 6,6'-tetraalkylpiperazine) 등의 치환된 피페리진일 수 있다.

[358] 상기 황계 산화 방지제는 장기간 열에 노출되는 분야에 효과적인 과산화 분해제로서 디라우릴 3,3'-티오-디프로피오네이트(dilauryl 3,3'-thio-dipropionate), 또는 디미리스틸 3,3'-티오-디프로피오네이트 (dimiristyl 3,3'-dipropionate, DMTP)일 수 있다. 상기 인계 산화 방지제는 과산화수소를 알콜로 변화시킨 후 자신은 포스파이트(Phosphates)로 변환될 수 있다. 이러한 인계 산화 방지제로는 트리알킬포스파이트(trialkylphosphite, 알킬 : 이소데실(isodecyl-), 트리데실(tridecyl-)), 페닐알킬포스파이트(phenylalkyl-di-phosphite, 알킬 : 이소데실, 이소옥틸(isooctyl)), 디페닐알킬포스파이트(diphenylalkylphosphite, 알킬 : 이소데실, 이소옥틸), 트리페닐포스파이트(triphenylphosphite),

포스파라스아시드(1,1-비페닐-4,4'-딜, 1, 1-buphenyl-4,4'-dyl),
 비스테트라(2,4-비스(1,1'-디메틸에틸)페닐)
 에스테르(bis-tetra(bis(1,1'-dimethylethyl)phenyl)),
 3,5-디-t-부틸-4-히드록시벤질포스페이트디에틸에스테르(3,5-di-t-butyl-hydroxybenzylphosphate-diethylester),
 9,10-디히드로-9-크시-10-포스포페날트렌-10-옥사이드(9,10-dihydro-9-xy-10-phosphonaltrene-10-oxide),
 소듐비스(4-t-부틸페닐)포스파이트(sodium(4-t-butylphenyl)phosphite),
 소듐-2,2'-메틸렌-비스(4,6-디-t-부틸페닐)포스페이트(sodium-2,2-methylene-bis(4,6-di-t-butylphenyl)phosphate),
 1,3-비스(디페녹시포스포닐옥시)벤젠(1,3-bis(diphenoxyphosphonyloxy)benzene),
 비스(2,6-디-t-부틸-4-메틸페닐)펜타에리스리톨포스파이트(bis(2,6-di-t-butyl-4-methylphenyl)pentaerythritolphosphate),
 트리스(2,4-디-t-부틸페닐)포스파이트(tris-(2,4-di-t-butylphenyl)phosphite)), 또는
 2,2-메틸렌비스(4,6-디-t-부틸페닐)옥틸포스파이트(2,2-methylene-bis-(4,6-di-t-butylphenyl)octylphosphite)일 수 있다.

- [359] 이와 더불어서, 상기 용액은 부틸히드록시아니솔, 디부틸히드록시톨루엔, 비타민c, 토코페롤, 레시틴, 몰식자산프로필, 터셔리부틸히드로퀴논, 에리쓰르빈산류, 아스코빌 파르미데이트, L-아스코르1보스테아레이트으로 이루어진 생체안정성이 검증된 군으로부터 선택된 1종 이상의 생체 안정성을 갖는 산화방지제를 더 포함할 수 있다.
- [360] 제5 실시예에 따른 광학층 제조방법
- [361] 또 다른 예에서, 3차원 구조체를 함유하는 파우더 20 내지 75 중량%, 상기 3차원 구조체와 혼화성이 있는 고분자 5 내지 75%, 및 잔량의 산화방지제를 혼합하여 혼합물을 형성한 후, 이를 지지체 상에 코팅하여 광학층을 형성할 수 있다. 또한, 상기 코팅은 스핀코팅, 딥코팅, 바코팅, 슬롯다이 코팅, 스프레이코팅, 롤투롤코팅, 또는 인버스를코팅일 수 있다. 상기 고분자는 제2 실시예에 따른 광증폭층 제조방법에서 기술된 바와 같을 수 있고, 상기 산화방지제는 제4 실시예에 따른 광학층 제조방법에서 기술된 바와 같을 수 있다.
- [362] 상기 광학층은 50 내지 500nm 두께를 가질 수 있고, 구체적으로는 100 내지 200nm의 두께를 가질 수 있다.
- [363] 이러한 광학층은 주기적이며 규칙적인 3차원적 유기구조체층으로서, 유전율이 0에 가까운 메타물질로서의 특성과 위상학적 절연체로서의 특성이 혼합되어, 광증폭소재로서 그 우수한 특성을 나타낼 수 있다.
- [364] 구체적으로, 상기 광학층의 메타물질로서의 특성은 주기적이고 규칙적인 3차원 구조체에 기인한다. 이 3차원 구조체의 격자 간격에 의해 정의되는 파장 범위 내에서, 상기 광학층은 유전율이 1보다 작은 구체적으로는 0에 가까운

특성을 나타내고, 이에 따른 공간 뒤틀림(space distortion)으로 인한 타원 분산(elliptic dispersion)에 따라 광증폭 특성을 나타낼 수 있다. 이러한 격자 간격은 도 1에 도시된 -A-(L)n-Y-X들 즉, 상기 화학식 1에 나타난 화합물들이 의 -A1-(L1)n1-Y1-X1 또는 -A2-(L2)n2-Y2-X2 의 길이에 의해 조절할 수 있다. 더 구체적으로는 Y1과 Y2들 구체적으로,



설정에 의해 조절될 수 있다. 일 예로서, 주기적이고 규칙적인 3차원 구조체를 형성하는 화합물이 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)인 경우, 격자 간격은 약 3.4 nm일 수 있고 이에 따라 약 300nm 이하의 범위에서 유전율이 1보다 작은 구체적으로는 0에 가까운 메타물질로서의 특성을 나타낼 수 있다.

- [365] 이러한 메타물질로서의 특성을 나타내는 상기 광학층은 광증폭 특성 이외에도, 광학층 내에서는 일반 매질에서와 같은 소실파가 발생하지 않아 일반 매질의 분해능의 한계를 넘어설 수 있다. 또한, 광학층 안에서 전자기파의 손실이 없게 됨에 따라, 유전율이 1보다 낮은 영역에 대하여 전자기파가 가이드되거나 증폭되는 특성을 가질 수 있다. 이런 특성을 이용하면 새로운 자기공명 이미지, 새로운 근적외선, 가시광선, 또는 자외선 영역에 대한 광회로(novel optical circuit), 회절한계를 넘어서는 슈퍼렌즈, 전자기파에 대하여 스위칭과 변조가 가능한 조절가능한 메타물질(tunable metamaterials) 등으로 사용될 수 있다. 뿐만 아니라 보다 실용적인 영역에 대하여 투명망토(invisible cloacks), 환영광학(illusion optics), 광학적 블랙홀(optical black hole), 빔시프터(bean shifter), 필드 회전체(field rotators), 광 집중체(light concentrators), 비손실 전자기파 가이드 물질(lossless waveguide bends) 등으로 사용이 가능하다.

- [366] 한편, 위상학적 절연체(topological insulator)를 구현할 수 있는 조건은 1) 격자 대칭성(lattice symmetry)과 2) 스핀-궤도 결합(spin-orbital coupling)으로 알려져 있다. 본 실시예에 따른 주기적이고 규칙적인 3차원 구조체는 격자 대칭성을 나타낼 수 있다. 또한, 이 구조체 내에 주기적이고 규칙적으로 배치된 방향족 고리들로 인해 스핀-궤도 결합현상이 발생할 수 있다. 이에 따라, 주기적이고 규칙적인 3차원 구조체를 구비하는 광학층은 위상학적 절연체로서의 특징을 가질 수 있다. 따라서, 본 실시예에 따른 광학층은 디랙 밴드 구조를 가질 수 있으며, 방향족 고리기들의 주기적이고 규칙적인 배열에 의해 발생하는 디랙 플라즈몬은 국소적 표면 플라즈몬 공명을 야기하게 되므로 외부에서 들어오는 빛에 대하여 증폭효과를 갖게 될 수 있다. 이러한 위상학적 절연체로 특성을 나타내는 상기 광학층은 자기적 특성을 갖는 위상학적 절연체, 전기적 특성을 갖는 위상학적 절연체로 확장되어, 양자컴퓨터, 테라헤르츠 대역의 디텍터, 스핀트로닉스의 디바이스, 파장가변 광증폭기(tunable amplifier)로도 사용할 수 있다.

- [367] 또한, 상기 광학층은 규칙적이며 주기적인 3차원적 유기구조체 내의 방향족 고리들의 쿼드라폴 이상의 전기다중극자의 비등방적인 특성에 의해 발생하는 다양한 선형 또는 비선형광학 특성을 보일 수 있다. 이를 이용하여 상기 광학층은 n 차수 분극에 의한 n 고조파의 발생소재와 합주파수와 차주파수에 의한 광파라메트릭 증폭소재, 광 파라메트릭 발생소재, 광 파라메트릭 진동소재, 자기속박효과에 의한 전자기파 속박소재, 전자기파 자기집속소재 등 다양한 범위로 사용이 가능하다. 이러한 비등방적인 특성이 메타물질적 특성과 시너지를 일으키는 경우 선형 또는 비선형 메타물질(non-linear metamaterial)로서의 기능을 갖으며, 이 경우 거대 국소장에 대한 증폭기(giant local field amplifier), 히스테릭 트랜지션소재(hysteretic transition), 특이한 파장 혼합기(unusual wave mixer), 고립파 전달체(solitary wave propagation), 제 2 고조파를 이용한 백워드 페이즈 매칭소재(backward phase matching materials), 광 파라메트릭 증폭기(optical parametric amplifier) 등에 사용이 가능하다.
- [368] 이와 같이, 광학층은 메타물질로부터 기인되는 특성과 위상학적 절연체로부터 기인되는 특성을 모두 확보하는데, 메타물질로서의 특성은 회절 한계를 넘어서는 슈퍼렌즈[Nature materials, 7.6, 435-441 (2008)], 빛의 왜곡을 통한 투명화 소재[Nature photonics, 1.4, 224-227 (2007)], 슈퍼리어 특성을 이용한 안테나[Antennas and Wireless Propagation Letter, IEEE, 8, 295-298 (2008)] 등으로 사용이 가능하다. 뿐만 아니라, 최근 메타물질의 구조적 특징 뿐만 아니라 메타물질을 이루는 기본 단위물질에 대한 관점이 다양해짐에 따라 가변 밴드갭 소재[physical review B 70.23 235109 (2004)], 나노레이저[Physical Review B 75.8 085436 (2007)], 특정 밴드갭에 대한 전자기파를 차단 할 수 있는 전자기파 차폐소재[Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions 58.1, 195-202 (2010)]로 사용이 제안되고 있으며, 더 나아가 테라헤르츠 대역에 대한 흡수체[Applied Physics Letter, 100.11, 111104 (2012)], 구배 굴절율 렌즈 소재(GRIN)[U.S. Patent No. 7, 570, 432., 4 Aug (2009)], 광학적 전기적 제어가 가능하고 메모리로 사용 가능한 테라헤르츠 능동소자[Science 325, 5947, 1518-1521 (2009)] 등으로 사용이 가능해질 수 있다.
- [369]
- [370] 광증폭층을 포함하는 광학소자
- [371] 앞서 설명한 3차원 유기 구조체를 구비하는 광학층을 광학소자 내의 광증폭층으로 적용한 예시를 하기에서 설명하기로 한다.
- [372]
- [373] 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 발광다이오드를 나타낸 단면도이다.
- [374] 도 3을 참조하면, 소자 영역 및 상기 소자 영역을 둘러싸는 주변 영역을 구비하는 베이스 기판(101)을 제공한다. 상기 베이스 기판(101)은 실리콘 기판, 금속 기판, 또는 세라믹 기판일 수 있다. 상기 소자 영역은 후술하는

발광다이오드 반도체 칩이 실장되는 영역이고, 상기 주변영역은 그 외의 영역일 수 있다. 상기 베이스 기판(101)은 그의 소자 영역 상에 본딩 패드들(102, 103)을 구비할 수 있다. 상기 베이스 기판(101)의 주변 영역 상에 캐버티(105a)를 갖는 하우징(105)을 배치할 수 있다. 상기 캐버티(105a) 내에 상기 본딩 패드들(102, 103)의 일부들이 노출될 수 있다. 상기 하우징(105)은 실리콘, 금속, 세라믹 또는 수지로 형성될 수 있다. 상기 베이스 기판(101)과 상기 하우징(105)은 서로 분리되지 않은 일체형일 수 있다.

- [375] 상기 캐버티(105a) 내에 노출된 본딩 패드들 중 하나(102)에 발광다이오드 칩(C)을 배치한다. 상기 발광다이오드 칩(C)은 n형 반도체층, p형 반도체층 및 이들 사이에 개재된 광활성층을 구비한다. 상기 광활성층은 n형 반도체층과 p형 반도체층 사이의 공핍영역이거나 혹은 별도로 도입된 층일 수 있다. 상기 이러한 발광다이오드 칩(C)은 상기 n형 반도체층과 상기 p형 반도체층 사이에 전계를 인가할 때, 전자와 정공이 상기 광활성층 내에서 재결합하면서 발광한다. 상기 발광다이오드 칩(C)은 GaAlAs계, AlGaIn계, AlGaInP계, AlGaInPAs계, GaN계 중 어느 하나일 수 있다. 또한, 상기 발광다이오드 칩(C)은 가시광, 자외선광 또는 적외선광을 방출하는 소자일 수 있다. 상기 발광다이오드 칩(C)의 n 전극과 p 전극을 와이어들(W)을 통해 상기 본딩 패드들(102, 103)에 각각 전기적으로 연결될 수 있다.
- [376] 상기 캐버티(105a) 내에 상기 캐버티(105a)를 채우는 유기 봉지층(110)이 배치될 수 있다. 상기 유기 봉지층(110)은 광투과성 수지와 광변환체를 함유할 수 있다. 상기 광변환체는 상기 발광다이오드 칩(C)에서 발생된 광을 더 낮은 파장의 광으로 변환시키기 위한 것으로서, 형광체 또는 양자점일 수 있다. 이 때, 백색 소자가 구현될 수 있다.
- [377] 상기 유기 봉지층(110) 상에 유리 봉지층(120)을 형성할 수 있다. 상기 유리 봉지층(120)은 상기 발광다이오드 칩(C)의 위치에 대응하는 렌즈부(120a)를 가질 수 있다. 상기 유기 봉지층(120) 상에 반사방지막(130)이 배치될 수 있다.
- [378] 상기 발광다이오드의 광활성층으로부터 발생하는 광이 진행하는 경로 상에 즉, 상기 광활성층과 외부 사이에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 구체적으로, 상기 반사방지막(130) 상에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 상기 광증폭층(LAL)은 상기 유리 봉지층(120)과 상기 반사방지막(130) 사이, 상기 유리 봉지층(120)과 상기 유기 봉지층(110) 사이, 또는 상기 유기 봉지층(110)과 상기 발광다이오드 칩(C) 사이에 배치될 수 있다.
- [379] 도 3에 나타난 발광다이오드는 발광다이오드 모듈일 수 있다. 그러나, 본 발명은 이에 한정되지 않고 상기 발광다이오드 칩(C) 또는 상기 발광다이오드 모듈이 다수 개 배열된 발광다이오드 어레이로도 구현가능하다.
- [380]
- [381] 도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 유기발광다이오드 또는 양자점발광다이오드 패넌을 나타낸 단면도이다. 이러한 유기발광다이오드

또는 양자점발광다이오드 패널은 디스플레이 패널 또는 조명 패널일 수 있다. 디스플레이 패널의 경우 도 4에 도시된 단위 화소가 매트릭스 형태로 배열되어 있을 수 있다. 조명 패널의 경우 도 4에 도시된 단위 모듈일 수도 있고, 이러한 단위 모듈이 다수 개 배열된 어레이 형태일 수도 있다.

- [382] 도 4를 참조하면, 유기발광다이오드 또는 양자점발광다이오드 패널(200)은 소자 기판(210) 상에 배치된 화소 전극(230), 상기 화소 전극(230) 상에 배치된 발광 기능층(250), 상기 발광 기능층(250) 상에 배치된 공통 전극(270), 및 상기 공통 전극(270) 상에 배치된 봉지 기판(290)을 구비할 수 있다. 상기 공통 전극(270)과 상기 봉지 기판(290) 사이에 수분과 산소를 차단 또는 흡수하는 봉지재(280)가 배치될 수 있다.
- [383] 디스플레이 패널의 경우, 상기 소자 기판(210) 상에 상기 화소 전극(230)에 전기적으로 연결되고, 상기 화소 전극(230)에 전기적 신호를 공급 또는 차단하는 박막트랜지스터(220)가 배치될 수 있다. 구체적으로, 상기 소자 기판(210) 상에 버퍼층(215)이 배치될 수 있다. 상기 버퍼층(215) 상에 소오스/드레인 영역들 및 이들 사이에 배치된 채널 영역을 구비하는 반도체층(221)이 배치될 수 있고, 상기 반도체층(221) 상에 게이트 절연막(223)이 배치될 수 있으며, 상기 게이트 절연막(223) 상에 상기 반도체층(221)이 상부를 가로지르는 게이트 전극(225)이 배치될 수 있다. 상기 게이트 전극(225) 상에 상기 게이트 전극(225)을 덮는 제1 층간절연막(226)이 배치될 수 있고, 상기 제1 층간절연막(226) 상에 상기 제1 층간절연막(226) 및 상기 게이트 절연막(223)을 관통하여 상기 소오스/드레인 영역들에 각각 접속하는 소오스/드레인 전극들(227)이 배치될 수 있다. 상기 소오스/드레인 전극들(227) 상에 상기 소오스/드레인 전극들(227)을 덮는 제2 층간절연막(229)이 배치될 수 있으며, 상기 제2 층간절연막(229) 상에 상기 화소 전극(230)이 배치될 수 있다. 상기 화소 전극(230)은 ITO(Indium Tin Oxide)나 IZO(Indium Zinc Oxide) 등의 광투과 또는 투명 도전막일 수 있다.
- [384] 상기 화소 전극(230) 상에 상기 화소 전극(230)을 노출하는 개구부를 구비하는 화소 정의막(235)이 배치될 수 있다. 상기 개구부는 발광영역(ER)을 한정할 수 있다. 상기 개구부 내에 노출된 화소 전극(230) 상에 발광 기능층(250)이 배치될 수 있다. 상기 발광 기능층(250)은 발광층인 광활성층을 구비할 수 있다. 상기 발광층은 유기 발광층이거나 양자점 발광층일 수 있다. 상기 발광 기능층(250)은 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층, 및 전자주입층 중 적어도 하나 이상을 더 포함할 수 있다. 상기 공통 전극(270) 또한 광투과 또는 투명전극으로서, 예를 들어, 알루미늄, 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 인듐, 이트륨, 리튬, 은, 납, 세슘 등의 금속 또는 이들의 2종 이상의 조합을 사용하여 형성될 수 있다.
- [385] 상기 화소 전극(230)과 상기 공통 전극(270) 사이에 전계가 인가될 때, 상기 화소 전극(230)에서 주입된 정공과 상기 공통 전극(270)에서 주입된 전자가 상기 발광 기능층(250)의 발광층 내에서 재결합하여 광을 방출할 수 있다. 상기 소자 기판(210)과 상기 봉지 기판(290) 중 적어도 하나는 광투과 기판으로서, 유리

기관 또는 수지 기관일 수 있다. 일 예로서, 상기 소자 기관(210)은 광투과 기관이고 상기 봉지 기관(290)은 광반사 기관일 수 있다. 이 경우, 상기 발광층에서 방출된 광은 상기 소자 기관(210)을 통해서 외부로 방출될 수 있다. 이 경우를 배면 발광형 패널이라고 한다. 다른 예로서, 상기 소자 기관(210)은 광반사 기관이고 상기 봉지 기관(290)은 광투과 기관일 수 있다. 이 경우, 상기 발광층에서 방출된 광은 상기 봉지 기관(290)을 통해서 외부로 방출될 수 있다. 이 경우를 전면 발광형 패널이라고 한다. 또 다른 예로서, 상기 소자 기관(210)과 상기 봉지 기관(290)은 모두 광투과 기관일 수 있다. 이 경우, 상기 발광층에서 방출된 광은 상기 소자 기관(210)과 상기 봉지 기관(290) 모두를 통해서 외부로 방출될 수 있다. 이 경우를 양면 발광형 패널이라고 한다. 또한, 상기 소자 기관(210)과 상기 봉지 기관(290)이 모두 수지 기관일 때, 플렉서블 소자가 구현될 수 있다.

- [386] 상기 유기발광다이오드 패널의 발광층으로부터 발생하는 광이 진행하는 경로 내에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 구체적으로, 배면 발광형 패널인 경우, 상기 소자 기관(210)의 하부면 상에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고, 상기 소자 기관(210)과 상기 버퍼층(215) 사이, 상기 버퍼층(215)과 상기 박막트랜지스터(220) 사이, 상기 박막트랜지스터(220)와 상기 제1 층간절연막(226) 사이, 또는 상기 제1 층간절연막(226)과 상기 화소 전극(230) 사이에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 한편, 전면 발광형 패널인 경우, 상기 봉지기관(290) 상에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 상기 광증폭층(LAL)은 상기 봉지기관(290)과 상기 봉지재(280) 사이, 또는 상기 봉지재(280)와 상기 공통 전극(270) 사이에 배치될 수 있다. 다른 한편, 양면 발광형 패널인 경우 상기 배면 발광형 패널인 경우와 상기 전면 발광형 패널인 경우의 광증폭층(LAL)의 위치를 조합할 수 있다.

[387]

- [388] 한편, 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층은 여러 조명장치들에 사용될 수 있다. 구체적으로, 각 조명장치 내에서 광이 진행하는 경로 내에 광증폭층이 배치될 수 있다. 상기 조명장치는 발광다이오드 모듈, 발광다이오드 어레이, 유기발광다이오드 조명 모듈, 양자점발광다이오드 조명 모듈, 유기발광다이오드 어레이, 양자점발광다이오드 어레이, 형광등, 백열등 등일 수 있다.

[389]

- [390] 도 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 액정디스플레이를 나타낸 단면도이다.

- [391] 도 5를 참조하면, 액정디스플레이는 액정표시장치는 하부 기관(310), 상부 기관(320), 상기 상부 및 하부 기관들(310, 320) 사이에 위치하는 액정층(330)을 포함한다.

- [392] 상기 하부 기관(100)은 하부 베이스 기관(311)을 포함한다. 상기 하부 베이스

기관(311)은 광투과 기관으로서, 유리 기관일 수 있다. 상기 하부 베이스 기관(311)의 상부면 상에 박막트랜지스터(미도시)를 형성할 수 있다. 상기 박막트랜지스터 상에 상기 박막트랜지스터를 덮는 층간절연막(313)을 형성할 수 있다. 상기 층간절연막(313)은 실리콘 질화막 또는 실리콘 산화막 등의 무기 절연막, 수지 등의 유기 절연막, 또는 이들의 다중층일 수 있다. 상기 층간절연막(313) 상에 화소 전극(315)을 형성할 수 있다. 상기 화소 전극(315)은 상기 층간절연막(313)을 관통하여 상기 박막트랜지스터에 전기적으로 연결될 수 있다. 상기 화소 전극(315)은 ITO(Indium Tin Oxide)나 IZO(Indium Zinc Oxide) 등의 투명한 도전막일 수 있다. 상기 화소 전극(315) 상에 하부 배향막(317)을 형성할 수 있다.

- [393] 상기 상부 기관(320)은 상부 베이스 기관(321)을 포함한다. 상기 상부 베이스 기관(321)은 광투과 기관으로서, 유리 기관일 수 있다. 상기 상부 베이스 기관(321)의 하부면 상에 차광 패턴들(미도시) 및 칼라 필터들(미도시)을 형성할 수 있다. 상기 칼라 필터들 상에 보호막(323)을 형성할 수 있다. 상기 보호막(323)은 실리콘 질화막 또는 실리콘 산화막 등의 무기 절연막, 수지 등의 유기 절연막, 또는 이들의 다중층일 수 있다. 상기 보호막(323) 상에 대향 전극(325)을 형성할 수 있다. 상기 대향 전극(325) 또한 ITO(Indium Tin Oxide)나 IZO(Indium Zinc Oxide) 등의 투명한 도전막일 수 있다. 상기 대향 전극(325) 상에 상부 배향막(327)을 형성할 수 있다. 상기 상부 배향막(327)과 상기 하부 배향막(317)은 서로에 관계없이 폴리 아믹산(poly-amic acid), 폴리 이미드(poly-imide), 레시틴(lecithin), 나일론(nylon), 또는 PVA(polyvinylalcohol)를 사용하여 형성될 수 있다. 상기 액정층(330) 내의 액정은 상기 배향막들에 의해 초기 배향되고, 상기 제1 및 제2 전극들(315, 325) 사이에 가해진 전계에 의해 광차단 또는 광투과 동작을 수행할 수 있다.
- [394] 상기 하부 베이스 기관(311)의 하부면에 인접하여 하부 편광 필름(341)이 배치될 수 있고, 상기 상부 베이스 기관(321)의 상부면에 인접하여 상부 편광 필름(342)이 배치될 수 있다. 상기 하부 편광 필름(341)과 상기 상부 편광 필름(342)은 투과축이 서로 직교하도록 배치될 수 있다.
- [395] 상기 하부 편광 필름(341)의 하부에 백라이트 유닛(350)이 배치될 수 있다. 상기 백라이트 유닛(350)은 차례로 적층된 반사시트(351), 도광판(352), 확산시트(355), 프리즘시트(356), 및 보호시트(357)를 포함할 수 있다. 또한, 도광판(352)의 에지부들에 발광소자(353)와 이를 실장하는 발광소자 실장부(354)가 배치될 수 있다. 상기 발광소자(353)는 냉음극형광램프 또는 도 3을 참조하여 설명한 발광다이오드일 수 있다. 도시된 백라이트 유닛(350)은 발광소자가 에지에 위치하는 에지형이나, 이에 한정되지 않고 직하형일 수도 있다. 이 경우, 상기 발광소자(353)는 상기 반사시트(351)와 확산시트(355) 사이에 위치하고, 상기 도광판(352)은 생략될 수 있다.
- [396] 상기 액정디스플레이 패널의 발광소자(353)로부터 발생하는 광이 진행되는

경로 내에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 구체적으로, 상기 상부 편광 필름(342) 상에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 상기 광증폭층(LAL)은 상기 상부 편광 필름(342)과 상기 상부 베이스 기판(321) 사이, 상기 상부 베이스 기판(321)과 상기 칼라 필터들(미도시) 사이, 상기 칼라 필터들(미도시)과 상기 보호막(323) 사이, 상기 보호막(323)과 상기 대향 전극(325) 사이, 상기 대향 전극(325)과 상기 상부 배향막(327) 사이, 상기 하부 배향막(317)과 상기 화소 전극(315) 사이, 상기 화소 전극(315)과 상기 층간절연막(313) 사이, 상기 층간절연막(313)과 상기 박막트랜지스터(미도시) 사이, 상기 박막트랜지스터(미도시)와 상기 하부 베이스 기판(311) 사이, 상기 하부 베이스 기판(311)과 상기 하부 편광 필름(341) 사이, 상기 하부 편광 필름(341)과 상기 백라이트 유닛(350) 사이, 또는 상기 백라이트 유닛(350) 내에 배치될 수 있다. 상기 백라이트 유닛(350) 내에 배치되는 것은 구체적으로, 상기 보호시트(357)와 상기 프리즘시트(356) 사이, 상기 프리즘시트(356)와 확산시트(355) 사이, 또는 상기 확산시트(355)와 상기 도광판(352) 사이에 배치될 수 있다. 혹은 상기 도광판(352)과 상기 발광소자(353) 사이에 배치될 수 있다.

[397]

[398] 도 6은 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 태양전지를 나타낸 단면도이다.

[399] 도 6을 참조하면, 제1 도전형 반도체층(411) 상에 제2 도전형 반도체층(413)이 배치된다. 상기 제1 및 제2 도전형 반도체층들(411, 413)은 실리콘 반도체층들, 게르마늄 반도체층들, 실리콘게르마늄 반도체층들, 또는 화합물 반도체층들인 무기반도체층들일 수 있다. 이 경우, 상기 제1 및 제2 도전형 반도체층들(411, 413) 사이에 광흡수에 의해 여기자가 생성되는 PN 접합부가 형성될 수 있다. 상기 화합물 반도체층은 III-V족 반도체층으로서, GaAs계, AlAs계, GaP계, 또는 InP계층, 구체적으로 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($0 \leq x \leq 1$), $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ ($0 \leq x \leq 1$)일 수 있다.

[400] 한편, 제1 도전형 반도체층(411)은 칼코게나이드계 물질층일 예로서, I-III-VI₂ 화합물 반도체층 또는 II-VI 화합물 반도체층일 수 있다. I-III-VI₂ 화합물 반도체층은 CuInS_2 (CIS), CuGaS_2 (CGS), CuInSe_2 (CISE), CuGaSe_2 (CGSe), CuAlSe_2 (CAsSe), CuInTe_2 (CITE), CuGaTe_2 (CGTe), Cu(In, Ga)S_2 (CIGS), Cu(In, Ga)Se_2 (CIGSe), $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS), 또는 Cu(In, Ga)Se_2 (CIGS)층일 수 있다. II-VI 화합물 반도체층은 CdTe층일 수 있다. 이 때, 제2 도전형 반도체층(413)은 CdS, Zn(O, S, OH)_x , $\text{In(OH)}_x\text{Sy}$, ZnIn_xSey , ZnSe층일 수 있고, 버퍼층으로 불리워질 수도 있다.

[401] 이들 반도체층들(411, 413)은 결정질 반도체층들, 다결정질 반도체층들 또는 비정질 반도체층들일 수 있다. 나아가, 이들 반도체층들(411, 413)은 박막의 태양전지를 구현가능하게 하는 다결정질 반도체층들 또는 비정질 반도체층들일 수 있다.

[402] 이와는 달리, 상기 제1 및 제2 도전형 반도체층들(411, 413)은 유기

반도체층들일 수 있다. 이 경우, 상기 제1 및 제2 도전형 반도체층들(411, 413) 사이에 광조사에 의해 여기자가 생성되는 광활성층(미도시)을 추가로 형성할 수 있다. 상기 광활성층은 전자 도너 물질과 전자 억셉터 물질이 서로 섞여 있는 벌크-헤테로정선(bulk heterojunction; BHJ)층일 수 있다. 또는 상기 광활성층은 RMX_3 의 화학식을 갖으며 상기 화학식 중 R은 $C_nH_{2n+1}NH_3^+$ (n은 1 내지 0의 정수임), NH_4^+ , $HC(NH_2)_2^+$, CS^+ , NF_4^+ , NCl_4^+ , PF_4^+ , PCl_4^+ , $CH_3PH_3^+$, $CH_3ASH_3^+$, PH_4^+ , ASH_4^+ , SbH_4^+ 및 이들의 조합들로 이루어진 군으로부터 선택되는 1가의 양이온을 포함하고, M은 Pb_2^+ , Sn_2^+ , Ge_2^+ 및 이들의 조합들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 포함하는 2가의 금속 양이온이고, X는 할로젠 음이온일 수 있다. 이 때, 상기 제1 도전형 반도체층(411)은 조밀 TiO_2 층으로서 재결합방지막층으로 불리워질 수 있다.

- [403] 상기 제1 도전형 반도체층(411)의 하부에 반사막을 형성할 수 있다. 상기 반사막은 제1 전극(401)의 역할을 수행할 수도 있다. 상기 제2형 반도체층(413) 상에 제2 전극(420)을 형성할 수 있다. 상기 제2 전극(420)은 광투과성 전극일 수 있으며, 상기 광투과성 전극은 탄소나노튜브층, 그래핀층, 투명전도성산화물층 또는 금속층일 수 있고, 코팅, 열증착, 전자빔 증착, 또는 스퍼터링법을 사용하여 형성할 수 있다.
- [404] 상기 제2 전극(420) 상에 반사방지막(430)이 추가적으로 배치될 수 있다. 반사방지막(430)은 실리콘 나이트라이드막(SiN_x layer)일 수 있다. 상기 제2 전극(420) 또는, 상기 반사방지막(430)이 형성된 경우에는 상기 반사방지막(430) 상에 유리기판(440)이 형성될 수 있다. 상기 유리기판(440)은 1.4 내지 약 1.6의 굴절률을 갖는 실리카(SiO_2)층 또는 실리케이트(silicate)층으로, 일 예로서, 붕규산 글라스(borosilicate glass), 소다라임 글라스(soda-lime glass), 규산알루미늄 글라스(aluminum silicate glass), 또는 SOG(Spin On Glass)일 수 있다. 그러나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [405] 상기 유리기판(440) 상에 보호필름(450)이 배치될 수 있다. 상기 보호필름(450)은 약 1.4 내지 약 1.5의 굴절율을 갖는 PDMS(Polydimethylsiloxane), PMMA(Polymethyl Methacrylate), 또는 EVA(Ethylene Vinyl Acetate)일 수 있다.
- [406] 이러한 태양전지에 광 예를 들어, 태양광이 조사되면 광흡수층 다시 말해서, 상기 제1 및 제2 도전형 반도체층들(411, 413) 사이의 PN 접합부 또는 광활성층은 광자(photon)를 흡수하여 전자-정공 쌍을 생성하고, 상기 전자-정공 쌍은 분리되어 전자는 제2 전극(420)으로 정공은 제1 전극(401)으로 전달되어 전기를 생산하게 된다.
- [407] 상기 태양전지의 광, 예를 들어 태양광이 상기 태양전지 내부로 진행되는 경로 내에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 구체적으로, 상기 보호필름(450) 상에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 상기 광증폭층(LAL)은 상기 보호필름(450)과 상기 유리기판(440) 사이, 상기

유리기판(440)과 상기 반사방지막(430) 사이, 또는 상기 반사방지막(430)과 상기 제2 전극(420) 사이에 배치될 수 있다.

[408]

[409] 도 7은 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층을 구비하는 염료감응 태양전지를 나타낸 단면도이다.

[410]

도 7을 참고하면, 하부 기관(510)이 제공된다. 상기 하부 기관(510)은 광투과성 기관으로서, 그 재질은 유리 또는 광투과성 폴리머일 수 있다. 상기 하부 기관(510) 상에 제 1 전극(520)을 형성할 수 있다. 상기 제1 전극(520)은 광투과성 전극으로서, 폴리아닐린 등의 전도성 고분자막일 수 있으며, ITO(indium tin oxide), FTO(F-doped SnO₂), 또는 ITO 위에 ATO(antimony tin oxide)나 FTO가 코팅된 전도성 산화물 박막일 수 있다. 상기 제 1 전극(520) 상에 반도체층을 형성할 수 있다.

[411]

상기 반도체층은 적층된 금속 산화물 입자들(530)을 구비할 수 있다. 상기 금속 산화물 입자(530)가 구형인 것으로 도시하였으나, 이에 한정되지 않고 상기 금속 산화물 입자(530)는 튜브형, 와이어형 또는 막대형일 수 있고, 적어도 한 방향의 길이가 1000nm 미만인 나노 물질일 수 있다. 상기 금속 산화물은 티타늄 산화물(예를 들어, TiO₂), 주석 산화물(예를 들어, SnO₂), 텅스텐 산화물(예를 들어, WO₃), 아연 산화물(예를 들어, ZnO), 지르코늄 산화물(예를 들어, ZrO₂), 스트론튬 산화물(예를 들어, SrO) 또는 니오븀 산화물(예를 들어, Nb₂O₅)일 수 있다. 상기 금속 산화물 입자들(530)의 표면에 염료(535) 입자를 흡착시킬 수 있다. 상기 염료(535)는 태양광을 흡수하여 전자-홀 쌍을 생성할 수 있는 물질로서, 예를 들면, 유기 염료 또는 양자점 무기 염료일 수 있다. 상기 유기 염료는 루테튬계 유기금속화합물 또는 유기화합물일 수 있으며, 양자점 무기 염료는 InP 또는 CdSe일 수 있다. 이중 루테튬계 유기금속화합물은 중심금속인 루테튬 주위에 피리딘계 리간드들, 또는 피리딘계 리간드들/SCN 리간드들이 배위된 염료일 수 있다.

[412]

상기 염료(535)를 금속 산화물 입자들(530)의 표면에 흡착시킨 후, 상기 기관(510)의 테두리부에 상기 반도체층의 높이보다 일정 높이 이상으로 봉지재(570)를 형성할 수 있다. 그런 다음, 일면에 제 2 전극(550)이 형성된 상부 기관(560)을 준비하고, 상기 제 2 전극(550)이 상기 금속 산화물 입자들(530)을 향하도록 상부 기관(560)을 배치할 수 있다. 그리고, 상기 상부 기관(560)의 테두리부를 상기 봉지재(570)에 밀착시키고, 합착하여, 상기 제 2 전극(550) 및 상기 반도체층이 일정 간격 이격되어 공간을 형성할 수 있도록 한다. 이때, 상기 상부 기관(560)은 상기 하부 기관(510)과 마찬가지로, 광투과성 기관일 수 있으며, 그 재질은 유리 또는 광투과성 폴리머일 수 있다.

[413]

상기 상부 기관(560)을 합착한 후, 상기 밀봉재(570)의 일측에 미리 형성된 전해질 주입구(도면상에는 미도시)를 통하여 전해질(540)을 주입하여 상기 상부 기관(560) 및 하부 기관(510) 사이의 공간을 충전시키며, 이후에 상기 전해질

주입구를 밀봉하여 본 발명의 일 실시예에 따른 염료감응 태양전지(500)를 제조할 수 있다.

- [414] 이때, 상기 전해질(540)은 상기 다공성 반도체층 내로 도입될 수 있으며, 상기 다공성 반도체층에서의 확산이 용이하도록 액체 전해질일 수 있다. 상기 액체 전해질은 매질로서 아세토니트릴(acetonitrile)과 같은 액체를 함유할 수 있고, 또한 산화-환원종으로서 I/I_3 를 함유할 수 있다. 상기 I 의 소오스로는 LiI , NaI , 또는 이미다졸리움 요오드가 사용될 수 있으며, I_3 는 I_2 를 매질에 녹여 생성할 수 있다.
- [415] 상기 하부 기관(510)을 통해 입사된 태양광(Li)의 전체 파장대역 중 특정 파장대역은 상기 염료(535)에 의해 흡수되고, 상기 광에너지를 흡수한 염료(535)는 유기 염료인 경우 MLCT(Metal to Ligand Charge Transfer)에 의해 전자-홀 쌍을 생성할 수 있다. 상기 생성된 전자는 상기 금속 산화물 입자(530)를 통해 상기 제1 전극(520)으로 전달된다. 상기 전해질 내의 I 는 I_3 으로 산화되면서, 산화된 염료(535)에 전자를 전달하고, 염료(535)는 다시 환원된다. I_3 는 상기 제2 전극(550)으로부터 전자를 받아 I 로 다시 환원될 수 있다.
- [416] 상기 염료감응 태양전지의 광, 예를 들어 태양광이 상기 염료감응 태양전지 내부로 진행되는 경로 내에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 구체적으로, 상기 상부 기관(560) 상에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 상기 광증폭층(LAL)은 상기 상부 기관(560)과 상기 제 2 전극(550) 사이에 배치될 수 있다.
- [417]
- [418] 도 3 내지 도 7을 참조하여 설명한 바와 같이, 광증폭층(LAL)은 광학소자의 광경로 상에 배치될 수 있다. 구체적으로, 도 3 및 도 4를 참조하여 설명한 발광소자의 경우, 발광층으로부터 발생된 광이 외부로 추출되는 광경로 상에, 다시 말해서 발광층과 외부 사이에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 또한, 도 5를 참조하여 설명한 액정 디스플레이 소자의 경우, 발광소자로부터 나온 광이 외부로 추출되는 광 경로 상에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다. 한편, 도 6 및 도 7을 참조하여 설명한 수광소자 즉, 태양전지의 경우, 외부광이 광흡수층으로 유입되는 광경로 다시 말해서, 외부와 광흡수층 사이에 광증폭층(LAL)이 배치될 수 있다.
- [419] 이러한 광증폭층(LAL)은 앞서 설명한 바와 같이, 주기적이며 규칙적인 3차원적 유기 구조체이다. 특히, 나노미터 주기성을 갖는 규칙적이고 주기적인 3차원 구조체를 형성함에 따라, 특정 파장영역에서 0에 근접한 유전율을 갖는 메타물질을 구현할 수 있다. 따라서, 광증폭 현상을 나타낼 수 있다. 상기 특정 파장영역은 근적외선, 가시광선 또는 자외선 영역일 수 있고, 이는 상기 3차원 구조체의 격자 간격의 조절을 통해 조절할 수 있다. 또한, 상기 광증폭층(LAL)은 위상학적 절연체로서의 특성을 나타낼 수 있는데, 특히, 상기 주기적이고 규칙적인 구조를 갖는 광증폭층(LAL)이 위상학적 절연체로서의 특성에 의하여

발생하는 디락 플라즈몬의 국소 표면 플라즈몬 공명에 의해 광이 증폭될 수 있다.

- [420] 상기 기술한 주기적이며 규칙적인 3차원적 유기구조체는 유전율이 0에 가까운 메타물질로서의 특성과 위상학적 절연체로서의 특성이 혼합되어 특히 광증폭소재로서 그 우수한 특성을 들어낼 수 있는데, 이를 이용하여 보다 높은 효율을 갖는 광학소자를 구현할 수 있다.

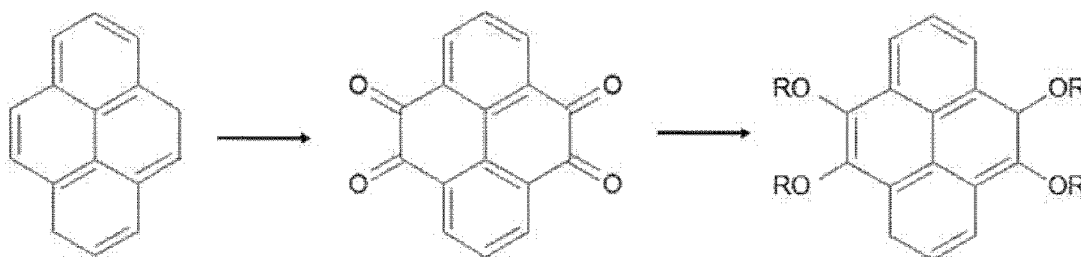
[421]

- [422] 이하, 본 발명을 실험예에 의해 상세히 설명한다. 다만, 하기 실험예들은 본 발명을 예시하는 것으로, 본 발명의 내용이 이에 한정되는 것은 아니다.

- [423] 화합물 제조예들 1A 내지 3A: 테트라키스(알킬옥시)-파이렌의 제조

- [424] [반응식 5]

[425]



- [426] 화합물 제조예 1A: 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌의 제조

- [427] 1A-1. 파이렌-4,5,9,10-테트라온의 제조

- [428] 파이렌(10 mmol)을 디클로로메탄(40.0 ml)과 아세토니트릴(acetonitrile) (40 ml) 용액에 녹인 후, 염화 루테늄(III) 수화물(ruthenium(III) chloride hydrate) (0.25 g, 1.2 mmol)과 소듐 메타페리오데이트(NaIO_4) (17.5 g, 81.8 mmol)와 함께 증류수(50.0 ml)에 40°C에서 16시간동안 환류시켜 파이렌-4,5,9,10-테트라온을 제조하였다.

- [429] 파이렌-4,5,9,10-테트라온: ^1H NMR(600MHz, DMSO- d_6) δ 8.32(d,4H), 7.71(t,2H)

- [430] 1A-2. 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌의 제조

- [431] 1A-1에서 얻어진 파이렌-4,5,9,10-테트라온(10 mmol)을 브로모 테트라부틸암모늄(Bu_4NBr) (13 mmol) 및 소듐 하이드로설파이트($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$) (115 mmol)와 함께 증류수(50 ml) 및 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹여 65°C에서 5분간 환류하였다. 반응 용액에 브로모도데실(bromododecyl) (60 mmol)과 KOH(306 mmol)을 증류수(50 ml)에 녹여서 만든 수용액을 첨가한 후 16시간동안 65°C에서 환류시켜 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(반응식 5에서 $\text{R}=\text{C}_{12}\text{H}_{25}$, 화합물 11)을 얻었다 (수율:72%).

- [432] 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 8.32(d,4H), 7.71(t,2H), 4.21(t,8H), 1.91(m,8H), 1.57(m,8H), 1.40-1.27(m,64H), 0.88(t,12H)

- [433] 도 8은 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌의 CDCl_3

용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

[434]

[435] 화합물 제조예 1B : 4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌의 제조

[436]

상기 1A-2에서 브로모도데실(bromododecyl)을 대신

브로모테트라데실(bromotetradecyl)을 첨가한 것을 제외하고는 상기 제조예 1A과 동일한 방법을 수행하여, 4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌(반응식 5에서 $\text{R}=\text{C}_{14}\text{H}_{29}$, 화합물 12)을 제조하였다(수율 : 70%).

[437]

4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌: $^1\text{H NMR}$ (600MHz, CDCl_3) δ 8.32(d,4H), 7.71(t,2H), 4.21(t,8H), 1.91(m,8H), 1.57(m,8H), 1.40-1.27(m,64H), 0.88(t,12H)

[438]

도 9는 제조예 1B에 따른 4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

[439]

[440] 화합물 제조예 1C : 4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌의 제조

[441]

상기 1A-2에서 브로모도데실(bromododecyl)을 대신

브로모옥타데실(bromooctadecyl)을 첨가한 것을 제외하고는 상기 제조예 1A과 동일한 방법을 수행하여, 4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌(반응식 5에서 $\text{R}=\text{C}_{18}\text{H}_{37}$, 화합물 13)을 제조하였다(수율 : 72%).

[442]

4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌: $^1\text{H NMR}$ (600MHz, CDCl_3) δ 8.32(d,4H), 7.71(t,2H), 4.21(t,8H), 1.91(m,8H), 1.57(m,8H), 1.40-1.27(m,64H), 0.88(t,12H)

[443]

도 10은 제조예 1C에 따른 4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

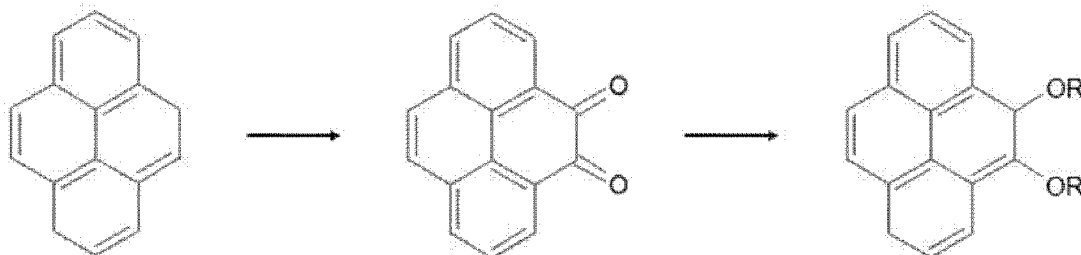
[444]

[445] 화합물 제조예 1D : 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌의 제조

[446]

[반응식 6]

[447]



[448] 1D-1. 파이렌-4,5-다이온의 제조

[449]

상기 제조예 1A의 1A-1 단계에서 반응 온도를 40°C 에서 30°C 로 변화한 것을 제외하고는 동일한 방법을 수행하여, 파이렌-4,5-다이온을 얻었다.

[450]

1D-2. 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌의 제조

[451]

상기 제조예 1A의 1A-2 단계에서 파이렌-4,5,9,10-테트라온 대신에 1D-1

단계에서 얻어진 파이렌-4,5-다이온을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법을 수행하여 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌 (반응식 6에서 $R=C_{12}H_{25}$, 화합물 14)을 얻었다(수율 : 68%).

[452] 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌: 1H NMR(600MHz, $CDCl_3$) δ 8.12(d,2H), 7.83(m,4H), 7.71(s,2H), 4.21(t,4H), 1.91(m,4H), 1.57(m,4H), 1.40-1.27(m,36H), 0.88(t,6H)

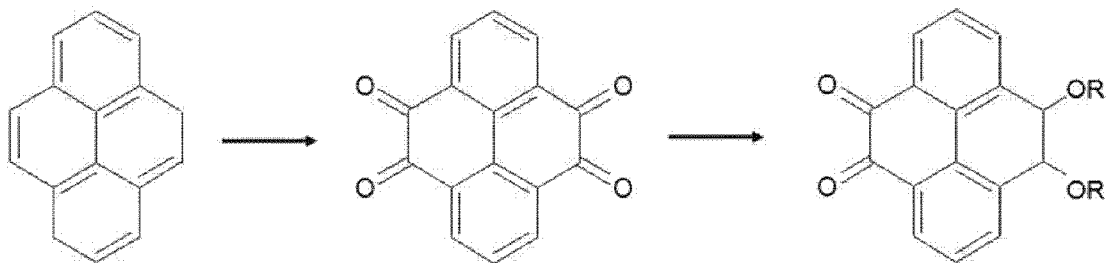
[453] 도 11은 제조예 1D에 따른 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌의 $CDCl_3$ 용매 하에서 측정한 1H -NMR 스펙트럼이다.

[454]

[455] 화합물 제조예 1E : 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌-9,10-다이온의 제조

[456] [반응식 7]

[457]

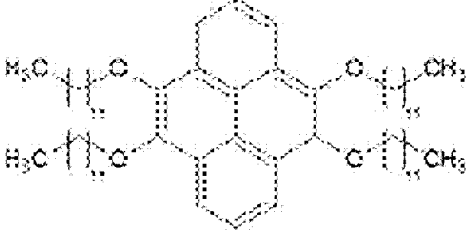
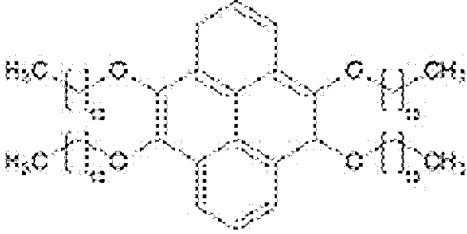
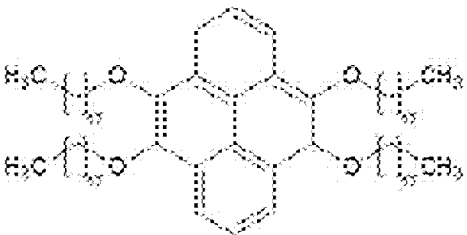
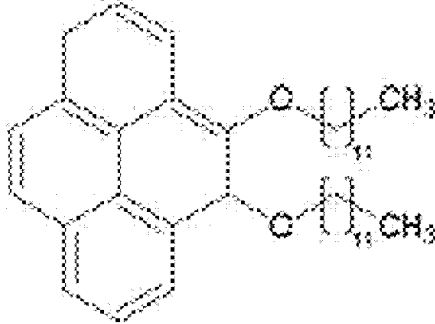


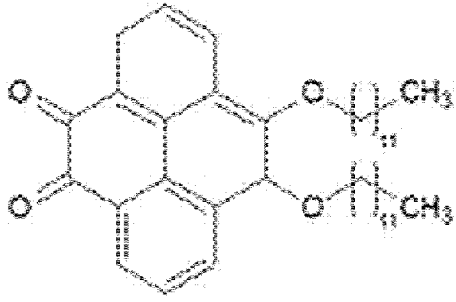
[458] 상기 제조예 1A의 1A-2 단계에서 브로모도데실의 당량을 20mmol로 한 것을 제외하고는 상기 제조예 1A와 동일한 방법을 수행하여, 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌-9,10-다이온(반응식 7에서 $R=C_{12}H_{25}$, 화합물 15)을 제조하였다(수율 : 63%).

[459] 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌-9,10-다이온: 1H NMR(600MHz, $DMSO-d_6$) δ 8.40(m,4H), 8.01(t,2H), 4.21(t,4H), 1.91(m,4H), 1.57(m,4H), 1.40-1.27(m,36H), 0.88(t,6H)

[460] 도 12는 제조예 1E에 따른 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌-9,10-다이온의 $DMSO-d_6$ 용매 하에서 측정한 1H -NMR 스펙트럼이다.

[461] [표1]

화합물 제조예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	수율(%)
1A	11		4,5,9,10-테트라키 스(도데실옥시)-파 이렌	72
1B	12		4,5,9,10-테트라키 스(테트라데실옥 시)-파이렌	70
1C	13		4,5,9,10-테트라키 스(옥타데실옥시)- 파이렌	72
1D	14		4,5-비스(도데실옥 시)-파이렌	68

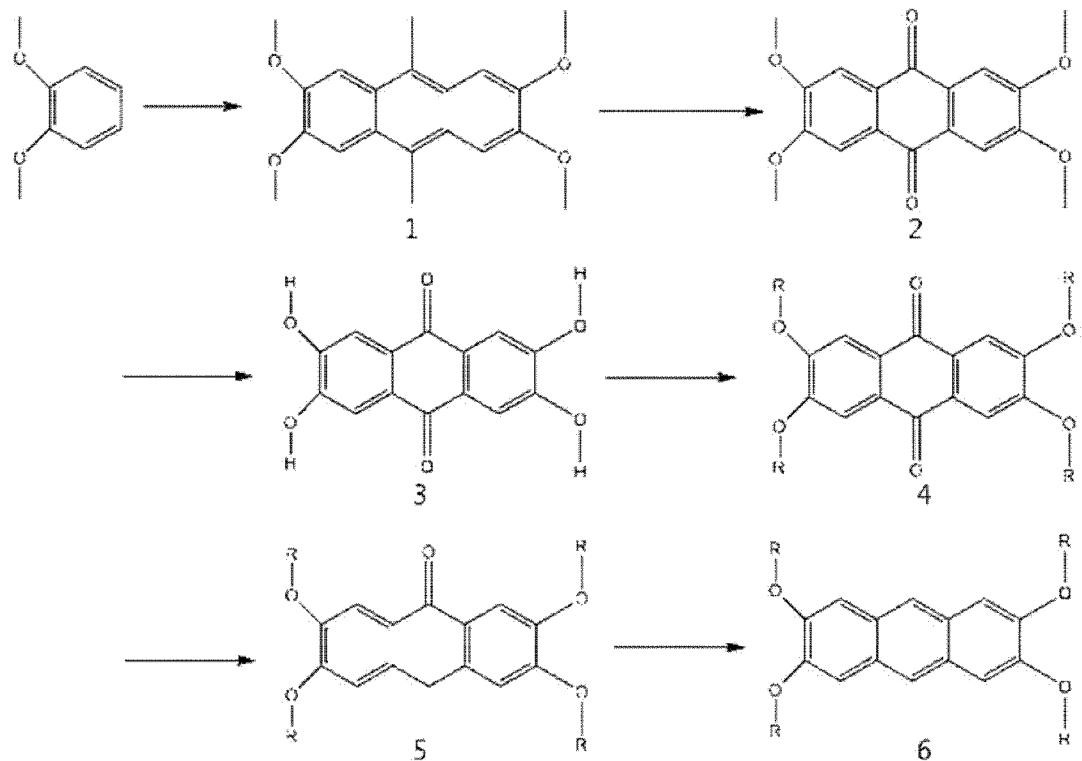
1E	15		4,5-비스(도데실옥시)-파이렌-9,10-다이온	63
----	----	---	----------------------------	----

[462]

[463] 화합물 제조예 2A : 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센의 제조

[464] [반응식 8]

[465]

[466] 상기 반응식 8에서, R은 C₁₂H₂₅이다.[467] 2A-1. 2,3,6,7-테트라키스(메톡시)-9,10-다이메틸안트라센(1)의 제조

[468] 냉각된 베라트롤(32 ml)과 아세트산(125 ml) 용액을 메탄올(20 ml)과 아세트알데하이드(21 ml)가 혼합되어 있는 냉각용액에 천천히 첨가하였다. 혼합된 용액을 1시간 동안 충분히 교반한 후 진한 황산(95%, 125 ml)를 2시간에 걸쳐 첨가하고, 20시간 동안 교반하며 반응시켰다. 반응이 끝난 후 얼음물에 반응물을 부어 반응을 종결시키고 필터링한 후, 물로 씻어내고 클로로포름을 전개액으로 하여 컬럼 크로마토 그래피를 실시하여, 2,3,6,7-테트라키스(메톡시)-9,10-다이메틸안트라센(1)을 분리하였다.

[469] 2A-2. 2,3,6,7-테트라키스(메톡시)안트라센-9,10-다이온(2)의 제조

- [470] 2A-1 단계의 결과물인 2,3,6,7-테트라키스(메톡시)-9,10-다이메틸안트라센(10.0 g)과 소듐 다이크로메이트(50 g), 아세트산(500 ml)을 60분 동안 환류시켜 2,3,6,7-테트라키스(메톡시)안트라센-9,10-다이온(2)을 얻었다.
- [471] 2,3,6,7-테트라키스(메톡시)안트라센-9,10-다이온: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.32(s,4H), 4.06(t,8H), 1.76(m,8H), 1.57(m,8H), 1.43-1.26(m,72H), 0.88(t,12H)
- [472] 2A-3. 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온(4)의 제조
- [473] 2A-2 단계의 결과물인 2,3,6,7-테트라키스(메톡시)안트라센-9,10-다이온(2) (470 mg, 1.6mmol)과 테트라-n-부틸-암모늄 브로마이드(6 mg)을 진한 브로민화 수소(30 mg)에 넣었다. 결과물을 환류시키며 12시간 동안 반응시킨 후, 얼음물에 넣어 반응을 종결하고 필터링하여 갈색 침전물(3)을 얻었다. 상기 갈색 침전물 (5g, 18.3mmol)에 다이메틸포름아마이드(100 ml)와 탄산칼륨(17.64 g)을 첨가한 후 5분 후에 1-브로모도데칸(183 mmol)을 첨가하고 상온에서 90분 동안 반응시킨 후, 서서히 온도를 60°C까지 상승시키고, 12시간 동안 반응시켰다. 그 후 증류수(80 ml)를 추가하여 미반응된 탄산칼륨을 녹여 엉켜있는 생성물을 용해한 후, 얼음물에 부어 반응을 끝내고 필터링하여 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온(4)을 제조하였다.
- [474] 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 8.11(s,2H), 7.14(s,4H), 4.16(t,8H), 1.76(m,8H), 1.43-1.26(m,72H), 0.88(t,12H)
- [475] 2A-4. 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9-온(5)의 제조
- [476] 아연 가루(16.9 g)을 증류수(250 ml)에 황화구리(0.4 g)가 담긴 용액에 넣어 10분동안 교반하면서 활성화시켰다. 활성화된 아연가루 용액을 디켄트시키고, 10% 수산화소듐 용액(160 ml)과 2A-3 단계의 결과물인 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온(4)(9.82g, 10.4mmol)을 톨루엔(150 ml)에 넣은 혼합 용액을 상기 활성화된 아연가루 용액에 넣었다. 결과물을 120°C에서 교반하며 15시간동안 반응을 진행시키고, 반응이 끝난 후에 물로 씻어내어 미반응 아연가루를 제거하고, -5°C에서 재결정화한 후, 필터링하고 진공오븐에서 말려, 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9-온(5)을 얻었다.
- [477] 2A-5. 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센(6)의 제조
- [478] 2A-4 단계의 결과물인 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9-온(5)(8.38 g, 8.98 mmol)을 다이클로로메탄(200 ml)에 녹인 후, 여기에 소듐보로하이드라이드(5.25 g, 135 mmol)를 넣고, 메탄올(30 ml)를 첨가하면서 상온에서 교반하였다. 교반 상태로 90분이 지난 후에 소듐보로하이드라이드(15 g, 385 mmol)를 추가로 넣어주었다. 7시간이 지난 후, 아세트산(10 ml)를 서서히 첨가하고 12시간을 더 반응시킨 후 진한황산(10 ml)를 첨가하고 순차적으로 증류수(50 ml)를 첨가하였다. 반응이 끝난 후 다이클로로메탄층을 추출하고 물로 충분히 씻은 후, -5°C에서 재결정화하고 필터링하고, 진공오븐에서 하루를 보관하여, 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센(6, 화합물 21)을 얻었다(수율

: 53%)

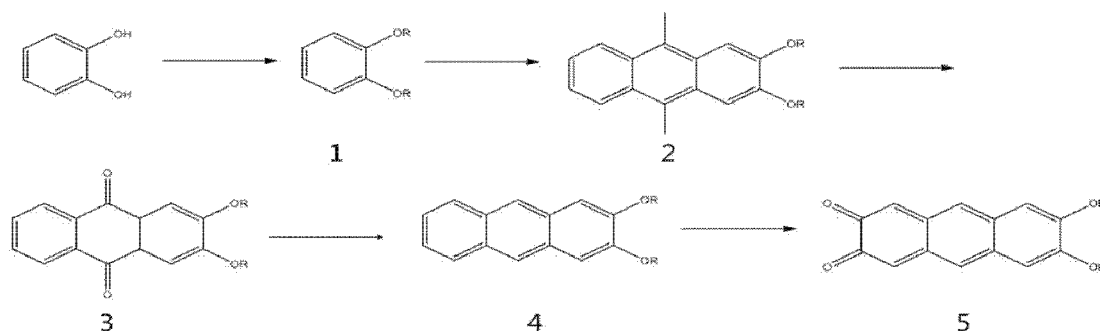
[479] 도 13은 제조예 2A에 따른 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

[480]

[481] 화합물 제조예 2B 및 2C : 2,3-비스(도데실옥시)안트라센과 6,7-비스(도데실옥시)안트라센-2,3-다이온의 제조

[482] [반응식 9]

[483]



[484] 상기 반응식 9에서, R은 $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$ 이다.

[485]

[486] 화합물 제조예 2B : 2,3-비스(도데실옥시)안트라센의 제조

[487] 2B-1. 1,2-비스(도데실옥시)벤젠(1)의 제조

[488] 카테콜(0.1 mol)을 다이메틸포름아마이드(20 ml)에 넣고 100°C 로 올린 후 1-브로모도데실(0.3 mol)을 넣고 18시간 동안 반응시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 서서히 식힌 후에 물에 넣어 반응을 종결시키고, 클로로포름을 사용하여 추출하여 증발을 시킨 후, 플래쉬 컬럼을 통하여 깨끗한 1,2-비스(도데실옥시)벤젠(1)을 얻었다.

[489] 1,2-비스(도데실옥시)벤젠: $^1\text{H NMR}(600\text{MHz}, \text{CDCl}_3)\delta$ 6.88(s,4H), 4.06(t,2H), 1.76(m,4H), 1.43(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)

[490] 2B-2. 2,3-비스(도데실옥시)-9,10-다이메틸안트라센(2)의 제조

[491] 2B-1 단계의 결과물인 1,2-비스(도데실옥시)벤젠(12.8 ml, 0.1 mol), 벤젠(9 ml, 0.1 mmol), 및 프로판알데하이드(7.4 ml, 0.1mol)를 아세트나이트릴(5.3 ml, 0.1mol)에 녹인 후, 진한황산(50 ml)와 함께 교반하며 2시간동안 반응을 진행하고 열음에 부어 2,3-비스(도데실옥시)-9,10-다이메틸안트라센(2)을 얻었다.

[492] 2,3-비스(도데실옥시)-9,10-다이메틸안트라센: $^1\text{H NMR}(600\text{MHz}, \text{CDCl}_3)\delta$ 7.98(d,2H), 7.35(d,2H), 7.14(s,2H), 4.16(t,4H), 2.64(s,6H), 1.76(m,4H), 1.57(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)

[493] 2B-3. 2,3-비스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온(3)의 제조

[494] 2B-2 단계의 결과물인 2,3-비스(도데실옥시)-9,10-다이메틸안트라센(10.0 g)과 소듐 다이크로메이트(50 g), 및 아세트산(500 ml)을 60분 동안 환류시켜 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온(3)을 얻었다.

- [495] 2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온(3): ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 8.05(s,4H), 4.73(s,2H), 4.18(d,2H), 4.01(t,4H), 1.76(m,4H), 1.43-1.26(m, 36H), 0.88(t,6H)
- [496] 2B-4. 2,3-비스(도데실옥시)안트라센(4)의 제조
- [497] 2B-3 단계의 결과물인 2,3-비스(도데실옥시)안트라센-9,10-다이온(10 g, 41.3 mmol)과 활성 아연 분말(167 g, 2.6 mol)을 수산화나트륨(50 g, 1.25 mol)을 증류수(670 ml)에 녹인 용액에 섞은 후, 질소로 치환하면서 100°C 에서 48시간동안 반응을 시켜 2,3-비스(도데실옥시)안트라센(4, 화합물 22)을 얻었다(수율 : 63%)
- [498] 2,3-비스(도데실옥시)안트라센: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 8.21(s,2H), 7.91(t,2H), 7.36(d,2H) 7.14(s,2H), 4.16(t,4H), 1.76(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)
- [499] 도 14는 제조예 2B에 따른 2,3-비스(도데실옥시)안트라센의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 ^1H -NMR 스펙트럼이다.
- [500]
- [501] 화합물 제조예 2C : 2,3-비스(도데실옥시)안트라센-6,7-다이온(5)의 제조
- [502] 제조예 2B의 결과물인 2,3-비스(도데실옥시)안트라센 (10 mmol)을 디클로로메탄(40.0 ml)과 아세토니트릴(acetonitrile) (40 ml) 용액에 녹인 후, 염화 루테늄(III) 수화물(ruthenium(III) chloride hydrate) (0.25 g, 1.2 mmol)과, 소듐 메타페리odate(NaIO_4)(17.5 g, 81.8 mmol)와 함께 25°C 에서 증류수(50.0 ml)에 16시간 동안 환류시킴으로 2,3-비스(도데실옥시)안트라센-6,7-다이온(5, 화합물 23)을 제조하였다(수율 : 58%).
- [503] 2,3-비스(도데실옥시)안트라센-6,7-다이온: ^1H NMR(600MHz, DMSO-d_6) δ 6.46(s,2H), 6.28(s,2H), 6.24(s,2H), 4.16(t,4H), 1.76(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)
- [504] 도 15는 제조예 2B에 따른 2,3-비스(도데실옥시)안트라센-6,7-다이온의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 ^1H -NMR 스펙트럼이다.

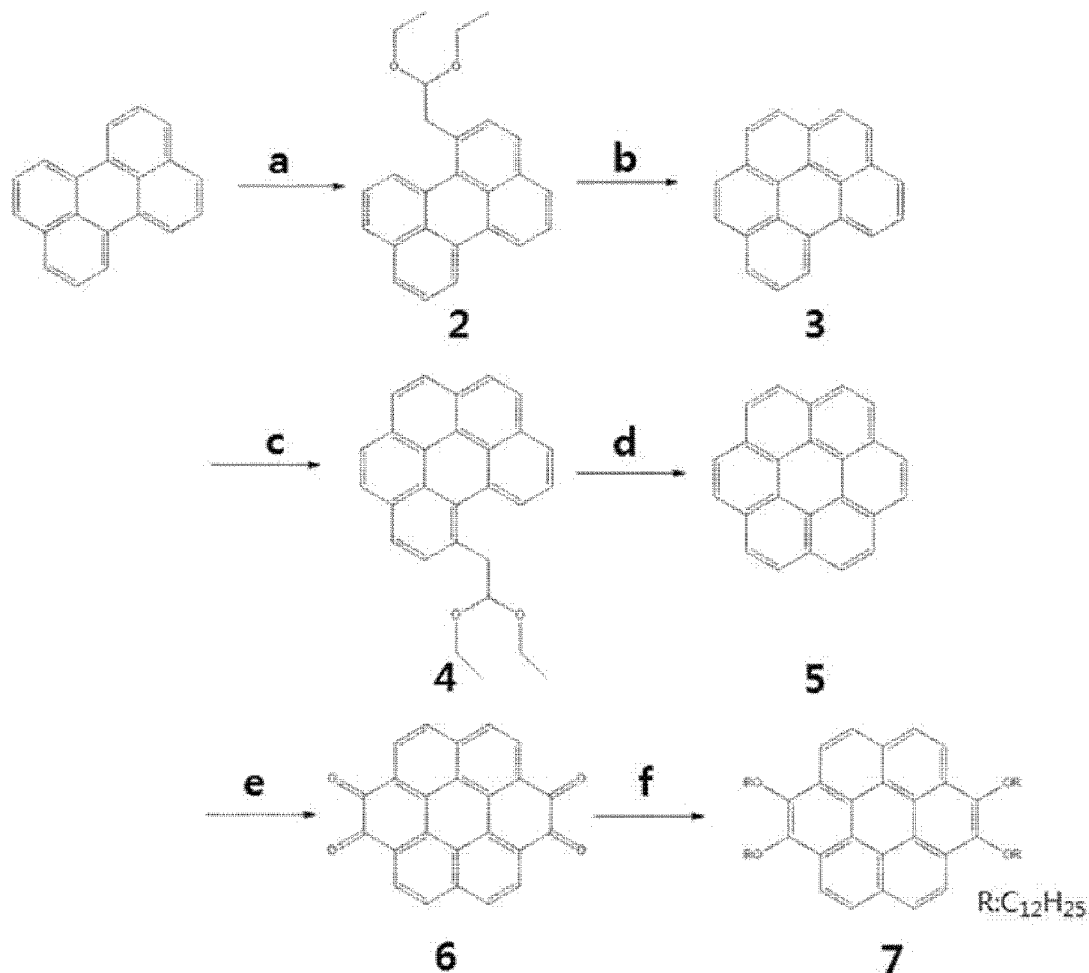
[505] [표2]

화합물 제조예 번호	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	수율(%)
2A	21		2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센	53
2B	22		2,3-비스(도데실옥시)안트라센	63
2C	23		2,3-비스(도데실옥시)안트라센-5,6-다이온	58

[506] 화합물 제조예 3A. 1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네의 제조

[507] [반응식 10]

[508]

[509] 3A-1. 1-(2,2-다이에톡시에틸)페릴렌(2)의 제조

[510] 아르곤으로 치환된 반응기 내에 페릴렌(4.00 g, 15.9 mmol), 테트라하이드로퓨란(THF)(250 ml), 및 소듐(0.80g)을 넣고 30°C에서 3시간 동안 초음파 처리를 한 후, -60°C로 냉각하고 브로모아세트알데하이드 다이에틸아세탈(3.13 g, 15.9 mmol)을 교반하면서 함께 넣어주었다. 그 후 아이오딘(6.05 g, 23.8 mmol)을 첨가하고 소듐 티오설파이트(100 ml)를 넣어 1-(2,2-다이에톡시에틸)페릴렌(2)을 얻었다.

[511] 1-(2,2-다이에톡시에틸)페릴렌: ¹H NMR(600MHz, CDCl₃) δ 7.91(s, 3H), 7.39(s, 6H), 7.26(s, 1H), 7.17(s, 1H), 4.58(t, 1H), 3.50(m, 4H), 3.28 (d, 2H), 1.10(t, 6H)

[512] 3A-2. 벤조[ghi]페릴렌(3)의 제조

[513] 3A-1 단계의 결과물인 1-(2,2-다이에톡시에틸)페릴렌(4.29 g, 11.6 mmol)을 메탄올(8 ml)과 함께 교반하면서 진한 황산(4 ml)를 적하하여 벤조[ghi]페릴렌(3)을 얻었다.

[514] 벤조[ghi]페릴렌: ¹H NMR(600MHz, CDCl₃) δ 7.91(d, 2H), 7.71(s, 2H), 7.39(s, 8H)

[515] 3A-3. 7-(2,2-다이에톡시에틸)벤조[ghi]페릴렌(4)의 제조

[516] 페릴렌 대신에 3A-2 단계의 결과물인 벤조[ghi]페릴렌(3)을 사용한 것을

제외하고는 상기 3A-1 단계와 동일한 방법을 사용하여
7-(2,2-다이에톡시에틸)벤조[ghi]페릴렌(4)을 얻었다.

[517] 7-(2,2-다이에톡시에틸)벤조[ghi]페릴렌: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.91(d, 1H), 7.71(s, 2H), 7.39(s, 6H), 7.26(s, 1H), 7.17(s, 1H), 4.58(t, 1H), 3.50(m, 4H), 3.29 (d, 2H), 1.10(t, 6H)

[518] 3A-4. 코로네네(5)의 제조

[519] 1-(2,2-다이에톡시에틸)페릴렌 대신에 3A-3 단계의 결과물인
7-(2,2-다이에톡시에틸)벤조[ghi]페릴렌을 사용한 것을 제외하고는 상기 3A-2
단계와 와 동일한 방법을 사용하여 코로네네(5)를 얻었다.

[520] 코로네네: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.39(s, 12H)

[521] 3A-5. 코로네네-1,2,7,8-테트라온(6)의 제조

[522] 파이렌 대신에 3A-4 단계의 결과물인 코로네네를 넣어준 것을 제외하고는,
상기 제조에 1A-1과 동일한 방법으로 코로네네-1,2,7,8-테트라온(6)을
제조하였다.

[523]

[524] 코로네네-1,2,7,8-테트라온: ^1H NMR(600MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.83(d, 4H), 7.49(d, 4H)

[525] 3A-6. 1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네(7)의 제조

[526] 파이렌-4,5,9,10-테트라온 대신에 3A-5 단계의 결과물인
코로네네-1,2,7,8-테트라온을 넣어준 것을 제외하고는, 상기 제조에 1A-2와
동일한 방법으로 1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네(7, 화합물 31)를
제조하였다(수율 : 61%)

[527] 1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.39(s, 4H), 4.16(t, 8H), 1.76(m, 8H), 1.43-1.26(m, 72H), 0.88(t, 12H)

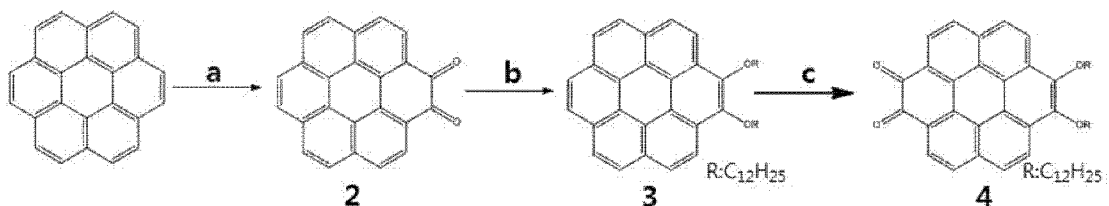
[528] 도 16은 제조에 3A에 따른 1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네의 CDCl_3
용매 하에서 측정한 ^1H -NMR 스펙트럼이다.

[529]

[530] 화합물 제조에 3B 및 3C : 1,2-비스(도데실옥시)코로네네와 7,8-비스(도데실
옥시)코로네네-1,2-다이온의 제조

[531] [반응식 11]

[532]



[533] 화합물 제조에 3B : 1,2-비스(도데실옥시)코로네네의 제조

[534] 상기 제조에 1A의 1A-1 단계에서 파이렌 대신에 코로네네를 넣고 반응 온도를
40°C에서 30°C로 변화한 것을 제외하고는 상기 제조에 1A와 동일한 방법을

- 수행하여 1,2-비스(도데실옥시)코로네네(3, 화합물 32)를 제조하였다(수율 : 63%)
- [535] 1,2-비스(도데실옥시)코로네네: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.39(s,10H), 4.16(t,4H), 1.76(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)
- [536] 도 17은 제조예 3B에 따른 1,2-비스(도데실옥시)코로네네의 CDCl_3 용매 하에서 측정된 ^1H -NMR 스펙트럼이다.
- [537] 화합물 제조예 3C : 7,8-비스(도데실옥시)코로네네-1,2-다이온의 제조
- [538] 2,3-비스(도데실옥시)안트라센 대신에 제조예 3B의 1,2-비스(도데실옥시)코로네네를 넣어준 것을 제외하고는 상기 제조예 2C와 동일한 방법으로 7,8-비스(도데실옥시)코로네네-1,2-다이온(4, 화합물 33)을 제조하였다(수율 : 62%)
- [539] 7,8-비스(도데실옥시)코로네네-1,2-다이온 : ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.88(d, 2H), 7.53(d, 2H), 7.39(s,4H), 4.16(t,4H), 1.76(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)
- [540] 도 18은 제조예 3C에 따른 7,8-비스(도데실옥시)코로네네-1,2-다이온의 CDCl_3 용매 하에서 측정된 ^1H -NMR 스펙트럼이다.

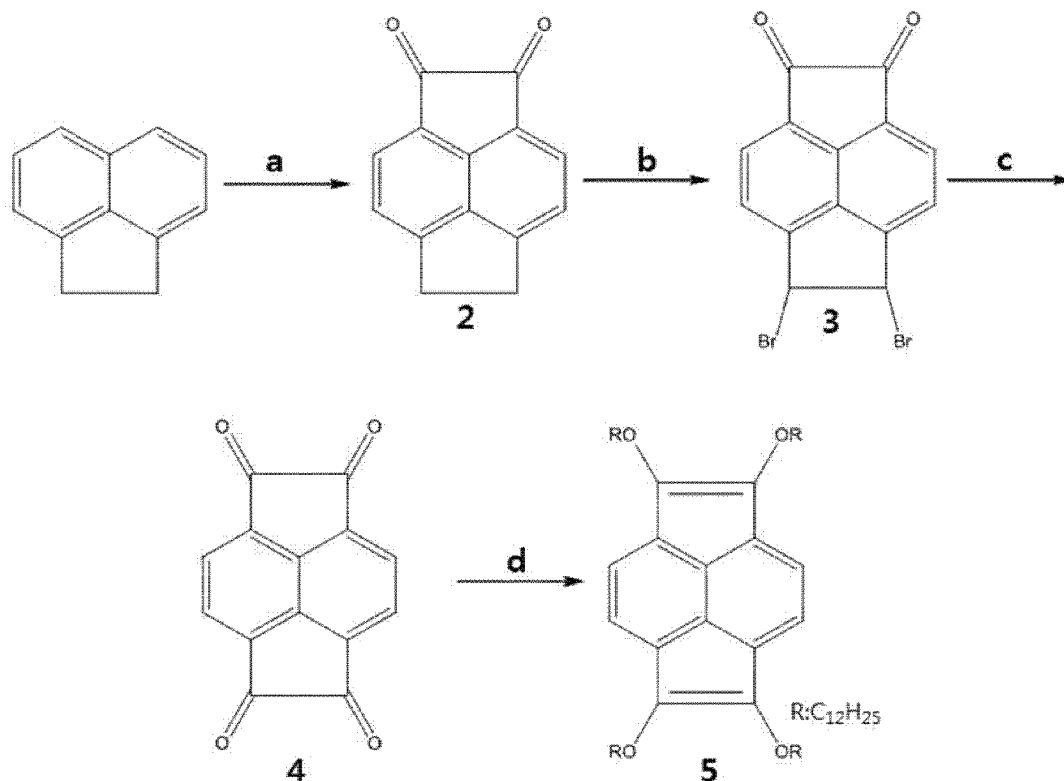
[541] [표3]

화합물 제조예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	수율(%)
3A	31		1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네	61
3B	32		1,2-비스(도데실옥시)코로네네	63
3C	33		7,8-비스(도데실옥시)코로네네-1,2-다이온	62

[542] 화합물 제조예 4A : 1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 제조

[543] [반응식 12]

[544]

[545] 4A-1. 다이케토파이라센(2)의 제조

[546]

[547] 아세나프텐(17.60 g, 0.114 mol)을 카본 다이설파이드(1500 ml)에 녹인 후, -5 °C에서 옥사릴 브로마이드(25.00 g, 0.116 mol)를 첨가하였다. 결과물에 알루미늄 브로마이드(62.50 g, 0.234 mol)를 10 ~ 15분에 걸쳐 강한 교반과 함께 첨가한 후, 반응기를 상온에서 밤새 반응시켜 다이케토파이라센(2)을 얻었다.

[548] 다이케토파이라센: $^1\text{H NMR}$ (600MHz, CDCl_3) δ 8.36(d, 2H), 7.64(d, 2H), 3.52(s, 4H)

[549] 4A-2. 5,6-다이브로모-1,2-다이케토파이라센(3)의 제조

[550] 4A-1 단계의 결과물인 다이케토파이라센(1.00 g, 4.8 mmol)을 사염화탄소(100 ml)에 녹인 용액에 N-브로모숙신이미드(2.60 g, 15.0 mmol)과 다이벤조일 펄록사이드(100 mg)를 첨가한 후, 5시간 동안 환류시켜 5,6-다이브로모-1,2-다이케토파이라센(3)을 얻었다.

[551] 5,6-다이브로모-1,2-다이케토파이라센: $^1\text{H NMR}$ (600MHz, CDCl_3) δ 8.36(d, 2H), 7.64(d, 2H), 5.69(s, 2H)

[552] 4A-3. 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라온(4)의 제조

[553] 4A-2 단계의 결과물인 5,6-다이브로모-1,2-다이케토파이라센(0.832 g, 4.0 mmol)과 무수 벤젠셀레니닉(2.88 g, 8.0 mmol)을 클로로벤젠(70 ml)에 용해시킨 뒤 125°C에서 72시간 동안 환류시켜 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라온(4)을 얻었다.

[554] 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라온: $^1\text{H NMR}$ (600MHz, CDCl_3) δ

8.65(s,4H)

[555] 4A-4. 1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌(5)의 제조

[556] 파이렌-4,5,9,10-테트라온 대신에 4A-3 단계의 결과물인

사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라온을 넣어준 것을 제외하고, 상기 제조에 1A의 1A-2단계와 동일하게 반응시켜

1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌(5, 화합물 41)을 얻었다(수율 : 59%)

[557] 1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌 : ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.34(s,4H), 4.16(t,8H), 1.76(m,8H), 1.43-1.26(m,72H), 0.88(t,12H)

[558] 도 19는 제조에 4A에 따른

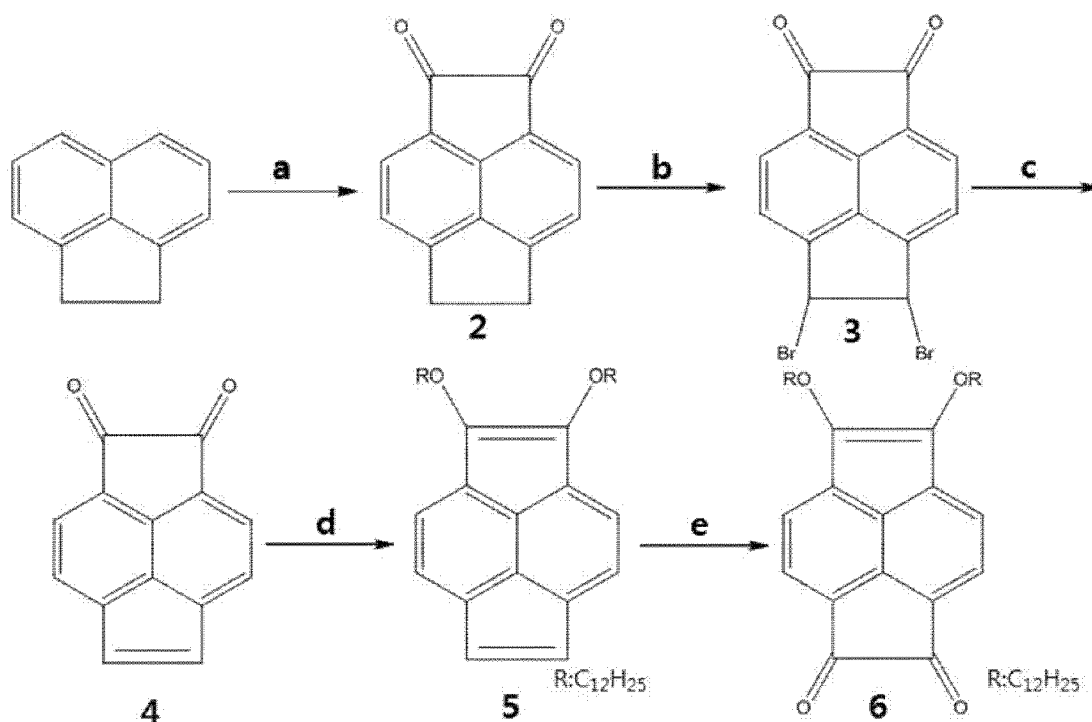
1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정된 ^1H -NMR 스펙트럼이다.

[559]

[560] 화합물 제조에 4B 및 4C : 1,2-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌 및 5,6-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이온의 제조

[561] [반응식 13]

[562]



[563]

[564] 화합물 제조에 4B : 1,2-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 제조[565] 4B-1. 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이온(4)의 제조

[566] 상기 제조에 4A-2에서 제조된 5,6-다이브로모-1,2-다이케토파라센(3, 10

mmol)을 과량의 포타슘아이오다이드와 함께 아세톤에 녹여 하룻 밤 동안 환류시켜, 사이클로펜타[fg]아세나프탈렌-1,2,-다이온(4)을 얻었다.

[567] 사이클로펜타[fg]아세나프탈렌-1,2,-다이온(4) : ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.90(d,2H), 7.58(d,2H), 7.15(s,2H)

[568] 4B-2. 1,2,-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌(5)의 제조

[569] 파이렌-4,5-다이온 대신에 4B-1 단계의 결과물인 사이클로펜타[fg]아세나프탈렌-1,2,-다이온을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 1D와 동일한 방법을 진행하여

1,2,-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌(5, 화합물 42)을 제조하였다(수율 : 62%).

[570] 1,2,-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌 : ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.90(d,2H), 7.58(d,2H), 7.15(s,2H), 4.16(t,4H), 1.76(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)

[571] 도 20은 제조예 4B에 따른 1,2,-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정 한 ^1H -NMR 스펙트럼이다.

[572]

[573] 화합물 제조예 4C : 5,6-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌-1,2-다이온(6)의 제조

[574] 2,3-비스(도데실옥시)안트라센 대신에 제조예 4B의 결과물인 1,2,-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌(5)를 넣은 것을 제외하고는, 제조예 2C와 동일한 방법으로 진행하여 5,6-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌-1,2-다이온(6, 화합물 43)을 얻었다(수율 : 60%)

[575] 5,6-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌-1,2-다이온 : ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 8.25(d, 2H), 8.14(d, 2H), 4.16(t,4H), 1.76(m,4H), 1.43-1.26(m,36H), 0.88(t,6H)

[576] 도 21은 제조예 4C에 따른 5,6-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프탈렌-1,2-다이온의 CDCl_3 용매 하에서 측정 한 ^1H -NMR 스펙트럼이다.

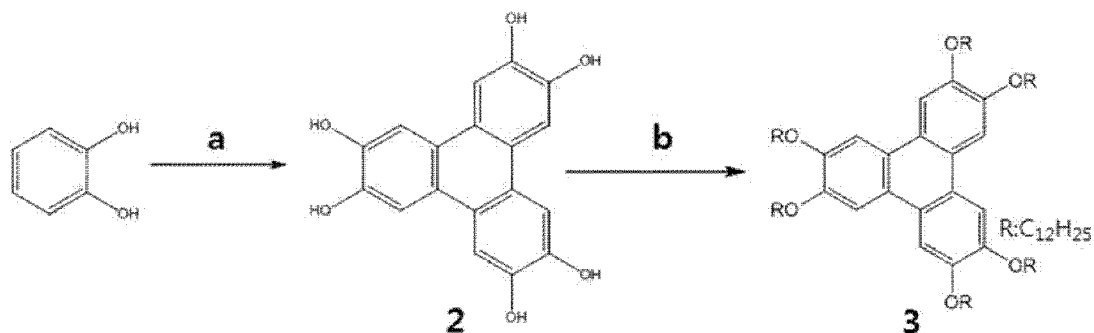
[577] [표4]

화합물 제조예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	수율(%)
4A	41		1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌	59
4B	42		1,2-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌	62
4C	43		5,6-비스(도데실옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이온	60

[578] 화합물 제조예 5A : 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌의 제조

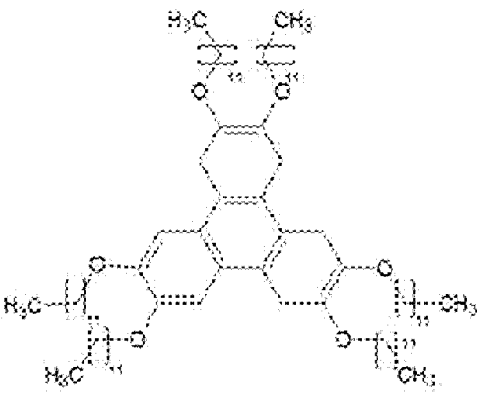
[579] [반응식 14]

[580]

[581] 5A-1.트라이페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥산올(2)의 제조

[582] 카테콜(20 g, 0.182 mol)과 6수화·염화철(III)(196.8 g, 0.728 mol)을 초음파를 사용하여 24시간동안 반응시켰다. 반응이 끝난 혼합물을 묽은 염산과 물로 씻어주고, 가열된 사이클로펜타논으로 추출하여 대강의 트라이페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥산올(2)을 얻었다.

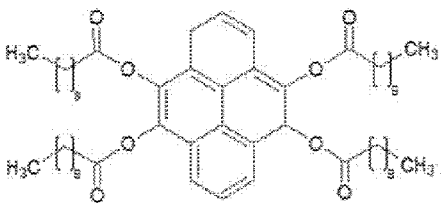
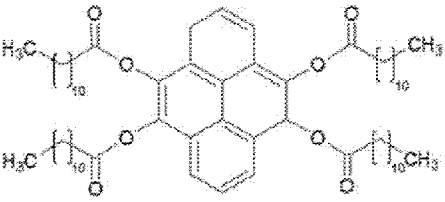
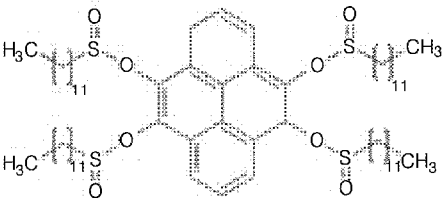
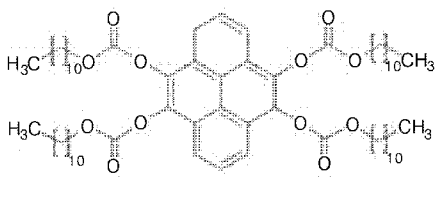
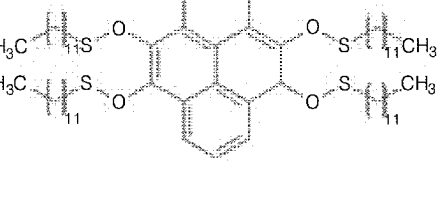
- [583] 트라이페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥산올: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.82(s,6H), 5.35(s,6H)
- [584] 5A-2. 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌(3)의 제조
- [585] 5A-1 단계의 결과물인 트라이페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥산올(10 mmol)을 브로모도데실(bromododecyl) (60 mmol)과 수산화칼륨(306 mmol)을 증류수(50 ml)에 녹여서 만든 수용액첨가한 후 16시간 동안 65°C 에서 환류시켜 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌(3, 화합물 51)을 얻었다(수율 : 74%)
- [586] 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌: ^1H NMR(600MHz, CDCl_3) δ 7.92(s,6H), 4.16(t,8H), 1.76(m,8H), 1.43-1.26(m,72H), 0.88(t,12H)
- [587] 도 22는 제조예 5A에 따른 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 ^1H -NMR 스펙트럼이다.
- [588] [표5]

화합물 제조예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	수율 (%)
5A	51		2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌	74

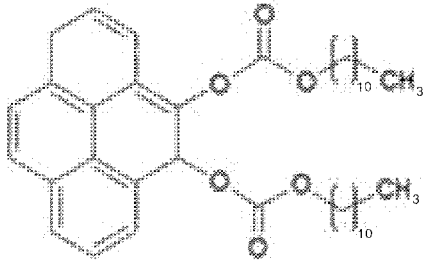
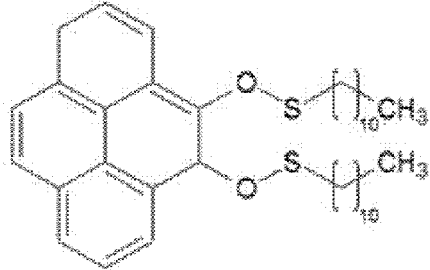
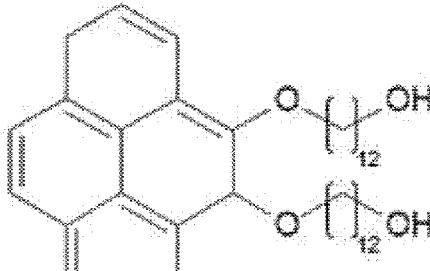
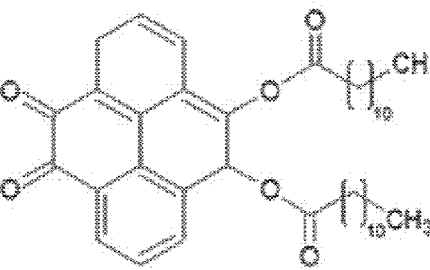
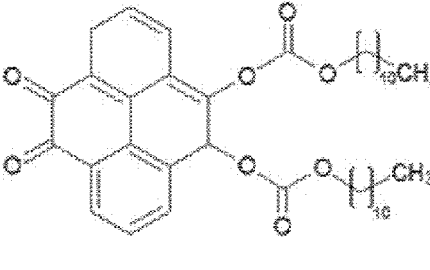
- [589] 화합물 제조예 6A : 파이렌-4,5,9,10-테트라일 테트라운데카노에이트의 제조
- [590] 제조예 1A의 1A-2 단계에서 브로모도데실 대신 운데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1A과 동일한 방법을 사용하여 파이렌-4,5,9,10-테트라일 테트라운데카노에이트(화합물 61)를 얻었다.
- [591] 화합물 제조예 6B : 파이렌-4,5-다이일다이트라이테카노에이트의 제조
- [592] 제조예 1D의 1D-2 단계에서 브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1D과 동일한 방법을 사용하여 파이렌-4,5-다이일다이트라이테카노에이트(화합물 62)를 얻었다.
- [593] 화합물 제조예 6C : 파이렌-4,5-다이일다이트라이테카노에이트의 제조
- [594] 제조예 1E에서 브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1E과 동일한 방법을 사용하여

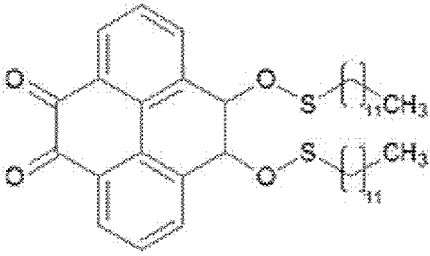
9,10-다이옥소-9,10-다이하이드로파이렌-4,5-다일다이드테카노에이트(화합물 63)를 얻었다.

[595] [표6]

화합물 제 조 예	화합 물 번 호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수율 (%)
6A	61		파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라운데카노에이트	운데카노일브로마이드	72
6A	61-1		파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라도데카노에이트	도데카노일브로마이드	74
6A	61-2		파이렌-4,5,9,10-트타라일테트라키스(도데칸-1-설포네이트)	도데실설퍼닐브로마이드	20
6A	61-3		파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라운데실테트라카보네이트	카보노브로믹산, 운데실에스터	45
6A	61-4		4,5,9,10-테트라키스((도데실싸이오)옥시)파이렌	도데실싸이오브로마이드	78

6A	61-5		12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-올)	12-브로모도데칸-1-올	73
6A	61-6		12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라아일테트라키스(옥시))테트라도데카오닉산	12-브로모도데카오닉산(cas number 73367-80-3)	56
6B	62		파이렌-4,5-다이일다이도데카노에이트	도데카노일브로마이드	54
6B	62-1		파이렌-4,5-다이일비스(운데칸-1-설피네이트)	운데실설피닐브로마이드	33
6B	62-2		파이렌-4,5-다이일비스(도데칸-1-설피네이트)	도데실설피닐브로마이드	22

6B	62-3		파이렌-4,5-다이일다이운데실비스(카보네이트)	카보노브로믹 산, 운데실 에스터	85
6B	62-4		4,5-비스((운데실싸이오)옥시)파이렌	운데실싸이오브로마이드	59
6B	62-5		12,12'-(파이렌-4,5-다이일비스(옥시))비스(도데칸-1-올)	12-브로모도데칸-1-올	47
6C	63		9,10-다이옥소-9,10-다이하이드로파이렌-4,5-다이일다이드데카노에이트	도데카노일브로마이드	71
6C	63-1		9,10-다이옥소-9,10-다이하이드로파이렌-4,5-다이일다이운데실다이크보네이트	카보노브로믹 산, 운데실 에스터	76

6C	63-2		9,10-비스((도 데실싸이오)옥 시)파이렌-4,5- 다이온	도데실싸 이오브로 마이드	47
----	------	---	--	---------------------	----

[596]

[597] 화합물 제조예 7A : 안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라도데카노에이트의 제조

[598] 제조예 2A의 2A-3 단계에서 1-브로모도데칸 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 2A와 동일한 방법을 사용하여 안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라도데카노에이트(화합물 71)를 얻었다.

[599]

[600] 화합물 제조예 7B : 안트라센-2,3-다이일다이도데카노에이트의 제조

[601] 제조예 2B의 2B-1 단계에서 1-브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 2B와 동일한 방법을 사용하여 안트라센-2,3-다이일다이도데카노에이트(화합물 72)를 얻었다.

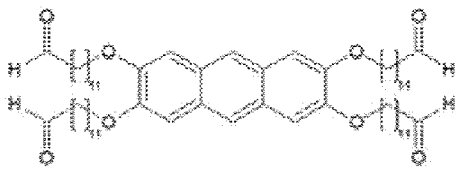
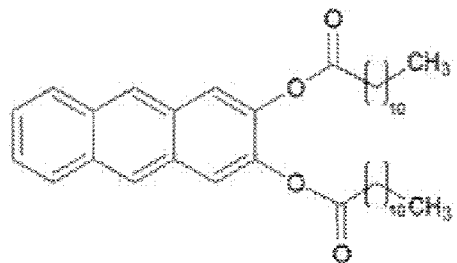
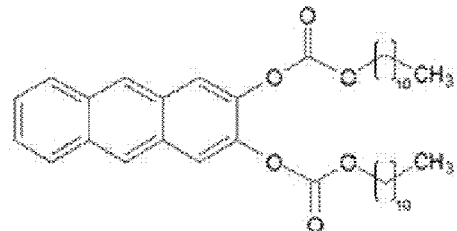
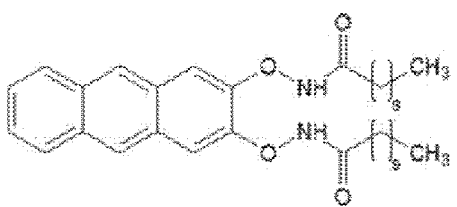
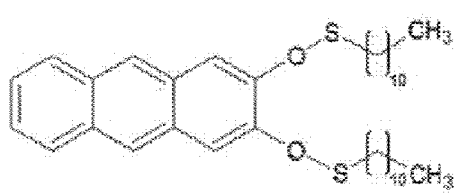
[602]

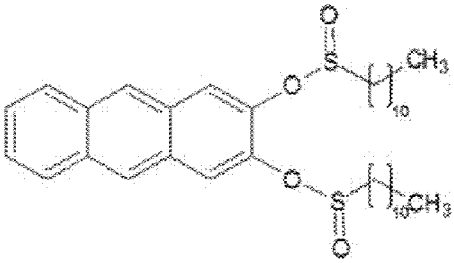
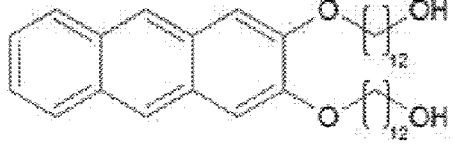
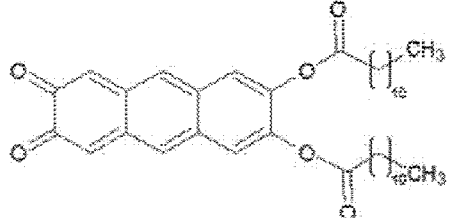
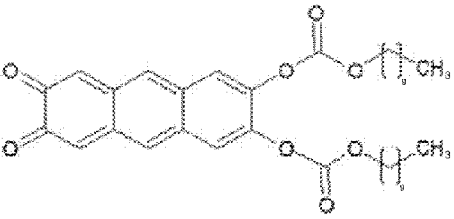
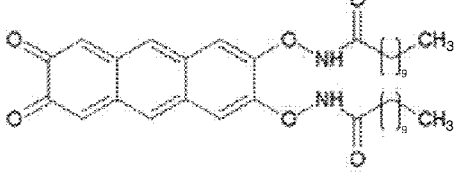
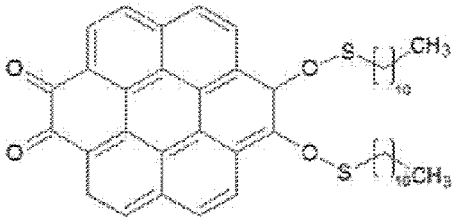
[603] 화합물 제조예 7C : 6,7-다이옥소-6,7-다이하이드로안트라센-2,3-다이일다이도데카노에이트의 제조

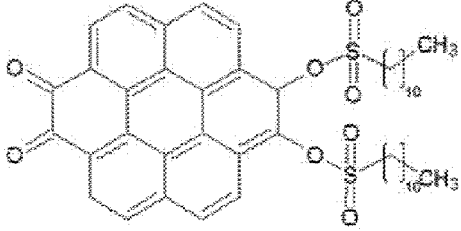
[604] 제조예 2B의 2B-1 단계에서 1-브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 2B 및 제조예 2C와 동일한 방법을 차례로 수행하여 6,7-다이옥소-6,7-다이하이드로안트라센-2,3-다이일다이도데카노에이트(화합물 73)를 얻었다.

[605] [표7]

화합물 제조예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수율(%)
7A	71		안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라도데카노에이트	도데카노일브로마이드	71
7A	71-1		안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라운데카네펴옥소에이트	1-(브로모옥시)-1-옥소운데칸	64
7A	71-2		N,N',N'',N'''-(안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라키스(옥시))테트라운데칸아마이드	N-브로모운데칸아마이드	67
7A	71-3		2,3,6,7-테트라키스((운데실사이오)옥시)안트라센	운데실사이오브로마이드	38
7A	71-4		안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라키스(도데칸-1-설퍼네이트)	도데실설퍼닐브로마이드	59
7A	71-5		12,12',12'',12'''-(안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도	12-브로모도데칸-1-올	33

			데칸-1-올)		
7A	71-6		안트라센-2,3,6,7-테트라일)테트라키스(옥시)테트라도데카오닉산	12-브로모도데카오닉산(cas number 73367-80-3)	56
7B	72		안트라센-2,3-다이일다이도데카노에이트	도데카노일브로마이드	42
7B	72-1		안트라센-2,3-다이일다이운데실다이카보네이트	카보노브로믹산, 운데실에스터	33
7B	72-2		N,N'-(안트라센-2,3-다이일비스(옥시))다이운데칸아마이드	N-브로모운데칸아마이드	58
7B	72-3		2,3-비스((운데실싸이오)옥시)안트라센	운데실싸이오브로마이드	37

7B	72-4		안트라센-2,3-다이일비스(운데칸-1-설퍼네이트)	운데실설퍼닐브로마이드	40
7B	72-5		12,12'-(안트라센-2,3-다이일비스(옥시))비스(도데칸-1-올)	12-브로모도데칸-1-올	32
7C	73		6,7-다이옥소-6,7-다이하이드로안트라센-2,3-다이일다이도데카노에이트	도데카노일브로마이드	49
7C	73-1		다이데실(6,7-다이옥소-6,7-다이하이드로안트라센-2,3-다이일)다이카보네이트	카보노브로믹산, undecyl ester	38
7C	73-2		N,N'-((6,7-다이옥소-6,7-다이하이드로안트라센-2,3-다이일)비스(옥시))다이운데칸아민	N-브로모운데칸아마이드	62
7C	73-3		7,8-비스((운데실싸이오)옥시)코로네네-1,2-다이온	운데실싸이오브로마이드	59

7C	73-4		7,8-다이옥소-7,8-다이하이드로코로네네-1,2-다이일비스(운데칸-1-설포네이트)	운데실설포닐브로마이드	83
----	------	---	--	-------------	----

[606]

[607] 화합물 제조예 8A : 코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라도데카노에이트의 제조

[608] 제조예 3A의 3A-6 단계에서 브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 3A와 동일한 방법을 사용하여 코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라도데카노에이트(화합물 81)를 얻었다.

[609]

[610] 화합물 제조예 8B : 코로네네-1,2-다이일다이도데카노에이트의 제조

[611] 제조예 3B에서 브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 3B와 동일한 방법을 사용하여 코로네네-1,2-다이일다이도데카노에이트(화합물 82)를 얻었다.

[612]

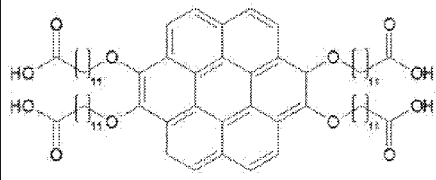
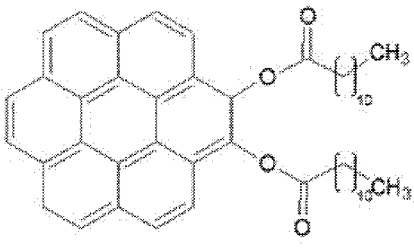
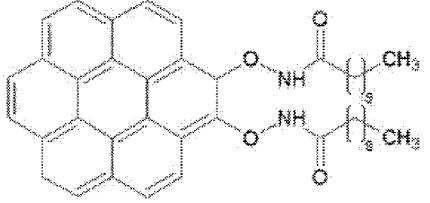
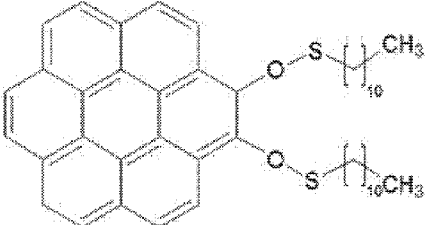
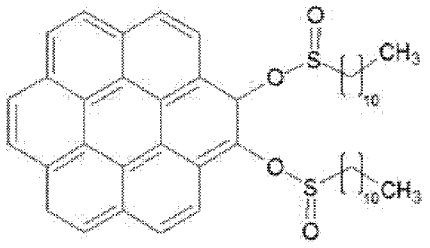
[613] 화합물 제조예 8C : 7,8-다이옥소-7,8-다이하이드로코로네네-1,2-다이일다이도데카노에이트의 제조

[614]

[615] 제조예 3B에서 브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 3B 및 제조예 3C와 동일한 방법을 차례로 수행하여 7,8-다이옥소-7,8-다이하이드로코로네네-1,2-다이일다이도데카노에이트(화합물 83)를 얻었다.

[616] [표8]

화합물 제 조 예	화합 물 번 호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수 율(%)
8A	81		코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라도데카노에이트	도데카노일브로마이드	28
8A	81-1		코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라키스(운데실)테트라카보네이트	카보노브로믹산, 운데실에스터	66
8A	81-2		N,N',N'',N'''-(코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라키스(옥시))테트라운데칸아마이드	N-브로모운데칸아마이드	49
8A	81-3		1,2,7,8-테트라키스((운데실싸이오)옥시)코로네네	운데실싸이오브로마이드	47
8A	81-4		코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라키스(운데칸-1-설퍼네이트)	운데실설퍼닐브로마이드	56
8A	81-5		12,12',12'',12'''-(코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-올)	12-브로모도데칸-1-올	49

8A	81-6		(코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라키스(옥시))테트라도데카오닉산	12-브로모도데카오닉산(cas number 73367-80-3)	51
8B	82		코로네네-1,2-다이일다이도데카노에이트	도데카노일브로마이드	61
8B	82-1		N,N'-(코로네네-1,2-다이일비스(옥시))다이운데칸아마이드	N-브로모운데칸아마이드	79
8B	82-2		1,2-비스((운데실싸이오)옥시)코로네네	운데실싸이오브로마이드	79
8B	82-3		코로네네-1,2-다이일비스(운데칸-1-설피네이트)	운데실설피닐브로마이드	75

8B	82-4		12,12'-(코로네네-1,2-다이일비스(옥시))비스(도데칸-1-올)	12-브로모도데칸-1-올	31
8B	82-5		2,2'-((((coronene-1,2-다이일비스(옥시))비스(에탄-3,1-다이일))비스(옥시))비스(에탄-2,1-다이일))비스(옥시))비스(에탄-2,1-다이일))비스(옥시))비스(에탄-1-올)	1-브로모-2-(2-(2-(2-하이드록시에톡시)에톡시)에탄	59
8C	83		7,8-다이옥소-7,8-다이하이드로코로네네-1,2-다이일다이도데카노에이트	도데카노일브로마이드	35
8C	83-1		다이운데실(7,8-다이옥소-7,8-다이하이드로코로네네-1,2-다이일)	카보노브로믹산, unde실에스터	51
8C	83-2		N,N'-((7,8-다이옥소-7,8-다이하이드로코로네네-1,2-다이일)비스(옥시))다이운데칸아마이드	N-브로모운데칸아마이드	45

[617]

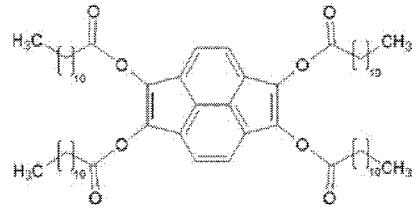
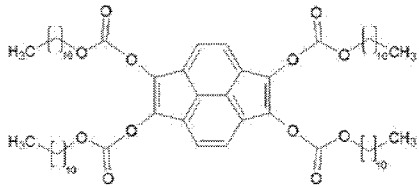
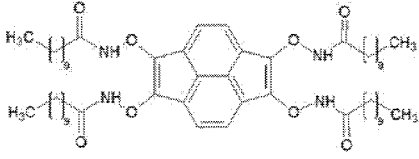
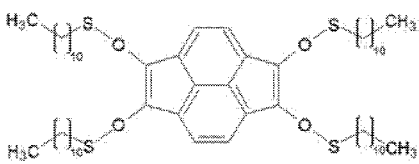
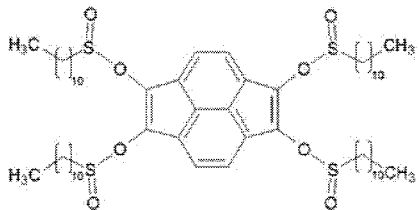
[618]

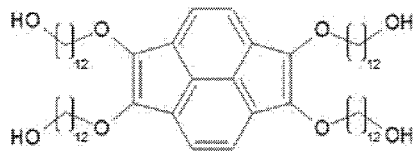
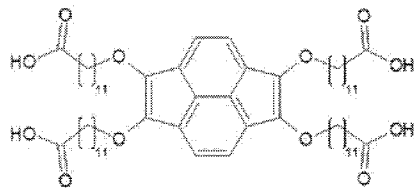
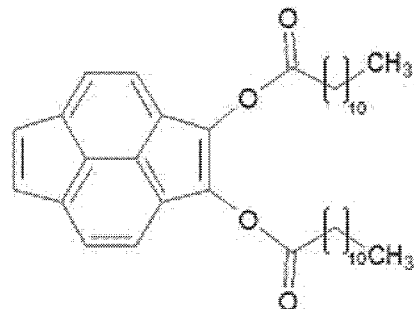
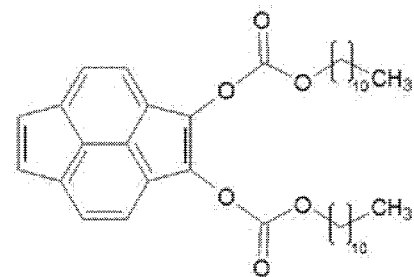
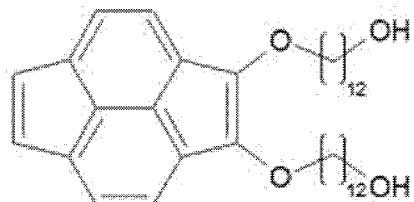
화합물 제조예 9A : 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-

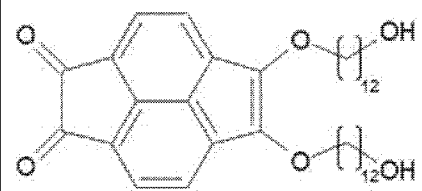
테트라일테트라도데카노에이트의 제조

- [619] 제조예 4A의 4A-4 단계에서 브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 4A와 동일한 방법을 사용하여 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라일테트라도데카노에이트(화합물 91)를 얻었다.
- [620]
- [621] 화합물 제조예 9B : 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다일다이드테카노에이트의 제조
- [622] 제조예 4B-2에서 브로모도데실 대신 도데카노일 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 4B와 동일한 방법을 사용하여 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다일다이드테카노에이트(화합물 92)를 얻었다.
- [623] 화합물 제조예 9C : 5,6-비스((12-하이드록시도데실)옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이온의 제조
- [624] 제조예 4C에서 브로모도데실 대신 12-브로모도데칸-1-올을 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 4C와 동일한 방법을 사용하여 5,6-비스((12-하이드록시도데실)옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이온(화합물 93)를 얻었다.
- [625]

[626] [표9]

화합물 제 조 예	화합 물 번 호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수 율(%)
9A	91		사이클로펜타[fg]]아세나프틸렌-1 ,2,5,6-테트라일 테트라도데카노 에이트	도데카노일 브로마이드	39
	91-1		사이클로펜타[fg]]아세나프틸렌-1 ,2,5,6-테트라일 테트라키스(운 데실)테트라카 보네이트	카보노브로 믹 산, 운데실 에스터	54
	91-2		N,N',N'',N'''-(사 이클로펜타[fg]]아세나프틸렌-1, 2,5,6-테트라일 테트라키스(옥 시))테트라운데 칸아마이드	N-브로모운 데칸아마이 드	31
	91-3		1,2,5,6-테트라키 스((운데실싸이 오)옥시)사이클 로펜타[fg]아세 나프틸렌	운데실싸이 오브로마이 드	80
	91-4		사이클로펜타[fg]]아세나프틸렌-1 ,2,5,6-테트라일 테트라키스(운 데칸-1-설피네이 트)	운데실설피 닐 브로마이드	28

9B	91-5		12,12',12'',12'''-(1,2,5,6-사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(도데칸-1-올))	12-브로모도데칸-1-올	76
	91-6		12,12',12'',12'''-(사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라일테트라키스(옥시))테트라도데카오닉산	12-브로모도데카오닉산(cas number 73367-80-3)	70
	92		사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다일다이도데카노에이트	도데카노일브로마이드	85
	92-1		사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이일다이운데실다이카보네이트	카보노브로믹산, 운데실에스테르	80
	92-2		12,12'-(사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2-다이일비스(옥시))비스(도데칸-1-올)	12-브로모도데칸-1-올	63

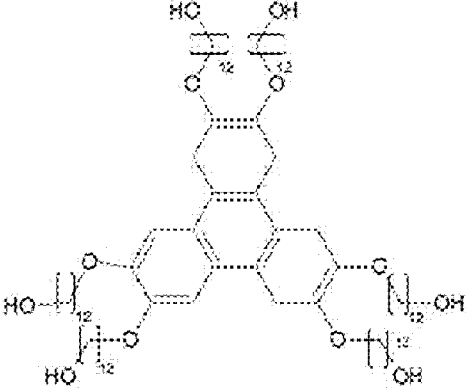
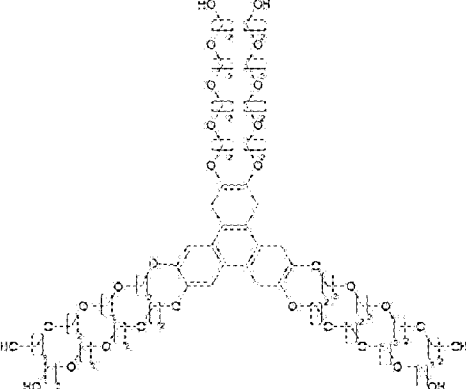
9C	93		5,6-비스((12-하이드록시도데실)옥시)사이클로펜타[fg]아제나프틸렌-1,2-다이온	12-브로모도데칸-1-올	37
----	----	---	---	---------------	----

[627] 화합물 제조예 10A :

[628] 12,12',12'',12''',12'''',12'''''-(트라이페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥사일헥사키스(옥시))헥사키스(도데칸-1-올)의 제조

[629] 제조예 5A-2에서 브로모도데실 대신 12-브로모도데칸-1-올을 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 5A와 동일한 방법을 사용하여 12,12',12'',12''',12'''',12'''''-(트라이페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥사일헥사키스(옥시))헥사키스(도데칸-1-올)(화합물 101)을 얻었다.

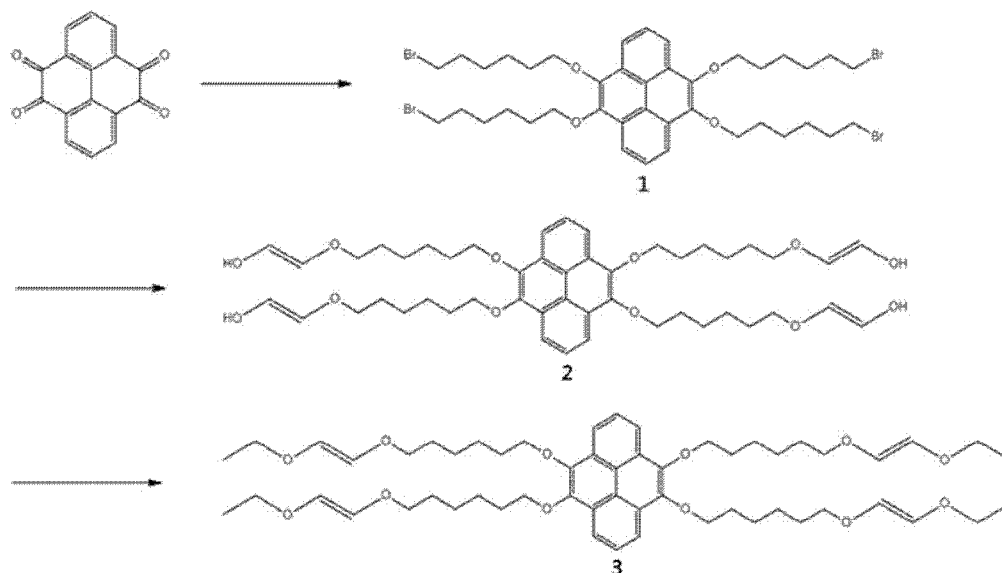
[630] [표10]

화합물 제조예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수율 (%)
10A	101		12,12',12'',12''' ,12''',12''''-(트 라이페닐렌-2 ,3,6,7,10,11- 헥사일헥사 키스(옥시)) 헥사키스(도 데칸-1-올)	12-브로 모도데 칸-1-올	50
	101-1		2,2',2'',2''',2''''-((((((트 라이페닐렌-2 ,3,6,7,10,11- 헥사일헥사 키스(옥시)) 헥사키스(에 탄-2,1-다이 일))헥사키스 (옥시))헥사 키스(에탄-2, 1-다이일))헥 사키스(옥시))헥사키스(에 탄-2,1-다이 일))헥사키스 (옥시))헥사 에탄올	1-브로모 -2-(2-(2-(2-하이드 록시에 톡시)에 톡시)에 톡시)에 탄	56

[631] 화합물 제조예 11A : 4,5,9,10-테트라키스((6-((2-에톡시비닐)옥시)헥실)옥시
)파이렌의 제조

[632] [반응식 15]

[633]

[634] 11A-1. 4,5,9,10-테트라키스((6-브로모헥실)옥시)파이렌(1)의 제조

[635] 브로모도데실(bromododecyl)을 대신

1,6-다이브로모헥산(1,6-dibromohexane)을 첨가한 것을 제외하고는, 상기 제조에 1A의 1A-2단계와 동일한 방법으로

4,5,9,10-테트라키스((6-브로모헥실)옥시)파이렌(1)을 제조하였다.

[636] 4,5,9,10-테트라키스((6-브로모헥실)옥시)파이렌 : $^1\text{H NMR}$ (600MHz, CDCl_3) δ 8.00(d,4H), 7.82(m,2H), 4.16(d,8H), 3.51(t,8H), 1.73(m,16H), 1.43-1.29(m,8H)

[637] 11A-2. 2,2',2'',2'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라에탄올(2)의 제조

[638] 11A-1의 결과물인 4,5,9,10-테트라키스((6-브로모헥실)옥시)파이렌(1 mmol)과 1,2-에텐다이올(5 mmol)을 다이메틸포름아마이드(20 ml)에 녹인 후 80°C 에서 환류시키며 14시간동안 반응시켰다. 그 후 클로로포름으로 추출하고 마그네슘설파이트로 수분을 제거한 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 2,2',2'',2'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라에탄올(2)을 얻었다.

[639] 2,2',2'',2'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라에탄올: $^1\text{H NMR}$ (600MHz, CDCl_3) δ 16.7(s,4H), 8.00(d,4H), 7.82(m,2H), 6.44(d,4H), 4.15(m,12H), 1.71(m,16H), 1.43(m,16H)

[640] 11A-3. 4,5,9,10-테트라키스((6-((2-에톡시비닐)옥시)헥실)옥시)파이렌(3)의 제조

[641] 11A-2의 결과물인

2,2',2'',2'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라에탄올(1 mmol)과 1-브로모에탄(6 mmol)을 테트라하이드로퓨란(30 ml)에 넣고 70°C 에서 12시간동안 환류시키며 반응하여 4,5,9,10-테트라키스((6-((2-에톡시비닐)옥시)헥실)옥시)파이렌(3),

화합물 111)을 얻었다.

[642]

[643] 4,5,9,10-테트라키스((6-((2-에톡시비닐)옥시)헥실)옥시)파이렌 : 1H NMR(600MHz, CDCl₃) δ 8.00(d,4H), 7.82(m,2H), 5.40(s, 4H), 4.49(t,4H), 4.16(t, 8H), 4.01(t, 8H), 1.71(m,16H), 1.43(m,16H), 1.21(t,12H)

[644]

[645] 화합물 제조예 11B : 2,3,6,7-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헥틸)옥시)안트라센의 제조

[646] 11B-1. 2,3,6,7-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)안트라센의 제조

[647] 제조예 2A의 2A-3 단계에서 1-브로모도데칸 대신에 1,7-다이브로모헥탄을 첨가한 것을 제외하고는 제조예 2A와 동일한 방법으로 2,3,6,7-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)안트라센을 얻었다.

[648] 11B-2. 2,3,6,7-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헥틸)옥시)안트라센의 제조

[649] 제조예 11A의 11A-2단계에서 4,5,9,10-테트라키스((6-브로모헥실)옥시)파이렌 대신에 2,3,6,7-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)안트라센을 첨가한 것을 제외하고는 제조예 11A의 11A-2단계 및 11A-3단계를 수행하여 2,3,6,7-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헥틸)옥시)안트라센(화합물 112)을 얻었다.

[650]

[651] 화합물 제조예 11C : 1,2,7,8-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헥틸)옥시)코로네네의 제조

[652] 11C-1. 1,2,7,8-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)코로네네의 제조

[653] 제조예 3A의 3A-6 단계에서 브로모도데실 대신에 1,7-다이브로모헥탄을 첨가한 것을 제외하고는 제조예 3A와 동일한 방법으로 1,2,7,8-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)코로네네를 얻었다.

[654] 11C-2. 1,2,7,8-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헥틸)옥시)코로네네의 제조

[655] 제조예 11A의 11A-2단계에서 4,5,9,10-테트라키스((6-브로모헥실)옥시)파이렌 대신에 1,2,7,8-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)코로네네를 첨가한 것을 제외하고는 제조예 11A의 11A-2단계 및 11A-3단계를 수행하여 1,2,7,8-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헥틸)옥시)코로네네(화합물 113)를 얻었다.

[656] 화합물 제조예 11D : 1,2,5,6-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헥틸)옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 제조

[657] 11D-1. 1,2,5,6-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 제조

[658] 제조예 4A의 4A-4 단계에서 브로모도데실 대신에 1,6-다이브로모헥탄을 첨가한 것을 제외하고는 제조예 4A와 동일한 방법으로 1,2,5,6-테트라키스((7-브로모헥틸)옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌을

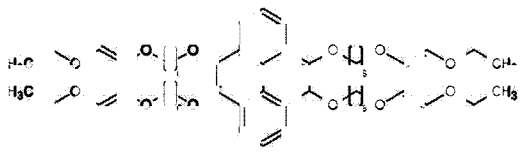
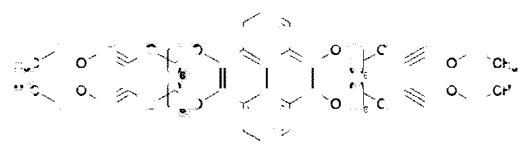
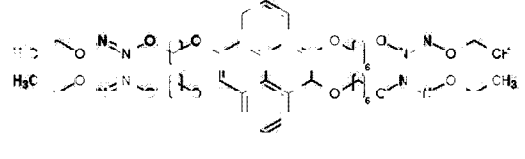
얻었다.

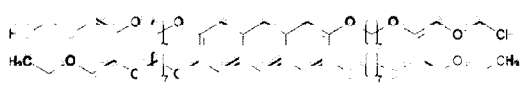
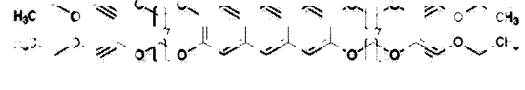
[659] 11D-2. 1,2,5,6-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헵틸)옥시)사이클로펜
타[fg]아세나프틸렌의 제조

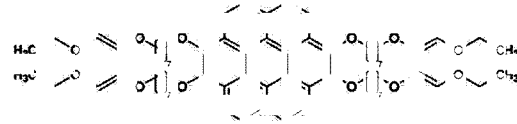
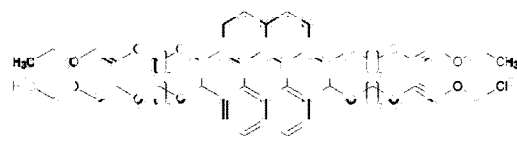
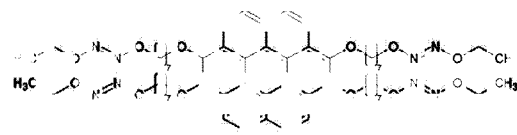
[660] 제조예 11A의 11A-2단계에서 4,5,9,10-테트라키스((6-브로모헥실)옥시)파이렌
대신에

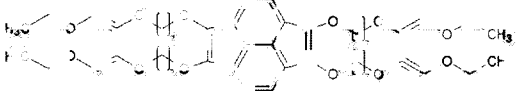
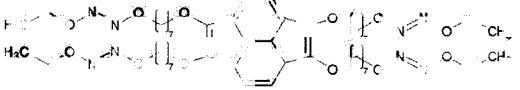
1,2,5,6-테트라키스((7-브로모헵틸)옥시)사이클로펜타[fg]아세나프틸렌을
첨가한 것을 제외하고는 제조예 11A의 11A-2단계 및 11A-3단계를 수행하여
1,2,5,6-테트라키스((7-((2-에톡시비닐)옥시)헵틸)옥시)사이클로펜타[fg]아세나프
틸렌(화합물 114)을 얻었다.

[661] [표11]

화합물 제 조 예	화합 물 번 호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수 율(%)
11A	111		4,5,9,10-테 트라키스((6-((2-에톡 시비닐)옥 시)헥실)옥 시)파이렌	1,2-에틴다 이올	
	111-1		4,5,9,10-테 트라키스((6-((에톡시 에틴일)옥 시)헥실)옥 시)파이렌	1,2-에틴다 이올	71
	111-2		4,5,9,10-테 트라키스((6-((에톡시 다이하제 닐)옥시)헥 실)옥시)파 이렌	하이포니 트루스 산(Hyponi trous acid)	37

11B	112		2,3,6,7-테 트라키스((7-((2-에톡 시비닐)옥 시)헵틸)옥 시)안트라 센	1,2-에 틴다 이올	44
	112-1		2,3,6,7-테 트라키스((7-((에톡시 에틸)옥 시)헵틸)옥 시)안트라 센	1,2-에 틴다 이올	58
	112-2		2,3,6,7-테 트라키스((7-((에톡시 다이아제 닐)옥시)헵 틸)옥시)안 트라센	하이포니 트러스 산(Hyponi trous acid)	25

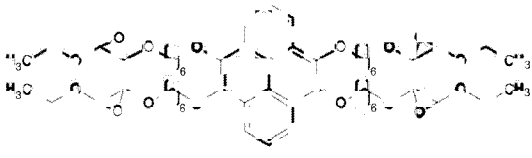
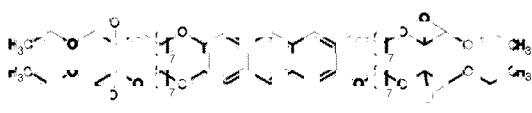
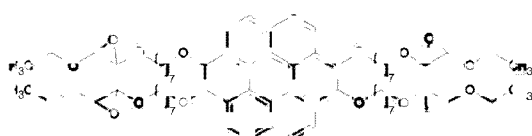
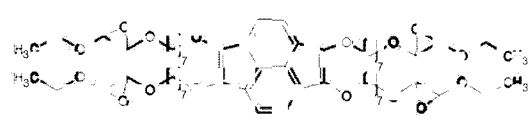
11C	113		1,2,7,8-테 트라키스((7-((2-에톡 시비닐)옥 시)헵틸)옥 시)코로네 네	1,2-에 틴다 이올	79
	113-1		1,2,7,8-테 트라키스((7-((에톡시 에틴닐)옥 시)헵틸)옥 시)코로네 네	1,2-에 틴다 이올	42
	113-2		1,2,7,8-테 트라키스((7-((에톡시 다이아제 닐)옥시)헵 틸)옥시)코 로네네	하이포니 트러스 산(Hyponi trous acid)	53

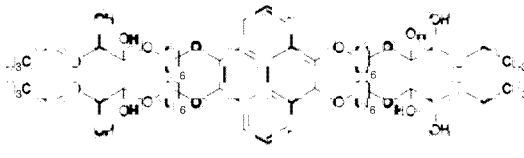
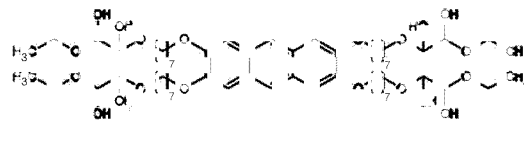
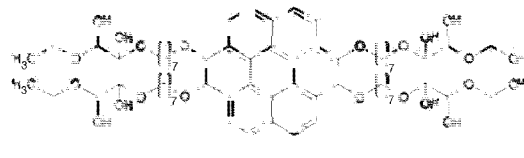
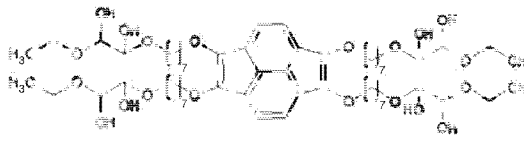
11D	114		1,2,5,6-테트라키스((2-에톡시비닐)옥시)헵틸)옥시)-1,2,5,6-테트라하이드로사이클로펜타[fg]아세나프틸렌	1,2-에틸다이올	71
	114-1		1,2,5,6-테트라키스((2-에톡시비닐)옥시)헵틸)옥시)-1,2,5,6-테트라하이드로사이클로펜타[fg]아세나프틸렌	1,2-에틸다이올	32
	114-2		1,2,5,6-테트라키스((2-에톡시비닐)옥시)헵틸)옥시)-1,2,5,6-테트라하이드로사이클로펜타[fg]아세나프틸렌	하이포니트루스산(Hypotritous acid)	34

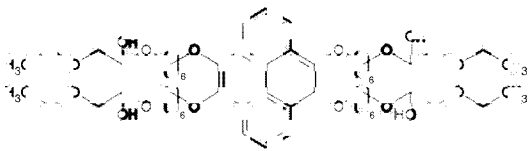
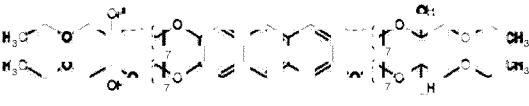
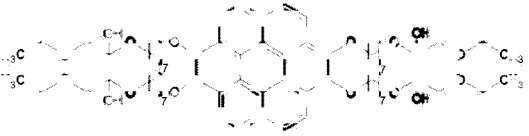
[662] 화합물 제조예 12A : 4,5,9,10-테트라키스((6-((3-에톡시옥시렌-2-일)옥시)헥실)옥시)파이렌의 제조

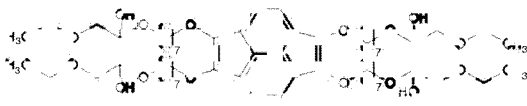
- [663] 염화철 (0.001 mmol)을 톨루엔(2 ml)에 녹인 후 질소로 충분히 치환한 다음 제조예 11A에서 얻은 4,5,9,10-테트라키스((6-((2-에톡시비닐)옥시)헥실)옥시)파이렌(화합물 111, 1 mmol)을 넣고 환류하며 10시간 동안 반응시켰다. 그 후, 클로로포름을 이용하여 추출하고 클로로포름과 헥세인을 전개액으로 하여 플래쉬 컬럼을 실시하여 4,5,9,10-테트라키스((6-((3-에톡시옥시렌-2-일)옥시)헥실)옥시)파이렌(화합물 121)을 제조하였다(수율 : 68%).
- [664]
- [665] 화합물 제조예 12B : 2,2',2'',2'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라키스(1-에톡시에탄-1,2-다이올)의 제조
- [666] 제조예 12A를 통해 형성된 4,5,9,10-테트라키스((6-((3-에톡시옥시렌-2-일)옥시)헥실)옥시)파이렌(화합물 121) 2 mmol을 메탄올과 다이클로로메탄(1:1v)혼합용액 5 ml에 녹인 후 철(III)포피린 콤플렉스 메소-테트라키스(2,3,5,6-테트라플로로-4-N,N,N-트라이메틸아닐니우밀)프로피나토에 첨가하여 상온에서 12시간 동안 교반하면 최종 생성물인 2,2',2'',2'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라키스(1-에톡시에탄-1,2-다이올)(화합물 122)을 얻었다(수율 : 37%)
- [667]
- [668] 화합물 제조예 12C : 1,1',1'',1'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라키스(2-에톡시에탄올)의 제조
- [669] 제조예 12A를 통해 형성된 4,5,9,10-테트라키스((6-((3-에톡시옥시렌-2-일)옥시)헥실)옥시)파이렌(화합물 121) 1mmol과 NaBH₄ 2mmol을 요소/클로린 클로라이드 유테틱 염 1 ml에 넣고 60 °C에서 30분간 반응시키면 최종 생성물인 1,1',1'',1'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라키스(2-에톡시에탄올)(화합물 123)을 얻을 수 있다.(수율 : 76%)

[670] [표12]

화합물 제 조 예	화합 물 번 호	화합물 구조	화합물명	교체 반응 물	수율(%)
12A	121		4,5,9,10-테트라키스((6-((3-에톡시옥시)-2-일)옥시)헥실)옥시)파이렌	화합물 101	68
12A	121-1		2,3,6,7-테트라키스((7-((3-에톡시옥시)-2-일)옥시)헵틸)옥시)안트라센	화합물 102	79
12A	121-2		1,2,7,8-테트라키스((7-((3-에톡시옥시)-2-일)옥시)헵틸)옥시)코로네네	화합물 103	63
12A	121-3		1,2,5,6-테트라키스((7-((3-에톡시옥시)-2-일)옥시)헵틸)옥시)-1,2,5,6-테트라하이드로사이클로펜타[fg]아세나프틸렌	화합물 104	65

12B	122		2,2',2'',2'''-(((과 이렌-4,5,9,10- 테트라일테트 라키스(옥시)) 테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라 키스(1-에톡시 에탄-1,2-다이 올)	화합 물 111	37
12B	122- 1		2,2',2'',2'''-(((안 트라센-2,3,6,7 -테트라일테 트라키스(옥 시))테트라키 스(헵탄-7,1- 다이일))테트 라키스(옥시)) 테트라키스(1- 에톡시에탄-1, 2-다이올)	화합 물 111- 1	45
12B	122- 2		2,2',2'',2'''-(((코 로네네-1,2,7,8 -테트라일테 트라키스(옥 시))테트라키 스(헵탄-7,1- 다이일))테트 라키스(옥시)) 테트라키스(1- 에톡시에탄-1, 2-다이올)	화합 물 111- 2	25
12B	122- 3		2,2',2'',2'''-((((1 ,2,5,6-테트라 하이드로사이 클로펜타[fg]	화합 물 111- 3	24

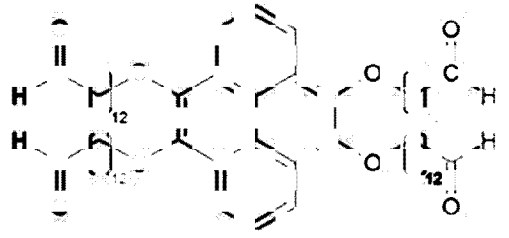
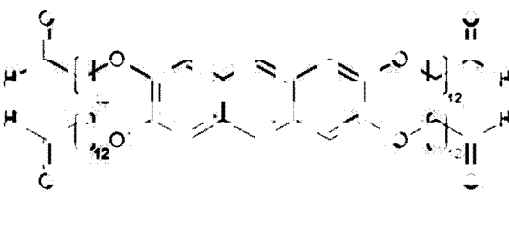
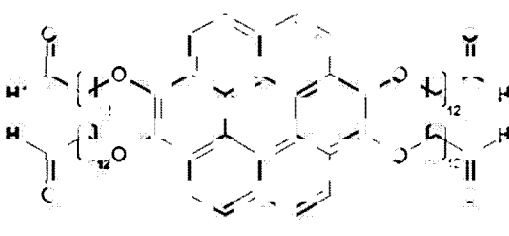
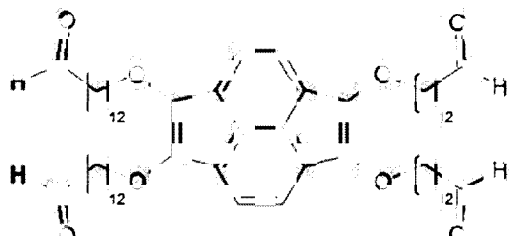
			아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헵탄-7,1-다일))테트라키스(옥시))테트라키스(1-에톡시에탄-1,2-다이올)		
12C	123		1,1',1'',1'''-(((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헥산-6,1-다일))테트라키스(옥시))테트라키스(2-에톡시에탄올)	화합물 111	76
12C	123-1		1,1',1'',1'''-(((안트라센-2,3,6,7-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헵탄-7,1-다일))테트라키스(옥시))테트라키스(2-에톡시에탄올)	화합물 111-1	57
12C	123-2		1,1',1'',1'''-(((코로네네-1,2,7,8-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(헵탄-7,1-	화합물 111-2	52

			다일))테트라 키스(옥시))테 트라키스(2-에 톡시에탄올)		
12C	123- 3		1,1',1'',1'''-(((1 ,2,5,6-테트라 하이드로사이 클로펜타[fg] 아세나프틸렌 -1,2,5,6-테트 라일)테트라 일테트라키스 (옥시))테트라 키스(헵탄-7,1 -다일))테트라 키스(옥시))테 트라키스(2-에 톡시에탄올)	화합 물 111- 3	65

[671] 화합물 제조예 13A. 13,13',13'',13'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라아일테트라키스(옥시))테트라트라이데카날의 제조

[672] 0°C 다이클로로메탄(1 ml)에 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-올)(화합물 61-5)(0.8 mmol)을 넣은 후 0.5M의 KBr(0.16 ml)를 넣고, pH 8.6에 0.35M의 소듐 하이포클로라이트 (2.86 ml)를 넣고 3시간동안 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 유기물 층만 추출하여 마그네슘 설페이트로 수분을 제거하고 증발시킨 다음 컬럼을 통하여 최종 생성물 13,13',13'',13'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라아일테트라키스(옥시))테트라트라이데카날(화합물 131)을 얻었다. (수율 38%)

[673] [표13]

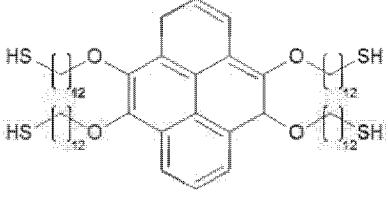
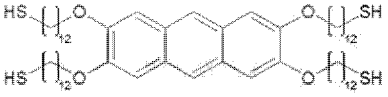
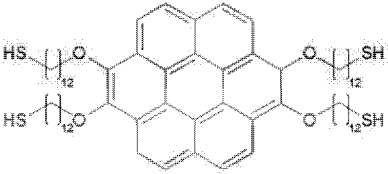
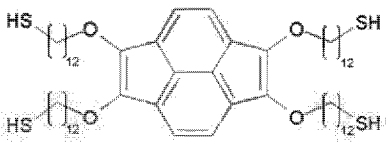
화합물 제 조 예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수 율(%)
13A	131		13,13',13'',1 3'''-(파이렌- 4,5,9,10-테 트라아일테 트라키스(옥시))테트 라트라이데 카날	화합물 61-5	38
	131-1		13,13',13'',1 3'''-((테트라 데카하이드 로안트라센 -2,3,6,7-테 트라일)테 트라키스(옥시))테트 라트라이데 카날	화합물 71-5	39
	131-2		13,13',13'',1 3'''-(코로네 네-1,2,7,8- 테트라일테 트라키스(옥시))테트 라트라이데 카날	화합물 81-5	38
	131-3		13,13',13'',1 3'''-(사이클 로펜타[fg] 아세나프틸 렌-1,2,5,6- 테트라일테	화합물 91-5	30

		트라키스(옥시))테트라라이데카날		
--	--	-------------------	--	--

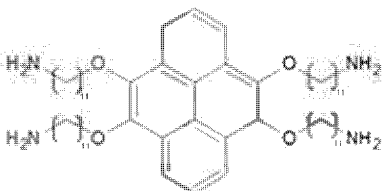
- [674] 화합물 제조예 14A : 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)의 제조
- [675] 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-올)(화합물 61-5) 10 mmol에 하이드로젠 설파이드 15 mmol과 다이소듐카보네이트 4 mmol, 칼슘 카보네이트 하이드록사이드 포스페이트 3 mmol을 250 °C에서 교반하며 열반응 시키면 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)(화합물 141)을 얻었다(수율 47%)
- [676] 화합물 제조예 14B : 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-아민)의 제조
- [677] 화합물 제조예 14A에서 얻어진 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)(화합물 141) 10mmol에 7.5bar의 NH₃를 주입하며 RuHCl(a-iPr-PNP)(CO) 0.01mmol을 톨루엔을 용매로하여 아르곤 분위기에서 12시간동안 환류하며 반응하면 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-아민)(화합물 142)을 얻었다(수율:73%)
- [678] 화합물 제조예 14C : 11,11'-(파이렌-4,5-다이일비스(옥시))다이(도데칸-1-아민)의 제조
- [679] 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-올)(화합물 61-5) 10 mmol 대신에, 12,12'-(안트라센-2,3-다이일비스(옥시))비스(도데칸-1-올)(화합물 72-5) 20 mmol을 사용한 것을 제외하고는 화합물 제조예 14A와 동일한 과정을 거쳐 11,11'-(파이렌-4,5-다이일비스(옥시))다이(도데칸-1-사이올)을 얻었다.
- [680] 이 후, 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)(화합물 141) 10mmol 대신에, 위에서 얻어진 11,11'-(파이렌-4,5-다이일비스(옥시))다이(도데칸-1-사이올) 20 mmol을 사용한 것을 제외하고는 화합물 제조예 14B와 동일한 과정을 거쳐 11,11'-(파이렌-4,5-다이일비스(옥시))다이(도데칸-1-아민)(화합물 143)을 얻었다(수율 57%).
- [681] 화합물 제조예 14D : 11,11',11'',11'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(운데칸-1-아민)의 제조

- [682] 제조예 1A의 1A-2 단계에서 브로모도데실 대신 12-브로모운데칸-1-올을 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1A와 동일한 방법을 사용하여 11,11',11'',11'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(운데칸-1-올)을 얻었다.
- [683] 12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(도데칸-1-올)(화합물 61-5) 대신에, 상기 11,11',11'',11'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(운데칸-1-올)을 사용한 것을 제외하고는 화합물 제조예 14A와 동일한 과정을 거쳐 11,11',11'',11'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(운데칸-1-사이올)을 얻었다.
- [684] 이 후,
12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)(화합물 141) 대신에, 위에서 얻어진 11,11',11'',11'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(운데칸-1-사이올)을 사용한 것을 제외하고는 화합물 제조예 14B와 동일한 과정을 거쳐 11,11',11'',11'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(운데칸-1-아민)(화합물 144)을 얻었다(수율 70%).

[685] [표14]

화합물 소재 조예	화합물 번호	화합물 구조	화합물명	교체 반응물	수 율(%)
14A	141		12,12',12'',12'''- (파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)	화합물 61-5	47
	141-1		12,12',12'',12'''- ((테트라에카하이드로안트라센-2,3,6,7-테트라일)테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)	화합물 71-5	43
	141-2		12,12',12'',12'''- (코로네네-1,2,7,8-테트라닐테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)	화합물 81-5	77
	141-3		12,12',12'',12'''- (사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라닐테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-사이올)	화합물 91-5	59

14B	142		12,12',12'',12'''-((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시)테트라키스(도데칸-1-아민))	화합물 141	73
14B	142-1		12,12',12'',12'''-(((테트라에카하이드로안트라센-2,3,6,7-테트라일)테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-아민))	화합물 141-1	45
14B	142-2		12,12',12'',12'''-((코로네네-1,2,7,8-테트라닐테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-아민))	화합물 141-2	35
14B	142-3		12,12',12'',12'''-((사이클로펜타[fg]아세나프틸렌-1,2,5,6-테트라닐테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-아민))	화합물 141-3	50
14C	143		11,11'-(파이렌-4,5-다이일비스(옥시))다이(도데칸-1-아민)		57

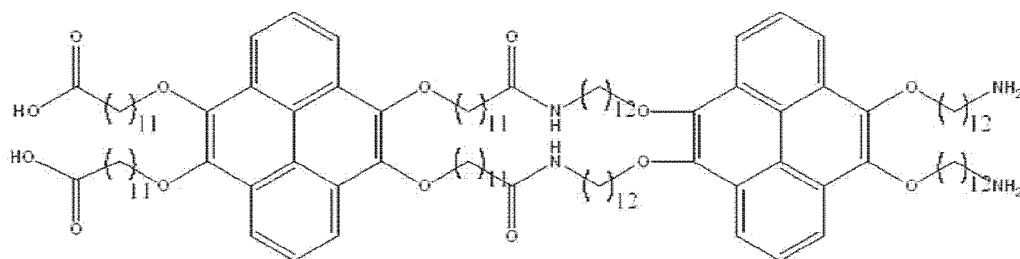
14D	144		11,11',11'',11'''-((파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(운데칸-1-아민))	70
-----	-----	---	---	----

[686]

[687] 화합물 제조예 15A: 화합물 151의 제조

[688] [화합물 151]

[689]



[690] 상기에서 얻어진

12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라도데카노익산(화합물 61-6)(10mmol)과

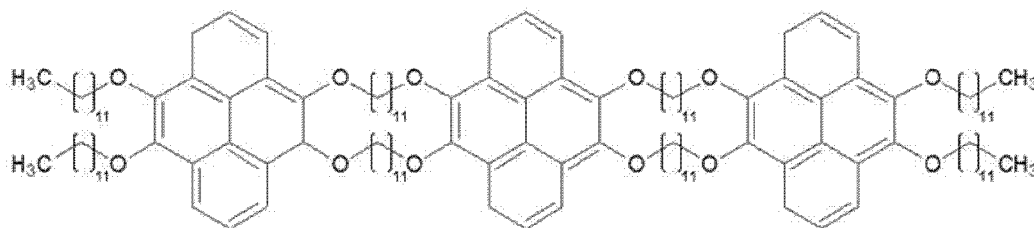
12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(도데칸-1-아민)(화합물 142)(10mmol)을, 증류수(70ml), 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹여 65°C에서 5시간 동안 환류시켜 최종생성물인 화합물 151을 얻었다.

[691] 도 23은 제조예 15A에 따른 화합물 151의 CDCl₃ 용매 하에서 측정한 ¹H-NMR 스펙트럼이다.

[692] 화합물 제조예 15B: 화합물 152의 제조

[693] [화합물 152]

[694]



[695] 제조예 1E 얻어진 4,5-비스(도데실옥시)-파이렌-9,10-다이온(화합물 15, 20 mmol)과 파이렌-4,5,9,10-테트라온(10 mmol)을 브로모테트라뷰틸암모늄(Bu₄NBr)(26mmol), 소듐하이드로설파이트(Na₂S₂O₄)(230mmol)와 함께, 증류수(70ml), 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹여 65°C에서 5분간 환류시킨 후

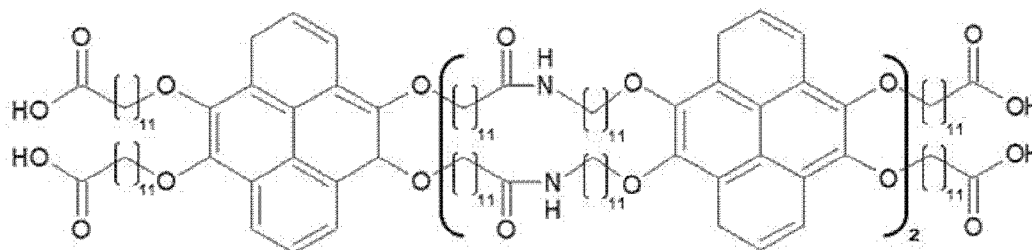
브로모도데실(bromododecyl)(60 mmol)과 KOH(306 mmol)을 증류수(50 ml)에 녹여서 만든 수용액을 첨가한 후 16시간 동안 65°C에서 환류시켜 화합물 152를 얻었다.

[696] 도 24는 제조예 15B에 따른 화합물 152의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

[697] 화합물 제조예 15C: 화합물 153의 제조

[698] [화합물 153]

[699]



[700] 상기에서 얻어진

12,12',12'',12'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라도데카노익 산(화합물 61-6)(20 mmol)과

11,11',11'',11'''-(파이렌-4,5,9,10-테트라일테트라키스(옥시))테트라키스(운데칸-1-아민)(화합물 144)(10 mmol)을, 증류수(70ml), 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹여 65°C에서 5분간 환류시켜 화합물 153을 얻었다.

[701] 도 25는 제조예 15C에 따른 화합물 153의 CDCl_3 용매 하에서 측정한 $^1\text{H-NMR}$ 스펙트럼이다.

[702] 도 26a 및 도 26b는 화합물 제조예에 따른

4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 결정을 촬영한 광학사진들이다.

[703] 도 26a 및 도 26b를 참조하면, 유기 결정은 수 μm 의 폭과 수십 내지 수백 μm 의 길이를 갖는 로드-like 형태를 나타냄을 알 수 있다.

[704] 3차원 구조체 평가에 1: X-선 회절분석을 통한 3차원 구조체 구조의 확인

[705] X-선 회절은 D8 advance(Bruker 사)와 D/MAX RINT 2000 (Rikaku 사)를 사용하여 40 kV 및 100 mA 조건의 $\text{Cu-K}\alpha$ ($\lambda = 0.15418 \text{ nm}$) 조사(radiation)를 사용하여 $1^\circ \sim 45^\circ$ 까지 측정하였다. 또한, 프로그램 EXPO2013 [Altomare A, et al. EXPO2013: a kit of tools for phasing crystal structures from powder data. Journal of Applied Crystallography, 2013 46, 1231-1235]을 사용하여 결정구조를 확인할 수 있었다.

[706] 상기 측정방법을 사용하여 화합물 제조예에서 얻어진 화합물의 X-선 회절 스펙트럼 결과들은 다음과 같다.

[707] 도 27은 화합물 제조예에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

[708] 도 27을 참조하면, 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌의 경우 $a=37.523\text{\AA}$,

$b=34.476 \text{ \AA}$, 및 $c=9.340 \text{ \AA}$ (residuals: $R_p=8.532$, $R_{wp}=11.747$)의 orthorhombic 단위 격자를 갖는 결정을 형성하는 것을 확인할 수 있었다.

[709] 도 28은 화합물 제조예에 따른 따른

2,3,6,7-테트라키스(도데실옥시)안트라센(화합물 21)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

[710] 도 29는 화합물 제조예에 따른

1,2,7,8-테트라키스(도데실옥시)코로네네(화합물 31)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

[711] 도 30은 화합물 제조예에 따른

1,2,5,6-테트라키스(도데실옥시)사이클로펜타[f,g]아세나프탈렌(화합물 41)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

[712] 도 31은 화합물 제조예에 따른

2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌(화합물 51)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

[713] 도 32a 및 도 32b는 각각 도 27의 X-선 스펙트럼으로부터 유추된

4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌의 결정구조의 사시도와 상면도이다.

[714] 도 32a를 참조하면, 3차원 유기 구조체를 형성하는 단위 유기분자(UM)인

4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌 내의 네 개의 옥시기들(A)은 방향족 고리기, 즉, 파이렌(Ar) 내에 전자 풍부 영역(electron-rich region, δ^-)와 전자 결핍 영역(electron-deficient region, δ^+)으로 전자 구조의 편재화를 발생시킬 수 있다.

[715] 또한, 단위 유기분자인 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌 내에서 서로

인접한 도데실기들(Y)은 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용(PIa)에 의해 안정화되어 한 스트레인의 도데실기에 비해 유연성이 감소하여 보다 강직해질(rigid) 수 있다.

[716] 또한, 각 층 내에 서로 인접하는 단위 유기분자들 사이에서는 도데실기들의

말단 부분들(X)은 또한 물리적 상호작용(PIb)에 의해 결합될 수 있다. 이 때, 서로 인접하는 도데실기들의 말단부분들은 서로 맞물릴(interdigit) 수 있다.

[717] 한편, Z 방향으로 단위 유기분자들이 파이-파이 상호작용(PIc)에 의해

적층되는데, 이 때는 앞서 설명한 파이렌(Ar) 내에 편재화된 전자 풍부 영역(electron-rich region, δ^-)와 전자 결핍 영역(electron-deficient region, δ^+)으로 인해, Y방향으로 인접하는 파이렌기들(Ar) 사이에 전자 풍부 영역(δ^-)과 전자 결핍 영역 사이(δ^+)의 인력(PIc)이 발생하고, 이로 인해 제1층(F_1)의 화합물이 연장되는 방향(X)에 비해 제2층(F_2)의 화합물이 연장되는 방향은 90도 틀어져 Y방향이 되고, 또한, 제3층(F_3)의 화합물이 연장되는 방향은 다시 90도 틀어져 X방향이 될 수 있다.

[718] 도 32b를 참조하면, 이러한 3차원 유기 구조체 내에는 다수의 기공(V)이 형성된 것을 확인할 수 있다.

[719]

[720] 3차원 구조체 평가에 2: 질소 흡착 실험을 통한 다공성 구조 확인

[721] 질소 흡착 실험은 Autosorb-iQ2ST/MP 분석기(Quantachrome Instruments 사)를 사용하여 실시하였고, 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌 결정, 4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌 결정, 및 4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌 결정을 각각 16시간동안 상온에서 탈가스(degasing)한 후, 77K에서 질소를 사용하였다.

[722] 도 33은 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌 결정, 4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌 결정, 및 4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌 결정의 질소 등온 흡착-탈착 그래프이다.

[723] 도 33을 참조하면, 질소 등온 흡착 과정과 질소 등온 탈착 과정이 일치하지 않는 히스테리시스 커브가 나타남을 확인할 수 있다. 또한, 유기 결정들은 모두 IUPAC 분류에 따른 타입 4의 메조포러스(2-50 nm) 등온 흡착 특성을 나타내었다. 이는 다공성 구조를 갖는 결정에서만 확인할 수 있는 모습으로 상기 유기 결정들이 효과적이고 명확하게 다공성 구조를 형성하는 것을 확인할 수 있다.

[724] 한편, 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌 결정, 4,5,9,10-테트라키스(테트라데실옥시)-파이렌 결정, 및 4,5,9,10-테트라키스(옥타데실옥시)-파이렌 결정으로 갈수록 질소 흡착량이 증가하는 것을 알 수 있는데, 이는 파이렌에 결합된 치환기의 길이에 의해 기공의 면적이 증가됨에 기인하는 것으로 추정되었다.

[725]

[726] 분리체 제조예 1

[727] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 20mg을 IR 펠렛 다이(IR pellet die)에 넣고 7000 kgf/cm²의 압력으로 가압하여 펠렛 형태의 분리체를 제조하였다.

[728] 분리체 제조예 2

[729] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 2g을 144cm²의 넓이를 갖는 PVDF(polyvinylidene fluoride) 플레이트 상에 균일하게 편 후, 7000 kgf/cm²의 압력으로 가압하여 분리체 필름을 제조한 후, 상기 분리체 필름을 PVDF 플레이트로부터 분리하였다.

[730] 분리체 제조예 3

[731] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 500mg을 지름이 2mm이고 길이가 5cm인 다공성 알루미늄 파이프에 충전하여 분리체 패키지를 제조하였다.

[732] 분리체 제조예 4

[733] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 1g을 밑면의 넓이가 2.25cm²이고 길이가 0.5cm인 다공성 알루미늄 바스켓에

충진하여 분리체 패키지를 제조하였다.

[734] 분리체 제조예 5

[735] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 500mg을 넓이가 3cm²인 셀룰로오스 파우치에 충진하여 분리체 패키지를 제조하였다.

[736] 분리체 제조예 6

[737] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 부피비 1:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 12.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이를 1750rpm의 속도로 PVDF 플레이트 상에 스핀코팅한 후, 건조하여 분리체 필름을 형성한 후, 상기 분리체 필름을 상기 PVDF 플레이트로부터 분리하였다.

[738] 분리체 제조예 7

[739] PVDF 플레이트 대신에 PDMS(polydimethylsiloxane) 플레이트를 사용한 것을 제외하고는 분리체 제조예 6과 동일한 방법으로 분리체 필름을 제조하였다.

[740] 분리체 제조예 8

[741] PVDF 플레이트 대신에 PTFE(polytetrafluoroethylene) 플레이트를 사용한 것을 제외하고는 분리체 제조예 6과 동일한 방법으로 분리체 필름을 제조하였다.

[742] 분리체 제조예 9

[743] 부피비 1:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 PC(polycarbonate)를 넣어 1mM 농도의 균일 용액을 만든 후, 여기에 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 넣어 12.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이를 1750rpm의 속도로 PTFE 플레이트 상에 스핀코팅한 후, 건조하여 분리체 필름을 형성한 후, 상기 분리체 필름을 상기 PTFE 플레이트로부터 분리하였다.

[744] 분리체 제조예 10

[745] PC(polycarbonate) 대신에 PMMA(폴리메틸메트아크릴레이트)를 넣은 것을 제외하고는 분리체 제조예 9와 동일한 방법을 수행하여 분리체를 제조하였다.

[746] 분리체 제조예 11

[747] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 대신에 화합물 제조예 5A에 따른 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌(화합물 51)을 사용한 것을 제외하고는 분리체 제조예 4와 동일한 방법을 수행하여 분리체를 제조하였다.

[748] 분리체 평가예 1: X선 회절분석

[749] 상기 3차원 구조체에 대한 X-선 회절분석과 동일한 방법으로 X-선 회절분석을 수행하였다.

[750] 도 34는 분리체 제조예 1에 따른

4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)를 펠렛타이징한 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

- [751] 도 35는 분리체 제조에 4에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)를 패키징한 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [752] 도 36은 분리체 제조에 6에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)의 균질 용액을 스핀코팅하여 형성한 필름 형태 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [753] 도 37은 분리체 제조에 10에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)와 PMMA의 균질 용액을 스핀코팅하여 형성한 필름 형태 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [754] 도 38은 분리체 제조에 11에 따른 2,3,6,7,10,11-헥사키스(도데실옥시)트라이페닐렌(화합물 51)을 패키징한 분리체의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.
- [755] 분리체 평가에 2: 열중량분석
- [756] 분리체 제조에 1에 따라 형성된 분리체를 물, 아세톤, 에탄올, 부탄올, 1,4-다이옥세인 중 어느 하나에 1 분 동안 담근 후 꺼내어 열중량분석을 실시하였다.
- [757] 도 39는 서로 다른 용매를 담지한 분리체 제조에 1에 따라 형성된 분리체의 온도에 따른 중량 변화를 나타낸 그래프이다.
- [758] 도 39를 참조하면, 분리체가 아세톤, 에탄올, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인을 담지한 경우에는 100°C 이하에서 큰 첫 번째 중량 손실, 구체적으로 아세톤의 경우 약 83%, 에탄올의 경우 약 95%, 부탄올의 경우 약 97%, 1,4-다이옥세인의 경우 약 97%의 중량 손실이 나타나는데, 이는 분리체 내에 이들 용매가 이 정도의 중량비로 함유되었던 것을 나타낸다. 한편, 물을 담지한 경우와 분리체 자체는 약 350도에서 첫 번째 중량 손실이 나타나고, 아세톤, 에탄올, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인을 담지한 경우 또한 약 350도에서 두 번째 중량 손실이 나타나는데, 이는 분리체 자체의 분해에 따른 결과이다. 위의 결과로부터, 상기 분리체는 물은 거의 흡수 또는 흡착하지 않는 반면, 아세톤, 에탄올, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인은 매우 큰 양을 흡수 또는 흡착하는 것을 알 수 있다. 따라서, 상기 분리체는 물과 아세톤, 에탄올, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인의 혼합물로부터 아세톤, 에탄올, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인을 충분히 분리해낼 수 있음을 알 수 있다.
- [759] 분리체 평가에 3: 가장자리 젖음성 평가
- [760] 가장 자리 젖음성 평가는 NPL(National Physical Laboratory)에서 제공한 문서 "Techniques for characterising the wetting, coating and spreading of adhesives on surfaces"를 참고하여 진행하였으며, 밀면이 0.25cm² 이고 길이가 0.5cm인 알루미늄 원통 내에 분리체를 충전하고, 개구를 갖는 밀면을 저울 위에 올려져있는 정량의 흡착하고자 하는 액체와 접촉시키고, 시간의 경과에 따라 감소하는 액체의 무게를 통하여 흡착되는 액체의 양과 속도를 확인하였다.

- [761] 도 40은 서로 다른 용매에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 가장자리 젖음성을 나타낸 그래프이다.
- [762] 도 40을 참조하면, 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체는 물에 대해서는 전혀 흡착 또는 흡수력을 나타내지 않는 반면, 극성 용매인 메탄올, 아세톤, 부탄올, 1,4-다이옥세인, 에탄올에 대해서는 흡착 또는 흡수력을 나타내고 있는 것을 알 수 있다. 이에 더하여, 흡착 또는 흡수속도는 에탄올, 1,4-다이옥세인, 부탄올, 아세톤, 메탄올 순으로 빨라지므로, 이러한 속도 차이에 의해서도 이들 극성 용매들의 분리가 가능할 수 있다.
- [763] 분리체 평가예 4: 기체크로마토그래피를 통한 분리체의 분리능 평가
- [764] 본 평가는 HP-5MS UI capillary column(60m x 0.25mm)을 구비하는 가스크로마토그래피(상표명 : agilent 6890)와 질량분석기(상표명: finnigan TSQ-7000)를 함께 사용하여 수행하였다. 가스크로마토그래피 오븐을 150°C에서 2분간 유지한 후에, 분당 6°C의 속도로 300°C 까지 승온하였고, 마지막으로 300°C에서 33분간 유지하였다. 초기에 3 μ l의 샘플을 2분 동안 주사하였고, 캐리어 가스는 분당 20 ml로 주사되었다.
- [765] 도 41은 물과 에탄올의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [766] 도 41을 참조하면, 물과 에탄올의 혼합 용액(에탄올 100ppm) 자체를 기체크로마토그래피를 사용하여 분리한 경우 물과 에탄올의 분리된 피크를 나타내지만, 이 혼합 용액을 분리체를 통해 여과한 경우(after remediation)에는 에탄올 피크는 전혀 나타나지 않고 물 피크만 나타나는 것을 알 수 있다.
- [767] 도 42는 물과 아세톤의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [768] 도 42를 참조하면, 물과 아세톤의 혼합 용액(아세톤 100ppm) 자체를 기체크로마토그래피를 사용하여 분리한 경우 물과 아세톤의 분리된 피크를 나타내지만, 이 혼합 용액을 분리체를 통해 여과한 경우(after remediation)에는 아세톤 피크는 전혀 나타나지 않고 물 피크만 나타나는 것을 알 수 있다.
- [769] 도 43은 물과 부탄올의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [770] 도 43을 참조하면, 물과 부탄올의 혼합 용액(부탄올 100ppm) 자체를 기체크로마토그래피를 사용하여 분리한 경우 물과 부탄올의 분리된 피크를 나타내지만, 이 혼합 용액을 분리체를 통해 여과한 경우(after remediation)에는 부탄올 피크는 전혀 나타나지 않고 물 피크만 나타나는 것을 알 수 있다.
- [771] 도 44는 물과 1,4-다이옥세인의 혼합 용액에 대한 분리체 제조예 1에 따라 형성된 분리체의 분리능을 기체크로마토그래피를 사용하여 나타낸 그래프이다.
- [772] 도 44를 참조하면, 물과 1,4-다이옥세인의 혼합 용액(1,4-다이옥세인 100ppm) 자체를 기체크로마토그래피를 사용하여 분리한 경우 물과 1,4-다이옥세인의 분리된 피크를 나타내지만, 이 혼합 용액을 분리체를 통해 여과한 경우(after

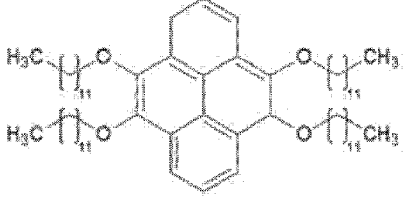
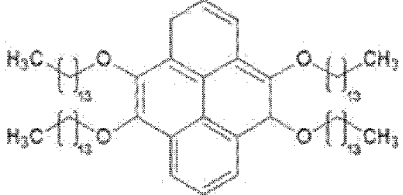
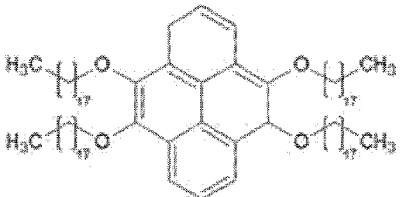
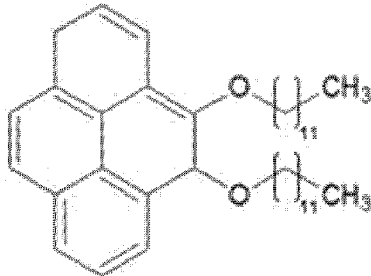
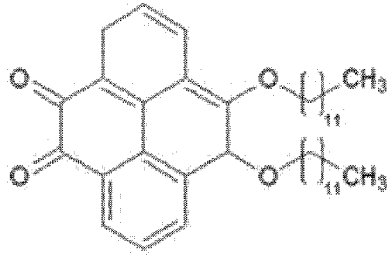
remediation)에는 1,4-다이옥세인 피크는 전혀 나타나지 않고 물 피크만 나타나는 것을 알 수 있다.

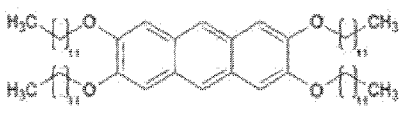
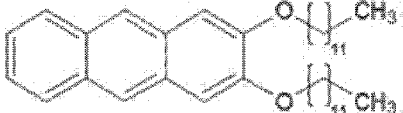
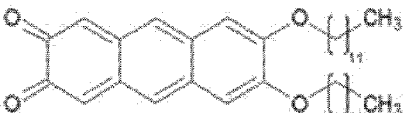
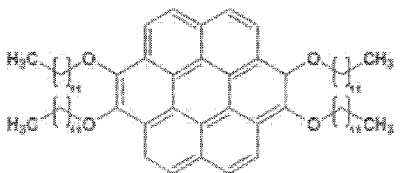
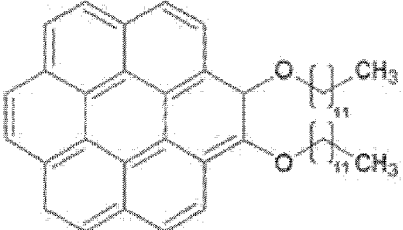
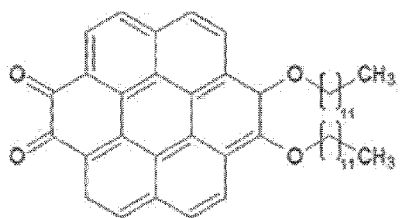
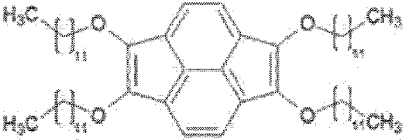
- [773] 기체크로마토그래피가 ppb 레벨을 검출할 수 있는 것을 고려할 때, 본 실시예에 따른 분리체는 에탄올, 아세톤, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인을 함유하는 수용액으로부터 에탄올, 아세톤, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인을 선택적으로 흡수 또는 흡착이 가능하며, 그 결과물로서 나온 수용액 내에는 에탄올, 아세톤, 부탄올, 또는 1,4-다이옥세인이 전혀 없거나 있더라도 ppb 레벨 미만으로 존재함을 알 수 있다.

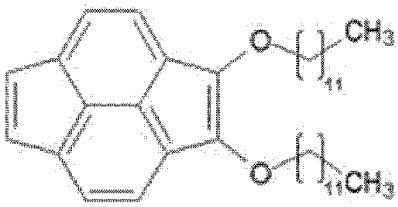
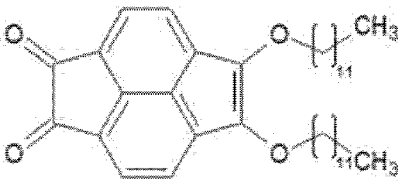
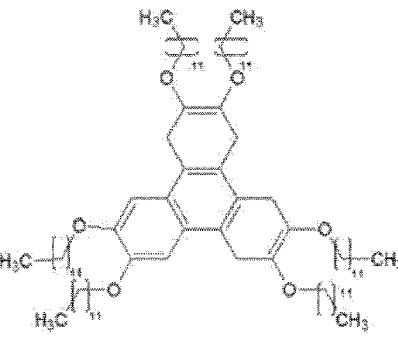
[774] 분리체 평가예 2: 한센 용해 파라미터 검토

- [775] 상기 화합물 제조예들에 따른 화합물들의 한센 용해 파라미터들은 하기 표에 나타낸 바와 같다. 하기 표에서, δ_h 은 수소 결합 파라미터, δ_p 은 극성 파라미터, δ_{dl} 은 분산 파라미터이고, R_0 는 한센 용해 구의 상호작용 반지름이고, 이고, θ 는 도 2에 도시된 이면각이다.

[776] [표15]

화합물 소재 조예	화합물 번호	화합물 구조	δ_p	δ_h	δ_d	R_0	θ
1A	11		3.4	1.4	17.7	3.46	0.39
1B	12		3.2	1.4	18.5	3.42	0.40
1C	13		3.1	1.4	19.4	3.41	0.40
1D	14		3.7	1.5	18.4	3.74	0.35
1E	15		4.1	1.6	18.2	3.32	0.37

2A	21		3.4	1.4	17.7	3.46	0.38
2B	22		3.2	1.4	18.5	3.67	0.32
2C	23		4.1	1.6	18.2	3.28	0.35
3A	31		4.6	1.6	17.7	3.49	0.40
3B	32		4.7	1.8	18.5	3.81	0.37
3C	33		4.9	2.0	18.2	3.67	0.39
4A	41		3.1	1.4	17.7	3.54	0.35

4B	42		2.9	1.3	18.5	3.58	0.31
4C	43		4.1	1.7	18.2	3.47	0.33
5A	51		3.9	3.4	17.9	3.55	0.38

[777]

[778] **3차원 구조체 평가예 3 : 3차원 구조체 결정의 광학 특성 확인**

[779] 도 45는 화합물 제조예에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11) 결정에 광을 조사하여 촬영한 사진들이다. 구체적으로, BX-51 형광 편광 현미경(Olympus 사)을 이용하였고, U-RFL-T를 소스로 하는 직접조사광원을 사용하되 자외선 필터를 이용하여 400nm 이하의 광원을 결정에 조사하여 촬영하였다.

[780] 도 45를 참조하면, 광결정 소재로서의 특성으로 구조체 내부의 빛이 특정 부분으로의 확산이 차단되어 구조체 끝 부분에서만 강하게 발광하는 것을 확인할 수 있다.

[781]

[782] **광증폭층 제조예 1**

[783] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 부피비 1:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 12.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액을 소다라임 유리 상에 스핀코팅하여 광증폭층을 형성하였다.

[784]

[785] 광증폭층이 도입된 발광소자 제조예 1

[786] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 부피비 5:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 27.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액 내에 적색 LED 전구, 청색 LED 전구, 녹색 LED 전구, 또는 백색 LED 전구를 담그었다가 빼내어 건조시키는 딥코팅법을 사용하여 발광소자 상에 광증폭층을 형성하였다.

[787]

[788] 광증폭층이 도입된 발광소자 제조예 2

[789] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 부피비 1:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 12.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액을 적색 LED 어레이 패널, 청색 LED 어레이 패널, 녹색 LED 어레이 패널, 백색 LED 어레이 패널, 적색 LED 모듈, 청색 LED 모듈, 녹색 LED 모듈, 또는 백색 LED 모듈 상에 스핀코팅하여 발광소자 상에 광증폭층을 형성하였다.

[790]

[791] 광증폭층이 도입된 유기발광소자 제조예 1

[792] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 부피비 5:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 27.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액 내에 적색 OLED 전구, 청색 OLED 전구, 녹색 OLED 전구, 또는 백색 OLED 전구를 담그었다가 빼내어 건조시키는 딥코팅법을 사용하여 유기발광소자 상에 광증폭층을 형성하였다.

[793]

[794] 광증폭층이 도입된 유기발광소자 제조예 2

[795] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 부피비 1:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 12.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액을 적색 LED 어레이 패널, 청색 LED 어레이 패널, 녹색 LED 어레이 패널, 백색 LED 어레이 패널, 적색 LED 모듈, 청색 LED 모듈, 녹색 LED 모듈, 또는 백색 LED 모듈 상에 스핀코팅하여 발광소자 상에 광증폭층을 형성하였다.

[796]

[797] 광증폭층이 도입된 형광등 제조예

[798] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 부피비 5:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 27.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액을 형광등 상에 딥코팅하여, 형광등 상에 광증폭층을 형성하였다.

[799]

[800] 광증폭층이 도입된 백열전구 제조예

[801] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물

11)을 부피비 5:1의 클로로포름과 에틸아세테이트의 혼합용매에 넣어 27.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액을 형광등 상에 딥코팅하여, 백열전구 상에 광증폭층을 형성하였다.

[802]

[803] 광증폭층 평가예 1: X선 회절분석

[804] 상기 광증폭층이 형성된 발광소자 또는 유기발광소자의 광증폭층에 대한 X-선 회절분석을 수행하되, 상기 3차원 구조체에 대한 X-선 회절분석과 동일한 방법으로 수행하였다.

[805]

[806] 도 46은 광증폭층이 도입된 발광소자 제조예 1에서 얻어진 광증폭층의 X-선 스펙트럼을 나타낸다.

[807] 도 46을 참조하면, 광증폭층이 도입된 발광소자 제조예 1에서 얻어진 광증폭층의 X-선 스펙트럼은 광증폭층의 원료인 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)에 의한 3차원 구조체 결정의 X-선 스펙트럼(도 27)과 거의 유사하다. 상기 광증폭층은 3차원 구조체 결정을 유지하고 있음을 알 수 있다.

[808] 이외에도 광증폭층이 도입된 발광소자 제조예 2, 광증폭층이 도입된 유기발광소자 제조예들 1 및 2, 광증폭층이 도입된 형광등 제조예, 및 광증폭층이 도입된 백열전구 제조예에서 얻어진 광증폭층 또한 도 46와 거의 동일한 X-선 스펙트럼을 나타내었다.

[809]

[810] 광증폭층 평가예 2: 굴절율과 유전율의 확인

[811] 상기 광증폭층 제조예에 따른 광증폭층에 200nm에서 1800nm까지의 광을 조사하여 굴절율과 유전율을 측정하였다.

[812]

[813] 도 47a는 본 발명의 일 실시예 따른 광증폭층의 정상축(ordinary axis)에서의 굴절율과 유전율을 나타낸 그래프이고, 도 47b는 본 발명의 일 실시예 따른 광증폭층의 이상축(extra-ordinary axis)에서의 굴절율과 유전율을 나타낸 그래프이다.

[814] 도 47a 및 도 47b를 참조하면, 약 300nm 이하의 파장영역에서 정상축과 이상축 모두에서 1 이하의 유전율과 굴절율, 구체적으로는 0에 가까운 유전율과 굴절율을 나타내는 것을 알 수 있다.

[815]

[816] 광증폭층 평가예 3: 자외선/가시광선 분광스펙트로미터를 통한 광증폭의 확인

[817] 상기 광증폭층 제조예에 따른 광증폭층에 자외선/가시광선 분광스펙트로미터(Jasco 500)를 사용하여 200nm에서 800nm까지의 광을 조사하여 광투과도를 측정하였다.

[818] 도 48은 본 발명의 일 실시예 따른 광증폭층의 광투과도를 나타낸 그래프이다.

- [819] 도 48을 참조하면, 200 내지 약 300nm에서 약 2750%에 이르는 투과도가 나타남을 알 수 있다. 일반적인 물질의 투과도는 최대 100%임을 고려하면, 본 광증폭층은 주기적이고 규칙적인 특성에 의해 발생하는 0에 가까운 유전율을 갖는 물성에 기인하는 광증폭 현상을 나타냄을 알 수 있다.
- [820]
- [821] 광증폭층 평가예 4: 정규화된 페르미 레벨과 정규화된 플라즈몬 진동수 사이의 관계 확인
- [822] 도 49는 광증폭층 제조예에 따른 광증폭층의 정규화된 페르미 레벨과 정규화된 플라즈몬 진동수 사이의 관계를 나타낸 그래프이다.
- [823] 도 49를 참조하면, 정규화된 페르미 레벨을 E_f 로 표시하고 정규화된 플라즈몬 진동수를 E_f 로 표시할 때, 전자가 유효질량을 가질 때 $\Delta E_f/\Delta E_{f0}$ 는 1의 값을 나타내고, 전자의 유효질량이 1보다 작은 경우에는 $(\Delta E_f/\Delta E_{f0})^{1/2}$ 이 1보다 작은 상수 구체적으로 1/2를 나타냄이 알려져 있다.[Nature Nanotechnology 7, 330-334 (2012)] 광증폭층 제조예에 따른 광증폭층에서 얻어진 데이터 점들(data points)을 피팅(fitting)하면 $(\Delta E_f/\Delta E_{f0})^{1/2}$ 가 1/2를 나타내는 그래프에 온전히 겹쳐지는 것을 확인할 수 있다.. 따라서, 본 실시예에 따른 광증폭층 내에서 전자는 0의 유효질량을 가질 수 있음을 알 수 있다. 이는 본 실시예에 따른 광증폭층이 디락 밴드 구조를 갖는 위상학적 절연체임을 의미하는 것일 수 있다.
- [824]
- [825] 광증폭층 평가예 5: 자외선/가시광선 광발광스펙트로미터를 통한 광증폭의 확인
- [826] 상기 광증폭층 제조예에 따른 광증폭층에 자외선/가시광선 광발광스펙트로미터(Varian Cary eclipse Fluorescence spectrometer)를 사용하여 200nm에서 800nm까지의 광을 25nm 단위로 조사하고, 5nm 단위로 광발광 강도(photoluminescence intensity)를 측정하였다.
- [827]
- [828] 도 50은 본 발명의 일 실시예에 따른 광증폭층의 광발광 강도를 나타낸 그래프이다. 도 50을 참조하면, 300nm의 광을 광증폭층 상에 조사하여 광증폭층을 여기한 경우, 여기파장과 같은 300nm(A1), 여기파장의 2배인 600nm(A2) 및 여기파장의 세배인 900nm(A3)에서 발광이 관찰되었다. 마찬가지로의 현상들이 다른 파장들(B1, C1, D1, E1, F1, G1, H1, I1, J1, 및 K1)에서도 관찰되었다.
- [829]
- [830] 한편, 여기파장과 동일한 파장에서의 발광 강도는 1000 a.u.으로 광증폭이 일어난 것으로 파악되었다. 이러한 광증폭은 상기 주기적이고 규칙적인 구조를 갖는 광증폭층이 유전율이 0에 가까운 메타물질로서의 특징과 위상학적 절연체로서의 특성에 의하여 발생하는 디락 플라즈몬의 국소 표면 플라즈몬 공명에 의한 현상으로 풀이되었다. 이는 본 실시예에 따른 광학층이 파장가변

광증폭기(tunable amplifier)로도 사용할 수 있음을 보여준다. 또한, 여기 파장의 정수배에 해당하는 파장을 갖는 발광광들이 검출되었는데, 이는 분자 스스로의 비등방성과 사극자(quadrupole) 특성에 의해 발생하는 것으로 풀이되었다.

[831]

[832] **광증폭층 평가예 6: 입사광의 에너지에 따른 광증폭 정도의 확인**

[833] 상기 광증폭층 제조예에 따라 소다라임 유리 상에 광증폭층을 120nm, 135nm, 또는 150nm로 형성하고, 서로 다른 두께를 갖는 광증폭층들 및 광증폭층을 형성하지 않은 소다라임 유리 상에 266nm의 레이저를 조사하였다.

[834] 도 51은 레이저의 입사 에너지에 따른 증폭정도를 나타낸 그래프이다.

[835] 도 51을 참조하면, 입사 광량에 따른 광증폭 성능을 확인할 수 있다.

[836]

[837] **광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 1**

[838] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 클로로포름과 에틸아세테이트 혼합용액(2:1 %v)에 넣어 27.5mM 농도의 균일 용액을 만들고, 이 균질 용액을 실리콘 태양전지 상에 스핀코팅하여 광증폭층을 형성하였다.

[839]

[840] **광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 2**

[841] 화합물 제조예 1A에 따른 4,5,9,10-테트라키스(도데실옥시)-파이렌(화합물 11)을 클로로포름에 PMMA를 1wt% 녹인 혼합용액을 용매로 하여 25mM의 농도의 용액을 형성한 후 PMMA대비 0.1wt%의 카테콜을 혼합하여 혼합물을 형성한 후, 이 혼합물을 실리콘 태양전지 상에 스핀코팅하여 광증폭층을 형성하였다.

[842]

[843] **광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 3**

[844] 상기 실리콘 태양전지 대신에 카드뮴텔루라이드 합금 태양전지를 사용한 것을 제외하고는 태양전지 제조예 1과 동일한 방법으로 광증폭층을 형성하였다.

[845]

[846] **광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 4**

[847] 상기 실리콘 태양전지 대신에 구리인듐갈륨셀레늄 합금 태양전지를 사용한 것을 제외하고는 태양전지 제조예 1과 동일한 방법으로 광증폭층을 형성하였다.

[848]

[849] **광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 5**

[850] 상기 실리콘 태양전지 대신에 유기태양전지를 사용한 것을 제외하고는 태양전지 제조예 1과 동일한 방법으로 광증폭층을 형성하였다.

[851]

[852] **광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 6**

[853] 상기 실리콘 태양전지 대신에 유기/무기 하이브리드 태양전지를 사용한 것을 제외하고는 태양전지 제조예 1과 동일한 방법으로 광증폭층을 형성하였다.

[854]

[855] 광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 7

[856] 상기 실리콘 태양전지 대신에 염료감응태양전지를 사용한 것을 제외하고는 태양전지 제조예 1과 동일한 방법으로 광증폭층을 형성하였다.

[857]

[858] 광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 8

[859] 상기 실리콘 태양전지 대신에 갈륨비소 태양전지를 사용한 것을 제외하고는 태양전지 제조예 1과 동일한 방법으로 광증폭층을 형성하였다.

[860]

[861] 광증폭층이 도입된 태양전지 제조예 9

[862] 상기 실리콘 태양전지 대신에 투명태양전지를 사용한 것을 제외하고는 태양전지 제조예 1과 동일한 방법으로 광증폭층을 형성하였다.

[863]

[864] 광증폭층이 도입된 태양전지 평가예

[865] 상기 태양전지 제조예들 1 내지 9에서 얻어진 광증폭층이 도입된 태양전지들의 개방전압(open circuit voltage; Voc), 단락전류(Short Circuit Current; Jsc), 및 충전인자(fill factor; FF)를 얻어내어 아래 표 16에 정리하였다. 한편, 광증폭층이 도입되지 않은 태양전지들의 전력변환효율(Power Conversion Efficiency; PCE)에 대한 광증폭층이 도입된 태양전지들의 전력변환효율의 비를 상대적 효율로 나타내었다.

[866]

[867] [표16]

구분	Voc(V)	Isc(A)	충진인자(FF)	상대적효율(%)
실시예 1	0.5994	0.963	57.3	186
비교예 1	0.5979	0.666	44.69	100
실시예 2	0.577	0.839	55.94	152
비교예 2	0.5984	0.666	44.67	100
실시예 3	0.5994	0.963	57.3	186
비교예 3	0.5979	0.666	44.69	100
실시예 4	0.577	0.839	55.94	152
비교예 4	0.5984	0.666	44.67	100
실시예 5	0.5994	0.963	57.3	186
비교예 5	0.5979	0.666	44.69	100
실시예 6	0.577	0.839	55.94	152
비교예 6	0.5984	0.666	44.67	100
실시예 7	0.5994	0.963	57.3	186
비교예 7	0.5979	0.666	44.69	100
실시예 8	0.577	0.839	55.94	152
비교예 8	0.5984	0.666	44.67	100
실시예 9	0.5994	0.963	57.3	186
비교예 9	0.5979	0.666	44.69	100

[868]

[869] 상기 표를 참조하면, 광증폭층이 도입된 태양전지들은 광증폭층이 도입되지 않은 태양전지들에 비해 152% 또는 186%의 상대적 효율을 나타내는 등 전락변환효율의 향상이 매우 우수한 것으로 나타났다.

[870]

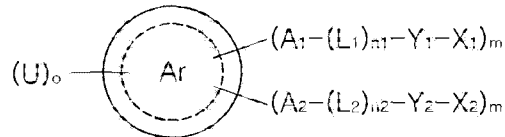
[871] 전술한 본 발명의 설명은 예시를 위한 것이며, 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 쉽게 변형이 가능하다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

[872]

본 발명의 범위는 후술하는 특허청구범위에 의하여 나타내어지며, 특허청구범위의 의미 및 범위 그리고 그 균등 개념으로부터 도출되는 모든 변경 또는 변형된 형태가 본 발명의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물:
[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

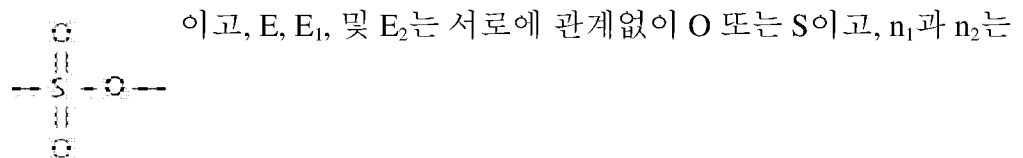
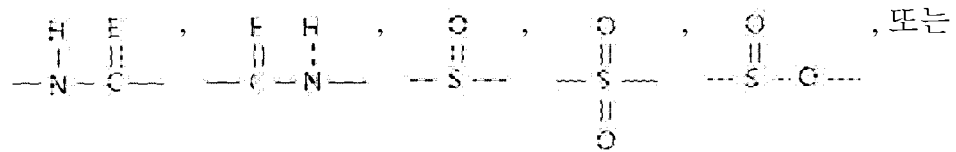
Ar은 6 내지 46 멤버의 호모사이클릭 방향족 고리 또는 헤테로사이클릭 방향족 고리이고,

$-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 상기 Ar의 치환 위치들(substitution positions) 중 바로 인접한 위치들에 결합되어 있고,

m은 1 내지 8의 정수이고,

A_1 과 A_2 는 서로에 관계없이, $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고,

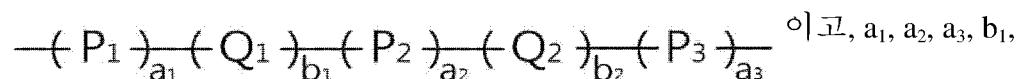
L_1 과 L_2 는 서로에 관계없이, $-\text{E}-$, $\begin{array}{c} \text{E} \\ || \\ -\text{C}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{E}_2 \\ || \\ -\text{C}-\text{E}_2- \end{array}$,



이고, E, E₁, 및 E₂는 서로에 관계없이 O 또는 S이고, n₁과 n₂는

서로에 관계없이 0 또는 1이고,

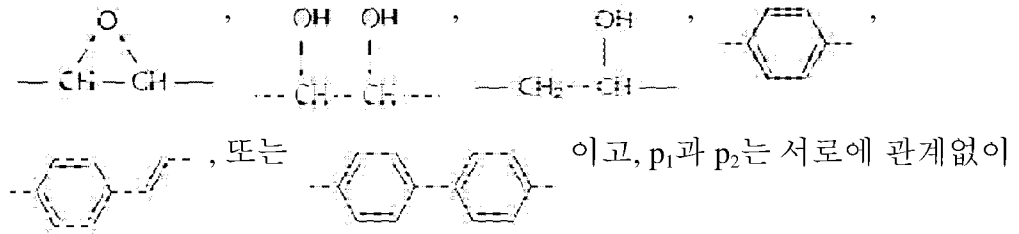
Y₁과 Y₂는 서로에 관계없이



및 b₂는 서로에 관계없이 0 내지 30의 정수이며, a₁+a₂+a₃+b₁+b₂는 3 내지 30의 정수이고,

P₁, P₂, 및 P₃는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_a\text{R}_b-$ 또는 $-(\text{CR}_a\text{R}_b)_r\text{O}-$ 이고, r은 1 내지 3의 정수이고,

Q₁ 및 Q₂는 서로에 관계없이 q₁-(p₁)_{c1}-q₂-(p₂)_{c2}-q₃이고, q₁과 q₃는 서로에 관계없이 $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고, q₂는 탄소에 결합된 수소기가 F, Cl, Br, 또는 I로 치환되거나 혹은 비치환된 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$,



- CR_aR_b - 이고, c_1 과 c_2 는 서로에 관계없이 0 내지 2의 정수이고,
 X_1 과 X_2 는 서로에 관계없이 - $\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ -, -OH-, -COOH-, -CHO-, -SH-, - $\text{COCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ -,
 - $\text{COOCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ -, - $\text{CR}_c=\text{CR}_d\text{R}_e$ -, -CN-, - $\text{N}=\text{C}=\text{O}$ -, - $\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ -, - $\text{C}\equiv\text{CR}_a$ -,
 - $\text{NHCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$ -, 또는 - NH_2 이고,
 R_a 와 R_b 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,
 R_c , R_d , 및 R_e 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,
 U는 시아노기, 히드록실기, 불소, 염소, 아이오드, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 15의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 15의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬메르캡토기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬티오시안기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 또는 15의 알킬인산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소티오시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 및 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느 하나이고,
 o 는 0 내지 16 사이의 정수이다.

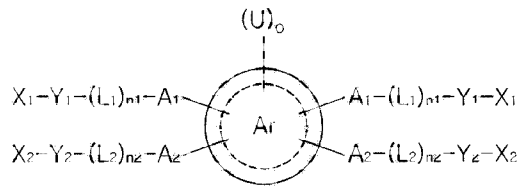
[청구항 2]

제1항에 있어서,

상기 Ar은 벤젠, 헤테로 원자를 함유하는 벤젠의 방향족

유사체(heteroatom containing aromatic analogues of benzene), 나프탈렌, 헤테로 원자를 함유하는 나프탈렌의 방향족 유사체, 안트라센, 헤테로 원자를 함유하는 안트라센의 방향족 유사체, 페날렌(phenalene), 헤테로 원자를 함유하는 페날렌의 방향족 유사체, 페난트라센(phenanthrene), 헤테로 원자를 함유하는 페난트라센의 방향족 유사체, 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌(cyclopenta[fg]acenaphthylene), 헤테로 원자를 함유하는 사이클로펜타[fg]아세나프틸렌의 방향족 유사체, 테트라센(tetracene), 헤테로 원자를 함유하는 테트라센의 방향족 유사체, 파이렌(pyrene), 헤테로 원자를 함유하는 파이렌의 방향족 유사체, 벤즈[de]안트라센, 헤테로 원자를 함유하는 벤즈[de]안트라센의 방향족 유사체, 트라이페닐렌(triphenylene), 헤테로 원자를 함유하는 트라이페닐렌의 방향족 유사체, 펜타센(pentacene), 헤테로 원자를 함유하는 펜타센의 방향족 유사체, 코로네네(coronene), 또는 헤테로 원자를 함유하는 코로네네의 방향족 유사체인 유기 화합물.

- [청구항 3] 제1항에 있어서,
상기 Ar은 C_n (n 은 2 내지 6의 정수) 대칭을 갖는 방향족 고리인 유기 화합물.
- [청구항 4] 제1항에 있어서,
상기 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 상기 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 서로에 대해 상기 Ar의 오르소(ortho) 위치들에 결합된 유기 화합물.
- [청구항 5] 제1항에 있어서,
상기 m 은 2 이상이고,
상기 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 상기 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 의 쌍들 사이에는,
상기 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 또는 상기 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 가 결합되지 않은 상기 Ar의 적어도 하나의 치환 위치가 위치하는 유기 화합물.
- [청구항 6] 제1항에 있어서,
상기 Ar은 C_n (n 은 2 내지 6의 정수) 대칭을 갖고,
상기 m 은 상기 n 과 같은 유기 화합물.
- [청구항 7] 제6항에 있어서,
상기 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 상기 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 상기 Ar의 치환 위치들 중 동등한 대칭성을 갖는 위치들(symmetry-equivalent positions)에 결합되는 유기 화합물.
- [청구항 8] 제1항에 있어서,
상기 화합물은 하기 화학식 1c로 나타낸 화합물인 유기 화합물:
[화학식 1c]



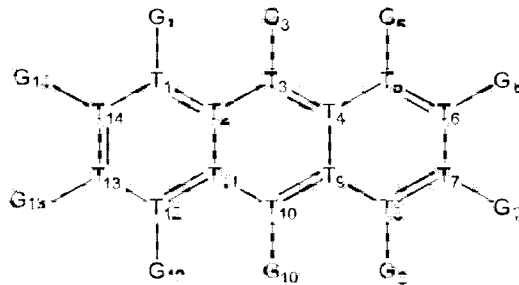
상기 화학식 1c에서, Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, U 및 o은 상기 화학식 1의 Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, U 및 o과 각각 동일하다.

[청구항 9]

제8항에 있어서,

상기 Ar이 하기 구조식 3의 방향족 고리이고,

[구조식 3]



상기 구조식 3에서,

T₁ 내지 T₁₄는 모두 C이거나; T₁ 내지 T₁₄ 중 일부는 서로에 관계없이 N, P, B 또는 Si일 수 있고, 나머지는 C이고,

G₁, G₃, G₅, G₆, G₇, G₈, G₁₀, G₁₂, G₁₃, 및 G₁₄는 치환 위치들이고,

상기 한 쌍의 -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂은 G₆과 G₇ 위치에 결합되고,

다른 한 쌍의 -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂은 G₁₃와 G₁₄ 위치에 결합되고,

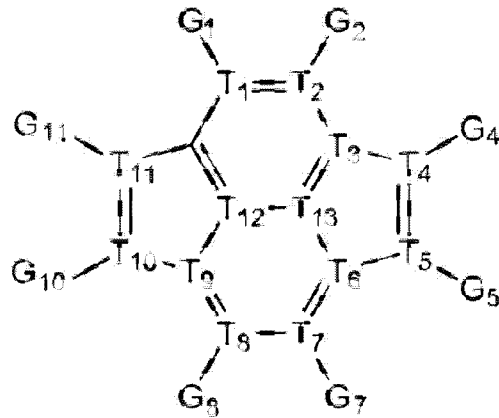
나머지 G₁, G₃, G₅, G₈, G₁₀, 또는 G₁₂에는 U가 결합되거나 결합되지 않고, 상기 o는 0 내지 6의 정수이다.

[청구항 10]

제8항에 있어서,

상기 Ar이 하기 구조식 6의 방향족 고리이고,

[구조식 6]



상기 구조식 6에서,

T_1 내지 T_{13} 는 모두 C이거나; T_1 내지 T_{13} 중 일부는 서로에 관계없이 N, P, B 또는 Si일 수 있고, 나머지는 C이고,

$G_1, G_2, G_4, G_5, G_7, G_8, G_{10}$, 및 G_{11} 은 치환 위치들이고,

한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_4 과 G_5 위치에 결합되고,

다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{10} 와 G_{11} 위치에 결합되고,

나머지 G_1, G_2, G_7 , 또는 G_8 에는 U가 결합되거나 결합되지 않고,

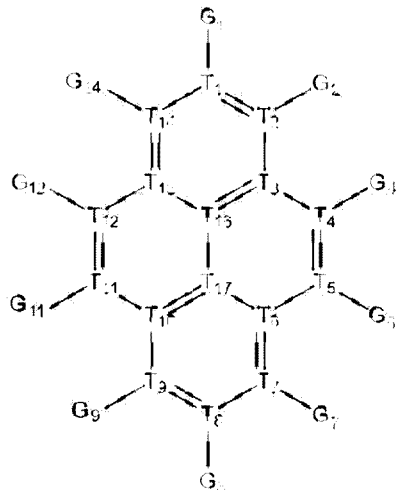
상기 o는 0 내지 4의 정수이다.

[청구항 11]

제8항에 있어서,

상기 Ar이 하기 구조식 8의 방향족 고리이고,

[구조식 8]



상기 구조식 8에서,

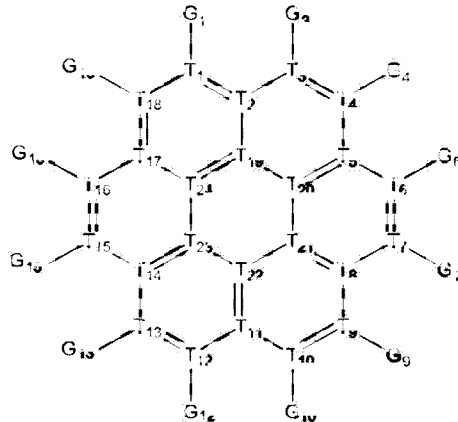
T_1 내지 T_{17} 는 모두 C이거나; T_1 내지 T_{17} 중 일부는 서로에 관계없이 N, P, B 또는 Si일 수 있고, 나머지는 C이고,

$G_1, G_2, G_4, G_5, G_7, G_8, G_9, G_{11}, G_{12}$, 및 G_{14} 는 치환 위치들이고,

한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_4 과 G_5 위치에 결합되고,

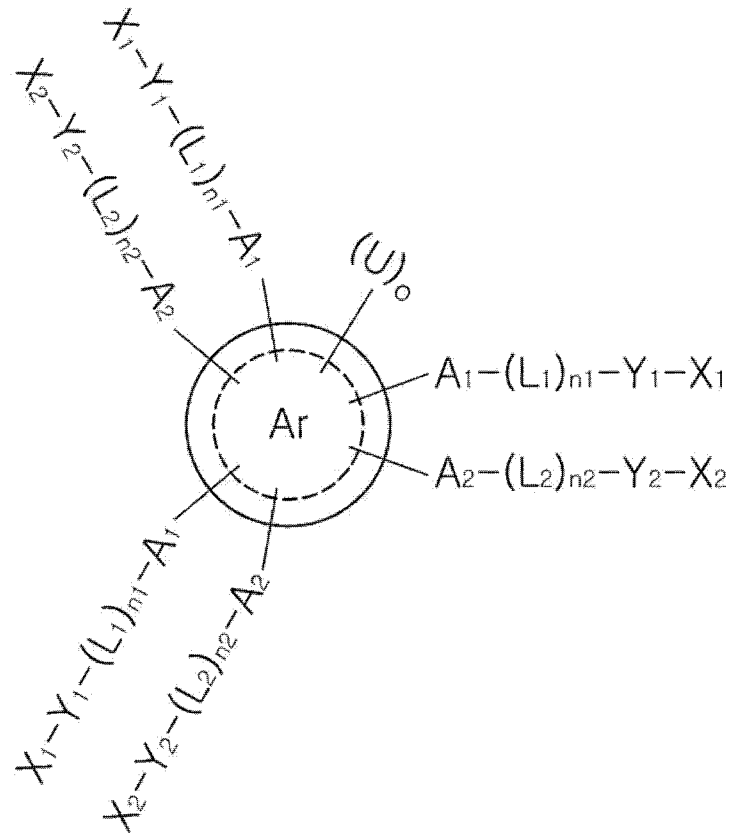
다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{11} 와 G_{12} 위치에 결합되고,
 나머지 G_1, G_2, G_7, G_8, G_9 , 또는 G_{14} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않고,
 상기 o는 0 내지 6의 정수이다.

[청구항 12] 제8항에 있어서,
 상기 Ar이 하기 구조식 12의 방향족 고리이고,
 [구조식 12]



상기 구조식 12에서,
 T_1 내지 T_{24} 는 모두 C이거나; T_1 내지 T_{24} 중 일부는 서로에 관계없이 N, P, B 또는 Si일 수 있고, 나머지는 C이고,
 $G_1, G_3, G_4, G_6, G_7, G_9, G_{10}, G_{12}, G_{13}, G_{15}, G_{16}$, 및 G_{18} 는 치환 위치들이고,
 상기 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_6 과 G_7 위치에 결합되고,
 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{15} 와 G_{16} 위치에 결합되고,
 나머지 $G_1, G_3, G_4, G_9, G_{10}, G_{12}, G_{13}$, 또는 G_{18} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않고,
 상기 o는 0 내지 8의 정수이다.

[청구항 13] 제1항에 있어서,
 상기 화합물은 하기 화학식 1d로 나타낸 화합물인 유기 화합물:
 [화학식 1d]



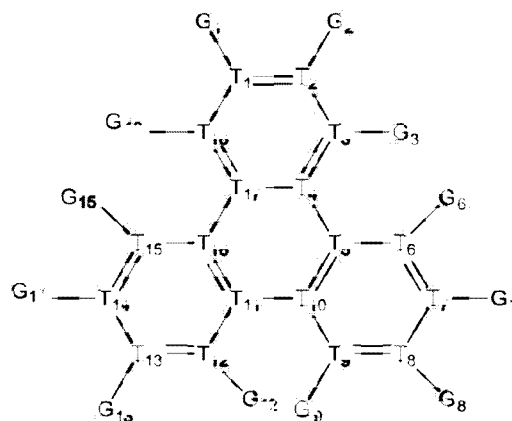
상기 화학식 1d에서, Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, U 및 o은 상기 화학식 1의 Ar, A₁, A₂, L₁, L₂, n₁, n₂, Y₁, Y₂, X₁, X₂, U 및 o과 각각 동일하다.

[청구항 14]

제13항에 있어서,

상기 Ar이 하기 구조식 10의 방향족 고리이고,

[구조식 10]



상기 구조식 10에서,

T₁ 내지 T₁₈는 모두 C이거나; T₁ 내지 T₁₈ 중 일부는 서로에 관계없이 N, P, B 또는 Si일 수 있고, 나머지는 C이고,

G₁, G₂, G₃, G₆, G₇, G₈, G₉, G₁₂, G₁₃, G₁₄, G₁₅, 및 G₁₈은 치환 위치들이고,

상기 한 쌍의 -A₁-(L₁)_{n1}-Y₁-X₁과 -A₂-(L₂)_{n2}-Y₂-X₂은 G₁과 G₂ 위치에

결합되고,

다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_7 와 G_8 위치에

결합되고,

또 다른 한 쌍의 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 G_{13} 와 G_{14} 위치에

결합되고,

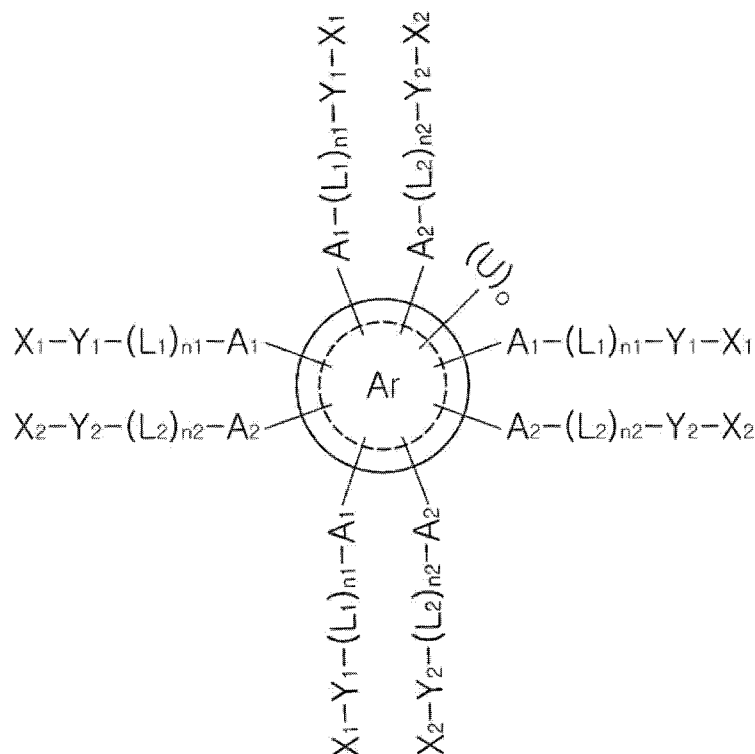
나머지 $G_3, G_6, G_9, G_{12}, G_{15}$, 또는 G_{18} 에는 U가 결합되거나 결합되지 않고, 상기 o는 0 내지 6의 정수이다.

[청구항 15]

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1e로 나타낸 화합물인 유기 화합물:

[화학식 1e]



상기 화학식 1e에서, Ar, A_1 , A_2 , L_1 , L_2 , n_1 , n_2 , Y_1 , Y_2 , X_1 , X_2 , U 및 o는 상기 화학식 1의 Ar, A_1 , A_2 , L_1 , L_2 , n_1 , n_2 , Y_1 , Y_2 , X_1 , X_2 , U 및 o과 각각 동일하다.

[청구항 16]

제1항에 있어서,

m은 2 이상이고,

상기 Ar의 중심에 대해 상기 $-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 의 쌍들이 이루는 각은 동일한 화합물.

[청구항 17]

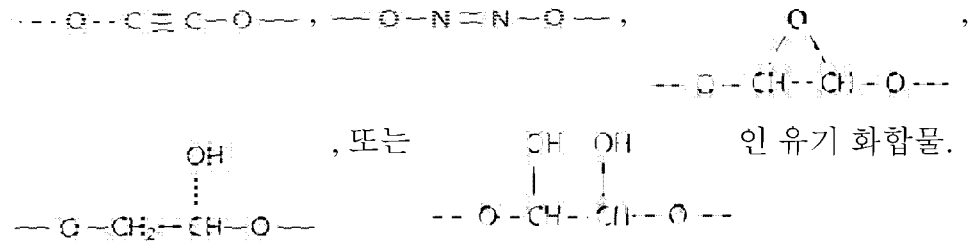
제1항에 있어서,

상기 P_1 , P_2 , 및 P_3 는 서로에 관계없이 $-(CH_2)-$, $-(CF_2)-$, $-(CH_2O)-$, $-(CH_2CH_2O)-$, 또는 $-(CH_2CH_2CH_2O)-$ 인 유기 화합물.

[청구항 18]

제1항에 있어서,

상기 Q_1 및 Q_2 는 서로에 관계없이 $-O-CH=CH-O-$,

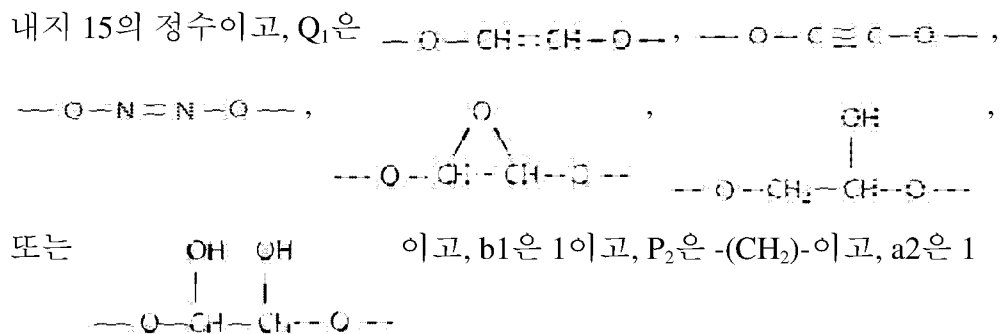


[청구항 19] 제1항에 있어서,
상기 Y₁과 Y₂는 서로에 관계없이-(CH₂)_{a1}-(a1은 6 내지 30의 정수) 또는 -(CH₂CH₂O)_{a1}-(a1은 3 내지 10의 정수)인 유기 화합물.

[청구항 20] 제1항에 있어서,
상기 Y₁과 Y₂는 서로에 관계없이

$$\text{---}(\text{P}_1)_{a_1}\text{---}(\text{Q}_1)_{b_1}\text{---}(\text{P}_2)_{a_2}\text{---}$$

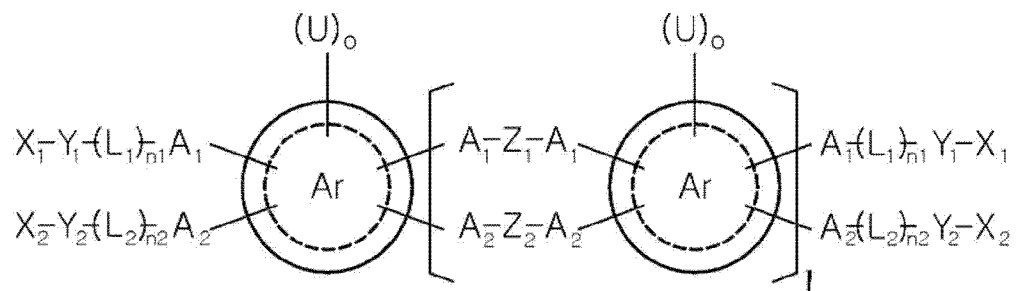
이고, P₁은 -(CH₂)-이고, a₁은 3



내지 3의 정수인 유기 화합물.

[청구항 21] 제1항에 있어서,
상기 화학식 1에서, A₁와 A₂, L₁과 L₂, n₁과 n₂, Y₁과 Y₂, X₁와 X₂는 모두 동일한 유기 화합물.

[청구항 22] 하기 화학식 2로 표시되는 유기 화합물:
[화학식 2]



상기 화학식 2에서,
Ar들은 서로에 관계없이 6 내지 46 멤버의 호모사이클릭 방향족 고리
또는 헤테로사이클릭 방향족 고리이고,

$-A_1-(L_1)_{n_1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n_2}-Y_2-X_2$ 은 상기 Ar의 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 결합되어 있고,

A_1 과 A_2 는 서로에 관계없이, $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고,

L_1 과 L_2 는 서로에 관계없이, $-\text{E}-$, $\begin{array}{c} \text{E} \\ || \\ -\text{C}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{E}_1 \\ || \\ -\text{C}-\text{E}_2- \end{array}$,

$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{E} \\ | \quad || \\ -\text{N}-\text{C}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{E} \quad \text{H} \\ || \quad | \\ -\text{C}-\text{N}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{O} \\ || \\ -\text{S}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{O} \\ || \\ -\text{S}- \\ || \\ \text{O} \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{O} \\ || \\ -\text{S}-\text{O}- \end{array}$, 또는

$\begin{array}{c} \text{O} \\ || \\ -\text{S}-\text{O}- \\ || \\ \text{O} \end{array}$ 이고, E, E₁, 및 E₂는 서로에 관계없이 O 또는 S이고, n_1 과 n_2 는

서로에 관계없이 0 또는 1이고,

Y_1 과 Y_2 는 서로에 관계없이

$-(P_1)_{a_1}-(Q_1)_{b_1}-(P_2)_{a_2}-(Q_2)_{b_2}-(P_3)_{a_3}-$ 이고, a_1 , a_2 , a_3 , b_1 ,

및 b_2 는 서로에 관계없이 0 내지 30의 정수이며, $a_1+a_2+a_3+b_1+b_2$ 는 3 내지 30의 정수이고,

P_1 , P_2 , 및 P_3 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_a\text{R}_b-$ 또는 $-(\text{CR}_a\text{R}_b)_r\text{O}-$ 이고, r 은 1 내지 3의 정수이고,

Q_1 및 Q_2 는 서로에 관계없이 $q_1-(p_1)_{c_1}-q_2-(p_2)_{c_2}-q_3$ 이고, q_1 과 q_3 는 서로에 관계없이 $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고, q_2 는 탄소에 결합된 수소기가 F, Cl, Br, 또는 I로 치환되거나 혹은 비치환된 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$,

$-\text{N}=\text{N}-$, $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ -\text{CH}-\text{CH}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{OH} \quad \text{OH} \\ | \quad | \\ -\text{CH}-\text{CH}- \end{array}$, $\begin{array}{c} \text{OH} \\ | \\ -\text{CH}_2-\text{CH}- \end{array}$,

, , 또는  이고, p_1 과 p_2 는

서로에 관계없이 $-\text{CR}_c\text{R}_d-$ 이고, c_1 과 c_2 는 서로에 관계없이 0 내지 2의 정수이고,

X_1 과 X_2 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_e\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{CHO}$, $-\text{SH}$, $-\text{COCR}_e\text{R}_d$, R_e , $-\text{COOCR}_e\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{CR}_e=\text{CR}_d\text{R}_e$, $-\text{CN}$, $-\text{N}=\text{C}=\text{O}$, $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CR}_e\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{C}\equiv\text{CR}_d$, $-\text{NHCR}_e\text{R}_d\text{R}_e$, 또는 $-\text{NH}_2$ 이고,

R_a 와 R_b 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,

R_c , R_d , 및 R_e 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,

U들은 서로에 관계없이 시아노기, 히드록실기, 불소, 염소, 아이오드, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 15의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 15의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬메르캡토기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬티오시안기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 또는 15의 알킬인산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소티오시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬시아산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 및 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

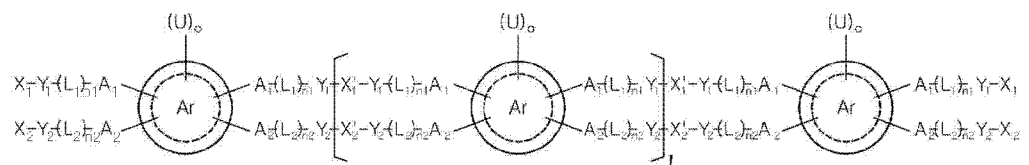
o들은 서로에 관계없이 0 내지 16 사이의 정수이고,

Z₁ 및 Z₂는 서로에 관계없이 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 15의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 15의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬메르캡토기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬티오시안기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 또는 15의 알킬인산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소티오시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 및 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

15의 알킬시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느 하나이고, l 은 1 내지 4의 정수이다.

[청구항 23] 하기 화학식 3로 표시되는 유기 화합물:

[화학식 3]



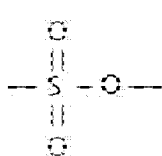
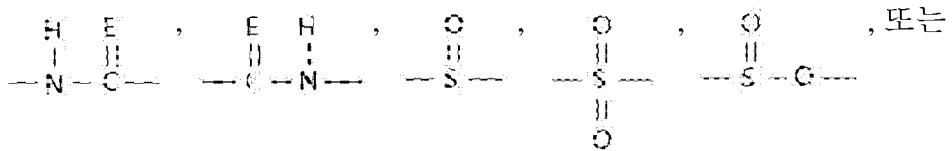
상기 화학식 3에서,

Ar들은 서로에 관계없이 6 내지 46 멤버의 호모사이클릭 방향족 고리 또는 헤테로사이클릭 방향족 고리이고,

$-A_1-(L_1)_{n1}-Y_1-X_1$ 과 $-A_2-(L_2)_{n2}-Y_2-X_2$ 은 상기 Ar의 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 결합되어 있고,

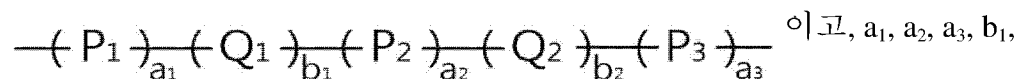
A_1 과 A_2 는 서로에 관계없이, $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고,

L_1 과 L_2 는 서로에 관계없이, $-\text{E}-$, $-\text{C}(=\text{O})-$, $-\text{C}(=\text{O})-\text{E}_2-$, $-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-$, $-\text{C}(=\text{O})-\text{S}-$, $-\text{C}(=\text{O})-\text{N}-$, $-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}(=\text{O})-$, 또는 $-\text{C}(=\text{O})-\text{S}-\text{C}(=\text{O})-$ 이고, E, E₁, 및 E₂는 서로에 관계없이 O 또는 S이고, n₁과 n₂는



서로에 관계없이 0 또는 1이고,

Y_1 과 Y_2 는 서로에 관계없이

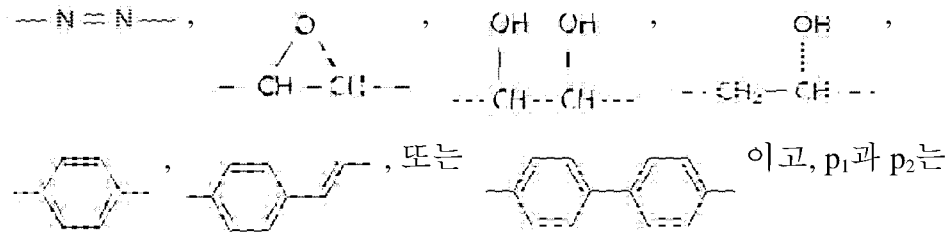


b_2 는 서로에 관계없이 0 내지 30의 정수이며, $a_1+a_2+a_3+b_1+b_2$ 는 3 내지 30의 정수이고,

P_1, P_2 , 및 P_3 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_a\text{R}_b-$ 또는 $-(\text{CR}_a\text{R}_b)_r\text{O}-$ 이고, r 은 1 내지

3의 정수이고,

Q_1 및 Q_2 는 서로에 관계없이 $q_1-(p_1)_{c_1}-q_2-(p_2)_{c_2}-q_3$ 이고, q_1 과 q_3 는 서로에 관계없이 $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 이고, q_2 는 탄소에 결합된 수소기가 F, Cl, Br, 또는 I로 치환되거나 혹은 비치환된 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$,



서로에 관계없이 $-\text{CR}_d\text{R}_b-$ 이고, c_1 과 c_2 는 서로에 관계없이 0 내지 2의 정수이고,

X_1 과 X_2 는 서로에 관계없이 $-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{CHO}$, $-\text{SH}$, $-\text{COCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{COOCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{CR}_c=\text{CR}_d\text{R}_e$, $-\text{CN}$, $-\text{N}=\text{C}=\text{O}$, $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{C}\equiv\text{CR}_d$, $-\text{NHCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, 또는 $-\text{NH}_2$ 이고,

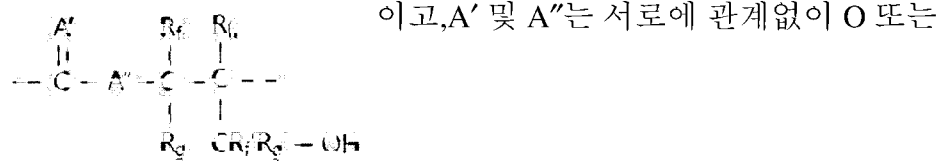
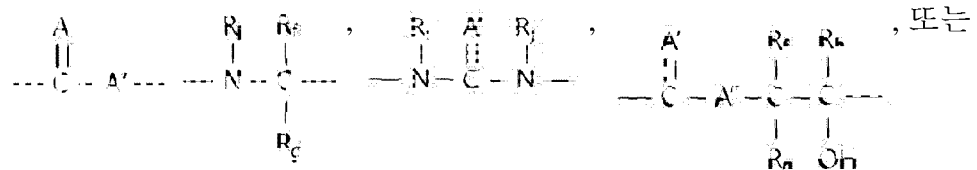
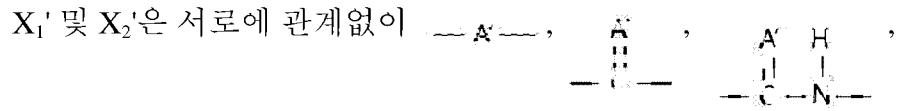
R_d 와 R_b 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,

R_c , R_d , 및 R_e 는 서로에 관계없이 H, F, Cl, Br, 또는 I이고,

U들은 서로에 관계없이 시아노기, 히드록실기, 불소, 염소, 아이오드, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 15의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 15의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬메르캅토기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬티오시안기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 또는 15의 알킬인산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트로소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬니트릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소티오시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬이소시안산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬시아산기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아조기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알킬아지드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 케티민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 알디민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 15의 아마이드기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지

24의 아릴아미노기, 탄소수 3 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 3 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 및 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

ℓ 들은 서로에 관계없이 0 내지 16 사이의 정수이고,



S이고, R_f , R_g , R_h , R_i , R_j , R_k , 및 R_l 는 서로에 관계없이 H 또는 C1 내지 C3의 알킬기이고,

ℓ 은 1 내지 4의 정수이다.

[청구항 24]

3차원 구조를 형성하는 다수 개의 단위 유기분자들을 포함하되

각 단위 유기분자는 방향족 고리와 상기 방향족 고리의 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 치환기들의 제1 쌍과 나머지 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 치환기들의 제2 쌍을 구비하고, 상기 치환기들은 그의 말단들에 서로에 관계없이 $-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{CHO}$, $-\text{SH}$, $-\text{COCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{COOCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{CR}_c=\text{CR}_d\text{R}_e$, $-\text{CN}$, $-\text{N}=\text{C}=\text{O}$, $-\text{C}=\text{N}=\text{N}-\text{CR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, $-\text{C}\equiv\text{CR}_a$, $-\text{NHCR}_c\text{R}_d\text{R}_e$, 또는 $-\text{NH}_2$ 의 말단기들(X)을 포함하고,

상기 3차원 구조의 하나의 층 내에 포함된 상기 단위 유기분자들 중 하나의 단위 유기분자의 상기 제1 쌍에 포함된 치환기들의 말단기들과 다른 하나의 단위 유기분자의 상기 제2 쌍에 포함된 치환기들의 말단기들은 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용, 런던 분산력(London dispersion interaction) 또는 수소 결합(hydrogen bonding)에 의해 자기 조립되고,

상기 3차원 구조의 하나의 층 내에 포함된 상기 단위 유기분자들과 이에 인접한 다른 층 내에 포함된 상기 단위 유기분자들은 방향족 고리들 사이의 파이-파이 상호작용에 의해 자기 조립된 3차원 유기 구조체.

[청구항 25]

제24항에 있어서,

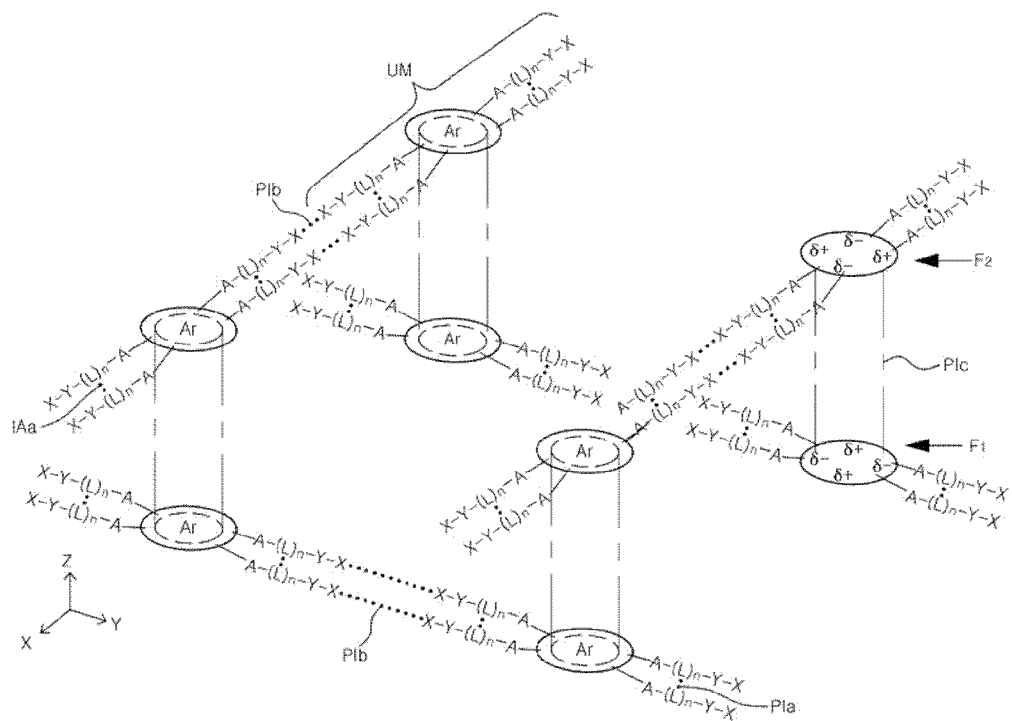
상기 방향족 고리의 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 한 쌍의 치환기들은 그들 사이의 반 데르 발스(Van Der Waals) 상호작용에

- 의해 단일 치환기에 비해 강직성이 증가된 3차원 유기 구조체.
- [청구항 26] 제24항에 있어서,
상기 방향족 고리의 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 한 쌍의 치환기들은 서로에 대해 상기 방향족 고리의 오르소 위치들에 결합된 3차원 유기 구조체.
- [청구항 27] 제24항에 있어서,
상기 치환기의 각각은 상기 방향족 고리에 직접 연결된 비공유 전자쌍을 갖는 칼코젠 원소를 구비하는 3차원 유기 구조체.
- [청구항 28] 제24항에 있어서,
상기 방향족 고리는 6 내지 46 멤버의 호모사이클릭 방향족 고리 또는 헤테로사이클릭 방향족 고리인 3차원 유기 구조체.
- [청구항 29] 제24항에 있어서,
상기 방향족 고리는 C_2 대칭을 갖는 방향족 고리인 3차원 유기 구조체.
- [청구항 30] 제24항에 있어서,
상기 방향족 고리는 C_3 대칭을 갖고,
각 유기 분자는 방향족 고리와 상기 방향족 고리의 나머지 치환 위치들 중 바로 인접한 위치들에 각각 결합된 치환기들의 제3 쌍을 더 구비하는 3차원 유기 구조체.
- [청구항 31] 제29항에 있어서,
상기 치환기들은 상기 방향족 고리의 치환 위치들 중 동등한 대칭성을 갖는 위치들(symmetry-equivalent positions)에 결합되는 3차원 유기 구조체.
- [청구항 32] 제24항에 있어서,
상기 3차원 유기 구조체는 삼사정계(triclinic), 단사정계(monoclinic), 사방정계(orthorhombic), 정방정계(tetragonal), 육방정계(hexagonal), 또는 입방정계(cubic)의 기본 격자 구조를 갖는 3차원 유기 구조체.
- [청구항 33] 제24항에 있어서,
상기 단위 유기분자들은 제1항의 유기화합물인 3차원 유기 구조체.
- [청구항 34] 제24항 내지 제33항 중 어느 한 항의 3차원 유기 구조체를 포함하는 분리체.
- [청구항 35] 제34항에 있어서,
상기 분리체는 펠렛 또는 필름 형태인 분리체.
- [청구항 36] 제35항에 있어서,
상기 분리체는 고분자를 더 포함하는 분리체.
- [청구항 37] 제34항에 있어서,
수소 결합 파라미터를 X축, 극성 파라미터를 Y축, 분산 파라미터의 2배를 Z축으로 하는 한센 스페이스 내에서 상기 분리체의 한센 용해 구가 정의되고,

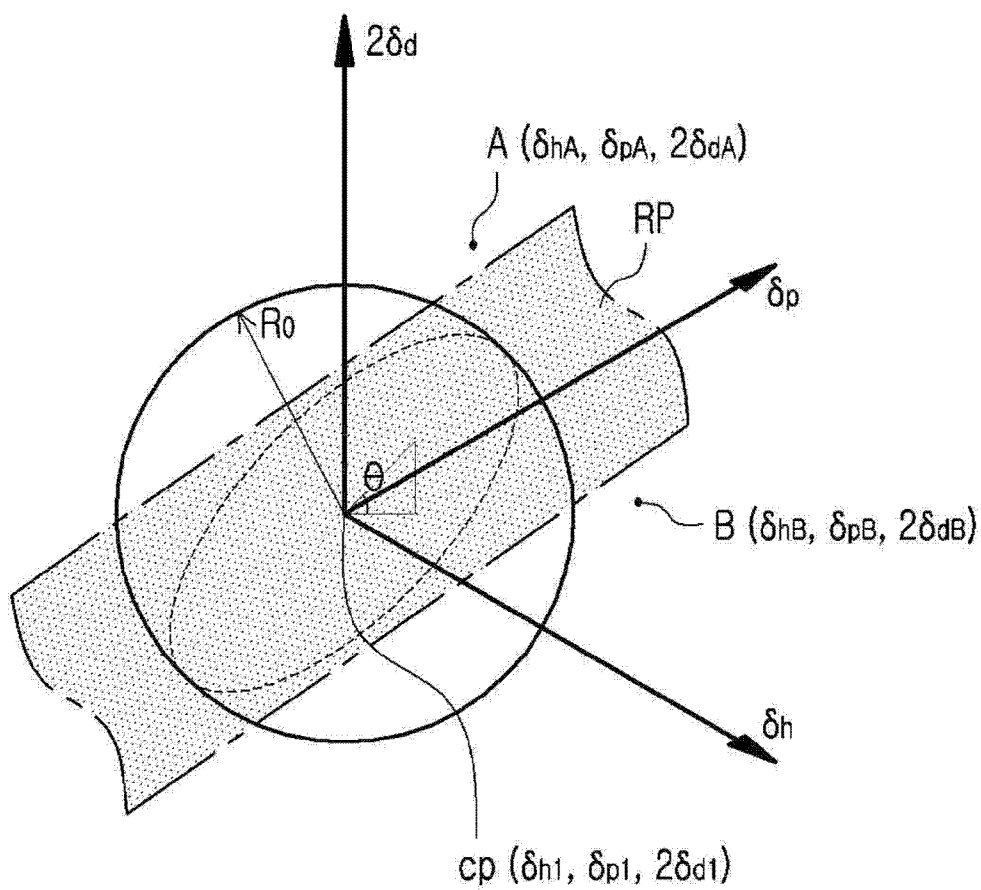
상기 분리체는 제1 액체와 제2 액체의 혼합액 중 어느 하나의 액체를 흡수 또는 흡착하되, 상기 한센 스페이스 내에서 상기 제1 액체와 상기 제2 액체의 한센 용해 파라미터들에 의해 각각 정의된 A점과 B점은 상기 한센 용해 구 외부에 배치되고, 상기 A점과 상기 B점은 상기 X축과 상기 Y축으로 이루어진 XY 평면에 대해 0.1 내지 0.45π 의 이면각을 갖고 상기 한센 용해 구의 중심점을 지나는 기준 평면(RP)에 의해 분리된 두 개의 영역에 분리 배치되는 분리체.

- [청구항 38] 제37항에 있어서,
상기 혼합액은 공비 혼합물인 분리체.
- [청구항 39] 제37항에 있어서,
상기 제1 액체는 물인 분리체.
- [청구항 40] 제24항 내지 제33항 중 어느 한 항의 3차원 유기 구조체를 포함하는 광학층.
- [청구항 41] 제40항의 광학층을 광경로 상에 포함하는 광학소자.
- [청구항 42] 제41항에 있어서,
상기 광학소자는 발광층을 구비하는 발광소자이고,
상기 광학층은 상기 발광층과 외부 사이에 배치된 광증폭층인 광학소자.
- [청구항 43] 제41항에 있어서,
상기 광학소자는 광흡수층을 구비하는 태양전지이고,
상기 광학층은 상기 광흡수층과 외부 사이에 배치된 광증폭층인 광학소자.
- [청구항 44] 제41항에 있어서,
상기 광학소자는 발광층 또는 발광소자를 구비하는 디스플레이이고,
상기 광학층은 상기 발광층 또는 상기 발광소자와 외부 사이에 배치되는 광증폭층인 광학소자.
- [청구항 45] 제41항에 있어서,
상기 광학소자는 발광층 또는 발광소자를 구비하는 조명장치이고,
상기 광학층은 상기 발광층 또는 상기 발광소자와 외부 사이에 배치되는 광증폭층인 광학소자.
- [청구항 46] 제41항에 있어서,
상기 광학소자는 슈퍼렌즈인 광학소자.
- [청구항 47] 제41항에 있어서,
상기 광학소자는 파장가변 광증폭기(tunable amplifier)인 광학소자.

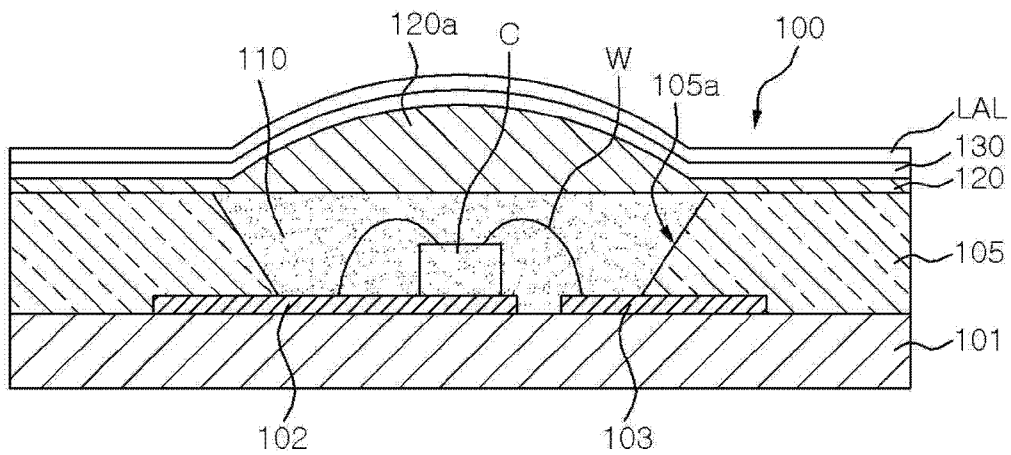
[도1]



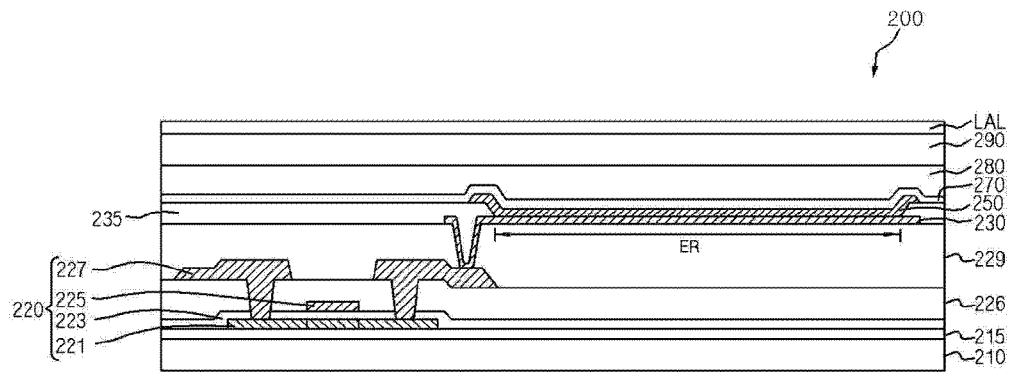
[도2]



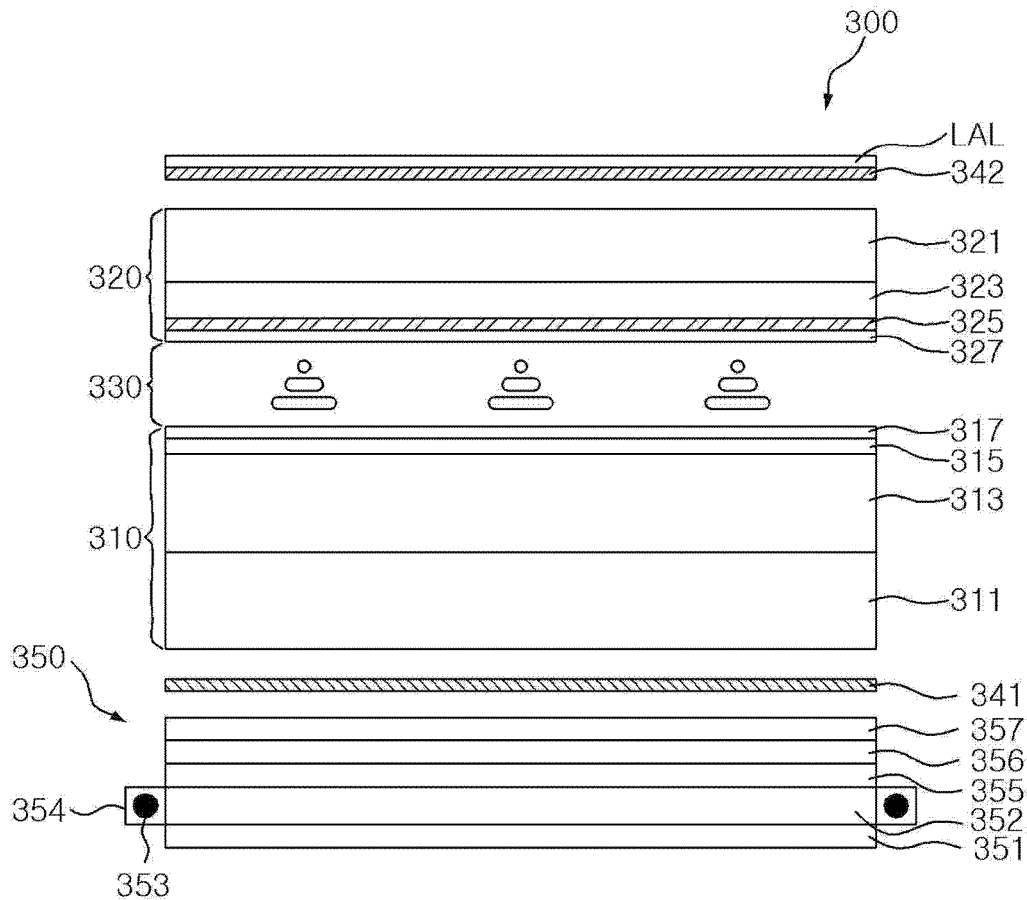
[도3]



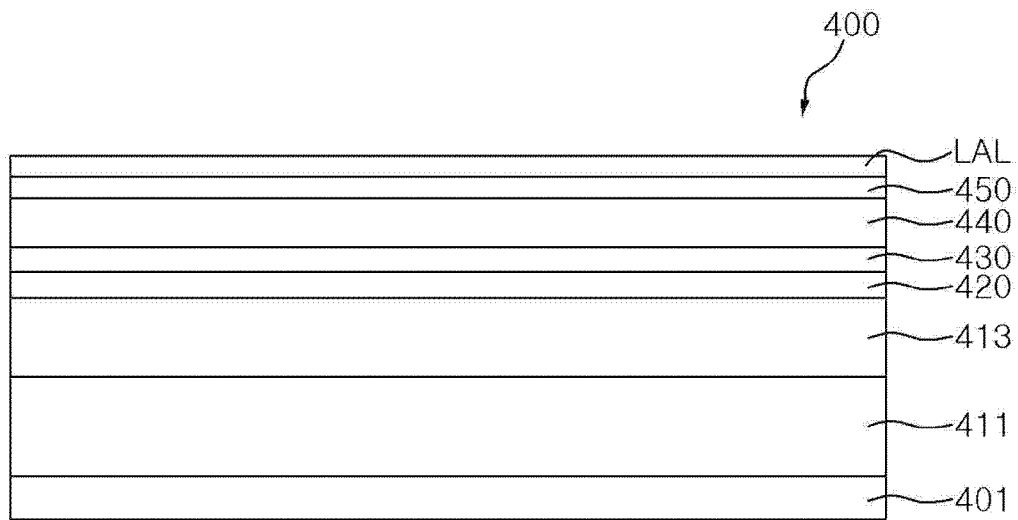
[54]



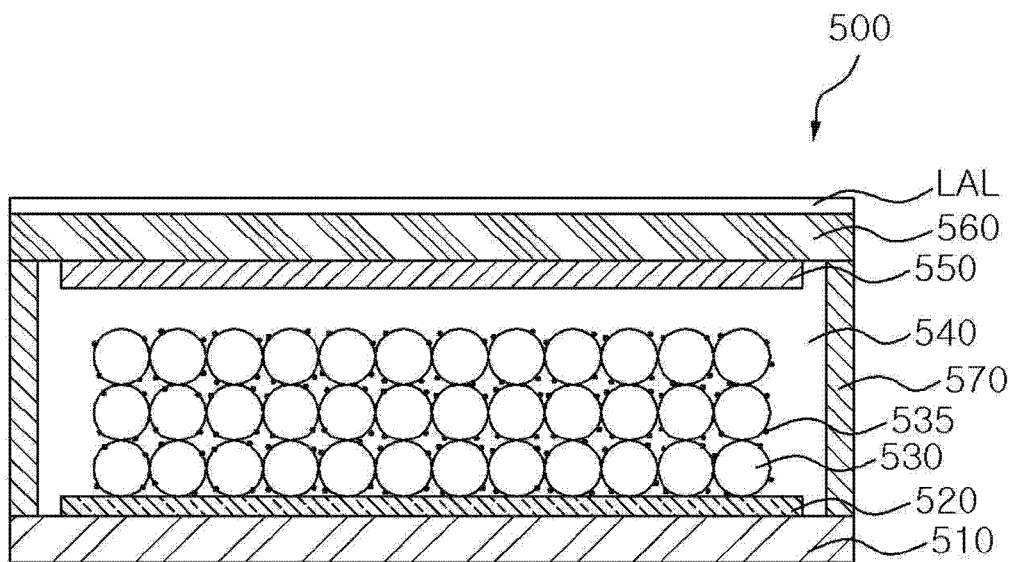
[도5]



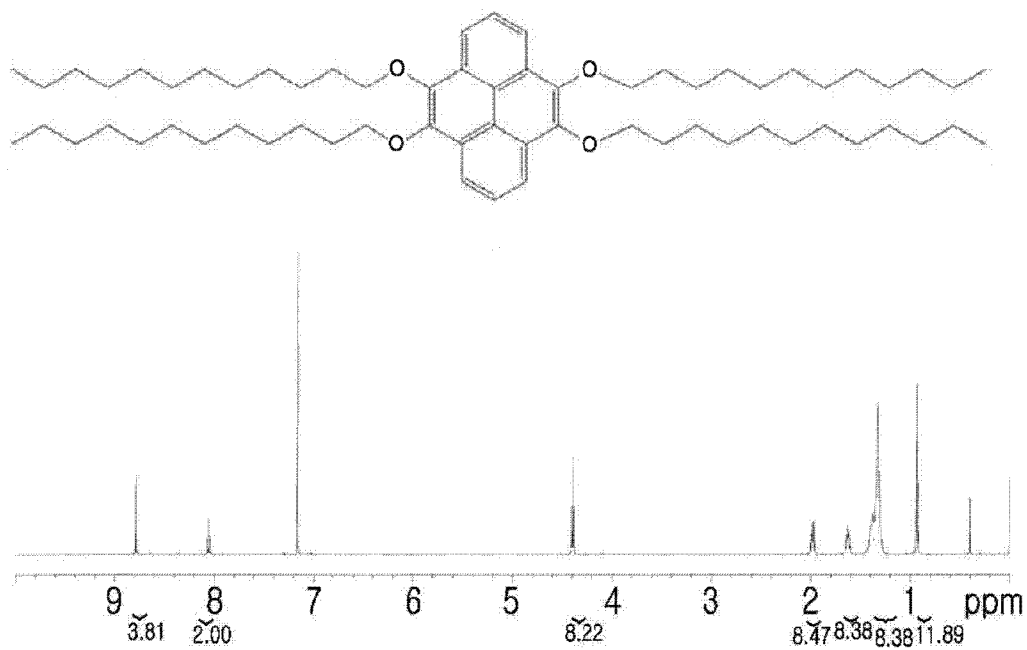
[도6]



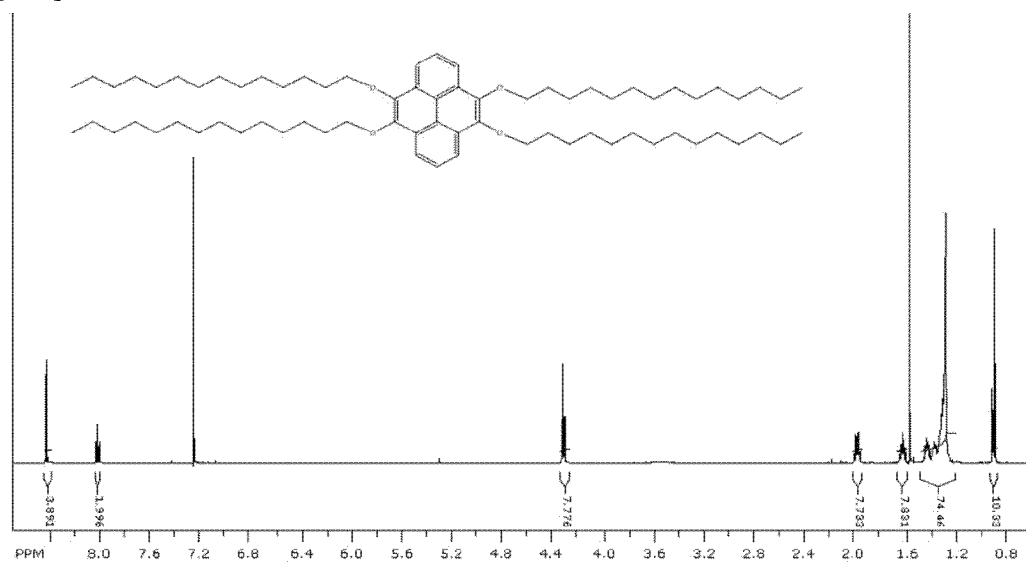
[도7]



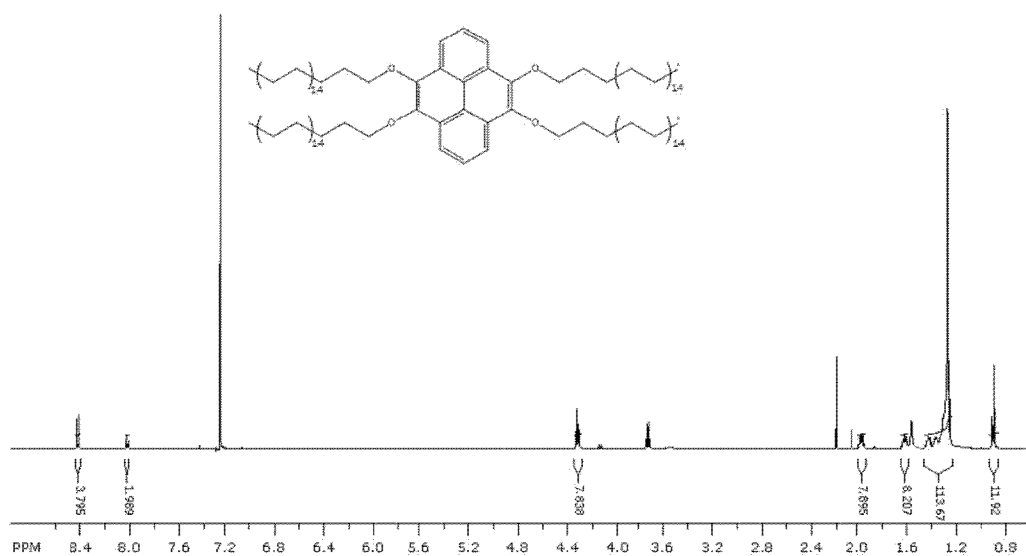
[도8]



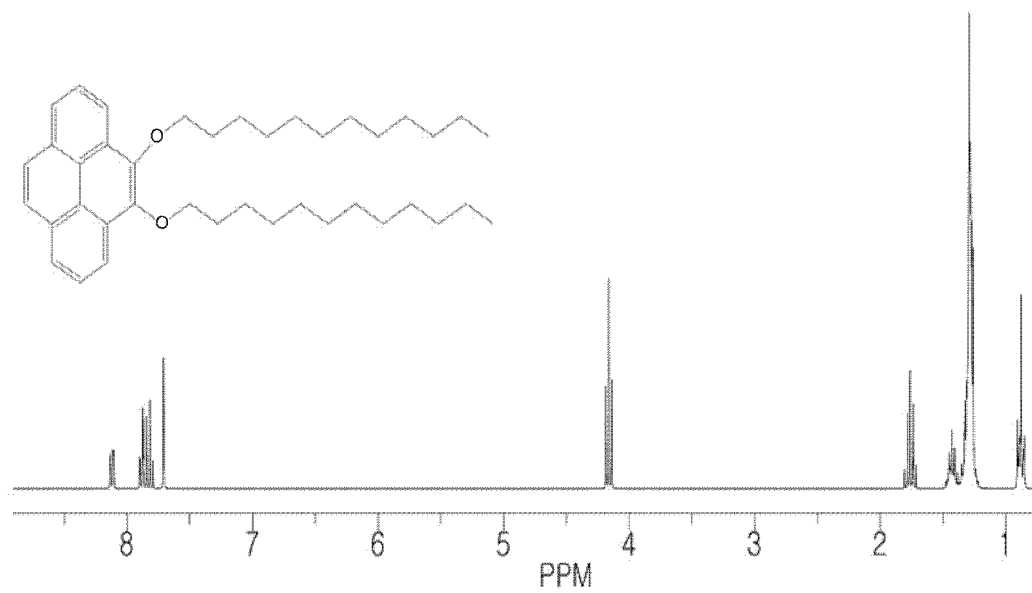
[도9]



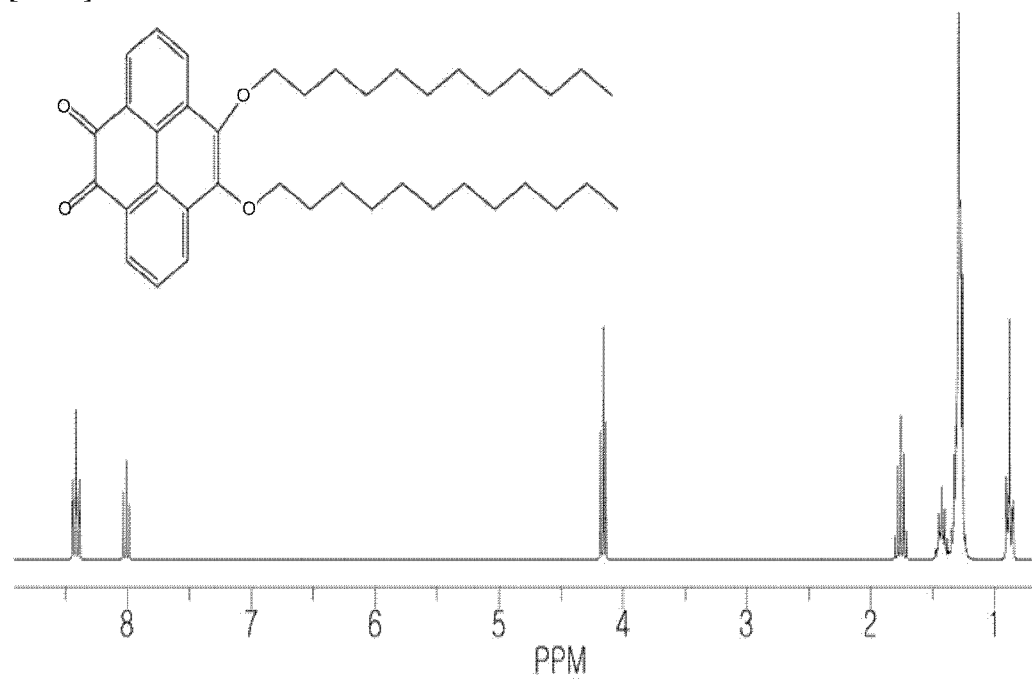
[도10]



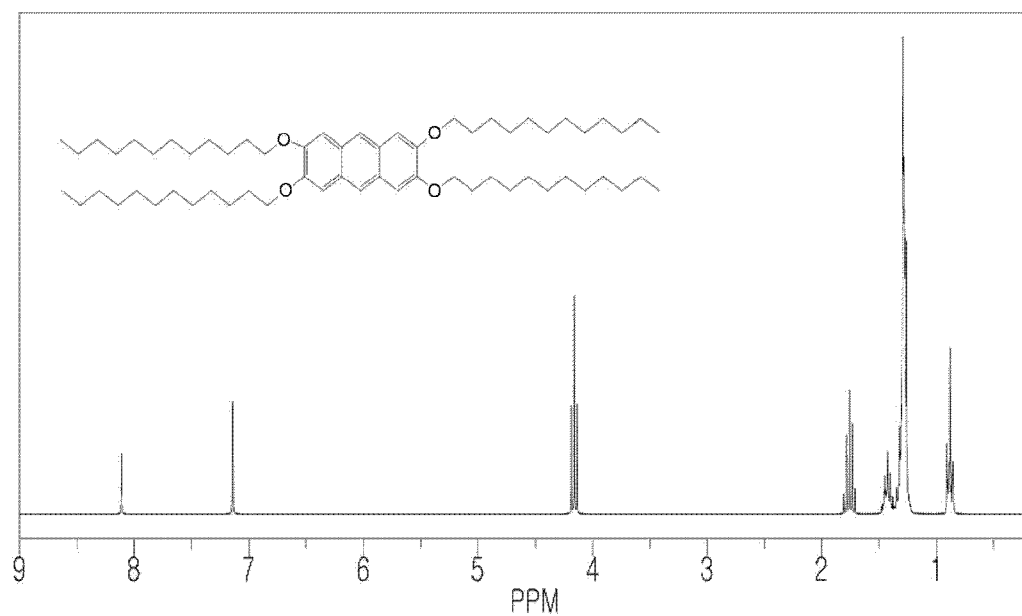
[도11]



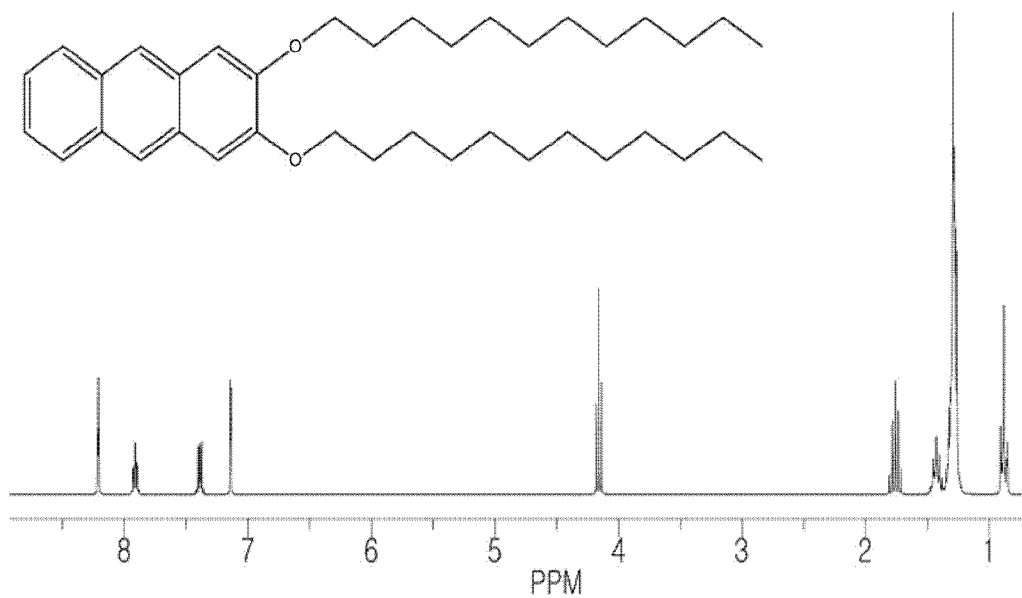
[도12]



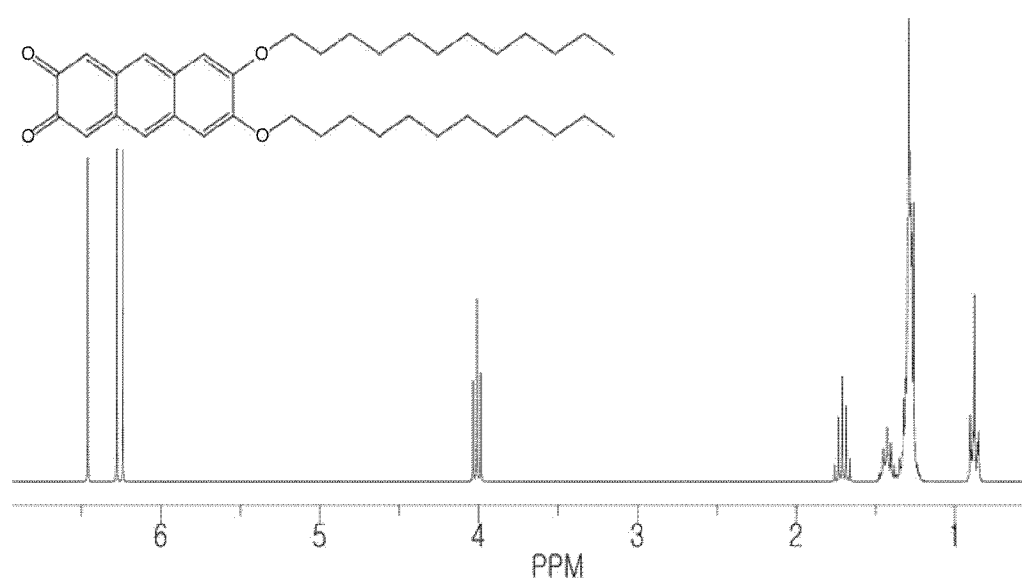
[도13]



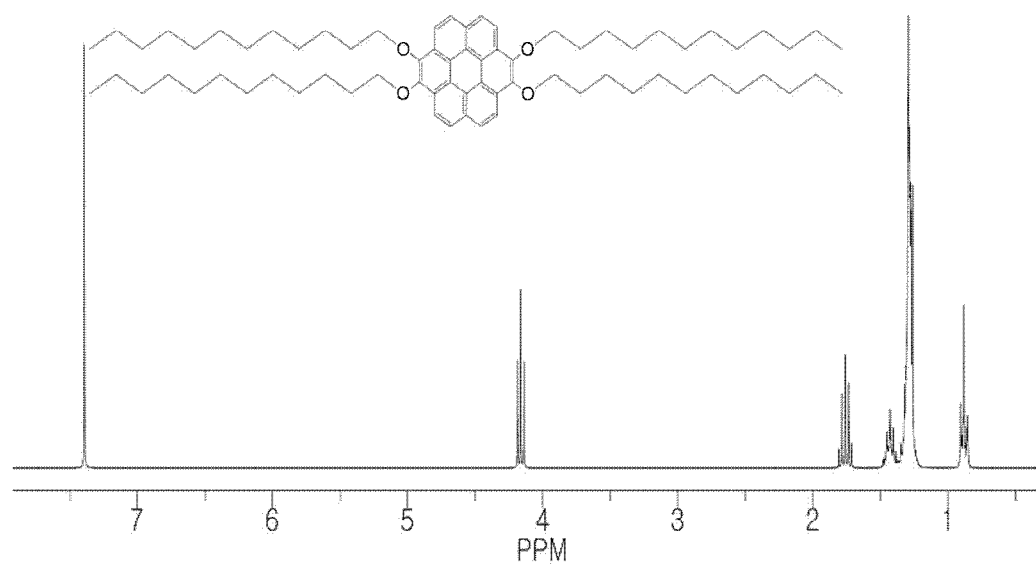
[도14]



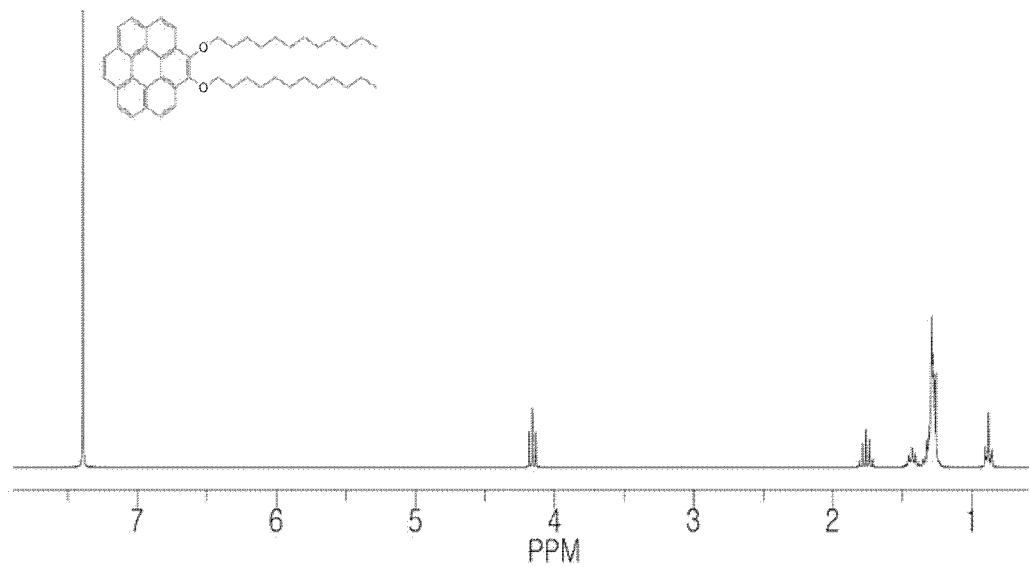
[도15]



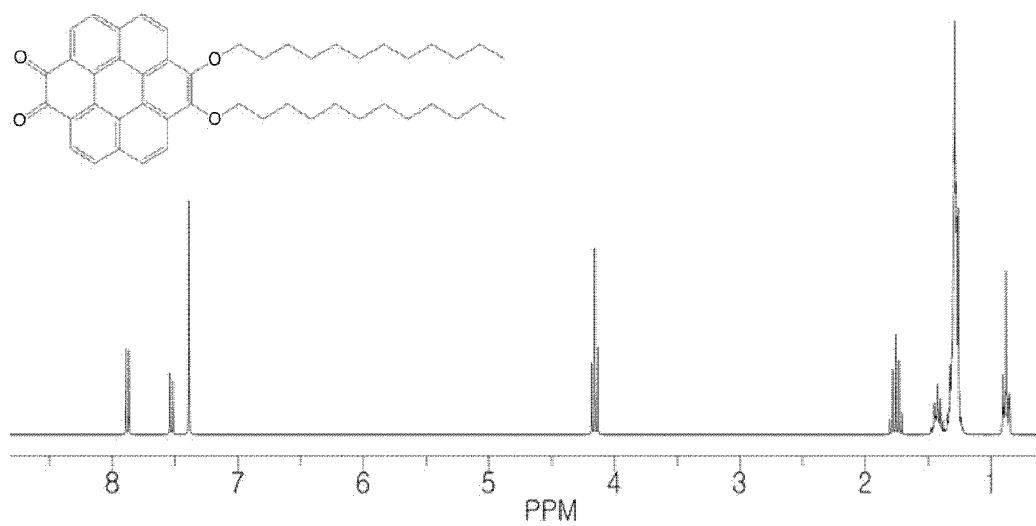
[도16]



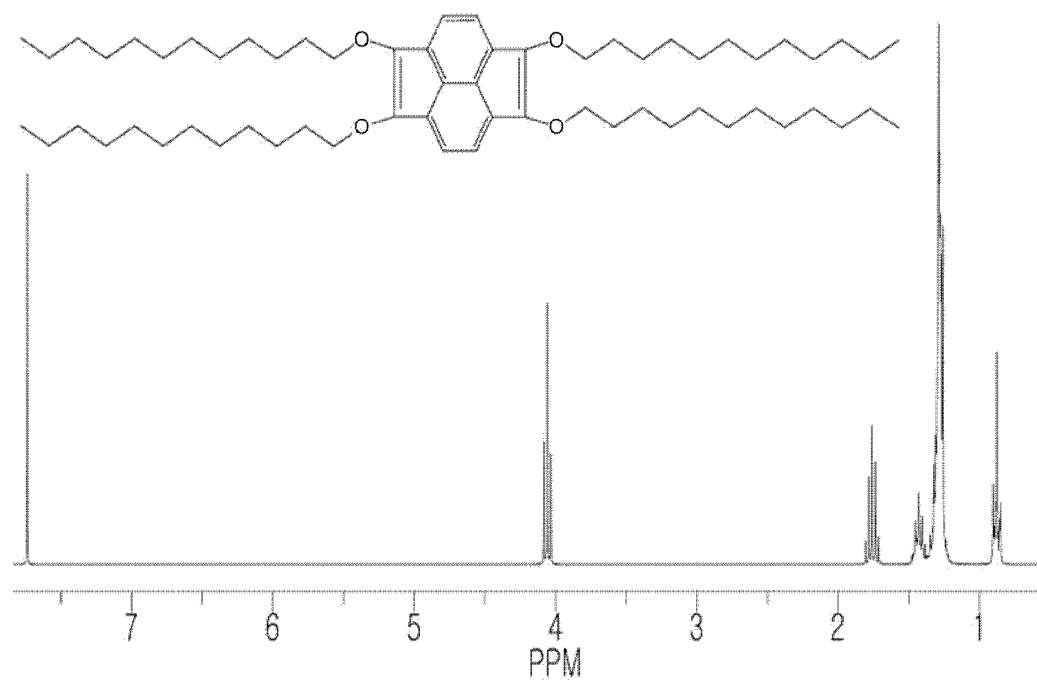
[도17]



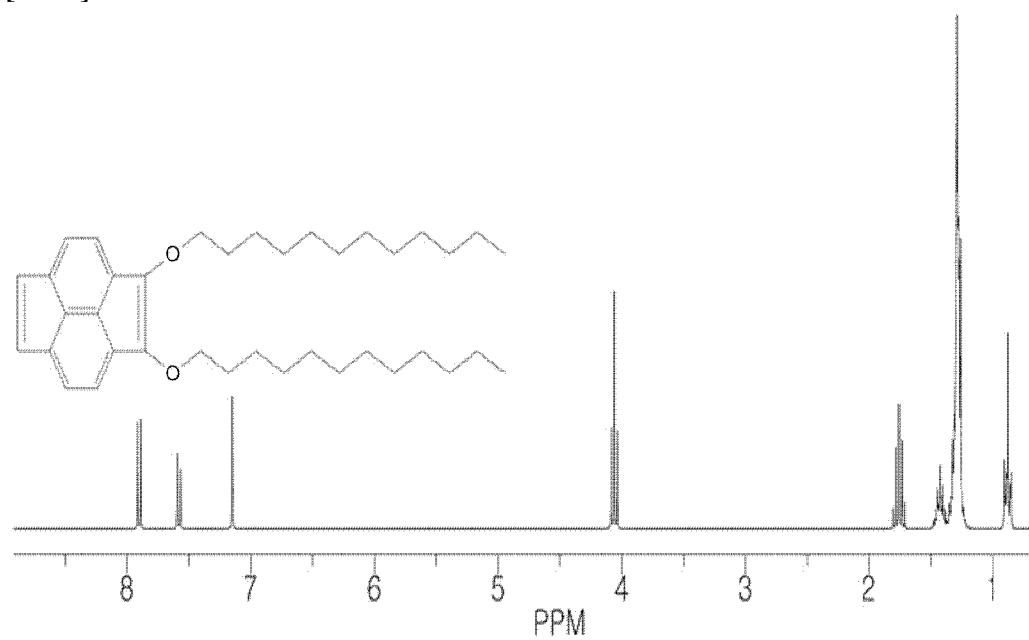
[도18]



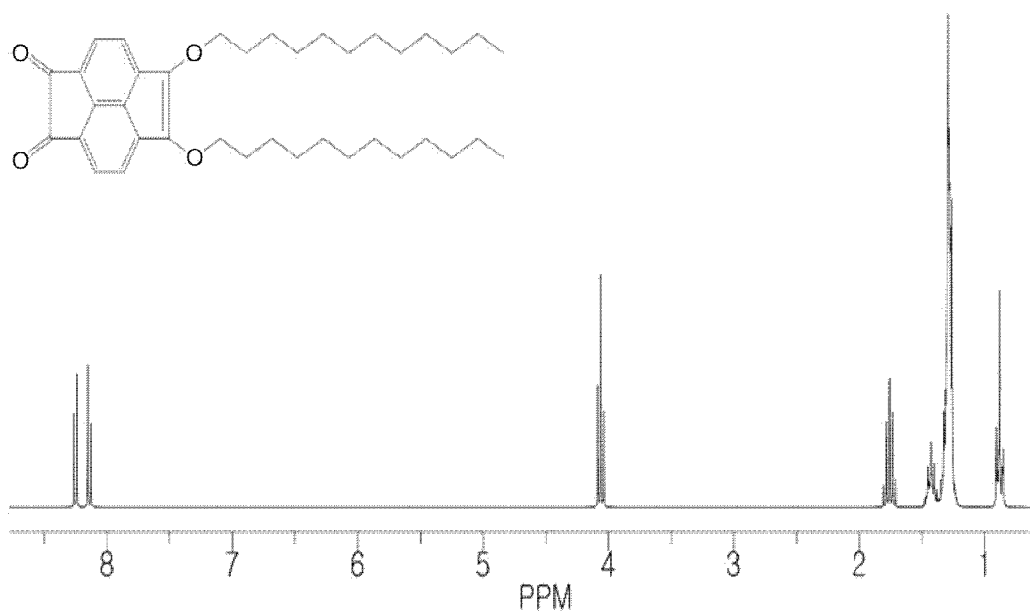
[도19]



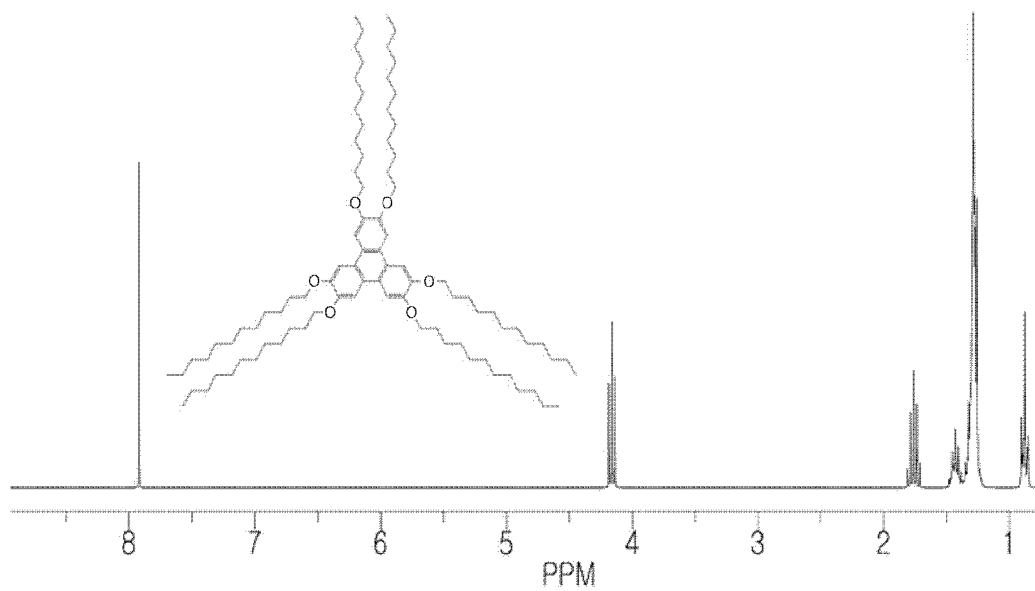
[도20]



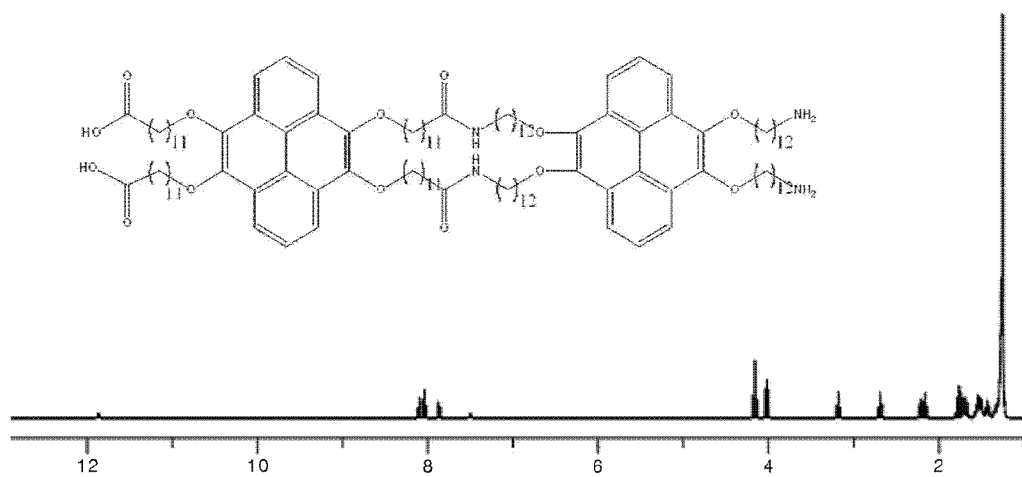
[도21]



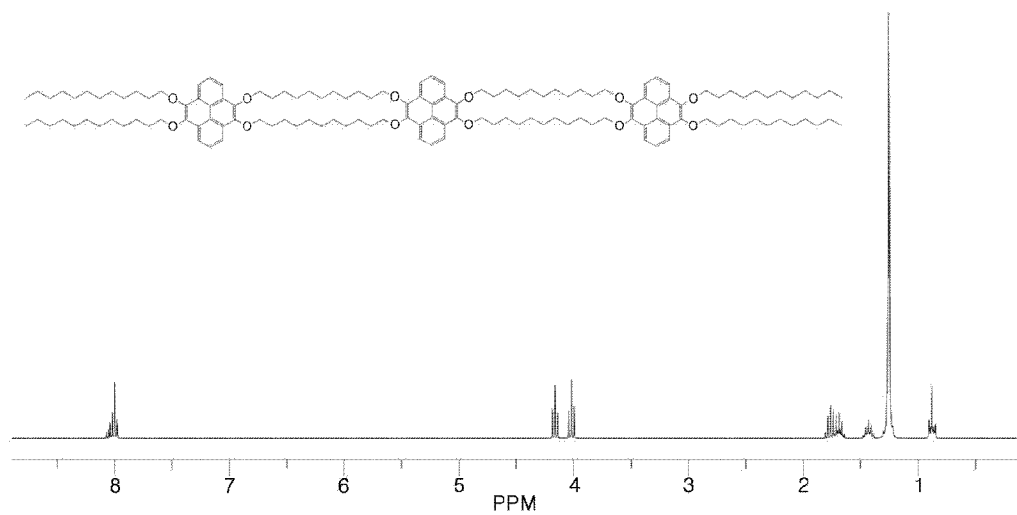
[도22]



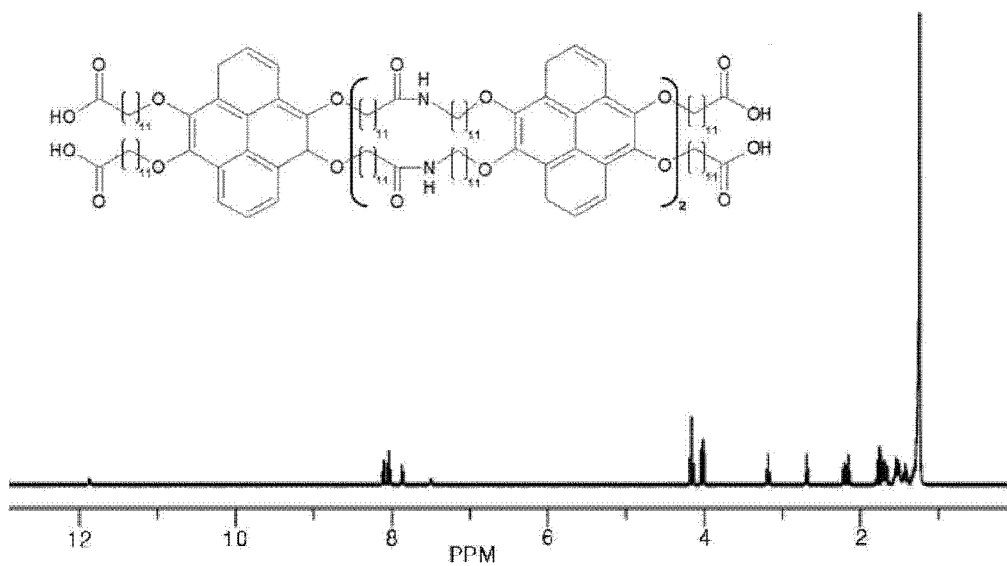
[도23]



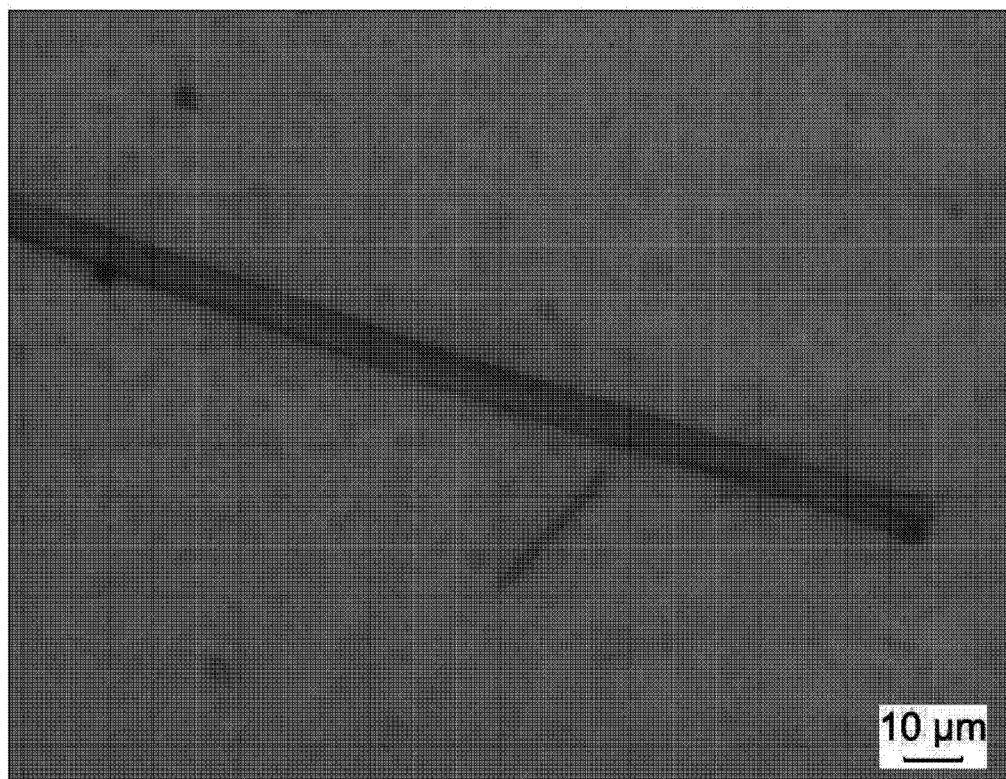
[도24]



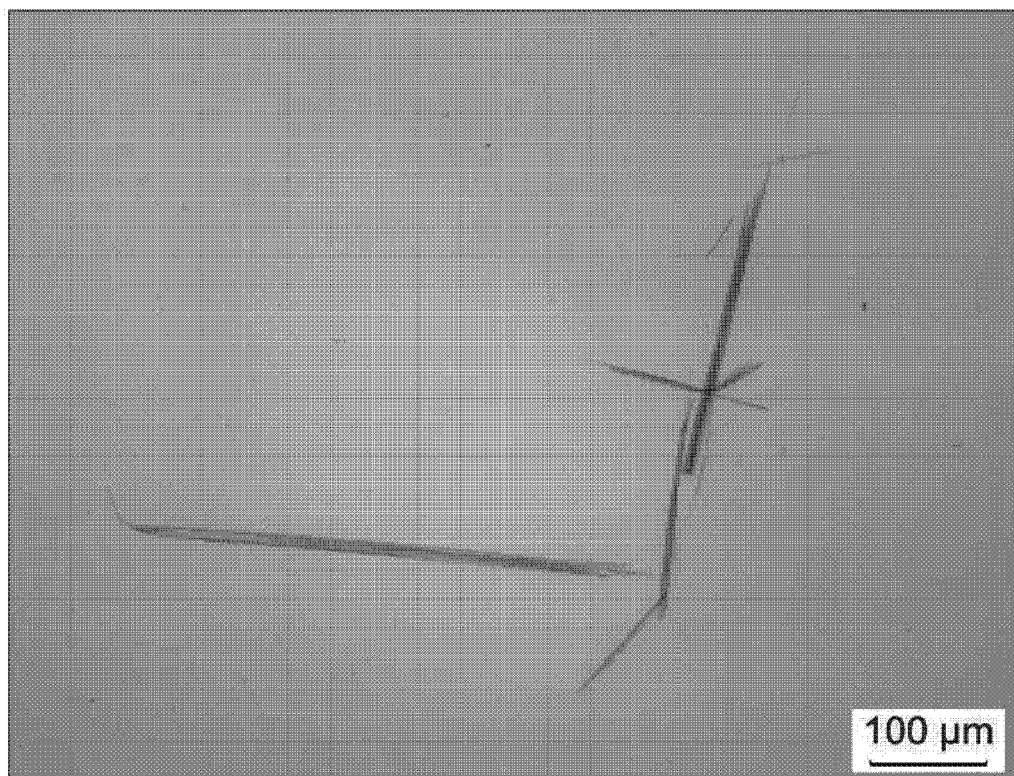
[도25]



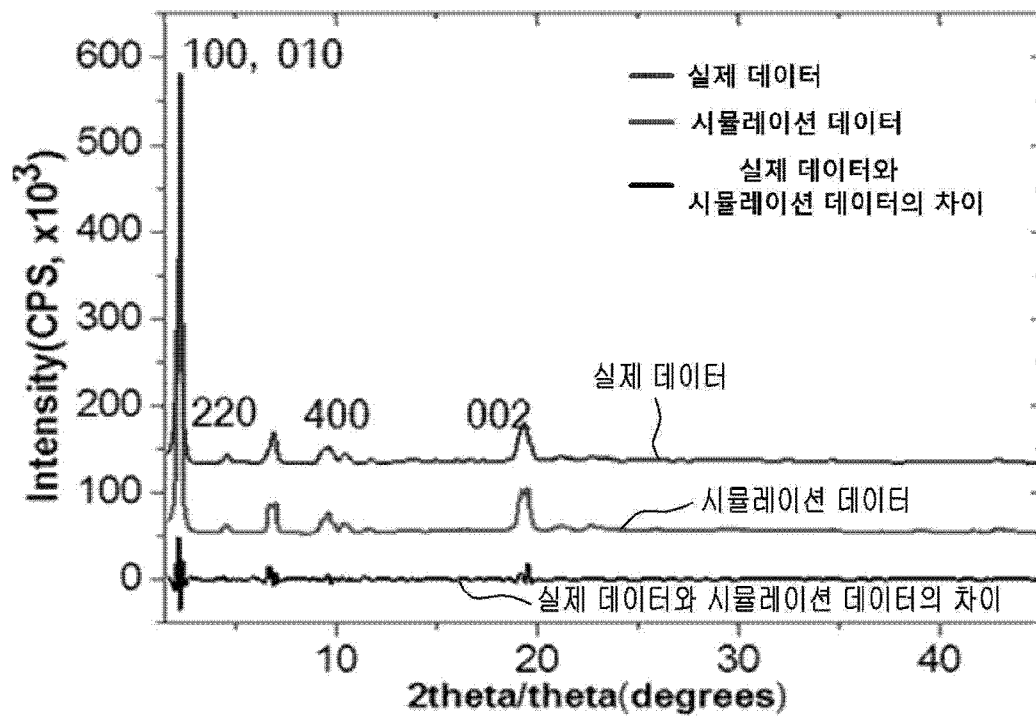
[도26a]



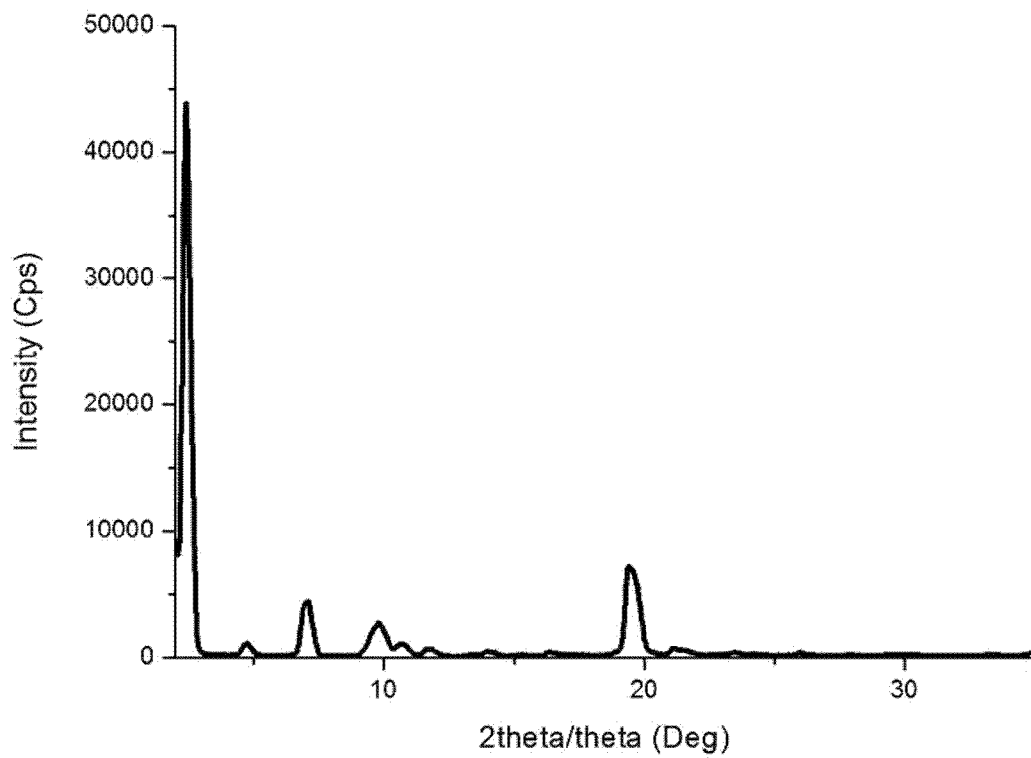
[도26b]



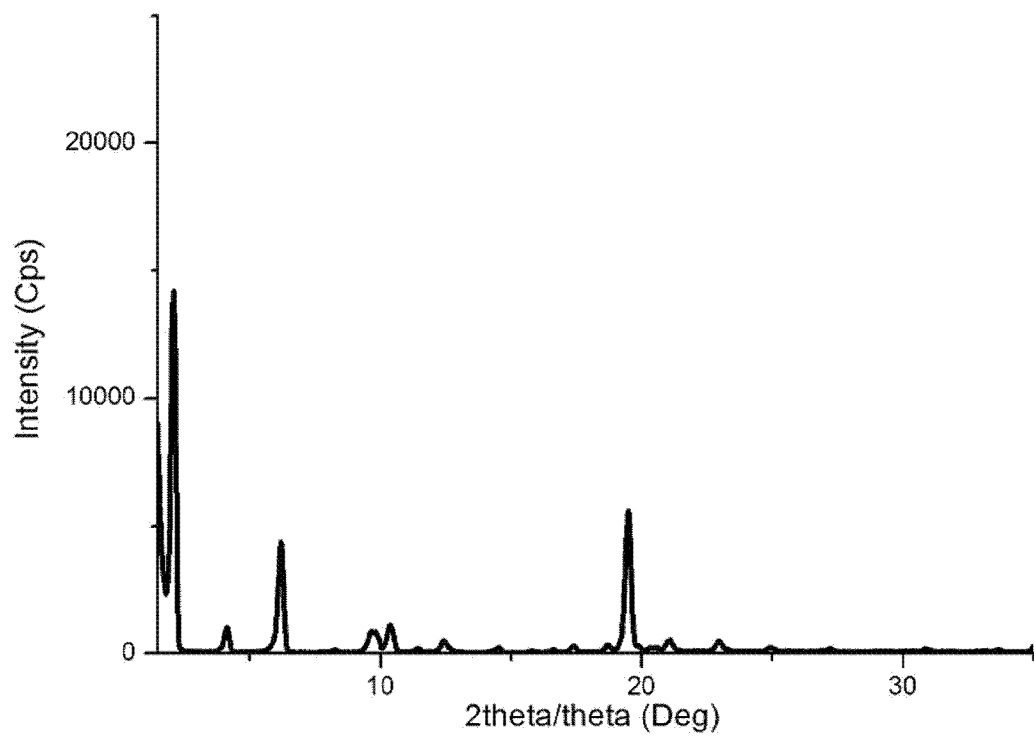
[도27]



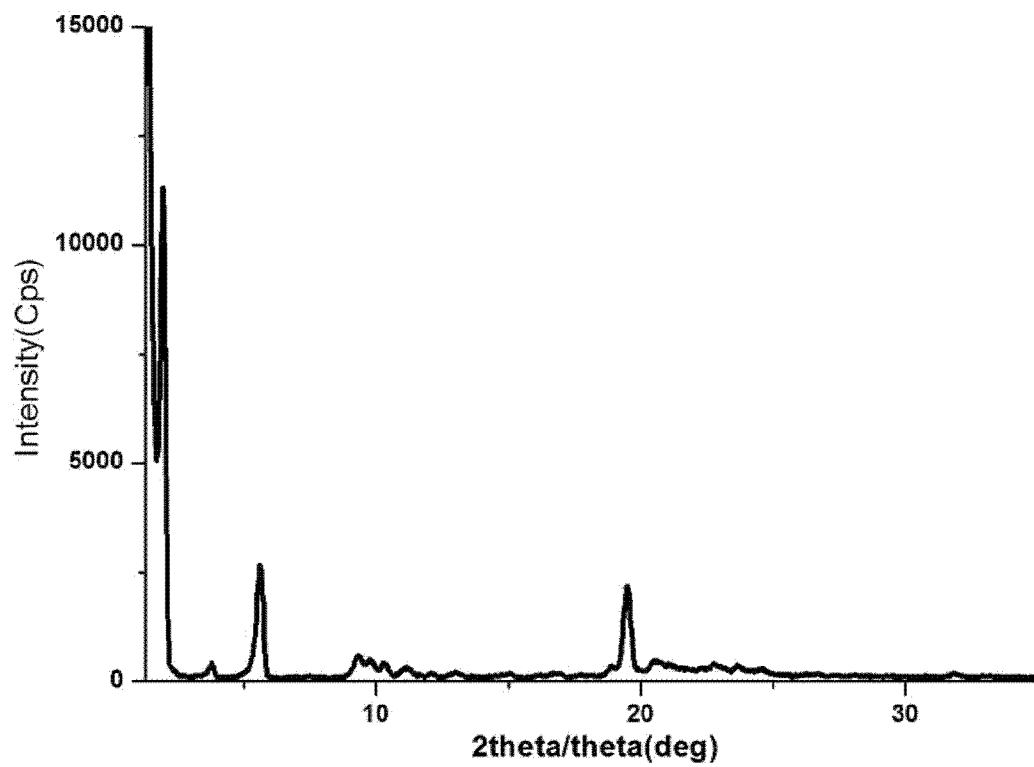
[도28]



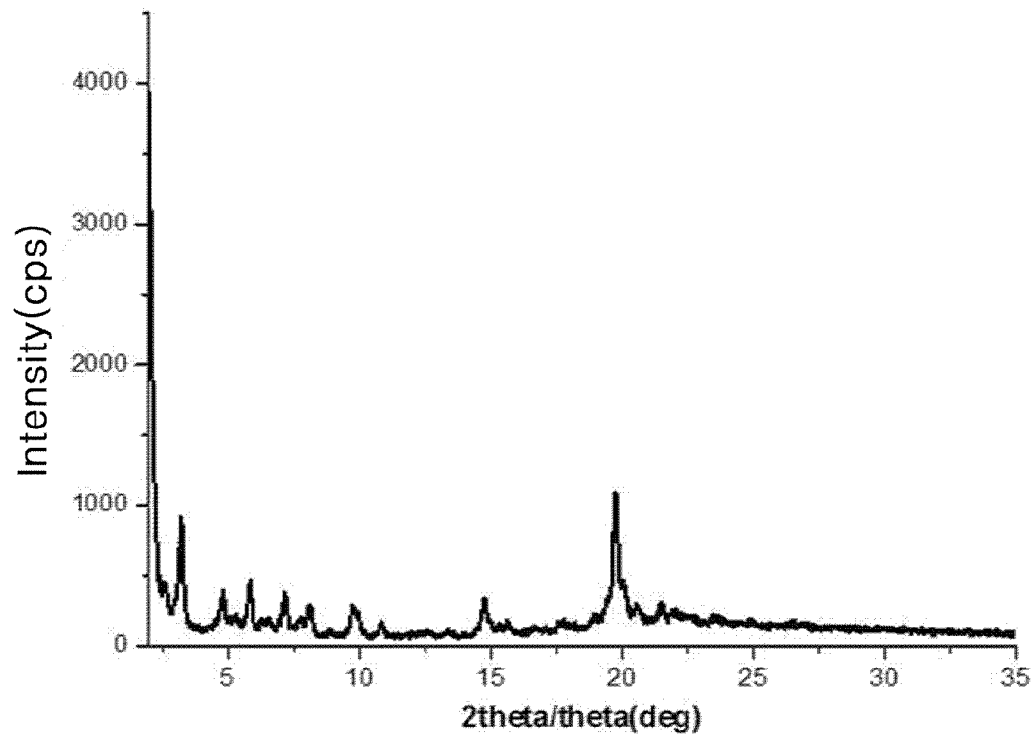
[도29]



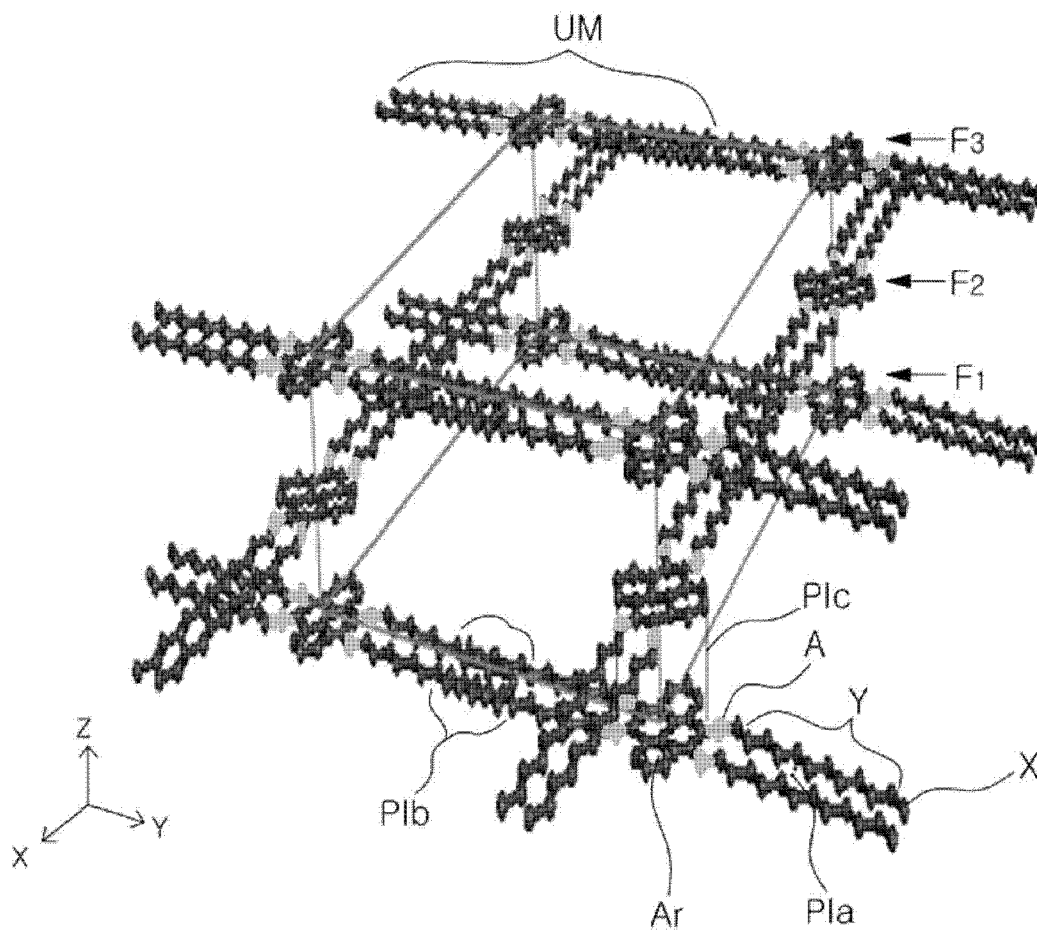
[도30]



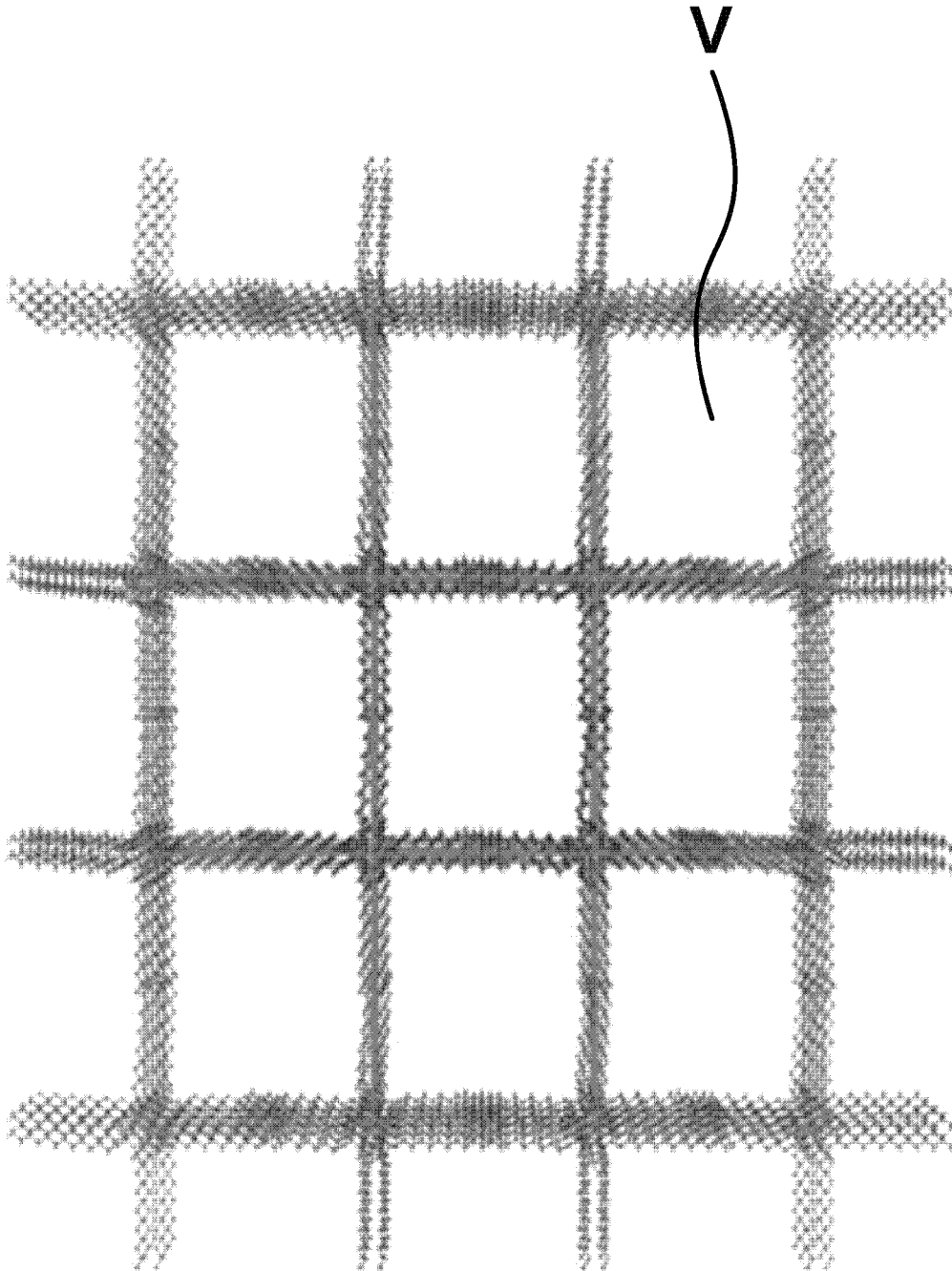
[도31]



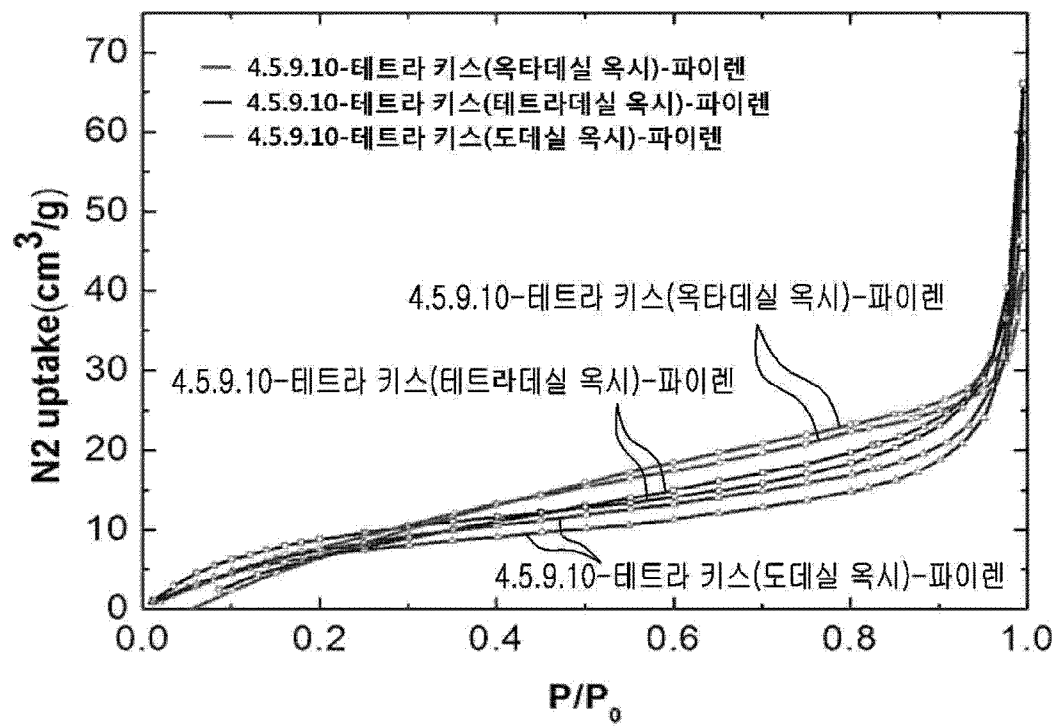
[도32a]



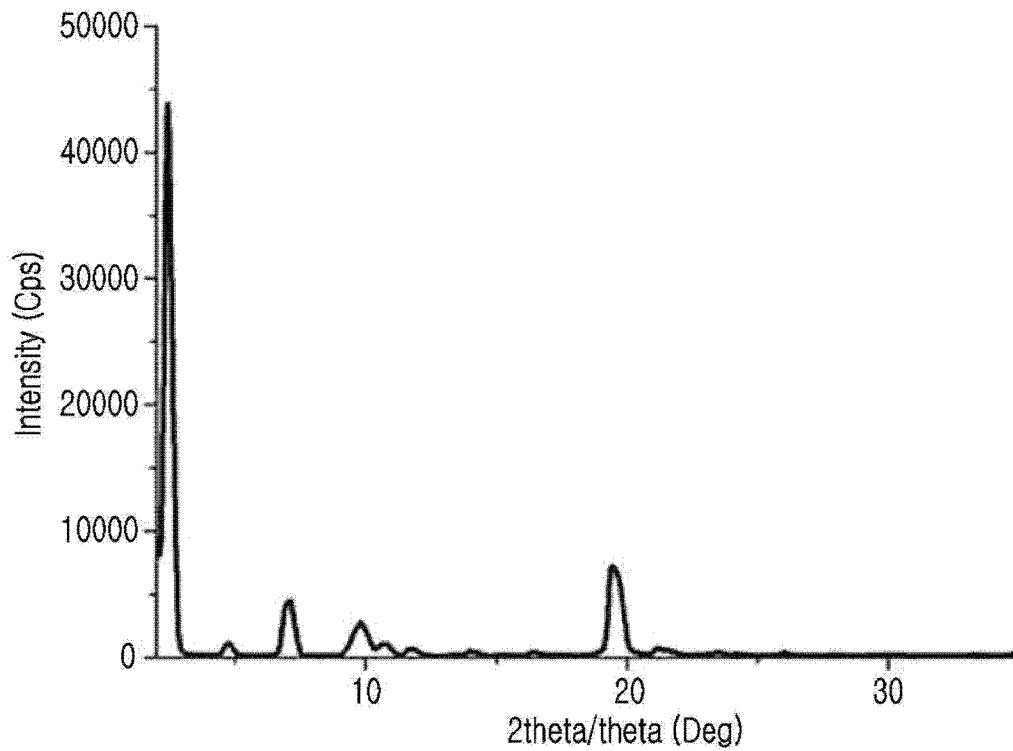
[도32b]



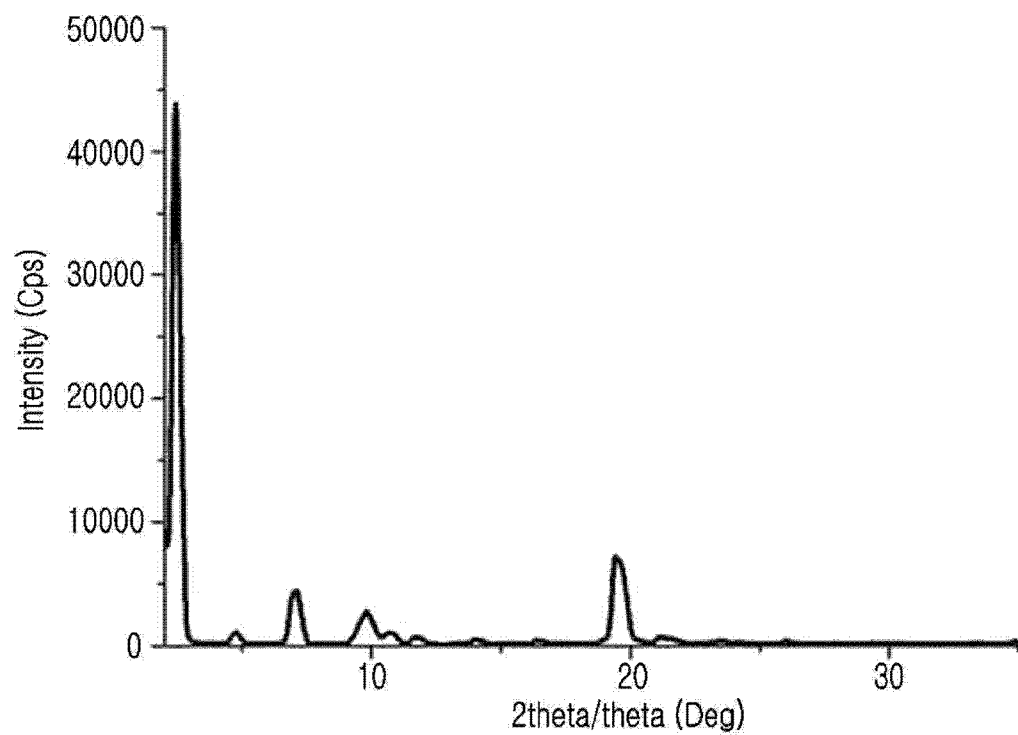
[도33]



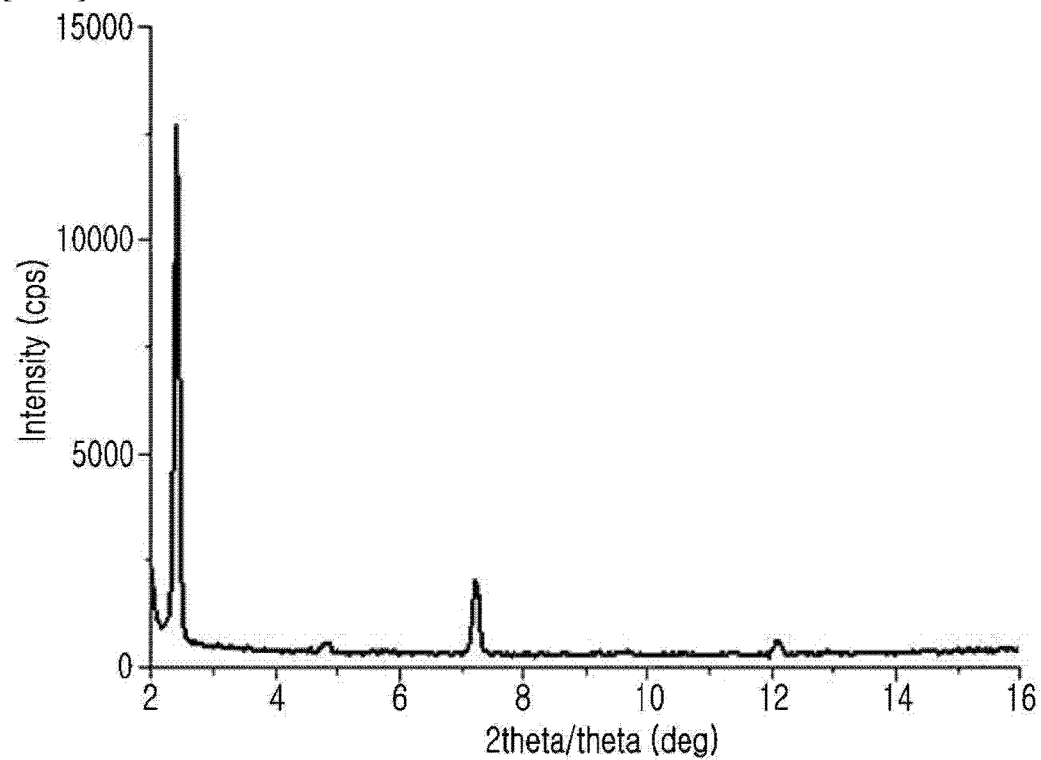
[도34]



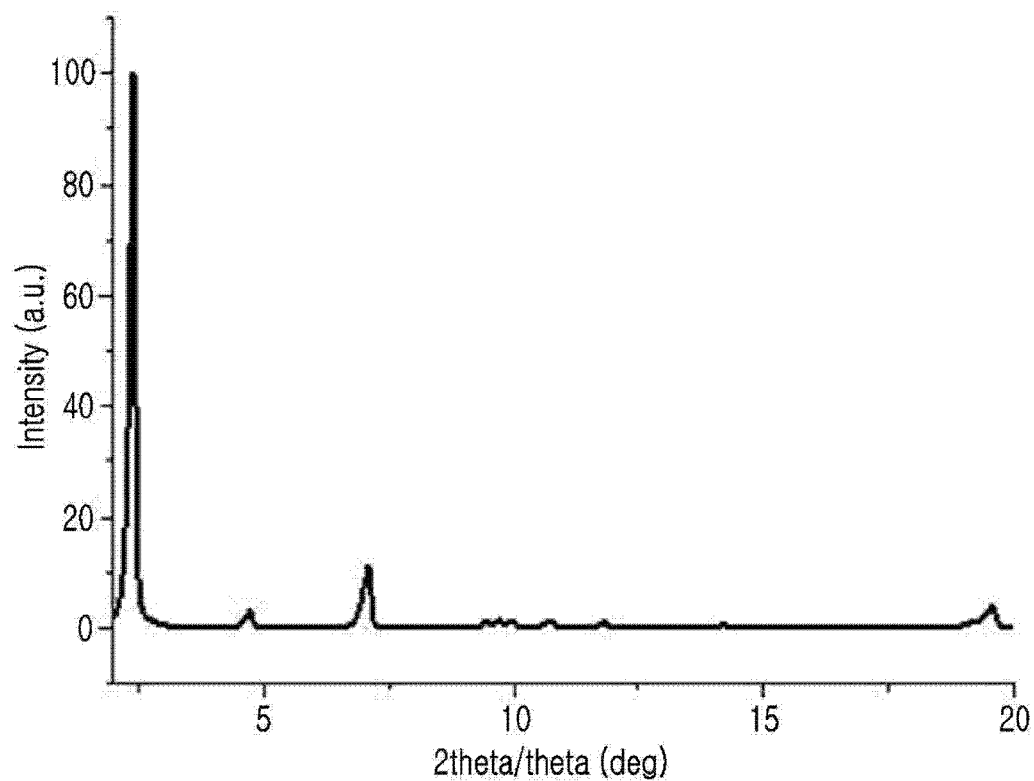
[도35]



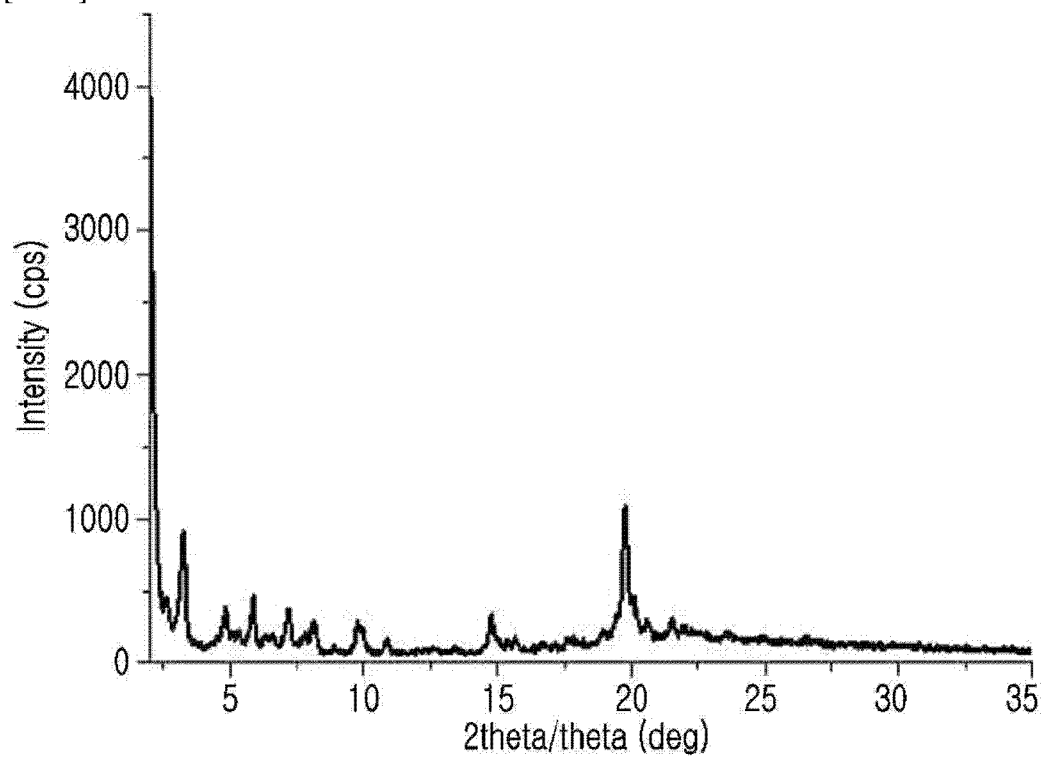
[도36]



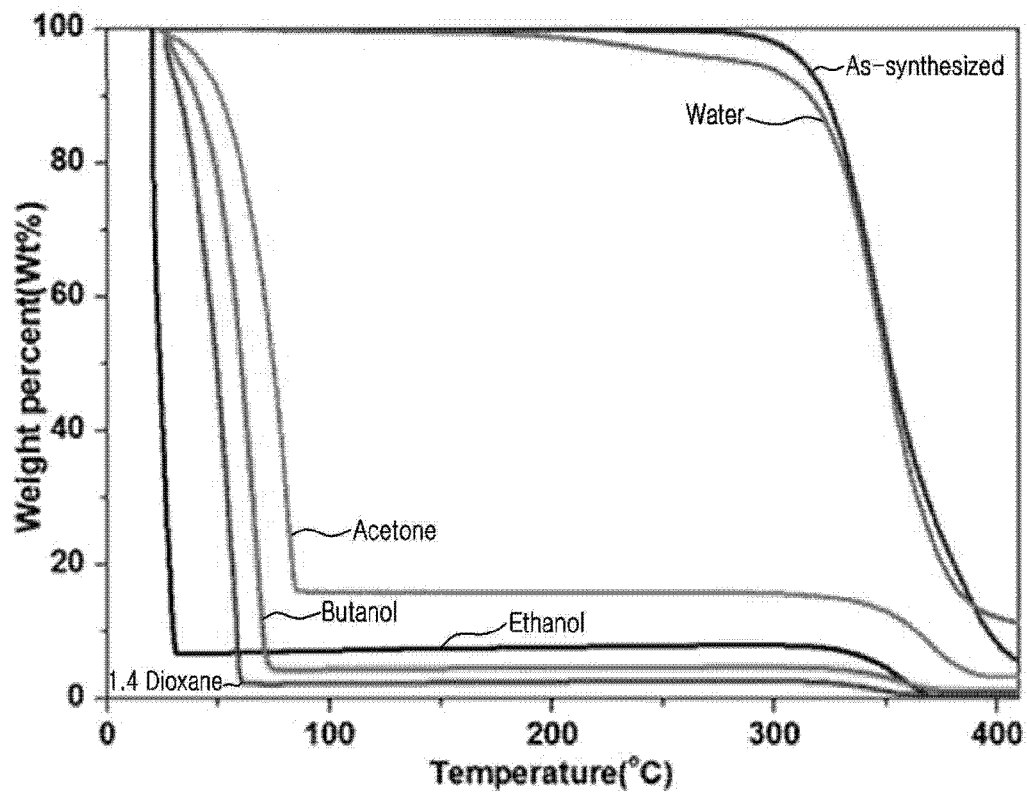
[도37]



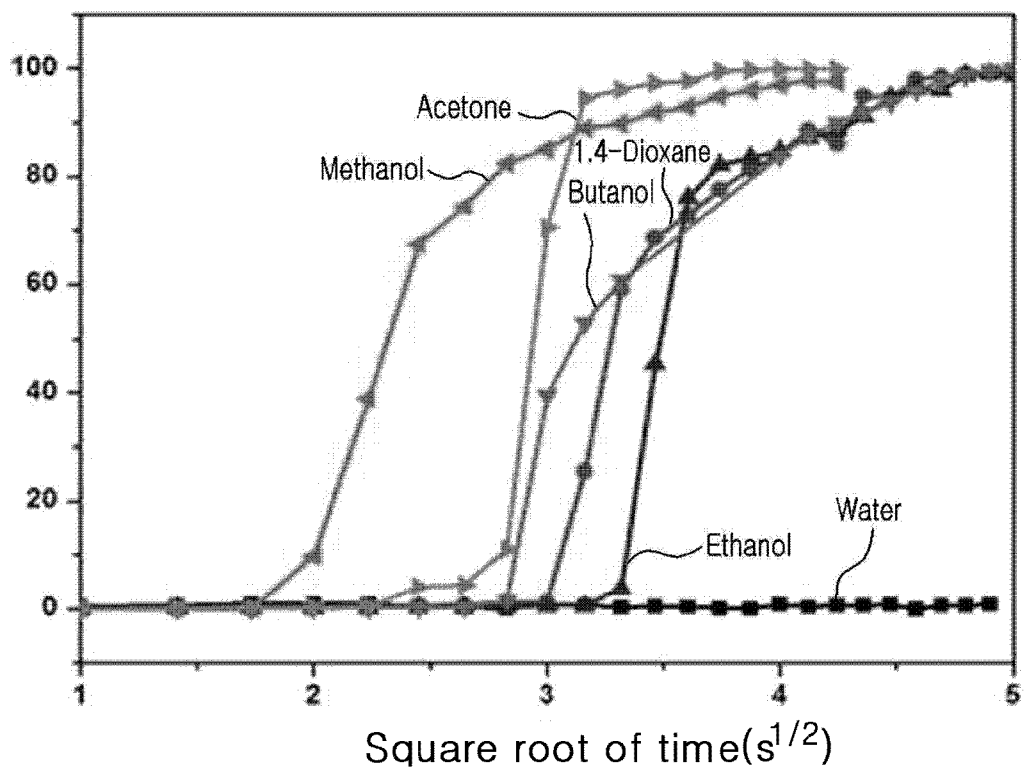
[도38]



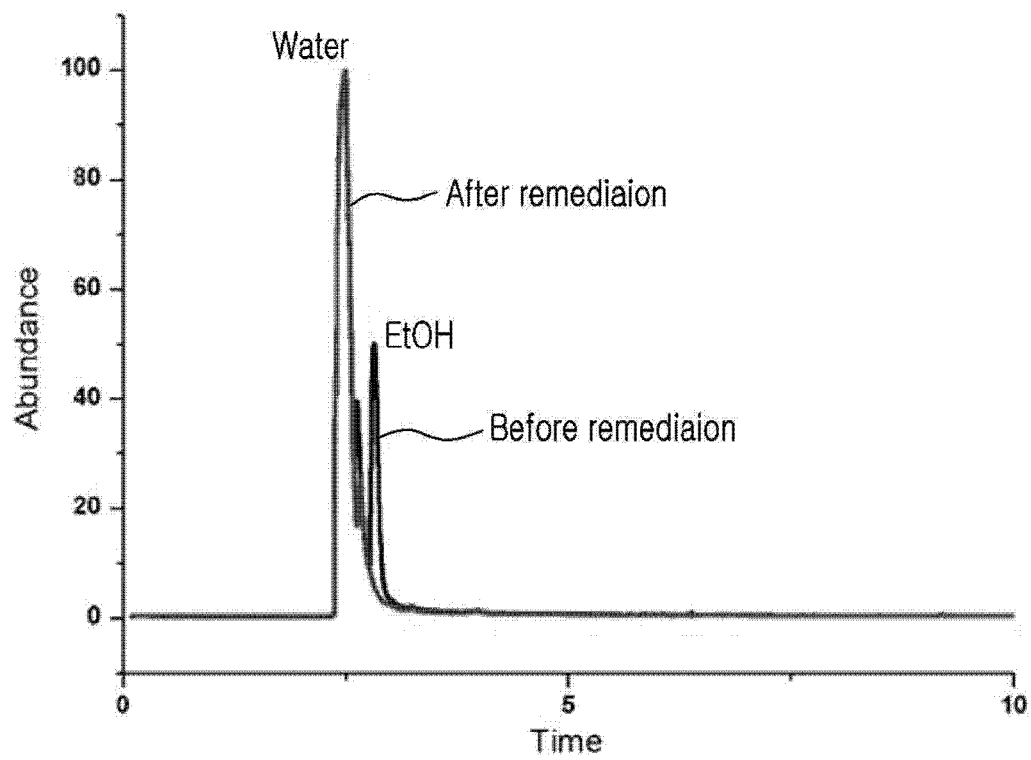
[도39]



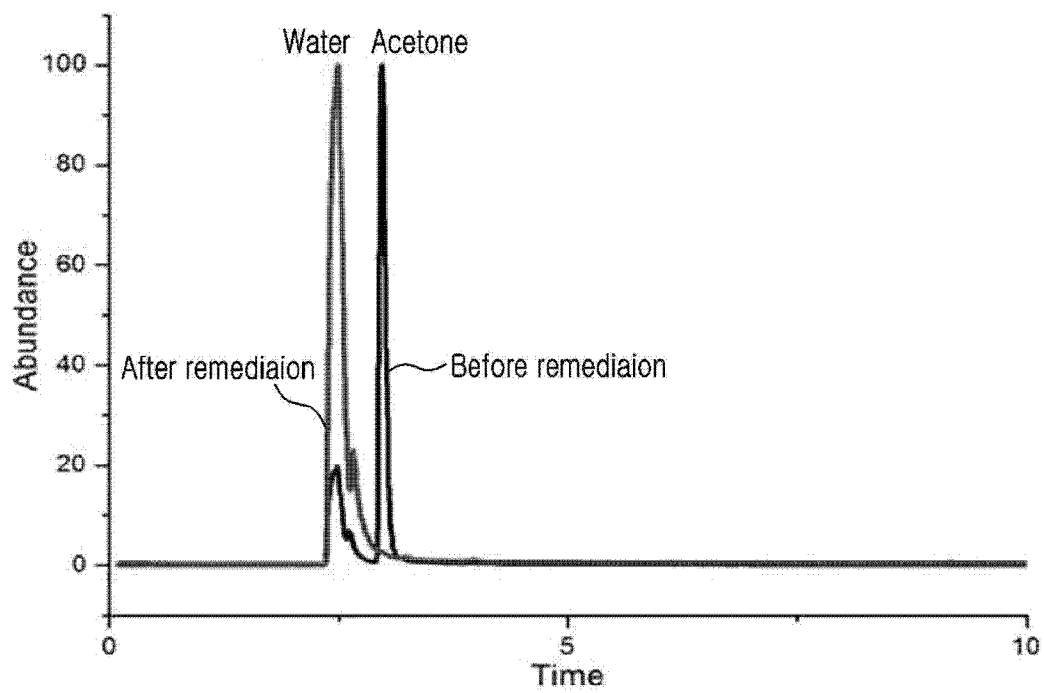
[도40]



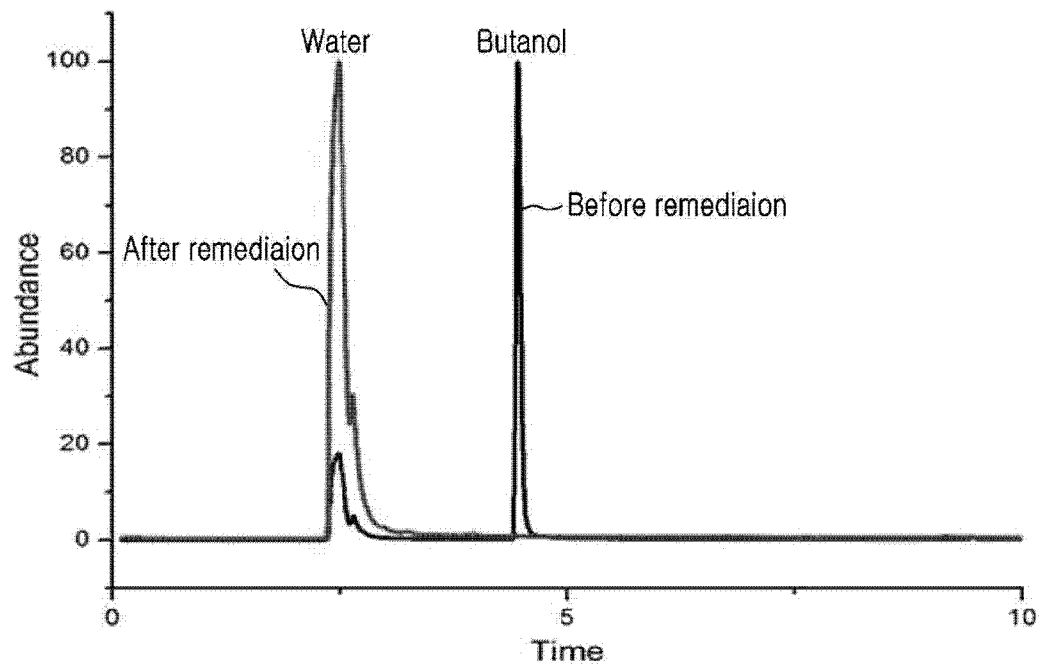
[도41]



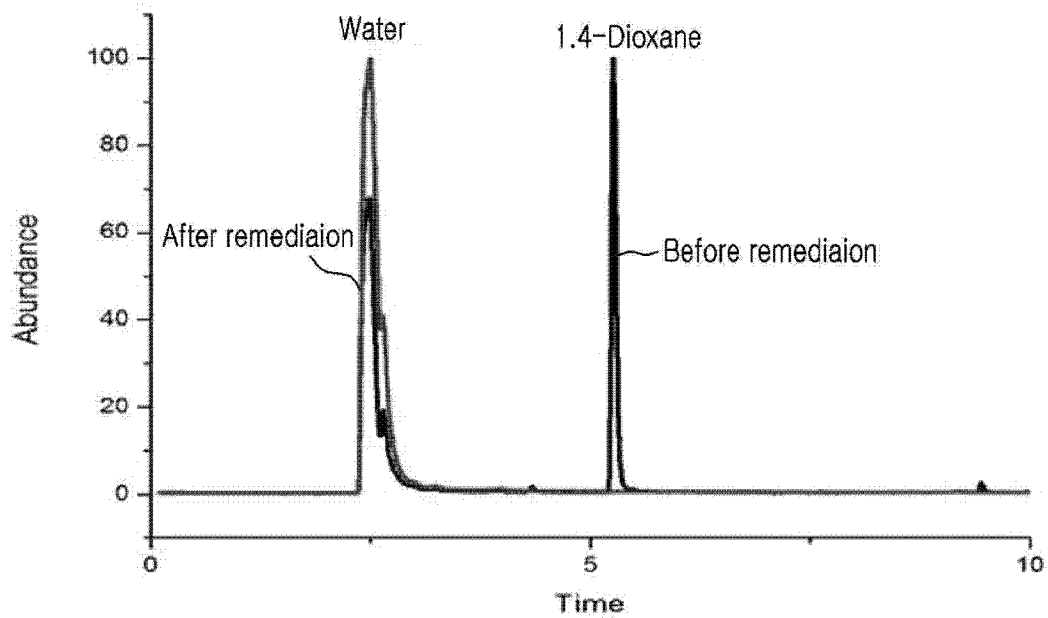
[도42]



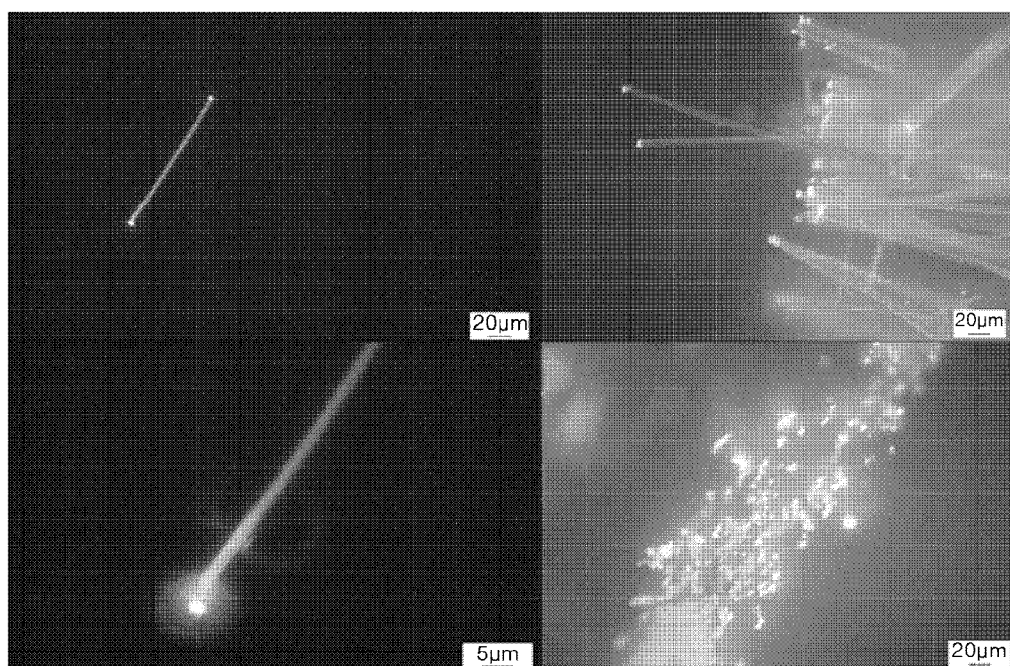
[도43]



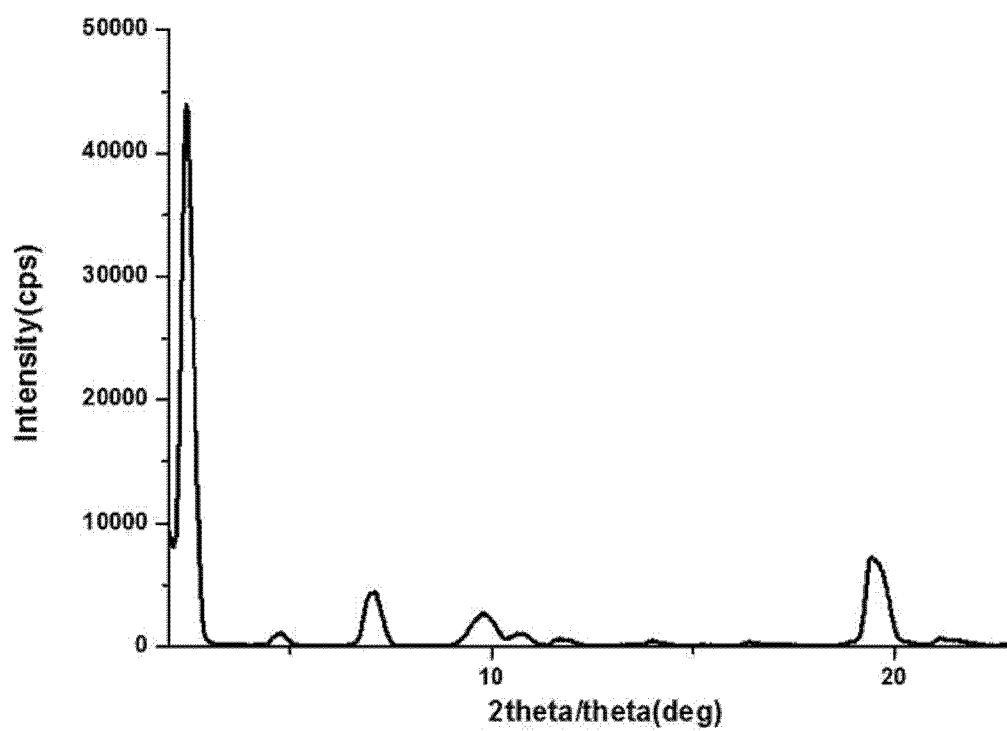
[도44]



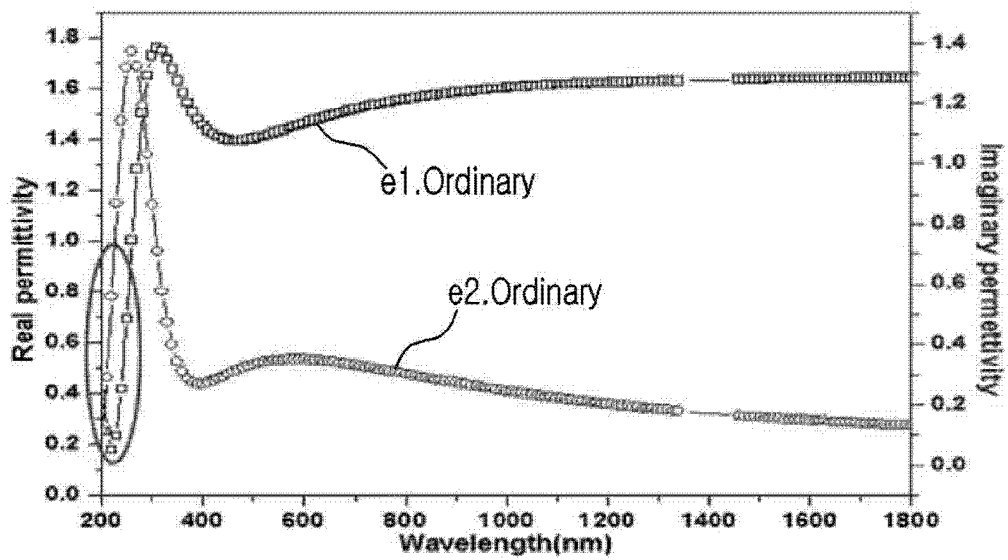
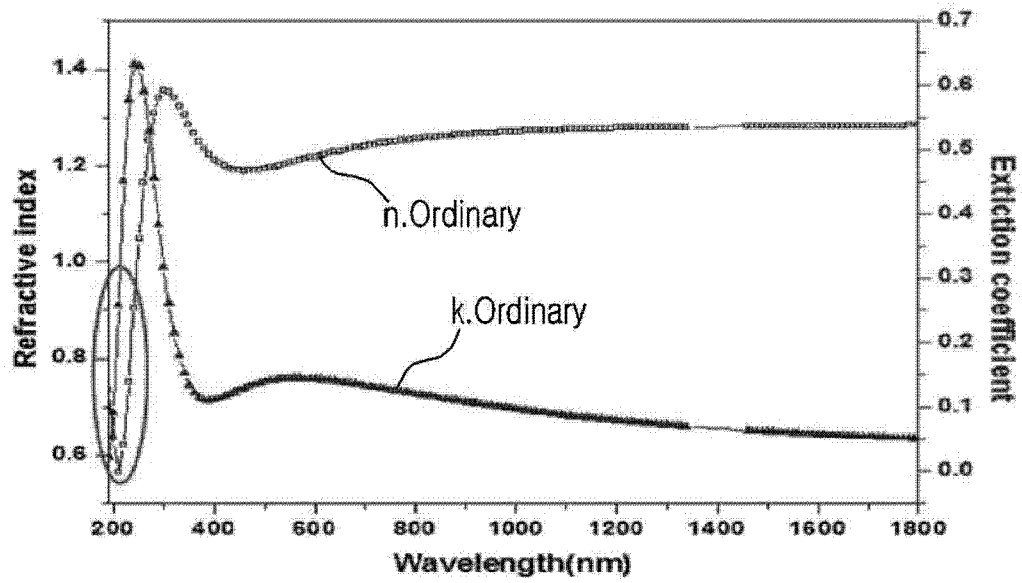
[도45]



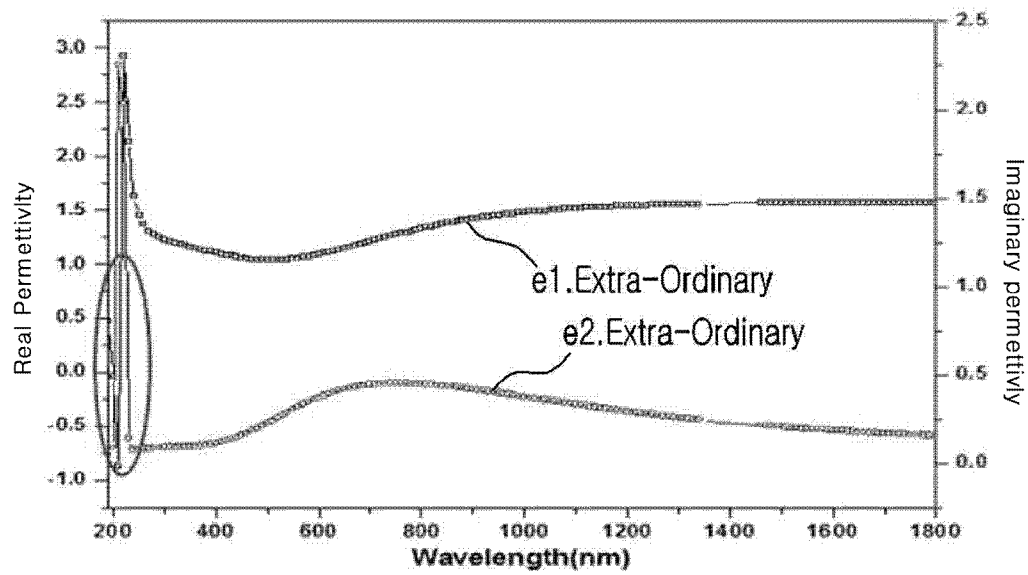
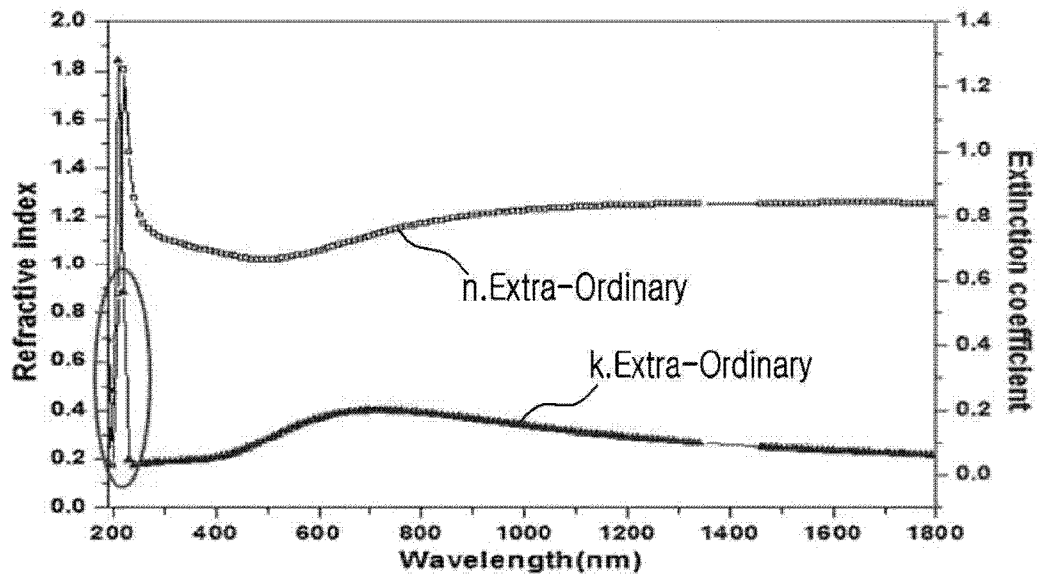
[도46]



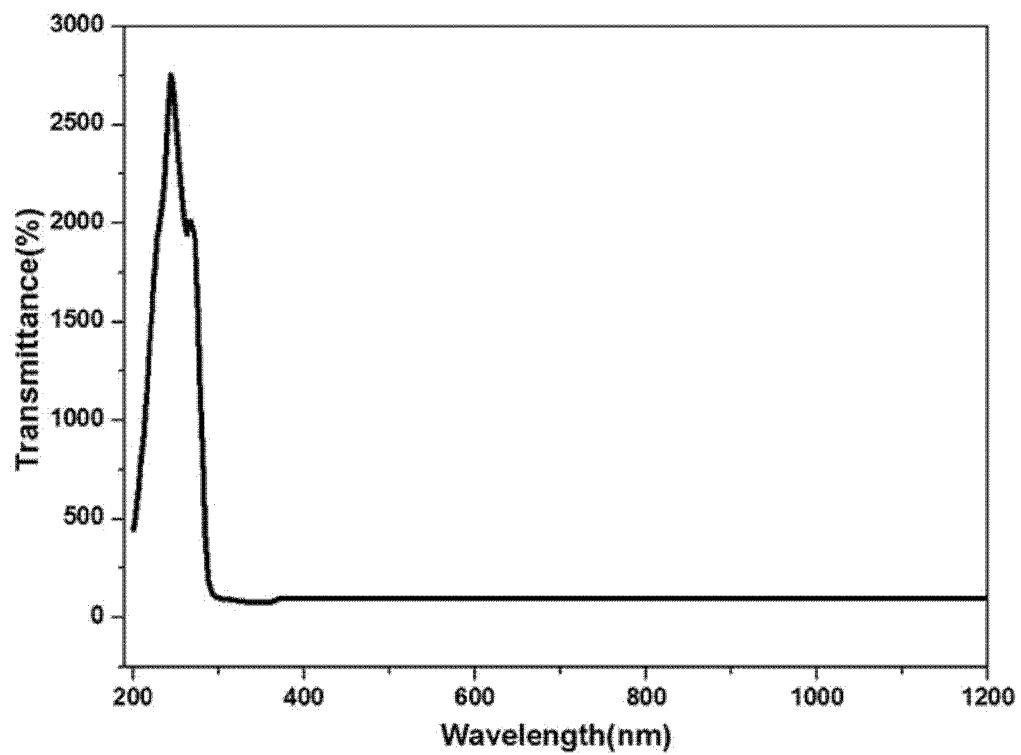
[도47a]



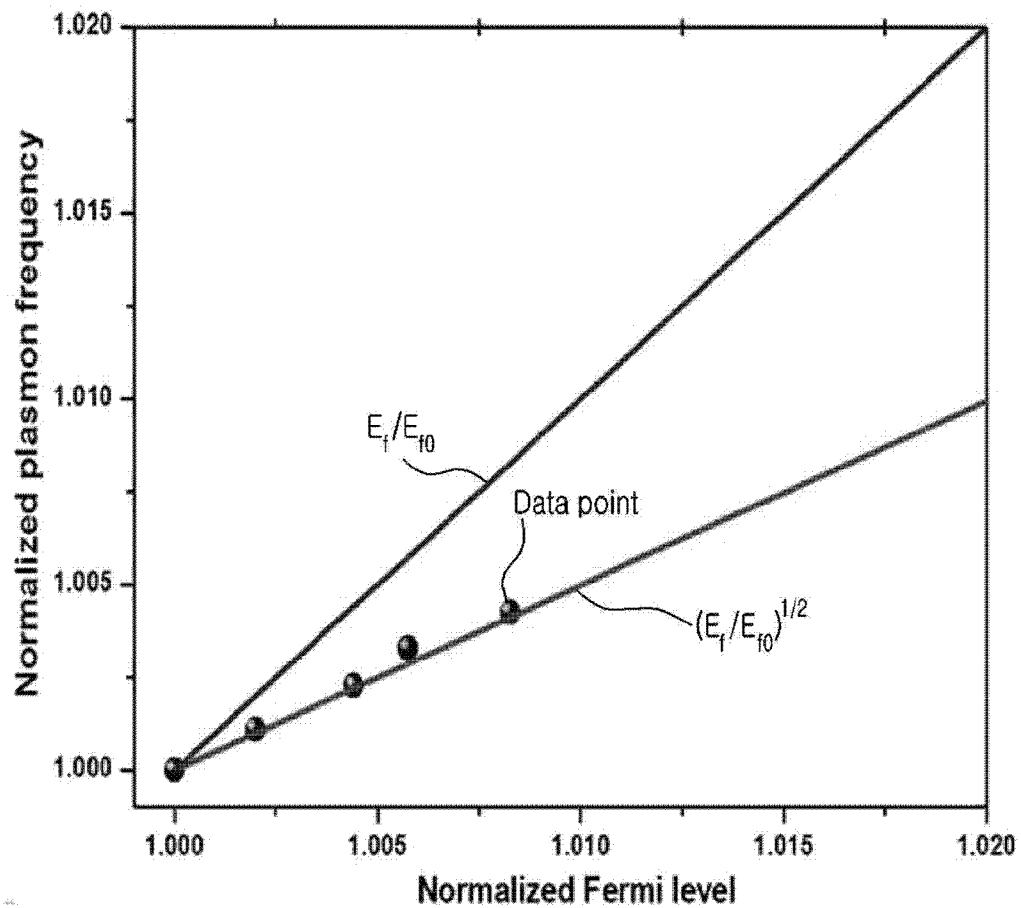
[도47b]



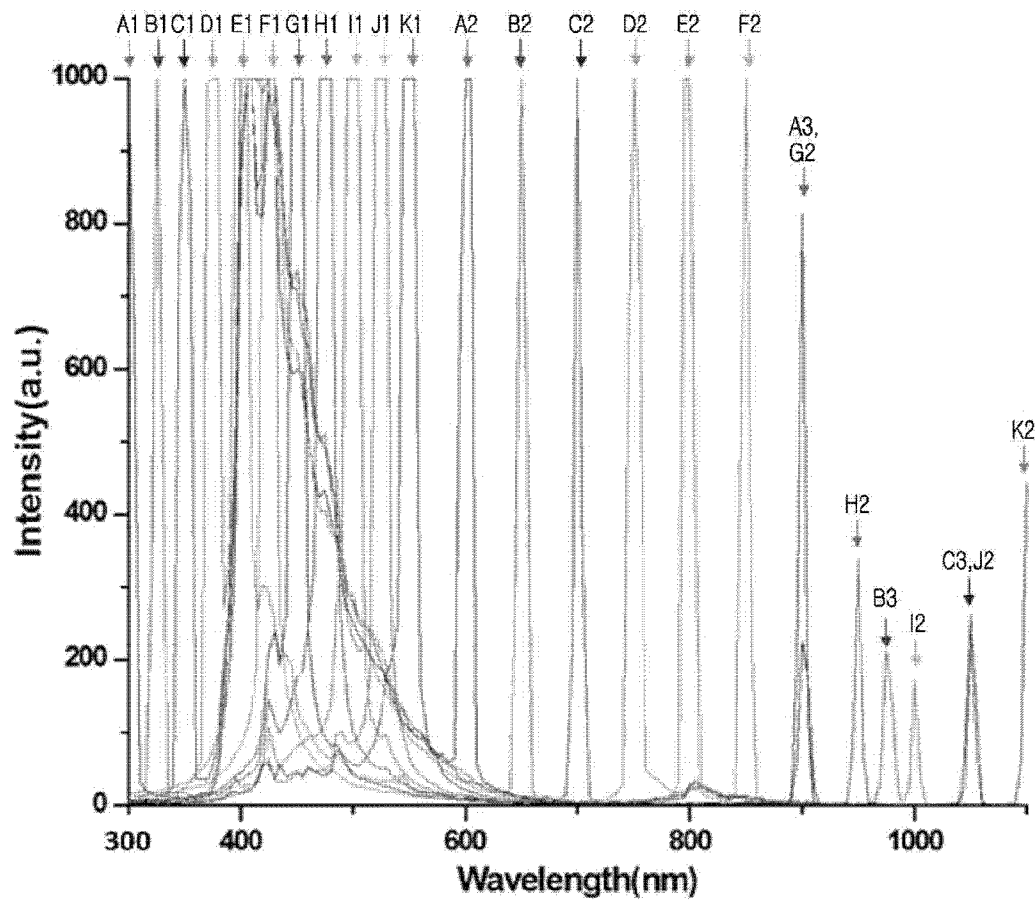
[도48]



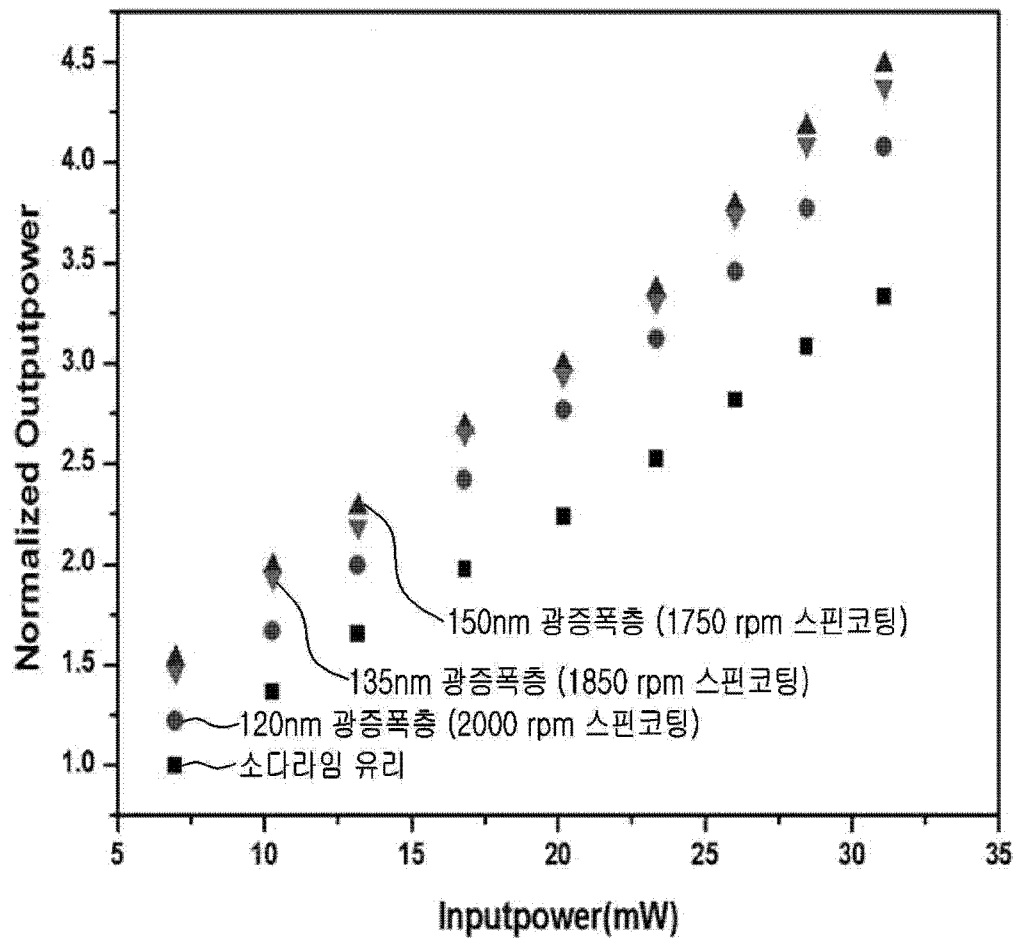
[도49]



[도50]



[도51]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2017/000803

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G02B 5/28(2006.01)i, H01L 51/52(2006.01)i, C07C 15/28(2006.01)i, C07C 15/38(2006.01)i, G02B 1/00(2006.01)i, B01J 20/22(2006.01)i, C07C 43/164(2006.01)i, C07C 43/20(2006.01)i, B01J 20/28(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G02B 5/28; C09D 11/00; B01D 71/64; C08G 61/00; C09K 11/06; B01D 61/36; C07C 15/28; H01L 51/52; C07C 15/38; G02B 1/00; B01J 20/22; C07C 43/164; C07C 43/20; B01J 20/28

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: organic compound, homocyclic aromatic ring, heterocyclic aromatic ring, 3D porous framework, 3D organic framework, self-assembly, separate body, optical layer, light amplification layer, optical device

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2649706 B2 (UBE IND. LTD. et al.) 03 September 1997 See pages 1-3.	1-47
A	WO 2010-006852 A1 (BASF SE. et al.) 21 January 2010 See claims 1-11.	1-47
A	KR 10-2010-0006979 A (LG CHEM, LTD.) 22 January 2010 See claims 1-15.	1-47
A	HIRAYAMA, S. et al., "Systematic Control of the Excited-State Dynamics and Carrier-Transport Properties of Functionalized Benzo[ghi]perylene and Coronene Derivatives", 2014, Chem. Eur. J., vol. 20, no. 29, pages 9081-9093. See page 9081; diagrams 1-3.	1-47
A	RIEGER, R. et al., "Entry to Coronene Chemistry-Making Large Electron Donors and Acceptors", 2008, Chem. Eur. J., vol. 14, no. 21, pages 6322-6325. See page 6322; diagram 1; figure 1.	1-47



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

14 APRIL 2017 (14.04.2017)

Date of mailing of the international search report

14 APRIL 2017 (14.04.2017)

Name and mailing address of the ISA/KR



Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Sconsa-ro, Daejeon 302-701,
Republic of Korea

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2017/000803

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
JP 2649706 B2	03/09/1997	EP 0361377 A2	04/04/1990
		EP 0361377 B1	28/06/1995
		JP 02-090929 A	30/03/1990
		JP 02-099121 A	11/04/1990
		JP 02-099122 A	11/04/1990
		JP 02-099123 A	11/04/1990
		JP 02-099124 A	11/04/1990
		JP 02-099125 A	11/04/1990
		JP 2611820 B2	21/05/1997
		JP 2649707 B2	03/09/1997
		JP 2649708 B2	03/09/1997
		JP 2649709 B2	03/09/1997
		JP 6036858 B2	18/05/1994
		US 4959151 A	25/09/1990
WO 2010-006852 A1	21/01/2010	CN 102137902 A	27/07/2011
		CN 102137902 B	31/12/2014
		EP 2291469 A1	09/03/2011
		JP 2011-526630 A	13/10/2011
		JP 5748660 B2	15/07/2015
		KR 10-2011-0040857 A	20/04/2011
		TW 2010-08972 A	01/03/2010
		TW 1465478 B	21/12/2014
		US 2011-0152491 A1	23/06/2011
		US 2014-0357898 A1	04/12/2014
		US 8841411 B2	23/09/2014
KR 10-2010-0006979 A	22/01/2010	KR 10-1115255 B1	15/02/2012
		US 2011-0114934 A1	19/05/2011
		US 9012040 B2	21/04/2015
		WO 2010-005266 A2	14/01/2010
		WO 2010-005266 A3	29/04/2010

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

G02B 5/28(2006.01)i, H01L 51/52(2006.01)i, C07C 15/28(2006.01)i, C07C 15/38(2006.01)i, G02B 1/00(2006.01)i, B01J 20/22(2006.01)i, C07C 43/164(2006.01)i, C07C 43/20(2006.01)i, B01J 20/28(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

G02B 5/28; C09D 11/00; B01D 71/64; C08G 61/00; C09K 11/06; B01D 61/36; C07C 15/28; H01L 51/52; C07C 15/38; G02B 1/00; B01J 20/22; C07C 43/164; C07C 43/20; B01J 20/28

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 유기 화합물, 호모사이클릭 방향족 고리, 헤테로사이클릭 방향족 고리, 3차원 다공성 구조체, 3차원 유기 구조체, 자기조립, 분리체, 광학층, 광증폭층, 광학소자

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	JP 2649706 B2 (UBE IND. LTD. 등) 1997.09.03 페이지 1-3 참조.	1-47
A	WO 2010-006852 A1 (BASF SE 등) 2010.01.21 청구항 1-11 참조.	1-47
A	KR 10-2010-0006979 A (주식회사 엘지화학) 2010.01.22 청구항 1-15 참조.	1-47
A	HIRAYAMA, S. 등, "Systematic Control of the Excited-State Dynamics and Carrier-Transport Properties of Functionalized Benzo[ghi]perylene and Coronene Derivatives", 2014, Chem. Eur. J., 20권, 29호, 페이지 9081-9093. 페이지 9081; 도식 1-3 참조.	1-47
A	RIEGER, R. 등, "Entry to Coronene Chemistry-Making Large Electron Donors and Acceptors", 2008, Chem. Eur. J., 14권, 21호, 페이지 6322-6325. 페이지 6322; 도식 1; 도면 1 참조.	1-47

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

"A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

"T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

"E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

"X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

"L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

"Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

"O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

"&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

"P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2017년 04월 14일 (14.04.2017)

국제조사보고서 발송일

2017년 04월 14일 (14.04.2017)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

강성철

전화번호 +82-42-481-8405



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 2649706 B2	1997/09/03	EP 0361377 A2 EP 0361377 B1 JP 02-090929 A JP 02-099121 A JP 02-099122 A JP 02-099123 A JP 02-099124 A JP 02-099125 A JP 2611820 B2 JP 2649707 B2 JP 2649708 B2 JP 2649709 B2 JP 6036858 B2 US 4959151 A	1990/04/04 1995/06/28 1990/03/30 1990/04/11 1990/04/11 1990/04/11 1990/04/11 1990/04/11 1997/05/21 1997/09/03 1997/09/03 1997/09/03 1994/05/18 1990/09/25
WO 2010-006852 A1	2010/01/21	CN 102137902 A CN 102137902 B EP 2291469 A1 JP 2011-526630 A JP 5748660 B2 KR 10-2011-0040857 A TW 2010-08972 A TW I465478 B US 2011-0152491 A1 US 2014-0357898 A1 US 8841411 B2	2011/07/27 2014/12/31 2011/03/09 2011/10/13 2015/07/15 2011/04/20 2010/03/01 2014/12/21 2011/06/23 2014/12/04 2014/09/23
KR 10-2010-0006979 A	2010/01/22	KR 10-1115255 B1 US 2011-0114934 A1 US 9012040 B2 WO 2010-005266 A2 WO 2010-005266 A3	2012/02/15 2011/05/19 2015/04/21 2010/01/14 2010/04/29