



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년02월06일  
(11) 등록번호 10-1702487  
(24) 등록일자 2017년01월26일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) C07D 471/06 (2006.01)  
C07D 493/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2010-7029908  
(22) 출원일자(국제) 2009년06월05일  
심사청구일자 2014년06월03일
- (85) 번역문제출일자 2010년12월31일  
(65) 공개번호 10-2011-0015454  
(43) 공개일자 2011년02월15일  
(86) 국제출원번호 PCT/EP2009/056942  
(87) 국제공개번호 WO 2009/147237  
국제공개일자 2009년12월10일
- (30) 우선권주장  
102008027214.0 2008년06월06일 독일(DE)  
61/116,760 2008년11월21일 미국(US)
- (56) 선행기술조사문헌  
JP02255789 A\*  
US20030153005 A1\*  
WO2007116001 A2\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌
- (73) 특허권자  
바스프 에스이  
독일 루트비히스하펜, 칼-보쉬-스트라쎄 38 (우:  
67056)
- (72) 발명자  
페네만 마르틴  
독일 68199 만하임 한스 사흐스 링 181  
마테른 가브리엘  
독일 67105 쉬퍼슈타트 랑가세 37  
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인  
김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 16 항

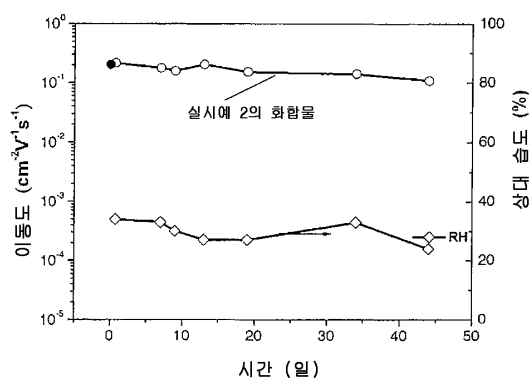
심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 염소화 나프탈렌테트라카르복실산 유도체, 이의 제조 방법 및 유기 전자 장치에서의 그 용도

(57) 요약

본 발명은 염소화 나프탈렌테트라카르복실산 유도체, 이의 제조 방법 및 전하 수송 물질, 엑시톤 수송 물질 또는 이미터 물질로서 그의 용도에 관한 것이다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

**웨른트너 프랑크**

독일 97204 회흐베르그 암 파트 35

**뢰저 코넬리아**

독일 68723 슈베츠쾰빙겐 카슈타니엔베크 49-51

**슈미트 뒤더거**

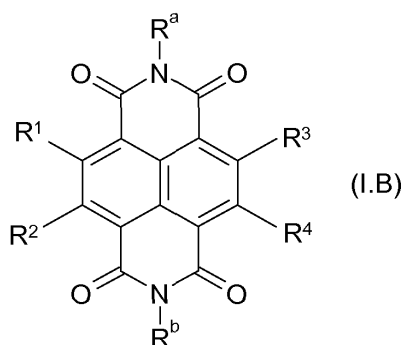
독일 33098 패더보른 암 바흐나인슈니트 58

## 명세서

## 청구범위

### 청구항 1

하기 화학식 I.B의 화합물을 갖는 유기 전계 효과 트랜지스트용 n형 반도체 또는 태양 전지용 전하 수송 물질 및/또는 엑시톤 수송 물질:



상기 식에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$  라디칼 중 2개 이상은 Cl이고, 나머지 라디칼은 수소이며,

$R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 1H, 1H-퍼플루오로- $C_2$ - $C_{30}$ -알킬 또는 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로- $C_3$ - $C_{30}$ -알킬이다.

### 청구항 2

제1항에 있어서,  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 2,2,2-트리플루오로에틸, 2,2,3,3,3-펜타플루오로프로필, 2,2,3,3,4,4,4-헵타플루오로부틸, 1H, 1H-퍼플루오로펜틸, 1H, 1H-퍼플루오로헥실, 1H, 1H-퍼플루오로헵틸, 1H, 1H-펜타데카플루오로옥틸, 1H, 1H-퍼플루오로노닐, 1H, 1H-퍼플루오로데실, 3,3,3-트리플루오로프로필, 3,3,4,4,4-펜타플루오로부틸, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로펜틸, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로헥실, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로헵틸, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로옥틸, 또는 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로노닐인 것인 유기 전계 효과 트랜지스트용 n형 반도체 또는 태양 전지용 전하 수송 물질 및/또는 엑시톤 수송 물질.

### 청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,  $R^1$  및  $R^3$ 은 각각 염소인 것인 유기 전계 효과 트랜지스트용 n형 반도체 또는 태양 전지용 전하 수송 물질 및/또는 엑시톤 수송 물질.

### 청구항 4

제1항 또는 제2항에 있어서,  $R^1$  및  $R^4$ 는 각각 염소인 것인 유기 전계 효과 트랜지스트용 n형 반도체 또는 태양 전지용 전하 수송 물질 및/또는 엑시톤 수송 물질.

### 청구항 5

제1항 또는 제2항에 있어서,  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 염소인 것인 유기 전계 효과 트랜지스트용 n형 반도체 또는 태양 전지용 전하 수송 물질 및/또는 엑시톤 수송 물질.

### 청구항 6

제1항 또는 제2항에 있어서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 염소인 것인 유기 전계 효과 트랜지스트용 n형 반도체 또는 태양 전지용 전하 수송 물질 및/또는 엑시톤 수송 물질.

# 청구항 7

제1항 또는 제2항에 있어서, 엑시톤 태양 전지용 엑시톤 수송 물질인, 유기 전계 효과 트랜지스트용 n형 반도체 또는 태양 전지용 전하 수송 물질 및/또는 엑시톤 수송 물질.

# 청구항 8

하나 이상의 게이트 구조, 소스 전극 및 드레인 전극을 가진 기관, 및 n형 반도체로서 제1항 또는 제2항에 정의된 화학식 I.B의 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계 효과 트랜지스터.

# 청구항 9

다수의 유기 전계 효과 트랜지스터를 포함하는 기관으로서, 상기 전계 효과 트랜지스터 중 적어도 일부는 n형 반도체로서 제1항 또는 제2항에 정의된 화학식 I.B의 하나 이상의 화합물을 포함하는 것인 기관.

# 청구항 10

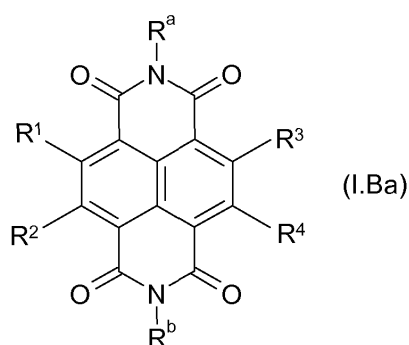
제9항에 정의된 하나 이상의 기관을 포함하는 반도체 유니트.

# 청구항 11

제1항 또는 제2항에 정의된 화학식 I.B의 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 태양 전지.

# 청구항 12

하기 화학식 I.Ba의 화합물:



상기 식에서,

$R^1$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^4$ 는 각각 수소이거나, 또는

$R^1$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 수소이며,

$R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 1H, 1H-퍼플루오로-C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>-알킬 또는 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로-C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>-알킬이다.

# 청구항 13

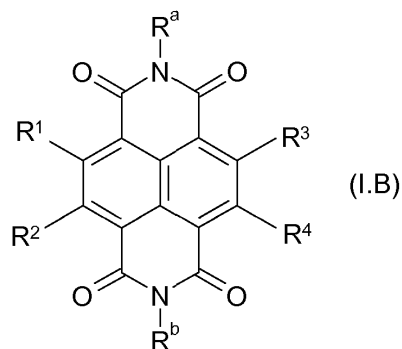
제12항에 있어서,  $R^1$  및  $R^4$ 가 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^3$ 이 각각 수소인 화합물.

# 청구항 14

제12항 또는 제13항에 있어서,  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 2,2,2-트리플루오로에틸, 2,2,3,3,3-펜타플루오로프로필, 2,2,3,3,4,4,4-헵타플루오로부틸, 1H, 1H-퍼플루오로헵틸, 1H, 1H-퍼플루오로헥실, 1H, 1H-퍼플루오로헵틸, 1H, 1H-펜타데카플루오로옥틸, 1H, 1H-퍼플루오로노닐, 1H, 1H-퍼플루오로데실, 3,3,3-트리플루오로프로필, 3,3,4,4,4-펜타플루오로부틸, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로헵틸, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로헥실, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로헵틸, 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로옥틸, 또는 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로노닐인 것인 화합물.

# 청구항 15

하기 화학식 I.B의 화합물의 제조 방법으로서,



(상기 식에서,

$R^1$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 수소이거나, 또는

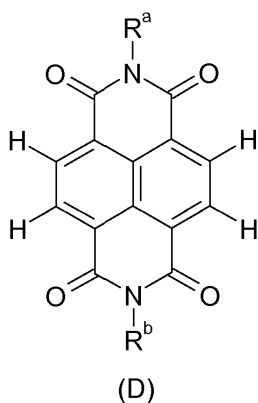
$R^1$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^4$ 는 각각 수소이거나, 또는

$R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^4$ 는 수소이거나, 또는

$R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이며,

$R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 비치환 또는 치환 알킬, 시클로알킬, 비시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 염소화 아릴 또는 염소화 헤테라릴이다)

a2) 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물을 i)  $R^a$ 와  $R^b$ 가 동일한 경우 화학식  $R^a-NH_2$ 의 아민, 또는 ii)  $R^a$ 와  $R^b$ 가 다른 경우 화학식  $R^a-NH_2$ 의 아민 및 화학식  $R^b-NH_2$ 의 아민과 반응시켜서 화학식 D의 화합물을 얻는 단계,



b2) 단계 a2)에서 얻은 화합물을 촉매로서 요오드의 존재 하에 염소화 반응시킴으로써 염소화시키는 단계를 포함하는 방법.

# 청구항 16

제15항에 있어서, 단계 b2)의 화학식 D의 화합물의 염소화는 클로로술폰산 중에서, 그리고 촉매량의 요오드의 존재 하에 염소화 반응시킴으로써 수행하고,

상기 촉매량은 염소의 양을 기준으로 1 내지 10 중량%인 것인 방법.

# 청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

청구항 21

삭제

청구항 22

삭제

청구항 23

삭제

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 염소화 나프탈렌테트라카르복실산 유도체, 이의 제조 방법 및 전자 수송 물질, 엑시톤 수송 물질 또는 이미터 물질로서 그의 용도에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 미래에는, 전자 산업의 많은 분야에서 통상적인 무기 반도체뿐만 아니라, 저분자량 물질 또는 고분자 물질을 주 재료로 하는 유기 반도체도 더욱 더 사용될 것으로 예상된다. 많은 경우에서, 이러한 유기 반도체는 통상적인 무기 반도체에 비하여 이점을 가지며, 예를 들면 기판 호환성이 더 좋고, 이것을 주재료로 하는 반도체 구성요소의 가공성이 더 좋다. 이들은 가요성 기판 상에서 가공할 수 있게 하며, 분자 모델링 방법에 의하여 특정 응용 분야에 대하여 계면 계도 에너지를 정밀하게 조절할 수 있게 한다. 그러한 구성요소의 상당히 감소된 비용은 유기 전자 장치 연구 분야에 부흥을 가져왔다. "유기 전자 장치"는 주로 신물질의 개발과 유기 반도체 층을 주재료로 하는 전자 장치 구성요소의 생산을 위한 제조 공정과 관련있다. 이들은 특히 유기 전계 효과 트랜지스터(OFET) 및 유기 발광 다이오드(OLED), 그리고 광전지를 포함한다. 예를 들면, 메모리 소자 및 집적 광전자 장치에서 매우 큰 개발 가능성은 유기 전계 효과 트랜지스터로 인한 것으로 생각된다. 유기 발광 다이오드(OLED)는 전기 전류에 의해 여기될 때 발광하는 물질의 성질을 이용한다. OLED는 음극선관과, 평면 디스플레이 유닛의 제조를 위한 액정 디스플레이의 대용물로서 특히 관심을 끌고 있다. 매우 조밀한 디자인과 본질적으로 더 낮은 전력 소비 덕분에, OLED를 포함하는 소자는 모바일 응용 분야, 예를 들면 휴대폰, 노트북 등의 분야에 특히 적절하다. 매우 큰 발전 가능성 또한, 광 유도 여기 상태에 대한 최대 수송 폭과 높은 이동도를 가지며, 따라서 소위 엑시톤 태양 전지에서 활성 물질로서 사용하기에 유리하게 적절한 물질은 발전 가능성이 매우 크다. 일반적으로, 그러한 물질을 기재로 하는 태양 전지는 매우 양호한 양자 수율을 달성할 수 있다.

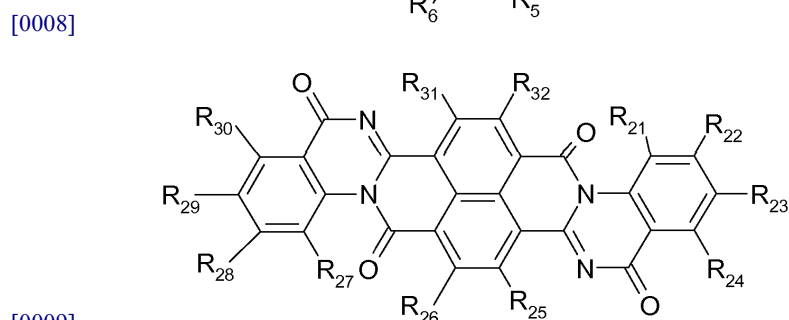
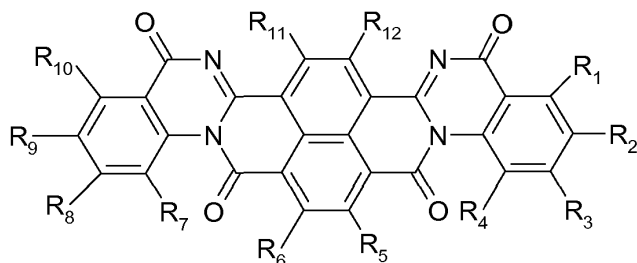
[0003] 문헌(H. Tachikawa and H. Kawabata describe, in Jpn. J. Appl. Phys., volume 44, No. 6A (2005), p. 3769 - 3773, hybrid density functional theory)은 할로겐화 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 비스무수물의 착체에 대해 연구하였다. 이 연구에서, 전자 상태에 대한 할로겐 치환의 효과는 완전히 컴퓨터 모델화되었다. 할로겐화 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 비스무수물의 실험 가능한 합성과 실제로 존재하는 화합물의 측정은 기재되지 않았다.

[0004] DE 36 20 332에는 2,3,6,7-테트라클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 이무수물 및 2,3,6,7-테트라클로로 나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 디이미드와 이들 화합물의 제조 방법이 기재되어 있다.

[0005] DE 37 03 131 A1에는 2,3,6,7-테트라플루오로나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 비스이미드, 이의 제조 방법 및 전기 전도성을 가진 라디칼 음이온 염의 제조를 위한 이의 용도가 기재되어 있다.

[0006] DE 101 48 172 A1에는 고리 상의 2번 및 6번 위치에 전자 주개 치환기를 가진 형광 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복시이미드 및, 고분자량 유기 및 무기 물질을 착색하기 위한 형광 염료로서, 형광 마킹을 위한 레이저 염료로서, 그리고 생분자를 위한 형광 표지로서 이의 용도가 기재되어 있다.

[0007] JP 11149984에는 하기 화합물 중 하나 이상을 주성분으로 하는 층을 함유하는 유기 전자발광 장치가 기재되어 있다:



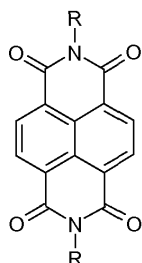
[0009]

[0010] 상기 식에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>12</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>32</sub>는 각각, 그 중에서도 특히 수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 환상 알콕시기 또는 치환 또는 비치환 아릴기를 나타낸다.

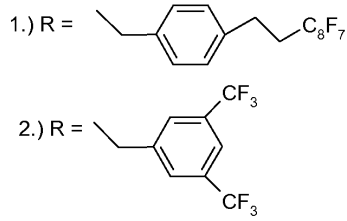
[0011] 문헌(B. A. Jones, A. Facchetti, M. R. Wasiliewski and T. J. Marks describe, in JACS ARTICLES)은 2007년 11월 14일에, 주위 조건 하의 n형 반도체의 안정성에 대한 구조 및 전자 기준을 웹 상에 게재하였다. 시안화 나프탈렌테트라카르복실산 유도체도 언급되어 있기는 하지만, 달성되는 이동도는 여전히 개선의 여지가 있다.

[0012] US 2005/0176970 A1에는 치환 페릴렌-3,4-디카르복시이미드 및 페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복시이미드)를 주성분으로 하는 n형 반도체가 기재되어 있다. 이 문헌에는 또한, 제조예에 의한 어떠한 증거 없이 그저 막연히 치환 나프탈렌-1,8-디카르복시이미드 및 나프탈렌-1,4,5,8-비스(디카르복시이미드)와 이의 n형 반도체로서의 용도가 기재되어 있다.

[0013] 문헌(K. C. See, C. Landis, A. Sarjeant and H. E. Katz in Chem. Mater. 2008, 20, 3609 - 3616)에는 하기 두 화합물을 주성분으로 하는 반도체가 기재되어 있다.



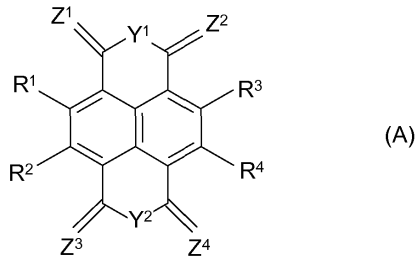
[0014]



[0015]

[0016]

WO 2007/074137에는 하기 화학식 A의 화합물 및 유기 전계 효과 트랜지스터에서 n형 반도체로서의 이의 용도가 기재되어 있다:



[0017]

[0018]

상기 식에서,

[0019]

$R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$  라디칼 중 하나 이상은 Br, F 및 CN 중에서 선택되는 치환기이고,

[0020]

$Y^1$ 은 O 또는  $NR^a$ (여기서,  $R^a$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이며,

[0021]

$Y^2$ 는 O 또는  $NR^b$ (여기서,  $R^b$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이고,

[0022]

$Z^1$  및  $Z^2$ 는 각각 독립적으로 O 또는  $NR^c$ (여기서,  $R^c$ 는 오르가닐 라디칼임)이며,

[0023]

$Z^3$  및  $Z^4$ 는 각각 독립적으로 O 또는  $NR^d$ (여기서,  $R^d$ 는 오르가닐 라디칼임)이고,

[0024]

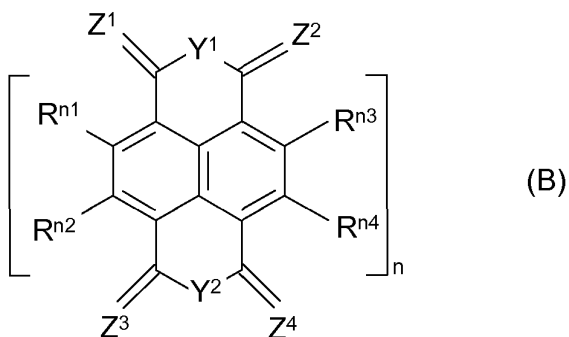
$Y^1$ 이  $NR^a$ 이고,  $Z^1$ 과  $Z^2$  라디칼 중 하나 이상이  $NR^c$ 인 경우,  $R^a$ 와  $R^c$  라디칼은 함께 측면 결합 사이에 2 내지 5 개의 원자를 가진 다리결합 기일 수도 있으며,

[0025]

$Y^2$ 가  $NR^b$ 이고,  $Z^3$ 과  $Z^4$  라디칼 중 하나 이상이  $NR^d$ 인 경우,  $R^b$ 와  $R^d$  라디칼은 함께 측면 결합 사이에 2 내지 5 개의 원자를 가진 다리결합 기일 수도 있다.

[0026]

WO 2007/093643에는 유기 전자 장치, 특히 유기 전계 효과 트랜지스터, 태양 전지 및 유기 발광 다이오드에서 반도체, 특히 n형 반도체로서 하기 화학식 B의 화합물의 용도가 기재되어 있다:



[0027]

[0028]

상기 식에서,

[0029]

n은 2, 3 또는 4이고,

[0030]

$R^{n1}$ ,  $R^{n2}$ ,  $R^{n3}$  및  $R^{n4}$  라디칼 중 하나 이상은 플루오르이며,



[0031] 필요에 따라, 하나 이상의 다른  $R^{n1}$ ,  $R^{n2}$ ,  $R^{n3}$  또는  $R^{n4}$  라디칼은 독립적으로 Cl 및 Br 중에서 선택되는 치환기이고, 나머지 라디칼은 각각 수소이며,

[0032]  $Y^1$ 은 O 또는  $NR^a$ (여기서,  $R^a$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이고,

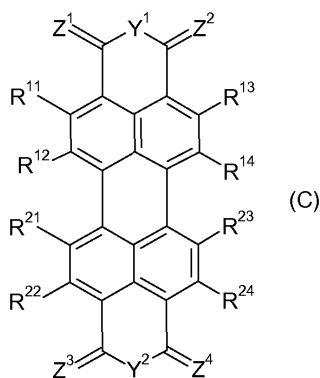
[0033]  $Y^2$ 는 O 또는  $NR^b$ (여기서,  $R^b$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이며,

[0034]  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$  및  $Z^4$ 는 각각 O이고,

[0035]  $Y^1$ 이  $NR^a$ 인 경우,  $Z^1$ 과  $Z^2$  라디칼 중 하나는 또한  $NR^c$ 이며, 여기서  $R^a$  및  $R^c$  라디칼은 함께 다리결합 기이고,

[0036]  $Y^2$ 가  $NR^b$ 인 경우,  $Z^3$ 과  $Z^4$  라디칼 중 하나는 또한  $NR^d$ 이며, 여기서  $R^b$  및  $R^d$  라디칼은 함께 다리결합 기이다.

[0037] 본 출원의 우선권 주장일 시점에서 공개되지 않은 유럽 특허 출원 07114556.9에는, 이미터 물질, 전하 수송 물질 또는 엑시톤 수송 물질로서 하기 화학식 C의 화합물의 용도가 기재되어 있다:



[0038]

[0039] 상기 식에서,

[0040]  $Y^1$ 은 O 또는  $NR^a$ (여기서,  $R^a$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이고,

[0041]  $Y^2$ 는 O 또는  $NR^b$ (여기서,  $R^b$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이며,

[0042]  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$  및  $Z^4$ 는 각각 O이고,

[0043]  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{21}$ ,  $R^{22}$ ,  $R^{23}$  및  $R^{24}$  라디칼은 각각 염소 및/또는 플루오르이며,

[0044] 여기서,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{21}$ ,  $R^{22}$ ,  $R^{23}$  및  $R^{24}$  라디칼 중 1 또는 2 개는 CN일 수도 있고/있거나,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{21}$ ,  $R^{22}$ ,  $R^{23}$  및  $R^{24}$  라디칼 중 1 개는 수소일 수도 있고,

[0045]  $Y^1$ 이  $NR^a$ 인 경우,  $Z^1$ 과  $Z^2$  라디칼 중 하나는 또한  $NR^c$ 이며, 여기서  $R^a$  및  $R^c$  라디칼은 함께 다리결합 X기이고,

[0046]  $Y^2$ 가  $NR^b$ 인 경우,  $Z^3$ 과  $Z^4$  라디칼 중 하나는 또한  $NR^d$ 이며, 여기서  $R^b$  및  $R^d$  라디칼은 함께 다리결합 X기이다.

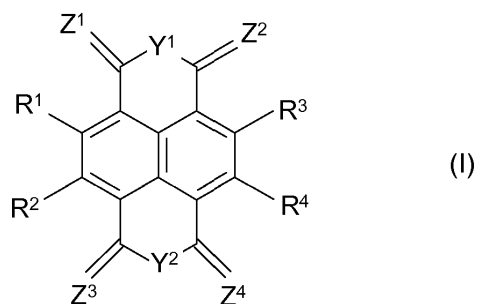
[0047] 또한, 염소화 화합물의 제조 방법도 기재되어 있는데, 여기서 염소화는 클로로술폰산 중에서 촉매량의 요오드의 존재 하에 염소와 반응시킴으로써 일어난다.

[0048] 유기 전자 장치, 특히 전계 효과 트랜지스터 및 유기 태양 전지에 유리하게 적절한 반도체 물질에 대한 필요성이 여전히 존재한다. 특히, 가시광 파장 범위, 특히 450 nm 이상의 파장 범위에서 실질적으로 투명한 반도체 물질이 요망되고 있다. 바람직하게는, 반도체 물질은 450 nm 이상의 파장 범위에서 흡광도가 10% 미만, 특히 흡광하지 않으며, 공기 안정하고, 고 전하 이동도를 가진다. 또한, 특히 액체 형태로 가공할 수 있는 반도체가 요망되는데, 즉 반도체 물질은 충분히 가용성이어서 직접 습식 가공할 수 있고, 저비용으로 유기 전자 장치를 제조할 수 있어야 한다. 바람직하게는, 예를 들면 반도체 물질은 진공 증착법에 의해 침착될 때 최소  $0.1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  또는 액체 형태로 침착될 때, 예를 들면 최소  $0.01 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 의 전하 이동도를 가져야 한다.

# 발명의 내용

[0049] 이제, 놀랍게도 염소화 나프탈렌테트라카르복실산 유도체가 전하 수송 물질, 엑시톤 수송 물질 또는 이미터 물질로서 특히 유리하게 적절하다는 것을 발견하였다. 이는 특히 바람직하게는, 예를 들어 적어도  $0.01 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 의 고 전하 이동도를 가진 n형 반도체로서 주목할 만하다. 또한, 이로부터 생성된 성분은 공기 안정하다.

[0050] 그러므로, 본 발명은 먼저 전하 수송 물질, 엑시톤 수송 물질 또는 이미터 물질로서 하기 화학식 I의 화합물의 용도를 제공한다:



[0051]

[0052] 상기 식에서,

[0053]  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$  라디칼 중 2 개 이상은 Cl이고, 나머지 라디칼은 수소이며,

[0054]  $Y^1$ 은 0 또는  $NR^a$ (여기서,  $R^a$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이고,

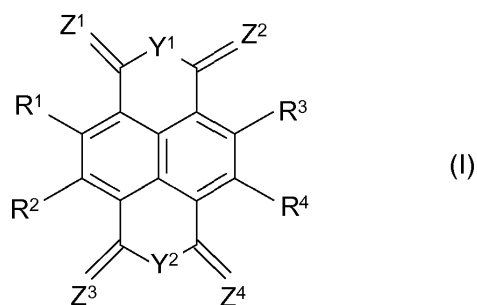
[0055]  $Y^2$ 은 0 또는  $NR^b$ (여기서,  $R^b$ 는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이며,

[0056]  $Z^1$  및  $Z^2$ 는 각각 0이고,

[0057]  $Z^3$  및  $Z^4$ 는 각각 0이다.

[0058] 이들은 특히 전하 수송 물질로서 주목할 만하다.

[0059] 본 발명은 또한 하기 화학식 I의 화합물을 제공한다:



[0060]

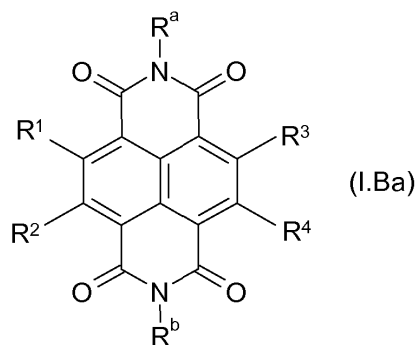
[0061] 상기 식에서,

[0062]  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^4$ 는 수소이거나, 또는  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이며,

[0063]  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$ 는 각각 0이고,  $Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 상기 정의된 바와 같고, 상세하게 후술될 것이며,

[0064] 2,3,6,7-테트라클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 이무수물 및 2,3,6,7-테트라클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 디이미드는 제외한다.

[0065] 본 발명은 또한 하기 화학식 I.Ba의 화합물을 제공한다:



[0066]

[0067] 상기 식에서,

[0068]  $R^1$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 수소이거나, 또는

[0069]  $R^1$  및  $R^3$ 는 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^4$ 는 각각 수소이고,

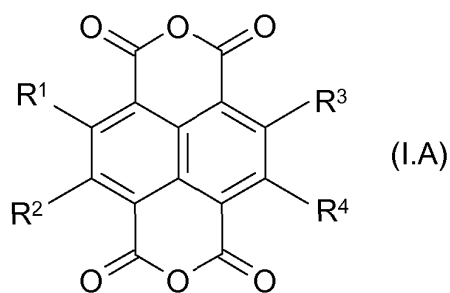
[0070]  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 1H, 1H-퍼플루오로-C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>-알킬 또는 1H, 1H, 2H, 2H-퍼플루오로-C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>-알킬이다.

[0071] 본 발명은 또한 화학식 I의 화합물의 제조 방법을 제공한다:

[0072] 본 발명은 또한 이미터 물질, 전하 수송 물질 또는 엑시톤 수송 물질로서의 화학식 I의 화합물의 용도에 관한 것이다.

[0073] 본 발명은 또한 유기 전계 효과 트랜지스터(OFET), 다수의 유기 전계 효과 트랜지스터를 포함하는 기관, 반도체 유닛, 유기 발광 다이오드(OLED) 및 유기 태양 전지를 제공하며, 이들은 하나 이상의 화학식 I의 화합물을 포함한다.

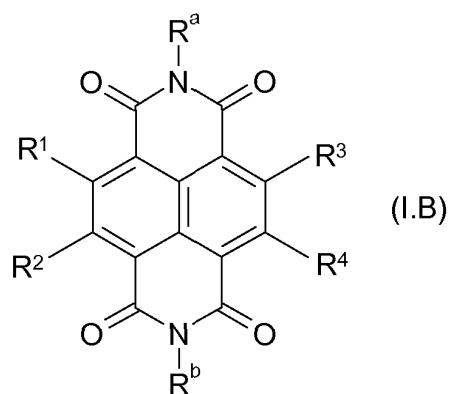
[0074] 바람직한 구체예에서, 화학식 I의 화합물은 하기 화학식 I.A의 화합물 중에서 선택된다:



[0075]

[0076] 상기 식에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 상기 정의된 바와 같고, 상세하게 후술된다.

[0077] 또 다른 바람직한 구체예에서, 화학식 I의 화합물은 하기 화학식 I.B의 화합물 중에서 선택된다:



[0078]

- [0079] 상기 식에서,
- [0080]  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$  라디칼 중 2 개 이상은 C1이고, 나머지 라디칼은 수소이며,
- [0081]  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 수소 또는 비치환 또는 치환 알킬, 알켄일, 알카디엔일, 일킨일, 시클로알킬, 비시클로알킬, 시클로알켄일, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴이다.
- [0082] 바람직하게는, 화학식 I.B의 화합물에서,  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 1H,1H-퍼플루오로-C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>-알킬, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로-C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>-알킬 또는 분지쇄 C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>-알킬이다.
- [0083] 바람직하게는, 화학식 I과 화학식 I.A 및 I.B의 화합물에서,  $R^1$  및  $R^3$  라디칼은 각각 염소이고,  $R^2$  및  $R^4$  라디칼은 각각 수소이다.
- [0084] 또한 바람직하게는, 화학식 I과 화학식 I.A 및 I.B의 화합물에서,  $R^1$  및  $R^4$  라디칼은 각각 염소이고,  $R^2$  및  $R^3$  라디칼은 각각 수소이다.
- [0085] 또한 바람직하게는, 화학식 I과 화학식 I.A 및 I.B의 화합물에서,  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$  라디칼은 각각 염소이고,  $R^4$  라디칼은 각각 수소이다.
- [0086] 또한 바람직하게는, 화학식 I과 화학식 I.A 및 I.B의 화합물에서,  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$  라디칼은 각각 염소이고,  $R^4$  라디칼은 각각 수소이다.
- [0087] 본 명세서에서 사용되는 표현 "비치환 또는 치환 알킬, 알켄일, 알카디엔일, 알킨일, 시클로알킬, 비시클로알킬, 시클로알켄일, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴"은 비치환 또는 치환 알킬, 비치환 또는 치환 알켄일, 비치환 또는 치환 알카디엔일, 비치환 또는 치환 알킨일, 비치환 또는 치환 시클로알킬, 비치환 또는 치환 비시클로알킬, 비치환 또는 치환 시클로알켄일, 비치환 또는 치환 헤테로시클로알킬, 비치환 또는 치환 아릴 또는 비치환 또는 치환 헤테로아릴을 의미한다.
- [0088] 본 발명에 관하여, 표현 "알킬"은 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 포함한다. 이것은 바람직하게는 직쇄 또는 분지쇄 C<sub>1</sub>-C<sub>70</sub>-알킬, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>-알킬, 보다 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>-알킬, 예컨대 C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>-알킬이다. 길기의 예는, 특히 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, n-노닐, n-데실, n-운데실, n-도데실, n-트리데실, n-테트라데실, n-헥사데실, n-옥타데실 및 n-에이코실이다. 바람직한 분지쇄 알킬기는 제비꼬리형 알킬기(하기 참조)이다.
- [0089] 또한, 표현 "알킬"은 탄소쇄에 -O-, -S-, -NR<sup>c</sup>-, -C(=O)-, -S(=O)- 및/또는 -S(=O)<sub>2</sub>- 중에서 선택되는 하나 이상의 비인접기가 개재될 수 있는 알킬 라디칼을 포함한다. R<sup>c</sup>는 바람직하게는 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테라릴이다. 또한, 표현 알킬은 치환 알킬 라디칼을 포함한다. 치환 알킬기는 알킬쇄의 길이에 따라서, 하나 이상(예컨대, 1, 2, 3, 4, 5 또는 5 보다 많은) 치환기를 가질 수 있다. 이들은 바람직하게는 각각 독립적으로 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테라릴, 할로젠, 히드록실, 메르캅토, COOH, 카르복실레이트, SO<sub>3</sub>H, 술포네이트, NE<sup>1</sup>E<sup>2</sup>, 니트로 및 시아노 중에서 선택되며, 여기서 E<sup>1</sup> 및 E<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테라릴이다. 할로젠 치환기는 바람직하게는 플루오르, 염소 또는 브롬이다.
- [0090] 카르복실레이트 및 술포네이트는 각각 카르복실산 작용 또는 술포산 작용, 특히 금속 카르복실레이트 또는 술포네이트, 카르복실산 에스테르 또는 술포산 에스테르 작용 또는 카르복시아미드 또는 술포아미드 작용의 유도체이다. 알킬기의 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 및 헤테라릴 치환기도 또한 치환되거나 치환되지 않을 수 있고; 적절한 치환기는 이들 기에 대해서 후술한다.
- [0091] 알킬에 대한 상기 언급은 알콕시, 알킬아미노, 알킬티오, 알킬술피닐, 알킬술포닐 등의 알킬 부분에도 적용된다.
- [0092] 아릴 치환 알킬 라디칼("아릴알킬")은 후술되는 바와 같은 하나 이상의 비치환 또는 치환 아릴기를 가진다. "아릴알킬" 중의 알킬기는 하나 이상의 추가 치환기를 갖고/갖거나, -O-, -S-, -NR<sup>c</sup>-, -CO- 및/또는 -SO<sub>2</sub>- 중에서

선택되는 하나 이상의 비인접기가 개재될 수 있다. R<sup>c</sup>는 상기 의미 중 하나를 가진다. 아릴알킬은 바람직하게는 페닐-C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-알킬, 보다 바람직하게는 페닐-C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬, 예를 들면 벤질, 1-페닐에틸, 2-페닐에틸, 1-펜프로프-1-일, 2-펜프로프-1-일, 3-펜프로프-1-일, 1-펜부트-1-일, 2-펜부트-1-일, 3-펜부트-1-일, 4-펜부트-1-일, 1-펜부트-2-일, 2-펜부트-2-일, 3-펜부트-2-일, 4-펜부트-2-일, 1-(펜메트)에트-1-일, 1-(펜메틸)-1-(메틸)에트-1-일 또는 (펜메틸)-1-(메틸)프로프-1-일; 바람직하게는 벤질 및 2-페네틸이다.

[0093] 본 발명에 관하여, 표현 "알켄일"은쇄 길이에 따라서 하나 이상의 비연속 탄소-탄소 이중 결합(예컨대, 1, 2, 3, 4 또는 4 초과)을 가질 수 있는 직쇄 및 분지쇄 알켄일기를 포함한다. 두 개의 이중 결합을 가진 알켄일은 이하에서 알카디엔일이라고도 한다. C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>-알켄일기가 바람직하고, C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>-알켄일기가 특히 바람직하다. 표현 "알켄일"은 또한, 하나 이상(예컨대, 1, 2, 3, 4, 5 또는 5 초과) 치환기를 가질 수 있는 치환 알켄일기를 포함한다. 적절한 치환기는, 예를 들면 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤타릴, 할로젠, 히드록실, 알콕시, 알킬티오, 메르캅토, COOH, 카르복실레이트, SO<sub>3</sub>H, 술포네이트, NE<sup>3</sup>E<sup>4</sup>, 니트로 및 시아노 중에서 선택되며, 여기서 E<sup>3</sup> 및 E<sup>4</sup>는 각각 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤타릴이다.

[0094] 그 다음, 알켄일은 예를 들면, 에텐일, 1-프로펜일, 2-프로펜일, 1-부텐일, 2-부텐일, 3-부텐일, 1-펜텐일, 2-펜텐일, 3-펜텐일, 4-펜텐일, 1-헥센일, 2-헥센일, 3-헥센일, 4-헥센일, 5-헥센일, 펜타-1,3-디엔-1-일, 헥사-1,4-디엔-1-일, 헥사-1,4-디엔-3-일, 헥사-1,4-디엔-6-일, 헥사-1,5-디엔-1-일, 헥사-1,5-디엔-3-일, 헥사-1,5-디엔-4-일, 헵타-1,4-디엔-1-일, 헵타-1,4-디엔-3-일, 헵타-1,4-디엔-6-일, 헵타-1,4-디엔-7-일, 헵타-1,5-디엔-1-일, 헵타-1,5-디엔-3-일, 헵타-1,5-디엔-4-일, 헵타-1,5-디엔-7-일, 헵타-1,6-디엔-1-일, 헵타-1,6-디엔-3-일, 헵타-1,6-디엔-4-일, 헵타-1,6-디엔-5-일, 헵타-1,6-디엔-2-일, 옥타-1,4-디엔-1-일, 옥타-1,4-디엔-2-일, 옥타-1,4-디엔-3-일, 옥타-1,4-디엔-6-일, 옥타-1,4-디엔-7-일, 옥타-1,5-디엔-1-일, 옥타-1,5-디엔-3-일, 옥타-1,5-디엔-4-일, 옥타-1,5-디엔-7-일, 옥타-1,6-디엔-1-일, 옥타-1,6-디엔-3-일, 옥타-1,6-디엔-4-일, 옥타-1,6-디엔-5-일, 옥타-1,6-디엔-2-일, 데카-1,4-디엔일, 데카-1,5-디엔일, 데카-1,6-디엔일, 데카-1,7-디엔일, 데카-1,8-디엔일, 데카-2,5-디엔일, 데카-2,6-디엔일, 데카-2,7-디엔일, 데카-2,8-디엔일 등이다. 알켄일에 관한 언급은 또한, 알켄일옥시, 알켄일티오 등의 알켄일기에도 적용된다.

[0095] 표현 "알킨일"은 하나 이상의 비인접 삼중 결합을 가진 비치환 또는 치환 알킨일기, 예를 들면 에틴일, 1-프로핀일, 2-프로핀일, 1-부틴일, 2-부틴일, 3-부틴일, 1-펜틴일, 2-펜틴일, 3-펜틴일, 4-펜틴일, 1-헥신일, 2-헥신일, 3-헥신일, 4-헥신일, 5-헥신일 등을 포함한다. 알킨일에 관한 언급은 또한, 알킨일옥시, 알킨일티오 등의 알킨일기에도 적용된다. 치환 알킨일은 바람직하게는 알켄일에 대해서 전술한 치환기 중 하나 이상(예컨대, 1, 2, 3, 4, 5 또는 5 초과)을 가진다.

[0096] 본 발명에 관하여, 표현 "시클로알킬"은 비치환 또는 치환 시클로알킬기, 바람직하게는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>-시클로알킬기, 예컨대 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸 또는 시클로옥틸, 특히 C<sub>5</sub>-C<sub>8</sub>-시클로알킬을 포함한다. 치환 시클로알킬기는 하나 이상(예컨대, 1, 2, 3, 4, 5 또는 5 초과)의 치환기를 가질 수 있다. 이들은 바람직하게는 각각 독립적으로 알킬, 알콕시, 알킬티오 및 알킬기에 대해 전술한 치환기 중에서 선택된다. 치환의 경우, 시클로알킬기는 바람직하게는 하나 이상, 예를 들면 1, 2, 3, 4 또는 5 개의 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬기를 가진다.

[0097] 바람직한 시클로알킬기의 예는 시클로펜틸, 2- 및 3-메틸시클로펜틸, 2- 및 3-에틸시클로펜틸, 시클로헥실, 2-, 3- 및 4-메틸시클로헥실, 2-, 3- 및 4-에틸시클로헥실, 2-, 3- 및 4-프로필시클로헥실, 2-, 3- 및 4-이소프로필시클로헥실, 2-, 3- 및 4-부틸시클로헥실, 2-, 3- 및 4-sec-부틸시클로헥실, 2-, 3- 및 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-메틸시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-에틸시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-프로필시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-이소프로필시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-부틸시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-sec-부틸시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-tert-부틸시클로헵틸, 시클로옥틸, 2-, 3-, 4- 및 5-메틸시클로옥틸, 2-, 3-, 4- 및 5-에틸시클로옥틸, 2-, 3-, 4- 및 5-프로필시클로옥틸이다.

[0098] 표현 시클로알켄일은 3 내지 8, 바람직하게는 5 내지 6 개의 탄소환 구성원을 갖는 비치환 및 치환 모노불포화 탄화수소기, 예컨대 시클로펜텐-1-일, 시클로펜텐-3-일, 시클로헥센-1-일, 시클로헥센-3-일, 시클로헥센-4-일 등을 포함한다. 적절한 치환기는 시클로알킬에 대해 전술한 것들이다.

[0099] 표현 비시클로알킬은 바람직하게는 5 내지 10 개의 탄소 원자를 가진 이환 탄화수소 라디칼, 예컨대 비시클로

[2.2.1]헵트-1-일, 비시클로[2.2.1]헵트-2-일, 비시클로[2.2.1]헵트-7-일, 비시클로[2.2.2]옥트-1-일, 비시클로[2.2.2]옥트-2-일, 비시클로[3.3.0]옥틸, 비시클로[4.4.0]데실 등을 포함한다. 표현 "비시클로알킬"은 비치환 또는 치환 비시클로알킬기를 포함한다. 치환 비시클로알킬기는 하나 이상(예컨대, 1, 2, 3 또는 3 초과)의 치환기를 가질 수 있다. 이들은 바람직하게는 각각 독립적으로 알킬, 알콕시, 알킬티오 및 알킬기에 대해 전술한 치환기 중에서 선택된다.

[0100] 본 발명에 관하여, 표현 "아릴"은 치환되거나 치환되지 않을 수 있는 단환 또는 다환 방향족 탄화수소 라디칼을 포함한다. 아릴은 바람직하게는 비치환 또는 치환 페닐, 나프틸, 인텐일, 플루오렌일, 안트라센일, 페난트렌일, 나프타센일, 크리센일, 피렌일 등, 보다 바람직하게는 페닐 또는 나프틸이다. 치환 아릴기는 고리계의 수 및 크기에 따라서, 하나 이상(예컨대, 1, 2, 3, 4, 5 또는 5 초과)의 치환기를 가질 수 있다. 이들은 바람직하게는 각각 독립적으로 알킬, 알콕시, 알킬티오, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤타릴, 할로젠, 히드록실, 메르캅토, COOH, 카르복실레이트, SO<sub>3</sub>H, 술포네이트, NE<sup>5</sup>E<sup>6</sup>, 니트로 및 시아노 중에서 선택되며, 여기서 E<sup>5</sup> 및 E<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤타릴이다. 할로젠 치환기는 바람직하게는 플루오르, 염소 또는 브롬이다. 아릴은 치환의 경우, 일반적으로 1, 2, 3, 4, 또는 5, 바람직하게는 1, 2, 또는 3 개의 치환기를 가질 수 있는 페닐이 보다 바람직하다.

[0101] 하나 이상의 라디칼을 가진 아릴은, 예를 들면 2-, 3- 및 4-메틸페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디메틸페닐, 2,4,6-트리메틸페닐, 2-, 3- 및 4-에틸페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디에틸페닐, 2,4,6-트리에틸페닐, 2-, 3- 및 4-프로필페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디프로필페닐, 2,4,6-트리프로필페닐, 2-, 3- 및 4-이소프로필페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디이소프로필페닐, 2,4,6-트리아이소프로필페닐, 2-, 3- 및 4-부틸페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디부틸페닐, 2,4,6-트리부틸페닐, 2-, 3- 및 4-이소부틸페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디이소부틸페닐, 2,4,6-트리아이소부틸페닐, 2-, 3- 및 4-sec-부틸페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디-sec-부틸페닐, 2,4,6-트리-sec-부틸페닐, 2-, 3- 및 4-tert-부틸페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디-tert-부틸페닐 및 2,4,6-트리-tert-부틸페닐; 2-, 3- 및 4-메톡시페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디메톡시페닐, 2,4,6-트리메톡시페닐, 2-, 3- 및 4-에톡시페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디에톡시페닐, 2,4,6-트리에톡시페닐, 2-, 3- 및 4-에톡시페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디에톡시페닐, 2,4,6-트리에톡시페닐, 2-, 3- 및 4-프로폭시페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디프로폭시페닐, 2-, 3- 및 4-이소프로폭시페닐, 2,4-, 2,5-, 3,5- 및 2,6-디이소프로폭시페닐 및 2-, 3- 및 4-부톡시페닐; 2-, 3- 및 4-시아노페닐이다.

[0102] 본 발명에 관하여, 표현 "헤테로시클로알킬"은 일반적으로 5 내지 8 개의 고리 원자, 바람직하게는 5 또는 6 개의 고리 원자를 가진 비방향족, 불포화 또는 완전 포화, 치환족 기를 포함하고, 상기 고리 탄소 원자 중 1, 2 또는 3 개는 산소, 질소, 황 및 -NR<sup>c</sup> 기로 대체되며, 하나 이상의, 예를 들면 1, 2, 3, 4, 5 또는 6 개의 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬기로 치환되거나 치환되지 않는다. R<sup>c</sup>는 상기 정의된 바와 같다. 그러한 헤테로치환족기의 예는 피롤리딘, 피페리딘, 2,2,6,6-테트라메틸피페리딘, 이미다졸리딘, 피라졸리딘, 옥사졸리딘, 모르폴리딘, 티아졸리딘, 이소티아졸리딘, 이소옥사졸리딘, 피페라진, 테트라히드로티오펜, 디히드로티오펜-2-일, 테트라히드로푸란, 디히드로푸란-2-일, 테트라히드로피란, 1,2-옥사졸린-5-일, 1,3-옥사졸린-2-일 및 디옥산일을 포함한다.

[0103] 본 발명에 관하여, 표현 "헤테로아릴"은 비치환 또는 치환 헤테로방향족, 단환 또는 다환기, 바람직하게는 피리딘, 퀴놀린, 아크리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 피롤, 이미다졸, 피라졸, 인돌, 푸린, 인다졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-트리아졸, 1,3,4-트리아졸 및 카르바졸을 포함하며, 여기서 이러한 헤테로방향족기는, 치환의 경우, 일반적으로 1, 2 또는 3 개의 치환기를 가질 수 있다. 치환기는 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알콕시, 히드록실, 카르복실, 할로젠 및 시아노 중에서 선택된다.

[0104] 산소 및 황 중에서 선택되는 추가의 이종 원자를 임의로 포함하는 질소 함유 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬 또는 헤테로아릴 라디칼은, 예를 들면 피롤, 피라졸, 이미다졸, 트리아졸, 피롤리딘, 피라졸린, 피라졸리딘, 이미다졸린, 이미다졸리딘, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 피페리딘, 피페라진, 옥사졸, 이소옥사졸, 티아졸, 이소티아졸, 인돌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 또는 퀴날딘을 포함한다.

[0105] 할로젠은 플루오르, 염소, 브롬 또는 요오드이다.



- [0106] 화학식 I 또는 I.B의 화합물에서,  $R^a$  및  $R^b$  라디칼은 동일 또는 상이하게 정의될 수 있다. 바람직한 구체예에서,  $R^a$  및  $R^b$  라디칼은 동일한 정의를 가진다.
- [0107] 제1 바람직한 구체예에서,  $R^a$  및  $R^b$  라디칼은 둘 다 수소이다.
- [0108] 수소 이외의  $R^a$  및  $R^b$  라디칼의 특정예는 다음과 같다:
- [0109] 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, n-노닐, n-데실, n-운데실, n-도데실, n-트리데실, n-테트라데실, n-헥사데실, n-옥타데실 및 n-에이코실, 2-메톡시에틸, 2-에톡시에틸, 2-프로폭시에틸, 2-부톡시에틸, 3-메톡시프로필, 3-에톡시프로필, 3-프로폭시프로필, 3-부톡시프로필, 4-메톡시부틸, 4-에톡시부틸, 4-프로폭시부틸, 3,6-디옥사헵틸, 3,6-디옥사옥틸, 4,8-디옥사노닐, 3,7-디옥사옥틸, 3,7-디옥사노닐, 4,7-디옥사옥틸, 4,7-디옥사노닐, 2- 및 4-부톡시부틸, 4,8-디옥사데실, 3,6,9-트리옥사데실, 3,6,9-트리옥사운데실, 3,6,9-트리옥사도데실, 3,6,9,12-테트라옥사트리데실 및 3,6,9,12-테트라옥사테트라데실;
- [0110] 2-메틸티오에틸, 2-에틸티오에틸, 2-프로필티오에틸, 2-부틸티오에틸, 3-메틸티오프로필, 3-에틸티오프로필, 3-프로필티오프로필, 3-부틸티오프로필, 4-메틸티오부틸, 4-에틸티오부틸, 4-프로필티오부틸, 3,6-디티아헵틸, 3,6-디티아옥틸, 4,8-디티아노닐, 3,7-디티아옥틸, 3,7-디티아노닐, 2- 및 4-부틸티오부틸, 4,8-디티아데실, 3,6,9-트리티아데실, 3,6,9-트리티아운데실, 3,6,9-트리티아도데실, 3,6,9,12-테트라티아트리데실 및 3,6,9,12-테트라티아테트라데실;
- [0111] 2-모노메틸- 및 2-모노에틸아미노에틸, 2-디메틸아미노에틸, 2- 및 3-디메틸아미노프로필, 3-모노이소프로필아미노프로필, 2- 및 4-모노프로필아미노부틸, 2- 및 4-디메틸아미노부틸, 6-메틸-3,6-디아자헵틸, 3,6-디메틸-3,6-디아자헵틸, 3,6-디아자옥틸, 3,6-디메틸-3,6-디아자옥틸, 9-메틸-3,6,9-트리아자데실, 3,6,9-트리메틸-3,6,9-트리아자데실, 3,6,9-트리아자운데실, 3,6,9-트리메틸-3,6,9-트리아자운데실, 12-메틸-3,6,9,12-테트라아자트리데실 및 3,6,9,12-테트라메틸-3,6,9,12-테트라아자트리데실;
- [0112] (1-에틸에틸리덴)아미노에틸렌, (1-에틸에틸리덴)아미노프로필렌, (1-에틸에틸리덴)아미노부틸렌, (1-에틸에틸리덴)아미노데실렌 및 (1-에틸에틸리덴)아미노도데실렌;
- [0113] 프로판-2-온-1-일, 부탄-3-온-1-일, 부탄-3-온-2-일 및 2-에틸펜탄-3-온-1-일;
- [0114] 2-메틸술피닐에틸, 2-에틸술피닐에틸, 2-프로필술피닐에틸, 2-이소프로필술피닐에틸, 2-부틸술피닐에틸, 2- 및 3-메틸술피닐프로필, 2- 및 3-에틸술피닐프로필, 2- 및 3-프로필술피닐프로필, 2- 및 3-부틸술피닐프로필, 2- 및 4-메틸술피닐부틸, 2- 및 4-에틸술피닐부틸, 2- 및 4-프로필술피닐부틸 및 4-부틸술피닐부틸;
- [0115] 2-메틸술폰닐에틸, 2-에틸술폰닐에틸, 2-프로필술폰닐에틸, 2-이소프로필술폰닐에틸, 2-부틸술폰닐에틸, 2- 및 3-메틸술폰닐프로필, 2- 및 3-에틸술폰닐프로필, 2- 및 3-프로필술폰닐프로필, 2- 및 3-부틸술폰닐프로필, 2- 및 4-메틸술폰닐부틸, 2- 및 4-에틸술폰닐부틸, 2- 및 4-프로필술폰닐부틸 및 4-부틸술폰닐부틸;
- [0116] 카르복시메틸, 2-카르복시에틸, 3-카르복시프로필, 4-카르복시부틸, 5-카르복시펜틸, 6-카르복시헥실, 8-카르복시옥틸, 10-카르복시데실, 12-카르복시도데실 및 14-카르복시테트라데실;
- [0117] 술폰메틸, 2-술폰에틸, 3-술폰프로필, 4-술폰부틸, 5-술폰펜틸, 6-술폰헥실, 8-술폰옥틸, 10-술폰데실, 12-술폰도데실 및 14-술폰테트라데실;
- [0118] 2-히드록시에틸, 2- 및 3-히드록시프로필, 3- 및 4-히드록시부틸 및 8-히드록시-4-옥사옥틸;
- [0119] 2-시아노에틸, 3-시아노프로필, 3- 및 4-시아노부틸;
- [0120] 2-클로로에틸, 2- 및 3-클로로프로필, 2-, 3- 및 4-클로로부틸, 2-브로모에틸, 2- 및 3-브로모프로필 및 2-, 3- 및 4-브로모부틸;
- [0121] 2-니트로에틸, 2- 및 3-니트로프로필 및 2-, 3- 및 4-니트로부틸;
- [0122] 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 펜톡시 및 헥소시;
- [0123] 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 부틸티오, 펜틸티오 및 헥실티오;
- [0124] 에틸일, 1- 및 2-프로필일, 1-, 2- 및 3-부틸일, 1-, 2-, 3- 및 4-펜틸일, 1-, 2-, 3-, 4- 및 5-헥실일, 1-,

2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8- 및 9-데신일, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10- 및 11-트리신일 및 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11-, 12-, 13-, 14-, 15-, 16- 및 17-옥타데신일;

[0125] 에텐일, 1- 및 2-프로펜일, 1-, 2- 및 3-부텐일, 1-, 2-, 3- 및 4-펜텐일, 1-, 2-, 3-, 4- 및 5-헥센일, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8- 및 9-데센일, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10- 및 11-트리센일 및 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11-, 12-, 13-, 14-, 15-, 16- 및 17-옥타데센일;

[0126] 메틸아미노, 에틸아미노, 프로필아미노, 부틸아미노, 펜틸아미노, 헥실아미노, 디시클로펜틸아미노, 디시클로헥실아미노, 디시클로헵틸아미노, 디페닐아미노 및 디벤질아미노;

[0127] 포르밀아미노, 아세틸아미노, 프로피온일아미노 및 벤조일아미노;

[0128] 카르바모일, 메틸아미노카르보닐, 에틸아미노카르보닐, 프로필아미노카르보닐, 부틸아미노카르보닐, 펜틸아미노카르보닐, 헥실아미노카르보닐, 헵틸아미노카르보닐, 옥틸아미노카르보닐, 노닐아미노카르보닐, 데실아미노카르보닐 및 페닐아미노카르보닐;

[0129] 아미노술포닐, N-도데실아미노술포닐, N,N-디페닐아미노술포닐 및 N-비스(4-클로로페닐)아미노술포닐;

[0130] 메톡시카르보닐, 에톡시카르보닐, 프로폭시카르보닐, 헥속시카르보닐, 도데실옥시카르보닐, 옥타데실옥시카르보닐, 페녹시카르보닐, (4-tert-부틸페녹시)카르보닐 및 (4-클로로페녹시)카르보닐;

[0131] 메톡시술포닐, 에톡시술포닐, 프로폭시술포닐, 부톡시술포닐, 헥속시술포닐, 도데실옥시술포닐, 옥타데실옥시술포닐, 페녹시술포닐, 1- 및 2-나프틸옥시술포닐, (4-tert-부틸페녹시)술포닐 및 (4-클로로페녹시)술포닐;

[0132] 디페닐포스피노, 디-(o-톨릴)포스피노 및 디페닐포스핀옥시도;

[0133] 페닐아조, 2-나프틸아조, 2-피리딜아조 및 2-피리미딜아조;

[0134] 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 2- 및 3-메틸시클로펜틸, 2- 및 3-에틸시클로펜틸, 시클로헥실, 2-, 3- 및 4-메틸시클로헥실, 2-, 3- 및 4-에틸시클로헥실, 3- 및 4-프로필시클로헥실, 3- 및 4-이소프로필시클로헥실, 3- 및 4-부틸시클로헥실, 3- 및 4-sec-부틸시클로헥실, 3- 및 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-메틸시클로헵틸, 2-, 3- 및 4-에틸시클로헵틸, 3- 및 4-프로필시클로헵틸, 3- 및 4-이소프로필시클로헵틸, 3- 및 4-부틸시클로헵틸, 3- 및 4-sec-부틸시클로헵틸, 3- 및 4-tert-부틸시클로헵틸, 시클로옥틸, 2-, 3-, 4- 및 5-메틸시클로옥틸, 2-, 3-, 4- 및 5-에틸시클로옥틸 및 3-, 4- 및 5-프로필시클로옥틸; 3- 및 4-히드록시시클로헥실, 3- 및 4-니트로시클로헥실 and 3- 및 4-클로로시클로헥실;

[0135] 1-, 2- 및 3-시클로펜텐일, 1-, 2-, 3- 및 4-시클로헥센일, 1-, 2- 및 3-시클로헵텐일 및 1-, 2-, 3- 및 4-시클로옥텐일;

[0136] 2-디옥산일, 1-모르폴린일, 1-티오모르폴린일, 2- 및 3-테트라히드로푸릴, 1-, 2- 및 3-피롤리딘일, 1-피페라질, 1-디케토피페라질 및 1-, 2-, 3- 및 4-피페리딜;

[0137] 페닐, 2-나프틸, 2- 및 3-피릴, 2-, 3- 및 4-피리딜, 2-, 4- 및 5-피리미딜, 3-, 4- 및 5-피라졸일, 2-, 4- 및 5-이미다졸일, 2-, 4- 및 5-티아졸일, 3-(1,2,4-트리아질), 2-(1,3,5-트리아질), 6-퀴날릴, 3-, 5-, 6- 및 8-퀴놀린일, 2-벤즈옥사졸일, 2-벤조티아졸일, 5-벤조티아디아졸일, 2- 및 5-벤즈이미다졸일 및 1- 및 5-이소퀴놀일;

[0138] 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 및 7-인돌일, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 및 7-이소인돌일, 5-(4-메틸이소인돌일), 5-(4-페닐이소인돌일), 1-, 2-, 4-, 6-, 7- 및 8-(1,2,3,4-테트라히드로이소퀴놀린일), 3-(5-페닐)-(1,2,3,4-테트라히드로이소퀴놀린일), 5-(3-도데실-1,2,3,4-테트라히드로이소퀴놀린일), 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 및 8-(1,2,3,4-테트라히드로퀴놀린일) 및 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 및 8-크로만일, 2-, 4- 및 7-퀴놀린일, 2-(4-페닐퀴놀린일) 및 2-(5-에틸퀴놀린일);

[0139] 2-, 3- 및 4-메틸페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디메틸페닐, 2,4,6-트리메틸페닐, 2-, 3- 및 4-에틸페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디에틸페닐, 2,4,6-트리에틸페닐, 2-, 3- 및 4-프로필페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디프로필페닐, 2,4,6-트리프로필페닐, 2-, 3- 및 4-이소프로필페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-다이소프로필페닐, 2,4,6-트리아이소프로필페닐, 2-, 3- 및 4-부틸페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디부틸페닐, 2,4,6-트리부틸페닐, 2-, 3- 및 4-이소부틸페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-다이소부틸페닐, 2,4,6-트리아이소부틸페닐, 2-, 3- 및 4-sec-부틸페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디-sec-부틸페닐 및 2,4,6-트리-sec-부틸페닐; 2-, 3- 및 4-메톡시페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디메톡시페닐,



2,4,6-트리메톡시페닐, 2-, 3- 및 4-에톡시페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디에톡시페닐, 2,4,6-트리에톡시페닐, 2-, 3- 및 4-프로폭시페닐, 2,4-, 3,5- 및 2,6-디프로폭시페닐, 2-, 3- 및 4-이소프로폭시페닐, 2,4- 및 2,6-다이소프로폭시페닐 및 2-, 3- 및 4-부톡시페닐; 2-, 3- 및 4-클로로페닐 및 2,4-, 3,5- 및 2,6-디클로로페닐; 2-, 3- 및 4-히드록시페닐 및 2,4-, 3,5- 및 2,6-디히드록시페닐; 2-, 3- 및 4-시아노페닐; 3- 및 4-카르복시페닐; 3- 및 4-카르복시아미도페닐, 3- 및 4-N-메틸카르복시아미도페닐 및 3- 및 4-N-에틸카르복시아미도페닐; 3- 및 4-아세틸아미노페닐, 3- 및 4-프로피온아미노페닐 및 3- 및 4-부티릴아미노페닐; 3- 및 4-N-페닐아미노페닐, 3- 및 4-N-(o-톨릴)아미노페닐, 3- 및 4-N-(m-톨릴)아미노페닐 및 3- 및 4-(p-톨릴)아미노페닐; 3- 및 4-(2-피리딜)아미노페닐, 3- 및 4-(3-피리딜)아미노페닐, 3- 및 4-(4-피리딜)아미노페닐, 3- 및 4-(2-피리미딜)아미노페닐 및 4-(4-피리미딜)아미노페닐;

[0140] 4-페닐아조페닐, 4-(1-나프틸아조)페닐, 4-(2-나프틸아조)페닐, 4-(4-나프틸아조)페닐, 4-(2-피리딜아조)페닐, 4-(3-피리딜아조)페닐, 4-(4-피리딜아조)페닐, 4-(2-피리미딜아조)페닐, 4-(4-피리미딜아조)페닐 및 4-(5-피리미딜아조)페닐;

[0141] 페녹시, 페닐티오, 2-나프톡시, 2-나프틸티오, 2-, 3- 및 4-피리딜옥시, 2-, 3- 및 4-피리딜티오, 2-, 4- 및 5-피리미딜옥시 및 2-, 4- 및 5-피리미딜티오.

[0142] 바람직한 R<sup>a</sup> 및 R<sup>b</sup> 라디칼은 다음과 같다:

[0143] 2,2,2-트리플루오로에틸, 2,2,3,3,3-펜타플루오로프로필, 2,2-디플루오로에틸, 2,2,3,3,4,4,4-헵타플루오로부틸, 1H,1H-퍼플루오로헨틸, 1H,1H-퍼플루오로헥실, 1H,1H-퍼플루오로헵틸, 1H,1H-펜타데카플루오로옥틸, 1H,1H-퍼플루오로노닐, 1H,1H-퍼플루오로데실, 3-브로모-3,3-디플루오로프로필, 3,3,4,4,4-펜타플루오로부틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로헨틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로헥실, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로헵틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로옥틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로노닐, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로데실, 3-(퍼플루오로옥틸)프로필, 4,4-디플루오로부틸, 4,4,4-트리플루오로부틸, 5,5,6,6,6-펜타플루오로헥실, 2,2-디플루오로프로필, 2,2,2-트리플루오로-1-페닐에틸아미노, 1-벤질-2,2,2-트리플루오로에틸, 2-브로모-2,2-디플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로-1-피리딘-2-일에틸, 2,2,2-트리플루오로-1-(4-메톡시페닐)에틸아미노, 2,2,2-트리플루오로-1-페닐에틸, 2,2-디플루오로-1-페닐에틸, 1-(4-브로모페닐)-2,2,2-트리플루오로에틸, 3-브로모-3,3-디플루오로프로필, 3,3,3-트리플루오로프로필아민, 3,3,3-트리플루오로-n-프로필, 3-(퍼플루오로옥틸)프로필, 펜타플루오로페닐, 2,3,5,6-테트라플루오로페닐, 4-시아노-(2,3,5,6)-테트라플루오로페닐, 4-카르복시-2,3,5,6-테트라플루오로페닐, 2,4-디플루오로페닐, 2,4,5-트리플루오로페닐, 2,4,6-트리플루오로페닐, 2,5-디플루오로페닐, 2-플루오로-5-니트로페닐, 2-플루오로-5-트리플루오로메틸페닐, 2-플루오로-5-메틸페닐, 2,6-디플루오로페닐, 4-카르복시아미도-2,3,5,6-테트라플루오로페닐, 2-브로모-4,6-디플루오로페닐, 4-브로모-2-플루오로페닐, 2,3-디플루오로페닐, 4-클로로-2-플루오로페닐, 2,3,4-트리플루오로페닐, 2-플루오로-4-요오도페닐, 4-브로모-2,3,5,6-테트라플루오로페닐, 2,3,6-트리플루오로페닐, 2-브로모-3,4,6-트리플루오로페닐, 2-브로모-4,5,6-트리플루오로페닐, 4-브로모-2,6-디플루오로페닐, 2,3,4,5-테트라플루오로페닐, 2,4-디플루오로-6-니트로페닐, 2-플루오로-4-니트로페닐, 2-클로로-6-플루오로페닐, 2-플루오로-4-메틸페닐, 3-클로로-2,4-디플루오로페닐, 2,4-디브로모-6-플루오로페닐, 3,5-디클로로-2,4-디플루오로페닐, 4-시아노-2-플루오로페닐, 2-클로로-4-플루오로페닐, 2-플루오로-3-트리플루오로메틸페닐, 2-트리플루오로메틸-6-플루오로페닐, 2,3,4,6-테트라플루오로페닐, 3-클로로-2-플루오로페닐, 5-클로로-2-플루오로페닐, 2-브로모-4-클로로-6-플루오로페닐, 2,3-디시아노-4,5,6-트리플루오로페닐, 2,4,5-트리플루오로-3-카르복시페닐, 2,3,4-트리플루오로-6-카르복시페닐, 2,3,5-트리플루오로페닐, 4-트리플루오로메틸-2,3,5,6-테트라플루오로페닐, 2-플루오로-5-카르복시페닐, 2-클로로-4,6-디플루오로페닐, 6-브로모-3-클로로-2,4-디플루오로페닐, 2,3,4-트리플루오로-6-니트로페닐, 2,5-디플루오로-4-시아노페닐, 2,5-디플루오로-4-트리플루오로메틸페닐, 2,3-디플루오로-6-니트로페닐, 4-트리플루오로메틸-2,3-디플루오로페닐, 2-브로모-4,6-디플루오로페닐, 4-브로모-2-플루오로페닐, 2-니트로테트라플루오로페닐, 2,2',3,3',4',5,5',6,6'-노나플루오로비페닐, 2-니트로-3,5,6-트리플루오로페닐, 2-브로모-6-플루오로페닐, 4-클로로-2-플루오로-6-요오도페닐, 2-플루오로-6-카르복시페닐, 2,4-디플루오로-3-트리플루오로페닐, 2-플루오로-4-트리플루오로페닐, 2-플루오로-4-카르복시페닐, 4-브로모-2,5-디플루오로페닐, 2,5-디브로모-3,4,6-트리플루오로페닐, 2-플루오로-5-메틸술폰페닐, 5-브로모-2-플루오로페닐, 2-플루오로-4-히드록시메틸페닐, 3-플루오로-4-브로모메틸페닐, 2-니트로-4-트리플루오로메틸페닐, 4-트리플루오로메틸페닐, 2-브로모-4-트리플루오로메틸페닐, 2-브로모-6-클로로-4-(트리플루오로메틸)페닐, 2-클로로-4-트리플루오로메틸페닐, 3-니트로-4-(트리플루오로메틸)페닐, 2,6-디클로로-4-(트리플루오로메틸)페닐, 4-트리플루오로페닐, 2,6-디브로모-4-(트리플루오로메틸)페닐,

4-트리플루오로메틸-2,3,5,6-테트라플루오로페닐, 3-플루오로-4-트리플루오로메틸페닐, 2,5-디플루오로-4-트리플루오로메틸페닐, 3,5-디플루오로-4-트리플루오로메틸페닐, 2,3-디플루오로-4-트리플루오로메틸페닐, 2,4-비스(트리플루오로메틸)페닐, 3-클로로-4-트리플루오로메틸페닐, 2-브로모-4,5-디(트리플루오로메틸)페닐, 5-클로로-2-니트로-4-(트리플루오로메틸)페닐, 2,4,6-트리스(트리플루오로메틸)페닐, 3,4-비스(트리플루오로메틸)페닐, 2-플루오로-3-트리플루오로메틸페닐, 2-요오도-4-트리플루오로메틸페닐, 2-니트로-4,5-비스(트리플루오로메틸)페닐, 2-메틸-4-(트리플루오로메틸)페닐, 3,5-디클로로-4-(트리플루오로메틸)페닐, 2,3,6-트리클로로-4-(트리플루오로메틸)페닐, 4-(트리플루오로메틸)벤질, 2-플루오로-4-(트리플루오로메틸)벤질, 3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)벤질, 3-클로로-4-(트리플루오로메틸)벤질, 4-플루오로페네틸, 3-(트리플루오로메틸)페네틸, 2-클로로-6-플루오로페네틸, 2,6-디클로로페네틸, 3-플루오로페네틸, 2-플루오로페네틸, (2-트리플루오로메틸)페네틸, 4-플루오로페네틸, 3-플루오로페네틸, 4-트리플루오로메틸페네틸, 2,3-디플루오로페네틸, 3,4-디플루오로페네틸, 2,4-디플루오로페네틸, 2,5-디플루오로페네틸, 3,5-디플루오로페네틸, 2,6-디플루오로페네틸, 4-(4-플루오로페닐)페네틸, 3,5-디(트리플루오로메틸)페네틸, 펜타플루오로페네틸, 2,4-디(트리플루오로메틸)페네틸, 2-니트로-4-(트리플루오로메틸)페네틸, (2-플루오로-3-트리플루오로메틸)페네틸, (2-플루오로-5-트리플루오로메틸)페네틸, (3-플루오로-5-트리플루오로메틸)페네틸, (4-플루오로-2-트리플루오로메틸)페네틸, (4-플루오로-3-트리플루오로메틸)페네틸, (2-플루오로-6-트리플루오로메틸)페네틸, (2,3,6-트리플루오로)페네틸, (2,4,5-트리플루오로)페네틸, (2,4,6-트리플루오로)페네틸, (2,3,4-트리플루오로)페네틸, (3,4,5-트리플루오로)페네틸, (2,3,5-트리플루오로)페네틸, (2-클로로-5-플루오로)페네틸, (3-플루오로-4-트리플루오로메틸)페네틸, (2-클로로-5-트리플루오로메틸)페네틸, (2-플루오로-3-클로로-5-트리플루오로메틸)페네틸, (2-플루오로-3-클로로)페네틸, (4-플루오로-3-클로로)페네틸, (2-플루오로-4-클로로)페네틸, (2,3-디플루오로-4-메틸)페네틸, 2,6-디플루오로-3-클로로페네틸, (2,6-디플루오로-3-메틸)페네틸, (2-트리플루오로메틸-5-클로로)페네틸, (6-클로로-2-플루오로-5-메틸)페네틸, (2,4-디클로로-5-플루오로)페네틸, 5-클로로-2-플루오로페네틸, (2,5-디플루오로-6-클로로)페네틸, (2,3,4,5-테트라플루오로)페네틸, (2-플루오로-4-트리플루오로메틸)페네틸, 2,3-(디플루오로-4-트리플루오로메틸)페네틸, (2,5-디(트리플루오로메틸))페네틸, 2-플루오로-3,5-디브로모페네틸, (3-플루오로-4-니트로)페네틸, (2-브로모-4-트리플루오로메틸)페네틸, 2-(브로모-5-플루오로)페네틸, (2,6-디플루오로-4-브로모)페네틸, (2,6-디플루오로-4-클로로)페네틸, (3-클로로-5-플루오로)페네틸, (2-브로모-5-트리플루오로메틸)페네틸 등.

[0144] 매우 바람직한 구체예에서,  $R^a$  및  $R^b$  라디칼은 각각 독립적으로 1H,1H-퍼플루오로- $C_2-C_{30}$ -알킬 또는 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로- $C_3-C_{30}$ -알킬, 바람직하게는 1H,1H-퍼플루오로- $C_2-C_{20}$ -알킬 또는 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로- $C_3-C_{20}$ -알킬, 특히 1H,1H-퍼플루오로- $C_2-C_{10}$ -알킬 또는 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로- $C_3-C_{10}$ -알킬, 예컨대 2,2,2-트리플루오로에틸, 2,2,3,3,3-펜타플루오로프로필, 2,2,3,3,4,4,4-헵타플루오로부틸, 1H,1H-퍼플루오로헥실, 1H,1H-퍼플루오로헵틸, 1H,1H-펜타데카플루오로옥틸, 1H,1H-퍼플루오로노닐, 1H,1H-퍼플루오로데실, 3,3,3-트리플루오로프로필, 3,3,4,4,4-헵타플루오로부틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로헥틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로헵틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로옥틸, 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로노닐이다.

[0145] 또 다른 바람직한 구체예에서,  $R^a$  및  $R^b$  라디칼은 하기 화학식 II의 기 중에서 선택된다:

[0146]  $\#-(A)_p-C(R^f)_x$  (II)

[0147] 상기 식에서,

[0148] #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타내고,

[0149] p는 0 또는 1이며,

[0150] x는 2 또는 3이고,

[0151] A는 존재하는 경우, -O- 및 -S- 중에서 선택되는 하나 이상의 비인접 기가 개재될 수 있는  $C_1-C_{10}$ -알킬렌기이며,

[0152] 여기서, x가 2인 경우,  $R^f$  라디칼을 가진 탄소 원자는 추가로 수소 원자를 더 갖고,

[0153]  $R^f$  라디칼은 각각 독립적으로 하나 이상의 비인접 산소 원자(들)가 개재될 수 있는  $C_1-C_{30}$ -알킬, 예컨대  $C_4$ -

C<sub>30</sub>-알킬이며, 여기서 R<sup>f</sup> 라디칼 중 하나 이상은 또한 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>-알킬옥시 또는 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>-알킬티오일 수 있다.

[0154] 화학식 II의 바람직한 라디칼은, 예를 들면 2-에틸헥스-1-일이다.

[0155] R<sup>a</sup> 및 R<sup>b</sup> 라디칼은 보다 바람직하게는 하기 화학식 II.1의 기(소위, 제비꼬리 라디칼) 중에서 선택된다. 바람직하게는, 화학식 II.1의 기에서, R<sup>f</sup> 라디칼은 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>-알킬, 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>-알킬, 보다 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>-알킬, 예컨대 C<sub>4</sub>-C<sub>8</sub>-알킬, 바람직하게는 C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>-알킬 중에서 선택된다. R<sup>a</sup> 및 R<sup>b</sup> 라디칼은 바람직하게는 둘 다 하기의 기이다:



[0156]

[0157] 상기 식에서,

[0158] #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타내고,

[0159] R<sup>f</sup> 라디칼은 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>-알킬, 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>-알킬, 보다 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>-알킬 중에서 선택된다. 한 가지 구체예에서, 각각의 R<sup>f</sup> 라디칼은 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>-알킬, 예컨대 C<sub>4</sub>-C<sub>8</sub>-알킬, 바람직하게는 C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>-알킬 중에서 선택된다. R<sup>f</sup> 라디칼은 산소 원자가 개재되지 않은 명백히 선형인 알킬 라디칼이다. 한 가지 구체예에서, 각각의 R<sup>f</sup>는 동일한 의미를 가진다. 또 다른 구체예에서, 각각의 R<sup>f</sup>는 상이한 의미를 가진다.

[0160] 화학식 II.1의 바람직한 라디칼은, 예를 들면 다음과 같다:

[0161] 1-에틸프로필, 1-메틸프로필, 1-프로필부틸, 1-에틸부틸, 1-메틸부틸, 1-부틸펜틸, 1-프로필펜틸, 1-에틸펜틸, 1-메틸펜틸, 1-펜틸헥실, 1-부틸헥실, 1-프로필헥실, 1-에틸헥실, 1-메틸헥실, 1-헥실헵틸, 1-펜틸헵틸, 1-부틸헵틸, 1-프로필헵틸, 1-에틸헵틸, 1-메틸헵틸, 1-헵틸옥틸, 1-헥실옥틸, 1-펜틸옥틸, 1-부틸옥틸, 1-프로필옥틸, 1-에틸옥틸, 1-메틸옥틸, 1-옥틸노닐, 1-헵틸노닐, 1-헥실노닐, 1-펜틸노닐, 1-부틸노닐, 1-프로필노닐, 1-에틸노닐, 1-메틸노닐, 1-노닐데실, 1-옥틸데실, 1-헵틸데실, 1-헥실데실, 1-펜틸데실, 1-부틸데실, 1-프로필데실, 1-에틸데실, 1-메틸데실, 1-데실운데실, 1-노닐운데실, 1-옥틸운데실, 1-헵틸운데실, 1-헥실운데실, 1-펜틸운데실, 1-부틸운데실, 1-프로필운데실, 1-에틸운데실, 1-메틸운데실, 1-운데실도데실, 1-데실도데실, 1-노닐도데실, 1-옥틸도데실, 1-헵틸도데실, 1-헥실도데실, 1-펜틸도데실, 1-부틸도데실, 1-프로필도데실, 1-에틸도데실, 1-메틸도데실, 1-트리실트리데실, 1-운데실트리데실, 1-데실트리데실, 1-노닐트리데실, 1-옥틸트리데실, 1-헵틸트리데실, 1-헥실트리데실, 1-펜틸트리데실, 1-부틸트리데실, 1-프로필트리데실, 1-에틸트리데실, 1-메틸트리데실, 1-트리데실테트라데실, 1-운데실테트라데실, 1-데실테트라데실, 1-노닐테트라데실, 1-옥틸테트라데실, 1-헵틸테트라데실, 1-헥실테트라데실, 1-펜틸테트라데실, 1-부틸테트라데실, 1-프로필테트라데실, 1-에틸테트라데실, 1-메틸테트라데실, 1-펜타데실헥사데실, 1-테트라데실헥사데실, 1-트리데실헥사데실, 1-트리실헥사데실, 1-운데실헥사데실, 1-데실헥사데실, 1-노닐헥사데실, 1-옥틸헥사데실, 1-헵틸헥사데실, 1-헥실헥사데실, 1-펜틸헥사데실, 1-부틸헥사데실, 1-프로필헥사데실, 1-에틸헥사데실, 1-메틸헥사데실, 1-헥사데실옥타데실, 1-펜타데실옥타데실, 1-테트라데실옥타데실, 1-트리데실옥타데실, 1-트리실옥타데실, 1-운데실옥타데실, 1-데실옥타데실, 1-노닐옥타데실, 1-옥틸옥타데실, 1-헵틸옥타데실, 1-헥실옥타데실, 1-펜틸옥타데실, 1-부틸옥타데실, 1-프로필옥타데실, 1-에틸옥타데실, 1-메틸옥타데실, 1-노나데실에이코산일, 1-옥타데실에이코산일, 1-헵타데실에이코산일, 1-헥사데실에이코산일, 1-펜타데실에이코산일, 1-테트라데실에이코산일, 1-트리데실에이코산일, 1-트리실에이코산일, 1-운데실에이코산일, 1-데실에이코산일, 1-노닐에이코산일, 1-옥틸에이코산일, 1-헵틸에이코산일, 1-헥실에이코산일, 1-펜틸에이코산일, 1-부틸에이코산일, 1-프로필에이코산일, 1-에틸에이코산일, 1-메틸에이코산일, 1-에이코산일도데산일, 1-노나데실도데산일, 1-옥타데실도데산일, 1-헵타데실도데산일, 1-헥사데실도데산일, 1-펜타데실도데산일, 1-테트라데실도데산일, 1-트리데실도데산일, 1-운데실도데산일, 1-데실도데산일, 1-노닐도데산일, 1-옥틸도데산일, 1-헵틸도데산일, 1-헥실도데산일, 1-펜틸도데산일, 1-부틸도데산일, 1-프로필도데산일, 1-에틸도데산일, 1-메틸도데산일, 1-트리코산일테트라코산일, 1-도데산일테트라코산일, 1-노나데실테트라코산일, 1-옥타데실테트라코산일, 1-헵타데실테트라코산일, 1-헥사데실테트라코산일, 1-펜타데실테트라코산일, 1-테트라데실테트라코산일, 1-테트라

데실테트라코산일, 1-트리데실테트라코산일, 1-트리실테트라코산일, 1-운데실테트라코산일, 1-데실테트라코산일, 1-노닐테트라코산일, 1-옥틸테트라코산일, 1-헵틸테트라코산일, 1-헥실테트라코산일, 1-펜틸테트라코산일, 1-부틸테트라코산일, 1-프로필테트라코산일, 1-에틸테트라코산일, 1-메틸테트라코산일, 1-헵타코산일헵타코산일, 1-헥사코산일헵타코산일, 1-펜타코산일헵타코산일, 1-테트라코산일헵타코산일, 1-트리코산일헵타코산일, 1-도데산일헵타코산일, 1-노나데실헵타코산일, 1-옥타데실헵타코산일, 1-헵타데실헵타코산일, 1-헥사데실헵타코산일, 1-헥사데실헵타코산일, 1-펜타데실헵타코산일, 1-테트라데실헵타코산일, 1-트리데실헵타코산일, 1-트리실헵타코산일, 1-운데실헵타코산일, 1-데실헵타코산일, 1-노닐헵타코산일, 1-옥틸헵타코산일, 1-헵틸헵타코산일, 1-헥실헵타코산일, 1-펜틸헵타코산일, 1-부틸헵타코산일, 1-프로필헵타코산일, 1-에틸헵타코산일, 1-메틸헵타코산일.

[0162] 보다 바람직한 라디칼은, 예를 들면 다음과 같다:

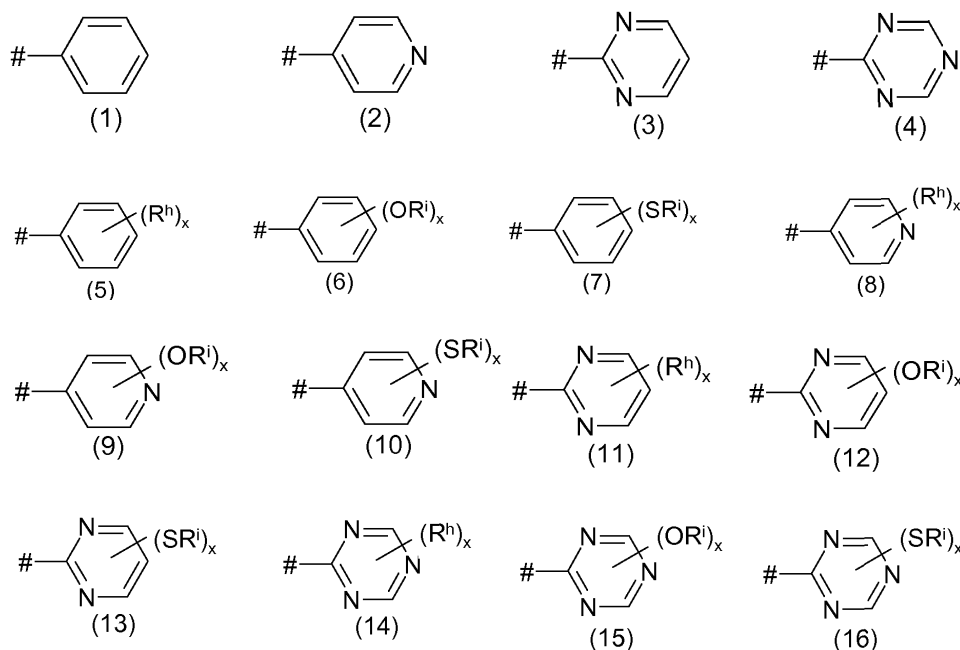
[0163] 1-메틸에틸, 1-메틸프로필, 1-메틸부틸, 1-메틸펜틸, 1-메틸헥실, 1-메틸헵틸, 1-메틸옥틸, 1-에틸프로필, 1-에틸부틸, 1-에틸펜틸, 1-에틸헥실, 1-에틸헵틸, 1-에틸옥틸, 1-프로필부틸, 1-프로필펜틸, 1-프로필헥실, 1-프로필헵틸, 1-프로필옥틸, 1-부틸펜틸, 1-부틸헥실, 1-부틸헵틸, 1-부틸옥틸, 1-펜틸헥실, 1-펜틸헵틸, 1-펜틸옥틸, 1-헥실헵틸, 1-헥실옥틸, 1-헵틸옥틸.

[0164] 각각의  $R^f$ 가 동일한 의미를 갖는 화학식 II.1의 기의 매우 바람직한 예는 1-부틸펜트-1-일, 1-펜틸헥스-1-일 및 1-헥실헵트-1-일이다. 각각의  $R^f$ 가 상이한 의미를 갖는 화학식 II.1의 바람직한 예는 2-에틸헥실, 1-메틸부틸, 1-메틸펜틸 또는 1-메틸헥실이다.

[0165] 또 다른 바람직한 구체예에서,  $R^a$ 는 화학식 III.A:  $-(C_nH_{2n})-R^{a1}$ 의 기 중에서 선택되고,  $R^b$ 는 화학식 III.B:  $-(C_nH_{2n})-R^{b1}$ 의 기 중에서 선택되며, 상기 식에서  $R^{a1}$  및  $R^{b1}$ 은 각각 독립적으로 비치환 또는 치환 시클로알킬, 비시클로알킬, 시클로알켄일, 헤테로시클로알킬, 아릴 및 헵타릴 중에서 선택되고, n은 1 내지 4의 정수이다.

[0166]  $R^a$ 는 바람직하게는  $-CH_2-R^{a1}$ ,  $-CH_2CH_2-R^{a1}$ ,  $-CH_2CH_2CH_2-R^{a1}$  및  $-CH_2CH_2CH_2CH_2-R^{a1}$  중에서 선택된다.  $R^b$ 는 바람직하게는  $-CH_2-R^{b1}$ ,  $-CH_2CH_2-R^{b1}$ ,  $-CH_2CH_2CH_2-R^{b1}$  및  $-CH_2CH_2CH_2CH_2-R^{b1}$  중에서 선택된다.

[0167]  $R^{a1}$  및  $R^{b1}$ 은 바람직하게는 하기 화학식 1 내지 16의 기 중에서 선택된다.



[0171]

[0172] 상기 식에서,

[0173] #는  $(C_nH_{2n})$  기에 대한 결합 부위를 나타내고,

[0174] 화학식 5, 8, 11 및 14 중의  $R^h$  라디칼은 각각 독립적으로  $C_1-C_3$ -알킬,  $C_1-C_3$ -플루오로알킬, 플루오르, 염소, 브롬,  $NE^1E^2$ , 니트로 및 시아노 중에서 선택되고,  $E^1$  및  $E^2$ 는 각각 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테릴 중에서 선택되며,

[0175] 화학식 6, 7, 9, 10, 12, 13, 15 및 16 중의  $R^i$  라디칼은 각각 독립적으로  $C_1-C_3$ -알킬 라디칼 중에서 선택되고,

[0176] x는 화학식 5, 6 및 7에서 1, 2, 3, 4 또는 5이며,

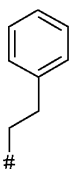
[0177] 화학식 8, 9 및 10에서 1, 2, 3 또는 4이고,

[0178] 화학식 11, 12 및 13에서 1, 2 또는 3이며,

[0179] 화학식 14, 15 및 16에서 1 또는 2이다.

[0180] 바람직하게는, 화학식  $(C_nH_{2n})-R^{a1}$  및  $(C_nH_{2n})-R^{b1}$  중의 n은 1 또는 2이다.

[0181] 바람직하게는  $R^a$  및  $R^b$ 는 둘 다 하기 화학식을 가진다:



[0182] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타낸다.

[0184] 또 다른 바람직한 구체예에서,  $R^a$  및  $R^b$ 는 1,1-디히드로퍼플루오로- $C_2-C_9$ -알킬기, 특히 1,1-디히드로퍼플루오로- $C_2-C_6$ -알킬기 중에서 선택된다.

[0185]  $R^a$  및  $R^b$ 는 하기 화학식 IV:

[0186]  $\#-CH_2-(\text{퍼플루오로-}C_1-C_9\text{-알킬})$  (IV)

[0187] 특히,  $\#CH_2-(\text{퍼플루오로-}C_1-C_5\text{-알킬})$  중에서 선택되며, 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타낸다.

[0188] 화학식 IV 중의 바람직한 퍼플루오로- $C_1-C_5$ -알킬 라디칼은 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, n-헵타플루오로프로필( $n-C_3F_7$ ), 헵타플루오로이소프로필( $CF(CF_3)_2$ ), n-노나플루오로부틸( $n-C_4F_9$ ) 및 또한  $C(CF_3)_3$ ,  $CF_2CF(CF_3)_2$ ,  $CF(CF_3)(C_2F_5)$ 이다. 화학식 IV의 바람직한 퍼플루오로- $C_6-C_9$ -알킬 라디칼은  $n-C_6F_{13}$ ,  $n-C_7F_{15}$ ,  $n-C_8F_{17}$  또는  $n-C_9F_{19}$ 를 포함한다.

[0189] 바람직한 구체예에 따르면,  $R^a$  및  $R^b$ 는 동일하다. 바람직하게는,  $R^a$  및  $R^b$ 는 둘 다  $-CH_2-(n-C_3F_7)$  또는  $CH_2-(n-C_4F_9)$ 이다.

[0190] 또 다른 바람직한 구체예에서,  $R^a$  및  $R^b$ 는 1,1,2,2-테트라히드로퍼플루오로- $C_3-C_{10}$ -알킬기 중에서 선택된다.

[0191]  $R^a$  및  $R^b$ 는 하기 화학식 V 중에서 선택된다:

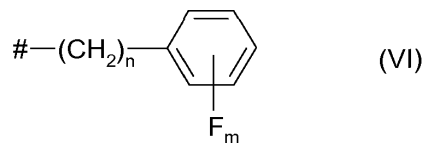
[0192]  $\#-CH_2-CH_2-(\text{퍼플루오로-}C_1-C_8\text{-알킬})$  (V)

[0193] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타낸다.

[0194] 화학식 V 중의 바람직한 퍼플루오로- $C_1-C_8$ -알킬 라디칼은 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, n-헵타플루오로프로필( $n-C_3F_7$ ), 헵타플루오로이소프로필( $CF(CF_3)_2$ ), n-운데카플루오로펜틸( $n-C_5F_{11}$ ),  $n-C_6F_{13}$ ,  $n-C_7F_{15}$ ,  $n-C_8F_{17}$ ,

$C(CF_3)_3$ ,  $CF_2CF(CF_3)_2$  또는  $CF(CF_3)(C_2F_5)$ 이다. 바람직한 구체예에 따르면,  $R^a$  및  $R^b$ 는 동일하다.

[0195] 또 다른 바람직한 구체예에서,  $R^a$  및  $R^b$  라디칼은 각각 하기 화학식 VI의 플루오로페닐알킬기 중에서 선택된다:



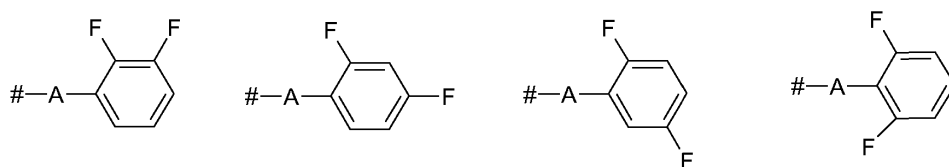
[0196] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타내고,  
 [0197] m은 1 내지 5이며,

[0198] n은 1 내지 10, 바람직하게는 2 내지 5이다.  
 [0199] 화학식 VI의 기에서, m은 바람직하게는 5이다.

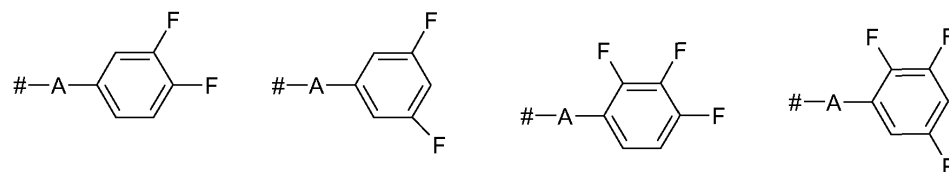
[0200] 화학식 VI의 화합물에서, n은 바람직하게는 2이다.

[0201] 화학식 VI의 화합물에서, n은 바람직하게는 2이다.

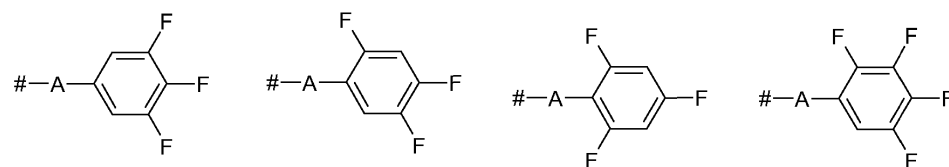
[0202] 화학식 VI의 플루오로페닐알킬기는 바람직하게는 하기 중에서 선택된다:



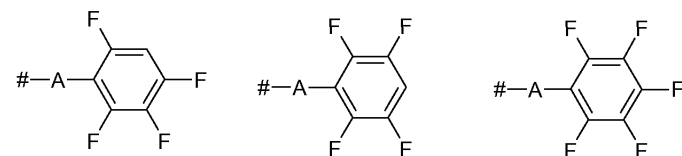
[0203]



[0204]



[0205]

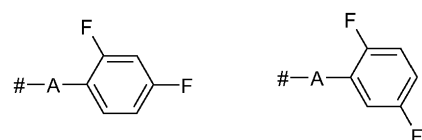


[0206]

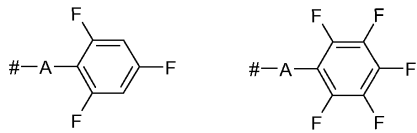
[0207] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타내고,

[0208] A는  $CH_2$ ,  $(CH_2)_2$  또는  $(CH_2)_3$ 이다.

[0209] 플루오로페닐알킬기는 보다 바람직하게는 하기 중에서 선택된다:



[0210]



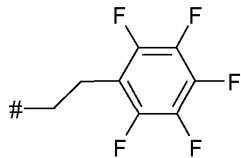
[0211]

[0212] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타내고,

[0213] A는  $\text{CH}_2$ ,  $(\text{CH}_2)_2$  또는  $(\text{CH}_2)_3$ 이다.

[0214] 상기 나타낸 화학식에서, A는 특히  $(\text{CH}_2)_2$ 이다.

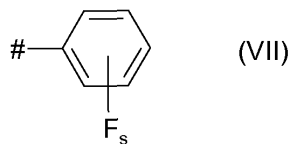
[0215] 바람직한 구체예에서,  $\text{R}^a$  및  $\text{R}^b$ 는 둘 다 하기 화학식을 가진다:



[0216]

[0217] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타낸다.

[0218] 또 다른 바람직한 구체예에서,  $\text{R}^a$  및  $\text{R}^b$  라디칼은 하기 화학식 VII의 플루오로페닐기 중에서 선택된다:

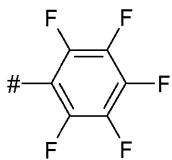


[0219]

[0220] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타내고,

[0221] s는 1 내지 5이다.

[0222] 바람직한 구체예에서,  $\text{R}^a$  및  $\text{R}^b$ 는 둘 다 하기 화학식을 가진다:

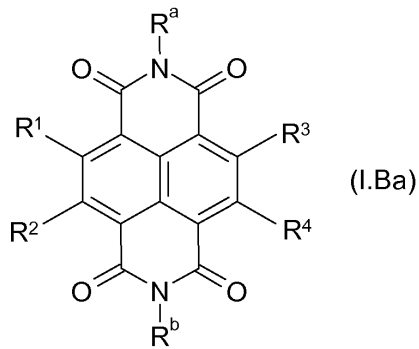


[0223]

[0224] 상기 식에서, #는 이미드 질소 원자에 대한 결합 부위를 나타낸다.

[0225] 본 발명의 또 다른 목적은 화학식 I의 신규한 삼염소화 및 사염소화 나프탈렌 화합물에 관한 것이며, 2,3,6,7-테트라클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 이무수물 및 2,3,6,7-테트라클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 디이미드는 제외한다. 특정예로는,  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$ 가 각각 O이고;  $Y^1$ 이  $\text{NR}^a$ 이며,  $\text{R}^a$ 가 1H,1H-퍼플루오로- $\text{C}_2$ - $\text{C}_{30}$ -알킬 또는 1H,1H,2H,2H-퍼플루오로- $\text{C}_3$ - $\text{C}_{30}$ -알킬이고,  $\text{R}^1$ ,  $\text{R}^2$  및  $\text{R}^3$ 이 각각 Cl이며,  $\text{R}^4$ 가 수소이거나, 또는  $\text{R}^1$ ,  $\text{R}^2$ ,  $\text{R}^3$  및  $\text{R}^4$ 가 각각 Cl인 화학식 I의 화합물이 있다.

[0226] 본 발명의 또 다른 목적은 하기 화학식 I.Ba의 이염소화 나프탈렌테트라카르복실산 디이미드 화합물이다:



[0227]

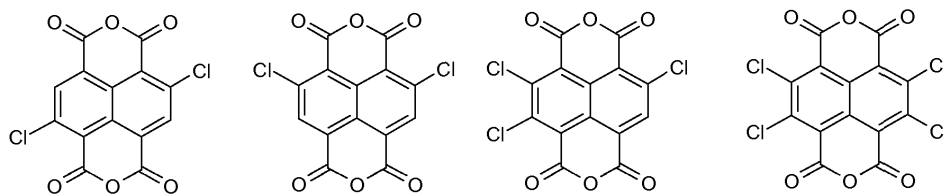
[0228] 상기 식에서,

[0229]  $R^a$  및  $R^b$ 는 독립적으로 1H, 1H-피플루오로-C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>-알킬 또는 1H, 1H, 2H, 2H-피플루오로-C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>-알킬이고,

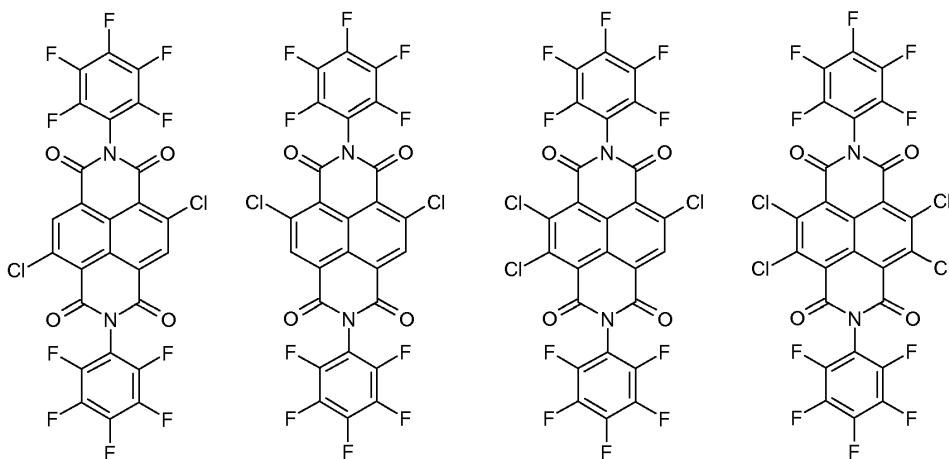
[0230]  $R^1$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^4$ 는 각각 수소이거나, 또는

[0231]  $R^1$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^4$ 는 각각 수소이다.

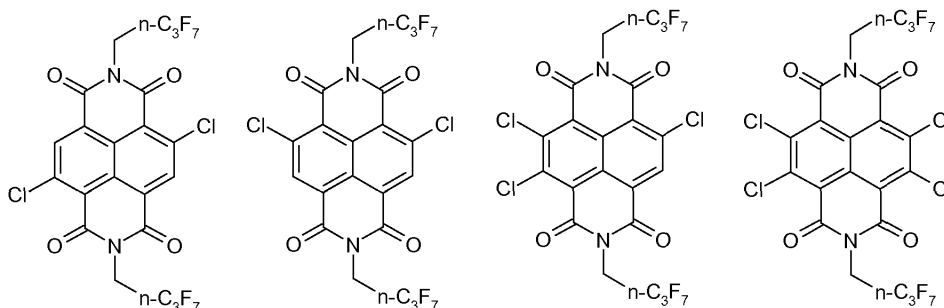
[0232] 화학식 I의 적절한 화합물의 특징에는 하기에 나타낸다.



[0233]

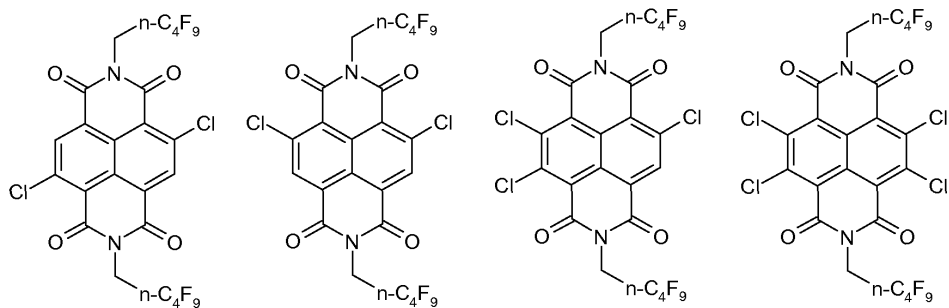


[0234]

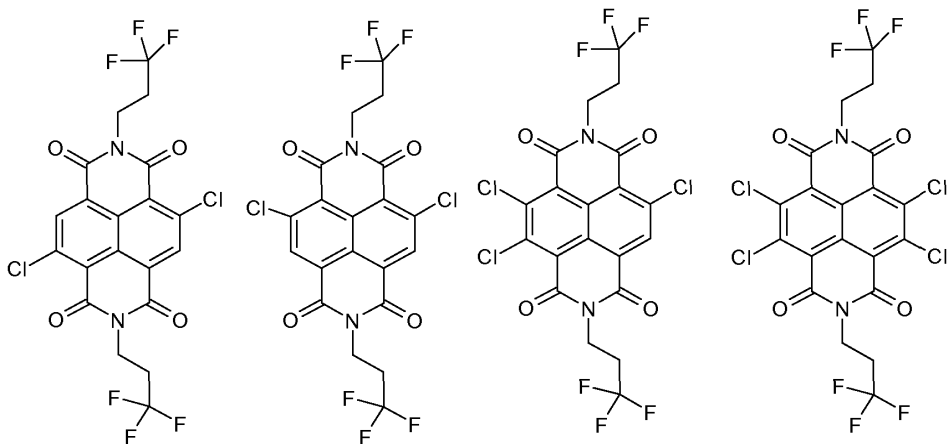


[0235]

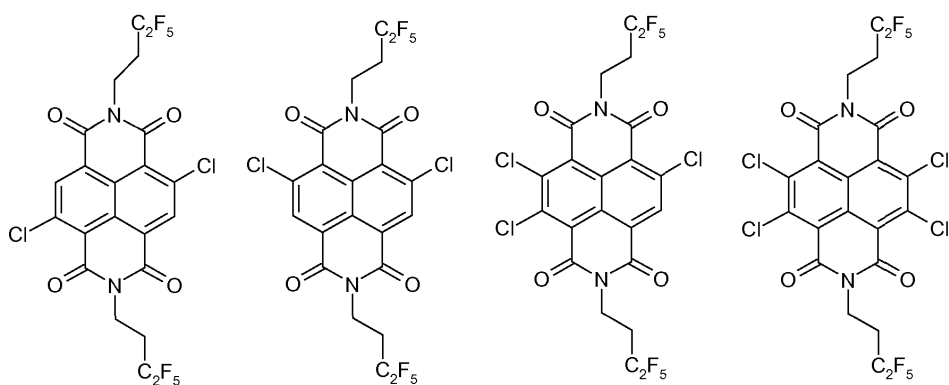




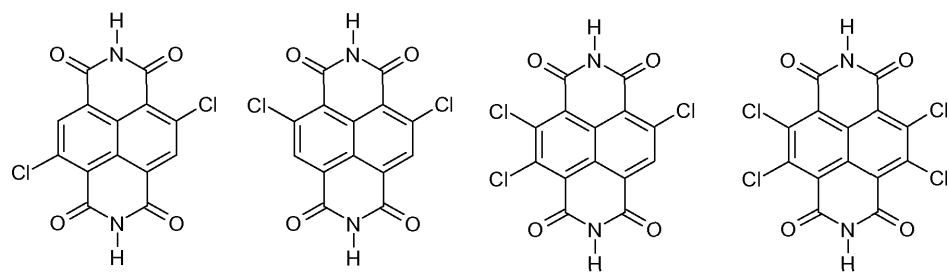
[0236]



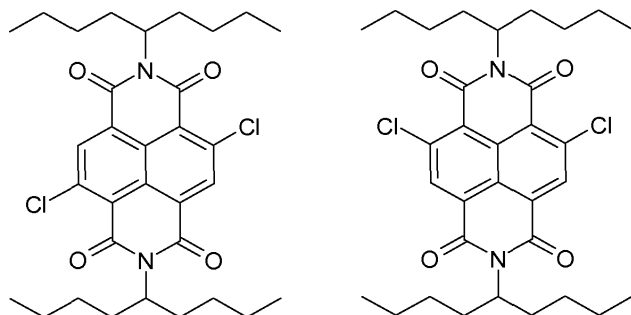
[0237]



[0238]

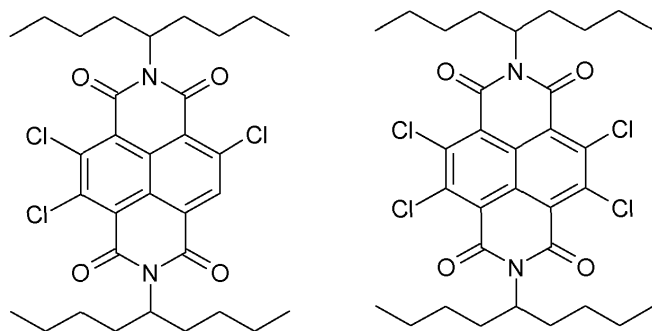


[0239]

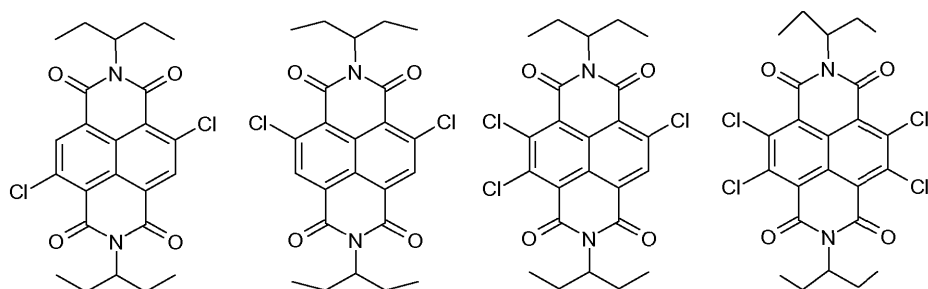


[0240]

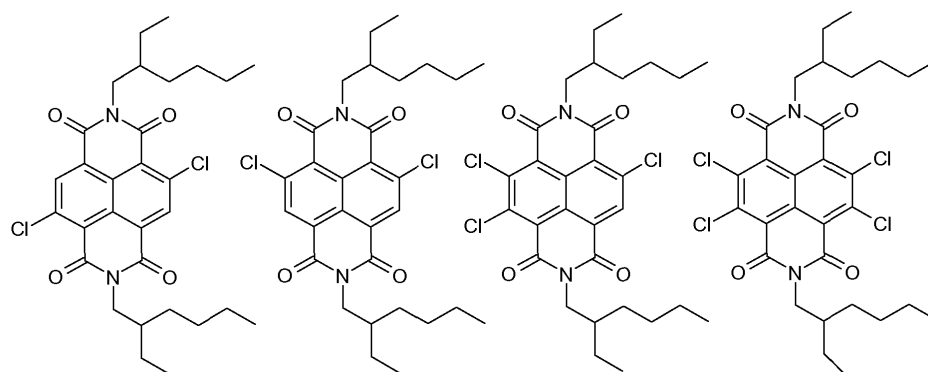
[0241]



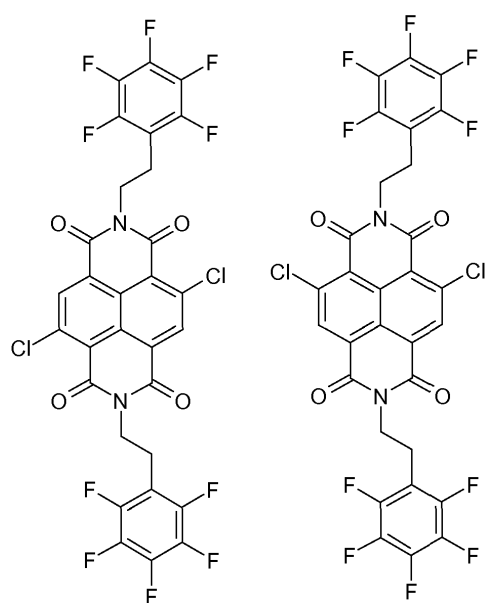
[0242]

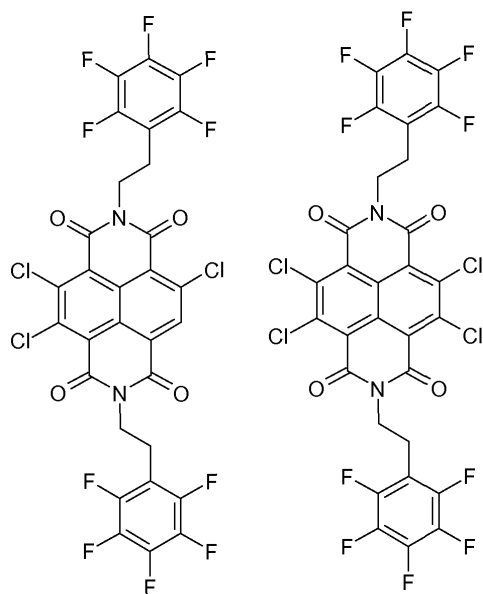


[0243]

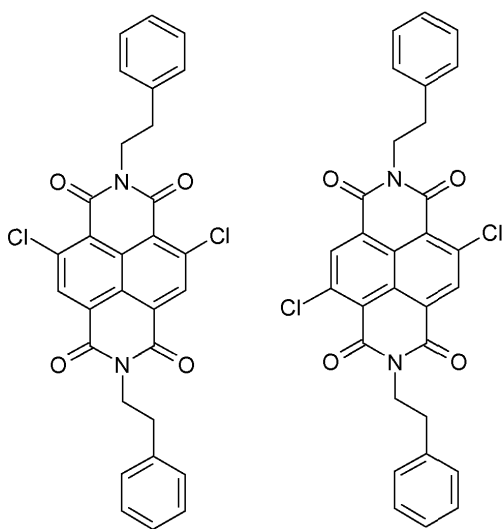


[0244]

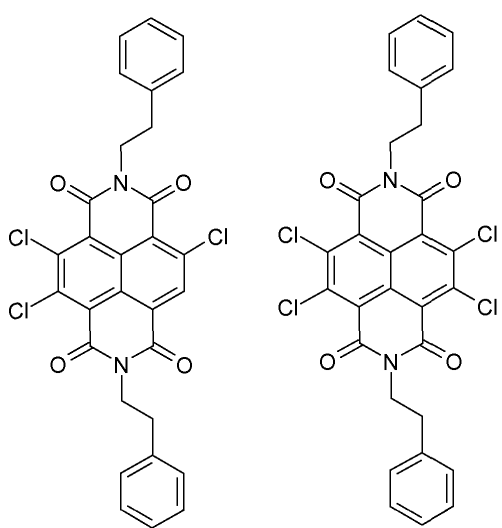




[0245]

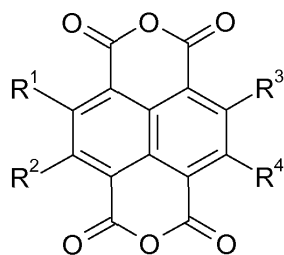


[0246]



[0247]

[0248] 본 발명은 또한 하기 화학식 I.A의 화합물의 제조 방법을 제공한다:



(I.A)

[0249]

상기 식에서,

[0250]

$R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^4$ 는 수소이거나, 또는  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이며,

[0251]

나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물을 클로로술폰산 중에서 그리고, 필요에 따라 촉매로서 요오드의 존재 하에 염소와 반응시킴으로써 염소화한다.

[0252]

나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물은 용매로서 클로로술폰산 중에서 염소와 반응시킴으로써 염소화될 수 있다.

[0253]

나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물과 염소화제의 반응은 바람직하게는 촉매로서 요오드의 존재 하에 행해진다.

[0254]

염소화 온도 및 기간은 화학식 I.A.의 염소화도를 제어하는 데 사용될 수 있다.

[0255]

염소화제와의 반응에 대한 반응 온도는 통상적으로 35 내지 150℃, 바람직하게는 35 내지 110℃, 보다 바람직하게는 60 내지 100℃, 예를 들면 40 내지 95℃ 범위 내이다.

[0256]

나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물과 염소화제의 반응은 표준압 또는 고압, 예를 들면 1 bar 내지 100 bar 범위의 염소화 압력 하에 일어날 수 있다. 통상적으로, 염소화 압력은 1 내지 10 bar 범위이다.

[0257]

화학식 I.A의 화합물은 통상적으로 침전에 의해 반응 혼합물로부터 분리된다. 침전은, 예를 들면 상기 화합물을 용해시키지 않거나, 또는 단지 소량으로만 용해시키지만, 비활성 용매와 혼화성인 액체를 첨가함으로써 일어난다. 바람직한 침전제는 물이다. 그 다음, 침전 생성물을 여과에 의해 분리할 수 있으며, 통상적으로 충분히 높은 순도를 가진다.

[0258]

2,3,6,7-테트라클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 이무수물은 또한 DE 36 20 332에 기재된 방법에 따라서 제조할 수 있다.

[0259]

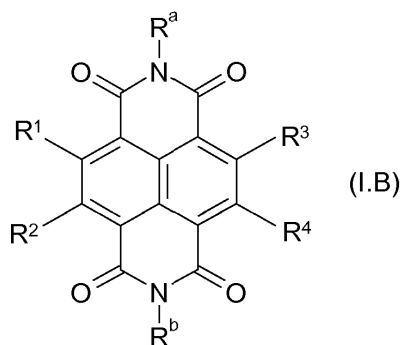
생성물을 반도체로서 사용하기 위하여, 화학식 I.A의 화합물을 더 정제하는 것이 유리할 수 있다. 예로는 컬럼 크로마토그래피 방법이 있으며, 이 경우, 예를 들면 할로겐화 탄화수소, 예컨대 염화메틸렌 또는 톨루엔/ 또는 석유 에테르/에틸 아세테이트 혼합물에 용해시킨 생성물을 실리카 겔 상에서 분리 또는 여과한다. 또한, 승화 또는 결정화에 의한 정제가 가능하다.

[0260]

필요에 따라, 정제 단계를 1회 또는 1회 이상 반복하고/하거나 상이한 정제 단계를 조합하여 매우 순수한 화합물 I.A를 얻는다.

[0261]

[0262] 본 발명은 또한 하기 화학식 I.B의 화합물의 제조 방법으로서,



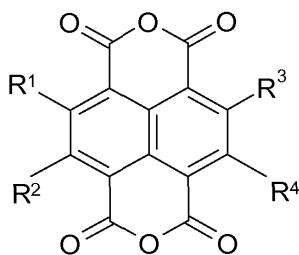
[0263]

[0264] (상기 식에서,

[0265]  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^4$ 는 수소이거나, 또는  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이며,

[0266]  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 수소 또는 비치환 또는 치환 알킬, 알켄일, 알카디엔일, 일킨일, 시클로알킬, 비시클로알킬, 시클로알켄일, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴이다)

[0267] a1) 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물을 클로로술폰산 중에서 그리고, 필요에 따라 촉매로서 요오드의 존재 하에 염소와 반응시킴으로써 염소화하여 하기 화학식 I.A의 화합물을 얻는 단계.



(I.A)

[0268]

[0269] (상기 식에서,

[0270]  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^4$ 는 수소이거나, 또는  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이다)

[0271] b1) 단계 a1)에서 얻은 화합물을 화학식  $R^a-NH_2$ 의 아민 및, 필요에 따라, 화학식  $R^b-NH_2$ 의 아민과 반응시키는 단계

[0272] 를 포함한다.

[0273] 반응 단계 a1)에 관하여, 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물의 염소화에 관한 상기 설명을 참조할 수 있다.

[0274] 반응 단계 b1)에서 카르복실산 무수물 기의 이미드화는 대체적으로 공지되어 있다. 극성 비양성자성 용매의 존재 하에 무수물과 1차 아민을 반응시키는 것이 바람직하다. 적절한 극성 비양성자성 용매는 질소 복소환, 예컨대 피리딘, 피리미딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴날딘, N-메틸피페리딘, N-메틸피페리돈 및 N-메틸피롤리돈이다.

[0275] 반응은 이미드화 촉매의 존재 하에 행할 수 있다. 적절한 이미드화 촉매는 유기 및 무기 산, 예를 들면 포름산, 아세트산, 프로피온산 및 인산이다. 적절한 이미드화 촉매는 또한, 전이 금속, 예컨대 아연, 철, 구리 및 마그네슘의 유기 및 무기 염이다. 예로는 아세트산아연, 프로피온산아연, 산화아연, 아세트산철(II), 염화철(III), 황산철(II), 아세트산구리(II), 산화구리(II) 및 아세트산마그네슘이 있다. 이미드화 촉매는 바람직하게는 방향족 아민의 반응에서 사용되며, 일반적으로 또한 지환족 아민의 반응에도 유리하다. 지방족 아민, 특히 단쇄 지방족 아민의 반응의 경우, 일반적으로 이미드화 촉매의 사용은 생략할 수 있다. 이미드화 촉매의 사용량은 이미드화하고자 하는 화합물의 총 중량을 기준으로 일반적으로 5 내지 80 중량%, 보다 바람직하게는 10 내지 75 중

량%이다.

[0276] 아민 대 이무수물의 정량적 몰비는 바람직하게는 약 2:1 내지 4:1, 보다 바람직하게는 2.2:1 내지 3:1이다.

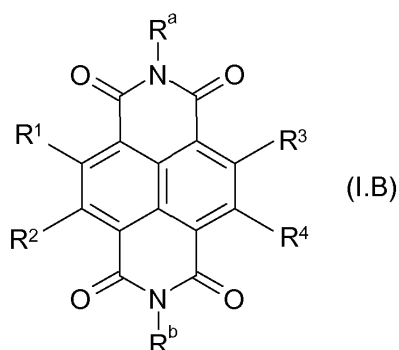
[0277] 단계 b1)의 반응 온도는 일반적으로 상온 내지 200℃, 바람직하게는 40℃ 내지 180℃이다. 지방족 및 지환족 아민은 바람직하게는 약 60℃ 내지 100℃의 온도 범위 내에서 반응된다. 방향족 아민은 바람직하게는 약 120℃ 내지 160℃의 온도 범위 내에서 반응된다.

[0278] 단계 b1)의 반응은 보호 가스 분위기, 예를 들면 질소 하에 수행되는 것이 바람직하다.

[0279] 단계 b1)의 반응은 표준 압력 또는 필요에 따라 고압에서 수행될 수 있다. 적절한 압력 범위는 약 0.8 내지 10 bar 범위이다. 휘발성 아민이 사용되는 경우(비점, 예를 들면,  $\leq 180^\circ\text{C}$ ), 고압에서 작업하는 것이 바람직하다.

[0280] 일반적으로, 단계 b1)에서 얻은 디이미드를 더 이상 정제하지 않고 후속 반응에 사용할 수 있다. 그러나, 생성물을 반도체로서 사용하기 위해서는, 생성물을 더 정제하는 것이 유리할 수 있다. 예로는 컬럼 크로마토그래피 방법이 있으며, 이 경우, 생성물을 바람직하게는 할로젠화 탄화수소, 예컨대 염화메틸렌, 클로로포름 또는 테트라클로로에탄에 용해시키고, 실리카 겔 상에서 분리 또는 여과한다. 최종적으로, 용매를 제거한다.

[0281] 본 발명은 또한 하기 화학식 I.B의 화합물의 제조 방법으로서,



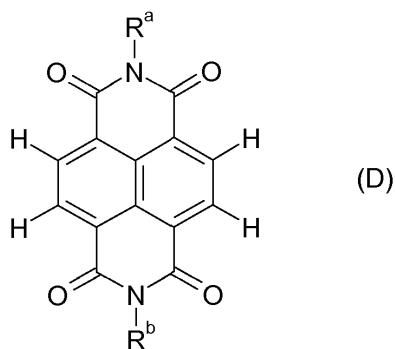
[0282]

[0283] (상기 식에서,

[0284]  $R^1$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 수소이거나, 또는  $R^1$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^4$ 는 각각 수소이거나, 또는  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 Cl이고,  $R^4$ 는 수소이거나, 또는  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 Cl이며,

[0285]  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 독립적으로 수소 또는 비치환 또는 치환 알킬, 시클로알킬, 비시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 염소화 아릴 또는 염소화 헤테라릴이다)

[0286] a2) 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물을 화학식  $R^a\text{-NH}_2$ 의 아민 및, 필요에 따라, 화학식  $R^b\text{-NH}_2$ 의 아민과 반응시켜서 하기 화학식 D의 화합물을 얻는 단계,



[0287]

[0288] b2) 단계 a2)에서 얻은 화합물을 촉매로서 요오드의 존재 하에 염소와 반응시킴으로써 염소화시키는 단계

[0289] 를 포함한다.

[0290] 바람직한 구체예에서, 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물을 단계 a2)에서 화학식  $R^a-NH_2$ 의 아민 및, 필요에 따라, 화학식  $R^b-NH_2$ 의 아민을 사용함으로써 전환시키는데, 여기서  $R^a$  및  $R^b$ 는 각각 촉매로서 요오드의 존재 하에 염소와의 반응에 의해 염소화될 수 없는 기이다. 바람직하게는, 단계 b2)의 화학식 D의 화합물의 염소화는 클로로술폰산 중에서, 그리고 촉매량의 요오드의 존재 하에 염소와 반응시킴으로써 일어난다. 요오드의 양은 염소의 양을 기준으로 1 내지 10 중량%, 바람직하게는 2 내지 5 중량%이다.

[0291] 염소와의 반응을 위한 반응 온도는 통상적으로 40 내지 150°C, 바람직하게는 60 내지 100°C 범위이다.

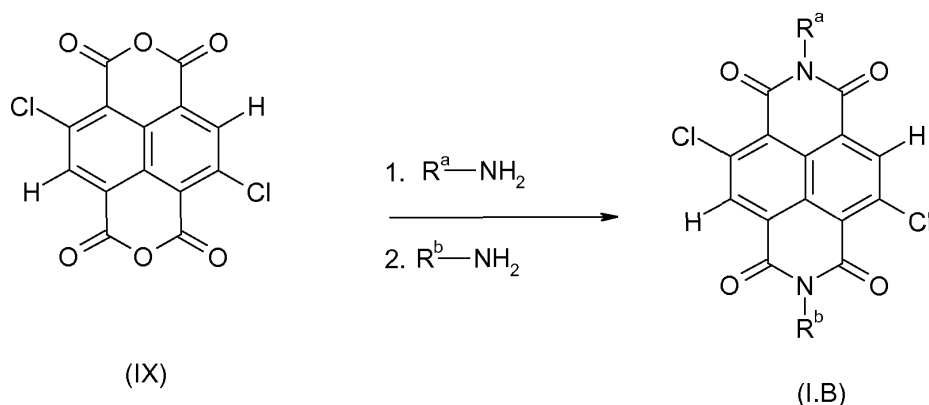
[0292] 나프탈렌-1,8:4,5-테트라카르복실산 이무수물과 염소의 반응은 표준압 또는 고압, 예를 들면 1 bar 내지 100 bar 범위의 염소화 압력 하에 일어날 수 있다. 통상적으로, 염소화 압력은 1 bar 내지 10 bar 범위이다.

[0293] 반응 시간은 통상 2 내지 48 시간, 바람직하게는 4 내지 16 시간 범위이다. 염소화 반응 온도 및 반응 시간은 염소화도를 제어하는 데 사용될 수 있다.

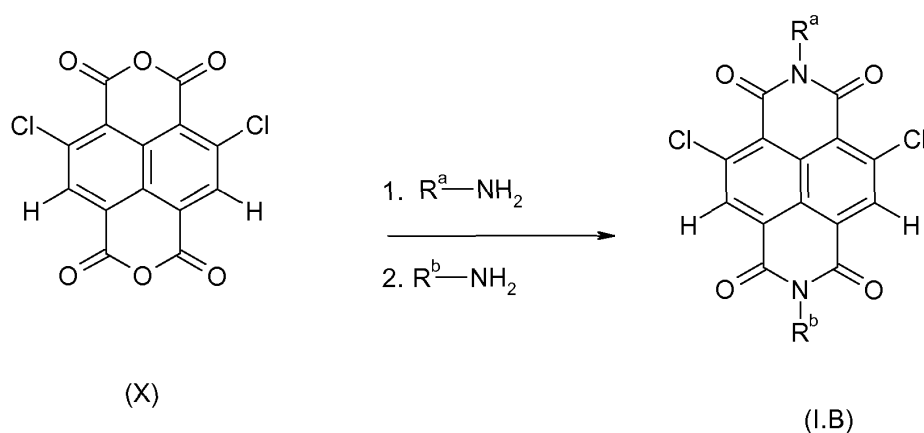
[0294] 보통, 화학식 D의 화합물 2 내지 20 mmol에 대하여 클로로술폰산 약 50 ml를 용매로서 사용한다.

[0295]  $R^1$  및  $R^4$ 가 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^3$ 이 각각 수소이거나, 또는  $R^1$  및  $R^3$ 이 각각 Cl이고,  $R^2$  및  $R^4$ 가 각각 수소인 화학식 I.B의 화합물은 또한 반응식 1에 개략 설명된 바와 같이 제조할 수 있다.

[0296] 반응식 1



[0297]



[0298]

[0299] 반응식 1에서,  $R^a$  및  $R^b$ 는 상기 정의된 바와 같다. 화학식 IX 및 X 각각의 디클로로나프탈렌테트라카르복실산 비스무수물은 화학식  $R^a-NH_2$ 의 아민 및, 필요에 따라, 화학식  $R^b-NH_2$ 의 아민으로 처리하며, 이 경우,  $R^a$ 는  $R^b$ 와 상이하다. 보통, 반응은 용매 중에서 수행된다. 적절한 용매는  $C_1$ - $C_6$  알칸 카르복실산, 예컨대 아세트산을 포함한다. 화학식 IX의 2,6-디클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 이무수물 및 화학식 X의 2,7-디클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 이무수물(즉, 각각  $R^1$  및  $R^4$ 가 둘 다 염소이고,  $R^2$  및  $R^3$ 이 둘 다 수소이거나, 또는  $R^1$  및  $R^3$ 이 둘 다 염소이고,  $R^2$  및  $R^4$ 가 둘 다 수소인 화학식 I.A의 화합물)은 또한 문헌(J. Org. Chem.

2006, 71, 8098-8105)에 기재된 방법에 따라서 제조할 수 있다.

- [0300]  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 가 염소인 화학식 I.B의 화합물은 DE 36 20 332에 기재된 방법에 따라서 제조할 수 있는 2,3,6,7-테트라클로로나프탈렌-1,4,5,8-테트라카르복실산 이무수물로부터 출발하여 반응식 1에 도시된 공정과 유사하게 제조할 수 있다.
- [0301] 화학식 I, 보다 구체적으로 화학식 I.A 및 I.B의 화합물은 유기 반도체로서 특히 유리하게 적절하다. 일반적으로, 이들은 n형 반도체로서 기능한다. 본 발명에 따라서 사용되는 화학식 I의 화합물을 다른 반도체와 조합하고, 에너지 레벨의 위치가, 다른 반도체가 n형 반도체로서 기능하는 결과를 가질 경우, 화합물 I은 또한 예외적인 경우에서 p형 반도체로서 기능할 수 있다.
- [0302] 화학식 I의 화합물은 공기 안정성에 대해서 주목받을 만 하다. 놀랍게도, 화학식 I의 화합물을 포함하는 유기 전계 효과 트랜지스터는 공기 안정성 및 수분 안정성에 대해 주목할 만하다.
- [0303] 화학식 I의 화합물은 고 전하 수송 이동도를 가지며/갖거나 고 온/오프 비율을 가진다. 화학식 I의 화합물은 진공 증착법에 의해 침착될 때 최소  $0.1 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  또는 액체 형태로 침착될 때 최소  $0.01 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ 의 전하 이동도를 가져야 한다. 평균 온/오프 비율은  $10^4$  이상, 바람직하게는  $10^5$  이상이다. 이는 유기 전계 효과 트랜지스터 (OFET)에 대해 특히 유리한 방식으로 적절하다.
- [0304] 본 발명의 화합물은 집적 회로(IC)의 제조에 특히 유리하게 적절하며, n-채널 MOSFET(금속 산화물 반도체 전계 효과 트랜지스터)에 오늘날까지 통상적으로 사용되고 있다. 그 다음은, 예를 들면 마이크로프로세서, 마이크로 컨트롤러, 스테틱 RAM 및 기타 디지털 논리 유니트를 위한 CMOS형 반도체 유니트이다.
- [0305] 반도체 물질의 제조를 위하여, 화학식 I의 본 발명의 화합물은 다음 공정: 인쇄(오프셋, 플렉소그래피, 그라비아, 스크린, 잉크젯, 전자사진), 증발, 레이저 전사, 스핀 코팅, 포토리소그래피, 드랍캐스팅 중 하나에 의해 더 가공될 수 있다. 이들은 특히 디스플레이(특히 대면적 및/또는 가요성 디스플레이) 및 RFID 태그용으로 적절하다.
- [0306] 본 발명의 화합물은 또한 OLED에서 형광 이미터로서 특히 적절한데, 이는 전기발광 또는 펄스 에너지 전달 (FRET)에 의한 적절한 인광 이미터에 의해 여기된다.
- [0307] 화학식 I의 본 발명의 화합물은 또한, 하전된 안료 염료에 의한 전기이동 효과에 기초한 색의 온 오프 전환하는 디스플레이에 특히 적절하다. 그러한 전기이동 디스플레이는, 예를 들면 US 2004/0130776에 기재되어 있다.
- [0308] 본 발명은 하나 이상의 게이트 구조, 소스 전극 및 드레인 전극을 가진 기판과 n형 반도체로서 상기 정의된 바와 같은 화학식 I의 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계 효과 트랜지스터를 더 제공한다. 본 발명은 다수의 유기 전계 효과 트랜지스터를 가진 기판을 더 제공하는데, 상기 전계 효과 트랜지스터 중 적어도 일부는 n형 반도체로서 상기 정의된 바와 같은 화학식 I의 하나 이상의 화합물을 포함한다. 본 발명은 또한 하나 이상의 그러한 기판을 포함하는 반도체 유니트를 제공한다.
- [0309] 특정 구체에는 유기 전계 효과 트랜지스터의 패턴(지형)을 가진 기판이고, 상기 각각의 트랜지스터는
- [0310] - 상기 기판 상에 침착된 유기 반도체;
- [0311] - 전도성 채널의 전도성을 제어하기 위한 게이트 구조; 및
- [0312] - 채널의 두 말단에 전도성 소스 및 드레인 전극을 포함하며,
- [0313] 상기 유기 반도체는 화학식 I의 하나 이상의 화합물로 구성되거나, 또는 화학식 I의 화합물을 포함한다. 또한, 유기 전계 효과 트랜지스터는 일반적으로 유전체를 포함한다.
- [0314] 또 다른 특정한 구체에는 유기 전계 효과 트랜지스터의 패턴을 가진 기판이며, 각각의 트랜지스터는 집적 회로를 형성하거나, 또는 집적 회로의 일부이고, 상기 트랜지스터의 적어도 일부는 화학식 I의 하나 이상의 화합물을 포함한다.
- [0315] 적절한 기판은 본질적으로 이 목적에 알려진 물질이다. 적절한 기판은, 예를 들면 금속(바람직하게는, 주기율표의 8, 9, 10 또는 11족의 금속, 예컨대 Au, Ag, Cu), 산화물 물질(예컨대, 유리, 석영, 세라믹,  $\text{SiO}_2$ ), 반도체(예컨대, 도핑된 Si, 도핑된 Ge), 금속 합금(예를 들면 Au, Ag, Cu 등을 주성분으로 하는 것), 반도체 합금, 중합체(예를 들면, 폴리염화비닐, 폴리올레핀, 예컨대 폴리에틸렌 및 폴리프로필렌, 폴리에스테르, 플루오로폴리



며, 폴리아미드, 폴리이미드, 폴리우레탄, 폴리알킬(메트)아크릴레이트, 폴리스티렌 및 이들의 혼합물 및 복합물), 무기 고체(예컨대, 염화암모늄), 종이 및 이들의 조합을 포함한다. 소정 용도에 따라서, 기판은 가요성이거나 비가요성일 수 있으며, 곡선 또는 평면 기하 구조를 가진다.

[0316] 반도체 유니트에 대해 전형적인 기판은 매트릭스(예를 들면, 석영 또는 중합체 매트릭스) 및 임의로 유전체 상층을 포함한다.

[0317] 적절한 유전체는  $\text{SiO}_2$ , 폴리스티렌, 폴리- $\alpha$ -메틸스티렌, 폴리올레핀(예컨대, 폴리프로필렌, 폴리에틸렌, 폴리이소부텐), 폴리비닐카르바졸, 플루오르화 중합체(예컨대, Cytop, CYMM), 시아노폴루란, 폴리비닐페닐, 폴리-p-크실렌, 폴리염화비닐 또는 열이나 대기 수분에 의해 가교 결합할 수 있는 중합체이다. 특정 유전체는 "자기 조립형 나노유전체", 즉  $\text{SiCl}$  작용기, 예를 들면  $\text{Cl}_3\text{SiOSiCl}_3$ ,  $\text{Cl}_3\text{Si}-(\text{CH}_2)_6-\text{SiCl}_3$ ,  $\text{Cl}_3\text{Si}-(\text{CH}_2)_{12}-\text{SiCl}_3$ 를 포함하는 단량체로부터 얻어지는 중합체 및/또는 대기 습기나 용매로 희석된 물의 첨가에 의해 가교되는 중합체이다(예를 들면, 문헌(Faccietti Adv. Mat. 2005, 17, 1705-1725) 참조). 물 대신에, 히드록실 함유 중합체, 예컨대 폴리비닐페놀 또는 폴리비닐 알코올 또는 비닐페놀과 스티렌의 공중합체도 가교 성분 역할을 할 수 있다. 하나 이상의 추가 중합체, 예를 들면 폴리스티렌이 가교 조작 중에 제공되어 또한 가교될 수 있다(Facietti, 미국 특허 출원 공개 2006/0202195 참조).

[0318] 기판은 전극, 예컨대 OFET의 게이트, 드레인 및 소스 전극을 추가로 가질 수 있는데, 이들은 기판 상에 정상적으로 편재된다(예를 들면, 유전체 상의 비전도성층에 침착되거나 매립된다). 기판은 통상적으로 유전체 상층(즉, 게이트 유전체) 아래에 배열되는 OFET의 전도성 게이트 전극을 추가로 포함할 수 있다.

[0319] 특정 구체예에서, 절연체 층(게이트 절연층)이 기판 표면의 하나 이상의 부분에 존재한다. 절연체 층은, 바람직하게는 무기 절연체, 예컨대  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiN}$  등, 강유전성 절연체, 예컨대  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Ta}_2\text{O}_5$ ,  $\text{La}_2\text{O}_5$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Y}_2\text{O}_3$  등, 유기 절연체, 예컨대 폴리이미드, 벤조시클로부텐(BCB), 폴리비닐 알코올, 폴리아크릴레이트 등 및 이들의 조합 중에서 선택되는 하나 이상의 절연체를 포함한다.

[0320] 소스 및 드레인 전극에 적절한 물질은 주로 전기 전도성 물질이다. 이들은 금속 특히 주기율표의 8, 9, 10 또는 11족의 금속, 예컨대 Pd, Au, Ag, Cu, Al, Ni, Cr 등을 포함한다. PEDOT(= 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)); PSS(= 폴리(스티렌술포네이트)), 폴리아닐린, 표면 변성 금 등과 같은 전도성 중합체도 적절하다. 바람직한 전기 전도성 물질은 비저항이  $10^{-3}$  옴 x 미터 미만, 바람직하게는  $10^{-4}$  옴 x 미터 미만, 특히  $10^{-6}$  또는  $10^{-7}$  옴 x 미터 미만이다.

[0321] 특정 구체예에서, 드레인 및 소스 전극은 유기 반도체 물질 상에 적어도 부분적으로 존재한다. 기판이 반도체 물질 또는 IC에 전형적으로 사용되는 바와 같은 추가 구성요소, 예컨대 절연체, 저항기, 커패시터, 전도체 트랙 등을 포함할 수 있다는 것은 이해해야 한다.

[0322] 전극은 통상의 방법, 예컨대 증발, 리소그래피 공정 또는 다른 구조화 공정에 의해 적용할 수 있다.

[0323] 반도체 물질은 또한, 인쇄에 의해 분산상의 적절한 보조제(중합체, 계면활성제)로 가공할 수 있다.

[0324] 바람직한 구체예에서, 화학식 I의 하나 이상의 화합물(및 필요에 따라 또 다른 반도체 물질)의 침착은 기상 증착법(물리 증착, PVD)에 의해 수행된다. PVD 공정은 고 진공 조건 하에서 수행하며, 다음 단계: 증발, 수송, 증착을 포함한다. 놀랍게도, 화학식 I의 화합물이 PVD 공정에 사용하기에 특히 유리하게 적절한 것으로 밝혀졌는데, 그 이유는 이것이 본질적으로 분해되지 않고/않거나 바람직하지 않은 부산물을 형성하지 않기 때문이다. 침착된 물질은 고 순도로 얻어진다. 특정한 구체예에서, 침착된 물질은 결정의 형태로 얻어지거나, 또는 고 결정 함량을 포함한다. 일반적으로, PVD에 대해서, 화학식 I의 하나 이상의 화합물은 그 증발 온도 이상의 온도로 가열되어 결정화 온도 아래로 냉각시킴으로써 기판 상에 침착된다. 침착 중의 기판 온도는 바람직하게는 약 20 내지 250°C, 보다 바람직하게는 50 내지 200°C 범위이다.

[0325] 생성된 반도체 층은 일반적으로 소스 전극과 드레인 전극 간의 옴 접촉에 충분한 두께를 가진다. 침착은 비활성 분위기 하에, 예를 들면 질소, 아르곤 또는 헬륨 하에 수행될 수 있다.

[0326] 침착은 통상적으로 상압 또는 감압 하에 수행된다. 적절한 압력 범위는 약  $10^{-7}$  내지 1.5 bar 범위이다.

[0327] 화학식 I의 화합물은 바람직하게는 10 내지 1000 nm, 보다 바람직하게는 15 내지 250 nm 두께로 기판에 침착된다. 특정 구체예에서, 화학식 I의 화합물은 적어도 부분적으로 결정 형태로 침착된다. 이를 위하여, 특히 전술

한 PVD 공정이 적절하다. 더욱이, 기존에 제조된 유기 반도체 결정을 사용할 수 있다. 그러한 결정을 얻는 적절한 공정은 본 명세서에서 참고로 포함하는 문헌(R.A. Laudise et al. in "Physical Vapor Growth of Organic Semi-Conductors", Journal of Crystal Growth 187 (1998), pages 449-454, and in "Physical Vapor Growth of Centimeter-sized Crystals of  $\alpha$ -Hexathiophene", Journal of Crystal Growth 1982 (1997), pages 416-427)에 기재되어 있다.

[0328] 화학식 I의 화합물은 또한 용액으로부터 가공하는 것이 유리할 수 있다. 그 경우, 화학식 I의 하나 이상의 화합물(및 필요에 따라 또 다른 반도체 물질)을, 예를 들면 스핀 코팅에 의해 기판에 도포한다. 또한, 화학식 I의 하나 이상의 화합물은 용액 전단에 의해 기판에 도포된다. 이 유형의 침착은, 예를 들면 문헌(Adv. Mater. 2008, 20, 2588-2594)에 기재되어 있다. 이는 통상의 나이프 코팅 방법, 예컨대 에어나이프 코팅, 나이프 코팅, 에어블레이드 코팅, 스퀴즈 코팅, 롤 코팅 및 키스 코팅을 포함한다. 이를 위하여, 예를 들면 화학식 I의 화합물의 용액을 제1 기판에 도포한 다음, 제2 기판을 상기 용액과 접촉시킨다. 그 다음, 전단 에너지를 도입한다. 바람직한 구체예에 따르면, 화학식 I의 하나 이상의 화합물의 소량의 용액, 예를 들면 액적을 기판에 첨가한다. 기판 온도는 용매 증발 속도를 제어하기 위하여 실온 내지 사용된 용매의 비점의 60 내지 80%인 온도 범위이다. 상부 웨이퍼를 고정  $\alpha$  웨이퍼에 대해서 당기면, 용액 상의 웨이퍼 간에 전단력이 발생한다. 전단 속도는 통상 0.01 내지 0.5 mm/sec, 바람직하게는 0.0866 내지 0.1732 mm/sec 범위이다. 소수성 표면을 가진 기판을 사용하는 것이 유리할 수 있다. 기판 표면을 소수성화하기에 적절한 화합물은 알킬트리알콕시실란, 예컨대 n-옥타데실트리메톡시실란, n-옥타데실트리에톡시실란, n-옥타데실트리(n-프로필)옥시실란 또는 n-옥타데실트리(이소프로필)옥시실란 또는 페닐트리클로로실란을 포함한다.

[0329] 화학식 I의 화합물이 용액으로부터 가공되는 경우, 사용되는 용매는 저비점 또는 고비점을 가질 수 있다. 적절한 용매는 방향족 용매, 예컨대 톨루엔, 크실렌, 메시틸렌, 나프탈렌, 데카히드로나프탈렌, 옥타히드로나프탈렌, 클로로벤젠 또는 디클로로벤젠, 특히 오르토-디클로로벤젠, 또는 선형 또는 고리 에테르, 예를 들면 테트라히드로푸란, 디글리콜 메틸 에테르, 또는 방향족 에테르, 예컨대 디페닐에테르 메톡시벤젠, 퍼플루오로폴리에테르, 예컨대 HT-60 또는 HT 90 CT 135(Solvay 제품, 쇠의 처음과 끝에 CF<sub>3</sub> 라디칼을 가진 퍼플루오로에틸렌글리콜, 퍼플루오로프로필렌글리콜의 공중합체), C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-카르복실산의 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬에스테르, 예컨대 메틸 아세테이트, 에틸 아세테이트, 프로필 아세테이트, 부틸 아세테이트, 메틸 프로피오네이트, 에틸 프로피오네이트, 프로필 프로피오네이트, 부틸 프로피오네이트 및 이들의 혼합물이다. 바람직한 구체예에 따르면, 용매의 혼합물, 특히 둘 이상의 용매가 상이한 비점을 가진 것이 사용된다. 바람직하게는, 비점의 차는 30°C보다 크다.

[0330] 화학식 I의 화합물은 인쇄 공정에 의하여 반도체 소자, 특히 OFET를 제조하는 데 적절하다. 이를 위하여 맞춤형 제작 인쇄 공정(잉크젯, 플렉소그래피, 오프셋, 그라비아; 요판 인쇄, 나노인쇄)를 사용할 수 있다. 인쇄 공정에서 화학식 I의 화합물의 사용에 바람직한 용매는 방향족 용매, 예컨대 톨루엔, 크실렌, 고리 에테르, 예컨대 디옥산, 테트라히드로푸란, 또는 선형 에테르, 예컨대 디메톡시에탄, 에틸렌 글리콜 디에틸에테르, tert-부틸메틸에테르 등이다. 또한, 농후화 물질, 예컨대 중합체, 예를 들면 폴리스티렌 등을 이러한 "반도체 잉크"에 첨가할 수 있다. 이 경우, 사용되는 유전체는 절연한 화합물이다.

[0331] 특정 구체예에서, 본 발명의 전계 효과 트랜지스터는 박막 트랜지스터(TFT)이다. 통상의 구성에서, 박막 트랜지스터는 기판 상에 배치된 게이트 전극, 그 위와 기판 상에 배치된 게이트 절연체 층, 게이트 절연체 층 상에 배치된 반도체 층, 반도체 층 상의 저항 접촉층 및 저항 접촉층 상의 소스 전극 및 드레인 전극을 가진다.

[0332] 바람직한 구체예에서, 화학식 I의 하나 이상의 화합물(및 필요에 따라 하나 이상의 또 다른 반도체 물질)을 침착시키기 전에 기판 표면을 개질시킬 수 있다. 이 개질은 반도체 물질을 결합하는 영역 및/또는 반도체 물질이 침착될 수 없는 영역을 형성하는 역할을 한다. 기판의 표면은 기판의 표면과 화학식 I의 화합물에 결합하기에 적절한 하나 이상의 화합물(C1)로 개질하는 것이 바람직하다. 적절한 구체예에서, 기판의 표면의 일부 또는 전체 표면을 하나 이상의 화합물(C1)로 코팅하여 화학식 I의 하나 이상의 화합물(및 필요에 따라 또 다른 반도체 화합물)의 침착을 개선할 수 있다. 또 다른 구체예는 해당 제조 공정에 의한 기판 상의 화학식 C1의 화합물의 패턴 침착을 포함한다. 이는 예를 들면 본 명세서에서 그 전체를 참고로 포함하는 US-2007-0190783-A1에 기재된 바와 같은, 이 목적에 대해 공지된, 소위 "패터닝" 공정이라 하는 마스크 공정을 포함한다.

[0333] 화학식 C1의 적절한 화합물은 기판, 그리고 화학식 I의 하나 이상의 반도체 화합물과의 결합 상호작용을 할 수 있다. 용어 "결합 상호작용"은 화학 결합(공유 결합), 이온 결합, 배위 상호작용, 반데르발스 상호작용, 예를 들면 쌍극자-쌍극자 상호작용 등의 형성 및 이들의 조합을 포함한다. 화학식 C1의 적절한 화합물은 다음과

같다:

- [0334] - 실란, 포스폰산, 카르복실산, 히드록삼산, 예컨대 알킬트리클로로실란, 예를 들면 n-옥타데실트리클로로실란; 아릴트리클로로실란, 예를 들면 페닐트리클로로실란; 트리알콕시실란기를 가진 화합물, 예를 들면 알킬트리알콕시실란, 예컨대 n-옥타데실트리메톡시실란, n-옥타데실트리에톡시실란, n-옥타데실트리(n-프로필)옥시실란, n-옥타데실트리(이소프로필)옥시실란; 트리알콕시아미노알킬실란, 예컨대 트리에톡시아미노프로필실란 및 N-[(3-트리에톡시실릴)프로필]에틸렌디아민; 트리알콕시알킬 3-글리시딜 에테르 실란, 예컨대 트리에톡시프로필 3-글리시딜 에테르 실란; 트리알콕시알릴실란, 예컨대 알릴트리메톡시실란; 트리알콕시(이소시아나토알킬)실란; 트리알콕시실릴(메트)아크릴로일옥시알칸 및 트리알콕시실릴(메트)아크릴아미도알칸, 예컨대 1-트리에톡시실릴-3-아크릴로일옥시프로판.
- [0335] - 아민, 포스핀 및 황 함유 화합물, 특히 티올.
- [0336] 화합물(C1)은 바람직하게는 알킬트리알콕시실란, 특히 n-옥타데실트리메톡시실란, n-옥타데실트리에톡시실란; 페닐트리클로로실란; 헥사알킬디실라잔, 특히 헥사메틸디실라잔(HMDS); C<sub>8</sub>-C<sub>30</sub>-알킬티올, 특히 헥사데칸티올; 메르캅토카르복실산 및 메르캅토술폰산, 특히 메르캅토아세트산, 3-메르캅토프로피온산, 메르캅토숙신산, 3-메르캅토-1-프로판술폰산 및 이의 알칼리 금속 및 암모늄 염 중에서 선택된다.
- [0337] 본 발명의 반도체를 포함하는 다양한 반도체 구조물도 고려되는데, 예를 들면 상부 접속부, 상부 게이트, 하부 접속부, 하부 게이트, 또는 아니면, 수직 구성물, 예를 들어 US 2004/0046182에 기재된 바와 같은 VOFET(수직형 유기 전계 효과 트랜지스터)가 있다.
- [0338] 층 두께는, 예를 들면 반도체에서 10 nm 내지 5  $\mu$ m, 유전체에서 50 nm 내지 10  $\mu$ m이며, 전극은, 예를 들면 20 nm 내지 1  $\mu$ m 두께일 수 있다. 또한, OFET를 조합하여 링 오실레이터 또는 인버터와 같은 다른 구성요소를 형성할 수 있다.
- [0339] 본 발명의 또 다른 양태는 n형 및/또는 p형 반도체일 수 있는, 다수의 반도체 구성요소를 포함하는 전자 구성요소의 제공이다. 그러한 구성요소의 예는 전계 효과 트랜지스터(FET), 쌍극성 접합 트랜지스터(BJT), 터널 다이오드, 컨버터, 발광 구성요소, 생물학적 및 화학적 검출기 또는 감지기, 온도 의존 검출기, 광검출기, 예컨대 편광 민감성 광검출기, 게이트, AND, NAND, NOT, OR, TOR 및 NOR 게이트, 저항기, 스위치, 타이머 유니트, 정적 또는 동적 저장기 및 프로그램 가능한 회로를 포함하는 기타 동적 또는 연속, 논리 또는 기타 디지털 구성요소이다.
- [0340] 특정한 반도체 소자는 인버터이다. 디지털 로직에서, 인버터는 입력 신호를 역변환하는 게이트이다. 또한, 인버터는 NOT 게이트라고도 한다. 실제 인버터 회로는 입력 전류의 반대를 구성하는 출력 전류를 가진다. 통상적인 값은, 예를 들어 TTL 회로의 경우 (0, +5V)이다. 디지털 인버터의 성능은 전압 변환 곡선(VTC), 즉 출력 전류에 대한 입력 전류의 플롯을 재생한다. 이상적으로, 이것은 단계적인 작용이며, 실측 곡선이 그러한 단계에 더 가깝게 근접할수록, 인버터는 더 좋다. 본 발명의 특정 구체예에서, 화학식 I의 화합물은 인버터 내 유기 n형 반도체로서 사용된다.
- [0341] 화학식 I, 보다 구체적으로 화학식 I.A 및 I.B의 본 발명의 화합물은 또한, 유기 광전지(OPV)에 사용하기에 특히 유리하게 적절하다.
- [0342] 일반적으로, 유기 태양 전지는 층 구조를 가지며, 일반적으로 적어도 다음 층: 애노드, 광활성층 및 캐소드를 포함한다. 그러므로, 일반적으로 이들 층은 기판에 통상적으로 배치된다. 유기 태양 전지의 구조는, 예를 들면 본 명세서에서 그 전체를 참고 인용하는 US 2005/0098726 및 US 2005/0224905에 기재되어 있다.
- [0343] 본 발명은 광활성 물질로서 상기 정의된 바와 같은 화학식 I의 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 태양 전지를 더 제공한다.
- [0344] 유기 태양 전지에 적절한 기판은, 예를 들면 산화물 물질(예컨대, 유리, 세라믹, SiO<sub>2</sub>, 특히 석영 등), 중합체(예컨대, 폴리염화비닐, 폴리올레핀, 예컨대 폴리에틸렌 및 폴리프로필렌, 폴리에스테르, 플루오로폴리머, 폴리아미드, 폴리우레탄, 폴리알킬(메트)아크릴레이트, 폴리스티렌 및 이들의 혼합물 및 복합물) 및 이들의 조합이다.
- [0345] 적절한 전극(캐소드, 애노드)은 주로 금속(바람직하게는 주기율표의 8, 9, 10 또는 11족 금속, 예컨대 Pt, Au, Ag, Cu, Al, In, Mg, Ca), 반도체(예컨대, 도핑된 Si, 도핑된 Ge, 산화주석인듐(ITO), 산화주석인듐갈륨

(GITO), 산화주석인듐아연(ZITO) 등), 금속 합금(Pt, Au, Ag, Cu 등을 주성분으로 함, 특히 Mg/Ag 합금), 반도체 합금 등이다. 사용되는 전극 중 하나, 예를 들면 애노드는 바람직하게는 입사광에 실질적으로 투명한 물질이다. 이는, 예를 들면 ITO, 도핑된 ITO, ZnO, FTO(불소 도핑 산화주석), AZO(알루미늄 도핑 ZnO), TiO<sub>2</sub>, Ag, Au, Pt를 포함한다. 사용되는 다른 전극, 예를 들면 캐소드는 바람직하게는 실질적으로 입사광을 반사시키는 물질이다. 이는 예를 들면, Al, Ag, Au, In, Mg, Mg/Al, Ca 등의 금속 필름을 포함한다.

[0346] 광활성층 자체는, 본 발명에 따른 공정에 의해 제공되고, 유기 반도체 물질로서 상기 정의된 바와 같은 화학식 I의 하나 이상의 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함하거나, 하나 이상의 층으로 이루어진다. 광활성층 이외에, 하나 이상의 추가 층이 존재할 수 있다. 이들은 예를 들면 다음을 포함한다:

[0347] - 전자 전도 특성을 가진 층(ETL, 전자 수송층)

[0348] - 흡수하지 않아야 하는 정공 전도 물질을 포함하는 층(정공 수송층, HTL)

[0349] - 흡수해서는 안되는 엑시톤 및 정공 차단층(예컨대, 엑시톤 차단층, EBL) 및

[0350] - 다중층

[0351] 적절한 엑시톤 및 정공 차단층은, 예를 들면 US 6,451,415에 기재되어 있다.

[0352] 엑시톤 차단층에 적절한 물질은, 예를 들면 바토크프로인(BCP), 4,4',4"-트리스[3-메틸페닐-N-페닐아미노]트리페닐아민(m-MTDATA) 또는 폴리에틸렌디옥시티오펜(PEDOT)이다.

[0353] 본 발명의 태양 전지는 광활성 도너-억셉터 헤테로접합에 기초할 수 있다. 화학식 I의 하나 이상의 화합물이 HTM(정공 수송 물질)으로서 사용되는 경우, 해당 ETM(전자 수송 물질)은, 상기 화합물의 여기 후, ETM으로의 신속한 전자 수송이 일어날 수 있도록 선택되어야 한다. 적절한 ETM은, 예를 들면 C60 및 기타 풀러렌, 페릴렌-3,4:9,10-비스(디카르복시미드)(PTCDI) 등이다. 화학식 I의 하나 이상의 화합물이 ETM으로 사용되는 경우, 상보적인 HTM은, 상기 화합물의 여기 후, HTM으로의 신속한 정공 수송이 일어날 수 있도록 선택되어야 한다. 헤테로접합은 편평(평활) 구조를 가질 수 있다(Two layer organic photovoltaic cell, C. W. Tang, Appl. Phys. Lett., 48 (2), 183-185 (1986) or N. Karl, A. Bauer, J. Holzapfel, J. Marktanner, M. Mobus, F. Stolzle, Mol. Cryst. Liq. Cryst., 252, 243-258 (1994) 참조). 또한, 헤테로접합은 벌크 헤테로접합 또는 상호 침투 도너-억셉터 네트워크로서 설계될 수 있다(예를 들면, C. J. Brabec, N. S. Sariciftci, J. C. Hummelen, Adv. Funct. Mater., 11 (1), 15 (2001) 참조).

[0354] 화학식 I의 화합물은 MiM, pin, pn, Mip 또는 Min 구조(M = 금속, p = p-도핑 유기 또는 무기 반도체, n = n-도핑 유기 또는 무기 반도체, I = 유기층으로 구성된 본래 전도성인 시스템; 예를 들면 문헌(J. Drechsel et al., Org. Electron., 5 (4), 175 (2004) or Maennig et al., Appl. Phys. A 79, 1-14 (2004)) 참조)를 가진 태양 전지 내 광활성 물질로서 사용될 수 있다.

[0355] 화학식 I의 화합물은 또한 문헌(P. Peumans, A. Yakimov, S. R. Forrest in J. Appl. Phys, 93 (7), 3693-3723 (2003))(특허 US 4,461,922, US 6,198,091 및 US 6,198,092 참조)에 기재된 바와 같이, 탠덤 전지 내 광활성 물질로서 사용될 수 있다.

[0356] 화학식 I의 화합물은 2 이상의 MiM, pin, Mip 또는 Min 다이오드가 서로 적층된 탠덤 전지 내 광활성 물질로서 사용될 수 있다(특허 출원 DE 103 13 232.5 참조)(J. Drechsel et al., Thin Solid Films, 451452, 515-517 (2004)).

[0357] M, n, i 및 p 층의 층 두께는 통상적으로 10 내지 1000 nm, 바람직하게는 10 내지 400 nm, 보다 바람직하게는 10 내지 100 nm이다. 박층은 감압 하에 또는 비활성 분위기 중에서 증착에 의해, 레이저 삭마에 의해, 또는 용액 또는 분산액 가공 가능한 방법, 예컨대 스핀 코팅, 나이프 코팅, 캐스팅 방법, 분무, 딥 코팅 또는 인쇄(예컨대, 잉크젯, 플렉소그래피, 오프셋, 그라비아; 오판 인쇄, 나노임프린팅)에 의해 생성할 수 있다.

[0358] 적절한 유기 태양 전지는, 전술한 바와 같이, 전자 도너(n형 반도체) 또는 전자 억셉터(p형 반도체)로서 화학식 I의 하나 이상의 본 발명의 화합물을 포함할 수 있다. 화학식 I의 화합물 이외에, 하기 반도체 물질이 유기 광전지에 사용하기에 적절하다:

[0359] 비할로젠화 또는 할로젠화된 프탈로시아닌. 이들은 무금속 프탈로시아닌, 또는 2가 금속 또는 금속 원자를 함유하는 기, 특히 티탄일옥시, 바나딜옥시, 철, 구리, 아연 등의 것을 포함하는 프탈로시아닌을 포함한다. 적절한 프탈로시아닌은 특히 구리 프탈로시아닌, 아연 프탈로시아닌 및 무금속 프탈로시아닌이다. 특정 구체예에서, 할



로겐화 프탈로시아닌이 사용된다. 이들은 다음을 포함한다:

- [0360] 2,6,10,14-테트라플루오로프탈로시아닌, 예컨대 구리 2,6,10,14-테트라플루오로프탈로시아닌 및 아연 2,6,10,14-테트라플루오로프탈로시아닌;
- [0361] 1,5,9,13-테트라플루오로프탈로시아닌, 예컨대 구리 1,5,9,13-테트라플루오로프탈로시아닌 및 아연 1,5,9,13-테트라플루오로프탈로시아닌;
- [0362] 2,3,6,7,10,11,14,15-옥타플루오로프탈로시아닌, 예컨대 구리 2,3,6,7,10,11,14,15-옥타플루오로프탈로시아닌 및 아연 2,3,6,7,10,11,14,15-옥타플루오로프탈로시아닌; 헥사데카클로로프탈로시아닌 및 헥사데카플루오로프탈로시아닌, 예컨대 구리 헥사데카클로로프탈로시아닌, 아연 헥사데카클로로프탈로시아닌, 무금속 헥사데카클로로프탈로시아닌, 구리 헥사데카플루오로프탈로시아닌, 아연 헥사데카플루오로프탈로시아닌 또는, 무금속 헥사데카플루오로프탈로시아닌,
- [0363] 포르피린, 예를 들면 5,10,15,20-테트라(3-피리딜)포르피린(TpyP), 또는 테트라벤조포르피린, 예를 들면 무금속 테트라벤조포르피린, 구리 테트라벤조포르피린 또는 아연 테트라벤조포르피린. 본 발명에 따라서 사용되는 화학식 I의 화합물과 같이, 가용성 전구체로서 용액으로부터 가공되고, 기판 상에서 열 분해에 의해 안료 광활성 성분으로 전환되는 테트라벤조포르피린이 특히 바람직하다.
- [0364] 각각 치환되거나 치환되지 않을 수 있는 아센, 예컨대 아트라센, 테트라센, 펜타센. 치환 아센은 바람직하게는 전자 주개 치환기(예컨대, 알킬, 알콕시, 에스테르, 카르복실레이트 또는 티오알콕시), 전자 끌개 치환기(예컨대, 할로젠, 니트로 또는 시아노) 및 이들의 조합 중에서 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함한다. 이들은 2,9-디알킬펜타센 및 2,10-디알킬펜타센, 2,10-디알콕시펜타센, 1,4,8,11-테트라알콕시펜타센 및 루브렌(5,6,11,12-테트라페닐나프타센)을 포함한다. 적절한 치환 펜타센은 본 명세서에서 참고로 포함하는 US 2003/0100779 및 US 6,864,396에 기재되어 있다. 바람직한 아센은 루브렌이다.
- [0365] 액정(LC) 물질은, 예를 들면 코로넨, 예컨대 헥사벤조코로넨(HBC-PhC<sub>12</sub>), 코로넨다이미드, 또는 트리페닐렌, 예컨대 2,3,6,7,10,11-헥사헥실티오텐트리페닐렌(HTT<sub>6</sub>), 2,3,6,7,10,11-헥사키스(4-n-노닐페닐)트리페닐렌(PTP<sub>9</sub>) 또는 2,3,6,7,10,11-헥사키스(운데실옥시)트리페닐렌(HAT<sub>11</sub>)이다. 디스크형(discotic)인 액정 물질이 특히 바람직하다.
- [0366] 티오펜, 올리고티오펜 및 이의 치환 유도체; 적절한 올리고티오펜은 쿼터티오펜, 퀸케티오펜, 섹시티오펜, α, ω-디(C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>)알킬티오펜, 예컨대 α, ω-디헥실쿼터티오펜, α, ω-디헥실퀸케티오펜 및 α, ω-디헥실섹시티오펜, 폴리(알킬티오펜), 예컨대 폴리(3-헥실티오펜), 비스(디티에노티오펜), 안트라디티오펜 및 디알킬안트라디티오펜, 예컨대 디헥실안트라디티오펜, 페닐렌-티오펜(P-T) 올리고머 및 이의 유도체, 특히 α, ω-알킬 치환 페닐렌 티오펜 올리고머이다.
- [0367] 또한, α, α'-비스(2,2-디시아노비닐)퀸케티오펜(DCV5T)형, (3-(4-옥틸페닐)-2,2'-비티오펜)(PTOPT), 폴리(3-(4'-(1,4,7-트리옥사옥틸)페닐)티오펜)(PEOPT), 폴리(3-(2'-(메톡시5'-옥틸페닐)티오펜)(POMeOPT), 폴리(3-옥틸티오펜)(P<sub>3</sub>OT), 폴리(피리도피라진비닐렌)폴리티오펜 블렌드, 예컨대 EHH-PpyPz, PTPTB 공중합체, BBL 공중합체, F<sub>8</sub>BT 공중합체, PFMO 공중합체(Brabec C., Adv. Mater., 2996, 18, 2884 참조), (PCPDTBT) 폴리[2.6-(4.4-비스(2-에틸헥실)-4H-시클로펜타[2.1-b; 3,4-b']-디티오펜)-4,7-(2,1,3-벤조티아디아졸)]이 적절하다.
- [0368] 파라페닐렌비닐렌 및 파라페닐렌비닐렌을 포함하는 소중합체 또는 중합체, 예컨대, MEH-PPV(폴리(2-메톡시-5-(2'-에틸헥실옥시)-1,4-페닐렌비닐렌)), MDMO-PPV(폴리(2-메톡시-5-(3',7'-디메틸옥틸옥시)-1,4-페닐렌비닐렌)), PPV, CN-PPV(다양한 알콕시 유도체를 가짐).
- [0369] 페닐렌에틴일렌/페닐렌비닐렌 하이브리드 중합체(PPE-PPV).
- [0370] 폴리플루오렌 및 교호 폴리플루오렌 공중합체, 예를 들면 4,7-디티엔-2'-일-2,1,3-벤조티아디아졸; 또한, 폴리(9,9'-디옥틸플루오렌-코-벤조티아디아졸)(F<sub>8</sub>BT), 폴리(9,9'-디옥틸플루오렌-코-비스(N,N'-(4-부틸페닐))-비스(N,N'-페닐)-1,4-페닐렌디아민(PFB)이 적절하다.
- [0371] 폴리카르바졸, 즉 카르바졸을 포함하는 소중합체 및 중합체.

[0372]

폴리아닐린, 즉 아닐린을 포함하는 소중합체 및 중합체.

[0373]

트리아릴아민, 폴리트리아릴아민, 폴리시클로펜타디엔, 폴리피롤, 폴리피란, 폴리실올, 폴리포스폴, TPD, CBP, 스피로-MeOTAD.

[0374]

풀러렌; 그러한 셀에서, 풀러렌 유도체는 정공 전도체이다.

[0375]

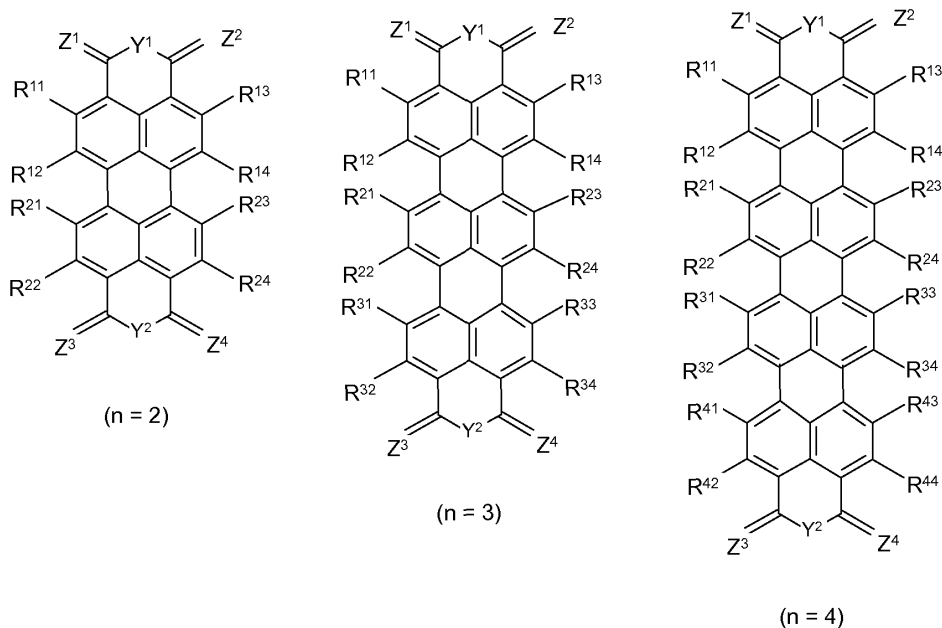
본 출원에 관하여, 용어 "풀러렌"은 탄소로 구성되며, 축합 탄소 고리의 규칙적인 삼차원 네트워크를 가진 물질을 의미한다. 이들은 구형, 원통형, 타원형, 평면형 또는 각형 구조를 가질 수 있다. 적절한 풀러렌은, 예를 들면 C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>76</sub>, C<sub>80</sub>, C<sub>82</sub>, C<sub>84</sub>, C<sub>86</sub>, C<sub>90</sub>, C<sub>96</sub>, C<sub>120</sub>, 단일벽 탄소 나노튜브(SWNT) 및 다중벽 탄소 나노튜브(MWNT)이다. 풀러렌 유도체의 예는 페닐-C<sub>61</sub>-부티르산 메틸 에스테르(PCBM), 페닐-C<sub>71</sub>-부티르산 메틸 에스테르([71]PCBM), 페닐-C<sub>84</sub>-부티르산 메틸 에스테르([84]PCBM), 페닐-C<sub>61</sub>-부티르산 부틸 에스테르([60]PCBB), 페닐-C<sub>61</sub>-부티르산 옥틸 에스테르([60]PCBO) 및 티에닐-C<sub>61</sub>-부티르산 메틸 에스테르([60]ThCBM)이다. C<sub>60</sub> 또는 PCBM(=[6,6]-페닐-C<sub>61</sub>-부티르산 메틸 에스테르)가 특히 바람직하다.

[0376]

유기 태양 전지에서, 하나 이상의 본 발명의 화합물 및 할로젠화 프탈로시아닌을 포함하는 반도체 물질의 조합을 사용하는 것이 특히 바람직하다.

[0377]

릴렌. 이에 관하여, 용어 "릴렌"은 일반적으로 주변 결합 나프탈렌 단위로 구성된 분자 부분을 가진 화합물을 의미한다. 나프탈렌 단위의 수에 따라서, 이들은 페릴렌(n=2), 터릴렌(n=3), 쿼터릴렌(n=4) 또는 고차 릴렌일 수 있다. 따라서, 이들은 하기 화학식의 페릴렌, 터릴렌 또는 쿼터릴렌일 수 있다.



[0378]

상기 식에서,

[0379]

R<sup>n1</sup>, R<sup>n2</sup>, R<sup>n3</sup> 및 R<sup>n4</sup> 라디칼(여기서, n은 1 내지 4임)은 각각 독립적으로 수소, 할로젠 또는 할로젠 이외의 기일 수 있고,

[0380]

Y<sup>1</sup>은 0 또는 NR<sup>a</sup>(여기서, R<sup>a</sup>는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이며,

[0381]

Y<sup>2</sup>은 0 또는 NR<sup>b</sup>(여기서, R<sup>b</sup>는 수소 또는 오르가닐 라디칼임)이고,

[0382]

Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, Z<sup>3</sup> 및 Z<sup>4</sup>는 각각 0이며,

[0383]

Y<sup>1</sup>이 NR<sup>a</sup>인 경우, Z<sup>1</sup>과 Z<sup>2</sup> 라디칼 중 하나는 또한 NR<sup>c</sup>이고, 여기서 R<sup>a</sup> 및 R<sup>c</sup> 라디칼은 함께 측면 결합 사이에 2 내지 5 개의 원자를 가진 다리결합 기이며,

[0384]

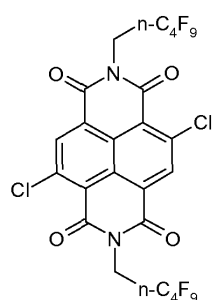
- [0385]  $Y^2$ 가  $NR^b$ 인 경우,  $Z^3$ 과  $Z^4$  라디칼 중 하나는 또한  $NR^d$ 이고, 여기서  $R^b$  및  $R^d$  라디칼은 함께 측면 결합 사이에 2 내지 5 개의 원자를 가진 다리결합 기이다.
- [0386] 적절한 킬렌은, 예를 들면 본 명세서에서 참고 인용하는 W02007/074137, W02007/093643 및 W02007/116001(=PCT/EP2007/053330)에 기재되어 있다.
- [0387] 유기 태양 전지에서, 화학식 I의 하나 이상의 본 발명의 화합물을 포함하는 반도체 물질의 조합을 사용하는 것이 특히 바람직하다.
- [0388] 전술한 모든 반도체 물질도 도핑될 수 있다. 특정 구체예에서, 본 발명의 유기 태양 전지에 화학식 I의 화합물 및/또는 (존재한다면) 이와 상이한 다른 반도체 물질이 하나 이상의 도펀트와 조합하여 이와 같이 사용된다. n형 반도체로서 화합물 I의 사용에 적절한 도펀트는, 예를 들면 피로닌 B 및 로다민 유도체이다.
- [0389] 또한, 본 발명은 화학식 I의 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 발광 다이오드(OLED)에 관한 것이다.
- [0390] 유기 발광 다이오드는 대체로 복수 개의 층으로부터 형성된다. 이들은 1. 애노드, 2. 정공 수송층, 3. 발광층, 4. 전자 수송층 및 5. 캐소드를 포함한다. 또한, 유기 발광 다이오드가 언급된 모든 층을 갖지 않는 것도 가능한데, 예를 들면 층(1)(애노드), (3)(발광층) 및 (5)(캐소드)를 포함하는 유기 발광 다이오드도 적절하며, 이 경우, 층(2)(정공 수송층) 및 (4)(전자 수송층)의 기능은 인접층이 맡는다. 층(1), (2), (3) 및 (5) 또는 층(1), (3), (4) 및 (5)을 가진 OLED도 또한 적절하다. 유기 발광 다이오드의 구조 및 그 제조 공정은 원칙적으로 당업자에게 공지되어 있으며, 예를 들면 W0 2005/019373으로부터 공지되어 있다. OLED의 개별 층에 적절한 물질은, 예를 들면 W0 00/70655에 개시되어 있다. 이들 문헌의 개시 내용은 본 명세서에 참고 인용된다. 화합물 I은 통상의 기술, 즉 열 증착, 화학 증착 및 기타 기술에 의하여 기상으로부터 증착함으로써 기판에 도포할 수 있다.
- [0391] 본 발명은 하기 비한정적인 실시예를 참고로 상세하게 설명하고자 한다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

#### [0392] 실시예

#### [0393] I. 화학식 I.B의 화합물의 제조

#### [0394] 실시예 1:



#### [0395]

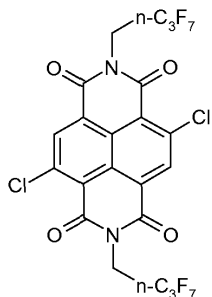
[0396] 이성질체 - 순수 2,6-디클로로-1,4,5,8-나프탈렌테트라카르복실산 이무수물(예 기재된 바와 같이 제조함) 550 mg(1.63 mmol)을 1H,1H-퍼플루오로펜틸아민 1.62 g(6.52 mmol)과 함께 아세트산 25 ml에 가하고, 140℃로 1 시간 동안 가열하였다. 그 후, 아세트산을 감압 하에 제거하고, 고형분을 메탄올로 수 회 세척하였다. 과잉의 반응물을 제거하기 위하여, 생성물을 2%  $NaHCO_3$  용액으로 비등시키고, 용해되지 않은 고형분을 컬럼 크로마토그래피(THF)에 의해 정제하였다. 황색 고형분 420 mg(32%)을 얻었다.

[0397] 3구역 구배 승화에 의해 정제를 행하였으며, 상기 구역은 200℃, 150℃ 및 116℃였다. 300 mg의 로딩으로부터, 승화된 생성물 157 mg을 얻었다.

[0398] 오르토-디클로로벤젠 중의 실시예 4.3의 화합물의 UV-vis 스펙트럼에서는 450 nm 이상의 파장 범위에서 흡광이 없는 것으로 나타났다.

[0399] 표제 화합물은 실온에서 1 중량%의 톨루엔 용해도와 실온에서 3 중량%의 테트라히드로푸란 용해도를 나타내었다.

[0400] 실시예 2:



[0401]

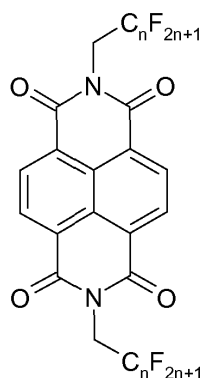
[0402] 실시예 1에 기재된 바와 같이 합성하였으나, 다만 1H,1H-퍼플루오로부틸아민을 사용하였다. 화합물을, 180, 130 및 100℃의 3구역 로를 사용하여 승화에 의해 정제하였다. 표제 화합물 302 mg으로부터 출발하여, 정제된 생성물 177 mg을 얻었다.

[0403] 오르토-디클로로벤젠 중의 실시예 2의 화합물의 UV-vis 스펙트럼에서는 450 nm 이상의 파장 범위에서 흡광이 없는 것으로 나타났다.

[0404] 표제 화합물은 실온에서 0.8 중량%의 톨루엔 용해도와 실온에서 1.5 중량%의 테트라히드로푸란 용해도를 나타내었다.

[0405] 실시예 3:

[0406] R<sup>a</sup> 및 R<sup>b</sup>가 1H,1H-퍼플루오로알킬인 화학식 D의 비스(1H,1H-퍼플루오로알킬)-1,4,5,8-나프탈렌 테트라카르복실산 다이미드의 일반 제조 절차



[0407]

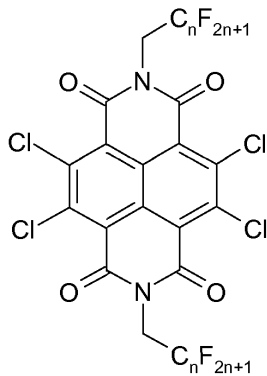
[0408] 상기 식에서, n은 1 내지 30이다.

[0409] N-메틸피롤리돈(NMP) 25 ml, 아세트산 3 ml, 1,4,5,8-나프탈렌테트라카르복실산 이무수물 2.68 g(0.01 mol) 및 1H,1H-퍼플루오로알킬아민 0.05 mol의 혼합물을 90℃로 5 시간 동안 가열하였다. 이어서, 반응 혼합물을 묶은 염산 100 ml에 붓고, 여과하였으며, 물 약 50 ml로 수 회 세척한 다음, 에탄올로 세척한 후, 70℃에서 감압 하에 건조시켰다. 미정제 생성물을 디클로로메탄으로부터 결정화함으로써 정제할 수 있다. 표제 화합물을 65 내지 90%의 수율로 얻었다.

[0410] 실시예 4:

[0411] R<sup>a</sup> 및 R<sup>b</sup>가 1H,1H-퍼플루오로알킬이고, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>가 염소인 화학식 I.B의 사염소화 화합물의 일반 제조 절차





[0412]

[0413]

상기 식에서, n은 1 내지 30이다.

[0414]

클로로술폰산(50 ml) 중의 실시예 3에서 얻은 생성물(약 3.0 내지 5.0 g)을 요오드(1.0 g)와 혼합하고, 가열하였다. 85℃의 온도에서, 1 bar의 염소를 반응 혼합물에 8 내지 16 시간에 걸쳐서 도입하였는데, 상기 염소 가스는 용액의 표면 아래에 도입하였다. 반응 과정은 DC에 의해 모니터링하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 물에 가하였다. 침전된 고형분을 여과해내고, 물로 세척하였으며, 감압 하에 건조시켰다. 표제 화합물의 수율은 62 내지 98% 범위였으며, 순도는 약 90%였다(DC). 표제 화합물을 톨루엔 및/또는 디클로로메탄으로부터 결정화하고/하거나 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다.

[0415]

화합물을 3 구역 로를 사용하여 승화에 의해 더 정제할 수 있다. 예를 들면:

[0416]

실시예 4.3의 화합물: 200, 140 및 100℃에서 승화;

[0417]

실시예 4.4의 화합물: 230, 160 및 100℃에서 승화. 실시예 4.4의 화합물 591 mg으로부터 출발하여, 승화된 화합물 436 mg을 얻었다.

[0418]

오르토-디클로로벤젠 중의 실시예 4.3의 화합물의 UV-vis 스펙트럼에서는 450 nm 이상의 파장 범위에서 흡광이 없는 것으로 나타났다.

[0419]

n = 1, 2, 3 및 4인 표제 화합물에 대한 톨루엔 및 테트라히드로푸란(THF) 용해도를 실온에서 측정하였다.

표 1

[0420]

실시예	n	톨루엔 용해도(중량%)	TF 용해도(중량%)
4.1	1	1	4
4.2	2	2	4
4.3	3	2	4
4.4	4	1.5	4

[0421]

II. 전계 효과 트랜지스터에 사용되는 경우의 성능 결과:

[0422]

모든 성능 테스트를 구배 승화에 의해 정제된 화합물로 수행하였다.

[0423]

II.1 기상으로부터의 증착에 의한 반도체 기관의 제조

[0424]

고도로 도핑된 n형(100) 실리콘 웨이퍼(전도도 < 0.004 Ω<sup>-1</sup>cm)를 소자를 위한 기관으로서 사용하였다. 게이트 유전체로서 SiO<sub>2</sub> 층(단위 면적 커패시턴스 Ci = 10 nF/cm<sup>2</sup>)을 Si 기관으로 3000 Å으로 열 성장시켰다. 그 다음, SiO<sub>2</sub>/Si 기관을 피라냐 용액(H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 및 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>의 7:3 혼합물(부피%))로 30 분 동안 세정하고, 탈이온수로 헹구었으며, 질소 건을 사용하여 건조시키고, 이어서 SiO<sub>2</sub>/Si 웨이퍼를 UV-오존 플라즈마(Jetlight UV0- 클리너 모델 42 -100V)로 20 분 동안 처리하였다. 유기 반도체 박막(45 nm)을, 잘 정의된 온도(표 2 참조)에서 유지시키고, 0.2 내지 0.3 Å/s 범위의 증착 속도와 진공 증착 챔버(Angstrom Engineering Inc., 캐나다 소재)를 이용한 10<sup>-6</sup> torr의 압력으로 Si/SiO<sub>2</sub> 기관으로 증착시켰다. 상부 접촉 배열 내 박막 트랜지스터를 사용하여 물질의 전하 이동도를 측정하였다. 금 소스 전극 및 드레인 전극(통상의 채널 길이는 100 μm이고, 폭/길이 비는 약 20임)을 세도우 마스크에 통과시켜 증착하였다. 소자의 전류-전압(I-V) 특성은 Keithley 4200-SCS 반도체 매개

변수 분석기를 사용하여 측정하였다. 전하 운반 이동도( $\mu$ ), 역치 전압( $V_T$ ) 및 온-투-오프 전류비( $I_{on}/I_{off}$ )는 표준 절차를 이용하여 소스-드레인 전류( $I_d$ ) 대 게이트 전압( $V_g$ ) 특성으로부터 추출하였다. 이동도는  $(I_{DS})^{1/2}$  대  $V_g$ 의 플롯의 기울기로부터 포화 규정에서 결정하였다.

[0425] 표면 처리(임의)

[0426] OTS-V

[0427]  $SiO_2$  코팅 웨이퍼의 세정 후,  $SiO_2/Si$  기판을 트리클로로에틸렌 중의 옥타데실트리메톡시실란(OTS)의 3 mM 용액으로 스핀 코팅한 다음, 암모니아 증기로 포화된 환경에 12 시간 동안 놓은 후, 초음파 세정하고, 이어서 세척 및 건조시켰다. 최종적으로, 유기 반도체를 전술한 바와 같이 증착시켰다.

표 2

질소 분위기에서 측정된 다양한 기판 온도( $T_{sub}$ )에서 화학식 I.B의 화합물에 대한 전계 효과 이동도( $\mu$ ), 온/오프 비( $I_{on}/I_{off}$ ) 및 역치 전압( $V_t$ )					
실시예로부터의 화합물	$T_{sub}$ [°C]	기판	$N_2$ 분위기		
			$\mu$ ( $cm^2 V^{-1} s^{-1}$ ) <sup>a</sup>	$I_{on}/I_{off}$	$V_t$ (V)
1	70	OTS	$1.12 \pm 0.10$ (1.26) <sup>b</sup>	$(2.2 \pm 0.9) \times 10^7$	$15 \pm 2$
2	50	OTS	$0.65 \pm 0.16$ (0.85)	$(2.2 \pm 0.8) \times 10^6$	$29 \pm 4$
	50	Bare	$0.70 \pm 0.09$ (0.86)	$(5.3 \pm 1.3) \times 10^5$	$20 \pm 1$

[0429] <sup>a</sup> 3 개 이상의 소자에 대해 얻은 평균치. <sup>b</sup> 기록된 최대 이동도

표 3

주변 공기에서 측정된 다양한 기판 온도( $T_{sub}$ )에서 화학식 I.B의 화합물에 대한 전계 효과 이동도( $\mu$ ), 온/오프 비( $I_{on}/I_{off}$ ) 및 역치 전압( $V_t$ )					
실시예로부터의 화합물	$T_{sub}$ [°C]	기판	$N_2$ 분위기		
			$\mu$ ( $cm^2 V^{-1} s^{-1}$ ) <sup>a</sup>	$I_{on}/I_{off}$	$V_t$ (V)
1	70	OTS	$1.32 \pm 0.10$ (1.43) <sup>b</sup>	$(5.3 \pm 0.6) \times 10^7$	$23 \pm 2$
2	50	OTS	$0.61 \pm 0.15$ (0.80)	$(1.9 \pm 0.9) \times 10^6$	$39 \pm 4$
	50	Bare	$0.75 \pm 0.13$ (0.91)	$(3.8 \pm 1.7) \times 10^5$	$25 \pm 2$

[0431] <sup>a</sup> 3 개 이상의 소자에 대해 얻은 평균치. <sup>b</sup> 기록된 최대 이동도

[0432] II.2 용액 전단 침착에 의한 반도체 기판의 제조

[0433] 고도로 도핑된 n형 Si(100) 웨이퍼(< 0.004  $\Omega cm$ )를 기판으로서 사용하였다. 게이트 유전체로서 300 nm  $SiO_2$  층(단위 면적 당 커패시턴스  $C_i = 10$  nF/ $cm^2$ )을 Si 기판으로 열 성장시켰다. 이 웨이퍼를 피라냐 용액,  $H_2SO_4$ 와  $H_2O_2$ 의 7:3 부피 혼합물 중에서 세정하고, 탈이온수로 행군 다음,  $N_2$ 에 의해 건조시켰다.  $SiO_2/Si$  기판 상의 페닐트리클로로실란(PTS) 처리된 표면은 다음 절차에 의해 얻었다: 세정  $SiO_2/Si$  기판을 80°C 톨루엔 중의 3 중량 % PTS 용액에 밤새도록 침지시켰다. 그 다음, 기판을 톨루엔, 아세톤, 이소프로판올로 행구고, 질소 스트림으로 건조시켰다. PTS 처리  $SiO_2/Si$  기판의 접촉각은 대략 70° 였다. 유기 반도체 박막을 용액 전단법에 의하여  $SiO_2/Si$  기판에 침착시켰다. 용액 전단 박막은 후술되는 바와 같이 제조하였다: 이 샘플을 밤새도록 70°C에서 건조시킨 후, 40 nm 금 접촉부를 필름에 증착시켜서 50  $\mu m$  채널 길이(L) 및 W/L 비 대략 20을 가진 소자를 제작하였다. OTFT 전사 및 출력 특성은 Keithley 4200 반도체 매개변수 분석기(Keithley Instruments, 미국 오하이

오주 클리블랜드 소재)를 사용하여  $N_2$  충전 글로브 박스에서 기록하였다. 공기 안정성에 대해서, 샘플을 또한 공기에 노출시킨 후 시간의 함수로서 모니터하였다. 달리 설명하지 않는다면, 소자는 전단 방향과 평행한 채널 길이를 가진다.

[0434] 용액 전단:

[0435] 화합물을 오르토-디클로로벤젠( $5$  또는  $10 \text{ mg ml}^{-1}$ )에 용해시키고, 용액을 고온점 상에 놓인 웨이퍼 기판에 적가하였다. PTS로 처리된 소수성  $SiO_2/Si$  웨이퍼를 용액 액적의 상부에 놓았다. 상부 웨이퍼를 일정 속도로 당겨서 용액에 전단을 인가하였다. 전단 속도:  $0.0086 \text{ mm/s}$ ; 온도:  $126^\circ\text{C}$

표 4

[0436]

용액 전단 방법(용매: 오르토-디클로로벤젠)에 의해 침착된 화학식 I.B의 화합물의 전기 특성					
실시예로부터의 화합물	$T_{\text{sub}}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	최대 이동도 [ $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]	이동도 [ $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]	평균 온/오프	$V_t(\text{V})$
1	126	$6.50 \times 10^{-2}$	$(4.50 \pm 2.16) \times 10^{-2}$	$1.92 \times 10^5$	$-36 \pm 13$
2	126	$2.16 \times 10^{-1}$	$(1.73 \pm 0.60) \times 10^{-1}$	$2.65 \times 10^5$	$-23 \pm 10$
4.3	126	$3.99 \times 10^{-2}$	$(2.20 \pm 1.20) \times 10^{-2}$	$1.03 \times 10^5$	$2 \pm 3$
4.4	126	$5.66 \times 10^{-2}$	$(3.66 \pm 0.56) \times 10^{-2}$	$2.28 \times 10^4$	$39 \pm 4$

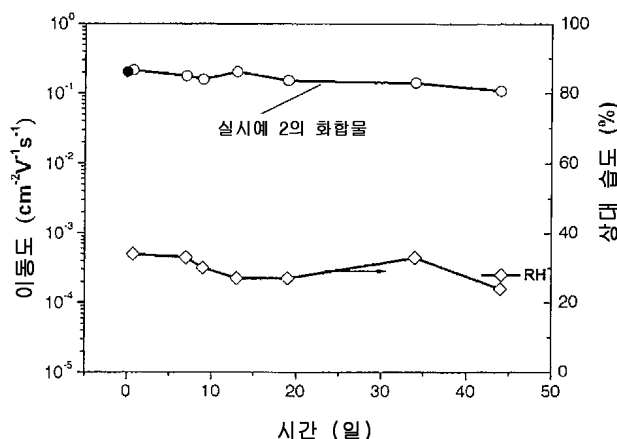
[0437]  $T_{\text{sub}} = T$  기판

[0438] 평균치를 4 개 이상의 소자로부터 얻었다.

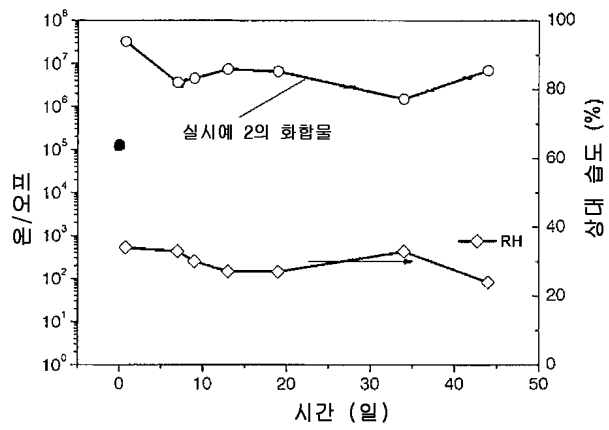
[0439] 연구된 분자의 공기 안정성 테스트는 이동도, 온/오프 비율 및 역치 전압( $V_t$ )을 시간의 함수로서 모니터하였다. 공기 중의 OTFT의 전기 특성의 변동은 흔히 상대 습도의 영향에 기인한다. 1, 2 및 4.3의 평균 이동도는 1 개월 반 동안 공기에 노출시킨 후, 각각  $4.50 \times 10^{-2}$ ,  $1.73 \times 10^{-1}$ ,  $2.20 \times 10^{-2}$ 에서  $1.88 \times 10^{-2}$ ,  $1.09 \times 10^{-1}$ ,  $8.63 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ 로 약간 감소하였다. 50 일의 시간 동안 상대 습도에 따른 공기 중의 실시예 2의 화합물의 용액 전단 침착에 의해 제조된 OTFT의 전기 특성의 변동은 도 1a(이동도) 및 도 1b(온/오프)에 나타낸다. 도 1c는 공기 중에서 역치 전압과 시간(50 일) 간의 상관관계를 보여준다. 도 1a, 1b, 및 1c에서, 각각의 경우에서 흑색 원은 질소 글로브 박스 내 전기 성능에 해당하고, RH는 상대 습도를 의미한다.

## 도면

### 도면1



도면1b



도면1c

