



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0063141  
(43) 공개일자 2024년05월10일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07C 43/23 (2006.01) C07C 317/22 (2006.01)  
C07C 323/20 (2006.01) C07D 333/76 (2006.01)  
C07D 339/08 (2006.01) C08G 63/64 (2006.01)  
C08G 64/06 (2006.01) C08G 64/08 (2006.01)
- (52) CPC특허분류  
C07C 43/23 (2013.01)  
C07C 317/22 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2024-7011686
- (22) 출원일자(국제) 2022년09월08일  
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2024년04월08일
- (86) 국제출원번호 PCT/EP2022/074976
- (87) 국제공개번호 WO 2023/036868  
국제공개일자 2023년03월16일
- (30) 우선권주장  
21195940.8 2021년09월10일  
유럽특허청(EPO)(EP)  
22169991.1 2022년04월26일  
유럽특허청(EPO)(EP)

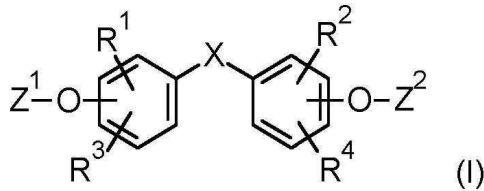
- (71) 출원인  
로이터 케미셰 아파라테바우 이.카.  
독일, 79108 프라이부르크, 엔게서스트라제 4비
- (72) 발명자  
안드루쉬코 바실  
독일, 79108 프라이부르크, 엔게서슈트라제 4비,  
쾨/오 로이터 케미셰 아파라테바우 이.카.
- (74) 대리인  
특허법인한얼  
(뒷면에 계속)

전체 청구항 수 : 총 30 항

(54) 발명의 명칭 (헤트)아릴 치환된 비스페놀 화합물 및 열가소성 수지

(57) 요약

본 발명은 화학식(I)의 화합물에 관한 것이다:



상기 식에서

X는 단일 결합, O, N-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-알킬, N-Ar<sup>1</sup>, CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>, S, S(O) 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되고,

Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>는 독립적으로 수소, -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk'-C(O)OR<sup>x</sup>, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 및 -C(O)-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 중에서 선택되며, 여기에서 R<sup>x</sup>는 수소, 페닐, 벤질 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 독립적으로 환 구성원으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 가지며 임의로 치환된 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 환 구성원으로서 총 5 내지 26개의 원자를 가지며 임의로 치환된 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며,

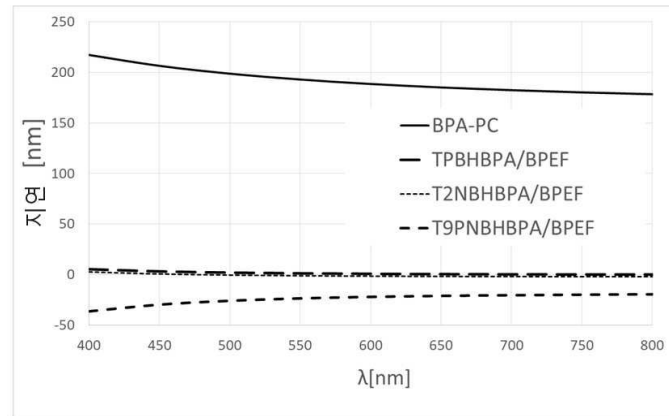
R<sup>5</sup>는 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 및 라디칼 Ar<sup>1</sup>으로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

R<sup>6</sup>는 수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되며;

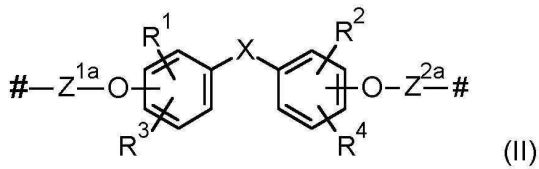
Alk는 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이고, 단, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 둘 모두 수소인 경우, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 둘 모두 페닐인 것은 아니다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



본 발명은 또한 화학식(II)로 나타내는 구조 단위를 포함하는 열가소성 수지를 생성하기 위한 단량체로서 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식(I)의 화합물의 용도, 및 이러한 열가소성 수지에 관한 것이다:



상기 식에서

#는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고;

여기에서 X, Z<sup>1a</sup>, Z<sup>2a</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 본 명세서에 정의된 바와 같다.

본 발명은 또한 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식(II)로 나타내는 구조 단위를 포함하는 열가소성 수지로 만들어진 광학 디바이스에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

*C07C 323/20* (2013.01)

*C07D 333/76* (2013.01)

*C07D 339/08* (2013.01)

*C08G 63/64* (2013.01)

*C08G 64/06* (2013.01)

*C08G 64/081* (2013.01)

(72) 발명자

**코스키 필립**

독일, 79108 프라이부르크, 엔게서슈트라쎄 4비,  
썬/오 로이터 케미쎄 아파라테바우 이.카.

**스톨츠 플로리안**

독일, 79108 프라이부르크, 엔게서슈트라쎄 4비,  
썬/오 로이터 케미쎄 아파라테바우 이.카.

**칸토르 마크**

독일, 79108 프라이부르크, 엔게서슈트라쎄 4비,  
썬/오 로이터 케미쎄 아파라테바우 이.카.

**카토 노리유키**

일본, 도쿄 1008324, 도쿄, 치요다쿠, 5-2 마루노  
우치 2쵸메, 미즈비시 가스 가가쿠 가부시키가이샤  
내

**니시모리 가즈시**

일본, 도쿄 1258601, 도쿄, 가츠시카쿠, 니쥬쿠 6  
쵸메, 1-1, 도쿄 리서치 래버러토리, 미즈비시 가  
스 가가쿠 가부시키가이샤 내

**모테기 아츠시**

일본, 도쿄 1258601, 도쿄, 가츠시카쿠, 니쥬쿠 6  
쵸메, 1-1, 도쿄 리서치 래버러토리, 미즈비시 가  
스 가가쿠 가부시키가이샤 내

**이시하라 켄타로**

일본, 도쿄 1008324, 도쿄, 치요다쿠, 5-2 마루노  
우치 2쵸메, 미즈비시 가스 가가쿠 가부시키가이샤  
내

**이케다 신야**

일본, 니이가타 9503121, 니이가타, 니이가타시,  
기타쿠, 마츠하마쵸, 3500, 니이가타 플랜트, 미즈  
비시 가스 가부시키가이샤 내

**와타나베 타카후미**

일본, 도쿄 1258601, 도쿄, 가츠시카쿠, 니쥬쿠 6  
쵸메, 1-1, 도쿄 리서치 래버러토리, 미즈비시 가  
스 가부시키가이샤 내

**오가타 타츠노부**

일본, 도쿄 1258601, 도쿄, 가츠시카쿠, 니쥬쿠 6  
쵸메, 1-1, 도쿄 리서치 래버러토리, 미즈비시 가  
스 가부시키가이샤 내

**타카마츠 카즈타카**

일본, 도쿄 1258601, 도쿄, 가츠시카쿠, 니쥬쿠 6  
쵸메, 1-1, 도쿄 리서치 래버러토리, 미즈비시 가  
스 가부시키가이샤 내

**하라다 유타로**

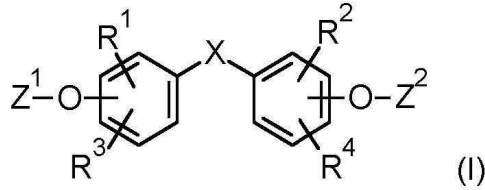
일본, 도쿄 1258601, 도쿄, 가츠시카쿠, 니쥬쿠 6  
쵸메, 1-1, 도쿄 리서치 래버러토리, 미즈비시 가  
스 가부시키가이샤 내

명세서

청구범위

청구항 1

화학식(I)의 화합물:



상기 식에서

X는 단일 결합, O, N-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-알킬, N-Ar<sup>1</sup>, CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>, S, S(O) 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되고,

Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>는 독립적으로 수소, -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk'-C(O)OR<sup>x</sup>, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 및 -C(O)-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 중에서 선택되며, 여기에서 R<sup>x</sup>는 수소, 페닐, 벤질 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 독립적으로 환 구성원(ring member)으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 운반(carry)하며;

R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 독립적으로 수소, 환 구성원으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이며, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 운반하고;

R<sup>5</sup>는 수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되며;

R<sup>6</sup>는 수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

Ar<sup>1</sup>은 환 구성원으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 운반하며;

Ar<sup>2</sup>는 페닐렌, 나프틸렌 및 비페닐일렌으로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

Alk는 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이며;

Alk'는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이고;

R<sup>Ar</sup>은 R, OR, CH<sub>n</sub>R<sub>3-n</sub>, NR<sub>2</sub> 및 CH=CHR'로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 동일한 (헤트)아릴기 상에 1개

초과의 그룹이 존재하는 경우  $R^{Ar}$ 은 동일하거나 상이할 수 있고;

R은 메틸, 에틸, 페닐, 나프틸, 페난트레닐 및 트리페닐레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 페닐, 나프틸, 페난트레닐 및 트리페닐레닐은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 동일하거나 상이한 라디칼 R"에 의해 치환되고;

R'는 수소, 메틸, 페닐 및 나프틸 중에서 선택되며, 여기에서 페닐 및 나프틸은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 동일하거나 상이한 라디칼 R"에 의해 치환되고;

R"는 페닐, OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>, N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 및 C(O)CH<sub>3</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되며;

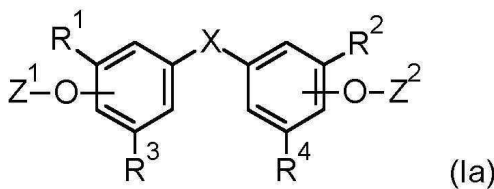
n은 0, 1 또는 2이며;

단, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 둘 모두 수소인 경우, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 둘 모두 페닐인 것은 아니다.

### 청구항 2

제1항에 있어서,

화학식(I)이 화학식(Ia)로 나타내지는 화합물:



### 청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,

X가 단일 결합, O, N-메틸, N-에틸, N-이소프로필, N-페닐, N-나프틸, N-페난트릴, CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), S 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 특히 단일 결합, O, CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), S 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되는 화합물.

### 청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,

Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 수소, 2-하이드록시에틸, 메톡시카르보닐-메틸, 하이드록시메틸-페닐-메틸, 하이드록시메틸-나프틸-메틸, 하이드록시메틸-비페닐릴-메틸, 메톡시카르보닐-페닐-메틸 및 메톡시카르보닐-나프틸-메틸 중에서, 특히 수소, 2-하이드록시에틸, 메톡시카르보닐-메틸, (4-(하이드록시메틸)페닐)메틸, (3-(하이드록시메틸)페닐)메틸, (4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸, (5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸, (6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸, 4'-(하이드록시메틸)-1,1'-비페닐릴-4-메틸, (4-(메톡시카르보닐)페닐)메틸, (3-(메톡시카르보닐)페닐)메틸, (4-(메톡시카르보닐)-1-나프틸)메틸 및 (6-(메톡시카르보닐)-2-나프틸)메틸 중에서 선택되는 화합물.

### 청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>가 독립적으로 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 비페닐릴, 플루오레닐, 11H-벤조[a]플루오레닐, 11H-벤조[b]플루오레닐, 7H-벤조[c]플루오레닐, 페난트레닐, 벤조[c]페난트레닐, 피레닐, 크리세닐, 피세닐, 트리페닐레닐, 벤조[b]푸라닐, 디벤조[b,d]푸라닐, 나프토[1,2-b]푸라닐, 나프토[2,3-b]푸라닐, 나프토[2,1-b]푸라닐, 벤조[b]나프토[1,2-d]푸라닐, 벤조[b]나프토[2,3-d]푸라닐, 벤조[b]나프토[2,1-d]푸라닐, 벤조[1,2-b:4,3-b']디푸라닐, 벤조[1,2-b:6,5-b']디푸라닐, 벤조[1,2-b:5,4-b']디푸라닐, 벤조[1,2-b:4,5-b']디푸라닐, 트리벤조[b,d,f]옥세피닐, 2H-나프토[1,8-d,e][1,3]디옥시닐, 디나프토[2,3-b:2',3'-d]푸라닐, 옥산트레닐, 벤조[a]옥산트레닐, 벤조[b]옥산트레닐, 벤조[b]티에닐, 디벤조[b,d]티에닐, 나프토

[1,2-*b*]티에닐, 나프토[2,3-*b*]티에닐, 나프토[2,1-*b*]티에닐, 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티에닐, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티에닐, 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]티에닐, 벤조[1,2-*b*:4,3-*b'*]디티에닐, 벤조[1,2-*b*:6,5-*b'*]디티에닐, 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티에닐, 벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티에닐, 9H-티오잔테닐, 6H-디벤조[*b,d*]티오피라닐, 1,4-벤조디티이닐, 나프토[1,2-*b*][1,4]디티이닐, 나프토[2,3-*b*][1,4]디티이닐, 티안트레닐, 벤조[*a*]티안트레닐, 벤조[*b*]티안트레닐, 디벤조[*a,c*]티안트레닐, 디벤조[*a,h*]티안트레닐, 디벤조[*a,i*]티안트레닐, 디벤조[*a,j*]티안트레닐, 디벤조[*b,i*]티안트레닐, 2H-나프토[1,8-*b,c*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에피닐, 디벤조[*b,f*]티에피닐, 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피라닐, 트리벤조[*b,d,f*]티에피닐, 2,5-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:4,5-*b',c'*]디티에닐, 2,6-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:5,4-*b',c'*]디티에닐, 트리벤조[*a,c,i*]티안트레닐, 벤조[*b*]나프토[1,8-*e,f*][1,4]디티에피닐, 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]티에닐, 5H-페난트로[1,10-*b,c*]티에닐, 7H-페난트로[1,10-*c,b*]티에닐, 디벤조[*d,d'*]벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티에닐 및 디벤조[*d,d'*]벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티에닐로 구성된 그룹 중에서 선택되는 화합물.

**청구항 6**

제5항에 있어서,

$R^1$  및  $R^2$ 가 독립적으로 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 페난트레닐, 피레닐, 트리페닐레닐, 벤조[*b*]푸라닐, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 벤조[*b*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에닐, 및 티안트레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되는 화합물.

**청구항 7**

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서,

$R^1$  및  $R^2$ 가 동일한 의미를 갖는 화합물.

**청구항 8**

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

$R^3$  및  $R^4$ 가 환 원자로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이며, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 운반하는 화합물.

**청구항 9**

제8항에 있어서,

$R^3$  및  $R^4$ 가 독립적으로 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 비페닐릴, 플루오레닐, 11H-벤조[*a*]플루오레닐, 11H-벤조[*b*]플루오레닐, 7H-벤조[*c*]플루오레닐, 페난트레닐, 벤조[*c*]페난트레닐, 피레닐, 크리세닐, 피세닐, 트리페닐레닐, 벤조[*b*]푸라닐, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 나프토[1,2-*b*]푸라닐, 나프토[2,3-*b*]푸라닐, 나프토[2,1-*b*]푸라닐, 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]푸라닐, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸라닐, 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]푸라닐, 벤조[1,2-*b*:4,3-*b'*]디푸라닐, 벤조[1,2-*b*:6,5-*b'*]디푸라닐, 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디푸라닐, 벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디푸라닐, 트리벤조[*b,d,f*]옥세피닐, 2H-나프토[1,8-*d,e*][1,3]디옥시닐, 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]푸라닐, 옥산트레닐, 벤조[*a*]옥산트레닐, 벤조[*b*]옥산트레닐, 벤조[*b*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에닐, 나프토[1,2-*b*]티에닐, 나프토[2,3-*b*]티에닐, 나프토[2,1-*b*]티에닐, 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티에닐, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티에닐, 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]티에닐, 벤조[1,2-*b*:4,3-*b'*]디티에닐, 벤조[1,2-*b*:6,5-*b'*]디티에닐, 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티에닐, 벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티에닐, 9H-티오잔테닐, 6H-디벤조[*b,d*]티오피라닐, 1,4-벤조디티이닐, 나프토[1,2-*b*][1,4]디티이닐, 나프토[2,3-*b*][1,4]디티이닐, 티안트레닐, 벤조[*a*]티안트레닐, 벤조[*b*]티안트레닐, 디벤조[*a,c*]티안트레닐, 디벤조[*a,h*]티안트레닐, 디벤조[*a,i*]티안트레닐, 디벤조[*a,j*]티안트레닐, 디벤조[*b,i*]티안트레닐, 2H-나프토[1,8-*b,c*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에피닐, 디벤조[*b,f*]티에피닐, 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피라닐, 트리벤조[*b,d,f*]티에피닐, 2,5-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:4,5-*b',c'*]디티에닐, 2,6-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:5,4-*b',c'*]디티에닐, 트리벤조[*a,c,i*]티안트레닐, 벤조[*b*]나프토

[1,8-*e, f*] [1,4]디티에피닐, 디나프토[2,3-*b:2', 3'-d*]티에닐, 5H-페난트로[1,10-*b, c*]티에닐, 7H-페난트로[1,10-*c, b*]티에닐, 디벤조[*d, d'*]벤조[1,2-*b:4, 5-b'*]디티에닐, 및 디벤조[*d, d'*]벤조[1,2-*b:5, 4-b'*]디티에닐로 구성된 그룹 중에서 선택되는 화합물.

**청구항 10**

제9항에 있어서,

$R^3$  및  $R^4$ 가 독립적으로 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 페난트레닐, 피레닐, 트리페닐레닐, 벤조[*b*]푸라닐, 디벤조[*b, d*]푸라닐, 벤조[*b*]티에닐, 디벤조[*b, d*]티에닐 및 티안트레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되는 화합물.

**청구항 11**

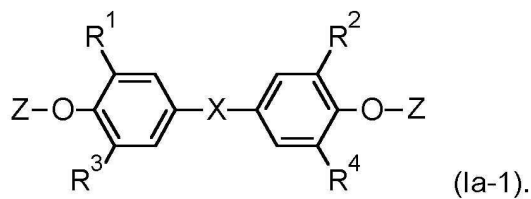
제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서,

$R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 동일한 의미를 갖는 화합물.

**청구항 12**

제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식(I)이 화학식(Ia-1)로 나타내지며, 여기에서 Z는 제1항 또는 제4항에서의  $Z^1$  및  $Z^2$ 로서 정의되는 화합물:



**청구항 13**

제12항에 있어서,

$R^y$ , X 및 Z가 표 A'의 한 행에 정의된 바와 같고, 여기에서  $R^y$ 는 동일한 의미의 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 를 나타내는 화합물:

[표 A']

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
1	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	수소
2	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	수소
3	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	수소
4	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	수소
5	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	수소
6	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	수소
7	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	수소
8	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	수소
9	SO <sub>2</sub>	페닐	수소
10	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	수소
11	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	수소
12	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	수소
13	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	수소
14	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	수소
15	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	수소
16	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	수소
17	S	페닐	수소
18	S	나프트-1-일	수소
19	S	나프트-2-일	수소
20	S	페난트렌-9-일	수소
21	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	수소
22	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	수소
23	S	티안트렌-1-일	수소
24	S	티안트렌-2-일	수소
25	단일 결합	페닐	수소
26	단일 결합	나프트-1-일	수소
27	단일 결합	나프트-2-일	수소
28	단일 결합	페난트렌-9-일	수소
29	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	수소
30	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	수소
31	단일 결합	티안트렌-1-일	수소
32	단일 결합	티안트렌-2-일	수소
33	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	2-하이드록시에틸
34	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
35	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
36	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
37	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸

	X	R' (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
38	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
39	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
40	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
41	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
42	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1,2-디하이드로- 아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
43	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
44	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
45	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
46	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
47	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
48	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
49	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
50	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
51	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
52	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
53	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
54	SO <sub>2</sub>	페닐	2-하이드록시에틸
55	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
56	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
57	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
58	SO <sub>2</sub>	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
59	SO <sub>2</sub>	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
60	SO <sub>2</sub>	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
61	SO <sub>2</sub>	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
62	SO <sub>2</sub>	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
63	SO <sub>2</sub>	1,2-디하이드로- 아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
64	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
65	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
66	SO <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
67	SO <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
68	SO <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
69	SO <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
70	SO <sub>2</sub>	벤조[b]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
71	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
72	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
73	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸

	X	R' (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
74	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
75	S	페닐	2-하이드록시에틸
76	S	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
77	S	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
78	S	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
79	S	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
80	S	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
81	S	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
82	S	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
83	S	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
84	S	1,2-디하이드로- 아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
85	S	디벤조[b,d]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
86	S	디벤조[b,d]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
87	S	벤조[b]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
88	S	벤조[b]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
89	S	벤조[b]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
90	S	벤조[b]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
91	S	벤조[b]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
92	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
93	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
94	S	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
95	S	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
96	단일 결합	페닐	2-하이드록시에틸
97	단일 결합	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
98	단일 결합	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
99	단일 결합	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
100	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
101	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
102	단일 결합	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
103	단일 결합	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
104	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	메톡시카르보닐-메틸
105	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
106	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
107	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
108	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
109	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸
110	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸

	X	R <sup>2</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
111	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
112	SO <sub>2</sub>	페닐	메톡시카르보닐-메틸
113	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
114	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
115	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
116	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
117	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸
118	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸
119	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
120	S	페닐	메톡시카르보닐-메틸
121	S	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
122	S	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
123	S	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
124	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
125	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸
126	S	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸
127	S	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
128	단일 결합	페닐	메톡시카르보닐-메틸
129	단일 결합	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
130	단일 결합	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
131	단일 결합	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
132	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
133	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸
134	단일 결합	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸
135	단일 결합	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
136	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
137	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
138	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
139	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
140	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
141	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
142	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
143	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
144	SO <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
145	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
146	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
147	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
148	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸

	X	R <sup>i</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
149	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
150	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
151	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
152	S	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
153	S	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
154	S	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
155	S	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
156	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
157	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
158	S	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
159	S	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
160	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
161	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
162	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
163	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
164	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
165	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
166	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
167	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
168	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
169	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
170	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
171	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
172	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
173	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
174	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
175	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
176	SO <sub>2</sub>	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
177	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
178	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
179	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
180	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
181	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
182	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
183	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
184	S	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
185	S	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
186	S	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸

	X	R <sup>i</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
187	S	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
188	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
189	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
190	S	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
191	S	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
192	단일 결합	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
193	단일 결합	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
194	단일 결합	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
195	단일 결합	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
196	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
197	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
198	단일 결합	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
199	단일 결합	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
200	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
201	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
202	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
203	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
204	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
205	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
206	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
207	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
208	SO <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
209	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
210	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
211	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
212	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
213	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
214	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
215	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
216	S	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
217	S	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
218	S	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
219	S	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
220	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
221	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
222	S	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
223	S	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
224	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸

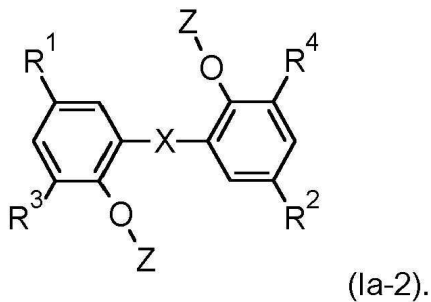
	X	R <sup>i</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
225	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
226	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
227	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
228	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
229	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
230	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
231	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
232	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
233	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
234	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
235	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
236	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
237	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
238	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
239	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
240	SO <sub>2</sub>	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
241	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
242	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
243	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
244	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
245	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
246	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
247	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
248	S	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
249	S	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
250	S	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
251	S	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
252	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
253	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
254	S	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
255	S	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
256	단일 결합	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
257	단일 결합	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
258	단일 결합	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
259	단일 결합	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
260	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
261	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
262	단일 결합	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸

	X	R <sup>i</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
263	단일 결합	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
264	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
265	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
266	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
267	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
268	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
269	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
270	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
271	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
272	SO <sub>2</sub>	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
273	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
274	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
275	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
276	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
277	SO <sub>2</sub>	디벤조[b,d]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
278	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
279	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
280	S	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
281	S	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
282	S	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
283	S	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
284	S	디벤조[b,d]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
285	S	디벤조[b,d]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
286	S	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
287	S	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
288	단일 결합	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
289	단일 결합	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
290	단일 결합	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
291	단일 결합	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
292	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
293	단일 결합	디벤조[b,d]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
294	단일 결합	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
295	단일 결합	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸

청구항 14

제1항 내지 제13항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식(I)이 화학식(Ia-2)로 나타내지며, 여기에서 Z는 제1항 또는 제4항에서의 Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>로서 정의되는 화합물:



청구항 15

제12항에 있어서,

$R^y$ , X 및 Z가 표 B의 한 행에 정의된 바와 같고, 여기에서  $R^y$ 가 동일한 의미의 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 를 나타내는 화합물:

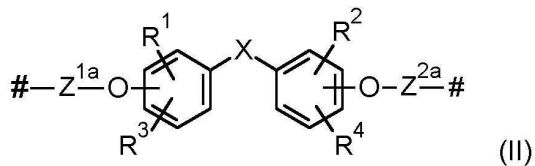
[표 B]

	X	$R^y$ ( $R^1 = R^2 = R^3 = R^4$ )	Z
1	단일 결합	페닐	수소
2	단일 결합	나프트-1-일	수소
3	단일 결합	나프트-2-일	수소
4	단일 결합	페난트렌-9-일	수소
5	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	수소
6	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	수소
7	단일 결합	티안트렌-1-일	수소
8	단일 결합	티안트렌-2-일	수소
9	단일 결합	페닐	2-하이드록시에틸
10	단일 결합	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
11	단일 결합	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
12	단일 결합	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
13	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
14	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
15	단일 결합	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
16	단일 결합	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
17	단일 결합	페닐	메톡시카르보니-메틸
18	단일 결합	나프트-1-일	메톡시카르보니-메틸
19	단일 결합	나프트-2-일	메톡시카르보니-메틸
20	단일 결합	페난트렌-9-일	메톡시카르보니-메틸
21	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	메톡시카르보니-메틸
22	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	메톡시카르보니-메틸
23	단일 결합	티안트렌-1-일	메톡시카르보니-메틸
24	단일 결합	티안트렌-2-일	메톡시카르보니-메틸
25	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
26	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
27	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
28	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
29	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
30	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
31	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
32	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
33	단일 결합	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
34	단일 결합	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
35	단일 결합	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
36	단일 결합	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐) 메틸
37	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐) 메틸

	X	R <sup>x</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
38	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
39	단일 결합	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
40	단일 결합	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
41	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
42	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
43	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
44	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
45	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
46	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
47	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
48	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
49	단일 결합	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
50	단일 결합	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
51	단일 결합	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
52	단일 결합	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
53	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
54	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
55	단일 결합	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
56	단일 결합	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
57	단일 결합	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
58	단일 결합	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
59	단일 결합	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
60	단일 결합	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
61	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
62	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
63	단일 결합	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
64	단일 결합	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸

청구항 16

하기 화학식(II)로 나타내는 구조 단위를 포함하는 열가소성 수지(thermoplastic resin):



상기 식에서

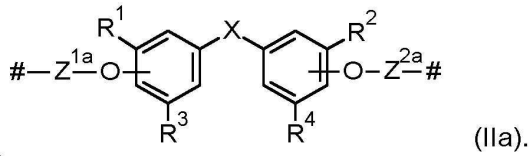
#는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고;

여기에서 Z<sup>1a</sup> 및 Z<sup>2a</sup>는 각각 Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>가 수소인 경우 수소를 단일 결합으로 대체하거나, Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>가 수소가 아닌 경우 Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>의 -OH 또는 -OR<sup>x</sup> 기를 옥소(-O-) 단위로 대체함으로써 화학식(I)의 Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>로부터 유래되며, 여기서 Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, X, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 제1항 내지 제15항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같다.

청구항 17

제16항에 있어서,

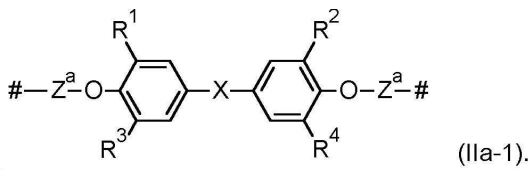
화학식(II)가 화학식(IIa)로 나타내지는 열가소성 수지:



**청구항 18**

제17항에 있어서,

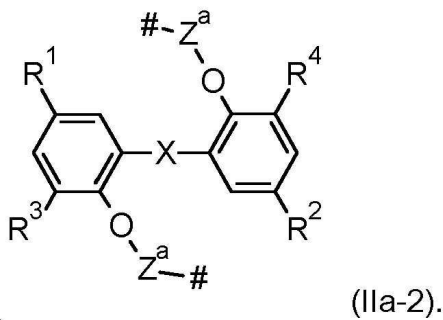
화학식(IIa)가 화학식(IIa-1)로 나타내지며, 여기에서 Z<sup>a</sup>는 제16항에서의 Z<sup>1a</sup> 및 Z<sup>2a</sup>와 같이 정의되는 열가소성 수지:



**청구항 19**

제17항에 있어서,

화학식(IIa)가 화학식(IIa-2)로 나타내지며, 여기에서 Z<sup>a</sup>는 제16항에서의 Z<sup>1a</sup> 및 Z<sup>2a</sup>와 같이 정의되는 열가소성 수지:

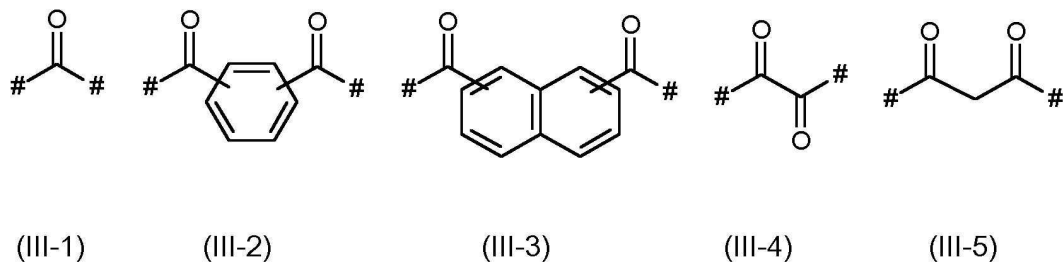


**청구항 20**

제16항 내지 제19항 중 어느 한 항에 있어서,

Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 수소, -Alk-OH 및 -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH 중에서 선택되는 화학식 (II)의 구조 단위가 하기 화학식 (III-1)

내지 (III-5)에 의해 나타내는 구조 중의 하나에 연결되는 열가소성 수지:



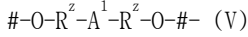
상기 식에서

#는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타낸다.

청구항 21

제16항 내지 제20항 중 어느 한 항에 있어서,

코폴리카르보네이트 수지, 코폴리에스테르카르보네이트 수지 및 코폴리에스테르 수지 중에서 선택되며, 여기에서 열가소성 수지가 화학식(II)로 나타내는 구조 단위에 부가하여 화학식(V)의 구조 단위를 포함하는 열가소성 수지:

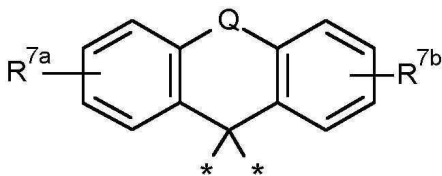


상기 식에서

#는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고;

A<sup>1</sup>은 적어도 2개의 벤젠 환을 보유하는 폴리사이클릭 라디칼이며, 여기에서 벤젠 환은 A에 의해 연결되고/되거나 서로 직접적으로 융합되고/되거나 비-벤젠 카르보사이클에 의해 융합될 수 있고, 여기에서 A<sup>1</sup>은 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 라디칼 R<sup>aa</sup>에 의해 치환되며, 이는 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>6</sub>-사이클로알킬 및 페닐로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

A는 단일 결합, O, C=O, S, SO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>, CH-Ar, CAr<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 및 화학식(A')의 라디칼로 구성된 그룹 중에서 선택되며:



(A')

상기 식에서

Q는 단일 결합, O, NH, C=O, CH<sub>2</sub> 또는 CH=CH를 나타내고;

R<sup>7a</sup>, R<sup>7b</sup>는 서로 독립적으로 수소, 불소, CN, R, OR, CH<sub>k</sub>R<sub>3-k</sub>, NR<sub>2</sub>, C(O)R 및 C(O)NH<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 R은 제1항에 정의된 바와 같고 k는 0, 1, 2 또는 3이며;

\*는 벤젠 환에 대한 연결 지점을 나타내고;

Ar은 환 원자로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헥사아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헥사아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헥사아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 Ar은 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 라디칼 R<sup>ab</sup>에 의해 치환되며, 이는 할로겐, 페닐 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

R<sup>z</sup>는 단일 결합, Alk<sup>1</sup>, O-Alk<sup>2</sup>-, O-Alk<sup>2</sup>-[O-Alk<sup>2</sup>]<sub>p</sub>- 또는 O-Alk<sup>3</sup>-C(O)-이며 여기에서 O는 A<sup>1</sup>에 결합되고, 여기에서

p는 1 내지 10의 정수이며;

Alk<sup>1</sup>은 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이고;

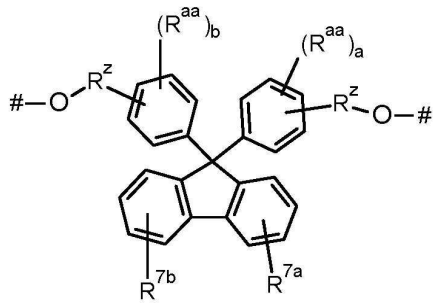
Alk<sup>2</sup>는 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이며;

Alk<sup>3</sup>는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이다.

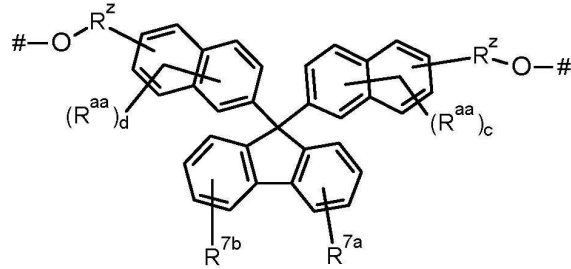
청구항 22

제21항에 있어서,

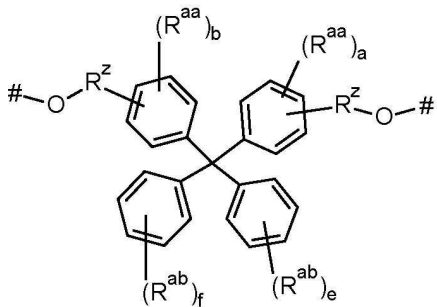
화학식 V의 구조 단위가 하기 화학식 V-1 내지 V-6 중의 하나에 의해 나타내지는 열가소성 수지:



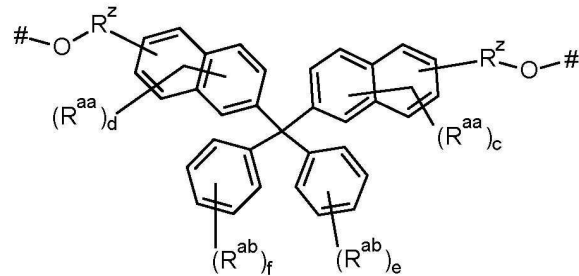
V-1



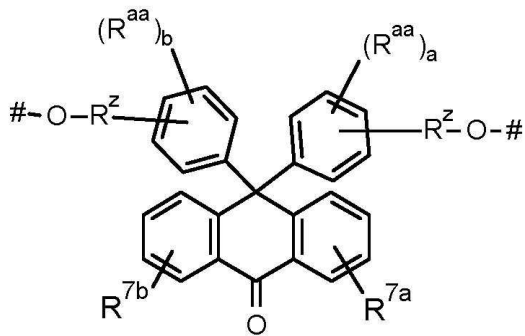
V-2



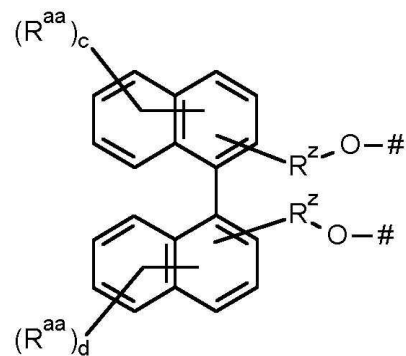
V-3



V-4



V-5



V-6

상기 식에서

a 및 b는 0, 1, 2 또는 3, 특히 0 또는 1이고;

c 및 d는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 특히 0 또는 1이며;

e 및 f는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 특히 0 또는 1이고;

여기에서 R<sup>z</sup>, R<sup>aa</sup>, R<sup>ab</sup>, R<sup>7a</sup> 및 R<sup>7b</sup>는 화학식(V)에 대해 정의된 바와 같다.

청구항 23

제21항 또는 제22항에 있어서,

화학식(II)의 구조 단위의 몰비가 화학식(II) 및 (V)의 구조 단위의 총 몰량을 기준으로 하여 1 내지 70 mol-

%이고, 여기에서 화학식(V)의 구조 단위의 몰비는 화학식(II) 및 (V)의 구조 단위의 총 몰량을 기준으로 하여 30 내지 99 mol-%인 열가소성 수지.

**청구항 24**

제16항 내지 제23항 중 어느 한 항에 있어서,  
1.640 이상의 굴절률을 갖는 열가소성 수지.

**청구항 25**

제16항 내지 제24항 중 어느 한 항에 있어서,  
24 이하의 아베수(Abbe number)를 갖는 열가소성 수지.

**청구항 26**

제16항 내지 제25항 중 어느 한 항에 있어서,  
90 내지 185 °C의 유리 전이 온도(Tg)를 갖는 열가소성 수지.

**청구항 27**

제16항 내지 제26항 중 어느 한 항에 있어서,  
폴리스티렌 표준에 대해 겔 투과 크로마토그래피에 의해 결정된 10000 내지 50000의 중량-평균 분자량을 갖는 열가소성 수지.

**청구항 28**

제16항 내지 제27항 중 어느 한 항에 있어서,  
1000 미만의 분자량(Mw)을 갖는 저분자량 화합물을 포함하며, 여기에서 열가소성 수지 내의 저분자량 화합물의 함량(CLWC)이 열가소성 수지의 총 중량을 기준으로 하여 0.3 중량% 내지 7.0 중량% 범위이고, 여기에서 CLWC가 하기 식으로 나타내지는 열가소성 수지:

$$CLWC(\%) = \frac{\text{GPC 분석에서 1.000 미만의 Mw를 갖는 화합물 피크의 총 면적}}{\text{(GPC 분석에서 화합물의 모든 피크의 총 면적)}} \times 100$$

**청구항 29**

제16항 내지 제28항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같은 열가소성 수지로 만들어진 광학 디바이스(optical device).

**청구항 30**

제16항 내지 제29항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같은 열가소성 수지의 단량체로서의, 제1항 내지 제15항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같은 화학식(I)의 화합물의 용도.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 유익한 광학적 및 기계적 특성을 가지며 광학 디바이스(optical device)를 생산하는데 사용될 수 있는 열가소성 수지(thermoplastic resin), 예컨대 폴리카르보네이트 수지를 제조하기 위한 단량체로서 적합한 (헥트)아릴 치환된 비스페놀 화합물에 관한 것이다.

**배경 기술**

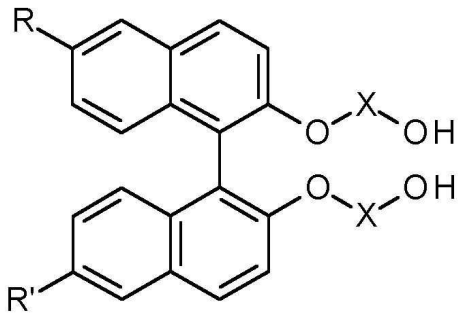
[0002] 광학 디바이스, 예컨대 광학 유리 대신에 광학 수지로 만들어진 광학 렌즈는 사출 성형에 의해 대량으로 생산될

수 있다는 점에서 유리하다. 최근에, 광학 수지, 특히 투명한 폴리카르보네이트 수지는 카메라 렌즈를 생산하는데 빈번하게 사용된다. 이와 관련하여, 더 높은 굴절률을 갖는 수지가 최종 제품의 크기 및 무게를 감소시키므로 매우 바람직하다. 일반적으로, 더 높은 굴절률을 갖는 광학 재료를 사용하는 경우, 더 적은 곡률을 갖는 표면으로 동일한 굴절력의 렌즈 요소가 달성될 수 있고, 이에 따라 동일 표면 상에 생성된 수차(aberration)의 양이 감소될 수 있다. 그 결과, 렌즈의 수를 감소시키고/시키거나, 렌즈의 비정상적 민감도를 감소시키고/시키거나, 렌즈 두께를 감소시킴으로써 무게 감소를 달성할 수 있다.

[0003] 제EP2034337호는 99 내지 51 mol%의 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)플루오렌 유래의 반복 단위 및 1 내지 49 mol%의 비스페놀 A 유래의 반복 단위를 포함하는 코폴리카르보네이트 수지를 기재한다. 수지는 23 내지 26의 낮은 아베수(Abbe number) 및 1.62 내지 1.64의 굴절률을 갖는 광학 렌즈를 제조하는데 적합하다.

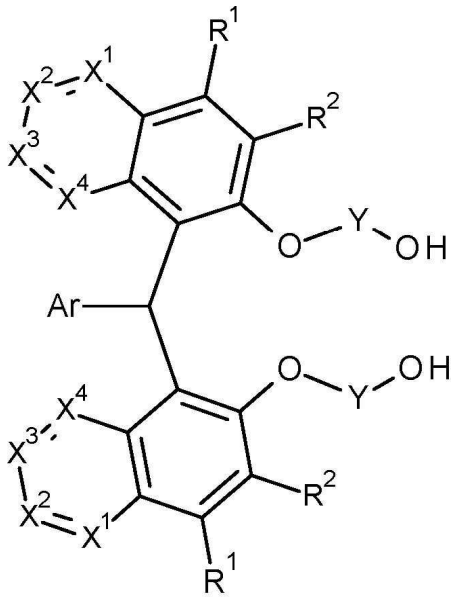
[0004] 제US 9,360,593호는 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1-비나프틸 유래의 반복 단위를 갖는 폴리카르보네이트 수지를 기재한다. 당해 폴리카르보네이트 수지는 높은 굴절률, 낮은 아베수, 높은 정도의 투명도, 낮은 복굴절(birefringence), 및 사출 성형에 적합한 유리 전이 온도의 측면에서 유익한 광학 특성을 갖는 것으로 기술된다. 비스(2-하이드록시에톡시)-1,1-비나프틸과 10,10-비스(4-하이드록시페닐)-안트론 단량체의 코-폴리카르보네이트 및 광학 렌즈를 제조하는데 대한 이들의 용도가 제US 2016/0319069호에 기재되어 있다. 공중합체는 양호한 내습성을 가지며 약 1.662 내지 1.667 범위의 굴절률을 갖는 것으로 보고되어 있다.

[0005] 제WO 2019/043060호는 광학 재료를 생산하기 위한 열가소성 수지를 기재하며, 여기에서 열가소성 수지는 화학식 (2)의 중합된 화합물을 포함한다:



(2)

- [0006] .
- [0007] 상기 식에서
- [0008] X는 예를 들어 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이고;
- [0009] R 및 R'는 동일하거나 상이하며 6 내지 36개의 탄소 원자를 갖는 임의로 치환된 모노 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 총 5 내지 36개의 원자를 갖는 임의로 치환된 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴 중에서 선택된다.
- [0010] 제WO 2019/154727호는 광학 재료를 생산하기 위한 열가소성 수지를 기재하며, 여기에서 열가소성 수지는 화학식 (3)의 중합된 화합물을 포함한다:



[0011]

[0012]

상기 식에서

[0013]

$R^1$ ,  $R^2$ 는 예를 들어 수소이고;

[0014]

Y는 2, 3 또는 4개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기이며,

[0015]

Ar은 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헥트아릴 중에서 선택되고;

[0016]

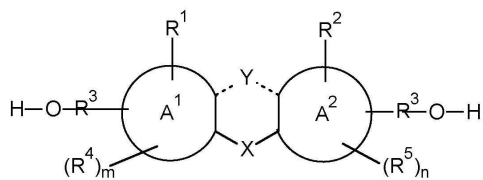
$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ 는 CH,  $C-R^x$  또는 N이며, 단 각각의 환에서 최대 2개의  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ 가 N이고;

[0017]

$R^x$ 는 예를 들어 할로젠, CN 또는  $CH=CH_2$ 이다.

[0018]

제WO 2020/079225호는 광학 재료를 생산하기 위한 열가소성 수지를 기재하며, 여기에서 열가소성 수지는 화학식 (4)의 중합된 화합물을 포함한다:



[0019]

[0020]

상기 식에서

[0021]

$A^1$ ,  $A^2$ 는 모노- 또는 비사이클릭 방향족 라디칼 및 모노- 또는 비사이클릭 헤테로방향족 라디칼 중에서 선택되고,

[0022]

X는 예를 들어 단일 결합, O, NH, 또는 임의로 치환된 탄소 원자를 나타내며,

[0023]

Y는 예를 들어 부재하거나 단일 결합을 나타내거나 X에 대해 언급된 의미를 갖고,

[0024]

$R^1$ ,  $R^2$ 는 수소, 라디칼  $Ar'$  또는 라디칼  $R^3$ 이며;

[0025]

$R^3$ 는 특히 O-알킬렌이고;

[0026]

m, n은 0, 1 또는 2이며;

[0027]

$R^4$ ,  $R^5$ 는 예를 들어 CN 및 라디칼  $R^a$  중에서 선택되고;

[0028]

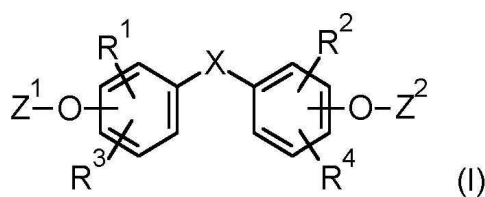
$R^a$ 는  $C\equiv C-R^{11}$  및  $Ar-C\equiv C-R^{11}$ 으로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서  $R^{11}$  및 Ar은 방향족 라디칼이고,

- [0029] 여기에서 A<sup>1</sup> 또는 A<sup>2</sup>에 부착된 적어도 하나의 라디칼은 라디칼 R<sup>a</sup>이다.
- [0030] 문헌[S. R. Turner et al., High Performance Polymers 17(2005) pp. 361-376]은 비스페놀 유래의 비정질 코폴리에스테르, 예컨대 비스(2-하이드록시에톡시)-2,2'-디페닐]-비스페놀 S(= 디-[4-(2-하이드록시에톡시)-2-페닐]-페닐설폰) 및 비스[(2-하이드록시에톡시)-2,2'페닐]-4,4'-비스페놀을 기재한다.
- [0031] 고굴절률을 갖는 열가소성 수지를 생산하기 위한 단량체는 또한 일반적으로 수지의 양의 복굴절 값을 유발한다. 광학 디바이스의 경우, 복굴절은 바람직하지 않은 특성이다. 지금까지, 양의 복굴절은 음의 복굴절을 갖는 공단량체, 예컨대 9,9-비스(4-(2-하이드록시-에톡시)페닐)플루오렌을 사용하여 보완되었다. 그러나, 이들 공단량체는 생성된 중합체의 굴절률을 감소시킨다. 현재, 높은 굴절률 및 낮은 복굴절을 제공하는 임의의 단량체는 거의 공지되어 있지 않다.
- [0032] 광학 수지 분야에서 이루어진 발전에도 불구하고 여전히, 광학 수지, 특히 폴리카르보네이트 수지 및 폴리에스테르 수지를 제조하기 위한 단량체로서 높은 굴절률을 초래하여 광학 디바이스, 특히 렌즈를 제조하는데 유용한 단량체에 대한 지속적인 필요가 존재한다. 이와 별개로, 단량체는 광학 수지의 다른 광학적 특성, 예컨대 낮은 아베수, 높은 정도의 투명도 및 낮은 복굴절을 손상시켜서는 안된다. 더욱이, 단량체는 제조가 용이해야 한다. 부가적으로, 이들 단량체로부터 얻어진 수지, 특히 폴리에스테르 및 폴리카르보네이트는 양호한 내습성 및 내열성을 가져야 하고 사출 성형에 적합한 충분히 높은 유리 전이 온도를 가져야 한다.
- [0033] 선행 기술 문헌
- [0034] 특허 문헌
- [0035] 특허 문헌 1: EP2034337
- [0036] 특허 문헌 2: US 9,360,593
- [0037] 특허 문헌 3: US 2016/0319069
- [0038] 특허 문헌 4: WO 2019/043060
- [0039] 특허 문헌 5: WO 2019/154727
- [0040] 특허 문헌 6: WO 2020/079225
- [0041] 비-특허 문헌
- [0042] 비-특허 문헌 1: 문헌[S. R. Turner et al., High Performance Polymers 17(2005) pp. 361-376]

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

- [0043] 놀랍게도, 본 명세서에 기재된 화학식(I)의 화합물이 높은 투명도 및 높은 굴절률을 갖는 열가소성 수지, 특히 폴리카르보네이트 및 폴리에스테르를 제조하는데 유용한 단량체이며 또한 폴리카르보네이트 및 폴리에스테르에 적절한 유리 전이 온도를 부여함이 발견되었다. 따라서 이러한 열가소성 수지는 높은 투명도 및 높은 굴절률이 요구되는 광학 수지를 생산하는데 적합하다. 본 명세서에 기재된 화학식(I)의 일부 단량체는 높은 굴절률 및 낮거나 심지어 음의 복굴절 둘 모두를 제공한다. 더욱이, 화학식(I)의 화합물은 용이하게 폴리에스테르 및 폴리카르보네이트 내로 혼입될 수 있고 중합 조건 하에 열적으로 안정하다. 따라서, 생성된 폴리에스테르 및 폴리카르보네이트는 낮은 황색도를 가진다. 따라서, 중합 형태 내에 화학식(I)의 단량체를 함유하는 열가소성 수지는 수지로 만들어진 광학 디바이스를 제조하는데 유리하게 사용될 수 있다.
- [0044] 따라서, 본 발명은 화학식(I)의 화합물에 관한 것이다:



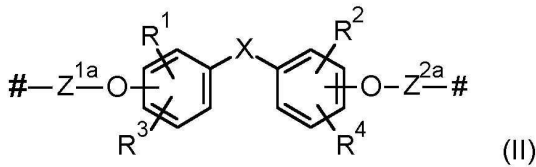
[0045]

- [0046] 상기 식에서
- [0047] X는 단일 결합, O, N-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)-알킬, N-Ar<sup>1</sup>, CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>, S, S(O) 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되고,
- [0048] Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>는 독립적으로 수소, -Alk<sup>1</sup>-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup>, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 및 -C(O)-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 중에서 선택되며, 여기에서 R<sup>x</sup>는 수소, 페닐, 벤질 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;
- [0049] R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 독립적으로 환 구성원(ring member)으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 운반(carry)하며;
- [0050] R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 독립적으로 수소, 환 구성원으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이며, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 운반하고;
- [0051] R<sup>5</sup>는 수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되며;
- [0052] R<sup>6</sup>는 수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;
- [0053] Ar<sup>1</sup>은 환 구성원으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 운반하며;
- [0054] Ar<sup>2</sup>는 페닐렌, 나프틸렌 및 비페닐일렌으로 구성된 그룹 중에서 선택되고;
- [0055] Alk는 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이며;
- [0056] Alk'는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이고;
- [0057] R<sup>Ar</sup>은 R, OR, CH<sub>n</sub>R<sub>3-n</sub>, NR<sub>2</sub> 및 CH=CHR'로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 동일한 (헤트)아릴기 상에 1개 초과인 기가 존재하는 경우 R<sup>Ar</sup>은 동일하거나 상이할 수 있고;
- [0058] R은 메틸, 에틸, 페닐, 나프틸, 페난트레닐 및 트리페닐레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 페닐, 나프틸, 페난트레닐 및 트리페닐레닐은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 동일하거나 상이한 라디칼 R"에 의해 치환되고;
- [0059] R'는 수소, 메틸, 페닐 및 나프틸 중에서 선택되며, 여기에서 페닐 및 나프틸은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 동일하거나 상이한 라디칼 R"에 의해 치환되고;
- [0060] R"는 페닐, OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>, N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 및 C(O)CH<sub>3</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되며;
- [0061] n은 0, 1 또는 2이며;
- [0062] 단, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 둘 모두 수소인 경우, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 둘 모두 페닐인 것은 아니다.
- [0063] 상기 화합물은 열가소성 수지, 특히 본 명세서에 정의된 바와 같은 광학 수지, 특히 폴리카르보네이트 수지의

제조에 특히 유용하다.

[0064] 광학 수지, 특히 폴리카르보네이트 수지 및 폴리에스테르 수지의 제조용 단량체로 사용되는 경우, 화학식(I)의 화합물은 수지에 높은 굴절률을 제공한다. 더욱이, 화학식(I)의 화합물은 수지의 높은 투명도를 제공하며 이들은 수지의 다른 광학 특성 및 기계적 특성을 유의하게 손상시키지 않는다. 특히, 이들 수지는 광학 수지의 다른 요건들, 예컨대 낮은 아베수, 높은 정도의 투명도 및 낮은 복굴절을 충족시킨다. 더욱이, 단량체는 이로부터 생산된 광학 수지에 충분히 높은 유리 전이 온도를 제공한다. 이와 별개로, 화학식(I)의 단량체는 용이하게 제조되고 높은 수율 및 높은 순도로 얻어질 수 있다. 특히, 화학식(I)의 화합물은 결정질 형태로 얻어질 수 있으며, 이는 광학 수지의 제조에 필요한 정도로 효율적인 정제를 가능케 한다. 특히, 화학식(I)의 화합물은 낮은 헤이즈(haze)를 제공하는 순도로 얻어질 수 있으며, 이는 광학 수지의 제조에서의 용도를 위해 특히 중요하다. 색상-부여 라디칼, 예컨대 라디칼 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup> 및 Ar<sup>1</sup>의 일부를 보유하지 않은 화학식(I)의 화합물도 낮은 황색도 지수 Y.I. 및 낮은 APHA 색수(color number)(ASTM E313에 따라 결정됨)를 제공하는 순도로 얻어질 수 있으며, 이는 또한 광학 수지의 제조에서의 용도를 위해 중요할 수 있다.

[0065] 본 발명은 또한 화학식(I)의 화합물의 중합된 단위를 포함하는 열가소성 수지, 즉, 하기 화학식(II)로 나타내는 구조 단위를 포함하는 열가소성 수지에 관한 것이다:

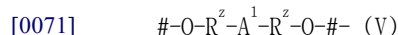


[0066] ...  
 [0067] 상기 식에서

[0068] #는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0069] 여기에서 Z<sup>1a</sup> 및 Z<sup>2a</sup>는 각각 Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>가 수소인 경우 수소를 단일 결합으로 대체하거나, Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>가 수소가 아닌 경우 Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>의 -OH 또는 -OR<sup>x</sup> 기를 옥소(-O-) 단위로 대체함으로써 화학식(I)의 Z<sup>1</sup> 또는 Z<sup>2</sup>로부터 유래되며, 여기에서 Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, X, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 상기 본 명세서에 정의된 바와 같다.

[0070] 본 발명은 추가로 코폴리카르보네이트 수지, 코폴리에스테르카르보네이트 수지 및 코폴리에스테르 수지 중에서 선택된 열가소성 수지에 관한 것이며, 여기에서 열가소성 수지는 화학식(II)의 구조 단위에 부가하여 화학식(V)의 구조 단위도 포함한다:

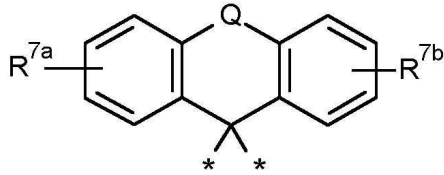


[0072] 상기 식에서

[0073] #는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0074] A<sup>1</sup>은 적어도 2개의 벤젠 환을 보유하는 폴리사이클릭 라디칼이며, 여기에서 벤젠 환은 A에 의해 연결되고/되거나 서로 직접적으로 융합되고/되거나 비-벤젠 카르보사이클에 의해 융합될 수 있고, 여기에서 A<sup>1</sup>은 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 라디칼 R<sup>aa</sup>에 의해 치환되며, 이는 할로젠, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>6</sub>-사이클로알킬 및 페닐로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

[0075] A는 단일 결합, O, C=O, S, SO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>, CH-Ar, CAr<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 및 화학식(A')의 라디칼로 구성된 그룹 중에서 선택되며;



(A')

[0076]

[0077]

[0078]

[0079]

[0080]

[0081]

[0082]

[0083]

[0084]

[0085]

[0086]

[0087]

상기 식에서

Q는 단일 결합, O, NH, C=O, CH<sub>2</sub> 또는 CH=CH를 나타내고;

R<sup>7a</sup>, R<sup>7b</sup>는 서로 독립적으로 수소, 불소, CN, R, OR, CH<sub>k</sub>R<sub>3-k</sub>, NR<sub>2</sub>, C(O)R 및 C(O)NH<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 R은 본 명세서에 정의된 바와 같고 k는 0, 1, 2 또는 3이며;

\*는 벤젠 환에 대한 연결 지점을 나타내고;

Ar은 환 구성원으로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 Ar은 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 라디칼 R<sup>ab</sup>에 의해 치환되며, 이는 할로젠, 페닐 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

R<sup>2</sup>는 단일 결합, Alk<sup>1</sup>, O-Alk<sup>2</sup>, O-Alk<sup>2</sup>-[O-Alk<sup>2</sup>]<sub>p</sub>- 또는 O-Alk<sup>3</sup>-C(O)-이며 여기에서 O는 A<sup>1</sup>에 결합되고, 여기서

p는 1 내지 10의 정수이며;

Alk<sup>1</sup>은 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이고;

Alk<sup>2</sup>는 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이며;

Alk<sup>3</sup>는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이다.

본 발명은 추가로 상기 정의된 바와 같은 열가소성 수지, 특히 폴리에스테르 및 특히 폴리카르보네이트로 만들어진 광학 디바이스에 관한 것이다.

### 과제의 해결 수단

[0088]

X가 단일 결합인 경우 화학식(I)의 화합물은 치환체 -O-Z<sup>1</sup>, -O-Z<sup>2</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>의 유형 및 위치에 따라 2개의 페닐렌 모이어티 사이의 결합을 따라 가능하게 제한된 회전으로 인하여 축 키랄성(axial chirality)을 가질 수 있다. 이 경우에, 따라서, 화학식(I)의 화합물은 이들의 (S)-거울상이성체 및 이들의 (R)-거울상이성체의 형태로 존재할 수 있다. 결과적으로, 화학식(I)의 화합물은 각각 라세미 혼합물 또는 비-라세미 혼합물로서 또는 이들의 순수한 (S)- 및 (R)-거울상이성체 형태로 존재할 수 있다. 본 발명은 X가 단일 결합인 경우 화학식(I)의 화합물의 거울상이성체의 라세미 및 비-라세미 혼합물 둘 모두에 관한 것이며, 또한 이들 거울상이성체가 존재하는 한 이들의 순수한 (S)- 및 (R)-거울상이성체에 관한 것이다.

[0089]

본 발명의 측면에서, 용어 "C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일기"는 대안적으로 "1, 2, 3 또는 4개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기"로도 명명될 수 있으며 1, 2, 3 또는 4개의 탄소 원자를 갖는 2개의, 포화된, 지방족 탄화수소 라디칼을 지칭한다. C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일의 예는 특히 메틸렌기(CH<sub>2</sub>), 선형 알칸디일, 예컨대 1,2-에탄디일(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>), 1,3-프로판디일(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>) 및 1,4-부탄디일(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)이나, 또한 분지형 알칸디일, 예컨대 1-메틸-1,2-에탄디일, 1-메틸-1,2-프로판디일, 2-메틸-1,2-프로판디일, 2-메틸-1,3-프로판디일 및 1,3-부탄디일이다.

[0090]

본 발명의 측면에서, 용어 "모노사이클릭 아릴"은 1가 방향족 모노사이클릭 라디칼, 예컨대 특히 페닐을 지칭한

다.

- [0091] 본 발명의 측면에서, 용어 "모노사이클릭 헤트아릴"은 1가 헤테로방향족 모노사이클릭 라디칼, 즉, 분자의 나머지에 단일 공유 결합에 의해 연결된 헤테로방향족 모노사이클을 지칭하며, 여기에서 환 구성원 원자는 공액  $\pi$ -전자 시스템의 일부이고, 여기에서 헤테로방향족 모노사이클은 5 또는 6개의 환 원자를 가지며, 이는 헤테로사이클릭 환 구성원으로서 1, 2, 3 또는 4개의 질소 원자 또는 1개의 산소 원자 및 0, 1, 2 또는 3개의 질소 원자, 또는 1개의 황 원자 및 0, 1, 2 또는 3개의 질소 원자를 포함하고, 여기에서 나머지 환 원자는 탄소 원자이다. 예로는 푸릴(= 푸라닐), 피롤릴(= 1H-피롤릴), 티에닐(= 티오펜일), 이미다졸릴(= 1H-이미다졸릴), 피라졸릴(= 1H-피라졸릴), 1,2,3-트리아졸릴, 1,2,4-트리아졸릴, 테트라졸릴, 옥사졸릴, 티아졸릴, 이속사졸릴, 이소티아졸릴, 1,3,4-옥사디아졸릴, 1,3,4-티아디아졸릴, 피리딜(= 피리디닐), 피라지닐, 피리다지닐, 피리미디닐 및 트리아지닐을 들 수 있다.
- [0092] 본 발명의 측면에서, 용어 "모노- 또는 폴리사이클릭 아릴"은 본 명세서에 정의된 바와 같은 1가 방향족 모노사이클릭 라디칼 또는 1가 방향족 폴리사이클릭 라디칼, 즉, 분자의 나머지에 단일 공유 결합에 의해 연결된 폴리사이클릭 아렌을 지칭하고, 여기에서 폴리사이클릭 아렌은
- [0093] (i) 방향족 폴리사이클릭 탄화수소, 즉, 완전히 불포화된 폴리사이클릭 탄화수소(여기에서 각각의 탄소 원자는 공액  $\pi$ -전자 시스템의 일부임),
- [0094] (ii) 포화되거나 불포화된 4 내지 10-원 모노- 또는 비사이클릭 탄화수소 환에 융합된 적어도 1개의 페닐 환을 보유하는 폴리사이클릭 탄화수소,
- [0095] (iii) 공유 결합에 의해 서로 연결되거나 서로 직접 융합되고/되거나 포화되거나 불포화된 4 내지 10-원 모노- 또는 비사이클릭 탄화수소 환에 융합된 적어도 2개의 페닐 환을 보유하는 폴리사이클릭 탄화수소이다.
- [0096] 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴은 환 원자로서 6 내지 26개, 종종 6 내지 24개의 탄소 원자, 예를 들어 6, 9, 10, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 22 또는 24개의 탄소 원자, 특히 6 내지 20개의 탄소 원자, 특히 6, 10, 12, 13, 14, 16, 17 또는 18개의 탄소 원자를 가진다. 폴리사이클릭 아릴은 전형적으로 환 원자로서 10 내지 26개의 탄소 원자, 특히 10 내지 20개의 탄소 원자, 특히 10, 12, 13, 14, 16, 17 또는 18개의 탄소 원자를 가진다.
- [0097] 이와 관련하여, 단일 결합을 통해 서로 연결되는 2, 3 또는 4개의 페닐 환을 보유하는 폴리사이클릭 아릴은, 예를 들어, 비페닐릴 및 테르페닐릴을 포함한다. 직접적으로 서로 융합된 2, 3 또는 4개의 페닐 환을 보유하는 폴리사이클릭 아릴은, 예를 들어, 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 피레닐, 트리페닐레닐, 크리세닐 및 벤조[c]페난트레닐을 포함한다. 포화되거나 불포화된 4- 내지 10-원 모노- 또는 비사이클릭 탄화수소 환에 융합된 2, 3 또는 4개의 페닐 환을 보유하는 폴리사이클릭 아릴은, 예를 들어, 9H-플루오렌, 비페닐레닐, 테트라페닐레닐, 아세나프테닐(1,2-디하이드로아세나프틸레닐), 아세나프틸레닐, 9,10-디하이드로안트라센-1-일, 1,2,3,4-테트라하이드로페난트레닐, 5,6,7,8-테트라하이드로페난트레닐, 사이클로펜트[fg]아세나프틸레닐, 페날레닐, 플루오란테닐, 벤조[k]플루오란테닐, 페틸레닐, 9,10-디하이드로-9,10[1',2']-벤제노안트라세닐, 디벤조[a,e][8]아놀레닐, 9,9'-스피로비[9H-플루오렌]일 및 스피로[1H-사이클로부타[de]나프탈렌-1,9'-[9H]플루오렌]일을 포함한다.
- [0098] 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴은 예시적으로 페닐, 나프틸, 9H-플루오렌, 페난트릴, 안트라세닐, 피레닐, 크리세닐, 벤조[c]페난트레닐, 아세나프테닐, 아세나프틸레닐, 2,3-디하이드로-1H-인테닐, 5,6,7,8-테트라하이드로-나프탈레닐, 사이클로펜트[fg]아세나프틸레닐, 2,3-디하이드로페날레닐, 9,10-디하이드로안트라센-1-일, 1,2,3,4-테트라하이드로페난트레닐, 5,6,7,8-테트라하이드로페난트레닐, 플루오란테닐, 벤조[k]플루오란테닐, 비페닐레닐, 트리페닐레닐, 테트라페닐레닐, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 디벤조[a,e][8]아놀레닐, 페틸레닐, 비페닐릴, 테르페닐릴, 나프틸렌페닐, 페난트릴페닐, 안트라세닐페닐, 피레닐페닐, 9H-플루오렌-페닐, 디(나프틸렌)페닐, 나프틸렌비페닐, 트리(페닐)페닐, 테트라(페닐)페닐, 펜타페닐(페닐), 페닐나프틸, 비나프틸, 페난트릴나프틸, 피레닐나프틸, 페닐안트라세닐, 비페닐안트라세닐, 나프탈레닐안트라세닐, 페난트릴안트라세닐, 디벤조[a,e][8]아놀레닐, 9,10-디하이드로-9,10[1',2']벤조안트라세닐, 9,9'-스피로비-9H-플루오렌 및 스피로[1H-사이클로부타[de]나프탈렌-1,9'-[9H]플루오렌]일을 포함한다.
- [0099] 본 발명의 측면에서, 용어 "모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴"은 본 명세서에 정의된 바와 같은 1가 헤테로방향족 모노사이클릭 라디칼 또는 1가 헤테로방향족 폴리사이클릭 라디칼, 즉, 단일 공유 결합에 의해 분자의 나머지에 연결된 폴리사이클릭 헤트아렌을 지칭하며, 여기에서
- [0100] (i) 폴리사이클릭 헤트아렌은 상기 정의된 바와 같은 헤테로방향족 모노사이클 및 적어도 하나, 예를 들어 1,



들 수 있으나 이로 제한되지 않는다.

- [0107] 화학식(I)의 화합물 및 화학식(II)의 구조 단위의 변수(치환체)의 바람직한 실시 형태에 대한 하기 언급은 단독으로 및 바람직하게 상호 조합하여 유효하다.
- [0108] 변수의 바람직한 실시 형태에 관한 하기 언급은 추가로 화학식(I)의 화합물 및 화학식(II)의 구조 단위에 있어서, 및 적용가능한 경우 본 발명에 따른 용도에 있어서 단독으로 및 바람직하게 상호 조합하여 유효하다.
- [0109] 화학식(I)의  $R^3$  및  $R^4$ 의 둘 모두가 수소이면, 라디칼  $R^1$  및  $R^2$ 는 환 원자로서 10 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원 원자인 총 9 내지 26개의 원자를 갖는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 바람직하게 선택되고, 여기에서 폴리사이클릭 헤트아릴의 1, 2, 3 또는 4개의 환 구성원 원자는 질소, 황 및 산소로 구성된 그룹 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이며, 여기에서 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 지닌다.
- [0110] 화학식(I) 및 마찬가지로 화학식(II)에서, 변수  $X$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Z^1$  및  $Z^2$  단독으로 또는 바람직하게 임의의 조합으로 바람직하게 하기 의미를 가진다:
- [0111] 수소,  $-Alk-OH$ ,  $-CH_2-Ar^2-CH_2-OH$ ,  $-Alk'-C(O)OR^x$  및  $-CH_2-Ar^2-C(O)OR^x$  중에서 독립적으로 선택된 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ , 및 이에 따라  $-Alk-O-$ ,  $-CH_2-Ar^2-CH_2-O-$ ,  $-Alk'-C(O)O-$  및  $-CH_2-Ar^2-C(O)O-$  중에서 독립적으로 선택된 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 가 선호되며, 여기에서  $Alk$ ,  $-Alk'$ ,  $Ar^2$  및  $R^x$ 는 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 의미를 가진다.
- [0112] 실시 형태의 바람직한 그룹(1)에서, 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 독립적으로  $-Alk-OH$  및  $-CH_2-Ar^2-CH_2-OH$  중에서 선택되고, 이에 따라 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 독립적으로  $-Alk-O-$  및  $-CH_2-Ar^2-CH_2-O-$  중에서 선택되며, 여기에서  $Alk$ 는 바람직하게 선형  $C_2-C_4$ -알칸디일, 예컨대 1,2-에탄디일( $CH_2-CH_2$ ), 1,3-프로판디일 또는 1,4-부탄디일이고, 특히 1,2-에탄디일이며,  $Ar^2$ 는 바람직하게 1,4-페닐렌, 1,3-페닐렌, 2,6-나프틸렌, 1,4-나프틸렌, 1,5-나프틸렌 및 4,4'-비페닐일렌 중에서 선택된다. 이와 관련하여 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$  또는 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 가 서로 동일한 것이 또한 바람직하다.
- [0113] 이에 따라, 실시 형태의 특히 바람직한 서브그룹(1.1)에서 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 2-하이드록시에틸(즉, 2-(HO)-에틸), 하이드록시메틸-페닐-메틸(즉, HO-메틸-페닐-메틸), 하이드록시메틸-나프틸-메틸 및 하이드록시메틸-비페닐-메틸, 특히 2-하이드록시에틸, 4-(하이드록시메틸)페닐메틸, (3-(하이드록시메틸)페닐)메틸, (4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸, (5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸, (6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸 및 4'-(하이드록시메틸)-1,1'-비페닐-4-메틸, 및 구체적으로 2-하이드록시에틸, 4-(하이드록시메틸)페닐메틸 및 (3-(하이드록시메틸)페닐)메틸 중에서 선택된다. 상응하게, 실시 형태의 이와 같이 특히 바람직한 그룹(1.1)에서 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 2(-O)-에틸, -O-메틸-페닐-메틸 및 -O-메틸-나프틸-메틸, 특히 2(-O)-에틸, (4(-O-메틸)페닐)메틸, (3(-O-메틸)페닐)메틸, (4(-O-메틸)-1-나프틸)메틸, (5(-O-메틸)-1-나프틸)메틸, (6(-O-메틸)-2-나프틸)메틸 및 4'(-O-메틸)-1,1'-비페닐-4-메틸, 및 구체적으로 2(-O)-에틸, (4(-O-메틸)페닐)메틸 및 (3(-O-메틸)페닐)메틸, (4(-O-메틸)-1-나프틸)메틸 중에서 선택된다.
- [0114] 실시 형태의 특별한 서브그룹(1')에서 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 동일한 의미를 갖고, 마찬가지로, 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 동일한 의미를 가지며, 이는 실시 형태의 그룹(1) 및 (1.1)에 정의된 의미 중에서 선택된다.
- [0115] 실시 형태의 다른 그룹(2)에서 화학식(I) 및 (II)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 둘 모두 수소이고 이에 따라 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 둘 모두 단일 결합이다.
- [0116] 실시 형태의 바람직한 그룹(3)에서, 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 독립적으로  $-Alk'-C(O)OR^x$  및  $-CH_2-Ar^2-C(O)OR^x$

중에서 선택되고, 이에 따라 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 독립적으로  $-Alk'-C(O)O-$  및  $-CH_2-Ar^2-C(O)O-$  중에서 선택되며, 여기에서  $Alk'$ 는 바람직하게 선형  $C_1-C_4$ -알칸디일, 예컨대 메틸렌 또는 1,2-에탄디일( $CH_2-CH_2$ ), 및 특히 메틸렌이고,  $Ar^2$ 는 바람직하게 1,4-페닐렌, 1,3-페닐렌, 2,6-나프틸렌, 1,5-나프틸렌 및 1,4-나프틸렌 중에서 선택되며,  $R^x$ 는 바람직하게 수소 또는  $C_1-C_4$ -알킬, 및 특히 메틸이다. 이와 관련하여 변수  $Z^1$  및  $Z^2$  또는 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 가 서로 동일한 것이 또한 바람직하다.

[0117] 이에 따라, 실시 형태의 특히 바람직한 서브그룹(3.1)에서, 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 메톡시카르보닐-메틸 (즉,  $CH_3O-C(O)-메틸$ ), 메톡시-카르보닐-페닐-메틸 (즉,  $CH_3O-C(O)-페닐-메틸$ ) 및 메톡시카르보닐-나프틸-메틸 중에서, 특히 메톡시카르보닐-메틸, (4-(메톡시카르보닐)페닐)메틸, (3-(메톡시카르보닐)페닐)메틸, (4-(메톡시카르보닐)-1-나프틸)메틸, (5-(메톡시카르보닐)-1-나프틸)메틸 및 (6-(메톡시카르보닐)-2-나프틸)메틸 중에서, 및 구체적으로 메톡시카르보닐-메틸, (4-(메톡시카르보닐)페닐)메틸 및 (3-(메톡시카르보닐)페닐)메틸 중에서 선택된다. 상응하게, 실시 형태의 이와 같이 특히 바람직한 그룹(3.1)에서, 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는  $-O-C(O)-메틸$ ,  $-O-C(O)-페닐-메틸$  및  $-O-C(O)-나프틸-메틸$  중에서, 특히  $-O-C(O)-메틸$ , (4-( $-O-C(O)-페닐$ )메틸, (3-( $-O-C(O)-페닐$ )메틸, (4-( $-O-C(O)-$ )-1-나프틸)메틸, (5-( $-O-C(O)-$ )-1-나프틸)메틸 및 (6-( $-O-C(O)-$ )-2-나프틸)메틸 중에서, 및 구체적으로  $-O-C(O)-메틸$ , (4-( $-O-C(O)-페닐$ )메틸 및 (3-( $-O-C(O)-페닐$ )메틸 중에서 선택된다.

[0118] 실시 형태의 특별한 서브그룹(3')에서, 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 동일한 의미를 갖고, 마찬가지로, 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 동일한 의미를 가지며, 이는 실시 형태의 그룹(3) 및 (3.1)에 정의된 의미 중에서 선택된다.

[0119] 실시 형태의 그룹(1.1), (2) 및 (3.1)의 조합인, 실시 형태의 바람직한 그룹(4)에서, 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 수소, 2-하이드록시에틸, 메톡시카르보닐-메틸, 하이드록시메틸-페닐-메틸, 하이드록시메틸-나프틸-메틸, 하이드록시메틸-비페닐릴-메틸, 메톡시카르보닐-페닐-메틸 및 메톡시카르보닐-나프틸-메틸 중에서 선택되고, 특히 수소, 2-하이드록시에틸, 메톡시카르보닐-메틸, (4-(하이드록시메틸)페닐)메틸, (3-(하이드록시메틸)페닐)메틸, (4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸, (5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸, (6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸, 4'-(하이드록시메틸)-1,1'-비페닐릴-4-메틸, (4-(메톡시카르보닐)페닐)메틸, (3-(메톡시카르보닐)페닐)메틸, (4-(메톡시카르보닐)-1-나프틸)메틸, (5-(메톡시카르보닐)-1-나프틸)메틸 및 (6-(메톡시카르보닐)-2-나프틸)메틸 중에서 선택되며, 특히 수소, 2-하이드록시에틸, 메톡시카르보닐-메틸, (4-(하이드록시메틸)페닐)메틸, (3-(하이드록시메틸)페닐)메틸, (4-(메톡시카르보닐)페닐)메틸 및 (3-(메톡시카르보닐)페닐)메틸 중에서 선택되고, 구체적으로 수소, 2-하이드록시에틸, (4-(하이드록시메틸)페닐)메틸 및 (3-(하이드록시메틸)페닐)메틸 중에서 선택된다. 상응하게, 실시 형태의 이와 같이 바람직한 그룹(4)에서, 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 단일 결합, 2(-O)-에틸,  $-O-C(O)-메틸$ ,  $-O-메틸-페닐-메틸$ ,  $-O-메틸-나프틸-메틸$ ,  $-O-C(O)-페닐-메틸$  및  $-O-C(O)-나프틸-메틸$  중에서 선택되고, 특히 단일 결합, 2(-O)-에틸,  $-O-C(O)-메틸$ , (4(-O-메틸)페닐)메틸, (3(-O-메틸)페닐)메틸, (4(-O-메틸)-1-나프틸)메틸, (5(-O-메틸)-1-나프틸)메틸, (6(-O-메틸)-2-나프틸)메틸, (4(-O-C(O)-페닐)메틸, (3(-O-C(O)-페닐)메틸, (4(-O-C(O)-)-1-나프틸)메틸, (5(-O-C(O)-)-1-나프틸)메틸 및 (6-(메톡시카르보닐)-2-나프틸)메틸 중에서 선택되며, 특히 단일 결합, 2(-O)-에틸,  $-O-C(O)-메틸$ , (4(-O-메틸)페닐)메틸, (3(-O-메틸)페닐)메틸, 4(-O-C(O)-페닐)메틸 및 (3(-O-C(O)-페닐)메틸 중에서 선택되고, 구체적으로 단일 결합, 2(-O)-에틸, (4(-O-메틸)페닐)메틸 및 (3(-O-메틸)페닐)메틸 중에서 선택된다.

[0120] 실시 형태의 특별한 서브그룹(4')에서, 화학식(I)의 변수  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 동일한 의미를 갖고, 마찬가지로, 화학식(II)의 변수  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 는 동일한 의미를 가지며, 이는 실시 형태의 그룹(4)에 정의된 의미 중에서 선택된다.

[0121] 변수 X는 바람직하게 단일 결합, O, N-메틸, N-에틸, N-*n*-프로필, N-이소프로필, N-*sec*-부틸, N-이소-부틸, N-*tert*-부틸, N-Ar<sup>1</sup>, CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), C(CH<sub>3</sub>)(CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), S, SO 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 N-Ar<sup>1</sup> 중의 Ar<sup>1</sup>은 본 명세서에 정의된 바와 같으며, 여기에서 Ar<sup>1</sup>은 특히 페닐, 나프틸, 페난트릴, 비페닐릴, 플루오레닐, 피레닐, 크리세닐, 벤조[b]푸라닐, 디벤조[b,d]푸라닐, 나프토[1,2-*b*]푸라닐, 나프토[2,3-*b*]푸

라닐, 나프토[2,1-*b*]푸라닐, 옥산트레닐, 벤조[*b*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에닐, 나프토[1,2-*b*]티에닐, 나프토[2,3-*b*]티에닐, 나프토[2,1-*b*]티에닐 및 티안트레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 특히 페닐, 나프틸, 페난트릴, 비페닐릴, 플루오레닐, 벤조[*b*]푸라닐, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 벤조[*b*]티에닐 및 디벤조[*b,d*]티에닐로 구성된 그룹 중에서 선택된다.

[0122] 특히, 변수 *X*는 단일 결합, O, N-메틸, N-에틸, N-*n*-프로필, N-이소프로필, N-*tert*-부틸, N-Ar<sup>1</sup>, CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), C(CH<sub>3</sub>)(CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), S 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 Ar<sup>1</sup>은 페닐, 나프틸, 예컨대 나프트-1-일 또는 나프트-2-일, 페난트릴, 예컨대 페난트렌-1-일, 페난트렌-2-일, 페난트렌-3-일, 페난트렌-4-일 또는 페난트렌-9-일, 비페닐릴, 예컨대 비페닐-2-일, 비페닐-3-일 또는 비페닐-4-일, 플루오레닐, 예컨대 플루오렌-1-일, 플루오렌-2-일, 플루오렌-3-일 또는 플루오렌-4-일, 벤조[*b*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]푸란-2-일, 벤조[*b*]푸란-3-일, 벤조[*b*]푸란-4-일, 벤조[*b*]푸란-5-일, 벤조[*b*]푸란-6-일 또는 벤조[*b*]푸란-7-일, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]푸란-1-일, 디벤조[*b,d*]푸란-2-일, 디벤조[*b,d*]푸란-3-일 또는 디벤조[*b,d*]푸란-4-일, 벤조[*b*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]티엔-2-일, 벤조[*b*]티엔-3-일, 벤조[*b*]티엔-4-일, 벤조[*b*]티엔-5-일, 벤조[*b*]티엔-6-일 또는 벤조[*b*]티엔-7-일, 및 디벤조[*b,d*]티에닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]티엔-1-일, 디벤조[*b,d*]티엔-2-일, 디벤조[*b,d*]티엔-3-일 또는 디벤조[*b,d*]티엔-4-일로 구성된 그룹 중에서 선택된다.

[0123] 실시 형태의 바람직한 그룹(5)에서, 변수 *X*는 단일 결합, O, N-페닐, N-나프틸, N-페난트릴, CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), S, S(O), 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서, 특히 단일 결합, O, N-페닐, N-나프트-1-일, N-나프트-2-일, N-페난트렌-9-일, CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, S, S(O) 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서, 특히 단일 결합, O, CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, S, S(O) 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 및 구체적으로 단일 결합, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, S 및 SO<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택된다.

[0124] 실시 형태의 특별한 서브그룹(5')에서, 변수 *X*는 CH<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 또는 CH(CH<sub>3</sub>)이고, 구체적으로 C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>이다. 실시 형태의 다른 특별한 서브그룹(5'')에서, 변수 *X*는 S 또는 SO<sub>2</sub>이다. 실시 형태의 또 다른 특별한 서브그룹(5''')에서, 변수 *X*는 단일 결합이다.

[0125] 바람직하게, 변수 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 독립적으로 환 원자로서 6 내지 18개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 9 내지 26개의 원자, 특히 9 내지 18개의 원자를 갖는 폴리사이클릭 헤트아릴의 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1 또는 2개는 산소 또는 황 원자인 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1 또는 2개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 운반하며, 여기에서 R<sup>Ar</sup>은 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미(실시 형태의 그룹 6) 중의 하나를 가진다. 더욱 바람직하게, 적어도 하나의 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>, 특히 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup> 둘 모두는 환 구성원 원자로서 10 내지 18개의 탄소 원자를 갖는 폴리사이클릭 아릴, 및 총 9 내지 18개의 환 구성원 원자를 갖는 폴리사이클릭 헤트아릴 중에서 선택된다.

[0126] 실시 형태의 더욱 바람직한 그룹(6.1)에 따라, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 독립적으로 페닐, 나프틸, 예컨대 나프트-1-일 또는 나프트-2-일, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 예컨대 1,2-디하이드로아세나프틸렌-3-일 또는 1,2-디하이드로아세나프틸렌-5-일, 비페닐릴, 예컨대 비페닐-4-일, 비페닐-3-일 또는 비페닐-2-일, 플루오레닐, 예컨대 플루오렌-1-일, 플루오렌-2-일, 플루오렌-3-일 또는 플루오렌-4-일, 11H-벤조[*a*]플루오레닐, 예컨대 11H-벤조[*a*]플루오렌-7-일, 11H-벤조[*b*]플루오레닐, 예컨대 11H-벤조[*b*]플루오렌-1-일, 7H-벤조[*c*]플루오레닐, 예컨대 7H-벤조[*c*]플루오렌-5-일 또는 7H-벤조[*c*]플루오렌-10-일, 페난트레닐, 예컨대 페난트렌-1-일, 페난트렌-2-일, 페난트렌-3-일, 페난트렌-4-일 또는 페난트렌-9-일, 벤조[*c*]페난트레닐, 예컨대 벤조[*c*]페난트렌-1-일, 벤조[*c*]페난트렌-2-일, 벤조[*c*]페난트렌-3-일, 벤조[*c*]페난트렌-4-일, 벤조[*c*]페난트렌-5-일 또는 벤조[*c*]페난트렌-6-일, 피레닐, 예컨대 피렌-1-일, 피렌-2-일 또는 피렌-4-일, 크리스닐, 예컨대 크리스-1-일, 크리스-2-일, 크리스-3-일, 크리스-4-일, 크리스-5-일 또는 크리스-6-일, 피세닐, 예컨대 피센-3-일, 트리페닐레닐, 예컨대 트리페닐렌-1-일 또는 트리페닐렌-2-일, 벤조[*b*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]푸란-2-일, 벤조[*b*]푸란-3-일, 벤조[*b*]푸란-4-일, 벤조[*b*]푸란-5-일, 벤조[*b*]푸란-6-일 또는 벤조[*b*]푸란-7-일, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]푸란-1-일, 디벤조[*b,d*]푸란-2-일, 디벤조[*b,d*]푸란-3-일 또는 디벤조[*b,d*]푸란-4-일, 나프토[1,2-*b*]푸라닐, 예컨대 나프토[1,2-*b*]푸란-5-일, 나프토[2,3-*b*]푸라닐, 예컨대 나프토[2,3-*b*]푸란-3-일, 나프토[2,3-*b*]푸란

-4-일 또는 나프토[2,3-*b*]푸란-9-일, 나프토[2,1-*b*]푸라닐, 예컨대 나프토[2,1-*b*]푸란-2-일 또는 나프토[2,1-*b*]푸란-5-일, 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]푸란-1-일 또는 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]푸란-4-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸란-2-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸란-4-일 또는 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸란-6-일, 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]푸란-6-일 또는 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]푸란-7-일, 벤조[1,2-*b*:4,3-*b'*]디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:4,3-*b'*]디푸란-7-일, 벤조[1,2-*b*:6,5-*b'*]디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:6,5-*b'*]디푸란-4-일, 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디푸란-4-일 또는 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디푸란-8-일, 벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디푸란-4-일, 트리벤조[*b,d,f*]옥세피닐, 예컨대 트리벤조[*b,d,f*]옥세핀-6-일 또는 트리벤조[*b,d,f*]옥세핀-8-일, 2H-나프토[1,8-*d,e*][1,3]디옥시닐, 예컨대 2H-나프토[1,8-*d,e*][1,3]디옥신-2-일 또는 2H-나프토[1,8-*d,e*][1,3]디옥신-6-일, 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]푸라닐, 예컨대 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]푸란-3-일 또는 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]푸란-5-일, 옥산트레닐, 예컨대 옥산트렌-1-일 또는 옥산트렌-2-일, 벤조[*a*]옥산트레닐, 예컨대 벤조[*a*]옥산트렌-1-일, 벤조[*a*]옥산트렌-2-일, 벤조[*a*]옥산트렌-6-일 또는 벤조[*a*]옥산트렌-7-일, 벤조[*b*]옥산트레닐, 예컨대 벤조[*b*]옥산트렌-1-일, 벤조[*b*]옥산트렌-2-일 또는 벤조[*b*]옥산트렌-6-일, 벤조[*b*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]티엔-2-일, 벤조[*b*]티엔-3-일, 벤조[*b*]티엔-4-일, 벤조[*b*]티엔-5-일, 벤조[*b*]티엔-6-일 또는 벤조[*b*]티엔-7-일, 디벤조[*b,d*]티에닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]티엔-1-일, 디벤조[*b,d*]티엔-2-일, 디벤조[*b,d*]티엔-3-일 또는 디벤조[*b,d*]티엔-4-일, 나프토[1,2-*b*]티에닐, 예컨대 나프토[1,2-*b*]티엔-5-일, 나프토[2,3-*b*]티에닐, 예컨대 나프토[2,3-*b*]티엔-3-일, 나프토[2,3-*b*]티엔-4-일 또는 나프토[2,3-*b*]티엔-9-일, 나프토[2,1-*b*]티에닐, 예컨대 나프토[2,1-*b*]티엔-2-일 또는 나프토[2,1-*b*]티엔-5-일, 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티엔-1-일 또는 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티엔-4-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티엔-2-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티엔-4-일 또는 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티엔-6-일, 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]티엔-7-일, 벤조[1,2-*b*:4,3-*b'*]디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:4,3-*b'*]디티엔-7-일, 벤조[1,2-*b*:6,5-*b'*]디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:6,5-*b'*]디티엔-4-일, 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티엔-4-일 또는 벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티엔-8-일, 벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티엔-4-일, 9H-티오잔테닐, 예컨대 9H-티오잔텐-4-일, 6H-디벤조[*b,d*]티오피라닐, 예컨대 6H-디벤조[*b,d*]티오피란-2-일 또는 6H-디벤조[*b,d*]티오피란-4-일, 1,4-벤조디티이닐, 예컨대 1,4-벤조디티인-2-일, 1,4-벤조디티인-5-일 또는 1,4-벤조디티인-6-일, 나프토[1,2-*b*][1,4]디티이닐, 예컨대 나프토[1,2-*b*][1,4]디티인-2-일 또는 나프토[1,2-*b*][1,4]디티인-6-일, 나프토[2,3-*b*][1,4]디티이닐, 예컨대 나프토[2,3-*b*][1,4]디티인-5-일, 티안트레닐, 예컨대 티안트렌-1-일 또는 티안트렌-2-일, 벤조[*a*]티안트레닐, 예컨대 벤조[*a*]티안트렌-1-일, 벤조[*a*]티안트렌-2-일, 벤조[*a*]티안트렌-6-일 또는 벤조[*a*]티안트렌-7-일, 벤조[*b*]티안트레닐, 예컨대 벤조[*b*]티안트렌-1-일, 벤조[*b*]티안트렌-2-일 또는 벤조[*b*]티안트렌-6-일, 디벤조[*a,c*]티안트레닐, 예컨대 디벤조[*a,c*]티안트렌-10-일 또는 디벤조[*a,c*]티안트렌-11-일, 디벤조[*a,h*]티안트레닐, 예컨대 디벤조[*a,h*]티안트렌-6-일, 디벤조[*a,i*]티안트레닐, 예컨대 디벤조[*a,i*]티안트렌-6-일, 디벤조[*a,j*]티안트레닐, 예컨대 디벤조[*a,j*]티안트렌-6-일, 디벤조[*b,i*]티안트레닐, 예컨대 디벤조[*b,i*]티안트렌-5-일, 2H-나프토[1,8-*b,c*]티에닐, 예컨대 2H-나프토[1,8-*b,c*]티엔-6-일 또는 2H-나프토[1,8-*b,c*]티엔-8-일, 디벤조[*b,d*]티에피닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]티에핀-2-일, 디벤조[*b,f*]티에피닐, 예컨대 디벤조[*b,f*]티에핀-2-일 또는 디벤조[*b,f*]티에핀-4-일, 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피라닐, 예컨대 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피란-1-일, 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피란-2-일, 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피란-3-일, 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피란-7-일, 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피란-9-일 또는 5H-페난트로[4,5-*b,c,d*]티오피란-10-일, 트리벤조[*b,d,f*]티에피닐, 예컨대 트리벤조[*b,d,f*]티에핀-6-일 또는 트리벤조[*b,d,f*]티에핀-8-일, 2,5-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:4,5-*b',c'*]디티에닐, 예컨대 2,5-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:4,5-*b',c'*]디티엔-3-일 또는 2,5-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:4,5-*b',c'*]디티엔-7-일, 2,6-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:5,4-*b',c'*]디티에닐, 예컨대 2,6-디하이드로나프토[1,8-*b,c*:5,4-*b',c'*]디티엔-4-일, 테트라벤조[*a,c,h,j*]티안트레닐, 예컨대 테트라벤조[*a,c,h,j*]티안트렌-3-일, 벤조[*b*]나프토[1,8-*e,f*][1,4]디티에피닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[1,8-*e,f*][1,4]디티에핀-2-일, 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]티에닐, 예컨대 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]티엔-3-일 또는 디나프토[2,3-*b*:2',3'-*d*]티엔-5-일, 5H-페난트로[1,10-*b,c*]티에닐, 예컨대 5H-페난트로[1,10-*b,c*]티엔-1-일 또는 5H-페난트로[1,10-*b,c*]티엔-3-일, 7H-페난트로[1,10-*c,b*]티에닐, 예컨대 7H-페난트로[1,10-*c,b*]티엔-1-일 또는 7H-페난트로[1,10-*c,b*]티엔-9-일, 디벤조[*d,d'*]벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티에닐, 예컨대 디벤조[*d,d'*]벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티엔-4-일 또는 디벤조[*d,d'*]벤조[1,2-*b*:4,5-*b'*]디티엔-6-일, 및 디벤조[*d,d'*]벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티에닐, 예컨대 디벤조[*d,d'*]벤조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티엔-4-일 또는 디벤조[*d,d'*]벤

조[1,2-*b*:5,4-*b'*]디티엔-6-일 중에서 선택되고, 이는 비치환되거나 1 또는 2개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 지닐 수 있다.

[0127]

실시 형태의 특히 바람직한 그룹(6.2)에 따라,  $R^1$  및  $R^2$ 는 독립적으로 페닐, 나프틸, 예컨대 나프트-1-일 또는 나프트-2-일, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 예컨대 1,2-디하이드로아세나프틸렌-3-일 또는 1,2-디하이드로아세나프틸렌-5-일, 비페닐릴, 예컨대 비페닐-4-일, 비페닐-3-일 또는 비페닐-2-일, 플루오레닐, 예컨대 플루오렌-1-일, 플루오렌-2-일, 플루오렌-3-일 또는 플루오렌-4-일, 페난트레닐, 예컨대 페난트렌-1-일, 페난트렌-2-일, 페난트렌-3-일, 페난트렌-4-일 또는 페난트렌-9-일, 벤조[*c*]페난트레닐, 예컨대 벤조[*c*]페난트렌-1-일, 벤조[*c*]페난트렌-2-일, 벤조[*c*]페난트렌-3-일, 벤조[*c*]페난트렌-4-일, 벤조[*c*]페난트렌-5-일 또는 벤조[*c*]페난트렌-6-일, 피레닐, 예컨대 피렌-1-일, 피렌-2-일 또는 피렌-4-일, 크리세닐, 예컨대 크리센-1-일, 크리센-2-일, 크리센-3-일, 크리센-4-일, 크리센-5-일 또는 크리센-6-일, 트리페닐레닐, 예컨대 트리페닐렌-1-일 또는 트리페닐렌-2-일, 벤조[*b*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]푸란-2-일, 벤조[*b*]푸란-3-일, 벤조[*b*]푸란-4-일, 벤조[*b*]푸란-5-일, 벤조[*b*]푸란-6-일 또는 벤조[*b*]푸란-7-일, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]푸란-1-일, 디벤조[*b,d*]푸란-2-일, 디벤조[*b,d*]푸란-3-일 또는 디벤조[*b,d*]푸란-4-일, 나프토[1,2-*b*]푸라닐, 예컨대 나프토[1,2-*b*]푸란-5-일, 나프토[2,3-*b*]푸라닐, 예컨대 나프토[2,3-*b*]푸란-3-일, 나프토[2,3-*b*]푸란-4-일 또는 나프토[2,3-*b*]푸란-9-일, 나프토[2,1-*b*]푸라닐, 예컨대 나프토[2,1-*b*]푸란-2-일 또는 나프토[2,1-*b*]푸란-5-일, 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]푸란-1-일 또는 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]푸란-4-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸란-2-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸란-4-일 또는 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]푸란-6-일, 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]푸라닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]푸란-6-일 또는 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]푸란-7-일, 옥산트레닐, 예컨대 옥산트렌-1-일 또는 옥산트렌-2-일, 벤조[*a*]옥산트레닐, 예컨대 벤조[*a*]옥산트렌-1-일, 벤조[*a*]옥산트렌-2-일, 벤조[*a*]옥산트렌-6-일 또는 벤조[*a*]옥산트렌-7-일, 벤조[*b*]옥산트레닐, 예컨대 벤조[*b*]옥산트렌-1-일, 벤조[*b*]옥산트렌-2-일 또는 벤조[*b*]옥산트렌-6-일, 벤조[*b*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]티엔-2-일, 벤조[*b*]티엔-3-일, 벤조[*b*]티엔-4-일, 벤조[*b*]티엔-5-일, 벤조[*b*]티엔-6-일 또는 벤조[*b*]티엔-7-일, 디벤조[*b,d*]티에닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]티엔-1-일, 디벤조[*b,d*]티엔-2-일, 디벤조[*b,d*]티엔-3-일 또는 디벤조[*b,d*]티엔-4-일, 나프토[1,2-*b*]티에닐, 예컨대 나프토[1,2-*b*]티엔-5-일, 나프토[2,3-*b*]티에닐, 예컨대 나프토[2,3-*b*]티엔-3-일, 나프토[2,3-*b*]티엔-4-일 또는 나프토[2,3-*b*]티엔-9-일, 나프토[2,1-*b*]티에닐, 예컨대 나프토[2,1-*b*]티엔-2-일 또는 나프토[2,1-*b*]티엔-5-일, 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티엔-1-일 또는 벤조[*b*]나프토[1,2-*d*]티엔-4-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티엔-2-일, 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티엔-4-일 또는 벤조[*b*]나프토[2,3-*d*]티엔-6-일, 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]티에닐, 예컨대 벤조[*b*]나프토[2,1-*d*]티엔-7-일, 티안트레닐, 예컨대 티안트렌-1-일 또는 티안트렌-2-일, 벤조[*a*]티안트레닐, 예컨대 벤조[*a*]티안트렌-1-일, 벤조[*a*]티안트렌-2-일, 벤조[*a*]티안트렌-6-일 또는 벤조[*a*]티안트렌-7-일, 벤조[*b*]티안트레닐, 예컨대 벤조[*b*]티안트렌-1-일, 벤조[*b*]티안트렌-2-일 또는 벤조[*b*]티안트렌-6-일, 2H-나프토[1,8-*b,c*]티에닐, 예컨대 2H-나프토[1,8-*b,c*]티엔-6-일 또는 2H-나프토[1,8-*b,c*]티엔-8-일, 디벤조[*b,d*]티에피닐, 예컨대 디벤조[*b,d*]티에핀-2-일, 디벤조[*b,f*]티에피닐, 예컨대 디벤조[*b,f*]티에핀-2-일 또는 디벤조[*b,f*]티에핀-4-일, 및 트리벤조[*b,d,f*]티에피닐, 예컨대 트리벤조[*b,d,f*]티에핀-6-일 또는 트리벤조[*b,d,f*]티에핀-8-일 중에서 선택되고, 이는 비치환되거나 1개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 지닐 수 있다.

[0128]

실시 형태의 특히 바람직한 그룹(6.3)에서,  $R^1$  및  $R^2$ 는 독립적으로 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 페난트레닐, 피레닐, 트리페닐레닐, 벤조[*b*]푸라닐, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 벤조[*b*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에닐, 및 티안트레닐 중에서 선택되고, 특히 페닐, 나프트-1-일, 나프트-2-일, 1,2-디하이드로아세나프틸렌-5-일, 페난트렌-9-일, 피렌-1-일, 피렌-2-일, 피렌-4-일, 트리페닐렌-1-일, 트리페닐렌-2-일, 디벤조[*b,d*]푸란-2-일, 디벤조[*b,d*]푸란-4-일, 벤조[*b*]티엔-3-일, 벤조[*b*]티엔-4-일, 벤조[*b*]티엔-5-일, 벤조[*b*]티엔-6-일, 벤조[*b*]티엔-7-일, 디벤조[*b,d*]티엔-2-일, 디벤조[*b,d*]티엔-4-일, 티안트렌-1-일 및 티안트렌-2-일 중에서 선택된다. 실시 형태의 그룹(6.3)의 서브그룹(6.3a)에서,  $R^1$  및  $R^2$ 는 독립적으로 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 페난트레닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 벤조[*b*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에닐 및 티안트레닐 중에서 선택되고, 구체적으로 페닐, 나프틸, 페난트레닐, 디벤조[*b,d*]티에닐 및 티안트레닐 중에서 선택된다.

[0129]

실시 형태의 특별한 서브그룹(6')에서, 변수  $R^1$  및  $R^2$ 는  $R^1$  및  $R^2$ 에 대해 본 명서에 정의된 의미 중에서 선택된, 특히 바람직한 것으로 언급된 것들, 및 특히 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3) 또는 (6.3a)에 정의된 의미 중에서 선택된 것과 동일한 의미를 가진다.

[0130] 실시 형태의 바람직한 그룹(7)에서, 변수  $R^3$  및  $R^4$ 는 수소와 상이하다. 즉, 변수  $R^3$  및  $R^4$ 는 환 구성원 원자로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤트아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이며, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 모노- 또는 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1, 2, 3 또는 4개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 지닌다. 더욱 바람직하게, 적어도 하나의  $R^3$  및  $R^4$ , 특히  $R^3$  및  $R^4$  둘 모두는 10 내지 18개의 탄소 원자를 갖는 폴리사이클릭 아릴, 및 총 9 내지 26개의 원자를 갖는 폴리사이클릭 헤트아릴 중에서 선택된다.

[0131] 바람직하게, 실시 형태의 본 그룹(7)에서, 변수  $R^3$  및  $R^4$ 는 환 구성원으로서 6 내지 18개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 9 내지 26개의 원자를 갖는 폴리사이클릭 헤트아릴로 구성된 그룹 중에서 독립적으로 선택되고, 여기에서 이들 원자의 1 또는 2개는 산소 또는 황 원자인 한편, 이들 원자의 나머지는 탄소 원자이며, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1 또는 2개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 운반하고, 여기에서  $R^{Ar}$ 은 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미 중의 하나를 가진다(이하, 실시 형태의 그룹(7.1)).

[0132] 더욱 바람직하게, 실시 형태의 본 그룹(7)에서,  $R^3$  및  $R^4$ 는 페닐, 나프틸, 예컨대 나프트-1-일 또는 나프트-2-일, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 예컨대 1,2-디하이드로아세나프틸렌-3-일 또는 1,2-디하이드로아세나프틸렌-5-일, 비페닐릴, 예컨대 비페닐-4-일, 비페닐-3-일 또는 비페닐-2-일, 플루오레닐, 예컨대 플루오렌-1-일, 플루오렌-2-일, 플루오렌-3-일 또는 플루오렌-4-일, 11H-벤조[a]플루오레닐, 예컨대 11H-벤조[a]플루오렌-7-일, 11H-벤조[b]플루오레닐, 예컨대 11H-벤조[b]플루오렌-1-일, 7H-벤조[c]플루오레닐, 예컨대 7H-벤조[c]플루오렌-5-일 또는 7H-벤조[c]플루오렌-10-일, 페난트레닐, 예컨대 페난트렌-1-일, 페난트렌-2-일, 페난트렌-3-일, 페난트렌-4-일 또는 페난트렌-9-일, 벤조[c]페난트레닐, 예컨대 벤조[c]페난트렌-1-일, 벤조[c]페난트렌-2-일, 벤조[c]페난트렌-3-일, 벤조[c]페난트렌-4-일, 벤조[c]페난트렌-5-일 또는 벤조[c]페난트렌-6-일, 피레닐, 예컨대 피렌-1-일, 피렌-2-일 또는 피렌-4-일, 크리세닐, 예컨대 크리센-1-일, 크리센-2-일, 크리센-3-일, 크리센-4-일, 크리센-5-일 또는 크리센-6-일, 피세닐, 예컨대 피센-3-일, 트리페닐레닐, 예컨대 트리페닐렌-1-일 또는 트리페닐렌-2-일, 벤조[b]푸라닐, 예컨대 벤조[b]푸란-2-일, 벤조[b]푸란-3-일, 벤조[b]푸란-4-일, 벤조[b]푸란-5-일, 벤조[b]푸란-6-일 또는 벤조[b]푸란-7-일, 디벤조[b,d]푸라닐, 예컨대 디벤조[b,d]푸란-1-일, 디벤조[b,d]푸란-2-일, 디벤조[b,d]푸란-3-일 또는 디벤조[b,d]푸란-4-일, 나프토[1,2-b]푸라닐, 예컨대 나프토[1,2-b]푸란-5-일, 나프토[2,3-b]푸라닐, 예컨대 나프토[2,3-b]푸란-3-일, 나프토[2,3-b]푸란-4-일 또는 나프토[2,3-b]푸란-9-일, 나프토[2,1-b]푸라닐, 예컨대 나프토[2,1-b]푸란-2-일 또는 나프토[2,1-b]푸란-5-일, 벤조[b]나프토[1,2-d]푸라닐, 예컨대 벤조[b]나프토[1,2-d]푸란-1-일 또는 벤조[b]나프토[1,2-d]푸란-4-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]푸라닐, 예컨대 벤조[b]나프토[2,3-d]푸란-2-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]푸란-4-일 또는 벤조[b]나프토[2,3-d]푸란-6-일, 벤조[b]나프토[2,1-d]푸라닐, 예컨대 벤조[b]나프토[2,1-d]푸란-6-일 또는 벤조[b]나프토[2,1-d]푸란-7-일, 벤조[1,2-b:4,3-b'] 디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-b:4,3-b'] 디푸란-7-일, 벤조[1,2-b:6,5-b'] 디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-b:6,5-b'] 디푸란-4-일, 벤조[1,2-b:5,4-b'] 디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-b:5,4-b'] 디푸란-4-일 또는 벤조[1,2-b:5,4-b'] 디푸란-8-일, 벤조[1,2-b:4,5-b'] 디푸라닐, 예컨대 벤조[1,2-b:4,5-b'] 디푸란-4-일, 트리벤조[b,d,f]옥세피닐, 예컨대 트리벤조[b,d,f]옥세핀-6-일 또는 트리벤조[b,d,f]옥세핀-8-일, 2H-나프토[1,8-d,e][1,3]디옥시닐, 예컨대 2H-나프토[1,8-d,e][1,3]디옥신-2-일 또는 2H-나프토[1,8-d,e][1,3]디옥신-6-일, 디나프토[2,3-b:2',3'-d]푸라닐, 예컨대 디나프토[2,3-b:2',3'-d]푸란-3-일 또는 디나프토[2,3-b:2',3'-d]푸란-5-일, 옥산트레닐, 예컨대 옥산트렌-1-일 또는 옥산트렌-2-일, 벤조[a]옥산트레닐, 예컨대 벤조[a]옥산트렌-1-일, 벤조[a]옥산트렌-2-일, 벤조[a]옥산트렌-6-일 또는 벤조[a]옥산트렌-7-일, 벤조[b]옥산트레닐, 예컨대 벤조[b]옥산트렌-1-일, 벤조[b]옥산트렌-2-일 또는 벤조[b]옥산트렌-6-일, 벤조[b]티에닐, 예컨대 벤조[b]티엔-2-일, 벤조[b]티엔-3-일, 벤조[b]티엔-4-일, 벤조[b]티엔-5-일, 벤조[b]티엔-6-일 또는 벤조[b]티엔-7-일, 디벤조[b,d]티에닐, 예컨대 디벤조[b,d]티엔-1-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-3-일 또는 디벤조[b,d]티엔-4-일, 나프토[1,2-b]티에닐, 예컨대 나프토[1,2-b]티엔-5-일, 나프토[2,3-b]티에닐, 예컨대 나프토[2,3-b]티엔-3-일, 나프토[2,3-b]티엔-4-일 또는 나프토[2,3-b]티엔-9-일, 나프토[2,1-b]티에닐, 예컨대 나프토[2,1-b]티엔-2-일 또는 나프토[2,1-b]티엔-5-일, 벤조[b]나프토[1,2-d]티에닐, 예컨대 벤조[b]나프토[1,2-d]티엔-1-일 또는 벤조[b]나프토[1,2-d]티엔-4-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]티에닐, 예컨대 벤조[b]나프토[2,3-d]티엔-2-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]티엔-4-일 또는

벤조[b]나프토[2,3-d]티엔-6-일, 벤조[b]나프토[2,1-d]티엔-7-일, 예컨대 벤조[b]나프토[2,1-d]티엔-7-일, 벤조[1,2-b:4,3-b']디티엔-6-일, 예컨대 벤조[1,2-b:4,3-b']디티엔-7-일, 벤조[1,2-b:6,5-b']디티엔-6-일, 예컨대 벤조[1,2-b:6,5-b']디티엔-4-일, 벤조[1,2-b:5,4-b']디티엔-6-일, 예컨대 벤조[1,2-b:5,4-b']디티엔-4-일 또는 벤조[1,2-b:5,4-b']디티엔-8-일, 벤조[1,2-b:4,5-b']디티엔-6-일, 예컨대 벤조[1,2-b:4,5-b']디티엔-4-일, 9H-티오잔테닐, 예컨대 9H-티오잔텐-4-일, 6H-디벤조[b,d]티오피라닐, 예컨대 6H-디벤조[b,d]티오피란-2-일 또는 6H-디벤조[b,d]티오피란-4-일, 1,4-벤조디티엔-2-일, 예컨대 1,4-벤조디티엔-2-일, 1,4-벤조디티엔-5-일 또는 1,4-벤조디티엔-6-일, 나프토[1,2-b][1,4]디티엔-2-일, 예컨대 나프토[1,2-b][1,4]디티엔-2-일 또는 나프토[1,2-b][1,4]디티엔-6-일, 나프토[2,3-b][1,4]디티엔-2-일, 예컨대 나프토[2,3-b][1,4]디티엔-5-일, 티안트레닐, 예컨대 티안트렌-1-일 또는 티안트렌-2-일, 벤조[a]티안트레닐, 예컨대 벤조[a]티안트렌-1-일, 벤조[a]티안트렌-2-일, 벤조[a]티안트렌-6-일 또는 벤조[a]티안트렌-7-일, 벤조[b]티안트레닐, 예컨대 벤조[b]티안트렌-1-일, 벤조[b]티안트렌-2-일 또는 벤조[b]티안트렌-6-일, 디벤조[a,c]티안트레닐, 예컨대 디벤조[a,c]티안트렌-10-일 또는 디벤조[a,c]티안트렌-11-일, 디벤조[a,h]티안트레닐, 예컨대 디벤조[a,h]티안트렌-6-일, 디벤조[a,i]티안트레닐, 예컨대 디벤조[a,i]티안트렌-6-일, 디벤조[a,j]티안트레닐, 예컨대 디벤조[a,j]티안트렌-6-일, 디벤조[b,i]티안트레닐, 예컨대 디벤조[b,i]티안트렌-5-일, 2H-나프토[1,8-b,c]티엔-6-일, 예컨대 2H-나프토[1,8-b,c]티엔-6-일 또는 2H-나프토[1,8-b,c]티엔-8-일, 디벤조[b,d]티오피닐, 예컨대 디벤조[b,d]티오피닐-2-일, 디벤조[b,f]티오피닐, 예컨대 디벤조[b,f]티오피닐-2-일 또는 디벤조[b,f]티오피닐-4-일, 5H-페난트로[4,5-b,c,d]티오피라닐, 예컨대 5H-페난트로[4,5-b,c,d]티오피란-1-일, 5H-페난트로[4,5-b,c,d]티오피란-2-일, 5H-페난트로[4,5-b,c,d]티오피란-3-일, 5H-페난트로[4,5-b,c,d]티오피란-7-일, 5H-페난트로[4,5-b,c,d]티오피란-9-일 또는 5H-페난트로[4,5-b,c,d]티오피란-10-일, 트리벤조[b,d,f]티오피닐, 예컨대 트리벤조[b,d,f]티오피닐-6-일 또는 트리벤조[b,d,f]티오피닐-8-일, 2,5-디하이드로나프토[1,8-b,c:4,5-b',c']디티엔-6-일, 예컨대 2,5-디하이드로나프토[1,8-b,c:4,5-b',c']디티엔-3-일 또는 2,5-디하이드로나프토[1,8-b,c:4,5-b',c']디티엔-7-일, 2,6-디하이드로나프토[1,8-b,c:5,4-b',c']디티엔-6-일, 예컨대 2,6-디하이드로나프토[1,8-b,c:5,4-b',c']디티엔-4-일, 테트라벤조[a,c,h,j]티안트레닐, 예컨대 테트라벤조[a,c,h,j]티안트렌-3-일, 벤조[b]나프토[1,8-e,f][1,4]디티오피닐, 예컨대 벤조[b]나프토[1,8-e,f][1,4]디티오피닐-2-일, 디나프토[2,3-b:2',3'-d]티엔-6-일, 예컨대 디나프토[2,3-b:2',3'-d]티엔-3-일 또는 디나프토[2,3-b:2',3'-d]티엔-5-일, 5H-페난트로[1,10-b,c]티엔-6-일, 예컨대 5H-페난트로[1,10-b,c]티엔-1-일 또는 5H-페난트로[1,10-b,c]티엔-3-일, 7H-페난트로[1,10-c,b]티엔-6-일, 예컨대 7H-페난트로[1,10-c,b]티엔-1-일 또는 7H-페난트로[1,10-c,b]티엔-9-일, 디벤조[d,d']벤조[1,2-b:4,5-b']디티엔-6-일, 예컨대 디벤조[d,d']벤조[1,2-b:4,5-b']디티엔-4-일 또는 디벤조[d,d']벤조[1,2-b:4,5-b']디티엔-6-일, 및 디벤조[d,d']벤조[1,2-b:5,4-b']디티엔-6-일, 예컨대 디벤조[d,d']벤조[1,2-b:5,4-b']디티엔-4-일 또는 디벤조[d,d']벤조[1,2-b:5,4-b']디티엔-6-일 중에서 독립적으로 선택되고, 여기에서 상기 언급된 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1 또는 2개의 라디칼 R<sup>Ar</sup>을 지닌다(이하 실시 형태의 그룹 (7.2)).

[0133] 특히, 실시 형태의 본 그룹(7)에서, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 페닐, 나프틸, 예컨대 나프틸-1-일 또는 나프틸-2-일, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 예컨대 1,2-디하이드로아세나프틸렌-3-일 또는 1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일, 비페닐릴, 예컨대 비페닐-4-일, 비페닐-3-일 또는 비페닐-2-일, 플루오레닐, 예컨대 플루오렌-1-일, 플루오렌-2-일, 플루오렌-3-일 또는 플루오렌-4-일, 페난트레닐, 예컨대 페난트렌-1-일, 페난트렌-2-일, 페난트렌-3-일, 페난트렌-4-일 또는 페난트렌-9-일, 벤조[c]페난트레닐, 예컨대 벤조[c]페난트렌-1-일, 벤조[c]페난트렌-2-일, 벤조[c]페난트렌-3-일, 벤조[c]페난트렌-4-일, 벤조[c]페난트렌-5-일 또는 벤조[c]페난트렌-6-일, 피레닐, 예컨대 피렌-1-일, 피렌-2-일 또는 피렌-4-일, 크리세닐, 예컨대 크리센-1-일, 크리센-2-일, 크리센-3-일, 크리센-4-일, 크리센-5-일 또는 크리센-6-일, 트리페닐레닐, 예컨대 트리페닐렌-1-일 또는 트리페닐렌-2-일, 벤조[b]푸라닐, 예컨대 벤조[b]푸란-2-일, 벤조[b]푸란-3-일, 벤조[b]푸란-4-일, 벤조[b]푸란-5-일, 벤조[b]푸란-6-일 또는 벤조[b]푸란-7-일, 디벤조[b,d]푸라닐, 예컨대 디벤조[b,d]푸란-1-일, 디벤조[b,d]푸란-2-일, 디벤조[b,d]푸란-3-일 또는 디벤조[b,d]푸란-4-일, 나프토[1,2-b]푸라닐, 예컨대 나프토[1,2-b]푸란-5-일, 나프토[2,3-b]푸라닐, 예컨대 나프토[2,3-b]푸란-3-일, 나프토[2,3-b]푸란-4-일 또는 나프토[2,3-b]푸란-9-일, 나프토[2,1-b]푸라닐, 예컨대 나프토[2,1-b]푸란-2-일 또는 나프토[2,1-b]푸란-5-일, 벤조[b]나프토[1,2-d]푸라닐, 예컨대 벤조[b]나프토[1,2-d]푸란-1-일 또는 벤조[b]나프토[1,2-d]푸란-4-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]푸라닐, 예컨대 벤조[b]나프토[2,3-d]푸란-2-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]푸란-4-일 또는 벤조[b]나프토[2,3-d]푸란-6-일, 벤조[b]나프토[2,1-d]푸라닐, 예컨대 벤조[b]나프토[2,1-d]푸란-6-일 또는 벤조[b]나프토[2,1-d]푸란-7-일, 옥산트레닐, 예컨대 옥산트렌-1-일 또는 옥산트렌-2-일, 벤조[a]옥산트레닐, 예컨대 벤조[a]옥산트렌-1-일, 벤조

[a]옥산트렌-2-일, 벤조[a]옥산트렌-6-일 또는 벤조[a]옥산트렌-7-일, 벤조[b]옥산트레닐, 예컨대 벤조[b]옥산트렌-1-일, 벤조[b]옥산트렌-2-일 또는 벤조[b]옥산트렌-6-일, 벤조[b]티에닐, 예컨대 벤조[b]티엔-2-일, 벤조[b]티엔-3-일, 벤조[b]티엔-4-일, 벤조[b]티엔-5-일, 벤조[b]티엔-6-일 또는 벤조[b]티엔-7-일, 디벤조[b,d]티에닐, 예컨대 디벤조[b,d]티엔-1-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-3-일 또는 디벤조[b,d]티엔-4-일, 나프토[1,2-b]티에닐, 예컨대 나프토[1,2-b]티엔-5-일, 나프토[2,3-b]티에닐, 예컨대 나프토[2,3-b]티엔-3-일, 나프토[2,3-b]티엔-4-일 또는 나프토[2,3-b]티엔-9-일, 나프토[2,1-b]티에닐, 예컨대 나프토[2,1-b]티엔-2-일 또는 나프토[2,1-b]티엔-5-일, 벤조[b]나프토[1,2-d]티에닐, 예컨대 벤조[b]나프토[1,2-d]티엔-1-일 또는 벤조[b]나프토[1,2-d]티엔-4-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]티에닐, 예컨대 벤조[b]나프토[2,3-d]티엔-2-일, 벤조[b]나프토[2,3-d]티엔-4-일 또는 벤조[b]나프토[2,3-d]티엔-6-일, 벤조[b]나프토[2,1-d]티에닐, 예컨대 벤조[b]나프토[2,1-d]티엔-7-일, 티안트레닐, 예컨대 티안트렌-1-일 또는 티안트렌-2-일, 벤조[a]티안트레닐, 예컨대 벤조[a]티안트렌-1-일, 벤조[a]티안트렌-2-일, 벤조[a]티안트렌-6-일 또는 벤조[a]티안트렌-7-일, 벤조[b]티안트레닐, 예컨대 벤조[b]티안트렌-1-일, 벤조[b]티안트렌-2-일 또는 벤조[b]티안트렌-6-일, 2H-나프토[1,8-b,c]티에닐, 예컨대 2H-나프토[1,8-b,c]티엔-6-일 또는 2H-나프토[1,8-b,c]티엔-8-일, 디벤조[b,d]티에피닐, 예컨대 디벤조[b,d]티에핀-2-일, 디벤조[b,f]티에피닐, 예컨대 디벤조[b,f]티에핀-2-일 또는 디벤조[b,f]티에핀-4-일, 및 트리벤조[b,d,f]티에피닐, 예컨대 트리벤조[b,d,f]티에핀-6-일 또는 트리벤조[b,d,f]티에핀-8-일 중에서 독립적으로 선택되고, 여기에서, 상기 언급된 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헤트아릴은 비치환되거나 1개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 지닌다(이하 실시 형태의 그룹(7.3)).

[0134] 실시 형태의 특히 바람직한 그룹(7.4)에서,  $R^3$  및  $R^4$ 는 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 페난트레닐, 피레닐, 트리페닐레닐, 벤조[b]푸라닐, 디벤조[b,d]푸라닐, 벤조[b]티에닐, 디벤조[b,d]티에닐, 및 티안트레닐 중에서 독립적으로 선택되고, 특히 페닐, 나프틸-1-일, 나프틸-2-일, 1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일, 페난트렌-9-일, 피렌-1-일, 피렌-2-일, 피렌-4-일, 트리페닐렌-1-일, 트리페닐렌-2-일, 디벤조[b,d]푸란-2-일, 디벤조[b,d]푸란-4-일, 벤조[b]티엔-3-일, 벤조[b]티엔-4-일, 벤조[b]티엔-5-일, 벤조[b]티엔-6-일, 벤조[b]티엔-7-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-4-일, 티안트렌-1-일 및 티안트렌-2-일 중에서 선택된다. 실시 형태의 그룹(7.4)의 서브그룹(7.4a)에서,  $R^1$  및  $R^2$ 는 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 페난트레닐, 벤조[b]푸라닐, 디벤조[b,d]푸라닐, 벤조[b]티에닐 및 디벤조[b,d]티에닐 중에서 독립적으로 선택된다.

[0135] 실시 형태의 그룹(7)의 특별한 서브그룹(7.5)가 높은 굴절률 및 음의 복굴절을 제공하는 것으로 밝혀졌다. 실시 형태의 이들 서브그룹(7.5)는 화학식(I)의 화합물, 특히 화학식(Ia-1)의 화합물에 관한 것이며, 여기에서  $R^3$  및  $R^4$ 는 수소와 상이하고 여기에서 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및/또는  $R^4$ 의 적어도 2개 및 바람직하게 4개는 본 명세서에 정의된 바와 같은 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헤트아릴 중에서 선택된 부피가 크고 입체 장애된 치환체이다. 이와 관련하여 부피가 큰 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및/또는  $R^4$ 는 특히 하기 그룹으로부터의 치환체이다:

[0136] - 화학식(I) 및 (Ia-1)에서 페닐 환에 결합된 적어도 하나의 페닐 환을 보유하는 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헤트아릴(여기에서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및/또는  $R^4$ 의 페닐 환은 환 구성원 원자로서 6 내지 14개의 탄소 원자를 갖는 방향족 환 및 5 내지 13개의 환 구성원 원자를 갖는 포화되거나 부분적으로 또는 완전히 불포화된 헤테로사이클릭 환의 적어도 하나에 융합되고, 여기에서 상기 페닐 환에 융합된 환의 적어도 하나는 페닐 환의 오르토- 및 메타-위치 사이의 결합에 융합됨), 및

[0137] - 환 구성원 원자로서 14 내지 26개, 특히 14 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 13 내지 26개, 특히 13 내지 20개의 원자를 갖는 폴리사이클릭 헤트아릴(여기에서 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자임).

[0138] 상기 부피가 큰 치환체의 예로는 나프틸, 페난트릴, 피레닐, 트리페닐레닐, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 디벤조[b,d]티에닐, 티안트레닐, 디벤조[b,d]푸라닐 및 9H-플루오렌-3-일을 들 수 있으나 이로 제한되지 않으며, 특히 1-나프틸, 9-페난트릴, 피렌-1-일, 피렌-4-일, 1-트리페닐레닐, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 디벤조[b,d]티엔-4-일, 디벤조[b,d]푸란-4-일 및 티안트렌-1-일을 들 수 있으나 이로 제한되지 않는다.

[0139] 부피가 큰 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및/또는  $R^4$ 의 이와 같이 유익한 효과에 대한 이유가 완전히 명백해진 것은 아니지만, 이는 이들의 입체 장애 때문인 것으로 보이며, 이들 치환체는 주쇄에 수직인 수지 내부의 배향으로 강제되고, 이는 수지의 복굴절을 감소시킨다.

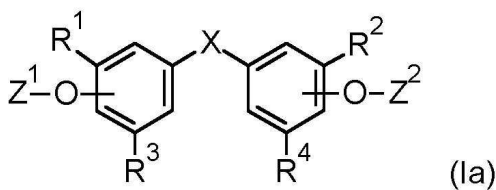
[0140] 이에 따라, 공단량체, 예컨대 화학식(IV)의 것들에 의해 수지에 부여된 양의 복굴절을 화학식(I), 특히 실시 형태(7.5)에 따른 화학식(Ia-1)의 단량체에 의해 부여된 음의 복굴절로 균형을 잡음으로써 본 발명에 따라 낮은 복굴절을 갖는 열가소성 수지가 얻어질 수 있다.

[0141] 실시 형태의 특별한 서브그룹(7')에서, 변수  $R^3$  및  $R^4$ 는  $R^3$  및  $R^4$ 에 대해 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 언급된 것들 중에서 선택된, 특히 실시 형태의 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a) 또는 (7.5)에 정의된 의미 중에서 선택된 것과 동일한 의미를 가진다.

[0142] 실시 형태의 특별한 그룹(8)에서, 변수  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 동일한 의미를 가진다. 실시 형태의 본 그룹(8)에서 변수  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 의 동일한 의미는 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 언급된 것들 중에서 바람직하게 선택되고, 그룹(6)에 정의된, 특히 실시 형태의 그룹(6.1)에 정의된 바와 같은, 더욱 특히 실시 형태의 그룹(6.2)에 정의된 바와 같은, 더욱 더 바람직하게 실시 형태의 그룹(6.3)에 정의된 바와 같은 그리고 특히 실시 형태의 그룹(6.3a)에 정의된 바와 같은 의미 중에서 바람직하게 선택된다. 실시 형태의 본 특별한 그룹(8)에서, 변수  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 더욱 바람직하게 실시 형태의 그룹(7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a) 또는 (7.5)에 정의된 바와 같다.

[0143] 실시 형태의 추가의 특별한 그룹(9)에서, 변수  $R^3$  및  $R^4$ 는 둘 모두 수소이다. 부가적으로, 실시 형태의 본 그룹(9)에서 변수  $R^1$  및  $R^2$ 는 바람직하게 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 본 명세서에 언급된 것들 중에서 선택되고, 그룹(6)에 정의된, 특히 실시 형태의 그룹(6.1)에 정의된 바와 같은, 더욱 특히 실시 형태의 그룹(6.2)에 정의된 바와 같은, 더욱 더 바람직하게 실시 형태의 그룹(6.3)에 정의된 바와 같은, 그리고 특히 실시 형태의 그룹(6.3a)에 정의된 바와 같은 의미 중에서 바람직하게 선택된 것과 동일한 의미를 가진다.

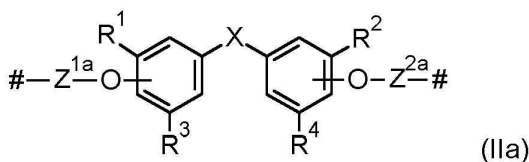
[0144] 실시 형태의 바람직한 그룹(10)에서 화학식(I)의 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 모두 모이어티 X에 대해 메타 위치에 위치하며, 즉, 실시 형태의 본 그룹에 따라 화학식(I)의 화합물은 화학식(Ia)의 화합물이다:



[0145]

[0146] 상기 식에서 변수 X,  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미를 가지며, 여기에서  $R^3$  및  $R^4$ 는 바람직하게 수소와 상이하고 여기에서 특히  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 동일한 의미를 갖는다.

[0147] 마찬가지로, 실시 형태의 본 바람직한 그룹(10)에 따라 화학식(II)의 구조 단위는 화학식(IIa)의 구조 단위이다:



[0148]

[0149] 상기 식에서 변수 X,  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미를 가지며, 여기에서  $R^3$  및  $R^4$ 는 바람직하게 수소와 상이하고 여기에서 특히  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 동일한 의미를 갖는다.

[0150] 당업자는 화학식(I), (Ia), (II) 및 (IIa)에서 실시 형태의 하나 이상의 그룹(1), (1.1) 및 (1')에서 주어진  $Z^1$  및  $Z^2$ 의 의미가 실시 형태의 그룹(5) 또는 그룹(5'), (5'') 및 (5''') 중의 하나에 따른 X의 의미, 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3), (6.3a) 및 (6') 중의 하나 이상에 따른  $R^1$  및  $R^2$ 의 의미, 및 또한 실시 형태의

그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a), (7.5) 및 (7') 중의 하나 이상에 따른  $R^3$  및  $R^4$ 의 의미 및 또한 실시 형태의 그룹(8) 또는 그룹(9)와 조합될 수 있음을 쉽게 이해할 것이다. 당업자는 또한 화학식(I), (Ia), (II) 및 (IIa)에서 실시 형태의 그룹(2)에 주어진  $Z^1$  및  $Z^2$ 의 의미가 실시 형태의 그룹(5) 또는 그룹(5'), (5'') 또는 (5''') 중의 하나에 따른 X의 의미, 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3), (6.3a) 및 (6') 중의 하나 이상에 따른  $R^1$  및  $R^2$ 의 의미 및 또한 실시 형태의 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a), (7.5) 및 (7') 중의 하나 이상에 따른  $R^3$  및  $R^4$ 의 의미 및 또한 실시 형태의 그룹(8) 또는 그룹(9)와 조합될 수 있음을 이해할 것이다. 당업자는 또한 화학식(I), (Ia), (II) 및 (IIa)에서 실시 형태의 그룹(3), (3.1) 및 (3')에 주어진  $Z^1$  및  $Z^2$ 의 의미가 실시 형태의 그룹(5) 또는 그룹(5'), (5'') 또는 (5''') 중의 하나에 따른 X의 의미, 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3), (6.3a) 및 (6') 중의 하나 이상에 따른  $R^1$  및  $R^2$ 의 의미 및 또한 실시 형태의 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a), (7.5) 및 (7') 중의 하나 이상에 따른  $R^3$  및  $R^4$ 의 의미 및 또한 실시 형태의 그룹(8) 또는 그룹(9)와 조합될 수 있음을 이해할 것이다. 당업자는 또한 화학식(I), (Ia), (II) 및 (IIa)에서 실시 형태의 그룹(4) 및 (4.1)에 주어진  $Z^1$  및  $Z^2$ 의 의미가 실시 형태의 그룹(5) 또는 그룹(5'), (5'') 또는 (5''') 중의 하나에 따른 X의 의미, 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3), (6.3a) 및 (6') 중의 하나 이상에 따른  $R^1$  및  $R^2$ 의 의미 및 또한 실시 형태의 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a), (7.5) 및 (7') 중의 하나 이상에 따른  $R^3$  및  $R^4$ 의 의미 및 또한 실시 형태의 그룹(8) 또는 그룹(9)와 조합될 수 있음을 이해할 것이다.

[0151] 이와 별개로 그리고 달리 언급되지 않으면, 변수  $Ar^1$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^{Ar}$ , R, R', R'' 및 n은 단독으로 또는 바람직하게 서로 조합하여 그리고 상기 기재된 변수 X,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Z^1$  및  $Z^2$ 의 의미 및 바람직한 의미와 함께 하기 의미를 가진다.

[0152]  $Ar^1$ 은 바람직하게 환 구성원 원자로서 6 내지 18개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 환 구성원 원자인 총 9 내지 16개의 원자를 갖는 폴리사이클릭 헥사아릴이고, 여기에서 헥사아릴의 이들 환 구성원 원자의 1 또는 2개는 황 원자인 한편, 헥사아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이며, 여기에서 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴 및 폴리사이클릭 헥사아릴은 비치환되거나 1 또는 2개의 라디칼  $R^{Ar}$ 을 운반하고, 여기에서  $R^{Ar}$ 은 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미 중의 하나를 가진다. 이때 비치환된 라디칼  $Ar^1$ 이 선호된다.

[0153] 더욱 바람직하게,  $Ar^1$ 은 페닐, 나프틸, 예컨대 나프트-1-일 또는 나프트-2-일, 플루오레닐, 예컨대 플루오렌-1-일, 플루오렌-2-일, 플루오렌-3-일 또는 플루오렌-4-일, 11H-벤조[a]플루오레닐, 예컨대 11H-벤조[a]플루오렌-7-일, 11H-벤조[b]플루오레닐, 예컨대 11H-벤조[b]플루오렌-1-일, 7H-벤조[c]플루오레닐, 예컨대 7H-벤조[c]플루오렌-5-일 또는 7H-벤조[c]플루오렌-10-일, 페난트레닐, 예컨대 페난트렌-1-일, 페난트렌-2-일, 페난트렌-3-일, 페난트렌-4-일 또는 페난트렌-9-일, 벤조[c]페난트레닐, 예컨대 벤조[c]페난트렌-1-일, 벤조[c]페난트렌-2-일, 벤조[c]페난트렌-3-일, 벤조[c]페난트렌-4-일, 벤조[c]페난트렌-5-일 또는 벤조[c]페난트렌-6-일, 피레닐, 예컨대 피렌-1-일, 피렌-2-일 또는 피렌-4-일, 크리세닐, 예컨대 크리센-1-일, 크리센-2-일, 크리센-3-일, 크리센-4-일, 크리센-5-일 또는 크리센-6-일, 트리페닐레닐, 예컨대 트리페닐렌-1-일 또는 트리페닐렌-2-일, 벤조[b]티에닐, 예컨대 벤조[b]티엔-2-일, 벤조[b]티엔-3-일, 벤조[b]티엔-4-일, 벤조[b]티엔-5-일, 벤조[b]티엔-6-일 또는 벤조[b]티엔-7-일, 디벤조[b,d]티에닐, 예컨대 디벤조[b,d]티엔-1-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-3-일 또는 디벤조[b,d]티엔-4-일, 나프토[1,2-b]티에닐, 예컨대 나프토[1,2-b]티엔-5-일, 나프토[2,3-b]티에닐, 예컨대 나프토[2,3-b]티엔-3-일, 나프토[2,3-b]티엔-4-일 또는 나프토[2,3-b]티엔-9-일, 나프토[2,1-b]티에닐, 예컨대 나프토[2,1-b]티엔-2-일 또는 나프토[2,1-b]티엔-5-일, 벤조[1,2-b:4,3-b'] 디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-b:4,3-b'] 디티엔-7-일, 벤조[1,2-b:6,5-b'] 디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-b:6,5-b'] 디티엔-4-일, 벤조[1,2-b:5,4-b'] 디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-b:5,4-b'] 디티엔-4-일 또는 벤조[1,2-b:5,4-b'] 디티엔-8-일, 벤조[1,2-b:4,5-b'] 디티에닐, 예컨대 벤조[1,2-b:4,5-b'] 디티엔-4-일, 및 티안트레닐, 예컨대 티안트렌-1-일 또는 티안트렌-2-일 중에서 선택된다.

[0154] 더욱 더 바람직하게,  $Ar^1$ 은 페닐, 나프틸, 플루오레닐, 페난트레닐, 피레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 벤조[b]

푸라닐, 디벤조[*b,d*]푸라닐, 벤조[*b*]티에닐, 디벤조[*b,d*]티에닐 및 티안트레닐 중에서, 특히 페닐, 나프틸, 페난트레닐, 크리세닐 및 디벤조[*b,d*]티에닐 중에서, 특히 페닐, 나프틸 및 페난트레닐 중에서, 및 구체적으로 페닐, 나프틸-1-일, 나프틸-2-일 및 페난트렌-9-일 중에서 선택된다.

[0155]  $R^5$ 는 바람직하게 수소, 메틸, 에틸 및 라디칼  $Ar^1$ 으로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서  $Ar^1$ 은 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것을 가진다. 더욱 바람직하게,  $R^5$ 는 수소, 메틸 또는 에틸이고, 특히 수소 또는 메틸이다.

[0156]  $R^6$ 는 바람직하게 수소, 메틸 및 에틸로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 특히 수소 또는 메틸이다.

[0157]  $R^{Ar}$ 은 바람직하게 R, OR 및  $CH_2R_{3-n}$ 으로 구성된 그룹 중에서, 더욱 바람직하게 R 및 OR의 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 n은 0, 1 또는 2, 특히 1 또는 2이며, 변수 R은 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것을 가진다. 특히, 라디칼  $R^{Ar}$ 은 메틸, 메톡시, 페닐, 나프틸, 페난트레닐 및 트리페닐레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 구체적으로 페닐, 나프틸 또는 페난트레닐이다.

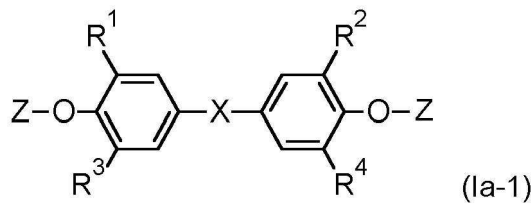
[0158] R은 바람직하게 메틸, 페닐, 나프틸, 페난트레닐 및 트리페닐레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 이는 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 동일하거나 상이한 라디칼 R"에 의해 치환되며, 여기에서 R"는 각 경우에 독립적으로 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것을 가진다. 더욱 바람직하게, R은 페닐, 나프틸 및 페난트레닐로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 이는 비치환된다.

[0159] R'는 바람직하게 수소, 메틸, 페닐 및 나프틸로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 여기에서 페닐 및 나프틸은 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 동일하거나 상이한 라디칼 R"에 의해 치환되며, 여기에서 R"는 각 경우에 독립적으로 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것을 가진다. 더욱 바람직하게, R'는 비치환된 페닐 또는 비치환된 나프틸이다.

[0160] R"는 바람직하게 페닐,  $OCH_3$  및  $CH_3$ 로 구성된 그룹 중에서 선택된다.

[0161] 변수 n은 바람직하게 1 또는 2이다.

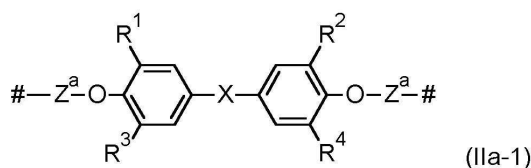
[0162] 화학식(Ia)에서  $Z^1$  및  $Z^2$  기는 둘 모두  $Z^1$  및  $Z^2$ 에 대해 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 의미 중의 하나를 갖는 Z이며, -O-Z 기는 둘 모두 모이어티 X에 대해 파라 위치에 있는, 실시 형태의 그룹(10)의 특별한 서브그룹(10.1)에서, 화학식(I)의 화합물은 화학식(Ia-1)의 화합물이다:



[0163]

[0164] 상기 식에서 X,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미를 가지며 여기에서  $R^3$  및  $R^4$ 는 특히 수소와 상이하다.

[0165] 실시 형태의 그룹(10)의 본 서브그룹(10.1)에서 화학식(II) 또는 (IIa)의 구조 단위는 화학식(IIa-1)의 구조 단위이다:



[0166]

[0167] 상기 식에서 #는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고 여기에서  $Z^a$ 는  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 에 대해 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 의미 중의 하나를 가지며, 변수 X,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 본 명세서에 정의된 의

미, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미를 갖고 여기에서  $R^3$  및  $R^4$ 는 특히 수소와 상이하다.

- [0168] 바람직하게, 화학식(Ia-1) 및 (IIa-1)에서 모이어티 X는 실시 형태의 그룹(5), 그룹(5') 또는 그룹(5'')에 정의된 바와 같다. 따라서, 본 명세서에서 모이어티 X는 특히 단일 결합, O, N-페닐, N-나프틸, N-페난트릴,  $CH_2$ ,  $C(CH_3)_2$ ,  $CH(CH_3)$ , S, S(O) 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 더욱 특히 단일 결합, O, N-페닐, N-나프트-1-일, N-나프트-2-일, N-페난트렌-9-일,  $CH_2$ ,  $C(CH_3)_2$ ,  $CH(CH_3)$ , S 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 특히 단일 결합, O,  $CH_2$ ,  $C(CH_3)_2$ , S 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 구체적으로 단일 결합,  $C(CH_3)_2$ , S 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서 선택된다. 이와 관련하여 X가  $C(CH_3)_2$ 인 것이 특히 선호된다. 또한, 이와 관련하여, X가 S 또는  $SO_2$ 인 것이 특히 선호된다.
- [0169] 치환체  $R^1$  및  $R^2$ 가 서로 독립적으로 각각 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3) 및 (6.3a)에 정의된 바와 같고 여기에서 치환체  $R^3$  및  $R^4$ 는 서로 독립적으로 각각 실시 형태의 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a) 및 (7.5)에 정의된 바와 같은 화학식(Ia-1)의 화합물 및 화학식(IIa-1)의 구조 단위가 또한 선호된다.
- [0170] 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 동일한 의미를 갖고, 이는 특히 바람직한 것으로 본 명세서에 언급된 의미 중의 하나, 및 특히 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3) 및 (6.3a) 및 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a) 및 (7.5)에 정의된 의미 중의 하나인 화학식(Ia-1)의 화합물 및 화학식(IIa-1)의 구조 단위가 더욱 더 선호된다.
- [0171] 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 동일한 의미를 갖고, 이는 페닐, 나프트-1-일, 나프트-2-일, 1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일, 페난트렌-9-일, 피렌-1-일, 피렌-2-일, 피렌-4-일, 트리페닐렌-1-일, 트리페닐렌-2-일, 디벤조[b,d]푸란-2-일, 디벤조[b,d]푸란-4-일, 벤조[b]티엔-3-일, 벤조[b]티엔-4-일, 벤조[b]티엔-5-일, 벤조[b]티엔-6-일, 벤조[b]티엔-7-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-4-일, 티안트렌-1-일 및 티안트렌-2-일로 구성된 그룹 중에서 선택된 화학식(Ia-1)의 화합물 및 화학식(IIa-1)의 구조 단위가 특히 선호된다. 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 독립적으로 페닐, 나프틸, 1,2-디하이드로아세나프틸레닐, 페난트레닐, 벤조[b]티에닐, 디벤조[b,d]티에닐 및 티안트레닐 중에서 선택되고, 구체적으로 페닐, 나프트-1-일, 나프트-2-일, 페난트렌-9-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-4-일, 티안트렌-1-일 및 티안트렌-2-일 중에서 선택된 화학식(Ia-1)의 화합물 및 화학식(IIa-1)의 구조 단위가 특별히 선호된다.
- [0172] 특별한 서브그룹(10.1)의 예는 모이어티 X, Z 기 및 변수  $R^y$ 의 조합이 하기 표 A의 1 내지 442행의 어느 하나에 정의된 바와 같고 여기에서 변수  $R^y$ 가 동일한 의미의 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 를 나타내는 화학식(Ia-1)의 화합물 및 화학식(IIa-1)의 구조 단위이다.

[0173] [표 A]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
1	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	수소
2	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	수소
3	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	수소
4	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	수소
5	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	수소
6	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	수소
7	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	수소
8	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	수소
9	SO <sub>2</sub>	페닐	수소
10	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	수소
11	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	수소
12	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	수소
13	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	수소
14	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	수소
15	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	수소
16	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	수소
17	S	페닐	수소
18	S	나프트-1-일	수소
19	S	나프트-2-일	수소
20	S	페난트렌-9-일	수소
21	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	수소
22	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	수소
23	S	티안트렌-1-일	수소
24	S	티안트렌-2-일	수소
25	단일 결합	페닐	수소
26	단일 결합	나프트-1-일	수소
27	단일 결합	나프트-2-일	수소
28	단일 결합	페난트렌-9-일	수소
29	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	수소
30	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	수소
31	단일 결합	티안트렌-1-일	수소
32	단일 결합	티안트렌-2-일	수소
33	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	2-하이드록시에틸
34	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
35	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
36	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
37	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸

[0174]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
38	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
39	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
40	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
41	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
42	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
43	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
44	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
45	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
46	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
47	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
48	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
49	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
50	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
51	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
52	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
53	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
54	SO <sub>2</sub>	페닐	2-하이드록시에틸
55	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
56	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
57	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
58	SO <sub>2</sub>	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
59	SO <sub>2</sub>	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
60	SO <sub>2</sub>	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
61	SO <sub>2</sub>	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
62	SO <sub>2</sub>	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
63	SO <sub>2</sub>	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
64	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
65	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
66	SO <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
67	SO <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
68	SO <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
69	SO <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
70	SO <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
71	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
72	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
73	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸

[0175]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
74	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
75	S	페닐	2-하이드록시에틸
76	S	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
77	S	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
78	S	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
79	S	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
80	S	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
81	S	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
82	S	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
83	S	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
84	S	1,2-디하이드로- 아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
85	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
86	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
87	S	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
88	S	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
89	S	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
90	S	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
91	S	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
92	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
93	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
94	S	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
95	S	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
96	SiO	페닐	2-하이드록시에틸
97	SiO	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
98	SiO	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
99	SiO	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
100	SiO	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
101	SiO	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
102	SiO	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
103	SiO	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
104	SiO	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
105	SiO	1,2-디하이드로- 아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
106	SiO	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
107	SiO	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
108	SiO	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
109	SiO	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸

	X	R' (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
110	S(O)	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
111	S(O)	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
112	S(O)	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
113	S(O)	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
114	S(O)	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
115	S(O)	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
116	S(O)	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
117	O	페닐	2-하이드록시에틸
118	O	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
119	O	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
120	O	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
121	O	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
122	O	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
123	O	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
124	O	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
125	O	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
126	O	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
127	O	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
128	O	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
129	O	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
130	O	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
131	O	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
132	O	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
133	O	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
134	O	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
135	O	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
136	O	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
137	O	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
138	CH <sub>2</sub>	페닐	2-하이드록시에틸
139	CH <sub>2</sub>	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
140	CH <sub>2</sub>	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
141	CH <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
142	CH <sub>2</sub>	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
143	CH <sub>2</sub>	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
144	CH <sub>2</sub>	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
145	CH <sub>2</sub>	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
146	CH <sub>2</sub>	피렌-4-일	2-하이드록시에틸

[0176]

	X	R <sup>i</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
147	CH <sub>2</sub>	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
148	CH <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
149	CH <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
150	CH <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
151	CH <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
152	CH <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
153	CH <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
154	CH <sub>2</sub>	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
155	CH <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
156	CH <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
157	CH <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
158	CH <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
159	N-페닐	페닐	2-하이드록시에틸
160	N-페닐	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
161	N-페닐	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
162	N-페닐	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
163	N-페닐	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
164	N-페닐	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
165	N-페닐	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
166	N-페닐	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
167	N-페닐	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
168	N-페닐	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
169	N-페닐	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
170	N-페닐	디벤조[ <i>bcd</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
171	N-페닐	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
172	N-페닐	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
173	N-페닐	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
174	N-페닐	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
175	N-페닐	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
176	N-페닐	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
177	N-페닐	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
178	N-페닐	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
179	N-페닐	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
180	N-나프트-1-일	페닐	2-하이드록시에틸
181	N-나프트-1-일	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
182	N-나프트-1-일	나프트-2-일	2-하이드록시에틸

[0177]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
183	N-나프트-1-일	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
184	N-나프트-1-일	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
185	N-나프트-1-일	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
186	N-나프트-1-일	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
187	N-나프트-1-일	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
188	N-나프트-1-일	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
189	N-나프트-1-일	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
190	N-나프트-1-일	디벤조[ <i>bd</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
191	N-나프트-1-일	디벤조[ <i>bd</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
192	N-나프트-1-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
193	N-나프트-1-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
194	N-나프트-1-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
195	N-나프트-1-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
196	N-나프트-1-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
197	N-나프트-1-일	디벤조[ <i>bd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
198	N-나프트-1-일	디벤조[ <i>bd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
199	N-나프트-1-일	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
200	N-나프트-1-일	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
201	N-나프트-2-일	페닐	2-하이드록시에틸
202	N-나프트-2-일	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
203	N-나프트-2-일	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
204	N-나프트-2-일	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
205	N-나프트-2-일	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
206	N-나프트-2-일	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
207	N-나프트-2-일	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
208	N-나프트-2-일	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
209	N-나프트-2-일	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
210	N-나프트-2-일	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
211	N-나프트-2-일	디벤조[ <i>bd</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
212	N-나프트-2-일	디벤조[ <i>bd</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
213	N-나프트-2-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
214	N-나프트-2-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
215	N-나프트-2-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
216	N-나프트-2-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
217	N-나프트-2-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸
218	N-나프트-2-일	디벤조[ <i>bd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸

[0178]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
219	N-나프트-2-일	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
220	N-나프트-2-일	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
221	N-나프트-2-일	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
222	N-페난트렌-9-일	페닐	2-하이드록시에틸
223	N-페난트렌-9-일	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
224	N-페난트렌-9-일	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
225	N-페난트렌-9-일	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
226	N-페난트렌-9-일	트리페닐렌-1-일	2-하이드록시에틸
227	N-페난트렌-9-일	트리페닐렌-2-일	2-하이드록시에틸
228	N-페난트렌-9-일	피렌-1-일	2-하이드록시에틸
229	N-페난트렌-9-일	피렌-2-일	2-하이드록시에틸
230	N-페난트렌-9-일	피렌-4-일	2-하이드록시에틸
231	N-페난트렌-9-일	1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일	2-하이드록시에틸
232	N-페난트렌-9-일	디벤조[ <i>b,d</i> ]푸란-2-일	2-하이드록시에틸
233	N-페난트렌-9-일	디벤조[ <i>b,d</i> ]푸란-4-일	2-하이드록시에틸
234	N-페난트렌-9-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-3-일	2-하이드록시에틸
235	N-페난트렌-9-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
236	N-페난트렌-9-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-5-일	2-하이드록시에틸
237	N-페난트렌-9-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-6-일	2-하이드록시에틸
238	N-페난트렌-9-일	벤조[ <i>b</i> ]티엔-7-일	2-하이드록시에틸

[0179]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
239	N-페난트렌-9-일	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
240	N-페난트렌-9-일	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
241	N-페난트렌-9-일	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
242	N-페난트렌-9-일	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
243	단일 결합	페닐	2-하이드록시에틸
244	단일 결합	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
245	단일 결합	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
246	단일 결합	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
247	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
248	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
249	단일 결합	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
250	단일 결합	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
251	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	메톡시카르보닐-메틸
252	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
253	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
254	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
255	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
256	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸
257	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸
258	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
259	SO <sub>2</sub>	페닐	메톡시카르보닐-메틸
260	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
261	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
262	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
263	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
264	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸
265	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸
266	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
267	S	페닐	메톡시카르보닐-메틸
268	S	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
269	S	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
270	S	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
271	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
272	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸

[0180]

	X	R' (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
273	S	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸
274	S	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
275	단일 결합	페닐	메톡시카르보닐-메틸
276	단일 결합	나프트-1-일	메톡시카르보닐-메틸
277	단일 결합	나프트-2-일	메톡시카르보닐-메틸
278	단일 결합	페난트렌-9-일	메톡시카르보닐-메틸
279	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	메톡시카르보닐-메틸
280	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	메톡시카르보닐-메틸
281	단일 결합	티안트렌-1-일	메톡시카르보닐-메틸
282	단일 결합	티안트렌-2-일	메톡시카르보닐-메틸
283	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
284	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
285	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
286	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
287	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
288	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
289	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
290	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
291	SO <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
292	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
293	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
294	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
295	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
296	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
297	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
298	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
299	S	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
300	S	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
301	S	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
302	S	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
303	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
304	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
305	S	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
306	S	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
307	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
308	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
309	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
310	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸

[0181]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
311	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
312	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
313	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
314	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
315	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
316	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
317	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
318	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
319	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
320	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
321	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
322	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
323	SO <sub>2</sub>	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
324	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
325	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
326	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
327	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
328	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
329	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
330	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
331	S	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
332	S	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
333	S	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
334	S	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
335	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
336	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
337	S	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
338	S	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
339	단일 결합	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
340	단일 결합	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
341	단일 결합	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
342	단일 결합	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
343	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
344	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
345	단일 결합	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
346	단일 결합	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
347	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
348	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸

[0182]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
349	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
350	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
351	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
352	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
353	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
354	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
355	SO <sub>2</sub>	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
356	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
357	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
358	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
359	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
360	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
361	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
362	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
363	S	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
364	S	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
365	S	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
366	S	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
367	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
368	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
369	S	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
370	S	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
371	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
372	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
373	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
374	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
375	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
376	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
377	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
378	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
379	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
380	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
381	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
382	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
383	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
384	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
385	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
386	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸

[0183]

	X	R' (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
387	SO <sub>2</sub>	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
388	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
389	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
390	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
391	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
392	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
393	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
394	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
395	S	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
396	S	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
397	S	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
398	S	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
399	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
400	S	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
401	S	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
402	S	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
403	단일 결합	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
404	단일 결합	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
405	단일 결합	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
406	단일 결합	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
407	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
408	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
409	단일 결합	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
410	단일 결합	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
411	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
412	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
413	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
414	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
415	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
416	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
417	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
418	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
419	SO <sub>2</sub>	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
420	SO <sub>2</sub>	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
421	SO <sub>2</sub>	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
422	SO <sub>2</sub>	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
423	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
424	SO <sub>2</sub>	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸

[0184]

	X	R <sup>y</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
425	SO <sub>2</sub>	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
426	SO <sub>2</sub>	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
427	S	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
428	S	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
429	S	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
430	S	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
431	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
432	S	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
433	S	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
434	S	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
435	단일 결합	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
436	단일 결합	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
437	단일 결합	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
438	단일 결합	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
439	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
440	단일 결합	디벤조[ <i>b,d</i> ]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
441	단일 결합	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
442	단일 결합	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸

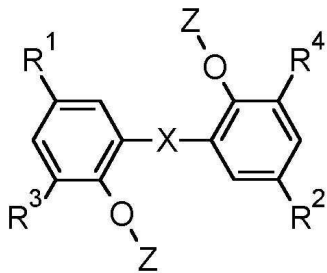
[0185]

[0186]

표 A에 언급된 화학식(Ia-1)의 화합물 및 화학식(IIa-1)의 구조 단위 중에서, 모이어티 X가 C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, S, 또는 단일 결합인 화학식(Ia-1) 및 (IIa-1)의 화합물 및 구조 단위가 특히 선호된다. 즉, 모이어티 X, Z 기 및 변수 R<sup>y</sup>의 조합이 상기 표 A의 1 내지 95 및 243 내지 442행의 어느 하나에 정의된 바와 같으며, 여기에서 변수 R<sup>y</sup>가 동일한 의미의 치환체 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>를 나타내는 화학식(Ia-1)의 화합물이 특히 선호된다.

[0187]

화학식(Ia)에서 Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup> 기는 둘 모두 Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>에 대해 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 의미 중의 하나를 갖는 Z이며, -O-Z 기는 둘 모두 모이어티 X에 대해 오르토 위치에 있는 실시 형태의 그룹(10)의 특별한 서브그룹(10.2)에서, 화학식(I)의 화합물은 화학식(Ia-2)의 화합물이다:



(Ia-2)

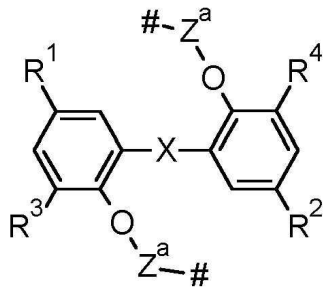
[0188]

[0189]

상기 식에서 X, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미를 가지며 여기에서 R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 특히 수소와 상이하다.

[0190]

실시 형태의 그룹(10)의 본 서브그룹(10.2)에서 화학식(II) 또는 (IIa)의 구조 단위는 화학식(IIa-2)의 구조 단위이다:



(IIa-2)

[0191]

[0192]

상기 식에서 #는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고 여기에서  $Z^a$ 는  $Z^{1a}$  및  $Z^{2a}$ 에 대해 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 의미 중의 하나를 가지며, 변수  $X$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 본 명세서에 정의된 의미, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미를 갖고 여기에서  $R^3$  및  $R^4$ 는 특히 수소와 상이하다.

[0193]

바람직하게, 화학식(Ia-2) 및 (IIa-2)에서 모이어티  $X$ 는 실시 형태의 그룹(5) 또는 그룹(5'')에 정의된 바와 같다. 따라서, 본 명세서에서 모이어티  $X$ 가 특히 단일 결합, O, N-페닐, N-나프틸, N-페난트릴,  $CH_2$ ,  $C(CH_3)_2$ ,  $CH(CH_3)$ , S, S(O) 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 더욱 특히 단일 결합, O, N-페닐, N-나프트-1-일, N-나프트-2-일, N-페난트렌-9-일,  $CH_2$ ,  $C(CH_3)_2$ ,  $CH(CH_3)$ , S 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 특히 단일 결합, O,  $CH_2$ ,  $C(CH_3)_2$ , S 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서, 구체적으로 단일 결합,  $C(CH_3)_2$ , S 및  $SO_2$ 로 구성된 그룹 중에서 선택된다. 이와 관련하여  $X$ 가 단일 결합인 것이 특히 선호된다.

[0194]

또한, 치환체  $R^1$  및  $R^2$ 가 서로 독립적으로 각각 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3) 및 (6.3a)에 정의된 바와 같고 여기에서 치환체  $R^3$  및  $R^4$ 가 서로 독립적으로 각각 실시 형태의 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a) 및 (7.5)에 정의된 바와 같은 화학식(Ia-2)의 화합물 및 화학식(IIa-2)의 구조 단위가 선호된다.

[0195]

치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 동일한 의미를 가지며 이는 특히 바람직한 것으로 본 명세서에 언급된 의미 중의 하나이고, 특히 실시 형태의 그룹(6), (6.1), (6.2), (6.3) 및 (6.3a) 및 그룹(7), (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.4a) 및 (7.5)에 정의된 의미 중의 하나인 화학식(Ia-2)의 화합물 및 화학식(IIa-2)의 구조 단위가 더욱 더 선호된다.

[0196]

치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 동일한 의미를 가지며 이는 페닐, 나프트-1-일, 나프트-2-일, 1,2-디하이드로-아세나프틸렌-5-일, 페난트렌-9-일, 피렌-1-일, 피렌-2-일, 피렌-4-일, 트리페닐렌-1-일, 트리페닐렌-2-일, 디벤조[b,d]푸란-2-일, 디벤조[b,d]푸란-4-일, 벤조[b]티엔-3-일, 벤조[b]티엔-4-일, 벤조[b]티엔-5-일, 벤조[b]티엔-6-일, 벤조[b]티엔-7-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-4-일, 티안트렌-1-일 및 티안트렌-2-일로 구성된 그룹 중에서 선택되고, 구체적으로 페닐, 나프트-1-일, 나프트-2-일, 페난트렌-9-일, 디벤조[b,d]티엔-2-일, 디벤조[b,d]티엔-4-일, 티안트렌-1-일 및 티안트렌-2-일 중에서 선택되는 화학식(Ia-2)의 화합물 및 화학식(IIa-2)의 구조 단위가 특히 선호된다.

[0197]

특별한 서브그룹(10.2)의 예는 모이어티  $X$  및 변수  $R^x$ 의 조합이 하기 표 B의 1 내지 64행의 어느 하나에 정의된 바와 같고 여기에서 변수  $R^y$ 가 동일한 의미의 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 를 나타내는 화학식(Ia-2)의 화합물 및 화학식(IIa-2)의 구조 단위이다.

[0198] [표 B]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
1	단일 결합	페닐	수소
2	단일 결합	나프트-1-일	수소
3	단일 결합	나프트-2-일	수소
4	단일 결합	페난트렌-9-일	수소
5	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	수소
6	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	수소
7	단일 결합	티안트렌-1-일	수소
8	단일 결합	티안트렌-2-일	수소
9	단일 결합	페닐	2-하이드록시에틸
10	단일 결합	나프트-1-일	2-하이드록시에틸
11	단일 결합	나프트-2-일	2-하이드록시에틸
12	단일 결합	페난트렌-9-일	2-하이드록시에틸
13	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	2-하이드록시에틸
14	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	2-하이드록시에틸
15	단일 결합	티안트렌-1-일	2-하이드록시에틸
16	단일 결합	티안트렌-2-일	2-하이드록시에틸
17	단일 결합	페닐	메톡시카르보니-메틸
18	단일 결합	나프트-1-일	메톡시카르보니-메틸
19	단일 결합	나프트-2-일	메톡시카르보니-메틸
20	단일 결합	페난트렌-9-일	메톡시카르보니-메틸
21	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	메톡시카르보니-메틸
22	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	메톡시카르보니-메틸
23	단일 결합	티안트렌-1-일	메톡시카르보니-메틸
24	단일 결합	티안트렌-2-일	메톡시카르보니-메틸
25	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
26	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
27	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
28	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
29	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
30	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
31	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
32	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)페닐)메틸
33	단일 결합	페닐	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
34	단일 결합	나프트-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
35	단일 결합	나프트-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
36	단일 결합	페난트렌-9-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
37	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
38	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸

[0199]

	X	R <sup>1</sup> (R <sup>1</sup> = R <sup>2</sup> = R <sup>3</sup> = R <sup>4</sup> )	Z
39	단일 결합	티안트렌-1-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
40	단일 결합	티안트렌-2-일	(3-(하이드록시메틸)페닐)메틸
41	단일 결합	페닐	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
42	단일 결합	나프트-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
43	단일 결합	나프트-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
44	단일 결합	페난트렌-9-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
45	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
46	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
47	단일 결합	티안트렌-1-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
48	단일 결합	티안트렌-2-일	(4-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
49	단일 결합	페닐	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
50	단일 결합	나프트-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
51	단일 결합	나프트-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
52	단일 결합	페난트렌-9-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
53	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
54	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
55	단일 결합	티안트렌-1-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
56	단일 결합	티안트렌-2-일	(5-(하이드록시메틸)-1-나프틸)메틸
57	단일 결합	페닐	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
58	단일 결합	나프트-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
59	단일 결합	나프트-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
60	단일 결합	페난트렌-9-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
61	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
62	단일 결합	디벤조[ <i>bcd</i> ]티엔-4-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
63	단일 결합	티안트렌-1-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸
64	단일 결합	티안트렌-2-일	(6-(하이드록시메틸)-2-나프틸)메틸

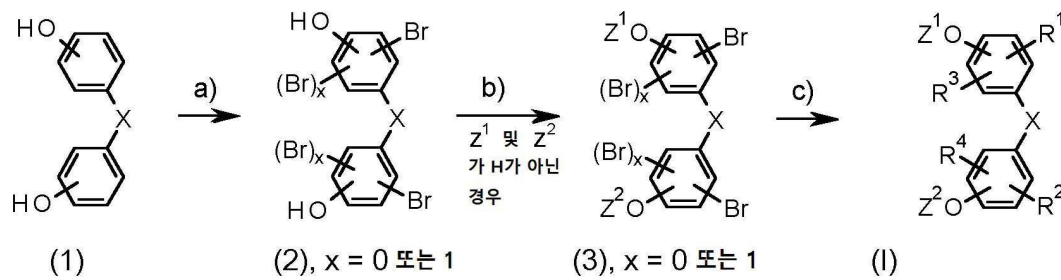
[0200]

[0201]

X, Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 각각 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나를 갖는 화학식(I)의 화합물은, 예를 들어, 하기 반응식 1에 나타낸 방법과 유사하게 제조할 수 있으며, 이는 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 동일한 의미를 갖고 Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 본 명세서에 정의된 바와 같은 -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, Alk-C(O)OR<sup>x</sup> 및 -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 중에서 선택된 동일한 그룹인 화합물(I)의 경우에 특히 적합하다. Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 둘 모두 수소인 상응하는 화합물(I)은, 예를 들어, 단계 b)가 생략되고 화합물(2)가 직접 반응 단계 c)에 적용되도록 반응식 1의 공정을 변형시킴에 의해 얻을 수 있다.

[0202]

[반응식 1]



[0203]

[0204]

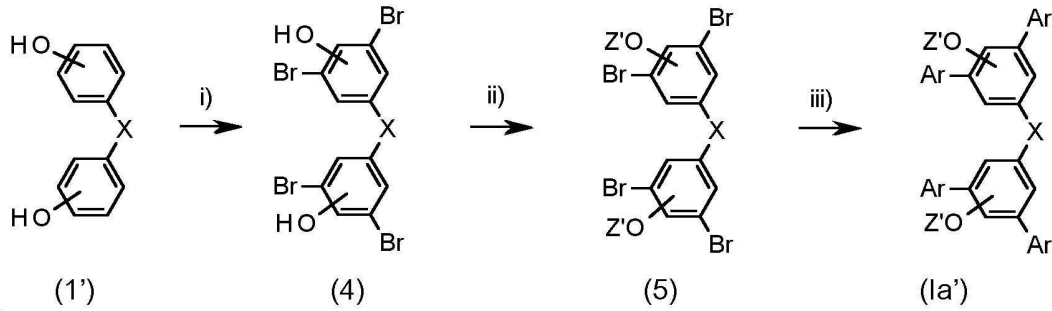
반응식 1의 단계 a), b) 및 c)에서 각각의 변환은 반응식 2a, 2b, 2c, 3, 4a, 4b, 5, 6a, 6b, 6c, 7a 및 7b와 관련하여 하기 본 명세서에 기재된 공정들의 반응 단계의 하나 이상을 채용함에 의해, 이들 반응 단계의 명백한 변형에 의해, 또는 대안적으로 유기 제조 화학에 잘 확립된 방법, 또는 이의 조합에 의해 달성될 수 있다.

[0205]

R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 동일한 의미를 갖는, 즉, 본 명세서에 정의된 바와 같은 임의로 치환된 모노- 또는 폴리사이클릭 (헤트)아릴 중에서 선택된 동일한 치환체 Ar이고 Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 본 명세서에 정의된 바와 같은 -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk-C(O)OR<sup>x</sup> 및 -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 중에서 선택된 동일 Z' 기인, 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식(Ia)의 화합물인 화학식(Ia')의 화합물은, 예를 들어, 하기 반응식 2a에 도시된 반응과 유사하게 제조할 수

있다.

[반응식 2a]



초기 단계 i)에서 하이드록실기가 모이어티 X에 대해 각각 오르토 위치 또는 파라 위치에 놓여 있는 비스페놀 (1')은 적합한 브롬화제와 반응하여 상응하는 테트라브롬화 유도체(4)를 제공한다. 적합한 브롬화제는 특히 브롬 원소이며, 이는 전형적으로 비스페놀(1')에 대해 3- 내지 15-배 몰과량으로 사용된다. 단계 ii)에서 테트라브로모 비스페놀(4)은 염기, 예를 들어 옥소 염기, 예컨대 포타슘 카르보네이트와 같은 알칼리 카르보네이트의 존재 하에 시약 Y-Z'(여기에서 Y는 적합한 이탈기, 예컨대 클로라이드, 브로마이드, 요오다이드, 토실레이트 또는 메시틸레이트기이고 Z'는 -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk-C(O)OR<sup>x</sup> 또는 -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup>임)와 반응시켜 화합물(5)로 변환될 수 있다. 반응식 2a의 단계 iii)에서의 변환은 테트라브로마이드(5)를 전이금속 촉매, 특히 팔라듐 촉매의 존재하에 화학식 Ar-B(OH)<sub>2</sub>(여기에서 Ar은 치환체 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>에 대해 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나를 가짐)의 보론산 또는 상기 보론산의 에스테르 또는 무수물, 특히 이의 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 에스테르로 처리함에 의해 스즈키 커플링 반응을 통해 달성할 수 있다. 적합한 팔라듐 촉매는 특히 적어도 하나의 트리-치환된 포스핀 리간드, 예를 들어, 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 및 테트라키스(트리톨릴포스핀) 팔라듐을 보유하는 것이다. 빈번하게, 팔라듐 촉매는 적합한 팔라듐 전구체, 예를 들어, 팔라듐(II) 아세테이트(Pd(OAc)<sub>2</sub>) 및 특히 트리아릴-포스핀과 같은 적합한 포스핀 리간드, 예를 들어, 트리페닐포스핀 및 트리톨릴포스핀으로부터 원위치 제조된다. 보통, 반응은 염기, 특히 옥소 염기, 예컨대 알칼리 카르보네이트 또는 알칼리 토류 카르보네이트, 예를 들어, 포타슘 카르보네이트의 존재하에 수행된다.

화합물(5)의 Z' 기가 하이드록실에틸인 경우, 반응식 2a의 반응 단계 ii)에 나타난 변환은 시약 Y-Z'로서 2-클로로-에탄올을 사용하거나, 대안적으로 시약 Y-Z' 대신에 에틸렌 카르보네이트 또는 에틸렌 옥사이드, 특히 에틸렌 카르보네이트를 사용하여 수행될 수 있다. 2-클로로-에탄올, 에틸렌 카르보네이트 또는 에틸렌 옥사이드를 사용하는 이러한 변환은 염기, 예를 들어, 옥소 염기, 예컨대 포타슘 카르보네이트와 같은 알칼리 카르보네이트의 존재하에 실행된다.

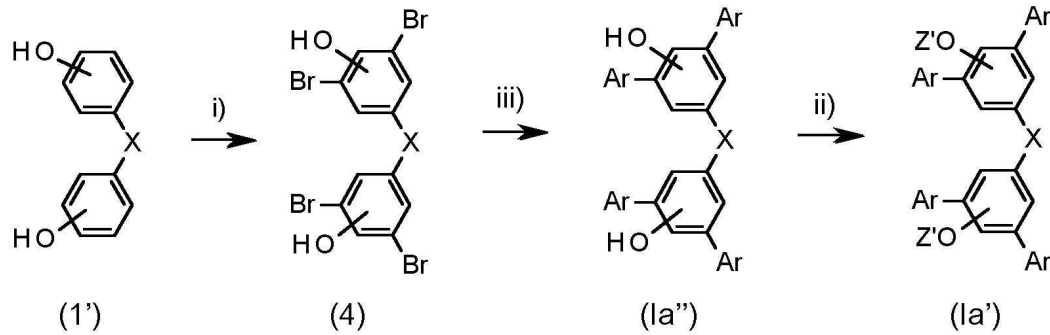
추가로 예로서, 화합물(5)의 Z' 기가 -Alk-C(O)OR<sup>x</sup>인 경우, 반응식 2a의 반응 단계 ii)에 나타난 변환은 시약 Y-Z'로서 Hal-Alk-C(O)OR<sup>x</sup>(여기에서 Hal은 할로젠, 예컨대 특히 브롬 또는 염소임)를 사용하여 예를 들어 문헌 [T. Ema, J. Org. Chem., 2010, 75(13), 4492-4500 또는 T. Ema et al., Org. Lett., 2006, 8, 17, 3773-3775]에 기재된 방법과 유사하게 수행될 수 있다. 경우에 따라, 이와 같이 도입된 에스테르기 O-Alk-C(O)R<sup>x</sup>는 이후 에스테르 가수분해의 주지된 방법을 사용하여 상응하는 산기 O-Alk-C(O)OH로 변환될 수 있다.

반응식 2a의 단계 i)에 대한 적합한 반응 조건 및 적합한 시약은, 예를 들어, 제US 3,363,007호, 제US 5,208,389호, 제JP H049346호, 제CN 101100416호, 제US 6,147,264호, 문헌[L. Kumar et al., Organic Process Research & Development, 2010, 14(1), 174-179, S. Dev et al., Polymer, 2017, 133, 20-29, R.-N. Wang et al., Hebei Gongye Daxue Xuebao, 2012, 41(3), 42-45, J. Lu et al., Crystal Growth & Design, 2011, 11(8), 3551-3557, K.-B. Oh et al., Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 2008, 18(1), 104-108, Y. Xin et al., Huaxue Yanjiu Yu Yingyong, 2006, 18(11), 1346-1348, Q. Yang et al., China, CN 111072529, CN 103992209, CN102898337, 및 V. A. Orlova et al., Trudy Vsesoyuznogo Instituta Gel'mintologii imeni K. I. Skryabina, 1971, 18, 201-205]에서 취할 수 있고; 반응식 2a의 단계 ii)에 대해서는, 예를 들어, 제JP S50105638(A)호, 제JP S5846034 (A)호, 제JPS5251351 (A)호, Imai, Hirokazu; et al.

Japan, 제JP 2013249373호, 제JP 2013249374호, 제JP 2008143854호, 및 제JP H0338563(A)호에서 취할 수 있으며; 반응식 2a의 단계 iii)에 대해서는 문헌[A. Suzuki et al., Chem. Rev., 1995, 95, 2457-2483; N. Zhe et al., J. Med. Chem., 2005, 48(5), 1569-1609; Young et al., J. Med. Chem., 2004, 47(6), 1547-1552; C. Slee et al., Bioorg. Med. Chem. Lett., 2001, 9, 3243-3253; T. Zhang et al., Tetrahedron Lett., 2011, 52, 311-313; S. Bourrain et al., Synlett, 2004, 5, 795-798; 및 B. Li et al., Europ. J. Org. Chem., 2011, 3932-3937]에서 취할 수 있다.

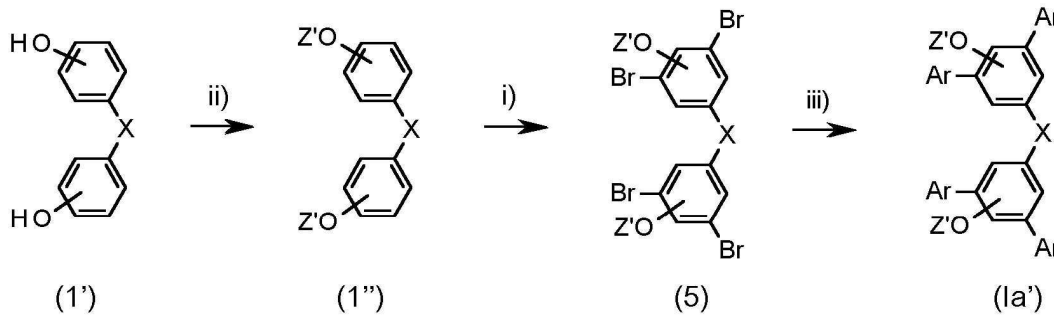
[0212] 대안적으로, 화학식(Ia')의 화합물을 제조하기 위하여, 반응식 2a의 단계 i), ii) 및 iii)의 순서는 하기 반응식 2b 및 2c에 따라 바뀔 수 있다.

[0213] [반응식 2b]



[0214]

[0215] [반응식 2c]

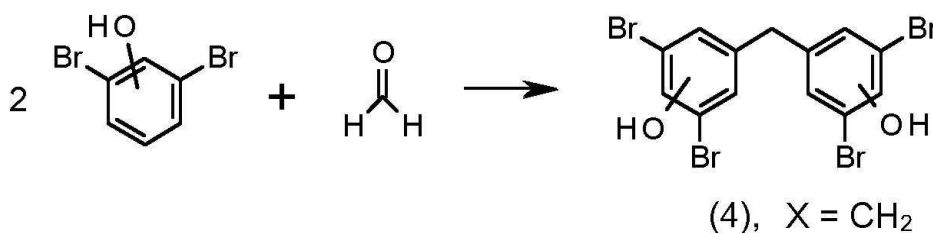


[0216]

[0217] 반응식 2b 및 2c에 따른 반응 단계 i), ii) 및 iii)의 반응은 반응식 2a의 단계 i), ii) 및 iii)에 대해 기재된 것과 동일하거나 매우 유사한 반응 조건을 사용하여 수행될 수 있다. 반응식 2b의 제2 반응 단계에서 얻어진 화학식(Ia'')의 화합물은 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 모두 반응식 2a와 관련하여 정의된 바와 같은 동일 치환체 Ar이고 Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>는 둘 모두 수소인, 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식(Ia)의 화합물이다. 따라서, 반응식 2b)에 따른 단계 i) 및 iii)의 순서는 이러한 본 발명의 화합물(Ia)를 제조하는데 적합하다.

[0218] 반응식 2a 및 2b에서의 단계 i)에 대한 대안으로서, X가 모이어티 CH<sub>2</sub>인 화학식(4)의 테트라브로모화 비스페놀은 또한 하기 반응식 3에 도시한 바와 같이 2,6-디브로모페놀 또는 2,4-디브로모페놀을 포름알데히드와 축합시켜 제조할 수 있다.

[0219] [반응식 3]



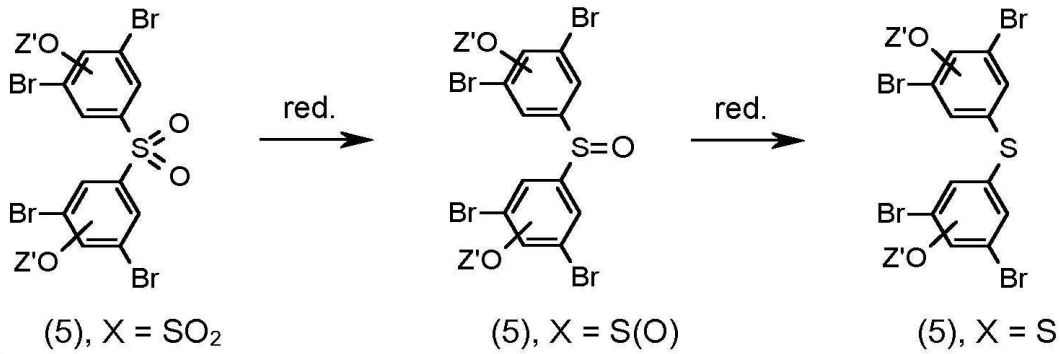
[0220]

[0221] 본 반응은 문헌[K.-W. Chi et al., Journal of the Korean Chemical Society, 2003, 47(4), 412-416]에 기재

되어 있다.

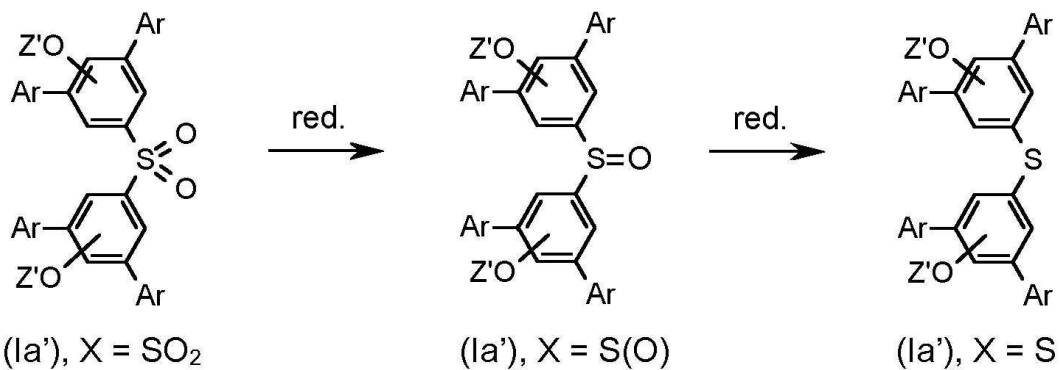
[0222] 반응식 2a 또는 2c에 따른 합성에 대한 대안으로서, 본 명세서에 정의된 바와 같이 X가 S(O)이고 Z'가 -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk-C(O)OR<sup>x</sup> 또는 -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup>인 화학식(5)의 테트라브로마이드는 X가 SO<sub>2</sub>인 상응하는 화합물(5)를 환원시켜 제조할 수도 있다. 결국, X가 S(O)인 화학식(5)의 테트라브로마이드가 상응하는 설파이드로 환원됨으로써 X가 S인 화합물(5)에 대한 대안적인 접근법을 제공할 수 있다. 마찬가지로, X가 S(O) 또는 S인 화합물(Ia')는 또한 위치 X에서 SO<sub>2</sub> 또는 S(O) 모이어티를 갖는 상응하는 화합물(Ia')의 환원을 통해 접근가능하다. 이들 변환이 하기 반응식 4a 및 4b에 요약된다.

[0223] [반응식 4a]



[0224]

[0225] [반응식 4b]

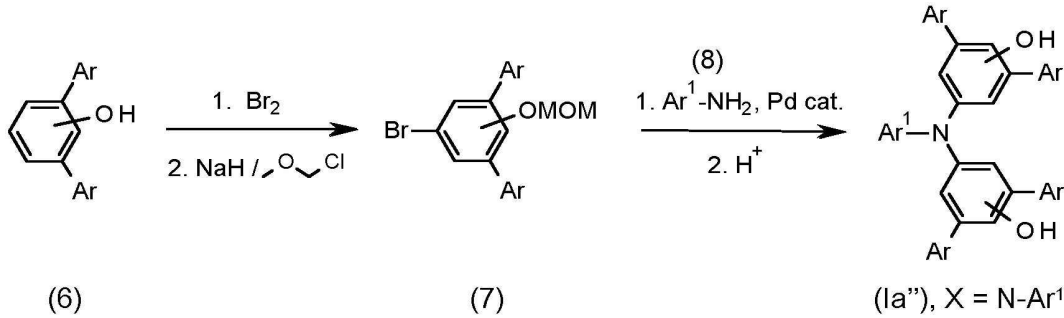


[0226]

[0227] 반응식 4a 및 4b에 나타난 환원 변환은 각각 설편을 설편사이드로 그리고 설편사이드를 설파이드로 변환시키기 위해 당업계에 잘 확립되어 있는 방법을 사용하여 수행될 수 있다. 예를 들어, 설편사이드는 4-클로로벤젠디아조늄 테트라플루오로보레이트와의 초기 반응에 이어 소듐 보로하이드라이드로 환원시켜 각각의 설편사이드로 변환될 수 있는 한편, 설편사이드는 리튬 알루미늄 하이드리드 또는 황 원소를 사용한 환원에 의해 각각의 설파이드로 변환될 수 있다.

[0228] X가 N-Ar<sup>1</sup>인 화학식(Ia-1)의 화합물을 제조하기 위한 반응식 2a 내지 2c에 따른 방법에 대한 대안은 하기 반응식 5에 나타난 합성이다. 2,6-디아릴 페놀 또는 2,4-디아릴 페놀(6)이 먼저 브롬화되고 이어서 이의 하이드록실기가 보호성 메톡시메틸(MOM) 에테르기로 변환되어 중간체(7)가 제공된 다음, 이는 팔라듐 촉매 존재하에 아릴 아민(8)과 반응한다. 최종 탈보호화에 의해 X가 N-Ar<sup>1</sup>(여기에서 Ar<sup>1</sup>은 본 명세서에 정의된 바와 같음)인 화합물(Ia'')이 제공되며, 이는 반응식 2b에 따라 각각의 화학식(Ia')의 화합물로 변환될 수 있다. 유사한 방법이 문헌[Y. Matsuta et al., Chemistry - An Asian Journal, 2017, 12(15), 1889-1894]에 기재되어 있다.

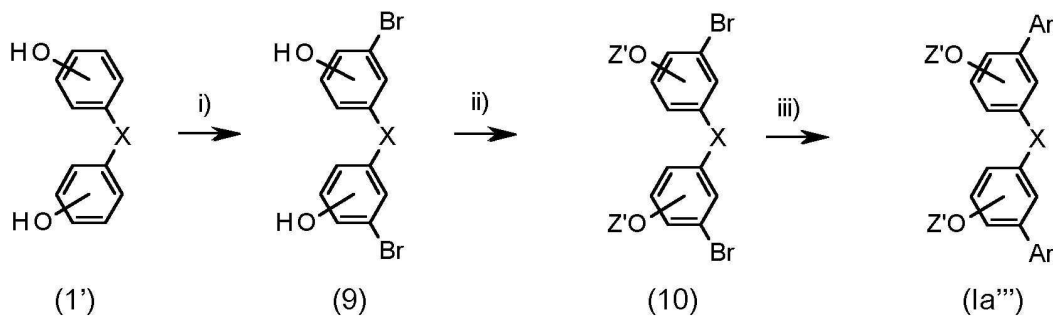
[0229] [반응식 5]



[0230]

[0231] 본 발명의 화학식(Ia)의 화합물(여기에서 X는 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나를 갖고, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 둘 모두 수소이며, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 본 명세서에 정의된 바와 같은 임의로 치환된 모노- 또는 폴리사이클릭 (헤트)아릴 중에서 선택된 동일 치환체 Ar이고, Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>는 본 명세서에 정의된 바와 같은 -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk-C(O)OR<sup>x</sup> 및 -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup> 중에서 선택된 동일 Z' 기입)인 화학식(Ia'')의 화합물은, 예를 들어, 하기 반응식 6a에 도시된 방법과 유사하게 제조될 수 있다.

[0232] [반응식 6a]



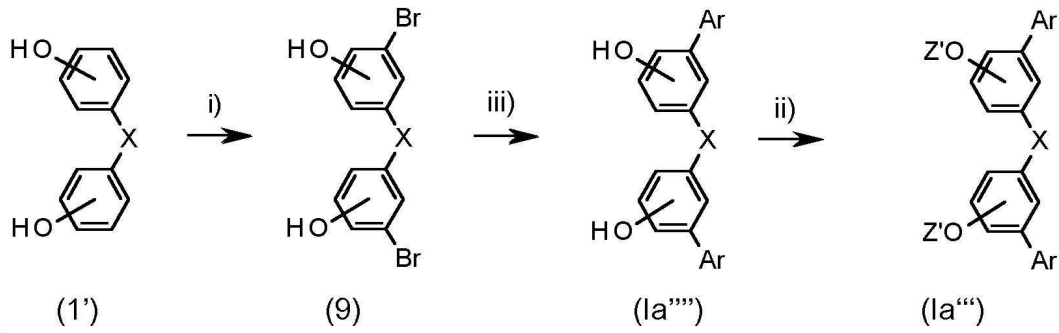
[0233]

[0234] 반응식 6a의 반응 단계 i), ii) 및 iii)은 원칙적으로 반응식 2a에 도시된 화학식(Ia')의 화합물의 제조와 관련하여 상기 기재된 단계 i) 내지 iii)과 유사하게 실행될 수 있다. 그러나, 반응식 2a의 단계 i)의 것과 달리, 본 단계 i)의 브롬화는 전형적으로 비스페놀(1')에 대해 1.5- 내지 5-배 과량의 브롬을 사용하여 수행되며, 이는 상기 반응식 2a의 방법과 관련하여 정의된 바와 같다.

[0235] 반응식 6a의 단계 i)에 대한 적합한 반응 조건 및 적합한 시약은 반응식 2a에 도시된 방법과 관련하여 상기 열거된 선행기술 문헌으로부터 유래될 수 있다. 이와 관련하여 반응식 6a의 단계 ii)에 대한 부가적인 구체적 정보를, 예를 들어, 제CA 663542호, 제US 4,093,555호; 제GB, 1 489 659 A호로부터 취할 수 있고; 반응식 6a의 단계 iii)에 대한 정보를 제JP H02111743(A)호, 제JP H08208775(A)호, 및 문헌[S. R. Turner et al., High Performance Polymers, 2005, 17(3), 361-376]으로부터 취할 수 있다.

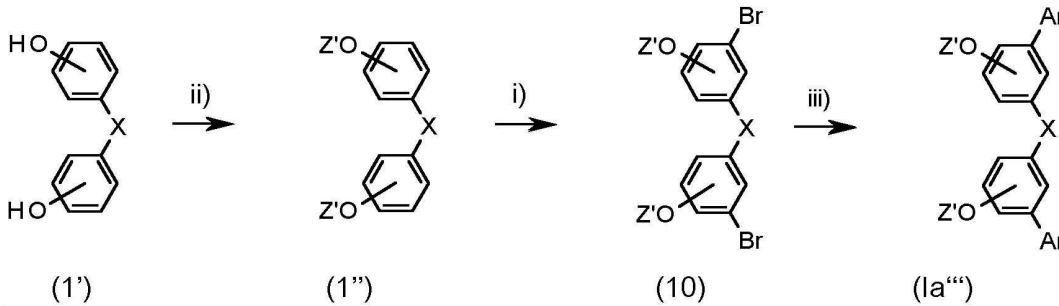
[0236] 대안적으로 화학식(Ia'')의 화합물은 반응식 6a에 나타난 단계 i), ii) 및 iii)의 순서를 재배열하여 하기 반응식 6b 및 6c에 따라 제조될 수 있다.

[0237] [반응식 6b]



[0238]

[0239] [반응식 6c]

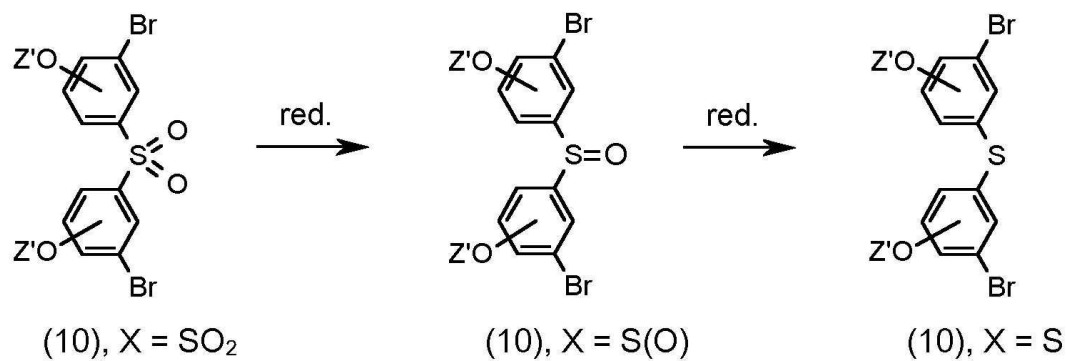


[0240]

[0241] 반응식 6b 및 6c에 따른 반응 단계 i), ii) 및 iii)은 반응식 6a의 단계 i), ii) 및 iii)에 대해 기재된 것과 동일하거나 매우 유사한 반응 조건을 사용하여 수행될 수 있다. 반응식 6b의 제2 반응 단계에서 얻어진 화학식 (Ia''')의 화합물은 R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 둘 모두 수소이고 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>가 상기 정의된 바와 같은 동일 치환체 Ar이며, Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 둘 모두 수소인 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식 (Ia)의 화합물이다. 따라서, 반응식 6b)에 따른 단계 i) 및 iii)의 순서는 이러한 본 발명의 화합물(Ia)을 제조하는데 적합하다.

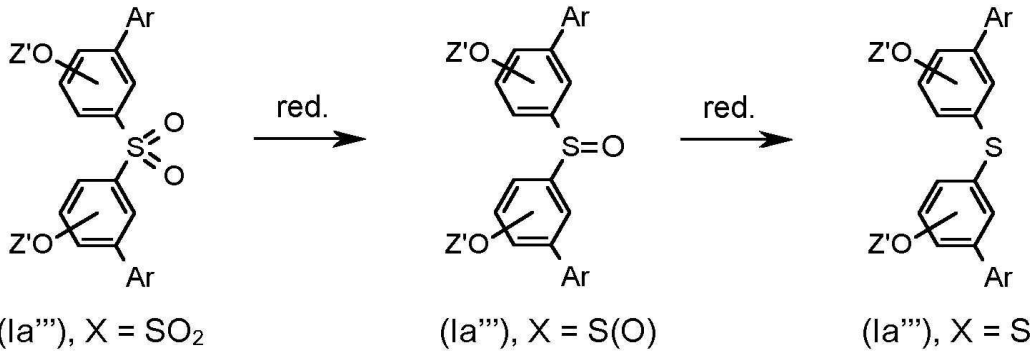
[0242] 반응식 6a 또는 6c에 따른 합성의 대안으로서, X가 S(O)이고 Z'가 본 명세서에 정의된 바와 같은 -Alk-OH, -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-CH<sub>2</sub>-OH, -Alk-C(O)OR<sup>x</sup> 또는 -CH<sub>2</sub>-Ar<sup>2</sup>-C(O)OR<sup>x</sup>인 화학식(10)의 디브로마이드는 또한 X가 SO<sub>2</sub>인 상응하는 화합물(10)을 환원시켜 제조될 수 있다. 결국, X가 S(O)인 화학식(10)의 비스페놀 화합물은 상응하는 설파이드로 환원될 수 있고, 따라서 X가 S인 화합물(10)에 대한 대안적인 접근법을 제공하게 된다. 마찬가지로, X가 S(O) 또는 S인 화합물(Ia''')은 또한 위치 X에서 SO<sub>2</sub> 또는 S(O) 모이어티를 갖는 상응하는 화합물(Ia'')의 환원을 통해 접근가능하다. 이들 변환이 하기 반응식 7a 및 7b에 요약된다.

[0243] [반응식 7a]



[0244]

[0245] [반응식 7b]



[0246]

[0247]

반응식 7a 및 7b에 나타난 환원 변환은 각각 설피온을 설피록사이드로 그리고 설피록사이드를 설피아이드로 변환하기 위해 당업계에서 잘 확립된 방법, 예컨대 반응식 4a 및 4b의 방법과 관련하여 상기 기재된 것들을 사용하여 수행될 수 있다.

[0248]

X가 모이어티  $CH_2$ 인 화학식(9)의 디브로모 비스페놀, 및 X가  $N-Ar^1$ 인 화학식(Ia'') 및 (Ia''')의 화합물을 제조하기 위한 대안적 방법은 출발 화합물로서 각각 2,6-디브로모페놀 대신에 2- 또는 4-브로모페놀 그리고 2,6-디아릴 페놀(6) 대신에 2- 또는 4-아릴 페놀을 사용함으로써 반응식 3 및 5와 관련하여 상기 기재된 방법으로부터 쉽게 유래될 수 있다.

[0249]

추가로 화학식(I)의 화합물은 상기 기재된 반응의 명백한 변형 및 제조 유기 화학에 잘 확립된 방법과의 조합을 채용함으로써 제조될 수 있다.

[0250]

상기 반응식 1, 2a, 2b, 2c, 3, 4a, 4b, 5, 6a, 6b, 6c, 7a 및 7b에 기재된 화합물을 제조하는 합성의 개별적 단계에서 얻어지는 반응 혼합물은 보통 관용적인 방식, 예를 들어, 물과의 혼합, 상 분리, 및 경우에 따라, 세척에 의한 비정제 생성물의 정제, 크로마토그래피 또는 결정화에 의해 후처리된다. 일부 경우에 중간체는 무색 또는 연갈색의 점성 오일의 형태로 얻어지며, 이는 휘발물이 제거되거나 적당히 상승된 온도에서 감압하에 정제된다. 중간체가 고체로 얻어지면, 재결정화 또는 세척 방법, 예컨대 슬러리 세척에 의해 정제가 달성될 수 있다.

[0251]

화학식(I)의 화합물을 제조하기 위해 상기 반응식 1, 2a, 2b, 2c, 3, 4a, 4b, 5, 6a, 6b, 6c, 7a 및 7b에 나타난 합성에서 사용된 출발 화합물은 구매가능하거나 당업계에 공지된 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0252]

상기 언급한 바와 같이, 본 발명의 화합물은 고순도로 얻어질 수 있으며, 이는 휘발물을 제외하고는 화학식(I)의 화합물과 상이한 상당량의 유기 불순물을 함유하지 않는 생성물이 얻어짐을 의미한다. 보통, 화학식(I)의 화합물의 순도는 비-휘발성 유기물을 기준으로 적어도 95%, 특히 적어도 98% 및 특히 적어도 99%이며, 즉, 생성물은 최대 5%, 특히 최대 2% 및 특히 최대 1%의 화학식(I)의 화합물과 상이한 비-휘발성 불순물을 함유한다.

[0253]

용어 "휘발물"은 표준 압력( $10^5$  Pa)에서 200 °C 미만의 비점을 갖는 유기 화합물을 지칭한다. 결과적으로, 비-휘발성 유기물은 표준 압력에서 200 °C를 초과하는 비점을 갖는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다.

[0254]

화학식(I)의 화합물 및 마찬가지로 이들의 용매화물이 종종 결정질 형태로 얻어질 수 있다는 것은 본 발명의 특별한 이점이다. 결정질 형태에서 화학식(I)의 화합물은 순수 형태 또는 물 또는 유기 용매와의 용매화물의 형태로 존재할 수 있다. 따라서, 본 발명의 특별한 태양은 본질적으로 결정질 형태로 존재하는 화학식(I)의 화합물에 관한 것이다. 특히, 본 발명은 화학식(I)의 화합물이 용매 없이 존재하는 결정질 형태 및 결정이 혼입된 용매를 함유하는 화학식(I)의 화합물의 결정질 용매화물에 관한 것이다.

[0255]

화학식(I)의 화합물 및 마찬가지로 이들의 용매화물이 종종 관용적인 유기 용매로부터 쉽게 결정화될 수 있다는 것은 본 발명의 특별한 이점이다. 이는 화학식(I)의 화합물의 효율적인 정제를 허용한다. 화학식(I)의 화합물 또는 이들의 용매화물을 결정화하기 위한 적합한 유기 용매로는 방향족 탄화수소, 예컨대 톨루엔 또는 자일렌, 지방족 케톤, 특히 3 내지 6개의 탄소 원자를 갖는 케톤, 예컨대 아세톤, 메틸 에틸 케톤, 메틸 이소프로필 케톤 또는 디에틸 케톤, 지방족 및 지환족 에테르, 예컨대 디에틸 에테르, 디프로필 에테르, 메틸 이소부틸 에테르, 메틸 tert-부틸 에테르, 에틸 tert-부틸 에테르, 디옥산 또는 테트라하이드로푸란, 지방족-방향족 에테르,

예컨대 아니솔, 및 1 내지 4개의 탄소 원자를 갖는 지방족 알코올, 예컨대 메탄올, 에탄올 또는 이소프로판올, 및 이의 혼합물을 들 수 있으나 이로 제한되지 않는다.

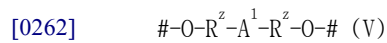
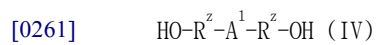
[0256] 대안적으로, 화학식(I)의 화합물 및 마찬가지로 이들의 용매화물은 이들 화합물의 원(raw) 생성물을 정제하기 위한 다른 단순하고 효율적인 방법, 예컨대 특히 화학식(I)의 화합물을 제조하기 위한 변환 직후 얻어진 원 고체의 슬러리 세척을 채용함으로써 정제된 형태로 얻을 수 있다. 슬러리 세척은 전형적으로 주변 온도 또는 보통 약 30 내지 90 °C, 특히 40 내지 80 °C의 상승된 온도에서 수행된다. 이때 적합한 유기 용매는 원칙적으로 화학식(I)의 화합물을 결정화하는데 적합한 것으로 상기 열거된 것, 예컨대 특히 언급된 방향족 탄화수소, 지방족 케톤 및 지방족 에테르, 예를 들어, 톨루엔, 메틸 에틸 케톤 및 메틸 tert-부틸 에테르와 동일하다.

[0257] 이에 따라, 본 명세서에 정의된 바와 같은 열가소성 중합체, 특히 폴리카르보네이트의 제조에 사용되는 화학식(I)의 화합물은 고수율 및 고순도로 쉽게 제조되고 얻어질 수 있다. 특히, 화학식(I)의 화합물은 결정질 형태로 얻어질 수 있으며, 이는 광학 수지의 제조에 요구되는 정도로 효율적인 정제를 허용한다. 특히, 이들 화합물은 높은 굴절률 및 또한 낮은 헤이즈를 제공하는 순도로 얻어질 수 있으며, 이는 광학 디바이스를 만드는 광학 수지의 제조에 사용함에 있어서 특히 중요하다. 결론적으로, 화학식(I)의 화합물은 광학 수지의 제조에 단량체로서 특히 유용하다.

[0258] 당업자는 사용된 단량체의 화학식(I)이 열가소성 수지에 포함되는 구조 단위의 화학식(II)에 상응함을 쉽게 이해할 것이다. 마찬가지로, 사용된 단량체의 화학식(Ia), (Ia-1) 및 (Ia-2)는 각각 열가소성 수지에 포함되는 구조 단위의 화학식(IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2)에 상응한다.

[0259] 당업자는 또한 화학식(II), (IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2)의 구조 단위가 열가소성 수지의 중합체쇄 내부의 반복 단위임을 이해할 것이다.

[0260] 각각 화학식(II), (IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2)의 구조 단위에 부가하여, 열가소성 수지는 이와 상이한 구조 단위를 가질 수 있다. 바람직한 실시 형태에서, 이들 추가의 구조 단위는 화학식(V)의 구조 단위를 초래하는 화학식(IV)의 방향족 단량체에서 유래된다:

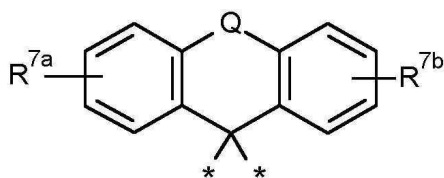


[0263] 상기 식에서

[0264] #는 주변 구조 단위에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0265]  $A^1$ 은 적어도 2개의 벤젠 환을 보유하는 폴리사이클릭 라디칼이며, 여기에서 벤젠 환은 A에 의해 연결되고/되거나 서로 직접적으로 융합되고/되거나 비-벤젠 카르보사이클에 의해 융합될 수 있고, 여기에서  $A^1$ 은 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 라디칼  $R^{aa}$ 에 의해 치환되며, 이는 할로젠,  $C_1-C_6$ -알킬,  $C_5-C_6$ -사이클로알킬 및 페닐로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

[0266] A는 단일 결합, O, C=O, S,  $SO_2$ ,  $CH_2$ , CH-Ar,  $CAr_2$ ,  $CH(CH_3)$ ,  $C(CH_3)_2$  및 화학식(A')의 라디칼로 구성된 그룹 중에서 선택되며:



(A')

[0267]

[0268] 상기 식에서

[0269] Q는 단일 결합, O, NH, C=O,  $CH_2$  또는  $CH=CH$ 를 나타내고;

[0270]  $R^{7a}$ ,  $R^{7b}$ 는 서로 독립적으로 수소, 불소, CN, R, OR,  $CH_kR_{3-k}$ ,  $NR_2$ , C(O)R 및 C(O)NH<sub>2</sub>로 구성된 그룹 중에서 선택

되며, 여기에서 R은 본 명세서에 정의된 바와 같고 k는 0, 1, 2 또는 3이며;

[0271]

\*는 벤젠 환에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0272]

Ar은 환 구성원 원자로서 6 내지 26개의 탄소 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 아릴, 및 환 구성원인 총 5 내지 26개의 원자를 갖는 모노- 또는 폴리사이클릭 헤테아릴로 구성된 그룹 중에서 선택되며, 여기에서 헤테아릴의 이들 환 구성원 원자의 1, 2, 3 또는 4개는 질소, 황 및 산소 중에서 선택되는 한편, 헤테아릴의 이들 환 구성원 원자의 나머지는 탄소 원자이고, 여기에서 Ar은 비치환되거나 1, 2 또는 3개의 라디칼 R<sup>ab</sup>에 의해 치환되며, 이는 할로젠, 페닐 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬로 구성된 그룹 중에서 선택되고;

[0273]

R<sup>z</sup>는 단일 결합, Alk<sup>1</sup>, O-Alk<sup>2</sup>-, O-Alk<sup>2</sup>-[O-Alk<sup>2</sup>]<sub>p</sub>- 또는 O-Alk<sup>3</sup>-C(O)-이며 여기에서 O는 A<sup>1</sup>에 결합되고, 여기서

[0274]

p는 1 내지 10의 정수이며;

[0275]

Alk<sup>1</sup>은 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이고;

[0276]

Alk<sup>2</sup>는 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이며;

[0277]

Alk<sup>3</sup>는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알칸디일이다.

[0278]

화학식(IV)에서 R<sup>z</sup>가 O-Alk<sup>3</sup>-C(O)인 경우, 화학식(IV)의 단량체의 에스테르, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 에스테르가 대신 사용될 수 있다.

[0279]

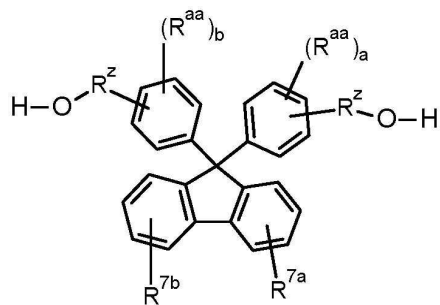
화학식(IV) 및 (V)와 관련하여, A<sup>1</sup>은 특히 2개의 벤젠 또는 나프탈린 환을 보유하는 폴리사이클릭 라디칼이며, 여기에서 벤젠 환은 A에 의해 연결된다. 이와 관련하여 A는 특히 단일 결합, CH-Ar, CAr<sub>2</sub>, 및 라디칼 A'로 구성된 그룹 중에서 선택된다.

[0280]

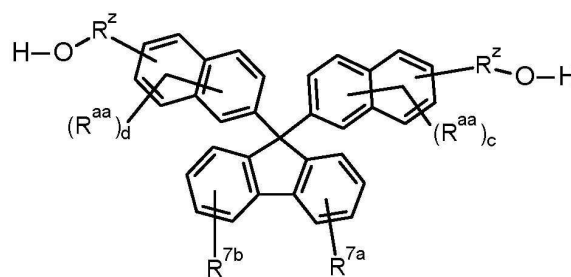
화학식(IV) 및 (V)와 관련하여, R<sup>z</sup>는 특히 O-Alk<sup>2</sup>-이며, 여기에서 Alk<sup>2</sup>는 특히 2 내지 4개의 탄소 원자를 갖는 선형 알칸디일 및 특히 O-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>이다.

[0281]

화학식(IV)의 단량체 중에서 일반식(IV-1) 내지 (IV-6)의 단량체가 선호된다:

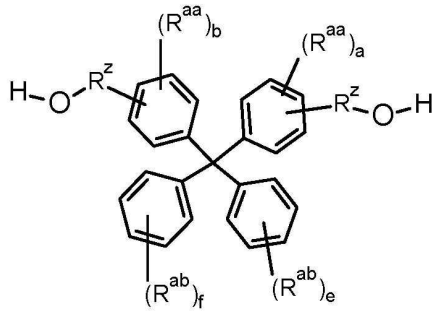


(IV-1)

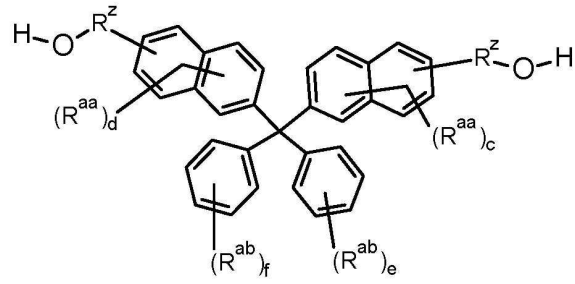


(IV-2)

[0282]

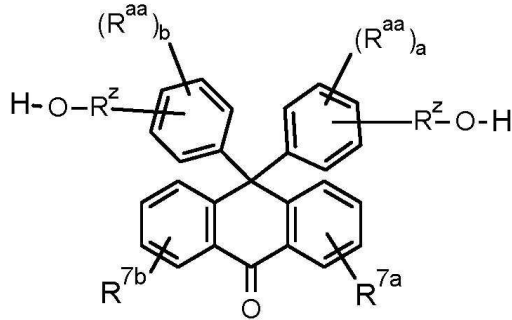


(IV-3)

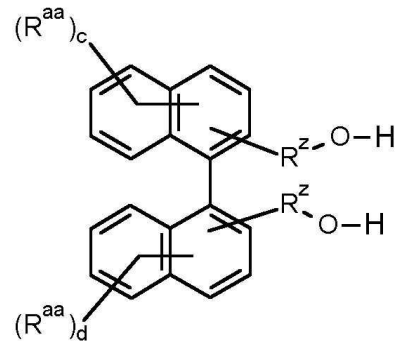


(IV-4)

[0283]



(IV-5)



(IV-6)

[0284]

[0285]

상기 식에서

[0286]

a 및 b는 0, 1, 2 또는 3, 특히 0 또는 1이고;

[0287]

c 및 d는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 특히 0 또는 1이며;

[0288]

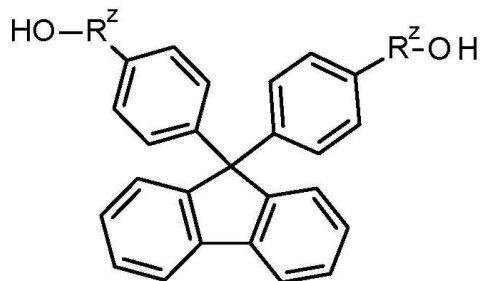
e 및 f는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 특히 0 또는 1이고;

[0289]

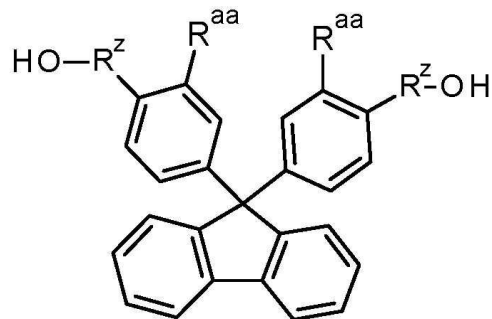
여기에서  $R^z$ ,  $R^{aa}$ ,  $R^{ab}$ ,  $R^{7a}$  및  $R^{7b}$ 는 화학식(IV)에 대해 정의된 바와 같으며 여기에서  $R^z$ 는 특히 단일 결합,  $CH_2$  및  $OCH_2CH_2$  중에서 선택된다.

[0290]

화학식(IV)의 단량체 중에서 일반식(IV-11) 내지 (IV-20)의 단량체가 특히 선호되며, 여기에서  $R^z$  및  $R^{aa}$ 는 본 명세서에 정의된 바와 같고  $R^z$ 는 특히 단일 결합,  $CH_2$  및  $O-CH_2CH_2$  중에서 선택되며, 특히  $O-CH_2CH_2$ 이다:

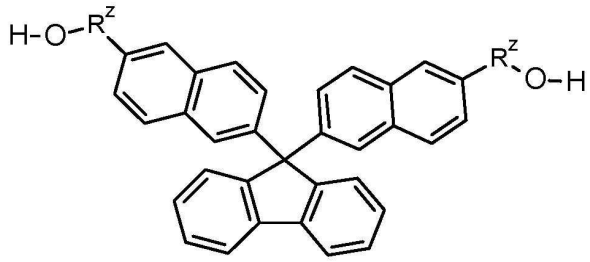


(IV-11)

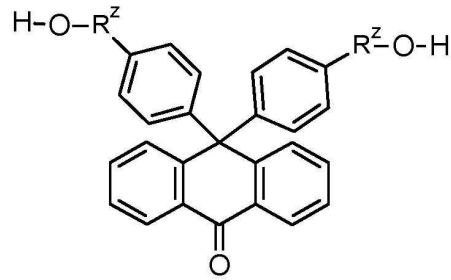


(IV-12)

[0291]

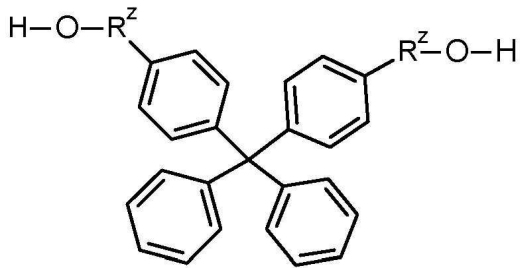


(IV-13)

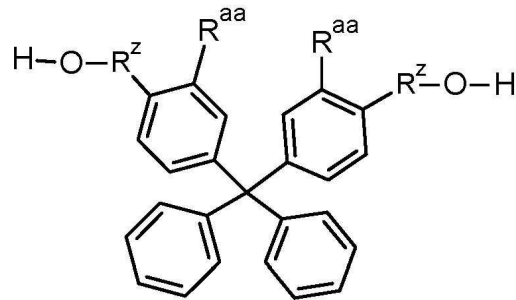


(IV-14)

[0292]

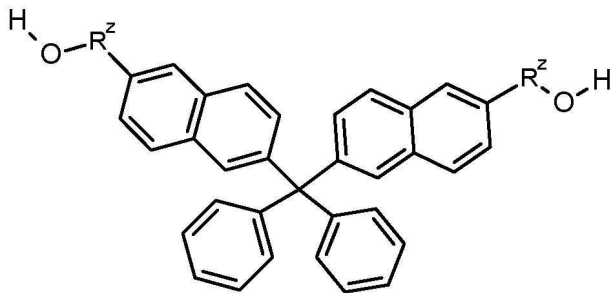


(IV-15)

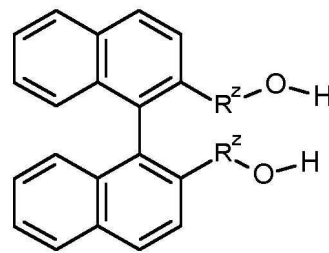


(IV-16)

[0293]

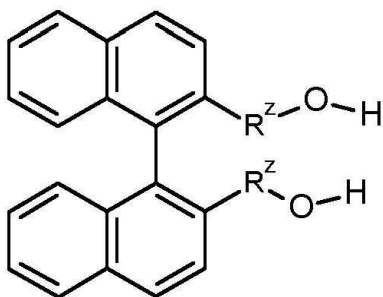


(IV-17)

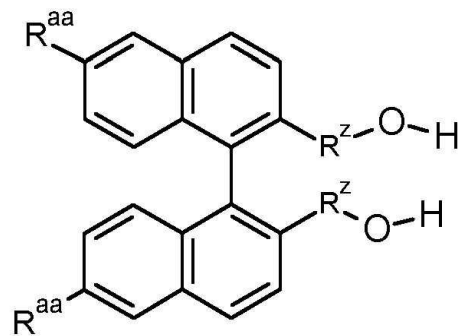


(IV-18)

[0294]



(IV-19)



(IV-20)

[0295]

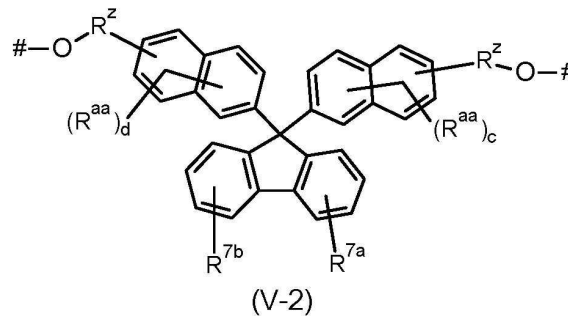
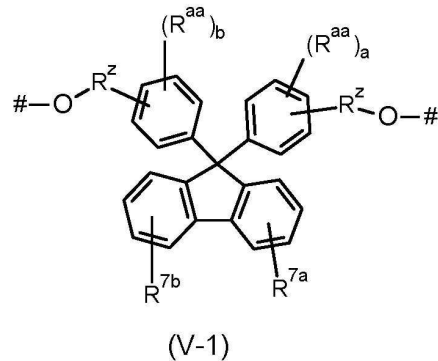
[0296]

화학식(IV-11) 내지 (IV-20)의 화합물의 예는 9,9-비스(4-하이드록시페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-하이드록시-3-메틸페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-하이드록시-3-이소프로필페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-하이드록시-3-tert-부틸페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-하이드록시-3-사이클로헥실페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-하이드록시-3-페닐-페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-(2-하이드록시-에톡시)-3-메틸페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)-3-이소프로필페닐)

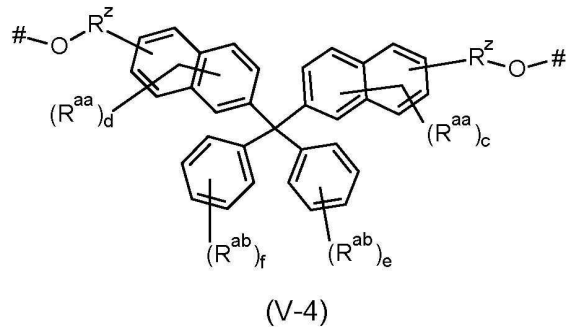
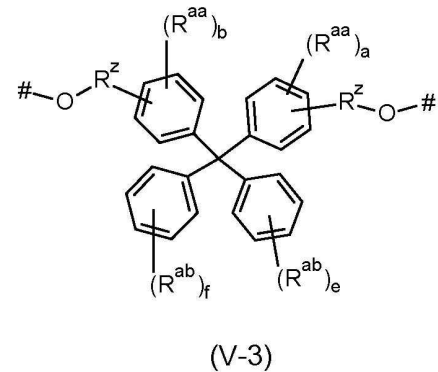
플루오렌, 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)-3-tert.-부틸페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-(2-하이드록시-에톡시)-3-사이클로헥실페닐)플루오렌, 또한 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)-3-페닐페닐)플루오렌(BPPEF로도 명명됨), 9,9-비스(6-하이드록시-2-나프틸)플루오렌, 9,9-비스(6-(2-하이드록시에톡시)-2-나프틸)플루오렌(9,9-비스(6-(2-하이드록시-에톡시)나프탈렌-2-일)플루오렌(BNEF)으로도 명명됨), 10,10-비스(4-하이드록시페닐)안트라센-9-온, 10,10-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)안트라센-9-온, 4,4'-디하이드록시-테트라페닐메탄, 4,4'-디(2-하이드록시에톡시)-테트라페닐메탄, 3,3'-디페닐-4,4'-디하이드록시-테트라페닐메탄, 디-(6-하이드록시-2-나프틸)-디페닐-메탄, 2,2'-[1,1'-비나프탈렌-2,2'-디일비스(옥시)디에탄올(2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프틸 또는 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프탈렌(BNE)로도 명명됨), 2,2'-비스(1-하이드록시메톡시-1,1'-비나프틸, 2,2'-비스(3-하이드록시프로필옥시)-1,1'-비나프틸, 2,2'-비스(4-하이드록시부톡시)-1,1'-비나프틸, 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-6,6'-디페닐-1,1'-비나프탈렌, 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-6,6'-디(나프탈렌-1-일)-1,1'-비나프탈렌, 2,2'-비스(2-하이드록시메톡시)-6,6'-디페닐-1,1'-비나프탈렌, 2,2'-비스(2-하이드록시-메톡시)-6,6'-디(나프탈렌-1-일)-1,1'-비나프탈렌, 2,2'-비스(2-하이드록시프로폭시)-6,6'-디페닐-1,1'-비나프탈렌, 2,2'-비스(2-하이드록시프로폭시)-6,6'-디(나프탈렌-1-일)-1,1'-비나프탈렌, 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-6,6'-디(나프탈렌-2-일)-1,1'-비나프탈렌, 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-6,6'-디(9-페난트릴)-1,1'-비나프탈렌 등이다. 일반식(IV) 또는 화학식(IV-1) 내지 (IV-6)의 단량체 중에서, 화학식(IV-1), (IV-2), (IV-3) 및 (IV-6)의 단량체가 특히 선호되고 화학식(IV-2), (IV-3) 및 (IV-6)의 단량체가 더욱 선호되며 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프틸(BNE 또는 BHBNA), 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-6,6'-디페닐-1,1'-비나프틸(DPBHBNA), 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)플루오렌(BPEF), 9,9-비스(6-(2-하이드록시에톡시)-2-나프틸)플루오렌(BNEF) 및 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)-3-페닐페닐)플루오렌(BPPEF)이 특별히 선호된다.

[0297]

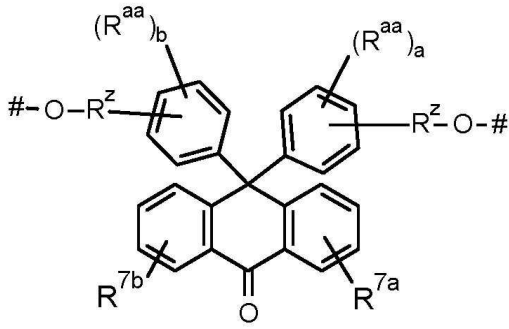
이에 따라, 열가소성 수지 내에 포함될 수 있는 화학식(V)의 구조 단위 중에서 일반식(V-1) 내지 (V-6)의 구조 단위가 선호된다:



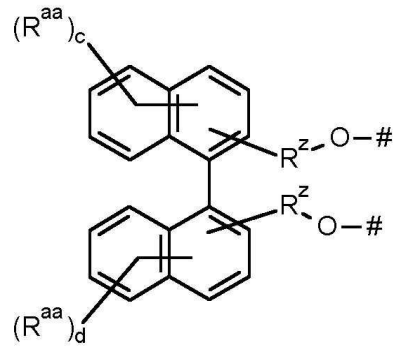
[0298]



[0299]



(V-5)



(V-6)

[0300]

[0301]

상기 식에서

[0302]

a 및 b는 0, 1, 2 또는 3, 특히 0 또는 1이고;

[0303]

c 및 d는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 특히 0 또는 1이며;

[0304]

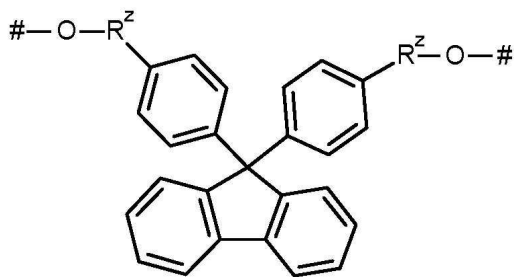
e 및 f는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 특히 0 또는 1이고;

[0305]

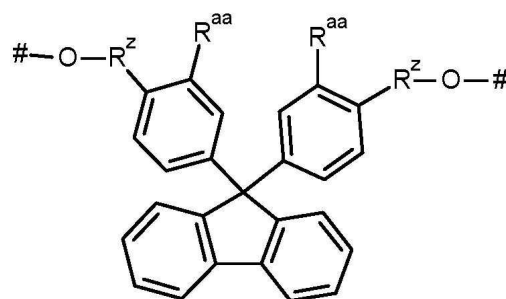
여기에서  $R^z$ ,  $R^{aa}$ ,  $R^{ab}$ ,  $R^{7a}$  및  $R^{7b}$ 는 화학식(V)에 대해 정의된 바와 같으며 여기서  $R^z$ 는 특히 단일 결합,  $CH_2$  및  $OCH_2CH_2$  중에서 선택된다.

[0306]

일반식(V-11) 내지 (V-20)의 구조 단위가 특히 선호되며, 여기에서  $R^z$  및  $R^{aa}$ 는 본 명세서에 정의된 바와 같고 여기서  $R^z$ 는 특히 단일 결합,  $CH_2$  및  $O-CH_2CH_2$  중에서 선택되며, 특히  $O-CH_2CH_2$ 이다:

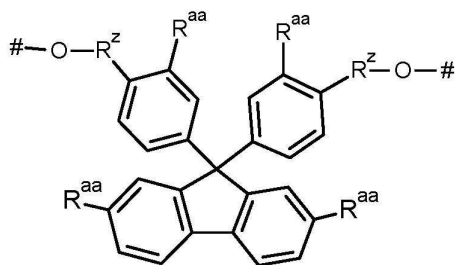


(V-11)

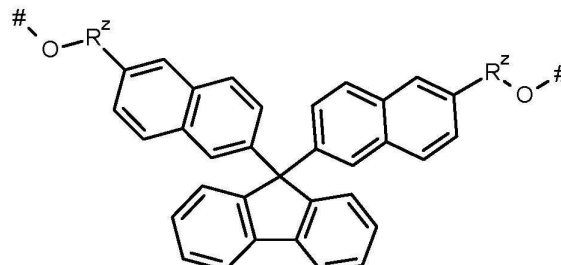


(V-12)

[0307]

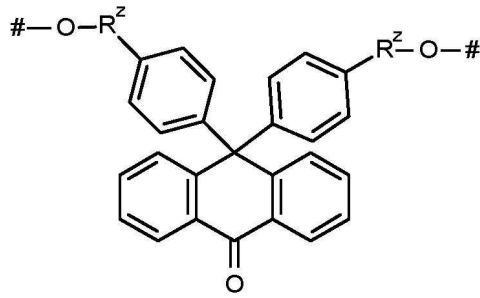


(V-13)

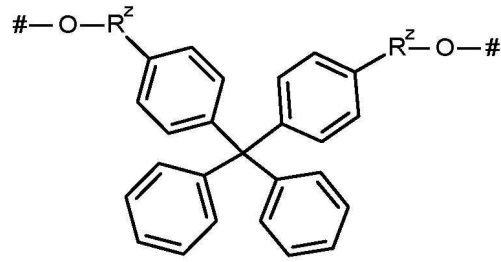


(V-14)

[0308]

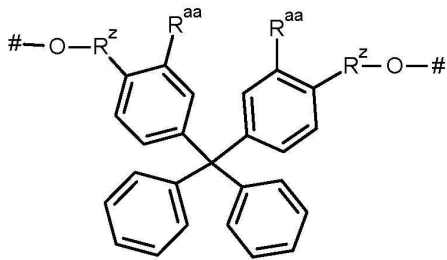


(V-15)

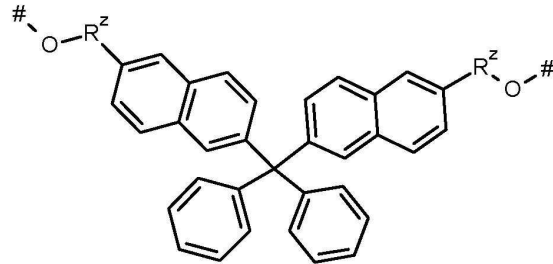


(V-16)

[0309]

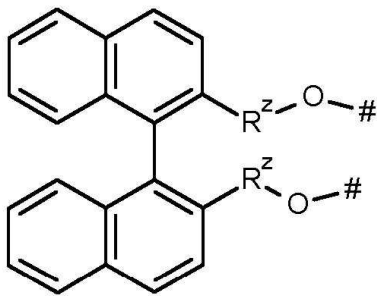


(V-17)

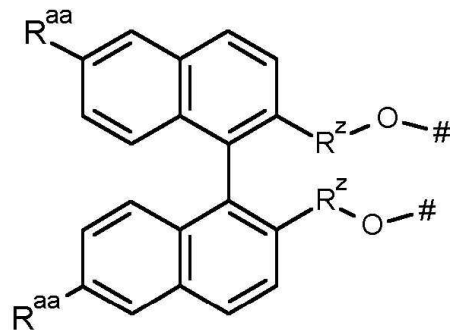


(V-18)

[0310]



(V-19)



(V-20)

[0311]

[0312]

화학식(V-1) 내지 (V-6)의 구조 단위 중에서, 화학식(V-1), (V-2) 및 (V-6)의 구조 단위가 특히 선호된다. 화학식(V-11) 내지 (V-20)의 구조 단위 중에서, 화학식(V-11), (V-12), (V-14), (V-19) 및 (V-20)의 구조 단위가 특히 선호되고 화학식(V-11), (V-19) 및 (V-20)의 구조 단위가 더욱 선호되며 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프틸(BNE 또는 BHBNA), 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-6,6'-디페닐-1,1'-비나프틸(DPBHBNA) 및 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)플루오렌(BPEF) 유래의 구조 단위가 특별히 선호된다.

[0313]

실시 형태의 특히 바람직한 그룹에서, 본 발명의 열가소성 수지는 적어도 하나의 화학식(IIa-1) 또는 (IIa-2)의 구조 단위 및 화학식(V-11)의 구조 단위, 화학식(V-19)의 구조 단위 및 화학식(V-20)의 구조 단위로 구성된 그룹 중에서 선택된 적어도 하나의 구조 단위를 포함한다. 실시 형태의 특별한 본 그룹에서, 이들 열가소성 수지가 바람직하며, 이때 화학식(IIa-1) 또는 (IIa-2)의 구조 단위에서 치환체  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$  또는  $R^1$  및  $R^2$ 는 동일하고 본 명세서에 정의된 의미 중의 하나, 특히 바람직한 것으로 언급된 의미 중의 하나를 가진다. 실시 형태의 특별한 본 그룹에서, 이들 열가소성 수지가 바람직하며, 이때 화학식(V-11), (V-19) 및 (V-20)의 구조 단위에서 라디칼  $R^2$ 는  $O-CH_2CH_2$ 이다.

[0314]

실시 형태의 특히 바람직한 본 그룹의 열가소성 수지에서, 화학식(IIa-1) 또는 (IIa-2)의 구조 단위의 총 몰비가 화학식(II) 및 (V)의 구조 단위의 총량의 1 내지 70 mol-% 범위, 바람직하게 5 내지 60 mol-% 범위, 더욱 바람직하게 8 내지 45 mol-% 범위, 더욱 더 바람직하게 10 내지 30 mol-% 범위인 것이 바람직하다.

[0315]

본 발명의 실시 형태의 더욱 특별한 그룹(10)은 복굴절이 단지 낮거나, 거의 없거나 없는 열가소성 수지에 관한

것이다. 실시 형태의 본 그룹(10)의 수지는  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 실시 형태의 그룹 5.5에 대해 정의된 바와 같은 화학식(II), 예컨대 특히 화학식(IIa-1)의 구조 단위, 및 부가적으로 화학식(II)의 구조 단위와 상이하고 바람직하게 화학식(V)의 구조 단위 중에서, 특히 화학식(V-11), (V-12), (V-14), (V-19) 및 (V-20)의 구조 단위 중에서 및 구체적으로(V-11), (V-19) 및 (V-20)의 구조 단위 중에서 선택된 하나 이상의 구조 단위를 가짐을 특징으로 한다. 실시 형태의 특히 바람직한 본 그룹(10)의 열가소성 수지에서, 화학식(IIa-1) 또는 (IIa-2)의 구조 단위의 총 몰비가 화학식(II) 및 (V)의 구조 단위의 총량의 0.5 내지 70 mol-% 범위, 바람직하게 1 내지 60 mol-% 범위, 더욱 바람직하게 2 내지 45 mol-% 범위, 및 더욱 더 바람직하게 3 내지 30 mol-% 범위인 것이 바람직하다.

[0316] 화학식(IV), (IV-1), (IV-2), (IV-3), (IV-4), (IV-5), (IV-6), (IV-11), (IV-12), (IV-13), (IV-14), (IV-15), (IV-16), (IV-17), (IV-18), (IV-19) 및 (IV-20)의 화합물은 공지되어 있거나 공지의 방법과 유사하게 제조될 수 있다.

[0317] 예를 들어, 화학식(IV-6)의 화합물은 예를 들어 일본 특허 공개 제2014-227387호, 일본 특허 공개 제2014-227388호, 일본 특허 공개 제2015-168658호 및 일본 특허 공개 제2015-187098호에 개시된 바와 같은 다양한 합성 방법에 의해 제조될 수 있다. 예를 들어, 1,1'-비나프톨은 에틸렌 글리콜 모노토실레이트와 반응할 수 있고; 대안적으로, 1,1'-비나프톨은 알킬렌 옥사이드, 할로게노알칸올, 또는 알킬렌 카르보네이트와 반응할 수 있으며; 대안적으로, 1,1'-비나프톨은 에틸렌 카르보네이트와 반응할 수 있다. 이에 의해,  $R^z$ -OH가  $O-Alk^z$  또는  $O-Alk^z-[O-Alk^z]_p$ -인 화학식(IV-6)의 화합물이 얻어진다.

[0318] 예를 들어, 화학식(IV-2)의 화합물은 예를 들어 일본 특허 공개 제5442800호, 및 일본 특허 공개 제2014-028806호에 개시된 바와 같은 다양한 합성 방법에 의해 제조될 수 있다. 예로

[0319] (a) 플루오렌을 염화수소 기체 및 메르캅토-카르복실산의 존재하에 하이드록시 나프탈렌과 반응시키거나;

[0320] (b) 9-플루오렌을 산 촉매(및 알킬 메르캅탄)의 존재하에 하이드록시 나프탈렌과 반응시키거나;

[0321] (c) 플루오렌을 염화수소 및 티올(예컨대, 메르캅토-카르복실산)의 존재하에 하이드록시 나프탈렌과 반응시키거나;

[0322] (d) 플루오렌을 황산 및 티올(예컨대, 메르캅토-카르복실산)의 존재하에 하이드록시 나프탈렌과 반응시킨 후 탄화수소 및 극성 용매(들)로 구성된 결정화 용매로부터 생성물을 결정화하여 비스나프톨 플루오렌을 형성하는 것 등을 들 수 있다.

[0323] 이에 의해,  $R^z$ 가 단일 결합인 화학식(IV-2)의 화합물이 얻어질 수 있다.

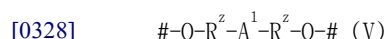
[0324]  $R^z$ 가  $O-Alk^z$  또는  $O-Alk^z-[O-Alk^z]_p$ -인 화학식(IV)의 화합물은 알킬렌 옥사이드 또는 할로알칸올과의 반응에 의해  $R^z$ 가 단일 결합인 화학식(IV)의 화합물로부터 제조될 수 있다. 예를 들어,  $R^z$ 가 단일 결합인 화학식(IV-2)의 9,9-비스(하이드록시나프틸)-플루오렌을 알킬렌 옥사이드 또는 할로알칸올과 반응시키면  $R^z$ 가  $O-Alk^z$  또는  $O-Alk^z-[O-Alk^z]_p$ -인 화학식(IV-2)의 화합물이 초래된다. 예를 들어, 9,9-비스[6-(2-하이드록시나프틸) 플루오렌을 알칼리 조건 하에 2-클로로에탄올과 반응시켜 9,9-비스[6-(2-하이드록시에톡시)나프틸] 플루오렌을 제조할 수 있다.

[0325] 열가소성 수지를 생성하는데 사용되는 화학식(I)의 단량체 및 마찬가지로 화학식(IV)의 공단량체는 이들의 제조 중에 얻어진 소정의 불순물, 예를 들어,  $O-Z^1-OH$  또는  $O-Z^2-OH$  기 대신에 OH 기를 보유하는 하이드록시 화합물을 함유할 수 있거나, 이는  $O-Alk^1-$  기 대신에  $O-Alk^1-[O-Alk^1]$  기를 함유할 수 있거나, 이는 라디칼  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  또는  $R^4$  대신에 할로젠 원자를 함유할 수 있다. 이러한 불순물 화합물의 총량은 바람직하게 1000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 500 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 200 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 100 ppm 이하이다. 열가소성 수지를 제조하는데 사용된 단량체 중의 불순물의 총 함량은 바람직하게 100 ppm 이하 특히 50 ppm 이하, 및 더욱 바람직하게 20 ppm 이하이다. 특히, 주요 구성요소가 화학식(I)로 나타내는 디하이드록시 화합물(들)인 단량체(들)에서, 라디칼  $Z^1$  또는  $Z^2$ 의 적어도 하나의 탄소 개수가 화학식(I)과 상이한 디하이드록시 화

합물의 총량은 바람직하게 1000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 500 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 200 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 100 ppm 이하이다. 라디칼  $Z^1$  또는  $Z^2$ 의 적어도 하나의 탄소 개수가 화학식(I)과 상이한 디하이드록시 화합물의 총 함량은 추가로 바람직하게 50 ppm 이하, 및 더욱 바람직하게 20 ppm 이하이다. 마찬가지로, 화학식(IV)의 공단량체에서 불순물의 양은 화학식(I)의 단량체의 경우 주어진 범위 내일 것이다.

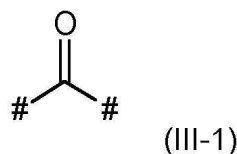
[0326] 광학 디바이스, 예컨대 렌즈의 제조를 위해 적합한 열가소성 수지는 특히 폴리카르보네이트, 폴리에스테르카르보네이트 및 폴리에스테르이다. 광학 디바이스, 예컨대 렌즈의 제조를 위해 바람직한 열가소성 수지는 특히 폴리카르보네이트이다.

[0327] 상기 폴리카르보네이트는 각각 화학식(II), (IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2) 중의 적어도 하나의 구조 단위, 임의로 화학식(I)의 단량체 화합물과 상이한 디올 단량체 유래의 구조 단위, 예를 들어, 화학식(V)의 구조 단위, 및 카르보네이트 형성 구성요소 유래의 화학식(III-1)의 구조 단위를 가짐을 구조적인 특징으로 한다:



[0329] 상기 식에서

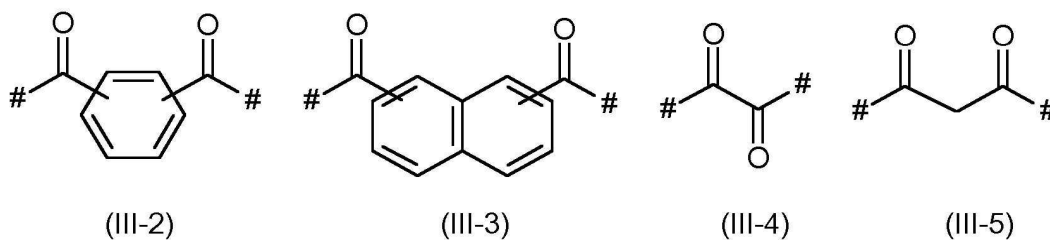
[0330] #,  $R^z$  및  $A^1$ 은 상기 본 명세서에 정의된 바와 같고;



[0331]

[0332] 상기 식에서 각각의 #는 주변 구조 단위, 즉, 화학식(II)의 구조 단위의 연결 지점의 O, 및 존재하는 경우 화학식(V)의 구조 단위의 연결 지점의 O에 대한 연결 지점을 나타낸다.

[0333] 상기 폴리에스테르는 각각 화학식(II), (IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2) 중의 적어도 하나의 구조 단위, 임의로 화학식(I)의 단량체 화합물과 상이한 디올 단량체 유래의 구조 단위, 예를 들어, 화학식 V의 구조 단위, 및 예를 들어 벤젠 디카르복실산의 경우 화학식(III-2), 나프탈렌 카르복실산의 경우 화학식(III-3), 옥살산의 경우 화학식(III-4) 및 말론산의 경우 화학식(III-5)의 디카르복실산 유래의 구조 단위를 가짐을 구조적인 특징으로 한다:



[0334]

[0335] 화학식(III-2) 내지 (III-5)에서 각각의 변수 #는 주변 구조 단위, 즉, 화학식(II)의 구조 단위의 연결 지점의 O, 및 존재하는 경우 화학식(V)의 구조 단위의 연결 지점의 O에 대한 연결 지점을 나타낸다.

[0336] 상기 폴리에스테르카르보네이트는 각각 화학식(II), (IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2) 중의 적어도 하나의 구조 단위, 임의로 화학식(I)의 단량체 화합물과 상이한 디올 단량체 유래의 구조 단위, 예를 들어, 화학식(V)의 구조 단위, 카르보네이트 형성 구성요소 유래의 화학식(III-1)의 구조 단위, 및 디카르복실산 유래의 구조 단위, 예를 들어, 벤젠 디카르복실산의 경우 화학식 (III-2), 나프탈렌 카르복실산의 경우 화학식(III-3), 옥살산의 경우 화학식(III-4) 및 말론산의 경우 화학식(III-5)를 가짐을 특징으로 한다.

[0337] 실시 형태의 특별한 그룹은 화학식(II)의 구조 단위 및 하나 이상의 화학식(V)의 구조 단위를 둘 모두 갖는 열가소성 공중합체 수지, 특히 폴리카르보네이트, 폴리에스테르카르보네이트 및 폴리에스테르, 즉, 적어도 하나의 화학식(I)의 단량체를 하나 이상의 화학식(IV)의 단량체와 반응시켜 얻을 수 있는 수지, 특히 폴리카르보네이트, 폴리에스테르카르보네이트 및 폴리에스테르에 관한 것이다. 이 경우에 화학식(I)의 단량체 대 화학식(IV)의 단량체의 몰비 및 마찬가지로 화학식(II)의 구조 단위 대 화학식(V)의 구조 단위의 몰비는

5:95 내지 80:20의 범위, 특히 10:90 내지 70:30의 범위 및 특히 15:85 내지 60:40의 범위 또는 1:99 내지 70:30의 범위, 특히 5:95 내지 60:40의 범위, 더욱 바람직하게 8:92 내지 45:55의 범위 또는 10:90 내지 40:60의 범위 및 특히 12:88 내지 30:70의 범위 또는 12:88 내지 20:80의 범위이다. 이에 따라, 화학식(II)의 구조 단위의 몰비는 보통 화학식(II) 및 (V)의 구조 단위의 총 몰량을 기준으로 하여 1 내지 70 mol-%, 특히 5 내지 60 mol-%, 더욱 바람직하게 8 내지 45 mol-%의 범위 또는 10 내지 40 mol-%의 범위, 특히 12 내지 30 mol-%의 범위 또는 15 내지 30 mol-%의 범위, 구체적으로 12 내지 20 mol-%의 범위 또는 15 내지 20 mol-%의 범위이다. 이에 따라, 화학식(V)의 구조 단위의 몰비는 보통 화학식(II) 및 (V)의 구조 단위의 총 몰량을 기준으로 하여 30 내지 99 mol-% 특히 40 내지 95 mol-%, 더욱 바람직하게 55 내지 92 mol-%의 범위 또는 60 내지 90 mol-%의 범위, 특히 70 내지 88 mol-%의 범위 또는 70 내지 85 mol-%의 범위, 구체적으로 80 내지 88 mol-%의 범위 또는 80 내지 85 mol-%의 범위이다.

[0338] 본 발명의 열가소성 공중합체 수지, 예컨대 폴리카르보네이트 수지는 랜덤 공중합체 구조, 블록 공중합체 구조, 및 교대 공중합체 구조 중의 어느 하나를 포함할 수 있다. 본 발명에 따른 열가소성 수지는 하나의 동일한 중합체 분자 내에 구조 단위(II) 및 하나 이상의 상이한 구조 단위(V)를 모두 포함할 필요가 없다. 즉, 본 발명에 따른 열가소성 공중합체 수지는 상기 기재된 구조가 각각 복수의 중합체 분자 중의 어느 하나에 포함되는 한 블렌드 수지일 수 있다. 예를 들어, 상기 기재된 구조 단위(II) 및 구조 단위(V)를 모두 포함하는 열가소성 수지는 구조 단위(II) 및 구조 단위(V)를 모두 포함하는 공중합체일 수 있으며, 이는 적어도 하나의 구조 단위(II)를 포함하는 단일중합체 또는 공중합체 및 적어도 하나의 구조 단위(V)를 포함하는 단일중합체 또는 공중합체의 혼합물일 수 있거나, 이는 적어도 하나의 구조 단위(II) 및 제1 구조 단위(V)를 포함하는 공중합체 및 적어도 하나의 구조 단위(II) 및 제1 구조 단위(V)와 상이한 적어도 하나의 다른 구조 단위(V)를 포함하는 공중합체의 블렌드 수지 동일 수 있다.

[0339] 열가소성 폴리카르보네이트는 디올 구성요소 및 카르보네이트 형성 구성요소의 중축합에 의해 얻을 수 있다. 유사하게, 열가소성 폴리에스테르 및 폴리에스테르카르보네이트는 디올 구성요소 및 디카르복실산, 또는 이의 에스테르 형성 유도체, 및 임의로 카르보네이트 형성 구성요소의 중축합에 의해 얻을 수 있다.

[0340] 구체적으로, 열가소성 수지(폴리카르보네이트 수지)는 하기 방법에 의해 제조될 수 있다.

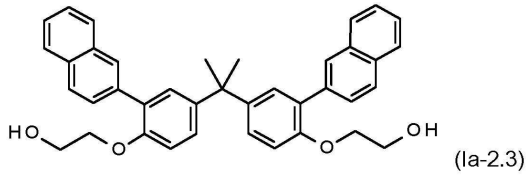
[0341] 본 발명의 열가소성 수지, 예컨대 폴리-카르보네이트 수지를 제조하는 방법은 상기 언급된 구조 단위에 상응하는 디하이드록시 구성요소 및 디에스테르 카르보네이트의 용융 중축합 방법을 포함한다. 본 발명에 따라 디하이드록시 화합물은 본 명세서에 정의된 바와 같은 적어도 하나의 화학식(I), 특히 각각 화학식(Ia), (Ia-1) 또는 (Ia-2)의 디하이드록시 화합물을 포함한다. 화학식(I)의 화합물에 부가하여, 디하이드록시 화합물은 또한 하나 이상의 화학식(IV)의, 바람직하게 화학식(IV-1) 내지 (IV-6)의, 특히 화학식(IV-11) 내지 (IV-20)의, 더욱 특히 화학식(IV-11), (IV-12), (IV-14), (IV-19) 또는 (IV-20)의, 특히 화학식(IV-11), (IV-19) 또는 (IV-20)의 디하이드록시 화합물을 포함할 수 있다.

[0342] 상기로부터 명백하듯이, 폴리카르보네이트 수지는 디하이드록시 구성요소를 카르보네이트 전구체, 예컨대 디에스테르 카르보네이트와 반응시켜 형성될 수 있으며, 여기에서 디하이드록시 구성요소는 적어도 하나의 각각 화학식(I), (Ia), (Ia-1) 및 (Ia-2)의 화합물, 또는 적어도 하나의 각각 화학식(I), (Ia), (Ia-1) 및 (Ia-2)의 화합물 및 적어도 하나의 화학식(IV), (IV-1), (IV-2), (IV-3), (IV-4), (IV-5), (IV-6), (IV-11), (IV-12), (IV-13), (IV-14), (IV-15), (IV-16), (IV-17), (IV-18), (IV-19) 또는 (IV-20)의 화합물의 조합을 포함한다. 구체적으로, 폴리카르보네이트 수지는 용융 중축합 방법에 의해 형성될 수 있으며 이때 각각 화학식(I), (Ia), (Ia-1) 및 (Ia-2)의 화합물, 또는 적어도 하나의 화학식(IV), (IV-1), (IV-2), (IV-3), (IV-4), (IV-5), (IV-6), (IV-11), (IV-12), (IV-13), (IV-14), (IV-15), (IV-16), (IV-17), (IV-18), (IV-19) 또는 (IV-20)의 화합물과 이의 조합 및 카르보네이트 전구체, 예컨대 디에스테르 카르보네이트가 염기성 화합물 촉매, 트랜스에스테르화 촉매, 또는 이의 혼합 촉매의 존재하에, 또는 촉매의 부재하에 반응한다.

[0343] 폴리카르보네이트 수지 이외의 열가소성 수지(또는 중합체), 예컨대 폴리에스테르카르보네이트 및 폴리에스테르는 각각 화학식(I), (Ia), (Ia-1) 및 (Ia-2)의 디하이드록시 화합물, 또는 적어도 하나의 화학식(IV), (IV-1), (IV-2), (IV-3), (IV-4), (IV-5), (IV-6), (IV-11), (IV-12), (IV-13), (IV-14), (IV-15), (IV-16), (IV-17), (IV-18), (IV-19) 또는 (IV-20)의 화합물과 이의 조합을 재료(또는 단량체)로 사용하여 얻어진다.

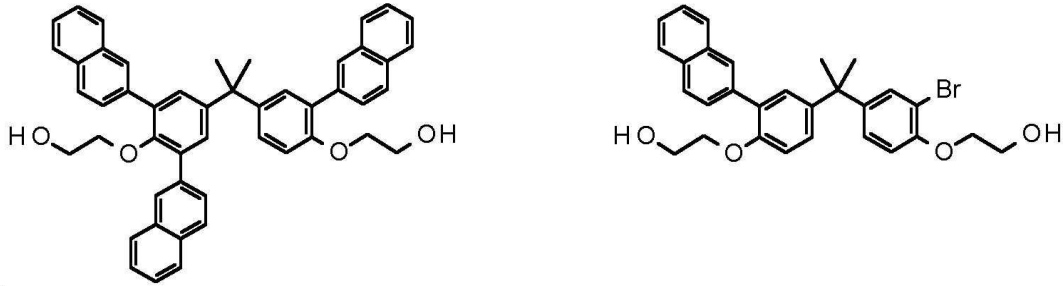
[0344] 앞에서 언급한 바와 같이, 열가소성 수지를 생성하기 위해 사용되는 화학식(I)의 단량체 및 마찬가지로 화학식(IV)의 공단량체는 이들의 제조로부터 초래된 불순물을 함유할 수 있다.

[0345] 예를 들어, X가  $C(CH_3)_2$ 이고  $R^1$  및  $R^2$ 가 둘 모두 나프탈렌-2-일인 화학식(Ia-2)의 화합물, 즉, 화학식(Ia-2.3)의 화합물 2,2'-(프로판-2,2-디일비스{[2-(나프탈렌-2-일)-4,1-페닐렌]옥시})디(에탄-1-올):

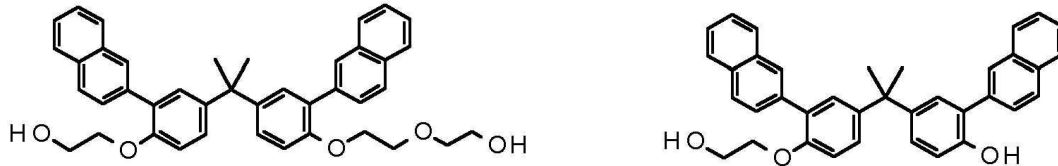


[0346]

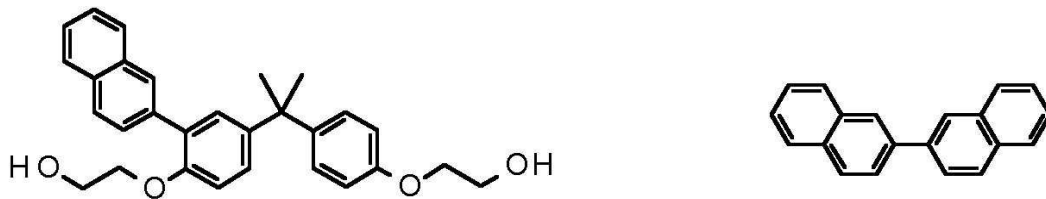
[0347] 은, 예를 들어, 하나 이상의 아래 반응식에 나타낸 하기 화합물을 불순물로서 포함할 수 있다:



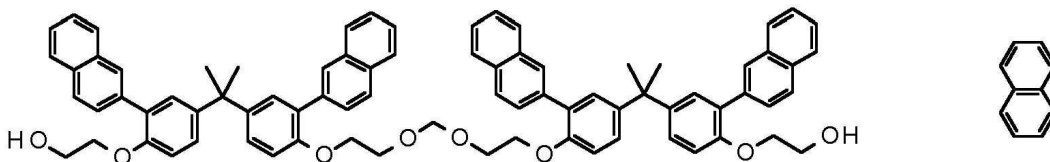
[0348]



[0349]



[0350]



[0351]

[0352] 특히, 화학식(Ia-2.3)의 화합물 내의 불순물 총량은 바람직하게 1000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 500 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 200 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 100 ppm 이하이다. 적어도 하나의 라디칼  $Z^1$  또는  $Z^2$ 의 탄소 개수가 화학식(Ia-2.3)과 상이한 디하이드록시 화합물의 총 함량은 추가로 바람직하게 50 ppm 이하, 및 더욱 바람직하게 20 ppm 이하이다.

[0353] 예를 들어,  $R^2$ 가  $O-Alk^2-$  또는  $O-Alk^2-[O-Alk^2-]_p$ -인 화학식(IV-2) 및 (IV-3)의 단량체는  $R^2$ 가 둘 모두 단일 결합인 디하이드록시 화합물, 또는 하나의  $R^2$ 가  $O-Alk^2-$  또는  $O-Alk^2-[O-Alk^2-]_p$ - 대신에 단일 결합인 디하이드록시 화합물을 포함할 수 있다.

[0354] 이의 주요 구성요소가 화학식(IV-2) 또는 (IV-3)의 디하이드록시 화합물(들)인 단량체(들)에서 적어도 하나의  $R^2$ 가  $O-Alk^2-$  또는  $O-Alk^2-[O-Alk^2-]_p$ -와 상이한 이러한 화학식(IV-2) 또는 (IV-3)의 디하이드록시 화합물의 총량은 바람직하게 1000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 500 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 200 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 100 ppm 이하이다. 적어도 하나의 c 및 d의 값이 화학식(IV-2) 또는 (IV-3)과 상이한 디하이드록시

화합물의 총 함량은 여전히 바람직하게 50 ppm 이하, 및 더욱 바람직하게 20 ppm 이하이다.

- [0355] 폴리카르보네이트 수지는 카르보네이트 전구체, 예컨대 디에스테르 카르보네이트와 함께 디하이드록시 구성요소로서 화학식(I)의 단량체 화합물을 반응시키거나, 적어도 하나의 화학식(I)의 단량체 화합물, 특히 적어도 하나의 본 명세서에 바람직한 것으로 언급된 단량체(I), 및 하나 이상의 화학식(IV), 특히 화학식(V-11), (V-12), (V-14), (V-19) 또는 (V-20) 및 특히 화학식(IV-11), (IV-19) 또는 (IV-20) 등의 단량체 화합물의 조합과 반응시켜 얻을 수 있다.
- [0356] 그러나, 폴리카르보네이트 수지를 제조하기 위한 중합 방법에서, 화학식(I) 및 (IV)의 일부 화합물은 불순물로 변환될 수 있으며, 이때 하나의 또는 둘 모두의 말단  $-Z^1OH$ ,  $-Z^2OH$  또는  $-R^2OH$  라디칼이 상이한 라디칼, 예컨대  $-OCH=CH_2$ 로 나타내는 비닐 말단 라디칼로 대체된다. 이러한 불순물의 양은 일반적으로 소량이므로, 형성된 중합체의 생성물은 정제 과정 없이 폴리카르보네이트 수지로서 사용될 수 있다.
- [0357] 본 발명의 열가소성 수지는, 예를 들어, 열가소성 수지 조성물의 추가 함량 또는 열가소성 수지의 중합체 골격의 일부로서 소량의 불순물을 함유할 수도 있다. 이러한 불순물의 예로는 열가소성 수지 형성 방법에 의해 형성되는 페놀, 미반응 디에스테르 카르보네이트 및 단량체를 들 수 있다. 열가소성 수지 내의 불순물 총량은 5000 ppm 이하, 또는 2000 ppm 이하일 수 있다. 열가소성 수지 내의 불순물 총량은 바람직하게 1000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 500 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 200 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 100 ppm 이하이다.
- [0358] 열가소성 수지 내의 불순물로서 페놀의 총량은 3000 ppm 이하, 또는 2000 ppm 이하일 수 있다. 불순물로서 페놀의 총량은 바람직하게 1000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 800 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 500 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 300 ppm 이하이다. 열가소성 수지 내의 불순물로서 디에스테르 카르보네이트의 총량은 바람직하게 1000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 500 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 100 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 50 ppm 이하이다. 열가소성 수지 내의 불순물로서 미반응 단량체의 총량은 바람직하게 3000 ppm 이하, 더욱 바람직하게 2000 ppm 이하, 더욱 더 바람직하게 1000 ppm 이하, 및 특히 바람직하게 500 ppm 이하이다. 이들 불순물의 총량의 하한은 중요하지 않으나, 0.1 ppm 또는 1.0 ppm일 수 있다.
- [0359] 열가소성 수지 내의 불순물로서 잔류 팔라듐의 총량은 바람직하게 50 ppm 이하, 더욱 바람직하게 10 ppm 이하이다. 잔류 팔라듐의 양은 흡착제, 예를 들어, 활성탄에 의한 처리와 같은 표준 방법에 의해 감소될 수 있다.
- [0360] 페놀 및 디에스테르 카르보네이트의 양을 조정함에 의해 목표 특성을 갖는 수지가 형성될 수 있다. 페놀, 디에스테르 카르보네이트, 및 단량체의 양은 중축합 조건, 중합체 사용되는 디바이스의 작업 조건, 또는 중축합 방법 후의 압출 성형 조건을 배열함으로써 적합하게 조정될 수 있다.
- [0361] GPC(겔 투과 크로마토그래피)에 의해 결정되는, 본 발명에 따른 열가소성 수지의 중량-평균 분자량( $M_w$ )은 바람직하게 5000 내지 100000 달톤, 더욱 바람직하게 10000 내지 80000 달톤, 더욱 더 바람직하게 10000 내지 50000 달톤 범위, 및 특히 15000 내지 50000 달톤 범위이다. GPC 측정은 폴리스티렌 표준을 사용하여 보정될 수 있다. 이 방식으로 결정된, 본 발명의 열가소성 수지의  $M_w$ 는 본 명세서에서 "폴리스티렌 변환  $M_w$ ", "폴리스티렌 변환된  $M_w$ " 또는 "폴리스티렌 표준에 대해 GPC에 의해 결정된  $M_w$ "로 표시될 수도 있다. 본 발명에 따른 열가소성 수지의 수-평균 분자량( $M_n$ )은 바람직하게 3000 내지 20000, 더욱 바람직하게 5000 내지 15000, 및 더욱 더 바람직하게 7000 내지 14000이다.  $M_n$ 은 하기 본 명세서에 기재된 바와 같이, 폴리스티렌 표준에 대해 보정된 GPC 측정에 의해  $M_w$ 와 유사하게 결정될 수 있다. 본 발명에 따른 열가소성 수지의 점도-평균 분자량( $M_v$ )는 바람직하게 8000 내지 20000, 더욱 바람직하게 9000 내지 15000, 및 더욱 더 바람직하게 10000 내지 14000 범위이다.
- [0362] 본 발명에 따른 열가소성 수지의 분자량 분포( $M_w/M_n$ )의 값은 바람직하게 1.5 내지 9.0, 더욱 바람직하게 1.8 내지 7.0, 및 더욱 더 바람직하게 2.0 내지 4.0이다.
- [0363] 열가소성 수지가 상기-언급된 적합한 범위 내의 중량-평균 분자량( $M_w$ )의 값을 가질 때, 열가소성 수지로 만들어진 성형 물품은 높은 강도를 가진다. 또한, 적합한  $M_w$  값을 갖는 이러한 열가소성 수지는 이의 우수한 유동성으로 인하여 성형에 유리하다.
- [0364] 실시 형태의 특별한 그룹에서, 본 발명의 열가소성 수지는 열가소성 수지의 총 중량을 기준으로 하여 적어도 0.3 중량%, 바람직하게 적어도 0.5 중량%, 더욱 바람직하게 적어도 0.8 중량% 및 특히 적어도 1.0 중량%의 1000 미만의 분자량  $M_w$ 를 갖는 저분자량 화합물을 포함한다. 1000 미만의  $M_w$ 를 갖는 저분자량 화합물의 상기 함량의 상한은 전형적으로 7.0 중량%, 바람직하게 5.0 중량%, 더욱 바람직하게 3.0 중량%, 더욱 더 바람직하게 2.0 중

량%, 특히 1.8 중량% 및 구체적으로 1.7 중량%이다. 이에 따라, 실시 형태의 본 특정 그룹에서 열가소성 수지 내의 1000 미만의 분자량 Mw를 갖는 저분자량 화합물의 함량은 각 경우에 열가소성 수지의 총 중량을 기준으로 하여 전형적으로 0.3 내지 7.0 중량% 범위, 바람직하게 0.5 내지 5.0 중량% 범위, 더욱 바람직하게 0.8 내지 3.0 중량%, 더욱 더 바람직하게 1.0 내지 2.0 중량% 범위, 특히 1.0 내지 1.8 중량% 범위 및 구체적으로 1.0 내지 1.7 중량% 범위이다.

[0365] 상기 범위 내의 양으로 1000 미만의 Mw-값을 갖는 저분자량 화합물을 포함하는 본 발명의 열가소성 수지는 높은 기계적 강도를 갖는 성형체를 형성한다. 이러한 열가소성 수지는 성형 공정, 예컨대 사출 성형의 과정 중에 특히, 흡출(bleed-out)로도 공지된 상기 저분자량 화합물의 분리 또는 침전이 없거나 그런 경향이 거의 없다. 또한, 상기 정의된 양으로 저분자량 화합물을 함유하는 본 발명의 열가소성 수지는 이들의 높은 가소성으로 인하여 성형 공정 동안 높은 성형 속도 및 감소된 에너지 요구량의 유리한 특성을 가진다.

[0366] 열가소성 수지 내의 저분자량 화합물의 함량은 상기 기재된 GPC 분석의 다이어그램을 기초로 하여 결정된다. 특히, 상기 함량은 열가소성 수지의 GPC 분석에 의해 얻어진 다이어그램의 모든 피크의 총 면적에 대한 저분자량 화합물 피크의 총 면적의 비로서 계산된다. 따라서, 열가소성 수지 내의 저분자량 화합물의 함량(CLWC)은 하기 식으로 나타낸다:

$$CLWC(\%) =$$

$$\frac{\text{GPC 분석에서 1.000 미만의 Mw를 갖는 화합물 피크의 총 면적}}{\text{(GPC 분석에서 화합물의 모든 피크의 총 면적)}} \times 100$$

[0367]

[0368] 상기-언급된 폴리카르보네이트 수지는 높은 굴절률( $n_D$  또는  $n_d$ )을 가지며 따라서 광학 렌즈에 적합하다. 본 명세서에서 참조된 굴절률 값은 0.1 mm의 두께를 갖는 필름의 값이며 JIS-K-7142의 방법에 의해 아베 굴절률 미터를 사용하여 측정될 수 있다. 23 °C, 589 nm의 파장에서 본 발명에 따른 폴리카르보네이트 수지의 굴절률은, 수지가 구조 단위(2)를 포함하는 경우, 보통 1.640 이상, 바람직하게 1.650 이상, 더욱 바람직하게 1.660 이상, 더욱 더 바람직하게 1.670 이상, 및 특히 1.680 이상이다. 예를 들어, 본 발명에 따른 구조 단위(2) 및 구조 단위(V)를 포함하는 코폴리카르보네이트 수지의 굴절률은 바람직하게 1.660 내지 1.720, 더욱 바람직하게 1.670 내지 1.720, 및 특히 1.680 내지 1.720이다.

[0369] 폴리카르보네이트 수지의 아베수( $v$ )는 바람직하게 24 이하, 더욱 바람직하게 20 이하, 및 더욱 더 바람직하게 18 이하이다. 아베수는 23 °C에서, 487 nm, 589 nm 및 656 nm의 파장에서의 굴절률을 기초로 하여 하기 수학적 식을 사용함으로써 계산될 수 있다.

[0370] 
$$v = (n_D - 1) / (n_F - n_C)$$

[0371]  $n_D$ : 589 nm 파장에서의 굴절률

[0372]  $n_C$ : 656 nm 파장에서의 굴절률

[0373]  $n_F$ : 486 nm 파장에서의 굴절률

[0374] 본 발명에 따른 열가소성 수지의 예로서 폴리카르보네이트 수지의 유리 전이 온도( $T_g$ )는, 폴리카르보네이트가 사출 성형에 사용가능하다는 점을 고려할 때, 바람직하게 90 내지 185 °C, 더욱 바람직하게 125 내지 175 °C, 및 더욱 더 바람직하게 140 내지 165 °C이다. 성형 유동성 및 성형 열 저항과 관련하여,  $T_g$ 의 하한은 바람직하게 130 °C 및 더욱 바람직하게 135 °C이고,  $T_g$ 의 상한은 바람직하게 185 °C 및 더욱 바람직하게 175 °C이다. 상기 주어진 범위 내의 유리 전이 온도( $T_g$ )는 상당한 범위의 사용가능한 온도를 제공하고 수지의 용점이 너무 높을 수 있는 위험을 피하게 하며, 따라서 수지는 원치않게 분해되거나 착색될 수 있다. 더욱이, 이는 높은 표면 정확도를 갖는 몰드의 제조를 허용한다.

[0375] 실시 형태의 바람직한 그룹(10)에서 열가소성 수지의 배향 복굴절의 절대값은 바람직하게 0 내지  $1 \times 10^{-2}$  범위, 더욱 바람직하게 0 내지  $5 \times 10^{-3}$  범위, 더욱 더 바람직하게 0 내지  $2 \times 10^{-3}$  범위, 특히 0 내지  $1 \times 10^{-3}$  범위, 구체적으로 0 내지  $0.4 \times 10^{-3}$  범위이다.

[0376] 본 발명의 폴리카르보네이트 수지를 사용하여 생성된 광학 성형체, 예컨대 광학 요소는 바람직하게 85% 이상,

더욱 바람직하게 87% 이상, 특히 바람직하게 88% 이상의 전 광선 투과율을 가진다. 바람직하게 85% 이상의 전 광선 투과율은 비스페놀 A 유형 폴리카르보네이트 수지 등에 의해 제공되는 것 만큼 양호하다.

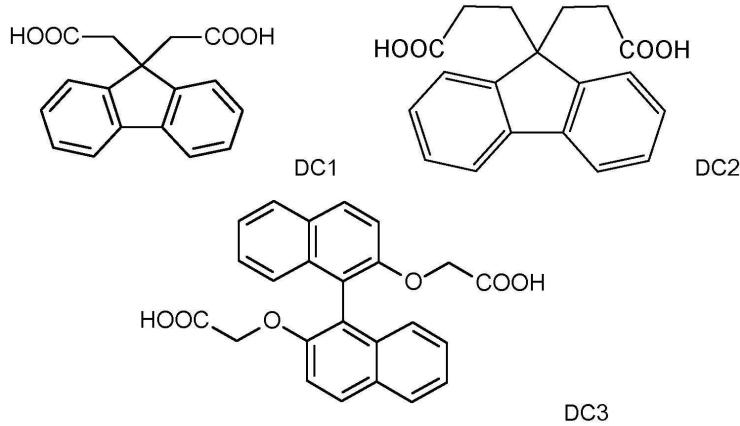
- [0377] 본 발명에 따른 열가소성 수지는 높은 수분 및 열 저항을 가진다. 수분 및 열 저항은 열가소성 수지를 사용하여 생성된 성형체, 예컨대 광학 요소에 대해 "PCT 시험"(압력 쿠키 시험)을 수행한 다음 PCT 시험 후에 성형체의 전 광선 투과율을 측정하여 평가될 수 있다. PCT 시험에서, 먼저, 50 mm의 직경 및 3 mm의 두께를 갖는 사출 성형체를 120 °C, 0.2 MPa, 100% RH의 조건 하에 20 시간 동안 HIRAYAMA Corporation에 의해 제조된 PC305S III와 함께 20 시간 동안 유지한다. 이어서, 사출 성형체 샘플을 디바이스로부터 제거하고 전 광선 투과율을 JIS-K-7361-1의 방법으로 Nippon Denshoku Industries Co., Ltd에 의해 제조된 SE2000 유형 분광 시차 측정 기구를 사용하여 측정한다.
- [0378] 본 발명에 따른 열가소성 수지는 60% 이상, 바람직하게 70% 이상, 더욱 바람직하게 75% 이상, 더욱 더 바람직하게 80% 이상, 특히 바람직하게 85% 이상의 PCT 시험 후 전 광선 투과율을 가진다. 전 광선 투과율이 60% 이상인 한, 열가소성 수지는 관용적인 열가소성 수지보다 높은 수분 및 열 저항을 가지는 것으로 간주된다.
- [0379] 본 발명에 따른 열가소성 수지는 바람직하게 5 이하의, 색조(hue)를 나타내는 b 값을 가진다. b 값이 작을수록, 색상은 황색을 덜 띠며, 이는 색조로서 양호하다.
- [0380] 본 발명에 따라, 폴리카르보네이트 또는 폴리에스테르의 제조에 사용되는 디올 구성요소는 부가적으로 화학식 (I)의 단량체 화합물과 상이한 하나 이상의 디올 단량체, 예컨대 하나 이상의 화학식(IV)의 단량체를 포함할 수 있다.
- [0381] 화학식(I)의 단량체 화합물과 상이한 적합한 디올 단량체는 관용적으로 폴리카르보네이트의 제조에 사용되는 것 들로서, 예를 들어, 하기를 들 수 있다:
- [0382] - 지방족 디올, 예컨대 에틸렌 글리콜, 프로판디올, 부탄디올, 펜탄디올 및 헥산디올;
- [0383] - 지환족 디올, 예컨대 트리사이클로[5.2.1.0<sup>2,6</sup>]데칸 디메탄올, 사이클로헥산-1,4-디메탄올, 데칼린-2,6-디메탄올, 노르보르난 디메탄올, 펜타사이클로펜타데칸 디메탄올, 사이클로펜탄-1,3-디메탄올, 스피로글리콜, 1,4:3,6-디안하이드로-D-솔비톨, 1,4:3,6-디안하이드로-D-만니톨 및 1,4:3,6-디안하이드로-L-이디톨(이들 또한 디올의 예에 포함됨); 및
- [0384] - 방향족 디올, 특히 화학식(IV)의 방향족 디올, 예컨대 비스(4-하이드록시페닐)메탄, 1,1-비스(4-하이드록시페닐)-에탄, 비스(4-하이드록시-페닐)에테르, 비스(4-하이드록시페닐)설폰사이드, 비스(4-하이드록시페닐)설파이드, 비스(4-하이드록시페닐)설펜, 비스(4-하이드록시페닐)케톤, 2,2-비스(4-하이드록시-페닐)프로판, 2,2-비스(4-하이드록시-3-t-부틸페닐)프로판, 2,2-비스(4-하이드록시-3-메틸페닐)프로판, 1,1-비스(4-하이드록시페닐)사이클로펜탄, 1,1-비스(4-하이드록시-페닐)사이클로헥산, 2,2-비스(4-하이드록시페닐)헥사플루오로-프로판, 비스(4-하이드록시-페닐)디페닐메탄, 1,1-비스(4-하이드록시페닐)-1-페닐에탄, α, ω-비스[2-(p-하이드록시페닐)에틸]폴리디메틸실록산, α, ω-비스[3-(o-하이드록시페닐)-프로필]폴리디메틸실록산, 4,4'-[1,3-페닐렌비스(1-메틸에틸리렌)하이드록시-페닐]-1-페닐에탄, 9,9-비스(4-하이드록시페닐)플루오렌, 9,9-비스[4-(2-하이드록시-에톡시)-3-메틸페닐]플루오렌, 9,9-비스[4-(2-하이드록시-에톡시)-3-tert-부틸-페닐]플루오렌, 9,9-비스[4-(2-하이드록시-에톡시)-3-이소프로필페닐]플루오렌, 9,9-비스[4-(2-하이드록시-에톡시)-3-사이클로헥실페닐]플루오렌, 9,9-비스(4-하이드록시-3-페닐-페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-(2-하이드록시에틸)페닐)플루오렌, 9,9-비스(4-(2-하이드록시-에틸)-3-페닐페닐)플루오렌, 9,9-비스(6-하이드록시-2-나프틸)플루오렌, 9,9-비스(6-(2-하이드록시에틸)-2-나프틸)플루오렌, 10,10-비스(4-하이드록시페닐)안트라센-9-on, 10,10-비스(4-(2-하이드록시에틸)페닐)안트라센-9-on 및 2,2'-[1,1'-비나프탈렌-2,2'-디일비스(옥시)]디에탄올(2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프틸 또는 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프탈렌(BNE)으로도 명명됨).
- [0385] 바람직하게, 디올 구성요소는 화학식(I)의 단량체에 부가하여 적어도 하나의 화학식(IV)의 단량체를 포함한다. 특히, 화학식(I) 및 (IV)의 단량체의 총량은 디올 구성요소의 총 중량을 기준으로 하여 적어도 90 중량% 만큼 또는 디올 구성요소의 디올 단량체의 총 물량을 기준으로 하여 적어도 90 mol-% 만큼 디올 구성요소에 기여한다. 특히, 디올 구성요소는 화학식(I)의 단량체에 부가하여 화학식(IV-11) 내지 (IV-20)의 단량체 중에서 선택된 적어도 하나의 단량체를 포함한다. 더욱 특히, 디올 구성요소는 화학식(I)의 단량체에 부가하여 화학식(IV-11), (IV-12), (IV-14), (IV-19) 및 (IV-20)의 단량체 중에서 선택된 적어도 하나의 단량체를 포함한다. 특히, 디올 구성요소는 화학식(I)의 단량체에 부가하여 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프틸, 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-6,6'-디페닐-1,1'-비나프틸, 9,9-비스(6-(2-하이드록시에톡시)-2-나프틸)플루오렌,

9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)-플루오렌 및 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)-3-페닐페닐)플루오렌 및 이의 조합 중에서 선택된 적어도 하나의 단량체를 포함한다.

- [0386] 빈번하게, 디올 구성요소의 총 중량을 기준으로 하는 화학식(I)의 단량체 화합물의 상대량은 적어도 1 중량%, 바람직하게 적어도 2% 또는 적어도 5 중량%, 특히 적어도 8 중량% 또는 적어도 10 중량% 및 특히 적어도 12 중량% 또는 적어도 15 중량%, 바람직하게 1 내지 90 중량%의 범위 또는 5 내지 90 중량%의 범위, 특히 2 내지 80 중량%의 범위 또는 5 내지 80 중량%의 범위 또는 8 내지 80 중량%의 범위 또는 10 내지 80 중량%의 범위, 특히 5 내지 70 중량%의 범위 또는 8 내지 70 중량%의 범위 또는 10 내지 70 중량%의 범위 또는 15 내지 70 중량%의 범위이지만, 100 중량% 만큼 높을 수도 있다.
- [0387] 빈번하게, 디올 구성요소의 총 몰량을 기준으로 하는 화학식(I)의 단량체 화합물의 상대 몰량은 적어도 1 mol-%, 바람직하게 적어도 2 mol-% 또는 적어도 5 mol-%, 특히 적어도 8 mol-% 또는 적어도 10 mol-% 및 특히 적어도 12 mol-% 또는 적어도 15 mol-%, 바람직하게 1 내지 80 mol-%의 범위 또는 2 내지 80 mol-%의 범위 또는 5 내지 80 mol-%의 범위 또는 8 내지 80 mol-%의 범위, 특히 2 내지 70 mol-%의 범위 또는 5 내지 70 mol-%의 범위 또는 8 내지 70 mol-%의 범위 또는 10 내지 70 mol-%의 범위, 특히 5 내지 60 mol-%의 범위 또는 8 내지 60 mol-%의 범위 또는 10 내지 60 mol-%의 범위 또는 12 내지 60 mol-%의 범위 또는 15 내지 60 mol-%의 범위이지만, 100 mol-% 만큼 높을 수도 있다.
- [0388] 결과적으로, 디올 구성요소의 총 몰량을 기준으로 하는 화학식(IV)의 단량체 화합물의 상대 몰량은 99 mol-% 또는 98 mol-% 또는 95 mol-%를 초과하지 않고, 특히 92 mol-% 또는 90 mol-%를 초과하지 않으며 특히 88 mol-% 또는 85 mol-%를 초과하지 않을 것이고, 바람직하게 20 내지 99 mol-%의 범위 또는 20 내지 98 mol-%의 범위 또는 20 내지 95 mol-%의 범위 또는 20 내지 92 mol-%의 범위, 특히 30 내지 98 mol-%의 범위 또는 30 내지 95 mol-%의 범위 또는 30 내지 92 mol-%의 범위 또는 30 내지 90 mol-%의 범위, 특히 40 내지 95 mol-%의 범위 또는 40 내지 92 mol-%의 범위 또는 40 내지 90 mol-%의 범위 또는 40 내지 88 mol-%의 범위 또는 40 내지 85 mol-%의 범위이지만, 99.9 mol-% 만큼 높을 수도 있다.
- [0389] 빈번하게, 화학식(I)의 단량체 및 화학식(IV)의 단량체의 총 몰량은 디올 구성요소 중의 디올 단량체의 총 몰량을 기준으로 하여 적어도 80 mol-%, 특히 적어도 90 mol-%, 특히 적어도 95 mol-%이거나 100 mol-% 이하이다.
- [0390] 화학식(I)의 단량체 및 임의로 화학식(IV)의 단량체에 부가하여 사용될 수 있는, 추가의 바람직한 방향족 디하이드록시 화합물의 예로는 비스페놀 A, 비스페놀 AP, 비스페놀 AF, 비스페놀 B, 비스페놀 BP, 비스페놀 C, 비스페놀 E, 비스페놀 F, 비스페놀 G, 비스페놀 M, 비스페놀 S, 비스페놀 P, 비스페놀 PH, 비스페놀 TMC, 비스페놀 Z 등을 들 수 있으나, 이로 제한되는 것은 아니다.
- [0391] 분자량 및 용융 점도를 조정하기 위하여, 열가소성 중합체를 형성하는 단량체는 단일 작용기 화합물, 폴리카르보네이트의 경우 단일 작용기 알코올 및 폴리에스테르의 경우 단일 작용기 알코올 또는 단일 작용기 카르복실산을 포함할 수도 있다. 적합한 모노알코올은 부탄올, 헥산올 및 옥탄올이다. 적합한 모노카르복실산으로는, 예를 들어, 벤조산, 프로피온산 및 부티르산을 들 수 있다. 분자량 및 용융 점도를 증가시키기 위하여, 열가소성 중합체를 형성하는 단량체는 다중 작용기 화합물, 폴리카르보네이트의 경우 3개 이상의 하이드록실기를 갖는 다중 작용기 알코올 및 폴리에스테르의 경우 3개 이상의 하이드록실기를 갖는 다중 작용기 알코올 또는 3개 이상의 카르복실기를 갖는 다중 작용기 카르복실산을 포함할 수도 있다. 적합한 다중 작용기 알코올은, 예를 들어, 글리세린, 트리메틸올 프로판, 펜타에리트리트 및 1,3,5-트리하이드록시 펜탄이다. 적합한 3개 이상의 카르복실기를 갖는 다중 작용기 카르복실산은, 예를 들어, 트리멜리트산 및 피로멜리트산이다. 디올 구성요소의 몰량을 기준으로 하는 이들 화합물의 총량은 빈번하게 10 mol-%를 초과하지 않을 것이다.
- [0392] 적합한 카르보네이트 형성 단량체는 폴리카르보네이트의 제조에 카르보네이트 형성 단량체로서 관용적으로 사용되는 것들이며, 포스젠, 디포스젠 및 디에스테르 카르보네이트, 예컨대 디에틸 카르보네이트, 디페닐 카르보네이트, 디-p-톨릴 카르보네이트, 페닐-p-톨릴 카르보네이트, 디-p-클로로페닐 카르보네이트 및 디나프틸 카르보네이트를 포함하지만 이로 제한되지 않는다. 이들 중에서, 디페닐 카르보네이트가 특히 바람직하다. 카르보네이트 형성 단량체는 총 1 mol의 디하이드록시 화합물(들)에 대해 0.97 내지 1.20 mol, 및 더욱 바람직하게 0.98 내지 1.10 mol의 비로 빈번하게 사용된다.
- [0393] 적합한 디카르복실산으로는 하기를 들 수 있으나, 이로 제한되지 않는다:
- [0394] - 지방족 디카르복실산, 예컨대 옥살산, 말론산, 석신산, 글루타르산, 아디프산, 피멜산, 수베르산, 아젤라산;
- [0395] - 지환족 디카르복실산, 예컨대 트리사이클로[5.2.1.02,6]데칸 디카르복실산, 사이클로헥산-1,4-디카르복실산,

테칼린-2,6-디카르복실산, 및 노르보르난디카르복실산; 및

- [0396] - 방향족 디카르복실산, 예컨대 벤젠 디카르복실산, 구체적으로 프탈산, 이소프탈산, 2-메틸테레프탈산 또는 테레프탈산, 및 나프탈렌 디카르복실산, 구체적으로 나프탈렌-1,3-디카르복실산, 나프탈렌-1,4-디카르복실산, 나프탈렌-1,5-디카르복실산, 나프탈렌-1,6-디카르복실산, 나프탈렌-1,7-디카르복실산, 나프탈렌-2,5-디카르복실산, 나프탈렌-2,6-디카르복실산, 2-[9-(카르복시메틸)플루오렌-9-일]아세트산(화학식 DC1), 2-[9-(카르복시메틸)플루오렌-9-일]프로피온산(화학식 DC2), 2,2'-비스(카르복시메틸옥시)-1,1'-비나프틸(화학식 DC3) 및 나프탈렌-2,7-디카르복실산.



- [0397]
- [0398] 디카르복실산의 적합한 에스테르 형성 유도체로는 디알킬 에스테르, 디페닐 에스테르 및 디톨릴 에스테르를 들 수 있으나, 이로 제한되지 않는다.
- [0399] 폴리에스테르의 경우, 에스테르 형성 단량체는 총 1 mol의 디하이드록시 화합물(들)에 대해 0.97 내지 1.20 mol, 및 더욱 바람직하게 0.98 내지 1.10 mol의 비로빈번하게 사용된다.
- [0400] 본 발명의 폴리카르보네이트는, 예를 들어, 그 전체 내용이 참조된 제US 9,360,593호, 제US 2016/0319069호 및 제US 2017/0276837호에 기재된 바와 같은 폴리카르보네이트의 주지의 제조와 유사하게 화학식(I)의 단량체 및 임의로 추가의 디올 단량체, 예컨대 화학식(IV)의 단량체를 포함하는 디올 구성요소 및 카르보네이트 형성 단량체를 반응시켜 제조될 수 있다.
- [0401] 본 발명의 폴리에스테르는, 예를 들어, 그 전체 내용이 참조된 제US2017/044311호에 기재된 바와 같은 폴리에스테르의 주지의 제조와 유사하게 화학식(I)의 단량체 및 임의로 추가의 디올 단량체, 예컨대 화학식(IV)의 단량체를 포함하는 디올 구성요소 및 디카르복실산 또는 이의 에스테르 형성 유도체를 반응시켜 제조될 수 있다.
- [0402] 본 발명의 폴리에스테르카르보네이트는 당업계에서 기재된 바와 같은 폴리에스테르카르보네이트의 주지의 제조와 유사하게 화학식(I)의 단량체 및 임의로 추가의 디올 단량체, 예컨대 화학식(IV)의 단량체를 포함하는 디올 구성요소, 카르보네이트 형성 단량체 및 디카르복실산 또는 이의 에스테르 형성 유도체를 반응시켜 제조될 수 있다.
- [0403] 카르보네이트 형성 단량체 또는 폴리카르복실산의 에스테르 형성 유도체가 사용되는 경우, 폴리카르보네이트, 폴리에스테르 및 폴리에스테르카르보네이트는 보통 에스테르화 촉매, 특히 트랜스에스테르화 촉매의 존재하에 디올 구성요소의 단량체를 카르보네이트 형성 단량체 및/또는 에스테르 형성 단량체, 즉, 디카르복실산 또는 이의 에스테르 형성 유도체와 반응시켜 제조된다.
- [0404] 적합한 트랜스에스테르화 촉매는 염기성 화합물이며, 이는 구체적으로 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속 화합물, 질소-함유 화합물 등을 포함하나 이로 제한되지 않는다. 마찬가지로, 적합한 트랜스에스테르화 촉매는 산성 화합물이고, 이는 구체적으로 다가 금속의 루이스산 화합물, 예컨대 아연, 주석, 티타늄, 지르코늄, 납 등과 같은 화합물을 포함하나 이로 제한되지 않는다.
- [0405] 적합한 알칼리 금속 화합물의 예로는 유기산, 예컨대 아세트산, 스테아르산, 벤조산, 또는 페닐인산의 알칼리 금속염, 알칼리 금속 페놀레이트, 알칼리 금속 옥사이드, 알칼리 금속 카르보네이트, 알칼리 금속 보로하이드리드, 알칼리 금속 수소 카르보네이트, 알칼리 금속 포스페이트, 알칼리 금속 수소 포스페이트, 알칼리 금속 하이드록사이드, 알칼리 금속 하이드리드, 알칼리 금속 알콕사이드 등을 들 수 있다. 이의 구체적인 예로는 소듐 하이드록사이드, 포타슘 하이드록사이드, 세슘 하이드록사이드, 리튬 하이드록사이드, 소듐 수소 카르보네이트,

소듐 카르보네이트, 포타슘 카르보네이트, 세슘 카르보네이트, 리튬 카르보네이트, 소듐 아세테이트, 포타슘 아세테이트, 세슘 아세테이트, 리튬 아세테이트, 소듐 스테아레이트, 포타슘 스테아레이트, 세슘 스테아레이트, 리튬 스테아레이트, 소듐 보로하이드리드, 소듐 보로페녹사이드, 소듐 벤조에이트, 포타슘 벤조에이트, 세슘 벤조에이트,

- [0406] 리튬 벤조에이트, 디소듐 수소 포스페이트, 디포타슘 수소 포스페이트, 디리튬 수소 포스페이트, 및 디소듐 페닐포스페이트를 들 수 있으며; 또한 비스페놀 A의 디소듐염, 디포타슘염, 디세슘염, 디리튬염, 페놀의 소듐염, 포타슘염, 세슘염 및 리튬염 등을 들 수 있다.
- [0407] 알칼리 토류 금속 화합물의 예로는 유기산, 예컨대 아세트산, 스테아르산, 벤조산, 또는 페닐인산의 알칼리 토류 금속염, 알칼리 토류 금속 페놀레이트, 알칼리 토류 금속 토류 옥사이드, 알칼리 토류 금속 카르보네이트, 알칼리 금속 보로하이드리드, 알칼리 토류 금속 수소 카르보네이트, 알칼리 토류 금속 하이드록사이드, 알칼리 토류 금속 하이드리드, 알칼리 토류 금속 알콕사이드 등을 들 수 있다. 이의 구체적인 예로는 마그네슘 하이드록사이드, 칼슘 하이드록사이드, 스트론튬 하이드록사이드, 바륨 하이드록사이드, 마그네슘 수소 카르보네이트, 칼슘 수소 카르보네이트, 스트론튬 수소 카르보네이트, 바륨 수소 카르보네이트, 마그네슘 카르보네이트, 칼슘 카르보네이트, 스트론튬 카르보네이트, 바륨 카르보네이트, 마그네슘 아세테이트, 칼슘 아세테이트, 스트론튬 아세테이트, 바륨 아세테이트, 마그네슘 스테아레이트, 칼슘 스테아레이트, 칼슘 벤조에이트, 마그네슘 페닐포스페이트 등을 들 수 있다.
- [0408] 질소-함유 화합물의 예로는 4차 암모늄하이드록사이드, 이의 염, 아민 등을 들 수 있다. 이의 구체적인 예로는 알킬기, 아릴기 등을 포함하는 4차 암모늄하이드록사이드, 예컨대 테트라메틸암모늄하이드록사이드, 테트라에틸암모늄하이드록사이드, 테트라프로필암모늄하이드록사이드, 테트라부틸암모늄하이드록사이드, 트리메틸벤질암모늄하이드록사이드 등; 3차 아민, 예컨대 트리페닐아민, 디메틸벤질아민, 트리페닐아민 등; 2차 아민, 예컨대 디에틸아민, 디부틸아민 등; 1차 아민, 예컨대 프로필아민, 부틸아민 등; 이미다졸, 예컨대 2-메틸이미다졸, 2-페닐이미다졸, 벤조이미다졸 등; 염기 또는 염기성 염, 예컨대 암모니아, 테트라메틸암모늄보로하이드리드, 테트라부틸암모늄보로하이드리드, 테트라부틸암모늄테트라페닐보레이트, 테트라페닐암모늄테트라페닐보레이트 등을 들 수 있다.
- [0409] 트랜스에스테르화 촉매의 바람직한 예로는 다가 금속, 예컨대 아연, 주석, 티타늄, 지르코늄, 납 등의 염, 특히 클로라이드, 알콕사이드, 알카노에이트, 벤조에이트, 아세틸아세토네이트 등을 들 수 있다. 이들은 독립적으로 또는 2개 이상의 조합으로 사용될 수 있다. 이러한 트랜스에스테르화 촉매의 구체적인 예로는 아연 아세테이트, 아연 벤조에이트, 아연 2-에틸헥사노에이트, 주석 클로라이드(II), 주석 클로라이드(IV), 주석 아세테이트(II), 주석 아세테이트(IV), 디부틸주석 라우레이트, 디부틸주석옥사이드, 디부틸주석메톡사이드, 지르코늄아세틸아세토네이트, 지르코늄 옥시아세테이트, 지르코늄테트라부톡사이드, 납 아세테이트(II), 납 아세테이트(IV) 등을 들 수 있다.
- [0410] 트랜스에스테르화 촉매는 빈번하게 총 1 mol의 디하이드록시 화합물(들)에 대해  $10^{-9}$  내지  $10^{-3}$  mol, 바람직하게  $10^{-7}$  내지  $10^{-4}$  mol의 비로 사용된다.
- [0411] 빈번하게, 폴리카르보네이트, 폴리에스테르 및 폴리에스테르카르보네이트는 용융 중축합 방법에 의해 제조된다. 용융 중축합에서 단량체는 부가적인 불활성 용매의 부재하에 반응한다. 반응이 수행되는 동안 트랜스에스테르화 반응 중에 형성된 임의의 부산물은 주변 압력 또는 감압에서 반응 혼합물의 가열에 의해 제거된다.
- [0412] 용융 중축합 반응은 바람직하게 단량체 및 촉매를 반응기 내로 투입하고 반응 혼합물에 조건을 적용하는 단계를 포함하며, 이때 단량체 사이의 반응 및 부산물의 형성이 일어난다. 중축합 반응 중에 적어도 잠시 동안 부산물이 체류하면 유리한 것으로 밝혀졌다. 그러나, 중축합 반응을 생성물 쪽으로 구동하기 위해서는, 중축합 반응 중에 또는 바람직하게 중축합 반응의 끝에 형성된 부산물의 적어도 일부를 제거하는 것이 유익하다. 반응 혼합물 중에 부산물을 허용하기 위해서, 반응기를 밀폐시키거나 압력을 증가 또는 감소시켜 압력을 제어할 수 있다. 본 단계의 반응 시간은 20 분 이상 및 240 분 이하, 바람직하게 40 분 이상 및 180 분 이하, 및 특히 바람직하게 60 분 이상 및 150 분 이하이다. 본 단계에서, 부산물이 생성된 직후 증류에 의해 제거되는 경우에, 최종적으로 얻어진 열가소성 수지는 낮은 함량의 고분자량 수지 분자를 갖는다. 대조적으로, 부산물이 소정의 시간 동안 반응기 내에 체류하도록 허용되는 경우에, 최종적으로 얻어진 열가소성 수지는 높은 함량의 고분자량 수지 분자를 갖는다.
- [0413] 용융 중축합 반응은 연속 시스템으로 또는 배치 시스템으로 수행될 수 있다. 반응에 사용가능한 반응기는 앵커-

유형 교반 블레이드, Maxblend<sup>®</sup> 교반 블레이드, 나선형 리본-유형 교반 블레이드 등을 포함하는 수직 유형; 패들 블레이드, 격자 블레이드, 아이 글래스-유형 블레이드 등을 포함하는 수평 유형; 또는 스크류를 포함하는 압출기 유형일 수 있다. 이러한 반응기의 조합을 포함하는 반응기는 바람직하게 중합 생성물의 점도를 고려하여 이용할 수 있다.

[0414] 중합 반응이 완료된 후 열가소성 수지, 예컨대 폴리카르보네이트 수지를 생성하는 방법에 따라, 열안정성 및 가수분해 안정성을 유지하기 위해 촉매가 제거되거나 불활성화될 수 있다. 촉매의 불활성화를 위해 바람직한 방법은 산성 물질을 첨가하는 것이다. 산성 물질의 구체적인 예로는 에스테르, 예컨대 부틸 벤조에이트 등; 방향족 설포네이트, 예컨대 p-톨루엔설포산 등; 방향족 설포산 에스테르, 예컨대 부틸 p-톨루엔설포네이트, 헥실 p-톨루엔설포네이트 등; 인산, 예컨대 아인산, 인산, 포스폰산 등; 아인산 에스테르, 예컨대 트리페닐 포스파이트, 모노페닐 포스파이트, 디페닐 포스파이트, 디에틸 포스파이트, 디-n-프로필 포스파이트, 디-n-부틸 포스파이트, 디-n-헥실 포스파이트, 디옥틸 포스파이트, 모노옥틸 포스파이트, 등; 인산 에스테르, 예컨대 트리페닐 포스페이트, 디페닐 포스페이트, 모노페닐 포스페이트, 디부틸 포스페이트, 디옥틸 포스페이트, 모노옥틸 포스페이트 등; 포스폰산, 예컨대 디페닐 포스폰산, 디옥틸 포스폰산, 디부틸 포스폰산 등; 포스폰산 에스테르, 예컨대 디에틸 페닐포스포네이트 등; 포스핀, 예컨대 트리페닐포스핀, 비스(디페닐포스피노)에탄 등; 붕산, 예컨대 붕산, 페닐붕산 등; 방향족 설포산염, 예컨대 테트라부틸포스포늄 도데실벤젠설포네이트염 등; 유기 할라이드, 예컨대 클로라이드 스테아레이트, 벤조일 클로라이드, 클로라이드 p-톨루엔설포네이트 등; 알킬설포산, 예컨대 디메틸 설포산 등; 유기 할라이드, 예컨대 벤질 클로라이드 등을 들 수 있다. 이들 불활성화제는 촉매에 대해 0.01 내지 50 mol, 바람직하게 0.3 내지 20 mol로 빈번하게 사용된다. 촉매가 불활성화된 후, 중합체로부터 낮은 비점의 화합물을 증류에 의해 제거하는 단계가 있을 수 있다. 증류는 바람직하게 200 내지 350 °C의 온도에서 감압, 예를 들어, 0.1 내지 1 mm Hg의 압력에서 수행된다. 본 단계의 경우, 고 표면 재생 능력(high surface renewal capability)을 갖는 교반 블레이드, 예컨대 패들 블레이드, 격자 블레이드, 아이 글래스-유형 블레이드 등을 포함하는 수평 디바이스, 또는 박막 증발기가 바람직하게 사용된다.

[0415] 열가소성 수지, 예컨대 폴리카르보네이트 수지가 매우 소량의 외래 물체를 갖는 것이 바람직하다. 따라서, 용융된 생성물을 바람직하게 여과하여 임의의 고체를 용융물로부터 제거한다. 필터 메쉬는 바람직하게 5 μm 이하, 및 더욱 바람직하게 1 μm 이하이다. 생성된 중합체를 중합체 필터로 여과하는 것이 바람직하다. 중합체 필터의 메쉬는 바람직하게 100 μm 이하, 및 더욱 바람직하게 30 μm 이하이다. 수지 펠렛을 샘플링하는 단계는 말할 필요도 없이 먼지가 적은 환경에서 수행될 필요가 있다. 먼지 환경은 바람직하게 클래스 6 이하, 및 더욱 바람직하게 클래스 5 이하이다.

[0416] 열가소성 수지는 광학 요소를 생성하기 위한 임의의 관용적인 성형 방법에 의해 성형될 수 있다. 적합한 성형 방법으로는 사출 성형, 압축 성형, 주조, 롤 공정, 압출 성형, 연장 등을 들 수 있으나 이로 제한되지 않는다.

[0417] 이와 같이 본 발명의 열가소성 수지를 성형하는 것이 가능한 한편, 적어도 하나의 본 발명의 열가소성 수지를 함유하고 적어도 하나의 부가적 및/또는 추가 수지를 추가로 함유하는 수지 조성물을 성형하는 것도 가능하다. 적합한 첨가제로는 항산화제, 가공 안정제, 광안정제, 중합 금속 억제제, 난연제, 윤활제, 대전방지제, 계면활성제, 향균제, 이형제, 자외선 흡수제, 가스제, 상용화제 등을 들 수 있다. 적합한 추가의 수지는, 예를 들어, 화학식(I)의 반복 단위를 함유하지 않은 다른 폴리카르보네이트 수지, 폴리에스테르 카르보네이트 수지, 폴리에스테르 수지, 폴리아미드, 폴리아세탈 등이다.

[0418] 항산화제의 예로는 트리에틸렌글리콜-비스[3-(3-tert-부틸-5-메틸-4-하이드록시페닐)프로피오네이트], 1,6-헥산디올-비스[3-(3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시페닐)프로피오네이트], 펜타에리트리톨-테트라키스[3-(3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시페닐)프로피오네이트], 옥타데실-3-(3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시페닐)프로피오네이트, 3,9-비스(2,6-디-tert-부틸-4-메틸페녹시)-2,4,8,10-테트라옥사-3,9-디포스파스피로[5.5]운데칸, 5,7-디-tert-부틸-3-(3,4-디메틸페닐)벤조푸란-2(3H)-온, 5,7-디-tert-부틸-3-(1,2-디메틸페닐)벤조푸란-2(3H)-온, 1,3,5-트리메틸-2,4,6-트리스(3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시벤질)벤젠, N,N-헥사메틸렌비스(3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시-하이드로신나미드), 3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시-벤질포스포네이트-디에틸에스테르, 트리스(3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시벤질)이소시아누레이트, 및 3,9-비스{1,1-디메틸-2-[β-(3-tert-부틸-4-하이드록시-5-메틸페닐)프로피오닐옥시]에틸}-2,4,8,10-테트라옥사스피로(5,5)운데칸 등을 들 수 있으나 이로 제한되지 않는다. 이들 예 중에서, 3,9-비스(2,6-디-tert-부틸-4-메틸페녹시)-2,4,8,10-테트라옥사-3,9-디포스파스피로[5.5]운데칸, 5,7-디-tert-부틸-3-(3,4-디메틸페닐)벤조푸란-2(3H)-온, 및 5,7-디-tert-부틸-3-

(1,2-디메틸페닐)벤조푸란-2(3H)-온이 더욱 바람직하다. 열가소성 수지 내의 항산화제 함량은 열가소성 수지 100 중량부에 대해 바람직하게 0.001 내지 0.3 중량부이다.

[0419] 가공 안정제의 예로는 포스포러스-계열 가공 안정제, 황-계열 가공 안정제 등을 들 수 있으나 이로 제한되지 않는다. 포스포러스-계열 가공 안정제로는 아인산, 인산, 포스포너스산, 포스폰산, 이의 에스테르 등을 들 수 있다. 이의 구체적인 예로는 트리페닐포스파이트, 트리스(노닐페닐)포스파이트, 트리스(2,4-디-tert-부틸페닐)포스파이트, 트리스(2,6-디-tert-부틸페닐)포스파이트, 트리데실포스파이트, 트리옥틸포스파이트, 트리옥타데실포스파이트, 디데실모노페닐포스파이트, 디옥틸모노페닐포스파이트, 디소프로필모노페닐포스파이트, 모노부틸-디페닐포스파이트, 모노데실디페닐포스파이트, 모노옥틸디페닐-포스파이트, 비스(2,6-디-tert-부틸-4-메틸페닐)펜타에리트리톨-디포스파이트, 2,2-메틸렌비스(4,6-디-tert-부틸페닐)옥틸포스파이트, 비스(노닐페닐)펜타에리트리톨디포스파이트, 비스(2,4-디쿠밀페닐)펜타에리트리톨디포스파이트, 비스(2,4-디-tert-부틸페닐)펜타에리트리톨-디포스파이트, 디스테아릴펜타에리트리톨디포스파이트, 트리부틸포스페이트, 트리에틸포스페이트, 트리메틸포스페이트, 트리페닐포스페이트, 디페닐모노오르톡세닐포스페이트, 디부틸포스페이트, 디옥틸-포스페이트, 디소프로필포스페이트, 디메틸 벤젠포스포네이트, 디에틸 벤젠-포스포네이트, 디프로필 벤젠포스포네이트, 테트라키스(2,4-디-t-부틸페닐)-4,4'-비페닐렌디포스포나이트, 테트라키스(2,4-디-t-부틸페닐)-4,3'-비페닐렌디포스포나이트, 테트라키스(2,4-디-t-부틸페닐)-3,3'-비페닐렌디포스포나이트, 비스(2,4-디-tert-부틸-페닐)-4-페닐-페닐포스포나이트, 비스(2,4-디-tert-부틸페닐)-3-페닐-페닐-포스포나이트 등을 들 수 있다. 열가소성 수지 조성물 내의 포스포러스-계열 가공 안정제의 함량은 열가소성 수지 100 중량부에 대해 바람직하게 0.001 내지 0.2 중량부이다.

[0420] 황-계열 가공 안정제의 예로는 펜타에리트리톨-테트라키스(3-라우릴티오프로피오네이트), 펜타에리트리톨-테트라키스(3-미리스틸티오프로피오네이트), 펜타에리트리톨-테트라키스(3-스테아릴티오프로피오네이트), 디라우릴-3,3'-티오디프로피오네이트, 디미리스틸-3,3'-티오디프로피오네이트, 디스테아릴-3,3'-티오디프로피오네이트 등을 들 수 있으나 이로 제한되지 않는다. 열가소성 수지 조성물 내의 황-계열 가공 안정제의 함량은 열가소성 수지 100 중량부에 대해 바람직하게 0.001 내지 0.2 중량부이다.

[0421] 바람직한 이형체는 적어도 90 중량%의 알코올 및 지방산의 에스테르를 함유한다. 알코올 및 지방산의 에스테르의 구체적인 예로는 1가 알코올 및 지방산의 에스테르, 다가 알코올 및 지방산의 부분적 에스테르 또는 전체적 에스테르를 들 수 있다. 알코올 및 지방산의 상기-기재된 에스테르의 바람직한 예로는 1 내지 20개의 탄소수를 갖는 1가 알코올 및 10 내지 30개의 탄소수를 갖는 포화된 지방산의 에스테르를 들 수 있다. 다가 알코올 및 지방산의 부분적 또는 전체적 에스테르의 바람직한 예로는 2 내지 25개의 탄소수를 갖는 다가 알코올 및 10 내지 30개의 탄소수를 갖는 포화 지방산의 부분적 또는 전체적 에스테르를 들 수 있다. 1가 알코올 및 지방산의 에스테르의 구체적인 예로는 스테아릴 스테아레이트, 팔미틸 팔미테이트, 부틸 스테아레이트, 메틸 라우레이트, 이소프로필 팔미테이트 등을 들 수 있다. 다가 알코올 및 지방산의 부분적 또는 전체적 에스테르의 구체적인 예로는 모노글리세리드 스테아레이트, 모노글리세리드 스테아레이트, 디글리세리드 스테아레이트, 트리글리세리드 스테아레이트, 모노소르비테이트 스테아레이트, 모노글리세리드 베헤네이트, 모노글리세리드 카프릴레이트, 모노글리세리드 라우레이트, 펜타에리트리톨 모노스테아레이트, 펜타에리트리톨 테트라스테아레이트, 펜타에리트리톨 테트라펠라르코네이트, 프로필렌글리콜 모노스테아레이트, 비페닐 비페네이트, 솔비탄 모노스테아레이트, 2-에틸헥실스테아레이트, 디펜타에리트리톨의 전체적 또는 부분적 에스테르, 예컨대 디펜타에리트리톨 헥사스테아레이트 등을 들 수 있다. 수지 조성물 내의 이형체의 함량은 열가소성 수지 100 중량부에 대해 바람직하게 0.005 내지 2.0 중량부, 더욱 바람직하게 0.01 내지 0.6 중량부, 및 더욱 더 바람직하게 0.02 내지 0.5 중량부이다.

[0422] 바람직한 자외선 흡수제는 벤조트리아졸-계열 자외선 흡수제, 벤조페논-계열 자외선 흡수제, 트리아진-계열 자외선 흡수제, 사이클릭 이미노에스테르-계열 자외선 흡수제, 및 시아노아크릴레이트-계열 자외선 흡수제로 구성된 그룹 중에서 선택된다. 즉, 하기 자외선 흡수제가 독립적으로 또는 2가지 이상의 조합으로 사용될 수 있다.

[0423] 벤조트리아졸-계열 자외선 흡수제의 예로는 2-(2-하이드록시-5-메틸페닐)벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-5-tert-옥틸페닐)벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-3,5-디쿠밀페닐)페닐벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-3-tert-부틸-5-메틸페닐)-5-클로로벤조트리아졸, 2,2'-메틸렌비스[4-(1,1,3,3-테트라메틸부틸)-6-(2N-벤조트리아졸-2-일)페놀], 2-(2-하이드록시-3,5-디-tert-부틸페닐)벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-3,5-디-tert-부틸페닐)-5-클로로벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-3,5-디-tert-아밀페닐)벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-5-tert-옥틸페닐)벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-5-tert-부틸페닐)벤조트리아졸, 2-(2-하이드록시-4-옥톡시페닐)벤조트리아졸, 2,2'-메틸렌비스(4-쿠밀-6-벤조트리아졸페닐), 2,2'-p-페닐렌비스(1,3-벤족사진-4-온), 2-[2-하이드록시-3-(3,4,5,6-테

트라하이드로프탈이미드메틸)-5-메틸페닐]벤조트리아졸 등을 들 수 있다.

- [0424] 벤조페논-계열 자외선 흡수제의 예로는 2,4-디하이드록시벤조페논, 2-하이드록시-4-메톡시벤조페논, 2-하이드록시-4-옥톡시벤조페논, 2-하이드록시-4-벤질옥시벤조페논, 2-하이드록시-4-메톡시-5-설펝시벤조페논, 2-하이드록시-4-메톡시벤조페논-5-설펝산 수화물, 2,2'-디하이드록시-4-메톡시-벤조페논, 2,2',4,4'-테트라하이드록시벤조페논, 2,2'-디하이드록시-4,4'-디메톡시벤조페논, 2,2'-디하이드록시-4,4'-디메톡시-5-소듐설펝시벤조페논, 비스(5-벤조일-4-하이드록시-2-메톡시페닐)메탄, 2-하이드록시-4-n-도데실옥시벤조페논, 2-하이드록시-4-메톡시-2'-카르복시벤조페논 등을 들 수 있다.
- [0425] 트리아진-계열 자외선 흡수제의 예로는 2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-([(헥실)옥시]-페놀, 2-(4,6-비스(2,4-디메틸페닐)-1,3,5-트리아진-2-일)-5-([(옥틸)옥시]-페놀 등을 들 수 있다.
- [0426] 사이클릭 이미노에스테르-계열 자외선 흡수제의 예로는 2,2'-비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-p-페닐렌비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-m-페닐렌비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-(4,4'디페닐렌)비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-(2,6-나프탈렌)비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-(1,5-나프탈렌)비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-(2-메틸-p-페닐렌)비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-(2-니트로-p-페닐렌)비스(3,1-벤족사진-4-온), 2,2'-(2-클로로-p-페닐렌)비스(3,1-벤족사진-4-온) 등을 들 수 있다.
- [0427] 시아노아크릴레이트-계열 자외선 흡수제의 예로는 1,3-비스-[(2'-시아노-3',3'-디페닐아크릴로일)옥시]-2,2-비스(((2-시아노-3,3-디페닐아크릴로일)옥시)메틸)프로판, 1,3-비스-[(2-시아노-3,3-디페닐아크릴로일)옥시]벤젠 등을 들 수 있다.
- [0428] 수지 조성물 내 자외선 흡수제의 함량은 열가소성 수지 100 중량부에 대해 바람직하게 0.01 내지 3.0 중량부, 더욱 바람직하게 0.02 내지 1.0 중량부, 및 더욱 더 바람직하게 0.05 내지 0.8 중량부이다. 용도에 따라 이련 범위의 함량으로 함유된 자외선 흡수제는 열가소성 수지에 충분한 기후 내성을 제공할 수 있다.
- [0429] 상기 언급한 바와 같이, 각각 본 명세서에 기재된 바와 같은 화학식(II), (IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2)의 반복 단위를 포함하는 열가소성 중합체 수지, 특히 폴리카르보네이트 수지는 열가소성 수지에 높은 투명도 및 높은 굴절률을 제공하며, 따라서 높은 투명도 및 높은 굴절률을 필요로 하는 광학 디바이스를 제조하는데 적합하다. 더욱 정확히, 각각 화학식(II), (IIa), (IIa-1) 및 (IIa-2)의 구조 단위를 갖는 열가소성 폴리카르보네이트는 바람직하게 적어도 1.660, 더욱 바람직하게 적어도 1.680, 특히 적어도 1.690의 높은 굴절률을 가짐을 특징으로 한다.
- [0430] 각각 화학식(I), (Ia), (Ia-1) 및 (Ia-2)의 단량체의 열가소성 수지, 특히 폴리카르보네이트 수지 굴절률에 대한 기여는 열가소성 수지 내의 상기 단량체의 굴절률 및 상기 단량체의 상대량에 따른다. 일반적으로, 열가소성 수지 내에 함유된 단량체의 굴절률이 높을수록 생성된 열가소성 수지의 굴절률이 높을 것이다. 이와 별개로, 화학식(II)의 구조 단위를 포함하는 열가소성 수지의 굴절률은, 예를 들어, 컴퓨터 소프트웨어 ACD/ChemSketch 2012(Advanced Chemistry Development, Inc.)를 사용함으로써 열가소성 수지를 제조하는데 사용된 단량체의 굴절률로부터(단량체의 또는 애초의 굴절률로부터) 계산될 수 있다.
- [0431] 열가소성 공중합체 수지의 경우, 열가소성 수지, 특히 폴리카르보네이트 수지의 굴절률은 공중합체 수지를 형성하는 각각의 단량체의 단일중합체의 굴절률로부터 하기의 소위 "폭스 방정식(fox equation)"에 의해 계산될 수 있다:
- [0432] 
$$1/n_D = x_1/n_{D1} + x_2/n_{D2} + \dots x_n/n_{Dn},$$
- [0433] 상기 식에서  $n_D$ 는 공중합체의 굴절률이고,  $x_1, x_2, \dots x_n$ 은 공중합체 내의 단량체 1, 2,  $\dots n$ 의 질량 분획이며  $n_{D1}, n_{D2}, \dots n_{Dn}$ 은 한번에 단량체 1, 2,  $\dots n$ 의 어느 하나 만으로부터 합성된 단일중합체의 굴절률이다. 폴리카르보네이트의 경우,  $x_1, x_2, \dots x_n$ 은 OH 단량체의 총량을 기준으로 하는 OH 단량체 1, 2,  $\dots n$ 의 질량 분획이다. 단일중합체의 굴절률이 높을수록 더 높은 굴절률의 공중합체를 초래할 것임은 명백하다.
- [0434] 열가소성 수지의 굴절률은 직접적 또는 간접적으로 결정될 수 있다. 직접적인 결정의 경우, 열가소성 수지의 굴절률  $n_D$ 는 아베 굴절계를 사용하고 열가소성 수지의 0.1 mm 필름을 적용하여 프로토콜 JIS-K-7142에 따라 589 nm의 파장에서 측정된다. 화학식(I)의 화합물의 호모폴리카르보네이트의 굴절률의 경우, 굴절률은 간접적으로 결정될 수도 있다. 이 경우에, 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)-플루오렌 및 디페닐 카르보네이트와 제각각의 화학식(I)의 단량체의 코-폴리카르보네이트가 제US 9,360,593호의 칼럼 48의 실시예 1의 프로토콜에 따라

제조되고, 아베 굴절계를 사용하고 코-폴리카르보네이트의 0.1 mm 필름을 적용하여 프로토콜 JIS-K-7142에 따라 589 nm의 파장에서 코-폴리카르보네이트의 굴절률  $n_D$ 를 측정한다. 이렇게 측정된 굴절률  $n_D$ 로부터, 폭스 방정식 및 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)페닐)플루오렌의 공지 굴절률( $n_D(589 \text{ nm}) = 1.639$ )을 적용하여 제각각의 단량체의 호모폴리카르보네이트의 굴절률을 계산할 수 있다.

- [0435] 앞에서 언급한 바와 같이, 색상-부여 라디칼, 예컨대 라디칼  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$  및  $Ar^1$ 의 일부를 보유하지 않은 화학식(I)의 화합물도 ASTM E313에 따라 결정된 낮은 황색도 지수 Y.I.를 제공하는 순도로 얻어질 수 있으며, 이는 또한 광학 수지의 제조에서의 용도를 위해 중요할 수 있다.
- [0436] 더욱 정확히, ASTM E313에 따라 결정된 화학식(I)의 화합물의 황색도 지수 Y.I.는 바람직하게 200, 더욱 바람직하게 100, 더욱 더 바람직하게 50, 특히 20 또는 10을 초과하지 않는다.
- [0437] 본 발명에 따른 열가소성 수지는 높은 굴절률 및 낮은 아베수를 갖는다. 본 발명의 열가소성 수지는 액정 디스플레이, 유기 EL 디스플레이, 태양 전지 등에 사용가능한 투명 전도성 기관을 생산하는데 사용될 수 있다. 또한, 본 발명의 열가소성 수지는 광학 부품, 예컨대 광학 디스크, 액정 패널, 광학 카드, 광학 시트, 광학 섬유, 연결장치, 증발 플라스틱 반사 거울, 디스플레이 등을 위한 구조재로서 사용되거나; 기능성 소재 목적에 적합한 광학 디바이스로서 사용될 수 있다.
- [0438] 이에 따라, 성형 물품, 예컨대 광학 디바이스가 본 발명의 열가소성 수지를 사용하여 형성될 수 있다. 광학 디바이스로는 광학 렌즈 및 광학 필름을 들 수 있다. 광학 디바이스의 구체적인 예로는 렌즈, 필름, 거울, 필터, 프리즘 등을 들 수 있다. 이들 광학 디바이스는, 예를 들어, 사출 성형, 압축 성형, 사출 압축 성형, 압출 성형, 또는 용액 주조에 의한 임의의 생산 방법에 의해 형성될 수 있다.
- [0439] 우수한 성형성 및 높은 열 저항때문에, 본 발명의 열가소성 수지는 사출 성형을 요구하는 광학 렌즈의 생산에 매우 적합하다. 성형의 경우, 본 발명의 열가소성 수지, 예컨대 폴리카르보네이트 수지는 다른 열가소성 수지, 예를 들어, 상이한 폴리카르보네이트 수지, 폴리에스테르카르보네이트 수지, 폴리에스테르 수지, 및 다른 수지와 혼합물로서 사용될 수 있다.
- [0440] 부가적으로, 본 발명의 열가소성 수지는 광학 디바이스를 형성하기 위한 첨가제와 혼합될 수 있다. 광학 디바이스를 형성하기 위한 첨가제로서, 상기-언급된 것들이 사용될 수 있다. 첨가제로는 항산화제, 가공 안정제, 광안정제, 중합 금속 억제제, 난연제, 윤활제, 대전방지제, 계면활성제, 향균제, 이형제, 자외선 흡수제, 가소제, 상용화제 등을 들 수 있다.
- [0441] 상기로부터 명백한 바와 같이, 본 발명의 다른 태양은 상기 정의한 바와 같은 열가소성 수지로 만들어진 광학 디바이스에 관한 것이며, 여기에서 열가소성 수지는 화학식(II) 및 임의로 화학식(V)의 구조 단위를 포함한다. 화학식(II) 및 (V)의 구조 단위의 바람직한 의미 및 바람직한 실시 형태와 관련하여, 상기 언급을 참조한다.
- [0442] 본 명세서에 정의한 바와 같은 화학식(II)의 반복 단위 및 임의로 화학식(V)의 반복 단위를 포함하는 광학 수지로 만들어진 광학 디바이스는 보통 광학 성형 물품, 예컨대 광학 렌즈, 예를 들어, 자동차 헤드 램프 렌즈, 프레넬 렌즈(Fresnel lense), 레이저 프린터용  $f\theta$  렌즈, 카메라 렌즈, 안경용 렌즈 및 배면 투사 TV용 투사 렌즈, CD-ROM 픽업 렌즈일 뿐 아니라, 광학 디스크, 이미지 디스플레이 매체용 광학 요소, 광학 필름, 필름 기관, 광학 필터 또는 프리즘, 액정 패널, 광학 카드, 광학 시트, 광학 섬유, 광학 연결장치, 이포지션(eposition) 플라스틱 반사 거울 등이다. 여기서 광학 렌즈 및 광학 필름이 특히 선호된다. 화학식(II)의 반복 단위 및 임의로 화학식(V)의 반복 단위를 포함하는 광학 수지는 또한 액정 디스플레이, 유기 EL 디스플레이, 태양 전지 등에 적합한 투명 전도성 기관의 구조 멤버 또는 기능성 멤버로서 적합한 광학 디바이스에 사용가능한 투명 전도성 기관을 생산하는데 유용하다.
- [0443] 본 발명에 따른 열가소성 수지로부터 생성된 광학 렌즈는 높은 굴절률, 낮은 아베수 및 낮은 정도의 복굴절을 가지며, 매우 수분이 많고 열 저항성이다. 따라서, 광학 렌즈는 높은 굴절률을 갖는 고가의 유리 렌즈가 관용적으로 사용되는 분야, 예컨대 망원경, 쌍안경, TV 투사기 등에서 사용될 수 있다. 광학 렌즈가 비구면 렌즈의 형태로 사용되는 것이 바람직하다. 단지 하나의 비구면 렌즈는 구면 수차를 실질적으로 제로로 만들 수 있다. 따라서, 구면 수차를 제거하기 위해 복수의 구면 렌즈를 사용할 필요는 없다. 이에 의해 구면 수차를 포함하는 디바이스의 무게 및 생산 비용이 감소된다. 비구면 렌즈는 다양한 유형의 광학 렌즈 중에서 카메라 렌즈로 특히 유용하다. 본 발명은 높은 굴절률 및 낮은 수준의 복굴절을 갖는 비구면 렌즈를 용이하게 제공하는데, 이는 유리를 가공하여 생산하기에는 기술적으로 어렵다.

- [0444] 본 발명의 광학 렌즈는 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식(II)의 반복 단위 및 임의로 화학식(V)의 반복 단위의 수지를, 예를 들어, 사출 성형, 압축 성형, 사출 압축 성형 또는 주조하여 형성할 수 있다.
- [0445] 본 발명의 광학 렌즈는 광학 왜곡이 작음을 특징으로 한다. 관용적인 광학 수지를 포함하는 광학 렌즈는 큰 광학 왜곡을 가진다. 성형 조건에 의해 광학 왜곡 값을 감소시키는 것이 불가능하지는 않지만, 조건의 폭이 매우 작고 이에 따라 성형을 매우 어렵게 만든다. 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식(II)의 반복 단위 및 임의로 화학식(V)의 반복 단위를 갖는 수지는 수지의 배향 및 작은 성형 왜곡에 기인한 매우 작은 광학 왜곡을 가지므로, 성형 조건을 엄격하게 설정하지 않고도 우수한 광학 요소가 얻어질 수 있다.
- [0446] 사출 성형에 의해 본 발명의 광학 렌즈를 제조하기 위해서는, 렌즈가 260 °C 내지 320 °C의 실린더 온도 및 100 °C 내지 140 °C의 몰드 온도에서 성형되어야 함이 바람직하다.
- [0447] 본 발명의 광학 렌즈는 요구되는 바와 같이 비구면 렌즈로서 유리하게 사용된다. 단일 비구면 렌즈를 사용하여 구면 수차가 실질적으로 무효화될 수 있으므로 구면 수차는 구면 렌즈의 조합에 의해 제거될 필요가 없고, 이에 의해 무게 및 생산 비용을 감소시키는 것이 가능해진다. 따라서, 광학 렌즈 중에서 비구면 렌즈가 카메라 렌즈로서 특히 유용하다.
- [0448] 본 명세서에 정의된 바와 같은 화학식(II)의 반복 단위 및 임의로 화학식(V)의 반복 단위를 갖는 수지가 높은 성형성을 가지므로 이들은 크기가 얇고 작으며 복잡한 형상을 갖는 광학 렌즈의 재료로서 특히 유용하다. 렌즈 크기로서, 렌즈의 중심부 두께는 0.05 내지 3.0 mm, 바람직하게 0.05 내지 2.0 mm, 더욱 바람직하게 0.1 내지 2.0 mm이다. 렌즈 직경은 1.0 내지 20.0 mm, 바람직하게 1.0 내지 10.0 mm, 더욱 바람직하게 3.0 내지 10.0 mm이다. 한쪽 면은 볼록하고 다른쪽 면은 오목한 메니스커스 렌즈가 바람직하다.
- [0449] 본 발명의 광학 렌즈 표면은 필요에 따라 코팅층, 예컨대 반사방지층 또는 경질 코팅층을 가질 수 있다. 반사방지층은 단일층 또는 다중층이고 유기 재료 또는 무기 재료, 그러나 바람직하게 무기 재료를 포함할 수 있다. 무기 재료의 예로는 옥사이드 및 플루오라이드, 예컨대 규소 옥사이드, 알루미늄 옥사이드, 지르코늄 옥사이드, 티타늄 옥사이드, 세륨 옥사이드, 마그네슘 옥사이드 및 마그네슘 플루오라이드를 들 수 있다.
- [0450] 본 발명의 광학 렌즈는 임의의 방법, 예컨대 금속 성형, 커팅, 연마, 레이저 가공, 방출 가공 또는 엿지 가공에 의해 형성될 수 있다. 금속 성형이 바람직하다.
- [0451] 본 발명에 따른 열가소성 수지의 사용에 의해 생성된 광학 필름은 투명도 및 열 저항이 높고, 따라서 액정 기판 필름, 광학 메모리 카드 등에 바람직하게 이용가능하다. 외래 물체가 광학 필름 내로 가능한 한 많이 혼입되는 것을 피하기 위하여, 말할 필요도 없이, 먼지가 적은 환경에서 성형이 수행될 필요가 있다. 먼지 환경은 바람직하게 클래스 6 이하, 및 더욱 바람직하게 클래스 5 이하이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0452] 발명의 추가 예시로서 하기 실시예를 제시한다.
- [0453] 1. 약어:
- [0454] m.p.: 융점
- [0455] RT: 실온
- [0456] THF: 테트라하이드로푸란
- [0457] TLC: 박막 크로마토그래피
- [0458] 2. 화학식(I)의 단량체의 제조
- [0459] 2.1 화학식(I)의 단량체에 대한 분석:
- [0460] 80 MHz NMR-분광계(Magritek Spinsolve 80)를 사용하여 23 °C에서 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼을 결정하였다. 달리 언급되지 않는 한 용매는 CDCl<sub>3</sub>이었다.
- [0461] Shimadzu FTIR-8400S 분광계(스캔수: 45, 해상도: 4 cm<sup>-1</sup>; 아포디제이션(apodization): Happ-Genzel)를 사용하여 ATR FT-IR에 의해 IR 스펙트럼을 기록하였다.

[0462] DSC(시차 주사 열량계) 측정은 Linseis Chip-DSC 10을 사용하여 수행하였다.

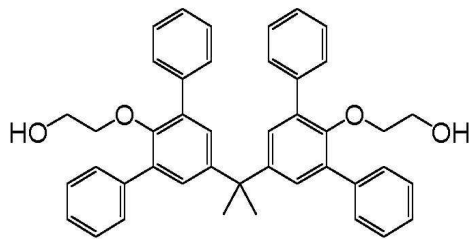
[0463] 화합물의 용점은 Buechi Melting Point B-545에 의해 결정하였다.

[0464] 하기 시스템 및 조건을 사용하여 UPLC(초 고성능 액체 크로마토그래피) 분석을 실행하였다: Waters Acquity UPLC H-Class Systems; 칼럼: Acquity UPLC BEH C18, 1.7  $\mu$ m, 2.1 x 100 mm; 칼럼 온도: 25  $^{\circ}$ C, 구배: 아세토니트릴/물: 0 min에서 아세토니트릴 80%, 4.0 min에서 100%; 6.0 min에서 100%; 6.1 min에서 80%; 8.0 min에서 80%); 주입 부피: 2.0  $\mu$ l; 실행 시간: 8 min; 210 nm에서 검출.

[0465] 화학식(I)의 화합물의 황색도 지수 YI는 하기 프로토콜에 따라 ASTM E313과 유사하게 결정될 수 있다: 1 g의 화학식(I)의 화합물을 19 g의 용매, 예를 들어, 메탄올 또는 메틸렌 클로라이드에 용해시킨다. 용액을 50 mm 큐벳으로 옮기고 Shimadzu UV-가시광 분광 광도계 UV-1900에 의해 300 내지 800 nm의 범위에서 투과를 결정한다. 용매 자체, 예를 들어, 메탄올을 참조로 사용한다. 스펙트럼으로부터 ASTM E308(CIE 시스템을 사용하여 물체의 색상을 컴퓨팅하기 위한 표준 실무) 및 ASTM E 313(기기적으로 측정된 색상 좌표계로부터 황색도 및 백색도 지수를 계산하기 위한 표준 실무)에 따라 소프트웨어 "RCA-소프트웨어 UV2DAT"를 사용하여 황색도 지수를 계산할 수 있다.

[0466] 2.2제조 실시예:

[0467] 실시예 1: 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디페닐-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디페닐-페녹시]에탄올(화학식 (Ia-1)의 화합물, X = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 페닐 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 33)



[0468]

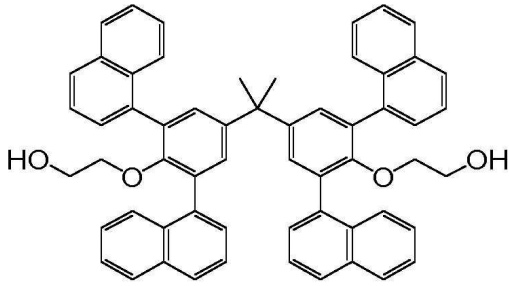
[0469] 2-[2,6-디브로모-4-[1-[3,5-디브로모-4-(2-하이드록시에톡시)페닐]-1-메틸-에틸]페녹시]에탄올(135.91 g; 200 mmol; 순도 = 93%)에 페닐보론산(102.42 g; 840 mmol; 4.2 당량), 트리스(*o*-톨릴)포스판(243.5 mg; 0.8 mmol) 및 아니솔(800 mL)을 첨가하였다. 이 혼합물에 물(396 g)에 용해된 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(178.3 g)를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70  $^{\circ}$ C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 Pd(OAc)<sub>2</sub>(45 mg; 0.2 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다. 이어서 반응 혼합물을 70  $^{\circ}$ C로 냉각시키고 유기 층을 동 온도에서 분리하고 그 후에 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층을 활성탄(Norit® DX Ultra, Cabot Corp.)으로 처리하고 혼합물을 2.5 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용액을 감압하에 농축시켰다. 얻어진 혼합물을 실온으로 냉각시키고 밤새 교반하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하여 미색 고체로서 비정제 표제 화합물을 얻었다(97.8 g; 79% 수율). 비정제 물질을 아세톤 또는 에탄올 혼합물로부터 재결정화하여 화학적 순도 >99% 및 황색도 지수 1.3(APHA 5)을 갖는 백색 고체로서 표제 화합물을 얻었다.

[0470] m.p. (DSC): 108.3  $^{\circ}$ C;

[0471] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>):  $\delta$  = 7.93 - 7.31(m, 24H), 3.44(m, 8H), 1.72(s, 6H), 1.2(s, 2H, OH) ppm.

[0472] IR(ATR): 725.3(84.84); 746.5(60.86); 842.9(88.30); 883.4(72.19); 1008.8(67.89); 1022.3(74.21); 1072.5(80.22); 1182.4 88.48); 1211.3(73.28); 1361.8(85.89); 1421.6(72.15); 1467.9(75.76); 1597.1(90.24); 2357.1(92.49); 2883.7(89.41); 2935.8(89.02); 2958.9(86.06); 3030.3(90.52); 3057.3(90.63); 3184.6(91.52); 3352.4(90.54) cm<sup>-1</sup>.

[0473] 실시예 2: 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물, X = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 나프탈렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 34)



[0474]

[0475] 2-[2,6-디브로모-4-[1-[3,5-디브로모-4-(2-하이드록시에톡시)페닐]-1-메틸-에틸]페녹시]에탄올(90.4 g; 133 mmol; 순도 = 93%)에 나프탈렌-1-일보론산(114.4 g; 665 mmol; 5 당량) 및 트리스(*o*-톨릴)포스판(1.62 g; 5.32 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(800 mL) 및 물(331 g)에 용해된 148.2 g  $K_3PO_4$ (148.2 g)를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서  $Pd(OAc)_2$ (299 mg; 1.33 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다. 이어서 반응 혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 동 온도에서 분리하고 그 후에 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층을 활성탄(Norit® DX Ultra, Cabot Corp.)으로 처리하고 혼합물을 2.5 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용액을 감압하에 농축시켰다. 얻어진 혼합물 실온으로 냉각시키고 밤새 교반하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하여 미색 고체로서 비정제 표제 화합물(86.3 g; 83% 수율)을 96.7%의 화학적 순도로 얻었다. 비정제 물질을 아니솔 또는 톨루엔/MeOH 혼합물로부터 재결정화할 수 있다.

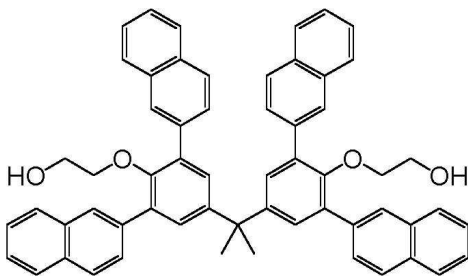
[0476] m.p. = 235.6-236.9 °C;

[0477] m.p. (DSC): 232.9 °C;

[0478]  $^1H$  NMR(80 MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  = 8.07 - 7.12(m, 32H), 3.24 - 2.76(m, 4H), 3.07 - 2.59(m, 4H), 1.81(s, 6H), -0.72(s, 2H, OH) ppm.

[0479] IR(ATR): 731.1(78.73); 777.3(46.43); 798.6(65.68); 889.2(80.73); 1012.7(70.29); 1068.6(73.00); 1114.9(85.15); 1221.0(74.61); 1334.8(86.63); 1386.9(76.67); 1456.3(82.21); 2870.2(90.63); 2935.8(90.42); 2964.7(90.34); 3057.3(90.78); 3556.9(88.32)  $cm^{-1}$ .

[0480] 실시예 3: 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-2-일)페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(나프탈렌-2-일)페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물, X =  $C(CH_3)_2$ ,  $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 =$  나프탈렌-2-일 및  $Z^1=Z^2 =$  2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 35)



[0481]

[0482] 2-[2,6-디브로모-4-[1-[3,5-디브로모-4-(2-하이드록시에톡시)페닐]-1-메틸-에틸]페녹시]에탄올(90.4 g; 133 mmol; 순도 = 93%)에 나프탈렌-2-일보론산(138 g; 800 mmol; 6 당량) 및 트리스(*o*-톨릴)포스판(1.62 g; 5.32 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(800 mL) 및 물(396 g)에 용해된  $K_3PO_4$ (178 g)를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서  $Pd(OAc)_2$ (299 mg; 1.33 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다 (약 5 내지 6 시간). 이어서 반응 혼합물을 70 °C로 냉각시키고 동 온도에서 유기 층을 분리하고 그 후에 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층을 활성탄(Norit® DX Ultra, Cabot Corp.)으로 처리하고 혼합물을 2.5 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용액을 감

압하에 농축시켰다. 얻어진 혼합물을 실온으로 냉각시키고 밤새 교반하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하여 미색 고체로서 비정제 표제 화합물을 얻고, 이를 톨루엔/아니솔 혼합물로부터 결정화하여 미색 고체로서 92.3 g의 표제 화합물을 92%의 화학적 순도로 얻었다. 메탄올로부터의 재결정화 후 표제 화합물을 백색 고체로서 >95%의 화학적 순도로 얻었다.

[0483] m.p. = 210.1-211.7 °C;

[0484] m.p.(DSC): 207.1 °C;

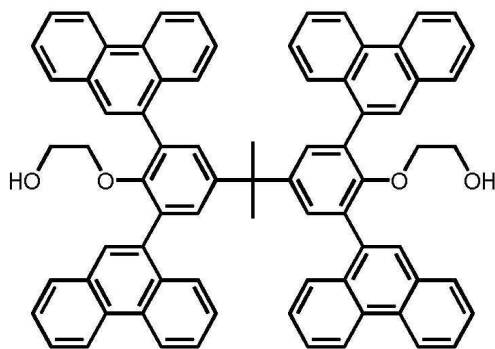
[0485] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.19 - 7.75 & 7.74 - 7.35(m, 32H), 3.51 - 3.13(m, 8H), 1.82(s, 6H), 1.28(s, 2H, OH) ppm.

[0486] IR(ATR): 744.6(55.26); 819.8(64.42); 854.5(69.17); 885.4(71.58); 1003.0(78.82); 1037.7(79.19); 1072.5(81.63); 1190.1(80.56); 1207.5(73.83); 1446.7(81.33); 1462.1(81.60); 1504.5(84.20); 2870.2(90.17); 2930.0(89.00); 2964.7(86.99); 3051.5(88.37); 3281.0(90.10) cm<sup>-1</sup>.

[0487] 실시예 4a: 2,6-디(페난트렌-9-일)-4-[1-(3,5-디(페난트렌-9-일)-4-하이드록시-페닐)-1-메틸-에틸]페놀(화학식 (Ia-1)의 화합물, X = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=R = 페난트렌-9-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 수소; 표 A의 화합물 4)

[0488] 2,6-디브로모-4-[1-(3,5-디브로모-4-하이드록시-페닐)-1-메틸-에틸]페놀(= 3,3',5,5'-테트라브로모비스페놀 A)(56.1 g; 100 mmol; 순도 = 97%)에 페난트렌-9-일보론산(133.3 g; 600 mmol; 6 당량) 및 트리소(o-톨릴)포스판(1.22 g; 4 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(600 mL) 및 물(198 g)에 용해된 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(133 g)를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(225 mg; 1 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다. 이어서 반응 혼합물을 70 °C로 냉각시키고 동 온도에서 유기 층을 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층을 활성탄(Norit® DX Ultra, Cabot Corp.)으로 처리하고 혼합물을 2.5 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 감압하에 용매를 제거하였다. 이와 같이 미색 고체로서 얻어진 비정제 표제 화합물을 상승된 온도에서 톨루엔/메탄올 혼합물(400 g)에 용해시켰다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고 밤새 교반하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하여 미색 고체(90.9 g)로서 표제 화합물을 95%의 화학적 순도로 얻고, 이를 추가의 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

[0489] 실시예 4b: 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(페난트렌-9-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(페난트렌-9-일)-페녹시]에탄올(화학식 (Ia-1)의 화합물, X = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 페난트렌-9-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup> = 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 36)



[0490]

[0491] 2,6-디(페난트렌-9-일)-4-[1-(3,5-디(페난트렌-9-일)-4-하이드록시-페닐)-1-메틸-에틸]페놀(111.7 g; 110 mmol; 순도 = 95%)에 에틸렌 카르보네이트(77.5 g; 880 mmol; 8 당량), 아니솔(315 g) 및 고체로서 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(12.2 g)를 첨가하였다. TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 135 °C에서 교반하였다. 이어서 반응 혼합물을 70-75 °C로 냉각시키고 동 온도에서 유기 층을 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%) 및 염수로 세척하였다. 유기 층을 활성탄(Norit® DX Ultra, Cabot Corp.)으로 처리하고 혼합물을 2 내지 3 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용매를 감압하에 제거하였다. 이렇게 미색 고체로서 얻어진 비정제 표제 화합물을 환류중에 메틸 에틸 케톤(250 g)에 용해시켰다. 그 후 혼합물을 실온으로 냉각시키고 밤새 교반

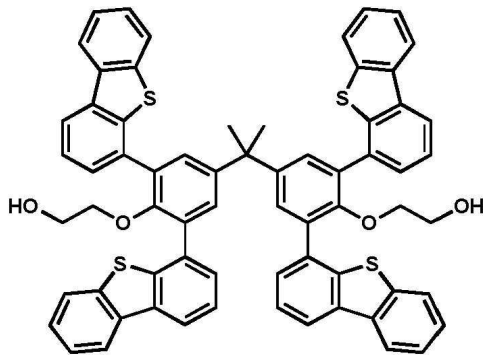
하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하여 백색 고체(90.5 g; 79% 수율)로서 표제 화합물을 >97%의 화학적 순도 및 2.9의 황색도 지수로 얻었다.

[0492] m.p.(DSC): 299.7 °C(302.5 °C);

[0493] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.99 - 8.72(m, 8H), 8.13 - 7.69(m, 32H), 3.33 - 3.11(m, 4H), 3.10 - 2.87(m, 4H), 2.19(s, 6H), 1.16(s, 2H, OH) ppm.

[0494] IR(ATR): 725.3(71.39); 750.3(69.02); 763.8(83.89); 792.8(90.23); 856.4(92.27); 891.1(85.61); 1010.7(87.29); 1066.7(89.17); 1215.2(89.68); 1278.9(93.54); 1361.8(92.15); 1448.6(89.01); 1462.1(91.02); 2283.8(95.22); 2868.2(95.44); 2918.4(95.24); 3063.1(95.44); 3551.1(93.88) cm<sup>-1</sup>.

[0495] 실시예 5: 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(1,2-디벤조[b,d]티오펜-4-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(1,2-디벤조[b,d]티오펜-4-일)-페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물, X = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 디벤조[b,d]티오펜-4-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 51)



[0496]

[0497] 2-[2,6-디브로모-4-[1-[3,5-디브로모-4-(2-하이드록시에톡시)페닐]-1-메틸-에틸]페녹시]에탄올(74.75 g; 110 mmol; 순도 = 93%)에 (디벤조[b,d]티오펜-4-일)보론산(125.4 g; 550 mmol; 5 당량) 및 트리스(o-톨릴)포스판(4.02 g; 13.2 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(660 mL) 및 물(285 g)에 용해된 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(122.6 g)를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(741 mg; 3.3 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다(약 5 내지 6 시간). 이어서 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 형성된 회색 고체 생성물을 여과에 의해 수집하고, 물 및 메탄올로 세척하고, 건조시켰다. 비정제 생성물을 50 °C에서 THF(790 mL)에 용해시킨 다음, 활성탄(Norit® DX Ultra, Cabot Corp.)을 첨가하고, 혼합물을 2 내지 2.5 시간 동안 50 °C에서 교반하였다. 고온의 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 얻어진 용액을 감압하에 농축시켰다. 생성된 미색 고체를 메탄올(500 mL)에 현탁시키고 환류중 2 내지 3 시간 동안 교반하였다. 생성물을 여과하고, 메탄올로 세척하고 진공하에 건조시켜 백색 분말로서 87 g의 표제 화합물을 얻었다. 활성탄(Norit® DX Ultra, Cabot Corp.) 처리에 의한 정제를 다시 한번 반복하고 THF/톨루엔 혼합물로부터 재결정화하여 백색 결정질 분말로서 표제 화합물을 87%의 수율 및 >98%의 화학적 순도로 얻었다.

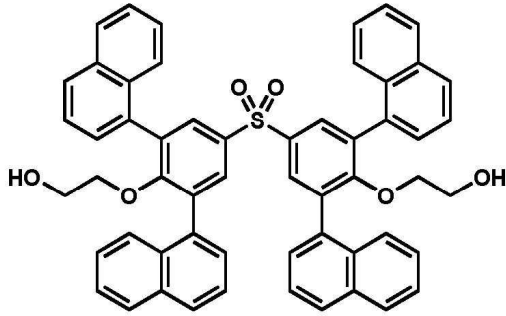
[0498] m.p.(DSC): 287.5 °C;

[0499] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.39 - 8.05(m, 8H), 7.89 - 7.13(m, 24H), 3.35 - 3.12(m, 4H), 3.12 - 2.89(m, 4H), 1.95(s, 6H), 1.2(s, 2H, OH) ppm.

[0500] IR(ATR): 727.2(64.11); 752.3(28.21); 804.3(76.60); 866.1(80.90); 893.1(71.52); 1010.7(62.08); 1045.5(65.61); 1070.5(69.28); 1107.2(77.73); 1219.1(67.42); 1248.0(78.54); 1363.7(77.84); 1379.2(66.51); 1440.9(67.41); 1466.0(76.10); 2868.2(87.64); 3061.1(88.60); 3554.9(82.08) cm<sup>-1</sup>.

[0501] 실시예 6: 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]설포닐]-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물, X = SO<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 나프탈렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화

합물 55)



[0502]

[0503]

2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디브로모페닐]설포닐-2,6-디브로모페녹시]에탄올(170.3 g; 250 mmol; 순도 = 96%)에 나프탈렌-1-일보론산(219.37 g; 1.25 mol; 5 eq.; 순도 = 98%) 및 트리소(*o*-톨릴)포스판(1.52 g; 5.0 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(750 mL) 및 613 g의 물에 용해된 276 g의  $K_3PO_4$ 를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서  $Pd(OCOCH_3)_2$ (281 mg; 1.25 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다. 혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 활성탄(Norit DX Ultra)을 첨가하고 혼합물을 2.5 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용액을 감압하에 농축시켰다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고 밤새 교반하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하여 백색 고체(149.33 g; 65%)로서 비정제 생성물을 92.14%의 화학적 순도로 얻었다. 비정제 물질을 1.6 L 톨루엔/MeOH(1:1(v/v)) 혼합물로부터 재결정화하여 백색 고체로서 79.6 g의 표제 화합물을 대략 97%의 화학적 순도로 얻었다.

[0504]

m.p.(DSC): 213.4 °C;

[0505]

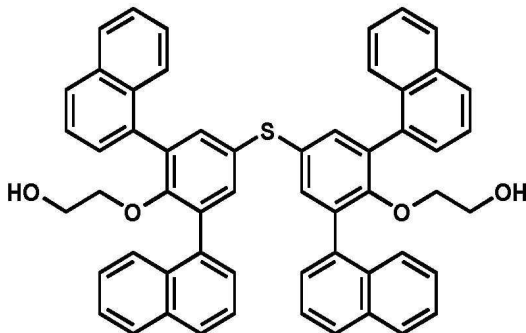
$^1H$  NMR(80 MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  = 8.07(s, 4H), 7.83 - 7.12(m, 28H), 3.31 - 3.06(m, 4H), 3.04 - 2.72(m, 4H), 0.79(s, 2H, OH) ppm.

[0506]

IR(ATR): 439.78(50.37); 509.22(45.63); 609.53(59.16); 621.1(69.13); 651.96(63.19); 723.33(73.09); 734.9(72.97); 775.41(41.64); 798.56(64.26); 895.0(76.4); 1018.45(71.93); 1068.6(72.88); 1091.75(66.93); 1118.75(70.24); 1147.68(56.44); 1226.77(75.63); 1323.21(70.4); 1423.51(78.3); 1506.46(86.42); 1573.97(89.54); 1593.25(91.18); 2947.33(90.31); 3057.27(90.11); 3570.36(89.31)  $cm^{-1}$ .

[0507]

실시예 7: 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]설포닐-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물, X = S,  $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 =$  나프탈렌-1-일 및  $Z^1=Z^2 =$  2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 76)



[0508]

[0509]

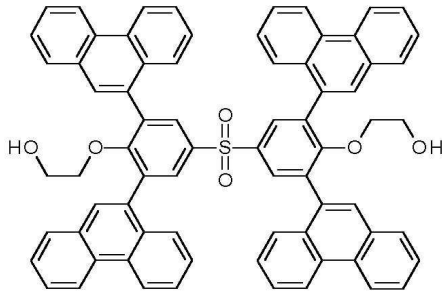
냉각된(-18 °C) 리튬 알루미늄 하이드리드(19 g; 500 mmol)의 THF(600 mL) 용액에  $TiCl_4$ (47.5 g; 250 mmol)의 2-메틸-THF(1 L) 용액을 서서히 첨가하고 혼합물을 불활성 기체 하에 30 min 동안 0 °C에서 교반하였다. 이 혼합물에 실시예 6에서 얻은 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]설포닐-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올(43.9 g; 50 mmol)을 0 °C에서 서서히 나누어 첨가하였다. 첨가 완료 후 혼합물을 추가의 30 min 동안 불활성 기체 하에 0 °C에서 교반하였다. 혼합물을 서서히 실온까지 가온하고 실온에서 1 시간 동안 교

반하였다. TLC(용리액: 사이클로헥산:에틸 아세테이트 2:1)가 변환 완료를 보였다. 이 혼합물에 물(19 g) 및 THF(30 mL)의 혼합물을 서서히 첨가하여 과량의 리튬 알루미늄 하이드리드를 제거하였다. 감압하에 용매를 제거하고 생성된 잔류물을 칼럼 크로마토그래피(실리카겔; 사이클로헥산: 에틸 아세테이트 5:1)로 정제하여 백색 고체로서 24.6 g의 표제 화합물을 대략 99.7%의 화학적 순도로 얻었다.

[0510] m.p.(DSC): 97 °C;

[0511] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.1 - 7.2(m, 32H), 3.2 - 3.0(m, 4H), 2.8 - 2.5(m, 4H), 0.2-0.5(m, 2H, OH) ppm.

[0512] 실시예 8: 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(페난트렌-9-일)페닐]설폰닐-2,6-디(페난트렌-9-일)페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물, X = SO<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 페난트렌-9-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 57)



[0513]

[0514] 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디브로모페닐]설폰닐-2,6-디브로모페녹시]에탄올(148.0 g; 217.26 mmol; 순도 = 96%)에 페난트렌-9-일보론산(246.13 g; 1,086.3 mmol; 5 eq.; 순도 = 98%) 및 트리스(o-톨릴)포스판(1.33 g; 4.35 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(700 g) 및 532 g의 물에 용해된 240 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(244 mg; 1.086 mmol)를 첨가하고 혼합물을 환류 하에 9 시간 동안 교반하였다. 그 후 TLC(용리액: 예들 들어 사이클로헥산:에틸 아세테이트 1:2)가 반응 완료를 보였으므로, 또 다른 부분의 페난트렌-9-일보론산(24.613 g; 108.63 mmol), 및 53.2 g의 물에 용해된 24 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 및 Pd-촉매[Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(24.4 mg; 0.1086 mmol) 및 트리스(o-톨릴)포스판(133 mg; 0.435 mmol)]를 첨가하였다. TLC(용리액: 예들 들어 사이클로헥산:에틸 아세테이트 1:2)가 거의 변환 완료를 보일 때까지, 반응 혼합물을 환류 하에 또 다른 90 분동안 교반하였다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고 1 시간 동안 교반하였다.

[0515] 비정제 생성물을 여과하고, 아니솔 및 2-메틸-테트라하이드로푸란으로 세척하고 60 °C에서 건조시켰다. 비정제 생성물을 3L의 THF에 용해시키고 10 g의 활성탄(Norit DX Ultra)을 첨가하였다. 혼합물을 40 °C에서 2 시간 동안 교반하고 셀라이트를 통해 활성탄을 여과한 후, 감압하에 용매를 완전히 제거하였다. 생성물을 톨루엔으로부터 결정화하여 백색 고체로서 157.7 g의 표제 화합물을 >94%의 화학적 순도로 얻었다. 생성물을 톨루엔으로부터 재결정화하여 표제 화합물을 >97%의 화학적 순도로 얻었다.

[0516] m.p.(DSC): 233.8 °C(톨루엔-용매화물); 242.2 °C

[0517] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.43 - 9.03(m, 8H), 8.22(dd, J = 3.1, 1.4 Hz, 4H), 7.55 - 8.01(m, 28H), 7.20 - 7.27(m, 4H), 3.01 - 3.49(m, 4H, -CH<sub>2</sub>-), 2.50 - 2.92(m, 4H, -CH<sub>2</sub>-), 0.32 - 0.56(m, 2H) ppm.

[0518] IR(ATR): 405.06(29.54); 561.3(78.99); 615.31(63.9); 632.67(63.18); 723.33(48.06); 744.55(52.77); 763.84(75.45); 887.28(76.3); 964.44(83.77); 1012.66(79.76); 1066.67(82.66); 1082.1(76.5); 1091.75(75.17); 1132.25(63.8); 1145.75(76.3); 1178.55(85.26); 1230.63(81.87); 1261.49(82.73); 1319.35(80.0); 1419.66(82.14); 1450.52(81.1) cm<sup>-1</sup>.

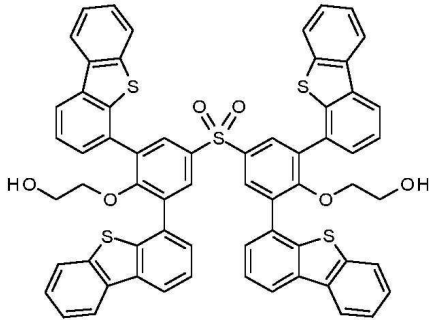
[0519] n<sub>D</sub> 계산치: 1.76 (Advanced Chemistry Development, Inc.로부터의 소프트웨어 ACD/ChemSketch 2012를 사용하여 계산됨)

[0520]

실시예

9:

2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(디벤조[b,d]티엔-4-일)페닐]설포닐-2,6-디벤조[b,d]티엔-4-일]페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물,  $X = SO_2$ ,  $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 =$  디벤조[b,d]티엔-4-일 및  $Z^1=Z^2 =$  2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 72)



[0521]

[0522]

2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디브로모페닐]설포닐-2,6-디브로모페녹시]에탄올(143.05 g; 210 mmol; 순도 = 96%)에 디벤조[b,d]티오펜-4-일보론산(244.37 g; 1.05 mol; 5 eq.; 순도 = 98%) 및 트리스(o-톨릴)포스판(1.28 g; 4.2 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(700 g) 및 515 g의 물에 용해된 232 g의  $K_3PO_4$ 를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서  $Pd(OCOCH_3)_2$ (236 mg; 1.05 mmol)를 첨가하고 TLC(용리액: 예를 들어 사이클로헥산:에틸 아세테이트 1:2)가 변환 완료를 보일 때까지 혼합물을 환류 하에 3 시간 동안 교반하였다(주: TLC에 따를 때 환류 중의 9 시간 후에 반응이 완료되지 않으면, 또 다른 부분의 디벤조[b,d]티오펜-4-일보론산(24.44 g; 105 mmol) 및 51.5 g의 물에 용해된 23.2 g의  $K_3PO_4$  뿐만 아니라  $Pd$ -촉매[ $Pd(OCOCH_3)_2$ (23.6 mg; 0.105 mmol) 및 트리스(o-톨릴)포스판(128 mg; 0.42 mmol)]를 첨가하여야 하고 TLC가 적어도 거의 변환 완료를 보여줄 때까지 반응 혼합물을 환류 하에 교반하여야 함). 혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 수성 상을 250 mL의 2-메틸테트라하이드로푸란으로 추출하였다. 유기 층을 합하여 여기에 10% NaOH 수용액(375 mL)을 70 °C에서 첨가하였다. 생성물이 결정화되었으므로, 현탁액을 실온으로 냉각시키고 비정제 생성물을 여과하고, 그 후 물 및 THF로 세척하고 60 °C에서 건조시켜 207.5 g의 비정제 생성물을 얻었다.

[0523]

얻어진 고체를 환류중에 3L의 아니솔에 용해시킨 다음 120 °C로 냉각시켰다. 이어서 10 g의 활성탄(Norit DX Ultra)을 첨가하고 혼합물을 120 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 셀라이트를 사용하여 활성탄을 120 °C에서 여과하고 용액을 감압하에 약 1000 g까지 농축시켰다. 맑은 용액을 실온으로 냉각시키고 THF(500 mL)를 첨가하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하고 60 °C에서 건조시켜 비정제 표제 화합물을 백색 고체(174.4 g; 77.8%)로서 얻었다. 비정제 생성물을 아니솔/THF(1/1 v/v) 또는 아니솔/2-프로판올(1/1 v/v) 혼합물로부터 재결정화하여 표제 화합물을 >95%(NMR에 의함)의 화학적 순도로 얻을 수 있었다(주: 아니솔/THF 혼합물이 사용되면 표제 화합물의 THF-용매화물이 얻어짐).

[0524]

m.p. (DSC): 204.1 °C(THF-용매화물); 294.1 °C

[0525]

$^1H$  NMR(80 MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta = 8.52$ (s, 4H), 8.32 - 8.51(m, 8H), 7.09 - 7.88(m, 20H), 3.40 - 3.55(m, 4H), 3.13 - 3.29(m, 4H), 1.00(t, J = 6,5 Hz, 2H, OH) ppm.

[0526]

IR(ATR): 495.72(37.35); 551.66(81.77); 565.16(83.67); 607.6(62.68); 630.74(69.8); 704.04(76.01); 723.33(77.99); 748.41(49.59); 885.36(81.46); 906.57(81.63); 1003.02(77.16); 1045.45(68.95); 1068.6(80.44); 1105.25(78.89); 1120.68(80.61); 1145.75(67.34); 1234.48(80.97); 1246.06(79.06); 1303.92(81.87); 1319.35(80.33); 1375.29(80.49); 1383.01(81.94); 1429.3(77.66); 1442.8(82.59)  $cm^{-1}$ .

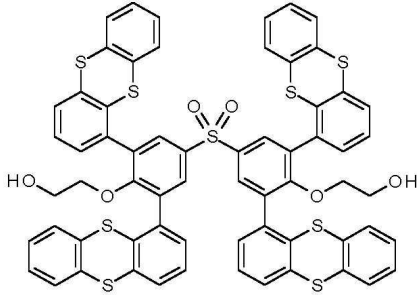
[0527]

$n_D$  계산치: 1.79(Advanced Chemistry Development, Inc.로부터의 소프트웨어 ACD/ChemSketch 2012를 사용하여 계산됨)

[0528]

실시예 10: 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(티안트렌-1-일)페닐]설포닐-2,6-디(티안트렌-1-일)페녹시]에탄올(화학식(Ia-1)의 화합물,  $X = SO_2$ ,  $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 =$  티안트렌-1-일 및  $Z^1=Z^2 =$  2-하이드록시에틸; 표 A의

화합물 73)



[0529]

[0530]

2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디브로모페닐]설포닐-2,6-디브로모페녹시]에탄올(143.05 g; 210 mmol; 순도 = 96%)에 티안트렌-1-일보론산(278.72 g; 1.05 mol; 5 eq.; 순도 = 98%) 및 트리스(o-톨릴)포스판(1.28 g; 4.2 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(700 g) 및 515 g의 물에 용해된 232 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(236 mg; 1.05 mmol)를 첨가하고 TLC(용리액: 예를 들어 사이클로헥산:에틸 아세테이트 1:2)가 변환 완료될 때까지 혼합물을 환류 하에 교반하였다(주: TLC에 따를 때 환류 중의 9 시간 후에 반응이 완료되지 않으면, 또 다른 부분의 티안트렌-1-일보론산(27.87 g; 105 mmol) 및 51.5 g의 물에 용해된 23.2 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 뿐만 아니라 Pd-촉매[Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(23.6 mg; 0.105 mmol) 및 트리스(o-톨릴)포스판(128 mg; 0.42 mmol)]를 첨가하여야 함. 이어서 TLC가 적어도 거의 변환 완료될 때까지 반응 혼합물을 환류하에 교반하여야 함).

[0531]

혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 100 g의 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 및 10 g의 활성탄(Norit DX Ultra)을 첨가하고 혼합물을 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용매를 감압하에 완전히 제거하였다. 비정제 생성물을 55 °C에서 860-880 mL의 톨루엔/메탄올(1/1 v/v) 혼합물에 용해시킨 다음 맑은 용액을 실온으로 냉각시키고 밤새 교반하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하고 60 °C에서 건조시킨 후 백색 고체(210.6 g; 83.9 %)로서 비정제 표제 화합물을 97.61%의 화학적 순도로 얻었다.

[0532]

톨루엔/메탄올 혼합물로부터의 부가적인 재결정화에 의해 생성물을 추가로 정제할 수 있다.

[0533]

m.p. (DSC): 224.0 °C;

[0534]

<sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.25(s, 4H), 7.97 - 7.23(m, 28H), 3.55 - 3.35(m, 4H), 3.43 - 3.05(m, 4H), 1.41 - 1.30(m, 2H, OH), ppm.

[0535]

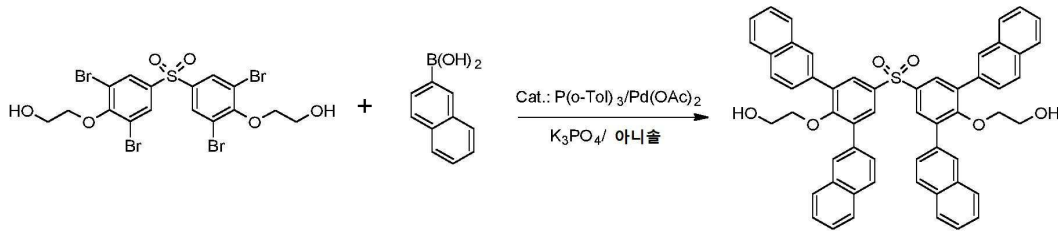
IR(ATR): 572.88(85.64); 615.31(56.0); 663.53(83.11); 700.18(68.44); 721.4(79.65); 746.48(51.87); 783.13(72.49); 794.7(79.81); 904.64(81.82); 1010.73(76.44); 1057.03(84.15); 1074.39(80.9); 1099.46(73.27); 1118.75(83.89); 1145.75(63.26); 1190.12(86.98); 1226.77(80.11); 1249.91(83.27); 1319.35(71.87); 1361.79(85.74); 1394.58(74.99); 1431.23(74.95); 1448.59(80.7); 1558.54(87.15) cm<sup>-1</sup>.

[0536]

n<sub>D</sub> 계산치: 1.77(Advanced Chemistry Development, Inc.로부터의 소프트웨어 ACD/ChemSketch 2012를 사용하여 계산됨)

[0537]

실시예 11: 2,2'-(설포닐비스{[2,6-디(나프탈렌-1-일)-4,1-페닐렌]옥시})디(에탄-1-올)(화학식(Ia-1)의 화합물, X = SO<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 나프탈렌-2-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 56)



[0538]

[0539]

2,2'-{설포닐비스[(2,6-디브로모-4,1-페닐렌)옥시]}디(에탄-1-올)(170.3 g; 250 mmol; 순도 = 96%)에 나프탈렌-2-일보론산(219.37 g; 1,25 mol; 5 eq.; 순도 = 98%) 및 트리스(*o*-톨릴)포스판(1.52 g; 5.0 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(750 mL) 및 613 g의 물에 용해된 276 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 질소로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(281 mg; 1.25 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다.

[0540]

혼합물을 70 °C로 냉각시키고, 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 활성탄(Norit DX Ultra)을 첨가하고 혼합물을 70 °C에서 2.5 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용액을 감압하에 농축시켰다. 혼합물을 주변 온도로 냉각시키고 밤새 교반하였다. 형성된 결정을 여과에 의해 수집하여 백색 고체(149.33 g; 65%)로서 비정제 표제 화합물을 92.2%의 화학적 순도로 얻었다. 그 후 비정제 물질을 톨루엔/MeOH(1/1 v/v) 및 이어서 메틸 에틸 케톤으로부터 재결정화하여 백색 고체로서 78.71 g의 표제 화합물을 약 94%의 화학적 순도로 얻었다.

[0541]

m.p.(DSC): 252.2 °C;

[0542]

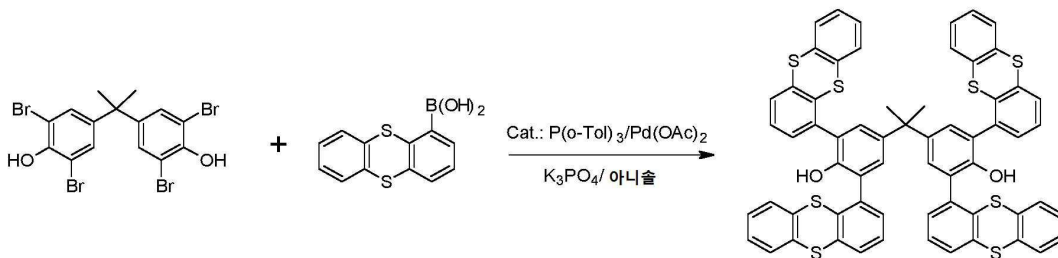
<sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.21(s, 4H, CAr-H), 8.10 - 7.42(m, 28H, CAr-H), 3.44 - 3.34(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 3.22 - 3.11(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 1.11(bs, 2H) ppm.

[0543]

IR(ATR): 740.69(60.15); 812.06(67.64); 866.07(73.57); 895(74.44); 949.01(80.71); 1016.52(74.98); 1101.39(65.76); 1143.83(55.87); 1219.05(75.88); 1319.35(64.85); 1421.58(79.99); 1442.8(83.05) cm<sup>-1</sup>.

[0544]

실시예 12: 4,4'-{(프로판-2,2-디일)비스[2,6-디(티안트렌-1-일)페놀]}(화학식(Ia-1)의 화합물, X = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 티안트렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 수소; 표 A의 화합물 7)



[0545]

[0546]

4,4'-{(프로판-2,2-디일)비스(2,6-디브로모페놀)}(70.1 g; 125 mmol; 순도: 97%)에 티안트렌-1-일보론산(166 g; 625 mmol; 5 eq.; 순도: 98%) 및 트리스(*o*-톨릴)포스판(1.52 g; 5.0 mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물에 아니솔(500 g) 및 248 g의 물에 용해된 11.4 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 아르곤으로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(281 mg; 1.25 mmol)를 첨가하고 TLC(용리액: 예를 들어 사이클로헥산 / 에틸 아세테이트 3:1)가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다.

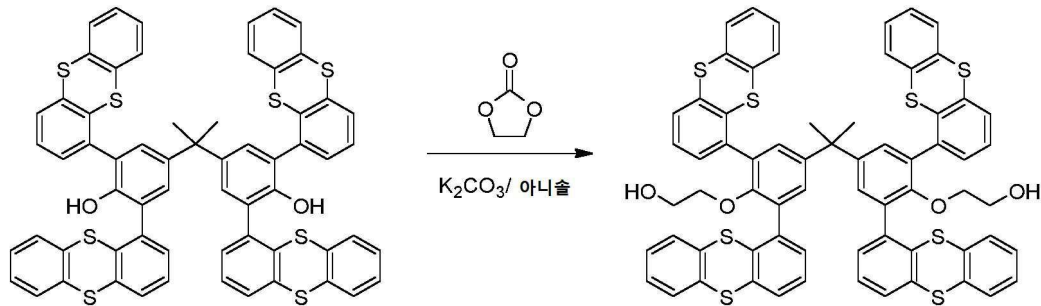
[0547]

혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaHCO<sub>3</sub> 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 6.75 g의 활성탄(Norit DX Ultra) 및 13.5 g의 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>를 첨가하고 혼합물을 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용매를 감압하에 완전히 제거하였다. 비정제 생성물은 부가적인 정제 없이 다음 단계에 사용할 수 있거나 톨루엔/MeOH(1/1 v/v) 혼합물로부터 재결정화될

수 있다.

[0548] 실시예 13: 2,2'-(프로판-2,2-디일비스{[2,6-디(티안트렌-1-일)-4,1-페닐렌]옥시})디(에탄-1-올)(화학식(Ia-1)의 화합물, X = C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 티안트렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup> = 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 52)

[0549]



[0550] 아니솔(360 g) 중의 실시예 12에서 얻은 4,4'-(프로판-2,2-디일)비스[2,6-디(티안트렌-1-일)페놀](125 mmol)에 5.2 g의 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 및 33 g의 에틸렌 카르보네이트를 첨가하였다. TLC(용리액: 에를 들어 사이클로헥산 / 에틸 아세테이트 3:1)가 변환 완료를 보여줄 때까지 반응 혼합물을 환류중에 교반하였다.

[0551] 혼합물을 70-80 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 염수, NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고 셀라이트를 통해 여과한 후 용매를 감압하에 완전히 제거하였다. 비정제 생성물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체로서 70.8 g의 표제 화합물을 약 97-98%의 화학적 순도로 얻었다.

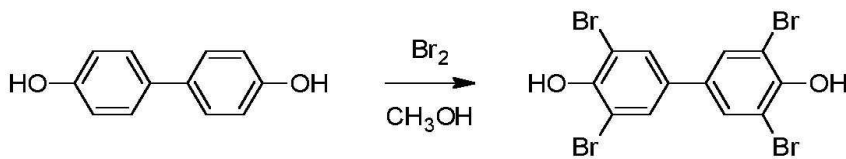
[0552] m.p. (DSC): 110.6 °C;

[0553] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 7.92 - 7.25(m, 32H, C<sub>Ar</sub>-H), 3.5 - 3.0(m, 8H, CH<sub>2</sub>), 2.1(bs, 6H, CH<sub>3</sub>), ppm.

[0554] IR(ATR): 723.33(68.04); 744.55(47.89); 779.27(73.45); 792.77(77.93); 885.36(77.60); 1026.16(74.34); 1070.53(78.20); 1111.03(80.06); 1219.05(76.24); 1247.99(79.74); 1386.86(70.11); 1448.59(64.40); 1552.75(85.03); 2848.96(83.56); 2924.18(78.87); 3053.42(87.35) cm<sup>-1</sup>.

[0555] 실시예 14a: 3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디올

[0556]

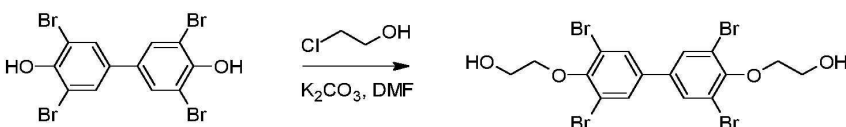


[0557] 750 g의 메탄올 중의 82.7 mL(약 258 g)의 브롬 용액에 750 g의 메탄올 중의 60 g의 [1,1'-비페닐]-4,4'-디올 용액을 0 °C에서 서서히 첨가하였다. 반응 혼합물을 0 °C에서 부가적인 시간 동안 교반한 다음 주변 온도에서 밤새 교반하였다. 침전된 생성물을 여과하고, 그 후 저온 메탄올에 이어서 아스코르브산 수용액(20 중량%) 및 마지막으로 물로 2회 세척하였다. 비정제 생성물(149 g)을 THF/톨루엔 혼합물로부터 결정화하여 미색 분말로서 130.3 g의 표제 생성물을 >97.5%의 화학적 순도로 얻었다.

[0558] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>): δ = 9.91(s, 2H, OH), 7.72(s, 4H, C<sub>Ar</sub>-H) ppm.

[0559] 실시예 14b: 2,2'-[(3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(옥시)]디(에탄-1-올)

[0560]

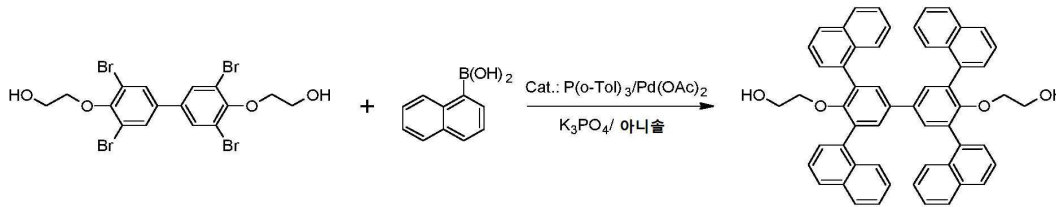


[0561] 483 g(약 512 mL)의 DMF 중의 161.3 g의 실시예 14a에서 얻은 3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디올 용액(60 °C에서 균질화됨)에 172.4 g의 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>를 첨가하였다. 혼합물을 60 °C에서 추가로 10-20 분간 교반한 다음 201.24 g의 2-클로로에탄-1-올을 첨가하였다. 반응 혼합물을 120 °C에서 3 시간 동안 교반하였다. 주변 온도로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 1.5 L의 물에 부어 백색 침전물을 형성하였다. 진한 HCl로 서서히 중화시킨 후, 비정제 생성물을 여과하고, 그 후 물(3 X 500 mL) 및 에탄올(500 mL)로 세척하였다. 비정제 생성물을 환류 중에 1450 g의 THF에 용해시키고, 4.0 g의 활성탄(Norit DX Ultra)을 첨가하고, 혼합물을 환류중에 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 60 °C에서 여과하고, 감압하에 용매를 제거하였다. THF/톨루엔 혼합물로부터의 결정화 후, 얻어진 결정을 여과하고 500 g의 톨루엔으로 세척하여 157.3 g(수율 대략 85.5%)의 표제 화합물을 >97.7%의 화학적 순도로 얻었다.

[0562] m.p. (DSC): 232.1 °C;

[0563] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>): δ = 7.8(s, 4H, C<sub>Ar</sub>-H), 4.74(t, J = 5.4 Hz, 2H, OH), 4.2 - 3.5(m, 8H, CH<sub>2</sub>) ppm.

[0564] 실시예 14c: 2,2'-[3,3',5,5'-테트라(나프탈렌-1-일)[1,1'-비페닐]-4,4'-디일]비스(옥시)}디(에탄-1-올)(화학식(Ia-1)의 화합물, X = 단일 결합, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 나프탈렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 244)



[0565]

[0566] 실시예 14b에서 얻은 2,2'-[(3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(옥시)]디(에탄-1-올)(74.5 g; 123.77 mmol)에 나프탈렌-1-일보론산(110 g; 626.8 mmol; 5.06 eq.; 순도 = 98%) 및 아니솔(390 mL)을 첨가하였다. 이 혼합물에 306 g의 물에 용해된 138 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반한 다음 아르곤으로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 5 mL의 아니솔 중의 트리스(o-톨릴)포스판(1.5 g; 4.95 mmol) 및 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(281 mg; 1.25 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다.

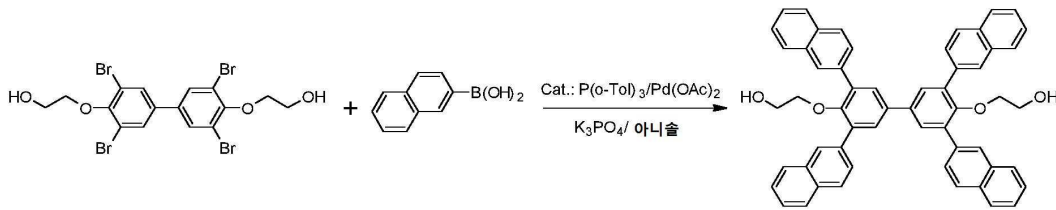
[0567] 혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 10 g의 활성탄(Norit DX Ultra) 및 100 g의 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>를 첨가하고 혼합물을 70 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 용매를 감압하에 제거하였다. 비정제 생성물을 톨루엔/i-프로판올 또는 톨루엔/MeOH(1/1 v/v) 혼합물로부터 재결정화하고/하거나 칼럼 크로마토그래피(용리액: 사이클로헥산/에틸 아세테이트)를 통해 정제하여 백색 고체로서 표제 화합물을 약 93%의 화학적 순도로 얻을 수 있다.

[0568] m.p. (DSC): 249.6 °C;

[0569] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.20 - 7.73(m, 16H, C<sub>Ar</sub>-H), 7.73 - 7.33(m, 16H, C<sub>Ar</sub>-H), 3.3 - 2.96(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 3.0 - 2.53(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 0.45(bs, 2H, OH) ppm.

[0570] IR(ATR): 607.6(76.1); 734.9(75.7); 773.48(34.8); 788.91(56.9); 800.49(68.7); 887.28(68.9); 1018.45(66.0); 1066.67(66.2); 1087.89(74.9); 1222.91(65.5); 1361.79(78.5); 1396.51(70.4); 1427.37(72.5); 1440.87(75.9); 1506.46(75.0) cm<sup>-1</sup>.

[0571] 실시예 15: 2,2'-[3,3',5,5'-테트라(나프탈렌-2-일)[1,1'-비페닐]-4,4'-디일]비스(옥시)}디(에탄-1-올)(화학식(Ia-1)의 화합물, X = 단일 결합, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 나프탈렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 245)



[0572]

[0573]

2,2'-[(3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(옥시)]디(에탄-1-올)(74.5 g; 123.77 mmol)에 나프탈렌-2-일보론산(165 g; 937.5 mmol; 7.5 eq.; 순도 = 98%) 및 아니솔(440 mL)을 첨가하였다. 이 혼합물에 460 g의 물에 용해된 207 g의  $K_3PO_4$ 를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 아르곤으로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 10 mL의 아니솔 중의 트리소(*o*-톨릴)포스판(3.05 g; 4.95 mmol) 및  $Pd(OCOCH_3)_2$ (561 mg; 2.5 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다.

[0574]

혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 10 g의 활성탄(Norit DX Ultra) 및 100 g의  $Na_2SO_4$ 를 첨가하고 혼합물을 70 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 감압하에 용매를 제거하였다. 비정제 생성물을 톨루엔/MeOH(7/3 w/w) 혼합물로부터 재결정화하고/하거나 칼럼 크로마토그래피(용리액: 사이클로헥산/에틸 아세테이트)를 통해 정제하여 백색 고체로서 표제 화합물을 약 94%의 화학적 순도로 얻었다.

[0575]

m.p. (DSC): 256.4 °C;

[0576]

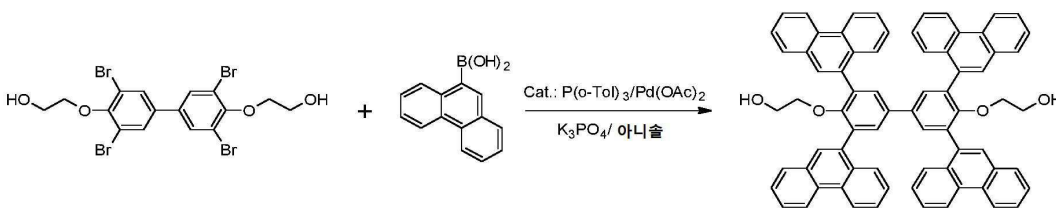
$^1H$  NMR(80 MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  = 8.2(s, 4H,  $C_{Ar}-H$ ), 8.12 - 7.77(m, 20H,  $C_{Ar}-H$ ), 7.71 - 7.42(m, 8H,  $C_{Ar}-H$ ), 3.57 - 3.38(m, 4H,  $CH_2$ ), 3.37 - 3.13(m, 4H,  $CH_2$ ), 1.13(m, 2H, OH) ppm.

[0577]

IR(ATR): 515.01(67.1); 651.96(78.1); 744.55(37.5); 775.41(77.9); 800.49(77.7); 823.63(53.4); 860.28(51.3); 893.07(71.0); 906.57(74.4); 995.3(77.1); 1014.59(70.5); 1045.45(74.2); 1072.46(72.0); 1080.17(68.6); 1217.12(67.0); 1236.41(76.2); 1336.71(76.6); 1419.66(67.7); 1442.8(69.8); 1504.53(76.0)  $cm^{-1}$ .

[0578]

실시예 16: 2,2'-{[3,3',5,5'-테트라(페난트렌-9-일)[1,1'-비페닐]-4,4'-디일]비스(옥시)}디(에탄-1-올)(화합식(Ia-1)의 화합물, X = 단일 결합,  $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 =$  페난트렌-9-일 및  $Z^1 = Z^2 =$  2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 246)



[0579]

[0580]

2,2'-[(3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(옥시)]디(에탄-1-올)(75.2 g; 125 mmol)에 페난트렌-9-일보론산(141.61 g; 625 mmol; 7.5 eq.; 순도: 98%) 및 아니솔(390 mL)을 첨가하였다. 이 혼합물에 306 g의 물에 용해된 138 g의  $K_3PO_4$ 를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 아르곤으로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 5 mL의 아니솔 중의 트리소(*o*-톨릴)포스판(1.52 g; 5.0 mmol) 및  $Pd(OCOCH_3)_2$ (281 mg; 1.25 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다.

[0581]

혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 10 g의 활성탄(Norit DX Ultra) 및 100 g의  $Na_2SO_4$ 를 첨가하고 혼합물을 70 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 감압하에 용매를 제거하였다. 비정제 생성물을 톨루엔/MeOH(7/3 w/w) 혼합물로부터 재결정화하고/하거나 칼럼 크로마토그래피(용리액: 사이클로헥산/

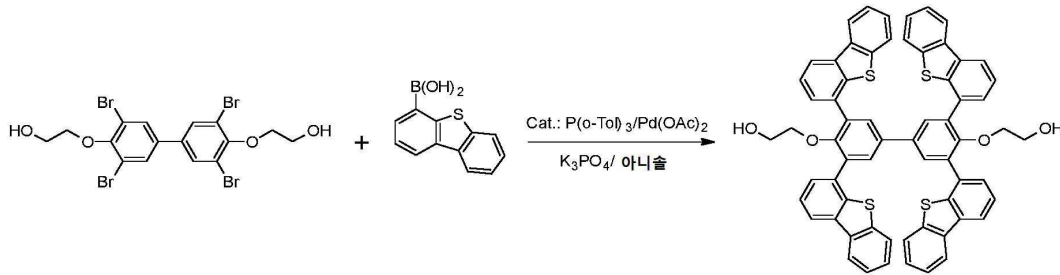
에틸 아세테이트)를 통해 정제하여 백색 고체로서 표제 화합물을 >98%의 화학적 순도로 얻었다.

[0582] m.p.(DSC): 347.2 °C 및 392.1 °C;

[0583] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.79 - 8.41(m, 8H, C<sub>Ar</sub>-H), 8.09 - 7.32(m, 32H, C<sub>Ar</sub>-H), 3.34 - 3.18(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 2.84 - 2.68(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 0.57 - 0.45(m, 2H, OH) ppm.

[0584] IR(ATR): 488.01(37.8); 567.09(72.2); 617.24(70.9); 692.47(78.9); 725.26(43.6); 744.55(47.9); 765.77(66.8); 885.36(71.0); 1014.59(74.9); 1068.6(76.0); 1220.98(71.6); 1361.79(79.7); 1429.3(67.4); 1448.59(72.5) cm<sup>-1</sup>.

[0585] 실시예 17: 2,2'-[3,3',5,5'-테트라키스(디벤조[b,d]티오펜-4-일)[1,1'-비페닐]-4,4'-디일]비스(옥시)}디(에탄-1-올)(화학식(Ia-1)의 화합물, X = 단일 결합, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 디벤조[b,d]티오펜-4-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 248)



[0586]

[0587] 2,2'-[3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디일]비스(옥시)}디(에탄-1-올)(10 g; 16.3 mmol)에 디벤조[b,d]티오펜-4-일보론산(19.1 g; 81.37 mmol; 5 eq.; 순도 = 98%) 및 아니솔(51 mL)을 첨가하였다. 이 혼합물에 40 g의 물에 용해된 18 g의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 아르곤으로 퍼징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 5 mL의 아니솔 중의 트리스(o-톨릴)포스판(198 mg; 0.651 mmol) 및 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(37 mg; 0.163 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료를 보여줄 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다.

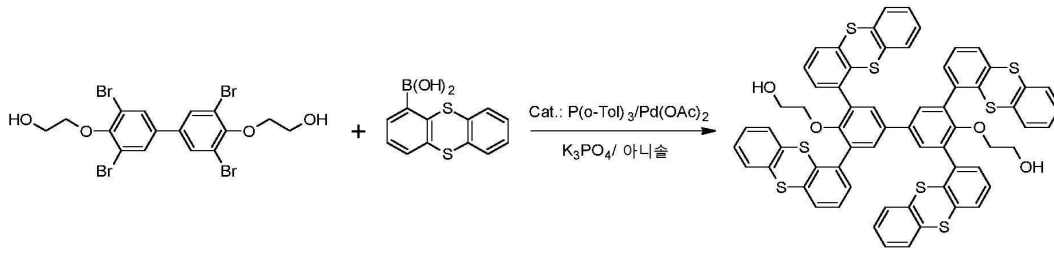
[0588] 혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 1.0 g의 활성탄(Norit DX Ultra) 및 10.0 g의 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>를 첨가하고 혼합물을 70 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 감압하에 용매를 제거하였다. 비정제 생성물을 메틸 에틸 케톤으로부터 재결정화하고/하거나 칼럼 크로마토그래피(용리액: 사이클로헥산/에틸 아세테이트)를 통해 정제하여 백색 고체로서 표제 화합물을 >94%의 화학적 순도로 얻었다.

[0589] m.p.(DSC): 390.9 °C;

[0590] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.21 - 6.98(m, 32H, C<sub>Ar</sub>-H), 3.34 - 3.18(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 3.05 - 2.79(m, 4H, CH<sub>2</sub>), 1.05 - 0.85(m, 2H, OH) ppm.

[0591] IR(ATR): 607.6(74.1); 617.24(65.8); 650.03(74.3); 686.68(70.2); 704.04(71.5); 721.4(64.4); 744.55(29.7); 887.28(61.2); 1031.95(63.0); 1047.38(60.8); 1078.24(64.8); 1232.55(64.9); 1249.91(74.9); 1303.92(78.5); 1357.93(75.7); 1379.15(68.1); 1442.8(65.3) cm<sup>-1</sup>.

[0592] 실시예 18: 2,2'-[3,3',5,5'-테트라(티안트렌-1-일)[1,1'-비페닐]-4,4'-디일]비스(옥시)}디(에탄-1-올)(화학식(Ia-1)의 화합물, X = 단일 결합, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 티안트렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 A의 화합물 249)



[0593]

[0594]

2,2'-[(3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(옥시)]디(에탄-1-올)(12.04 g; 20 mmol)에 티안트렌-1-일보론산(26.5 g; 100 mmol; 5 eq.; 순도: 98%) 및 아니솔(62 mL)을 첨가하였다. 이 혼합물에 49 g의 물에 용해된 22.1 g의  $K_3PO_4$ 를 첨가하였다. 2개의 맑은 상이 형성될 때까지 혼합물을 60-70 °C에서 교반하고 아르곤으로 피징하였다. 이 혼합물에 아르곤 하에서 5 mL의 아니솔 중의 트리스(*o*-톨릴)포스판(244 mg; 0.8 mmol) 및  $Pd(OAc)_2$ (45 mg; 0.2 mmol)를 첨가하고 TLC가 변환 완료될 때까지 혼합물을 환류하에 교반하였다.

[0595]

혼합물을 70 °C로 냉각시키고 유기 층을 70 °C에서 분리하고 그 후 NaOH 수용액(10 중량%), HCl 수용액(2 M) 및 염수로 세척하였다. 유기 층에 1.0 g의 활성탄(Norit DX Ultra) 및 10.0 g의  $Na_2SO_4$ 를 첨가하고 혼합물을 70 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 감압하에 용매를 제거하였다. 비정제 생성물을 칼럼 크로마토그래피(용리액: 사이클로헥산/에틸 아세테이트)를 통해 정제하여 백색 고체로서 표제 화합물을 >94%의 화학적 순도로 얻었다.

[0596]

m.p. (DSC): 276.5 °C;

[0597]

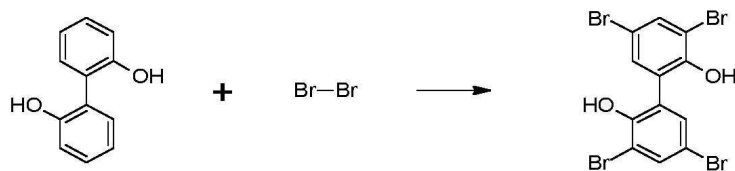
$^1H$  NMR(80 MHz,  $DMSO-d_6$ ):  $\delta$  = 7.85(s, 4H,  $C_{Ar}-H$ ), 7.74 - 7.16(m, 28H,  $C_{Ar}-H$ ), 4.15 - 4.00(m, 2H, OH), 3.27 - 3.05(m, 4H,  $CH_2$ ), 2.90 - 2.70(m, 4H,  $CH_2$ ) ppm.

[0598]

IR(ATR): 410.85(5.61); 432.07(43.16); 461.00(48.69); 476.43(49.07); 663.53(75.92); 725.26(68.4); 746.48(45.2); 790.84(73.4); 875.71(75.99); 1018.45(75.63); 1070.53(77.53); 1224.84(73.71); 1390.72(71.63); 1431.23(64.16); 1446.66(65.87)  $cm^{-1}$ .

[0599]

실시예 19a: 3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-2,2'-디올



[0600]

[0601]

메탄올(1000 mL) 중의 1,1'-비페닐-2,2'-디올(25.0 g; 134 mmol) 용액에 브롬(107 g, 671 mmol, 5.0 eq.)을 0 °C에서 적가하였다. 반응물을 실온으로 가온하고 TLC(헵탄/에틸 아세테이트 2:1)가 변환 완료될 때까지 교반하였다. 침전물을 여과하고 저온의 메탄올로 세척하여 비정제 생성물을 황색 고체(49.8 g, 99.2 mmol; 수율: 74%)로 얻었다. 비정제 생성물을 아세톤으로부터 재결정화하여 미색 고체로서 35.9 g의 표제 화합물을 얻었다.

[0602]

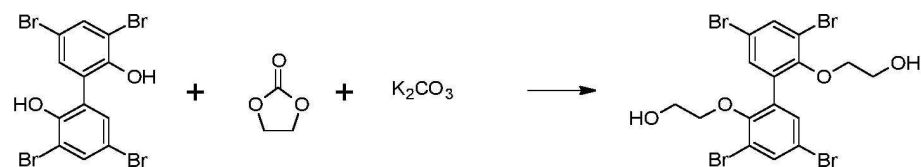
m.p. (DSC): 300 °C에서 분해.

[0603]

$^1H$  NMR(80 MHz,  $DMSO-d_6$ ):  $\delta$  = 8.67(br s, 2H), 7.74(d, J = 2.4 Hz, 2H), 7.29(d, J = 2.4 Hz, 2H) ppm.

[0604]

실시예 19b: 2,2'-[(3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-2,2'-디일)비스(옥시)]디(에탄-1-올)

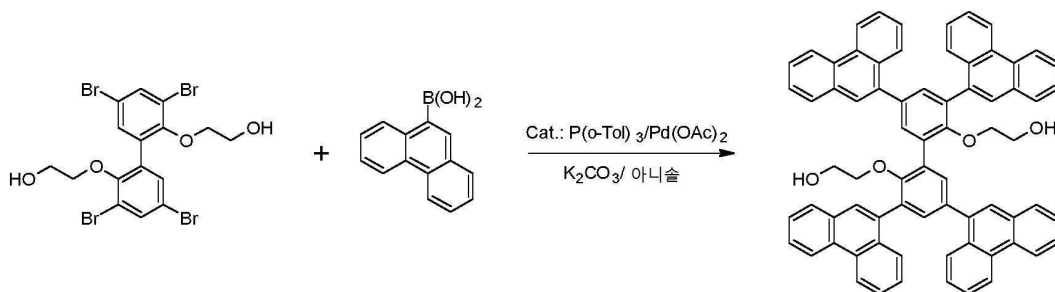


[0605]

[0606] 아니솔(450 mL) 중의 실시예 19a에서 얻은 3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-2,2'-디올(29.0 g; 57.8 mmol)의 현탁액에 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(31.9 g, 231 mmol, 4.0 eq)를 첨가하고 혼합물을 50 °C에서 30 min 동안 교반하였다. 에틸렌 카르보네이트(50.9 g, 578 mmol, 10 eq.)를 나누어 첨가하고 TLC(대략 1%의 아세트산을 갖는 사이클로헥산/에틸 아세테이트(2:1))가 변환 완료를 보여줄 때까지 반응물을 가열하여 환류시켰다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에틸 아세테이트(200 mL) 및 물(100 mL)을 첨가하고 상을 분리하였다. 수성 상을 에틸 아세테이트(100 mL)로 추출하였다. 유기 상을 합하여 물(2 x 100 mL)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키고, 감압하에 용매를 제거하여 미색 고체(35.2 g, 57.8 mmol, 100%)로서 비정제 생성물을 얻었다. 비정제 생성물을 톨루엔으로부터 재결정화하여 약간 미색의 고체로서 20 g의 표제 화합물을 얻었다.

[0607] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 7.76(d, J = 2.4 Hz, 2H), 7.45(d, J = 2.4 Hz, 2H), 3.85 - 3.49(m, 8H), 2.08(t, J = 5.6 Hz, 2H) ppm.

[0608] 실시예 19c: 2,2'-{[3,3',5,5'-테트라(페난트렌-9-일)[1,1'-비페닐]-2,2'-디일]비스(옥시)}디(에탄-1-올)(화학식(Ia-1)의 화합물, X = 단일 결합, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup> = R<sup>4</sup> = 티안트렌-1-일 및 Z<sup>1</sup>=Z<sup>2</sup>= 2-하이드록시에틸; 표 B의 화합물 12)



[0609]

[0610] 아니솔(100 g) 중의 실시예 19b에서 얻은 2,2'-[(3,3',5,5'-테트라브로모[1,1'-비페닐]-2,2'-디일)비스(옥시)]디(에탄-1-올)(17.0 g; 28.8 mmol) 및 9-페난트릴보론산(32.0 g; 144 mmol; 5.0 eq.)의 혼합물에 물(70 g) 중의 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(31.8 g, 150 mmol, 5.2 eq.) 용액을 첨가하고 혼합물을 70 °C로 가열하였다. 트리스(*o*-톨릴)포스판(0.175 g, 0.576 mmol, 2.0 mol%) 및 Pd(OCOCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(32.4 mg; 0.144 mmol, 0.5 mol%)를 첨가하고 TLC(사이클로헥산/에틸 아세테이트 3:1)가 추가의 진행을 보이지 않을 때까지 반응 혼합물을 가열 환류시켰다.

[0611] 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에틸 아세테이트(100 g)를 첨가하고 층을 분리하였다. 수성 상을 에틸 아세테이트(50 g)로 추출하였다. 유기 상을 합하여 연속적으로 물(100 g), 이어서 염수(100 g)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키고, 감압하에 용매를 제거하여 비정제 생성물을 얻었다. 칼럼 크로마토그래피(사이클로헥산/에틸 아세테이트 3:1)를 통해 정제하여 백색 고체로서 21.5 g의 표제 화합물을 >95%의 화학적 순도로 얻었다.

[0612] m.p. = 196 °C - 205 °C

[0613] <sup>1</sup>H NMR(80 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 9.04-8.54(m, 8H), 8.43 - 7.42(m, 32H), 3.95 - 3.05(m, 8H), 1.71(t, J = 6.2 Hz, 2H) ppm.

[0614] 2.3화학식(I)의 단량체의 굴절률 n<sub>D</sub>:

[0615] 하기 표 C는 소프트웨어 ACD/ChemSketch 2012(Advanced Chemistry Development, Inc.)를 사용하여 계산된 화학식(I)의 일부 단량체의 굴절률을 열거한다. 개별적인 단량체는 각각 표 A 및 B에서의 이들의 엔트리 번호로 표 C에서 확인된다. 또한, 표 C에 포함된 모든 단량체가 가시광 범위에서 흡수하지 않거나 단지 무시할만한 정도로 흡수하며 따라서 기본적으로 무색임이 이들에 대한 둘 화학적 계산에 의해 입증되었다.

[0616] [표 C]

엔트리 #	표	n <sub>p</sub> (calc.) 단량체
1	A	1.64
2	A	1.73
3	A	1.73
4	A	1.785
5	A	1.83
6	A	1.83
7	A	1.79
8	A	1.79
9	A	1.67
10	A	1.75
11	A	1.75
12	A	1.80
13	A	1.84
14	A	1.84
15	A	1.80
16	A	1.80
17	A	1.76
18	A	1.84
19	A	1.84
20	A	1.90
21	A	1.94
22	A	1.94
23	A	1.955
24	A	1.955
25	A	1.66
26	A	1.75
27	A	1.75
28	A	1.81
29	A	1.86
30	A	1.86
31	A	1.815
32	A	1.815
33	A	1.615
34	A	1.69
35	A	1.69
36	A	1.75
50	A	1.78
51	A	1.78
52	A	1.76
53	A	1.76
54	A	1.63
55	A	1.71
56	A	1.71
57	A	1.76
71	A	1.79
72	A	1.79
73	A	1.77
74	A	1.77

75	A	1.71
76	A	1.79
77	A	1.79
78	A	1.85
92	A	1.885
93	A	1.885
94	A	1.90
95	A	1.90
243	A	1.63
244	A	1.71
245	A	1.71
246	A	1.77
247	A	1.81
248	A	1.81
249	A	1.775
250	A	1.775
251	A	1.60
252	A	1.67
253	A	1.67
254	A	1.73
255	A	1.76
256	A	1.76
257	A	1.73
258	A	1.73
259	A	1.61
260	A	1.68
261	A	1.68
262	A	1.74
263	A	1.765
264	A	1.765
265	A	1.74
266	A	1.74
267	A	1.68
268	A	1.76
269	A	1.76
270	A	1.82
271	A	1.85
272	A	1.85
273	A	1.86
274	A	1.86
275	A	1.60
276	A	1.685
277	A	1.685
278	A	1.74
279	A	1.78
280	A	1.78
281	A	1.75
282	A	1.75
283	A	1.64
284	A	1.70
285	A	1.70

[0617]

286	A	1.75
287	A	1.78
288	A	1.78
289	A	1.76
290	A	1.76
291	A	1.655
292	A	1.72
293	A	1.72
294	A	1.76
295	A	1.79
296	A	1.79
297	A	1.765
298	A	1.765
299	A	1.73
300	A	1.795
301	A	1.795
302	A	1.84
303	A	1.875
304	A	1.875
305	A	1.89
306	A	1.89
307	A	1.65
308	A	1.72
309	A	1.72
310	A	1.77
311	A	1.80
312	A	1.80
313	A	1.77
314	A	1.77
315	A	1.64
316	A	1.70
317	A	1.70
318	A	1.75
319	A	1.78
320	A	1.78
321	A	1.76
322	A	1.76
323	A	1.655
324	A	1.72
325	A	1.72
326	A	1.76
327	A	1.79
328	A	1.79
329	A	1.765
330	A	1.765
331	A	1.73
332	A	1.795
333	A	1.795
334	A	1.84
335	A	1.875
336	A	1.875

337	A	1.89
338	A	1.89
339	A	1.65
340	A	1.72
341	A	1.72
342	A	1.77
343	A	1.80
344	A	1.80
345	A	1.77
346	A	1.77
347	A	1.67
348	A	1.73
349	A	1.73
350	A	1.77
351	A	1.80
352	A	1.80
353	A	1.775
354	A	1.775
355	A	1.69
356	A	1.74
357	A	1.74
358	A	1.78
359	A	1.805
360	A	1.805
361	A	1.78
362	A	1.78
363	A	1.765
364	A	1.82
365	A	1.82
366	A	1.86
367	A	1.89
368	A	1.89
369	A	1.905
370	A	1.905
371	A	1.69
372	A	1.745
373	A	1.745
374	A	1.79
375	A	1.82
376	A	1.82
377	A	1.79
378	A	1.79
379	A	1.67
380	A	1.73
381	A	1.73
382	A	1.77
383	A	1.80
384	A	1.80
385	A	1.775
386	A	1.775
387	A	1.69

[0618]

388	A	1.74
389	A	1.74
390	A	1.78
391	A	1.805
392	A	1.805
393	A	1.78
394	A	1.78
395	A	1.765
396	A	1.82
397	A	1.82
398	A	1.86
399	A	1.89
400	A	1.89
401	A	1.905
402	A	1.905
403	A	1.69
404	A	1.745
405	A	1.745
406	A	1.79
407	A	1.82
408	A	1.82
409	A	1.79
410	A	1.79
411	A	1.67
412	A	1.73
413	A	1.73
414	A	1.77
415	A	1.80
416	A	1.80
417	A	1.775
418	A	1.775
419	A	1.69
420	A	1.74
421	A	1.74
422	A	1.78
423	A	1.805
424	A	1.805
425	A	1.78
426	A	1.78
427	A	1.765
428	A	1.82
429	A	1.82
430	A	1.86
431	A	1.89
432	A	1.89
433	A	1.905
434	A	1.905
435	A	1.69
436	A	1.745
437	A	1.745
438	A	1.79

439	A	1.82
440	A	1.82
441	A	1.79
442	A	1.79
1	B	1.66
2	B	1.75
3	B	1.75
4	B	1.81
5	B	1.86
6	B	1.86
7	B	1.815
8	B	1.815
9	B	1.63
10	B	1.71
11	B	1.71
12	B	1.77
13	B	1.81
14	B	1.81
15	B	1.775
16	B	1.775
17	B	1.60
18	B	1.685
19	B	1.685
20	B	1.74
21	B	1.78
22	B	1.78
23	B	1.75
24	B	1.75
25	B	1.65
26	B	1.72
27	B	1.72
28	B	1.77
29	B	1.80
30	B	1.80
31	B	1.77
32	B	1.77
33	B	1.65
34	B	1.72
35	B	1.72
36	B	1.77
37	B	1.80
38	B	1.80
39	B	1.77
40	B	1.77
41	B	1.69
42	B	1.745
43	B	1.745
44	B	1.79
45	B	1.82
46	B	1.82
47	B	1.79

48	B	1.79
49	B	1.69
50	B	1.745
51	B	1.745
52	B	1.79
53	B	1.82
54	B	1.82
55	B	1.79
56	B	1.79

57	B	1.69
58	B	1.745
59	B	1.745
60	B	1.79
61	B	1.82
62	B	1.82
63	B	1.79
64	B	1.79

[0619]

[0620]

[0621]

[0622]

[0623]

[0624]

[0625]

[0626]

[0627]

3. 화학식 (I)의 단량체로부터 폴리카르보네이트 수지의 제조

3.1 화학식(I)의 단량체로부터 제조된 수지에 대한 분석:

굴절률( $n_D$ ):

JIS B 7071-2:2018에 따라 시험편으로서 폴리카르보네이트 수지로 만들어진 3 mm 두께의 디스크 형상 시험편을 사용하여 굴절률을 측정하였다. 하기의 굴절률 측정 디바이스를 사용하여 측정을 23 °C에서 수행하였다.

굴절률 측정 디바이스:

Shimadzu Corporation이 제조한 KPR-3000

아베수( $v$ ):

- [0628] 굴절률 측정에서 사용된 시험편과 동일한 3 mm 두께의 디스크 형상 시험편을 사용하였다. 23 °C 및 486 nm, 589 nm 및 656 nm의 파장에서 하기 굴절률 측정 디바이스를 사용하여 굴절률 값을 측정하였다. 이어서, 하기-기재된 수학적식을 사용하여 아베수를 계산하였다.
- [0629] 굴절률 측정 디바이스:
- [0630] Shimadzu Corporation이 제조한 KPR-3000
- [0631] 
$$v = (nD - 1)/(nF - nC)$$
- [0632] nD: 589 nm 파장에서의 굴절률
- [0633] nC: 656 nm 파장에서의 굴절률
- [0634] nF: 486 nm 파장에서의 굴절률
- [0635] 유리 전이 온도(Tg):
- [0636] JIS K7121-1987에 따른 10 °C/분 가열 프로그램을 사용하여 시차 주사 열량계(DSC)에 의해 유리 전이 온도를 측정하였다.
- [0637] 시차 주사 열량계 디바이스:
- [0638] Hitachi High-Tech Science Corporation에 의해 제조된 X-DSC7000
- [0639] 분자량
- [0640] 겔 투과 크로마토그래피(GPC) 방법에 따라 수지의 중량 평균 분자량(Mw) 값을 측정하고 표준 폴리스티렌 변환 접근법에 의해 계산하였다. 하기 디바이스, 칼럼 및 측정 조건을 사용하였다:
- [0641] GPC 디바이스: HLC-8420GPC(Tosoh Corporation);
- [0642] 칼럼: 3개의 TSKgel SuperHM-M(Tosoh Corporation),
- [0643] 1개의 가드 칼럼 SuperHM-M(Tosoh Corporation),
- [0644] 1개의 TSKgel SuperH-RC(Tosoh Corporation);
- [0645] 검출 디바이스: RI 검출
- [0646] 표준 폴리스티렌: 표준 폴리스티렌 키트로서 PstQuick C(Tosoh Corporation);
- [0647] 용리액: 테트라하이드로푸란;
- [0648] 용리액의 유속: 0.6 ml/min;
- [0649] 칼럼 온도: 40 °C.
- [0650] 수 평균 분자량(Mn) 값은 상기 기재된 Mw 값의 측정에 사용된 것들과 유사한 방법을 사용하여 계산할 수 있다. 폴리스티렌 변환된 중량 평균 분자량(Mw) 및 수 평균 분자량(Mn)은 사전 준비된 폴리스티렌의 표준 곡선을 사용하여 계산하였다. 구체적으로, 분자량이 공지된 표준 폴리스티렌("PstQuick C", Tosoh Corporation)을 사용하여 표준 곡선을 준비하였다. 추가로, 표준 폴리스티렌의 측정된 데이터를 기준으로 하여 각각의 피크의 분자량 값 및 용리 시간을 도시하고 3-차원 근사(approximation)를 수행함으로써 보정 곡선을 얻었다. 하기 계산식에 의거하여 Mw 및 Mn에 대한 값을 계산하였다:
- $$Mw = \frac{\sum(W_i \times M_i)}{\sum(W_i)}$$
- $$Mn = \frac{\sum(N_i \times M_i)}{\sum(N_i)}$$
- [0651]
- [0652] 계산식에서, "i"는 "i"번째 분할점을 나타내고, "Wi"는 "i"번째 분할점에서의 중합체의 분자량(g)을 나타내며, "Ni"는 "i"번째 분할점에서의 중합체의 분자수를 나타내고, "Mi"는 "i"번째 분할점에서의 분자질량을 나타낸다. 분자질량(M)은 보정 곡선에서 상응하는 용리 시간에 폴리스티렌의 분자질량 값을 나타낸다.
- [0653] 저분자량 화합물의 함량(CLWC)
- [0654] 저분자량 화합물의 함량(CLWC)은 모든 피크의 총 면적에 대한 1000 미만의 Mw 값을 갖는 화합물의 피크 면적의

합의 비를 나타내며, 여기에서 피크 면적은 상기 기재된 GPC 분석에 따라 결정된다. 따라서, CLWC 값은 하기 식을 사용하여 결정되었다:

$$CLWC(\%) =$$

$$\frac{\text{GPC 분석에서 1.000 미만의 Mw를 갖는 화합물 피크의 총 면적}}{\text{(GPC 분석에서 화합물의 모든 피크의 총 면적)}} \times 100$$

[0655]

[0656]

이와 관련하여 사용된 GPC 분석은 열가소성 수지의 분자량을 측정하기 위해 상기 기재된 것과 유사하게 수행되었다.

[0657]

복굴절( $\Delta n$ ):

[0658]

분석하고자 하는 각각의 수지 실시예를 메틸렌 클로라이드(용매)에 용해시켜 10 중량-%의 농도를 갖는 용액을 형성하였다. 얻어진 용액을 표면이 전기도금으로 처리된 SUS 플레이트 상에 주조하고 캐스트 필름을 만든 다음 25 °C에서 용매를 증발시켰다. 100  $\mu\text{m}$ 의 두께를 갖는 면당 50 mm의 사각 필름 조각을 캐스트 필름으로부터 절단하였다. 수지의 Tg보다 20 °C 더 높은 온도에서 필름 조각을 1.5배 미만으로 연신하였다. Shibayama Scientific Co., Ltd.에 의해 제조된 연신 기계 SS-70을 사용하여 연신을 실행하였다. 얻어진 연신 필름을 JASCO Corporation에 의해 제조된 엘립소미터 M-220을 사용한 지연 측정(retardation measurement)에 적용하였다.

[0659]

지연/위상 차이 Re로부터 복굴절 값  $\Delta n$ 을 하기 식에 의해 계산하였다:

[0660]

$$\Delta n = |Re/d|$$

[0661]

$\Delta n$ : 배향 복굴절

[0662]

Re: 위상 차이(phase difference)[nm]

[0663]

d: 두께[nm]

[0664]

복굴절의 대수 부호는 필름의 연신 방향에서의 굴절률( $n_{||}$ ) 및 연신에 대해 수직 방향에서의 굴절률( $n_{\perp}$ )을 사용하여 하기 식으로 나타낸다:

[0665]

$$\Delta n = n_{||} - n_{\perp}$$

[0666]

$\Delta n$ 이 양이면 이는 양의 복굴절이라 불리는 한편,  $\Delta n$ 이 음이면 이는 음의 복굴절이라 불린다.

[0667]

3.2호모폴리카르보네이트의 제조 실시예:

[0668]

실시예 20 내지 30:

[0669]

하기 표 1은 당업계에 주지된 폴리에스테르카르보네이트의 제조방법과 유사하게 디올 구성요소로서 실시예 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 또는 13에서 제조된 화학식(Ia-1)의 단량체 중의 하나를 카르보네이트 형성 단량체, 예컨대 디페닐카르보네이트와 반응시켜 얻을 수 있는 실시예 20 내지 30의 호모폴리카르보네이트의 물성, 즉 굴절률( $n_D$ ), 아베수( $v$ ), 유리 전이 온도(Tg) 및 복굴절( $\Delta n$ )을 열거한다. 표 1은 또한 디올 구성요소로서 각각 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)-페닐)플루오렌 및 비페놀 A로부터 제조된 2개의 비교예 호모폴리카르보네이트의  $n_D$ - 및 Tg-값을 열거한다. 이에 따라, 실시예 20 내지 30의 호모폴리카르보네이트는 각각 제각기의 화학식(IIa-1)의 구조 단위 및 화학식(III-1)의 구조 단위로 구성되는 한편, 비교예 호모폴리카르보네이트는 각각 단량체 9,9-비스(4-(2-하이드록시에톡시)-페닐)플루오렌 및 비스페놀 A로부터 유래된 구조 단위 및 화학식(III-1)의 구조 단위로 구성된다.

[0670]

표 1에 제공된 실시예 20 내지 30의 호모폴리카르보네이트의  $n_D$ -,  $v$ -, Tg- 및  $\Delta n$ -값은 상기-언급된 폭스 방정식을 사용하여 실시예 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 또는 13의 단량체에서 유래된 상응하는 공중합체의 제각기의 값으로부터 계산하였다. 이들 공중합체의 제조 및 이들의 물성 데이터를 하기 실시예 31 내지 40에 기재하였다. 비교예 호모폴리카르보네이트의  $n_D$ - 및 Tg-값은 제US 9,360,593호에서 취하였다.

[0671]

[표 1]

[0672] 실시예 20 내지 30의 호모폴리카르보네이트의 특성

실시예	단량체	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]	$\Delta n$
20	2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디페닐-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디페닐-페녹시]에탄올 (실시예 1 참조)	1.626	23.3	131	매우 약하게 양의 $\Delta n$
21	2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(나프탈렌-1-일)-페녹시]에탄올 (실시예 2 참조)	1.669	18.5	145	
22	2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-2-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(나프탈렌-2-일)-페녹시]에탄올 (실시예 3 참조)	1.669	16.6	154	매우 약하게 양의 $\Delta n$
23	2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(페난트렌-9-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(페난트렌-9-일)-페녹시]에탄올 (실시예 4b 참조)	1.712	16	235	강하게 음의 $\Delta n$
24	2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(1,2-디벤조[b,d]티엔-4-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(1,2-디벤조[b,d]티엔-4-일)-페녹시]에탄올 (실시예 5 참조)	1.712	17.9	195	
25	2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]설폰닐-2,6-디(나프탈렌-1-	1.679	18.6	155	

[0673]

실시예	단량체	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]	$\Delta n$
	일(페녹시)에탄올 (실시예 6 참조)				
26	2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]설폰닐-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올 (실시예 7 참조)	1.684	18.9	74	
27	2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(페난트렌-9-일)페닐]설폰닐-2,6-디(페난트렌-9-일)페녹시]에탄올 (실시예 8 참조)	1.716	16.7	197	
28	2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(디벤조[b,d]티엔-4-일)페닐]설폰닐-2,6-디벤조[b,d]티엔-4-일)페녹시]에탄올 (실시예 9 참조)	1.716	16.9	214	
29	2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(티안트렌-1-일)페닐]설폰닐-2,6-디(티안트렌-1-일)페녹시]에탄올 (실시예 10 참조)	1.709	20.1	166	
30	2,2'-프로판-2,2'-디일비스[2,6-디(티안트렌-1-일)-4,1-페닐렌]옥시]디(에탄-1-올) (실시예 13 참조)	1.702	20.6	197	
-	9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)-페닐]플루오렌*	1.639 *		149*	

[0674]

실시예	단량체	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]	$\Delta n$
-	비스페놀 A *	1.589 *		148*	

[0675]

[0676]

\* 비교예 화합물;  $n_D$  값 및  $T_g$  값은 제US 9,360,593호에 보고된 바와 같다.

[0677]

3.3코폴리카르보네이트의 제조에 대한 실시예:

[0678]

실시예 31: 실시예 1의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

[0679]

재료로서, 3.00 kg(4.83 mol)의 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디페닐-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디페닐-페녹시]에탄올 (실시예 1 참조, 이하 TPBHBPA로도 명명됨), 12.01 kg(27.39 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF), 7.11 kg(33.19 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및 15 ml의  $2.5 \times 10^2$  mol/l ( $7.8 \times 10^{-4}$  mol) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

[0680]

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고, 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서, 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 이어서, 압력을 10 분 내에 100 Torr로

감소시키고, 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고, 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 교반하면서 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 하기 표 2에 요약하였다.

[표 2]

수지	단량체 (mol-%)		특성		
	TPBHBPAA	BPEF	$n_D$	$v$	T <sub>g</sub> [°C]
실시예 31	15	85	1.637	23.5	142
실시예 20*	100	0	1.626	23.3	131

\* 실시예 20의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 32: 실시예 2의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 4.70 kg(5.72 mol)의 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올(실시예 2 참조, 이하 T1NBHBPAA로도 명명됨), 10.04 kg(22.90 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]-플루오렌(BPEF), 6.41 kg(29.90 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및 11 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $2.8 \times 10^{-4}$  mol) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다. 반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고, 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서, 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고, 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 교반하면서 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 표 3에 요약하였다.

[표 3]

수지	단량체 (mol-%)		특성		
	T1NBHBPAA	BPEF	$n_D$	$v$	T <sub>g</sub> [°C]
실시예 32	20	80	1.649	21.7	145
실시예 21*	100	0	1.669	18.5	145

\* 실시예 21의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 33: 실시예 3의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 6.51 kg(7.93 mol)의 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-2-일)페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(나프탈렌-2-일)페녹시]에탄올(실시예 3 참조, 이하 T2NBHBPAA로도 명명됨), 8.12 kg(18.51 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]-플루오렌(BPEF), 5.83 kg(27.22 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및 31 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $7.8 \times 10^{-4}$  mol) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고, 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서, 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고,

240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 교반하면서 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 표 4에 요약하였다.

[표 4]

수지	단량체 (mol-%)		특성		
	T2NBHBPA	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]
실시예 33	30	70	1.665	19.85	149
실시예 22*	100	0	1.669	16.61	154

\* 실시예 22의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 34: 실시예 4b의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 8.32 kg(8.16 mol)의 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(페난트렌-9-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(페난트렌-9-일)-페녹시]에탄올(실시예 4b 참조, 이하 T9PNBHBPA로도 명명됨), 8.35 kg(19.04 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)-페닐]플루오렌(BPEF), 6.00 kg(28.01 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및 32 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $7.8 \times 10^{-4}$  mol) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고, 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서, 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고, 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 교반하면서 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 표 5에 요약하였다.

[표 5]

수지	단량체 (mol-%)		특성		
	T9PNBHBPA	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]
실시예 34	30	70	1.675	19.1	179
실시예 23*	100	0	1.712	16	235

\* 실시예 23의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 35: 실시예 5의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 9.00 kg(8.61 mol)의 2-[4-[1-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(1,2-디벤조[b,d]티엔-4-일)-페닐]-1-메틸-에틸]-2,6-디(1,2-디벤조[b,d]티엔-4-일)-페녹시]에탄올(또는 2,2'-((프로판-2,2-디일비스(2,6-비스(디벤조[b,d]티오펜-4-일)-4,1-페닐렌))비스(옥시))비스(에탄-1-올), 실시예 5 참조, 이하 T4DBTBHBPA로도 명명됨), 8.81 kg(20.09 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF), 6.33 kg(29.56 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및 11 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $2.8 \times 10^{-4}$  mol) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고, 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 이어서, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감

소시키고, 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고, 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 하기 표 6에 요약하였다.

[표 6]

수지	단량체 (mol-%)		특성				
	T4DBTBHB PA	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [° C]	Mw	Mn
실시예 35	30	70	1.675	20.3	-	26459	6524
실시예 24*	100	0	1.712	17.9	195	-	-

\* 실시예 24의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 36: 실시예 6의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 7.00 kg(8.30 mol)의 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]설폰닐-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올(실시예 6 참조, 이하 T1NBHBPS로도 명명됨), 8.50 kg(19.38 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF), 6.11 kg(28.51 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및 11 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $2.8 \times 10^{-4}$  mol) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고, 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 이어서, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고, 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고, 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 하기 표 7에 요약하였다.

[표 7]

수지	단량체 (mol-%)		특성		
	T1NBHBPS	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [° C]
실시예 37	30	70	1.658	20.9	150
실시예 25*	100	0	1.679	18.6	155

\* 실시예 25의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 37: 실시예 7의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 4.50 kg(5.55 mol)의 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(나프탈렌-1-일)페닐]설폰닐-2,6-디(나프탈렌-1-일)페녹시]에탄올(또는 2,2'-((티오비스(2,6-디(나프탈렌-1-일)-4,1-페닐렌))비스(옥시))비스(에탄-1-올 실시예 7 참조, 이하 T1NBHTDP로도 명명됨), 9.73 kg(22.19 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF), 6.64 kg(28.58 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및 11 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $2.8 \times 10^{-4}$  mol) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고, 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열

하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 표 8에 요약하였다.

[표 8]

수지	단량체 (mol-%)		특성				
	T1NBHTDP	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]	Mw	Mn
실시예 37	20	80	1.653	21.8	112	6846	6206
실시예 26*	100		1.684	18.9	74	-	-

\* 실시예 26의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 38: 실시예 8의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 4.24 kg(4.06 mol)의 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(페난트렌-9-일)페닐]설폰닐-2,6-디(페난트렌-9-일)페녹시]에탄올(실시예 8 참조, 이하 T9PNBHBPS로도 명명됨), 10.09 kg(23.02 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF로도 명명됨), 5.92 kg(27.62 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC로도 명명됨) 및 11 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $2.7 \times 10^{-4}$  mol( $10 \times 10^{-6}$  mol 내지 1 mol의 디하이드록시 화합물의 총량)) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 교반하면서 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 표 9에 요약하였다.

[표 9]

수지	단량체 (mol-%)		특성		
	T9PNBHBPS	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]
실시예 38	15	85	1.661	21.0	157

실시예 39: 실시예 10의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 5.06 kg(4.23 mol)의 2-[4-[4-(2-하이드록시에톡시)-3,5-디(티안트렌-1-일)페닐]설폰닐-2,6-디(티안트렌-1-일)페녹시]에탄올(또는 2,2'-((설폰닐비스(2,6-디(티안트렌-1-일)-4,1-페닐렌))비스(옥시))비스(에탄-1-올), 실시예 10 참조, 이하 T1TNTBHBPS로도 명명됨), 10.51 kg(23.96 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF로도 명명됨), 6.19 kg(28.89 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC로도 명명됨) 및 11 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $2.8 \times 10^{-4}$  mol( $10 \times 10^{-6}$  mol 내지 1 mol의 디하이드록시 화합물의 총량)) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열

하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 교반하면서 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 표 10에 요약하였다.

[표 10]

수지	단량체 (mol-%)		특성				
	T1TNTBHB PS	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [° C]	Mw	Mn
실시예 39	15	85	1.661	22.3	151	21766	13021
실시예 29*	100		1.709	21.0	166	-	-

\* 실시예 29의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 40: 실시예 13의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 9.91 kg(8.44 mol)의 2,2'-(프로판-2,2-디일비스{[2,6-디(티안트렌-1-일)-4,1-페닐렌]옥시})디(에탄-1-올)(또는 2,2'-((프로판-2,2-디일비스(2,6-디(티안트렌-1-일)-4,1-페닐렌))비스(옥시))비스(에탄-1-올)), 실시예 13 참조, 이하 T1TNTBHBPA로도 명명됨), 8.64 kg(19.70 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF로도 명명됨), 6.21 kg(28.99 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC로도 명명됨) 및 11 ml의  $2.5 \times 10^{-2}$  mol/l( $2.8 \times 10^{-4}$  mol( $10 \times 10^{-6}$  mol 내지 1 mol의 디하이드록시 화합물의 총량)) 소듐 수소 카르보네이트 수용액을 교반기 및 종류 디바이스를 갖는 50 리터 반응기 내로 투입하였다.

반응기를 질소로 플라싱한 후, 반응 혼합물을 205 °C로 1 시간 동안 가열하고 760 Torr의 압력에서 교반하였다. 반응 혼합물을 완전히 용해시킨 후, 압력을 15 분 내에 150 Torr로 감소시키고 이어서 에스테르 교환 반응을 205 °C 및 150 Torr에서 20 분간 수행하였다. 추가로, 반응 혼합물을 37.5 °C/h의 가열 속도로 240 °C까지 가열하고 240 °C 및 150 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 이어서 압력을 10 분 내에 120 Torr로 감소시키고 240 °C 및 120 Torr의 반응 조건을 70 분간 유지하였다. 그 후, 압력을 10 분 내에 100 Torr로 감소시키고 240 °C 및 100 Torr의 반응 조건을 10 분간 유지하였다. 추가로, 압력을 40 분 내에 1 Torr 이하로 감소시키고 240 °C 및 1 Torr에서 10 분간 교반하면서 중합 반응을 수행하였다. 반응이 완료된 후, 반응기 내로 질소를 도입하여 압력을 증가시키고 생성된 폴리카르보네이트 수지를 펠렛화하고 반응기로부터 제거하였다. 얻어진 폴리카르보네이트 수지의 특성을 표 11에 요약하였다.

[표 11]

수지	단량체 (mol-%)		특성				
	T1TNTBHB PA	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [° C]	Mw	Mn
실시예 40	30	70	1.671	21.9	169	18336	11051
실시예 30*	100		1.702	20.6	197		

\* 실시예 30의 단일중합체에 대해 주어진 값들은 표 1에 이미 열거된 것들에 상응한다.

실시예 41: 실시예 15의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

재료로서, 14.7047 g(0.0335 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF), 11.1975 g(0.0144 mol)의 실시예 15에서 얻은 2,2'-{[3,3',5,5'-테트라(나프탈렌-2-일)[1,1'-비페닐]-4,4'-디일]비스(옥시)}디

(에탄-1-올)(T2NBHB4P), 10.5222 g(0.0491 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및  $0.4025 \times 10^{-4}$  g( $0.4771 \times 10^{-6}$  mol)의 소듐 수소 카르보네이트를 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 300 밀리리터 반응기 내로 투입하였다.

[0738] 반응기를 질소로 플라싱한 후, 내부 압력을 101.3 kPa로 설정하였다. 반응기를 200 °C로 가열된 오일조 내에 침지시켜 에스테르 교환 반응을 개시하였다. 반응 시작 5 분후 반응 혼합물의 교반을 시작하였다. 20 분 후, 10 분의 기간에 걸쳐 압력을 101.3 kPa에서 26.66 kPa로 감소시켰으며, 그 동안에 반응 혼합물을 210 °C로 가열하였다. 반응 시작 후 60 분 이내에 220 °에 도달하도록 반응 혼합물을 추가로 가열하였다. 반응 시작 후 80-분 지점으로부터 10 분의 기간에 걸쳐 압력을 20.00 kPa로 감소시키고, 이어서 반응 혼합물을 240 °C로 가열하는 한편 압력을 0.1 kPa 이하로 감소시켰다. 이어서 240 °C 및 0.1 kPa 이하의 조건을 30 분간 유지하였다. 그 후 질소 기체를 도입하여 압력을 101.3 kPa로 되돌려 목적하는 폴리카르보네이트 수지를 얻었다. 얻어진 수지의 특성을 표 12에 요약하였다.

[0739] 실시예 42: 실시예 14c의 단량체 및 BPEF로부터 제조된 공중합체

[0740] 재료로서, 16.0001 g(0.0365 mol)의 9,9-비스[4-(2-하이드록시에톡시)페닐]플루오렌(BPEF), 12.1815 g(0.0156 mol)의 실시예 14c에서 얻은 2,2'-[3,3',5,5'-테트라(나프탈렌-1-일)](1,1'-비페닐)-4,4'-디일]비스(옥시)디(에탄-1-올)(T1NBHB4P), 11.4484 g(0.0534 mol)의 디페닐카르보네이트(DPC) 및  $0.4379 \times 10^{-4}$  g( $0.5213 \times 10^{-6}$  mol)의 소듐 수소 카르보네이트를 교반기 및 증류 디바이스를 갖는 300 밀리리터 반응기 내로 투입하였다.

[0741] 반응기를 질소로 플라싱한 후, 내부 압력을 101.3 kPa로 설정하였다. 반응기를 200 °C로 가열된 오일조 내에 침지시켜 에스테르 교환 반응을 개시하였다. 반응 시작 5 분후 반응 혼합물의 교반을 시작하였다. 20 분 후, 10 분의 기간에 걸쳐 압력을 101.3 kPa에서 26.66 kPa로 감소시켰으며, 그 동안에 반응 혼합물을 210 °C로 가열하였다. 반응 시작 후 60 분 이내에 220 °C에 도달하도록 반응 혼합물을 추가로 가열하였다. 반응 시작 후 80-분 지점으로부터 10 분의 기간에 걸쳐 압력을 20.00 kPa로 감소시키고, 이어서 반응 혼합물을 240 °C로 가열하는 한편 압력을 0.1 kPa 이하로 감소시켰다. 이어서 240 °C 및 0.1 kPa 이하의 조건을 30 분간 유지하였다. 그 후 질소 기체를 도입하여 압력을 101.3 kPa로 되돌려 목적하는 폴리카르보네이트 수지를 얻었다. 얻어진 수지의 특성을 표 12에 요약하였다.

[0742] 비교예: BNE 및 BPEF로부터 제조된 코폴리카르보네이트

[0743] T2NBHB4P 대신에 2,2'-비스(2-하이드록시에톡시)-1,1'-비나프틸(BNE)를 공단량체로 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 41에 기재된 방법과 유사하게 본 비교예의 코폴리카르보네이트 수지를 제조하였다. 얻어진 수지의 특성을 표 12에 요약하였다.

[0744] [표 12]

수지	단량체 (mol-%)				특성				
	T2NBHB 4P	T1NBHB 4P	BNE	BPEF	$n_D$	$v$	$T_g$ [°C]	Mw	CLWC* [%]
실시예 41	30	0	0	70	1.67 41	18.7 6	15 7	3000 0	1.6
실시예 42	0	30	0	70	1.66 37	20.2 5	15 9	2300 0	1.2
비교예	0	0	30	70	1.64 70	22.0 5	13 7	3400 0	1.8

[0745] \* CLWC(저분자량 화합물의 함량) 값은 하기 기재된 바와 같이 결정되었다.

[0747] 표 12에 열거된 저분자량 화합물의 함량(CLWC)은 폴리스티렌 표준을 사용하여 보정된 GPC 데이터를 기준으로 하는 상기 구체화된 방법을 사용하여 계산하였다. 예를 들어, 실시예 41의 수지에 대해 표 12에 보고된 CLWC 값은 상기 기재된 식을 사용하여, 도 3에 나타낸 수지의 GPC 다이어그램으로부터 얻어진 개별적 피크 면적으로부터 계산되었다. 관련 피크 데이터는 하기 표 13에 요약하였다. 구체적으로, 1000 미만의 Mw 값을 갖는 화합물의 피크 면적의 합을 계산하고( $66697 + 23135 + 12863 = 102695$ ) 모든 피크의 총 면적( $6318321$ )에 대해 계산하였다. 이에 따라, 실시예 41의 수지에서 저분자량 화합물의 함량은  $1.6\%$  ( $102695 / 6318321 \times 100$ )로 계산되었다.

[0748] [표 13]

[0749] 실시예 41의 수지의 경우 GPC 다이어그램의 피크에 대한 데이터

피크 번호	피크 상단의 체류 시간 [min]	피크 상단에서의 Mw	피크 면적	피크 면적 비 [%]
1	22.810	29962	6105782	96.6361
2	27.007	2477	53104	0.8405
3	27.640	1664	56740	0.8980
4	28.598	903	66697	1.0556
5	29.553	485	23135	0.3662
6	30.430	271	12863	0.2036
총	-	-	6318321	100

[0750]

[0751] 복굴절 측정:

[0752] 도 1은 실시예 31, 33 및 34에서 제조된 수지 및 비스페놀 A로부터의 폴리카르보네이트 수지의 지연 또는 복굴절 측정 결과를 보여준다.

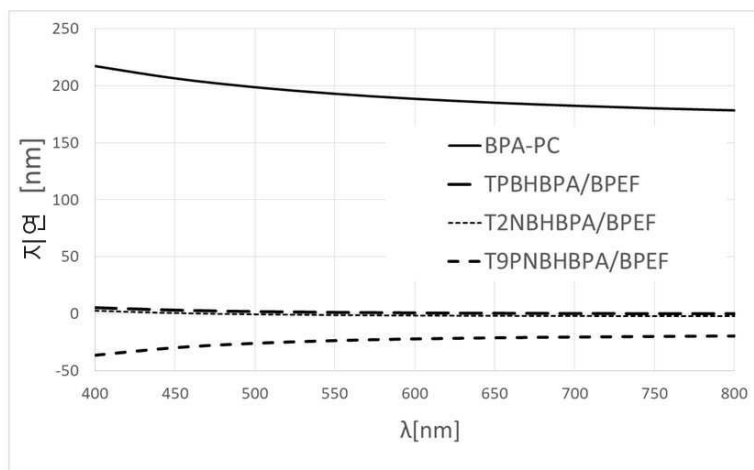
[0753] 도 2는 실시예 31, 33 및 34의 중합체의 지연 또는 복굴절에 대한 도 1의 일부 확대된 부분이다.

[0754] 도 1에서, "TPBHBPA/BPEF"는 실시예 31의 코폴리카르보네이트(15:85 몰비의 단량체 TPBHBPA 및 BPEF로부터 제조됨)를 나타내고, "T2NBHBPA/BPEF"는 실시예 33의 코폴리카르보네이트(30:70 몰비의 단량체 T2NBHBPA 및 BPEF로부터 제조됨)를 나타내며, "T9PNBHBPA/BPEF"는 실시예 34의 코폴리카르보네이트(30:70 몰비의 단량체 T9PNBHBPA 및 BPEF로부터 제조됨)를 나타내고, "BPA-PC"는 디올 단량체로서 비스페놀 A(BPA)로부터 제조된 호모 폴리카르보네이트(표 1의 마지막 엔트리와 비교)를 나타낸다.

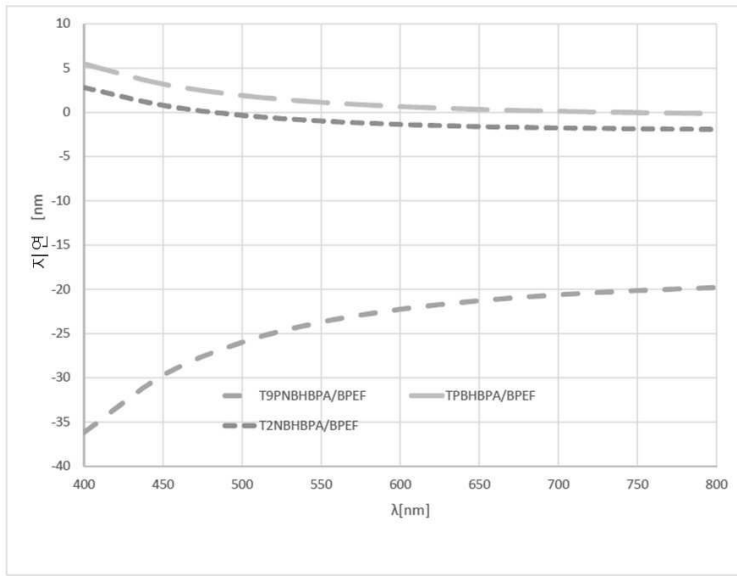
[0755] TPBHBPA, T2NBHBPA 및 T9PNBHBPA는 매우 낮은 절대값의 양의 또는 음의 복굴절을 갖는 폴리카르보네이트를 제공하는 것으로 도 1에 의해 확인된다. 이들 특성은 관용적인 재료에서 발견되지 않은 것이며, TPBHBPA, T2NBHBPA 및 T9PNBHBPA는 광학 재료로서 특히 유용하다.

## 도면

### 도면1



도면2



도면3

