

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2025年1月16日(16.01.2025)



(10) 国際公開番号

WO 2025/013902 A1

(51) 国際特許分類:

G02B 5/30 (2006.01) C08F 2/44 (2006.01)
C07F 7/08 (2006.01) C08G 77/00 (2006.01)
C07F 7/10 (2006.01) C08L 83/00 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/024984

(22) 国際出願日: 2024年7月10日(10.07.2024)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

特願 2023-113697 2023年7月11日(11.07.2023) JP
特願 2023-113782 2023年7月11日(11.07.2023) JP
特願 2023-169664 2023年9月29日(29.09.2023) JP
特願 2023-169671 2023年9月29日(29.09.2023) JP
特願 2023-219204 2023年12月26日(26.12.2023) JP
特願 2024-046680 2024年3月22日(22.03.2024) JP

(71) 出願人: 富士フイルム株式会社 (FUJIFILM CORPORATION) [JP/JP]; 〒1068620 東京都港区西麻布2丁目2番30号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 稲田 寛(INADA Hiroshi); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 大窪 恵(OKUBO Megumi); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 町田 崇(MACHIDA Takashi); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 山本 愛子(YAMAMOTO Aiko); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 小玉 啓祐(KODAMA Keisuke); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 後藤 亮司(GOTO Ryoji); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 岸野 真道(KISHINO Masamichi); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP).

(54) Title: COMPOSITION, OPTICALLY ANISOTROPIC FILM, AND COMPOUND

(54) 発明の名称: 組成物、光学異方性膜、化合物

(57) Abstract: The present invention addresses the problem of providing a composition capable of forming an optically anisotropic film in which visibility unevenness and alignment unevenness are suppressed. A composition according to the present invention contains: a silicon-containing compound selected from the group consisting of compounds A that satisfy requirements (a1)-(a3) and compounds B that satisfy requirements (b1)-(b4); and a liquid crystal compound. Requirement (a1): The value obtained by dividing the total number of methyl groups bound to a silicon atom within the molecule by the molecular weight of the compound is 0.0140 or more. Requirement (a2): Being represented by $A-(Z^{a1}-Y^{a1}-(X^{a1})_m)_n$. Requirement (a3): Having a molecular weight of 500-8000. Requirement (b1): The value obtained by dividing the total number of methyl groups bound to a silicon atom within the molecule by the molecular weight of the compound is 0.0140 or more. Requirement (b2): Having two or more groups represented by $-L^{b1}-X^{b1}$. Requirement (b3): Having a partial structure represented by $*(Z^{b1}-Y^{b1})_s-W^{b1}$. Requirement (b4): Having a molecular weight of 500-8000.

(57) 要約: 本発明は、視認ムラ及び配向ムラが抑制された光学異方性膜を形成できる、組成物の提供を課題とする。本発明の組成物は、要件(a1)～(a3)を満たす化合物A及び要件(b1)～(b4)を満たす化合物Bからなる群から選択されるケイ素含有化合物と、液晶化合物とを含む。要件(a1): 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。要件(a2): $A-(Z^{a1}-Y^{a1}-(X^{a1})_m)_n$ で表される。要件(a3): 分子量が500～8000である。要件(b1): 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。要件(b2): $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基を2つ以上有する。要件(b3): $*(Z^{b1}-Y^{b1})_s-W^{b1}$ で表される部分構造を有する。要件(b4): 分子量が500～8000である。



(74) 代理人: 伊 東 秀 明, 外 (ITO H Hideaki et al.);
〒1010032 東京都千代田区岩本町 2 丁目 3 番 3
号 ザイマックス岩本町ビル 6 階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保
護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA,
BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN,
CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC,
EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR,
HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG,
KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU,
LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY,
MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL,
PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK,
SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA,
UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保
護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS,
MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG,
ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU,
TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ,
DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS,
IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT,
RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF,
CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE,
SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第21条(3))

明 細 書

発明の名称：組成物、光学異方性膜、化合物

技術分野

[0001] 本発明は、組成物、光学異方性膜、及び、化合物に関する。

背景技術

[0002] 液晶化合物を含む組成物を用い、液晶化合物を所定の配向状態に配向させることにより形成された光学異方性膜は、光学補償シート等の種々の用途に用いられている。液晶化合物を含む組成物は、支持体側からの配向規制力が弱まる空気界面側から液晶化合物の配向性を規制し得る配向剤を含む場合があり、このような配向剤としては、従来、表面自由エネルギーが低く表面に偏在し易い、パーフルオロアルキル鎖を有するフッ素系配向剤が広く使用されている。しかしながら、昨今、環境汚染の観点からP F A Sフリーの代替素材が求められており、ケイ素系配向剤がその代替品として期待されている。

[0003] 例えば、ケイ素を含む部位を有する液晶化合物として、特許文献1には、所定のケイ素含有構造部位と、所定のメソゲン部位とを有する化合物が開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：特開平8－113577号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005] 上記のような配向剤に求められる性能としては、上記のような配向剤を含む組成物により形成される膜の視認ムラの抑制、及び、液晶化合物の配向ムラの抑制が挙げられる。なお、上記視認ムラとは、膜厚ムラ等に起因して、色味のムラが視認される現象を意図する。

本発明者らが、上記文献に記載の化合物を用いて光学異方性膜を形成した

ところ、視認ムラの抑制及び配向ムラの抑制の両立が達成できなかった。

[0006] そこで、本発明は、視認ムラ及び配向ムラが抑制された光学異方性膜を形成できる、組成物の提供を課題とする。

また、本発明は、上記組成物により形成される光学異方性膜、及び、上記組成物に係る化合物を提供することも課題とする。

課題を解決するための手段

[0007] 本発明者らは、上記課題を解決すべく鋭意検討した結果、以下の構成により課題を解決できることを見出した。

[0008] [1] 後述する要件 (a 1) ~ (a 3) を満たす化合物 A 及び後述する要件 (b 1) ~ (b 4) を満たす化合物 B からなる群から選択されるケイ素含有化合物と、液晶化合物とを含む、組成物。

[2] 上記化合物 A が、後述する式 (A 2) で表される化合物又は後述する式 (A 3) で表される化合物である、[1] に記載の組成物。

[3] 上記化合物 B が、後述する式 (B 1) で表される化合物である、[1] 又は [2] に記載の組成物。

[4] 後述する式 (A 2) において、置換基 T 中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位が、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ であり、

後述する式 (A 3) において、置換基 T 中、上記芳香環基を構成する芳香環と結合する部位が、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ である、[2] に記載の組成物。

[5] [1] ~ [4] のいずれか 1 つに記載の組成物を用いて形成された、光学異方性膜。

[6] 後述する要件 (a 1) ~ (a 3) を満たす化合物。

[7] 後述する式 (A 2) 又は式 (A 3) で表される、[6] に記載の化合物。

[8] 上記式 (A 2) において、置換基 T 中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位が、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は

、 $-\text{CO}-\text{O}-\text{NH}-$ であり、

後述する式（A3）において、置換基T中、上記芳香環基を構成する芳香環と結合する部位が、 $-\text{CO}-\text{O}-$ 、 $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$ 、 $-\text{NH}-\text{CO}-\text{O}-$ 、又は、 $-\text{CO}-\text{O}-\text{NH}-$ である、〔7〕に記載の化合物。

〔9〕 後述する要件（b1）～（b4）を満たす化合物。

〔10〕 後述する式（B1）で表される、〔9〕に記載の化合物。

発明の効果

[0009] 本発明によれば、視認ムラ及び配向ムラが抑制された光学異方性層を形成できる、組成物を提供できる。

また、本発明によれば、上記組成物に係る光学異方性膜及び化合物も提供できる。

発明を実施するための形態

[0010] 以下、本発明について詳述する。

以下に記載する構成要件の説明は、本発明の代表的な実施態様に基づいてなされる場合があるが、本発明はそのような実施態様に制限されない。

[0011] 本明細書において、「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値及び上限値として含む範囲を意味する。

また、本明細書において、ある成分が2種以上存在する場合、その成分の「含有量」は、それら2種以上の成分の合計含有量を意味する。

本明細書において、段階的に記載されている数値範囲において、ある数値範囲で記載された上限値又は下限値は、他の段階的な記載の数値範囲の上限値又は下限値に置き換えてもよい。また、本明細書に記載されている数値範囲において、ある数値範囲で記載された上限値又は下限値は、実施例に示されている値に置き換えてもよい。

本明細書において、2以上の好ましい態様の組み合わせは、より好ましい態様である。

[0012] 本明細書において、特定の符号で表示された置換基及び連結基等（以下、置換基等という）が複数あるとき、又は、複数の置換基等を同時に規定する

ときには、それぞれの置換基等は互いに同一でも異なってもよいことを意味する。このことは、置換基等の数の規定についても同様である。

本明細書において、表記される2価の基（例えば、 $-CO-O-$ ）の結合方向は、特段の断りがない限り、制限されない。例えば、「 $X-Y-Z$ 」なる式で表される化合物中の、 Y が $-CO-O-$ である場合、上記化合物は「 $X-O-CO-Z$ 」であってもよく、「 $X-CO-O-Z$ 」であってもよい。

[0013] 本明細書において、組成物の固形分とは、膜（例えば、硬化物及びフィルム等）を形成する成分を意図し、溶媒は含まれない。ここでいう、膜を形成する成分は、を形成する際に反応（重合）して化学構造が変化する成分でもよい。また、膜を形成する成分であれば、その性状が液体状であっても、固形分とみなす。

[0014] 本明細書において、特段の断りがない限り、分子量分布がある場合の分子量は、重量平均分子量（ M_w ）である。本明細書において、重量平均分子量（ M_w ）及び数平均分子量（ M_n ）は、ゲルパーミエーションクロマトグラフィ（GPC）によるポリスチレン換算で求めた値である。

[0015] 本明細書において、 $Re(\lambda)$ および $Rth(\lambda)$ は、それぞれ、波長 λ における面内のレタデーションおよび厚み方向のレタデーションを表す。なお、波長 λ は、特に記載がないときは、550nmとする。

また、本明細書において、 $Re(\lambda)$ および $Rth(\lambda)$ は、AxoScan OPMF-1（オプトサイエンス社製）において、波長 λ で測定した値である。

具体的には、AxoScan OPMF-1にて、平均屈折率（ $(n_x + n_y + n_z) / 3$ ）と膜厚（ $d(\mu m)$ ）を入力することにより、

遅相軸方向（°）

$$Re(\lambda) = RO(\lambda)$$

$$Rth(\lambda) = ((n_x + n_y) / 2 - n_z) \times d$$

が算出される。

なお、 $RO(\lambda)$ は、AxoScan OPMF-1で算出される数値として表示されるものであるが、 $Re(\lambda)$ を意味している。

[0016] [組成物]

以下、本発明の組成物について詳述する。

本発明の組成物（以下、単に「組成物」ともいう。）は、後述する要件（a1）～（a3）を満たす化合物A及び要件（b1）～（b4）を満たす化合物Bからなる群から選択されるケイ素含有化合物と、液晶化合物とを含む。

[0017] 上記構成を有する組成物が本発明の課題を解決できる理由は必ずしも明らかではないが、本発明者らは以下のとおり推測する。

なお、下記推測により、効果が得られる機序が制限されるものではない。換言すれば、下記以外の機序により効果が得られる場合でも、本発明の範囲に含まれる。

液晶化合物を含む組成物を用いて光学異方性膜を形成するに際し、化合物A及び化合物Bから選択される所定のケイ素含有化合物を含むことにより、視認ムラ及び配向ムラが抑制できる。

具体的には、ケイ素含有化合物は、要件（a2）及び要件（b2）に示されるように塗膜表面に偏在しやすいケイ素含有部位を有する。更に、要件（a1）及び要件（b1）に示すようにケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が所定値以上であり、また、要件（a3）及び要件（b4）に示すように特定化合物が所定の分子量であることにより、ケイ素含有化合物が効率的に塗膜表面に偏在し、ケイ素含有化合物が表面において組成物の効率的に表面張力を低下させることができる。結果として、形成される膜の視認ムラが抑制されたと推測される。

また、ケイ素含有化合物は、要件（a2）及び要件（b3）に示すような所定の連結基及び環構造を含む構造を有することにより、液晶化合物の配向性に寄与できる。更に、上述した通りケイ素含有化合物が表面に効率的に偏在することにより、層内において液晶化合物間に点在して配向を乱すことが

ない。結果として、形成される膜の配向ムラも抑制できると推測される。

以下、視認ムラが抑制された光学異方性膜を形成できることを単に「視認ムラ抑制性能が優れる」、配向ムラが抑制された光学異方性膜を形成できることを単に「配向ムラ抑制性能が優れる」ともいい、視認ムラ及び配向ムラの少なくとも一つがより抑制された光学異方性膜を形成できることを単に「本発明の効果がより優れる」ともいう。

[0018] 以下、組成物が含む各成分について詳述する。

[0019] [ケイ素含有化合物]

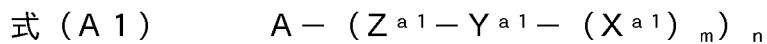
組成物は、化合物A及び化合物Bからなる群から選択されるケイ素含有化合物を含む。

[0020] <化合物A>

化合物Aは、要件(a1)～(a3)を満たす。

(a1) 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。

(a2) 式(A1)で表される。



式(A1)中、Aは、置換基を有していてもよい、芳香環若しくは脂肪族環、又は、 $A^1 - L^A - A^2$ で表される基を表す。 A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。 L^A は、 $-C \equiv C-$ 又は $-CH_2-$ を表す。

Z^{a1} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。

Y^{a1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

X^{a1} は、それぞれ独立に、 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基を表す。

nは2以上の整数を表す。

mは、それぞれ独立に、1以上の整数を表す。

(a 3) 分子量が500～8000である。

以下、各要件について詳述する。

[0021] (要件(a 1))

(a 1) 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。

ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が0.0140未満である場合、ケイ素含有化合物の塗膜表面への偏在度が低く、配向ムラ及び視認ムラが劣る点で好ましくない。

上記ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値は、具体的には、(ケイ素原子に直接結合したメチル基の合計数) / (分子量) の計算式により求められる。例えば、化合物の分子量が2000.00であり、化合物が、ケイ素原子とメチル基が結合した構造として $-Si(CH_3)_3$ の構造のみを4つ有する場合、ケイ素原子に結合したメチル基の数は12であるから、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値は、 $12 / 2000.00 = 0.006$ と求められる。

[0022] 化合物Aにおいて、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値は、本発明の効果がより優れる点で、0.0140～0.0280が好ましく、0.0140～0.0245がより好ましく、0.0150～0.0245が更に好ましく、0.0170～0.0245が特に好ましい。

[0023] (要件(a 2))

(a 2) 式(A 1)で表される。

式(A 1) $A - (Z^{a1} - Y^{a1} - (X^{a1})_m)_n$

[0024] 式(A 1)中、Aは、置換基を有していてもよい、芳香環若しくは脂肪族環、又は、 $A^1 - L^A - A^2$ で表される基を表す。Aとしては、配向ムラ抑制性能がより優れる点で、置換基を有していてもよい芳香環又は $A^1 - L^A - A^2$ で

表される基が好ましく、置換基を有していてもよい芳香環がより好ましい。

上記芳香環の環員原子数は、5～10が好ましく、5又は6がより好ましい。

上記芳香環は、芳香族炭化水素環及び芳香族複素環のいずれであってもよく、芳香族炭化水素環が好ましい。上記芳香族複素環が有するヘテロ原子の数は、4以下が好ましく、2以下がより好ましい。なかでも、配向ムラ抑制性能がより優れる点で、上記芳香族複素環が有する窒素原子の数が、2以下であることが好ましい。

また、上記芳香環は、単環であってもよく、縮環であってもよく、2つの芳香環が単結合で連結した構造であってもよい。上記縮環における縮合環の数は、2又は3が好ましく、2がより好ましい。2つの芳香環が単結合で連結した構造は、より具体的には、 $A_r - A_r$ (A_r は芳香環)で表される構造であり、例えば、ビアリール構造が挙げられる。

上記芳香族炭化水素環としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナンスロリン環、及び、ビフェニル環等が挙げられる。上記芳香族複素環としては、ピリジン環、ピリダジン環、イミダゾール環、チオフェン環、キノリン環、イソキノリレン環、オキサゾール環、チアゾール環、オキサジアゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾチアジアゾール環、フタルイミド環、チエノチアゾール環、チアゾロチアゾール環、チエノチオフェン環、及び、チエノオキサゾール環等が挙げられる。芳香環としては、ベンゼン環、ナフタレン環、又は、ビフェニル環が好ましく、ベンゼン環がより好ましい。

上記脂肪族環の環員原子数は、5～10が好ましく、5又は6がより好ましい。

上記脂肪族環は、脂肪族炭化水素環及び脂肪族複素環のいずれであってもよく、脂肪族炭化水素環が好ましい。また、上記脂肪族環は、単環であってもよく、縮環であってもよく、2つの脂肪族環が単結合で連結した構造であってもよい。上記縮環における縮合環の数は、2又は3が好ましく、2がよ

り好ましい。2つの脂肪族環が単結合で連結した構造は、より具体的には、 $C_y - C_y$ (C_y は脂肪族環)で表される構造であり、例えば、ビスクロアルカン構造が挙げられる。

脂肪族炭化水素環としては、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、シクロヘプタン環、シクロオクタン環、シクロノナン環、シクロドデカン環、シクロドコサン環、及び、ビスクロヘキサン環等が挙げられる。脂肪族複素環としては、ピロリジン環、オキサラン環、チオラン環、ピペリジン環、テトラヒドロピラン環、チアン環、ピペラジン環、及び、モルホリン環等が挙げられる。脂肪族環としては、シクロヘキサン環又はビスクロヘキサン環が好ましく、シクロヘキサン環がより好ましい。

上記芳香環及び脂肪族環が有していてもよい置換基としては、例えば、ハロゲン原子を有していてもよいアルキル基、 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基、アルキルエステル基、アシル基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アルキルオキシカルボニル基、カルバモイル基、アシルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基が挙げられ、アルキル基、 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基、アルキルエステル基、アルコキシ基、又は、アシル基が好ましく、炭素数1～4の直鎖状アルキル基、 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基、メチルエステル基、メトキシ基、又は、アセチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、メトキシ基、又は、メチルエステル基が更に好ましい。なお、上記 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基の定義及び好適態様は、後述する X^{a1} で表される基と同じである。

A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。上記置換基を有していてもよい芳香環及び置換基を有していてもよい脂肪族環の定義及び好適態様は、 A で表される置換基を有していてもよい芳香環及び置換基を有していてもよい脂肪族環と同じである。また、 A^1 及び A^2 は、単環又は縮環であることが好ましく、単環であることがより好ましい。

L^A は、 $-C \equiv C-$ 又は $-CH_2-$ を表す。

Aが $A^1-L^A-A^2$ で表される基である場合、 A^1 が少なくとも1つの $-Z^{a1}-Y^{a1}-(X^{a1})_m$ で表される基と結合し、かつ、 A^2 が少なくとも1つの $-Z^{a1}-Y^{a1}-(X^{a1})_m$ で表される基と結合することが好ましい。

[0025] 式(A1)中、 Z^{a1} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基を表す。つまり、 Z^{a1} は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、若しくは、 $-CO-$ を表すか、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。 Z^{a1} で表される基が上記基であることにより、液晶化合物の配向を乱しにくく、配向ムラ抑制性能が優れる。

R^N で表される置換基としては、例えば、アルキル基、アルケニル基、及び、アリール基が挙げられ、アルキル基が好ましく、炭素数1～4の直鎖状アルキル基がより好ましく、メチル基又はエチル基が更に好ましい。

上記鎖状のアルキレン基は、直鎖状及び分岐鎖状のいずれであってもよい。

上記鎖状のアルキレン基の炭素数は、1～6が好ましく、1～4がより好ましく、1～3が更に好ましい。

Z^{a1} で表される基としては、本発明の効果がより優れる点で、炭素数1～3の鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NR^N-CO-$ 、 $-NR^N-CO-O-$ 、 $-CO-NR^N-$ 、又は、 $-NR^N-CO-NR^N-$ が好ましく、炭素数1～3の鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 、 $-CO-O-$ 、又は、 $-NH-CO-O-$ がより好ましく、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、又は、 $-NH-CO-O-$ が更に好ましく、 $-O-$ 又は $-CO-O-$ が特に好ましい。

[0026] 式(A1)中、 Y^{a1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

上記置換基を有していてもよい、芳香環及び脂肪族環の定義及び好適態様

は、上述したAで表される置換基を有していてもよい芳香環及び置換基を有していてもよい脂肪族環の定義及び好適態様と同じである。

Y^{a1} で表される芳香環は、単環又は縮環であることも好ましく、単環であることがより好ましい。また、 Y^{a1} で表される脂肪族環は、単環又は縮環であることも好ましく、単環であることがより好ましい。

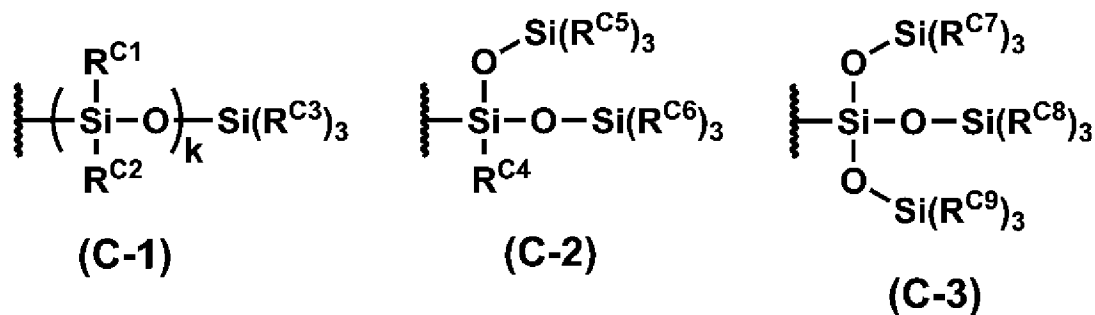
[0027] 式(A1)中、 X^{a1} は、それぞれ独立に、 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基を表す。

X^{a1} で表される基が有するケイ素原子の数は2以上であり、3以上が好ましく、4以上がより好ましく、5以上が更に好ましい。上限は特に制限されず、12以下の場合が多い。

X^{a1} は、なかでも、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造を有する1価の置換基Sを有することが好ましい。ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造とは、ケイ素原子が $Si-O-Si$ 構造を形成しながら3つ以上連結した構造を意図し、直鎖状及び分岐鎖状のいずれであってもよい。

上記置換基Sとしては、例えば、下記式(C-1)～式(C-3)で表される1価の基が挙げられ、式(C-2)で表される基又は式(C-3)で表される基が好ましく、式(C-3)で表される基がより好ましい。

[0028] [化1]



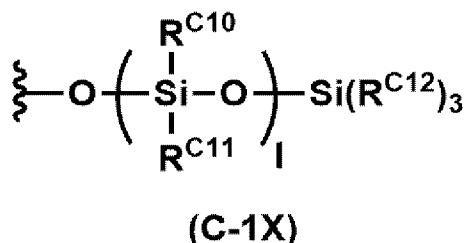
[0029] 式(C-1)中、 $R^{C1} \sim R^{C3}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい炭素数1～10のアルキル基を表す。

式(C-2)中、 R^{C4} は、置換基を有していてもよい炭素数1～10のアルキル基を表す。 R^{C5} 及び R^{C6} は、それぞれ独立に、置換基を有していても

よい炭素数 1～10 のアルキル基又は式 (C-1X) で表される基を表す。

式 (C-3) 中、 $R^{C7} \sim R^{C9}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい炭素数 1～10 のアルキル基又は式 (C-1X) で表される基を表す。

[0030] [化2]



[0031] 式 (C-1X) 中、 $R^{C10} \sim R^{C12}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい炭素数 1～10 のアルキル基を表す。I は、0～20 の整数を表す。

[0032] 式 (C-1) ～式 (C-3)、及び、式 (C-1X) 中、 $R^{C1} \sim R^{C12}$ で表される炭素数 1～10 のアルキル基は、鎖状及び環状のいずれであってもよく、鎖状が好ましく、直鎖状がより好ましい。

上記炭素数 1～10 のアルキル基の炭素数は、1～6 が好ましく、1～3 がより好ましい。

上記炭素数 1～10 のアルキル基は、置換基を有しないことも好ましい。

[0033] $R^{C1} \sim R^{C4}$ 及び $R^{C10} \sim R^{C12}$ としては、なかでも、メチル基が好ましい。
 $R^{C5} \sim R^{C9}$ としては、なかでも、メチル基又は式 (C-1X) で表される基が好ましい。

[0034] 式 (C-1) 中、k は、2～20 の整数を表す。

k としては、本発明の効果がより優れる点で、3～10 の整数が好ましく、3～8 の整数がより好ましい。

[0035] 式 (C-1X) 中、I は、0～20 の整数を表す。

I としては、本発明の効果がより優れる点で 0～10 の整数が好ましく、0～8 の整数がより好ましい。

[0036] X^{a1} で表される基が有する置換基 S の数は、1 以上が好ましく、1～6 がより好ましく、1～3 が更に好ましい。

X^{a1} で表される基としては、例えば、 $-L^x-$ (X^{a2})_xで表される基が挙げられる。 L^x は、 $x+1$ 価の連結基を表す。 X^{a2} は、それぞれ独立に、置換基 S を表す。 x は、1 以上の整数を表す。

x が 1 の場合、 L^x は 2 価の連結基を表す。2 価の連結基としては、例えば、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、又は、これらを組み合わせた基が挙げられる。 R^N は水素原子又は置換基を表す。上記組み合わせた基としては、例えば、鎖状のアルキレン基 $-O-$ 、鎖状のアルキレン基 $-O-CO-$ 、鎖状のアルキレン基 $-NR^N-CO-$ 、及び、鎖状のアルキレン基 $-NR^N-CO-O-$ が挙げられる。また、上記 2 価の連結基としては、上記基と、2 価の芳香環基又は脂肪族環基とを組み合わせた基も挙げられる。

[0037] 式 (A 1) 中、 n は 2 以上の整数を表す。

n は、2～6 の整数が好ましく、2～4 の整数がより好ましく、2 又は 3 が更に好ましい。

[0038] 式 (A 1) 中、 m は 1 以上の整数を表す。

m は、1～6 の整数が好ましく、1～3 の整数がより好ましく、1 又は 2 が更に好ましい。

また、 X^{a1} が、ケイ素原子を 3 つ以上含むシロキサン構造として、 k が 2 である式 (C-1) で表される基、又は、 R^{C5} 及び R^{C6} が炭素数 1～10 のアルキル基である式 (C-2) で表される基を有する場合、 m が、2 以上の整数であることが好ましい。

[0039] (要件 (a 3))

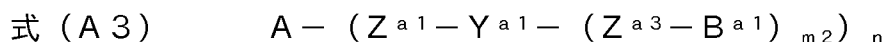
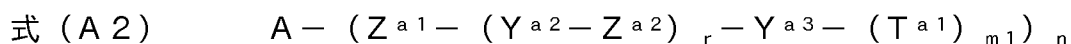
(a 3) 分子量が 500～8000 である。

分子量が 500 未満である場合、ケイ素含有化合物の表面への偏在度が低く、配向ムラ及び視認ムラが劣る点で好ましくない。また、分子量が 8000 超である場合、ケイ素含有化合物が液晶化合物の配向を阻害しやすく、配向ムラ及び視認ムラが劣る点で好ましくない。

化合物 A の分子量は、本発明の効果がより優れる点で、700 以上が好ま

しく、800以上がより好ましい。また、化合物の分子量は、視認ムラ抑制性能がより優れる点で、6000以下が好ましく、4000以下がより好ましい。なかでも、化合物Aの分子量は、視認ムラ抑制性能がより優れる点で、700～6000が好ましく、800～4000がより好ましい。

[0040] 化合物Aは、式(A2)で表される化合物又は式(A3)で表される化合物であることが好ましい。



[0041] 式(A2)及び式(A3)中、A、 Z^{a1} 、 Y^{a1} 、及び、nは、上記式(A1)におけるA、 Z^{a1} 、 Y^{a1} 、及び、nと同義である。

[0042] 式(A2)中、 Z^{a2} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。 R^N の詳細は上述したとおりである。

Z^{a2} で表される基の定義及び好適態様は、 Z^{a1} で表される基の定義及び好適態様と同じである。

[0043] 式(A2)中、 Y^{a2} 及び Y^{a3} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

Y^{a2} 及び Y^{a3} で表される基の定義及び好適態様は、 Y^{a1} で表される基の定義及び好適態様と同じである。

[0044] 式(A2)中、rは、それぞれ独立に、0以上の整数を表す。

rとしては、0～3の整数が好ましく、0又は1がより好ましい。

rが0である場合、 Y^{a3} は式(A1)における Y^{a1} と同義であり、rが1以上の整数である場合、 Z^{a1} と結合する Y^{a2} は式(A1)における Y^{a1} と同義である。

[0045] 式(A2)中、 T^{a1} は、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造を有する、1価の置換基Tを表す。ただし、上記置換基T中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位が、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組

み合わせた基である。

R^N は、水素原子又は置換基を表す。 R^N の詳細は上述したとおりである。

上記置換基Tは、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造として、上述した置換基Sを有することが好ましい。

上記置換基T中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位は、本発明の効果がより優れる点で、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NH-$ 、又は、これらを組み合わせた基が好ましく、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ がより好ましく、 $-CO-O-$ 又は $-O-CO-O-$ が更に好ましい。

また、上記置換基T中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位は、配向ムラ抑制性能がより優れる点で、 $-CO-O-$ 又は $-O-$ であることも好ましい。

置換基T中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位とは、置換基Tにおいて、 Y^{a3} で表される基との結合位置から、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、及び、 $-S-$ とは異なる連結基（例えば、炭化水素基）との間の部位を意図する。

[0046] 上記置換基Tとしては、例えば、 $-Z^{T1}-L^{T1}-(X^{T1})_{m3}$ で表される基が挙げられる。

Z^{T1} は、置換基T中、置換基Tが置換する構造（具体的には、例えば、式(A2)における Y^{a3} で表される基、及び、式(A3)における B^{a1} で表される基の芳香環)と結合する部位であり、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組み合わせた基を表す。

Z^{T1} としては、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NH-$ 、又は、これらを組み合わせた基が好ましく、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ がより好ましく、 $-CO-O-$ 又は $-O-CO-O-$ が更に好ましい。また、 Z^{T1} としては、 $-CO-O-$ 又は $-O-$ も好ましい。

L^{T1} は、 $m3+1$ 価の脂肪族炭化水素基を表す。

上記 $m3+1$ 価の脂肪族炭化水素基の少なくとも1つの炭素原子は、 $-NR^N-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ 、 $-SO-$ 、又は、 $-SO_2-$

で置換されていてもよい。ただし、 Z^{T1} と隣接する炭素原子は置換されない。

上記脂肪族炭化水素基は、鎖状が好ましく、直鎖状がより好ましい。

上記脂肪族炭化水素基の炭素数は、本発明の効果がより優れる点で、1～10が好ましく、1～6がより好ましく、2～4が更に好ましい。

X^{T1} は、上述した置換基Sを表し、式(C-2)で表される基又は式(C-3)で表される基がより好ましく、式(C-3)で表される基が更に好ましい。

$m3$ は、1以上の整数を表し、1～3の整数が好ましく、1又は2の整数がより好ましく、1が更に好ましい。

[0047] 式(A2)中、 $m1$ は、1以上の整数を表す。

$m1$ は、1～6の整数が好ましく、1～3の整数がより好ましく、1又は2が更に好ましい。

[0048] 式(A3)中、 Z^{a3} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基を表す。 R^N は、水素原子又は置換基を表す。 R^N の詳細は上述したとおりである。

Z^{a3} で表される基の定義及び好適態様は、 Z^{a1} で表される基の定義及び好適態様と同じである。

[0049] 式(A3)中、 B^{a1} は、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造を有する1価の置換基Tが1つ以上置換している、1価の芳香環基を表す。ただし、上記置換基T中、上記芳香環基を構成する芳香環と結合する部位が、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組み合わせた基である。

B^{a1} で表される1価の芳香環基を構成する芳香環は、単環又は縮環が好ましく、単環がより好ましい。

上記芳香環は、芳香族炭化水素環及び芳香族複素環のいずれであってもよく、芳香族炭化水素環が好ましい。芳香族炭化水素環及び芳香族複素環の例は、上述したAで表される芳香環として例示した通りであり、なかでも、ベ

ンゼン環が好ましい。

B^{a1} で表される芳香環基が有する置換基Tの定義及び好適態様は、式(A2)における置換基Tと同じである。 B^{a1} で表される芳香環基に置換する置換基Tの数は、1以上であり、1～6が好ましく、1～3がより好ましく、1又は2がより好ましい。

上記芳香環は、置換基Tと異なる置換基を有していてもよい。置換基Tと異なる置換基としては、ケイ素原子を含まない置換基が挙げられ、より具体的には、ハロゲン原子を有していてもよいアルキル基、アルキルエステル基、アシル基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アルキルオキシカルボニル基、カルバモイル基、アシルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基が挙げられる。置換基Tと異なる置換基としては、アルキル基、アルキルエステル基、アルコキシ基、又は、アシル基が好ましく、炭素数1～4の直鎖状アルキル基、メチルエステル基、メトキシ基、又は、アセチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、メトキシ基、又は、メチルエステル基が更に好ましい。

置換基Tが、 B^{a1} で表される芳香環基を構成する芳香環と結合する部位（例えば、 $-Z^{T1}-L^{T1}-(X^{T1})_{m3}$ で表される基における、 Z^{T1} で表される基）は、本発明の効果がより優れる点で、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NH-$ 、又は、これらを組み合わせた基が好ましく、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ がより好ましく、 $-CO-O-$ 又は $-O-CO-O-$ が更に好ましい。また、上記部位は、配向ムラ抑制性能がより優れる点で、 $-CO-O-$ 又は $-O-$ であることも好ましい。

[0050] B^{a1} としては、例えば、 $-Y^{a4}-(T^{a1})_{m4}$ で表される基が挙げられる。

Y^{a4} は、置換基を有していてもよい芳香環を表す。

T^{a1} は、置換基Tを表す。ただし、上記置換基T中、 Y^{a4} と結合する部位が、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組み合わせた基である。

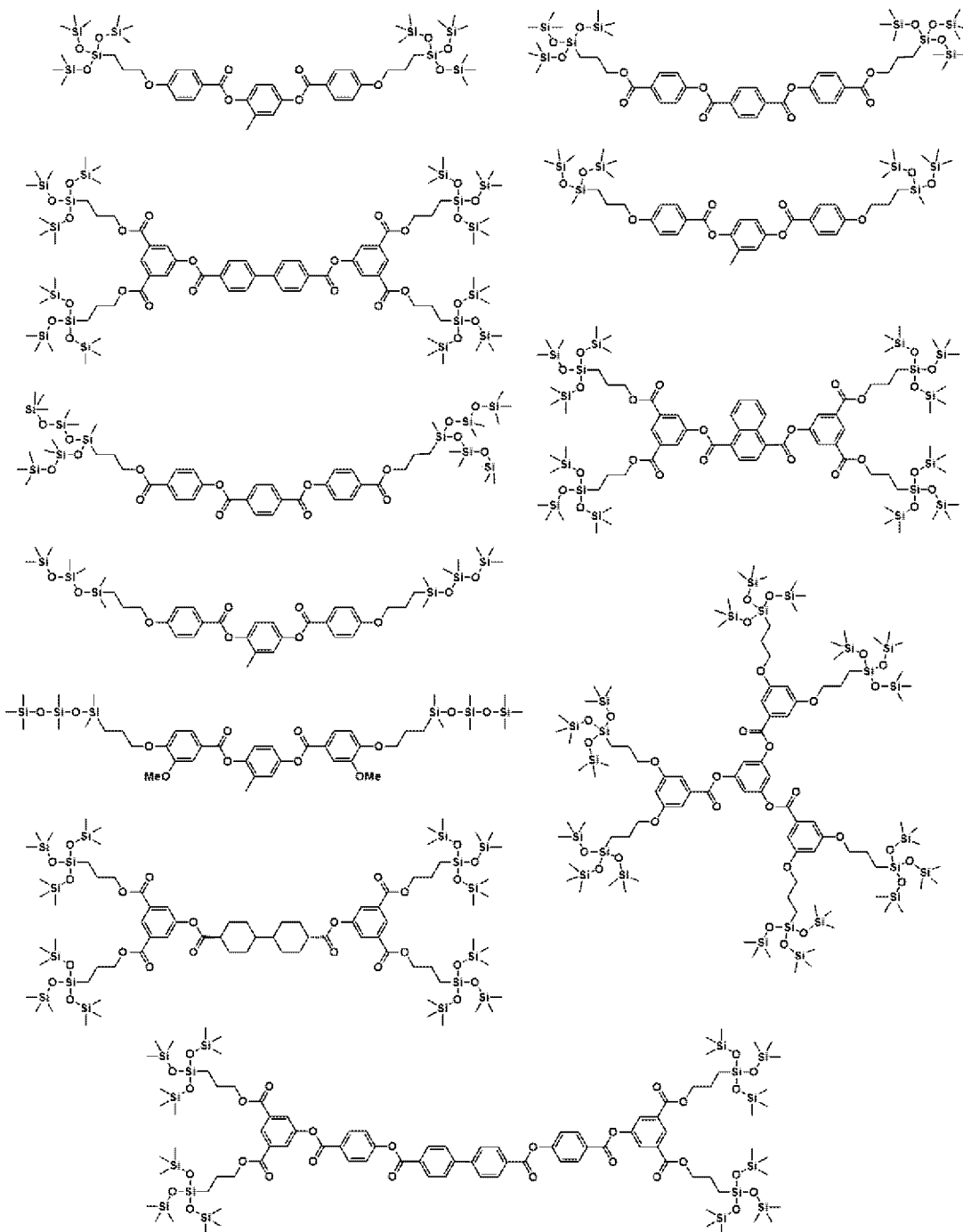
m 4 は、1 以上の整数を表し、1 ～ 6 が好ましく、1 ～ 3 がより好ましく、1 又は 2 がより好ましい。

[0051] 式 (A 3) 中、m 2 は、2 以上の整数を表す。

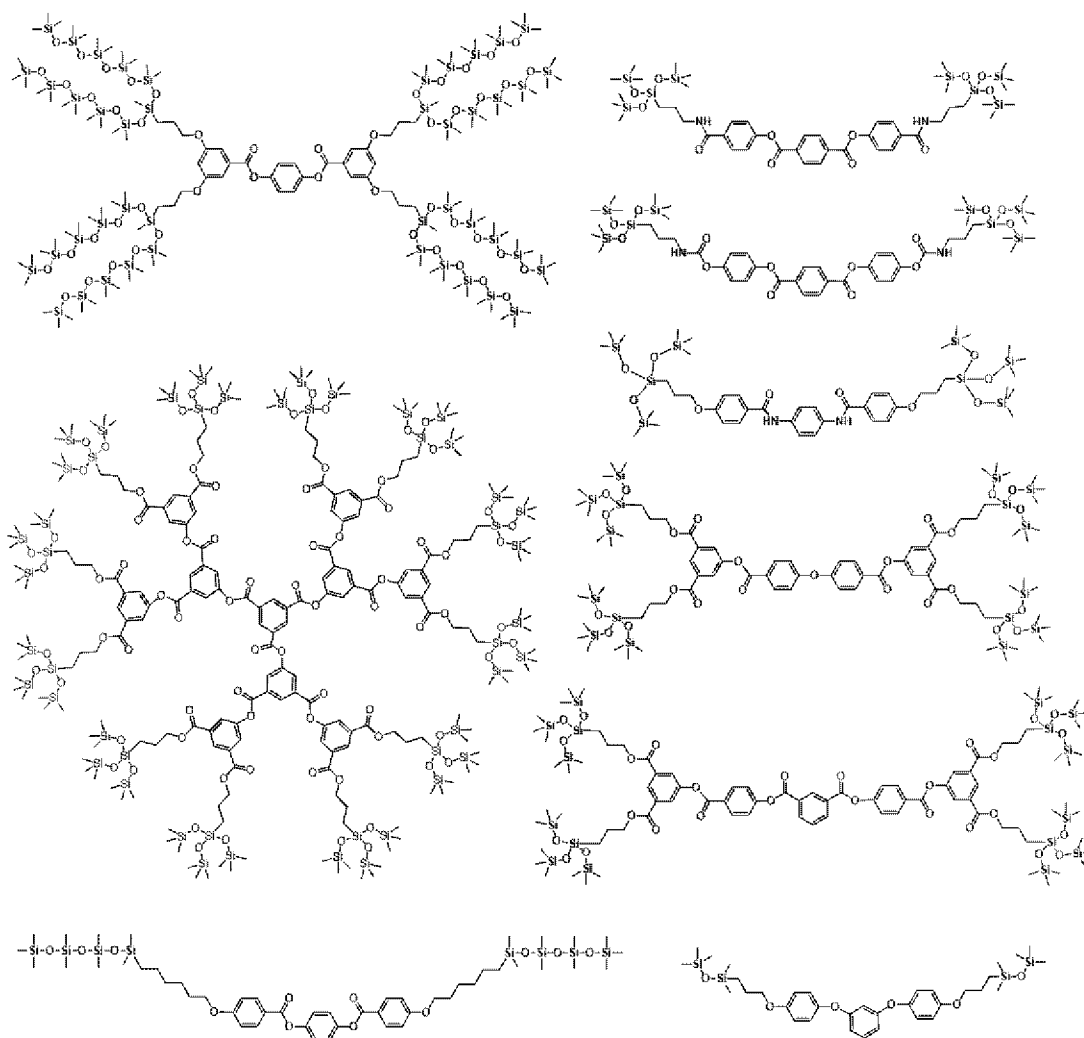
m 2 としては、2 ～ 6 の整数が好ましく、2 又は 3 がより好ましく、2 が更に好ましい。

[0052] 化合物 A としては、例えば、下記の化合物が挙げられる。

[0053] [化3]

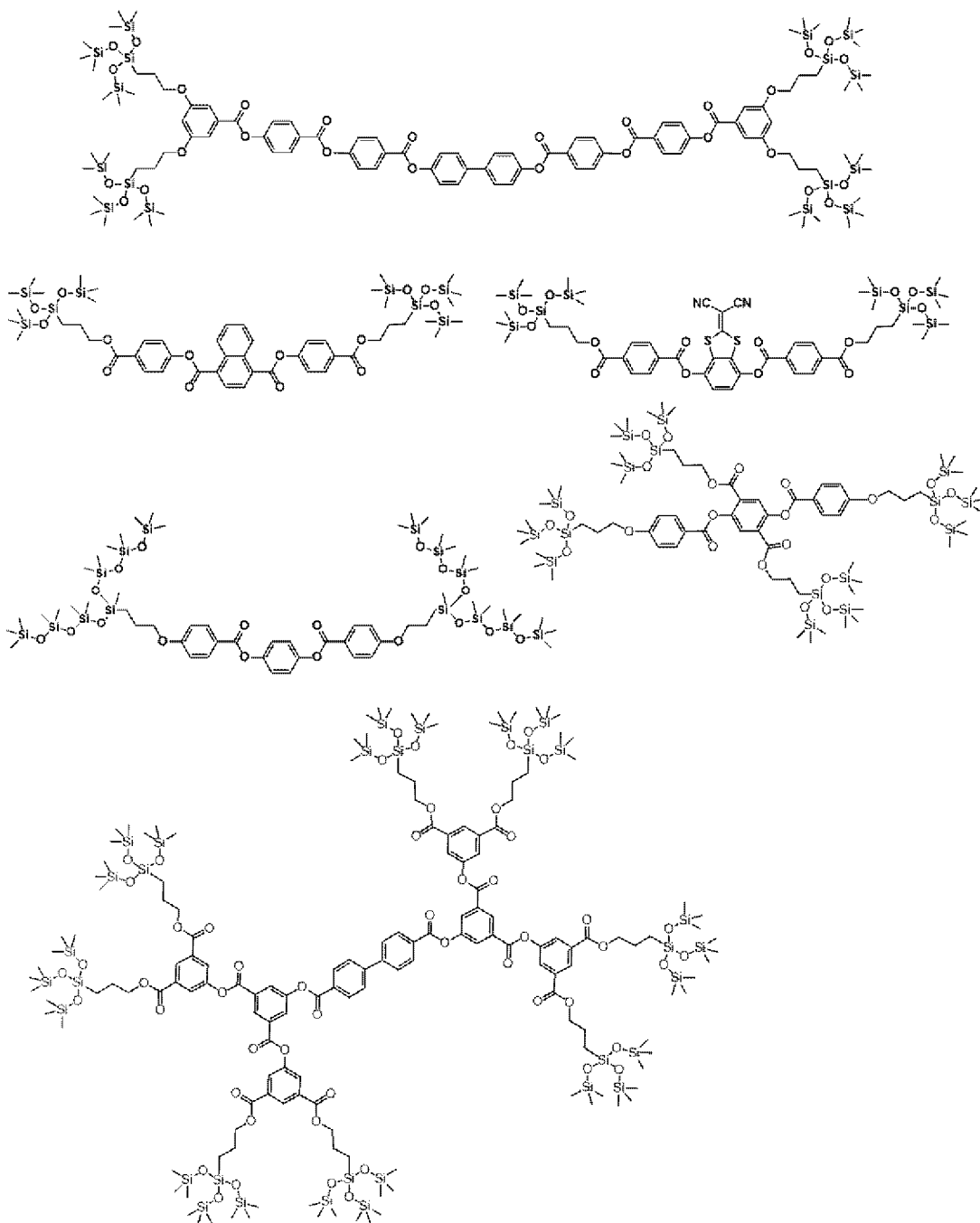


[0054] [化4]



[0055]

[化5]



[0056] <化合物B>

化合物Bは、要件（b1）～（b4）を満たす。

（b1） 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。

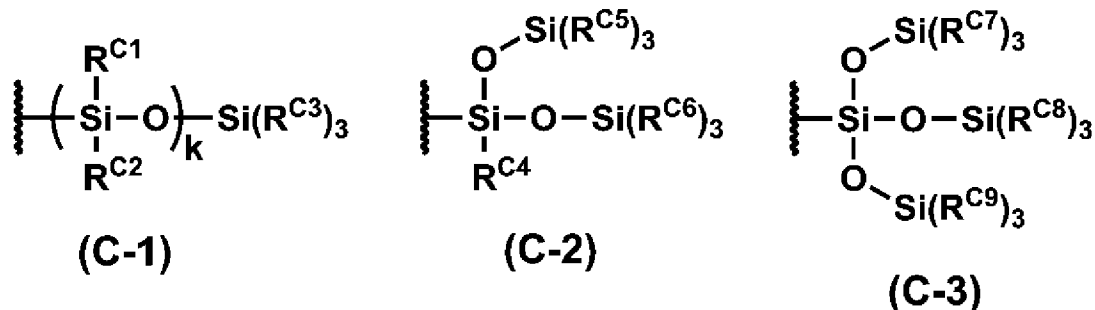
（b2） $-\text{L}^{\text{b1}}-\text{X}^{\text{b1}}$ で表される基を2つ以上有する。

L^{b1} は、それぞれ独立に、ヘテロ原子を有していてもよいアルキレン基又

は－Ｏ－を表す。

X^{b1}は、式（Ｃ－１）～式（Ｃ－３）で表される基からなる群から選択される１価の基を表す。

[0057] [化6]

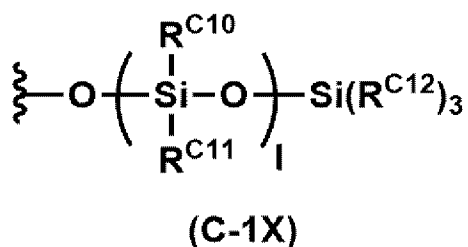


式（Ｃ－１）中、R^{C1}～R^{C3}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基を表す。kは、２～２０の整数を表す。

式（Ｃ－２）中、R^{C4}は、炭素数１～１０のアルキル基を表す。R^{C5}及びR^{C6}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基又は式（Ｃ－１X）で表される基を表す。

式（Ｃ－３）中、R^{C7}～R^{C9}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基又は式（Ｃ－１X）で表される基を表す。

[0058] [化7]



式（Ｃ－１X）中、R^{C10}～R^{C12}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基を表す。lは、０～２０の整数を表す。

(b3) *－(Z^{b1}－Y^{b1})_s－W^{b1}で表される部分構造を有する。

*は結合位置を表す。

Z^{b1}は、それぞれ独立に、アルキレン基、－Ｏ－、－ＣＯ－、－ＮＲ^N－、又は、これらを組み合わせた基を表す。R^Nは水素原子又は置換基を表す。

Y^{b1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

W^{b1} は、水素原子又はケイ素原子を含まない置換基を表す。

s は、1以上の整数を表す。

(b4) 分子量が500～8000である。

以下、各要件について詳述する。

[0059] (要件 (b1))

(b1) 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。

ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が0.0140未満である場合、ケイ素含有化合物の塗膜表面への偏在度が低く、配向ムラ及び視認ムラが劣る点で好ましくない。

上記ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値の計算方法は、化合物Aの要件 (a1) におけるケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値と同じである。

[0060] 化合物Bにおいて、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値は、本発明の効果がより優れる点で、0.0140～0.0280が好ましく、0.0140～0.0250がより好ましく、0.0150～0.0250が更に好ましく、0.0150～0.0200が特に好ましい。

[0061] (要件 (b2))

(b2) $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基を2つ以上有する。

L^{b1} は、それぞれ独立に、ヘテロ原子を有していてもよいアルキレン基又は $-O-$ を表す。

上記アルキレン基が有していてもよいヘテロ原子としては、酸素原子、窒素原子、及び、硫黄原子が挙げられる。なお、上記アルキレン基は、同一のヘテロ原子が隣接しない限り2つ以上のヘテロ原子を有していてもよい。

上記アルキレン基は、鎖状のアルキレン基が好ましく、直鎖状のアルキレ

ン基がより好ましい。

上記アルキレン基の炭素数は、1～10が好ましく、1～6がより好ましく、2～4が更に好ましい。

L^{b1} としては、 $-O-$ 又は炭素数1～6の鎖状のアルキレン基が好ましい。

X^{b1} は、式(C-1)～式(C-3)で表される基からなる群から選択される1個の基を表し、式(C-2)で表される基又は式(C-3)で表される基が好ましく、式(C-3)で表される基がより好ましい。

式(C-1)～式(C-3)は、化合物Aにおいて上述した通りである。

[0062] 化合物Bが有する $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基の数は、2以上であり、2～8が好ましく、2～6がより好ましく、2～4が更に好ましい。

[0063] (要件(b3))

(b3) $*-(Z^{b1}-Y^{b1})_s-W^{b1}$ で表される部分構造(以下、「部分構造B」ともいう。)を有する。

[0064] *は結合位置を表す。

[0065] 部分構造B中、 Z^{b1} は、それぞれ独立に、アルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、又は、これらを組み合わせた基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。 R^N の詳細は上述した通りである。

Z^{b1} におけるアルキレン基の定義及び好適態様は、 Z^{a1} で表されるアルキレン基と同じである。

Z^{b1} で表される基は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基であることも好ましい。

Z^{b1} で表される基としては、なかでも、炭素数1～3の鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NR^N-CO-$ 、 $-NR^N-CO-O-$ 、 $-CO-NR^N-$ 、又は、 $-NR^N-CO-NR^N-$ が好ましく、炭素数1～3の鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-NH-$ 、 $-CO-O-$ 、又は、 $-NH-CO-O-$ がより好ましく、 $-O-$ 、 $-C$

O—、—CO—O—、又は、—NH—CO—O—が更に好ましく、—O—又は—CO—O—が特に好ましい。

[0066] 部分構造B中、 Y^{b1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

Y^{b1} で表される芳香環及び脂肪族環の定義及び好適態様は、 Y^{a1} で表される基における芳香環及び脂肪族環の定義及び好適態様と同じである。

上記芳香環及び脂肪族環が有する置換基は、ケイ素原子を含まないことも好ましい。

上記置換基としては、例えば、ハロゲン原子を有していてもよいアルキル基、アルキルエステル基、アシル基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アルキルオキシカルボニル基、カルバモイル基、アシルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基が挙げられ、アルキル基、アルキルエステル基、アルコキシ基、又は、アシル基が好ましく、炭素数1～4の直鎖状アルキル基、メチルエステル基、メトキシ基、又は、アセチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、メトキシ基、又は、メチルエステル基が更に好ましい。

上記芳香環及び脂肪族環が有する置換基は、環基（芳香環基及び脂肪族環基）を含まないことも好ましい。

[0067] 部分構造B中、 W^{b1} は、水素原子又はケイ素原子を含まない置換基を表す。

上記ケイ素原子を含まない置換基としては、アルキル基を有していてもよいアリール基、アルキル基を有していてもよいヘテロアリール基、ハロゲン原子を有していてもよいアルキル基、アルキルエステル基、アシル基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アルキルオキシカルボニル基、カルバモイル基、アシルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基が挙げられ、アリール基、アルキル基、アルキルエステル基、アルコキシ基、又は、アシル基が好ましく、フェニル基、ナフチル基、炭素数1～4の直鎖状アルキル基、メチルエステル基、メトキシ基、又は、アセチル基がより好ましく、フェニル基、メチル基、エチル基、メトキシ基、又は、メチルエステル基が更に好ま

しい。

[0068] 部分構造B中、sは、1以上の整数を表す。

sとしては、1～8の整数が好ましく、1～6の整数がより好ましく、1～4の整数が更に好ましい。

[0069] (要件(b4))

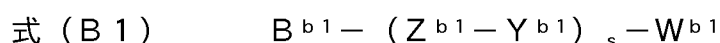
(b4) 分子量が500～8000である。

分子量が500未満である場合、ケイ素含有化合物の表面への偏在度が低く、配向ムラ及び視認ムラが劣る点で好ましくない。また、分子量が8000超である場合、ケイ素含有化合物が液晶化合物の配向を阻害しやすく、配向ムラ及び視認ムラが劣る点で好ましくない。

化合物Bの分子量は、本発明の効果がより優れる点で、800～4000が好ましく、800～1400がより好ましい。

[0070] また、化合物Bは、環構造を2以上有することが好ましく、配向ムラ抑制性能がより優れる点で、3以上有することがより好ましい。上限は特に制限されないが、10以下の場合が多く、6以下が好ましい。上記環構造は、芳香環及び脂肪族環を含む。

[0071] 化合物Bとしては、式(B1)で表される化合物が好ましい。



[0072] 式(B1)中、Z^{b1}、Y^{b1}、W^{b1}、及び、sは、上述した部分構造BにおけるZ^{b1}、Y^{b1}、W^{b1}、及び、sと同義である。

[0073] 式(B1)中、B^{b1}は、-L^{b1}-X^{b1}で表される基が2つ以上置換している、又は、-L^{b1}-X^{b1}で表される基を2つ以上有する基が1つ以上置換している、芳香環を表す。

B^{b1}で表される1価の芳香環基を構成する芳香環は、単環又は縮環が好ましく、単環がより好ましい。

上記芳香環は、芳香族炭化水素環及び芳香族複素環のいずれであってもよく、芳香族炭化水素環が好ましい。芳香族炭化水素環及び芳香族複素環の例は、上述したAで表される芳香環として例示した通りであり、ベンゼン環が

好ましい。

$-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基は、要件 (b 2) おいて上述した通りである。

[0074] B^{b1} が有する $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基の数は、2以上であり、2～6が好ましく、2～4がより好ましい。なお、上記 $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基の数は、芳香環に直接置換している $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基の数と、 $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基を2つ以上有する基に含まれる $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基の合計の数である。

[0075] $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基を2つ以上有する基としては、例えば、 $-Z^{b2}-L^{b2}-(L^{b1}-X^{b1})_{m5}$ で表される基、及び、 $-Z^{b2}-L^{b3}-SiR^{Si3}_3-w(L^{b1}-X^{b1})_w$ で表される基が挙げられる。

[0076] Z^{b2} は、単結合、又は、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、若しくは、これらを組み合わせた基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。 R^N の詳細は上述したとおりである。

Z^{b2} としては、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NH-$ 、又は、これらを組み合わせた基が好ましく、 $-O-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ がより好ましく、 $-CO-O-$ 又は $-O-CO-O-$ が更に好ましい。

また、 Z^{b2} は、配向ムラ抑制性能がより優れる点で、 $-CO-O-$ 又は $-O-$ であることも好ましい。

L^{b2} は、 $m5+1$ 価の脂肪族炭化水素基を表す。

上記 $m5+1$ 価の脂肪族炭化水素基の少なくとも1つの炭素原子は、 $-NR^N-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ 、 $-SO-$ 、又は $-SO_2-$ で置換されていてもよい。ただし、 Z^{b2} 及び L^{b1} と隣接する炭素原子は置換されない。

上記脂肪族炭化水素基は、鎖状が好ましく、直鎖状がより好ましい。

上記脂肪族炭化水素基の炭素数は、1～10が好ましく、1～6がより好ましい。

$m5$ は、2以上の整数を表し、2～4が好ましく、2又は3がより好まし

く、2が更に好ましい。

[0077] L^{b3} は、2価の脂肪族炭化水素基を表す。

上記2価の脂肪族炭化水素基の少なくとも1つの炭素原子は、 $-NR^N-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ 、 $-SO-$ 、又は、 $-SO_2-$ で置換されていてもよい。ただし、 Z^{b2} と隣接する炭素原子は置換されない。

上記脂肪族炭化水素基は、鎖状が好ましく、直鎖状がより好ましい。

上記脂肪族炭化水素基の炭素数は、1～10が好ましく、1～6がより好ましく、2～4が更に好ましい。

R^{Si} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい炭素数1～10のアルキル基を表す。

上記炭素数1～10のアルキル基は、鎖状及び環状のいずれであってもよく、鎖状が好ましく、直鎖状がより好ましい。

上記炭素数1～10のアルキル基の炭素数は、1～6が好ましく、1～3がより好ましい。

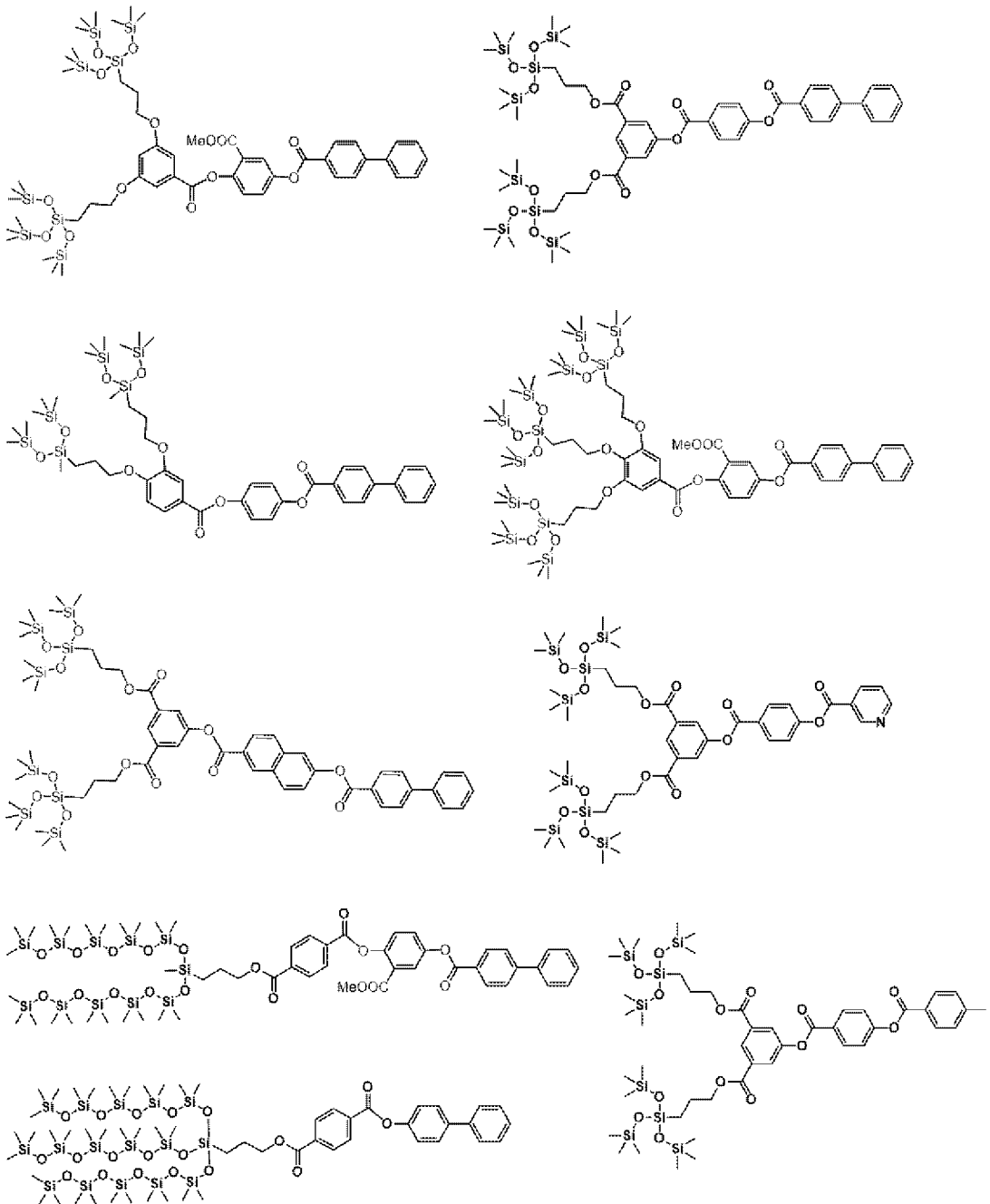
wは、2又は3を表す。

[0078] 配向ムラ抑制性能がより優れる点で、 B^{b1} で表される基において、芳香環に置換する $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基の数が2以下であり、かつ、 $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基を2つ以上有する基中の $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基の数が2であることも好ましい。

[0079] 化合物Bとしては、例えば、下記の化合物が挙げられる。

[0080]

[化8]



[0081] ケイ素含有化合物は、1種単独で用いてもよく、2種以上を組み合わせて用いてもよい。ケイ素含有化合物を2種以上組み合わせて用いる場合、化合物A及び化合物Bのいずれかを2種以上組み合わせてもよく、化合物A及び化合物Bを組み合わせてもよい。

ケイ素含有化合物の含有量は、組成物の全固形分に対して、本発明の効果がより優れる点で、0.01～5.0質量%が好ましく、0.01～1.0

質量％がより好ましい。

[0082] 〔液晶化合物〕

本発明の組成物は、液晶化合物を含む。

液晶化合物は、特に制限されず、公知の液晶化合物を使用できる。一般的に、液晶化合物はその形状から、棒状タイプ（棒状液晶化合物）と円盤状タイプ（ディスコティック液晶化合物）とに分類できる。更に、液晶化合物は、低分子タイプと高分子タイプとの分類できる。高分子とは一般に重合度が100以上のものを指す（高分子物理・相転移ダイナミクス，土井 正男著，2頁，岩波書店，1992）。

[0083] 液晶化合物は、棒状液晶化合物及び円盤状液晶化合物のいずれであってもよい。

本発明の組成物では、2種以上の棒状液晶化合物、2種以上の円盤状液晶化合物、又は、棒状液晶化合物と円盤状液晶化合物との混合物を用いてもよい。

[0084] 組成物が含む液晶化合物は、低分子液晶化合物及び高分子液晶化合物のいずれであってもよく、これらの混合物であってもよい。

液晶化合物は、配向性の点で、重合性液晶化合物であることが好ましい。

重合性液晶化合物は、重合性基を有する液晶化合物であり、配向後に重合させることによりその配向状態を固定化できる。また、高分子液晶化合物は、配向後に組成物から溶媒を除去し乾燥させることによりその配向状態を固定化できる。

[0085] 重合性液晶化合物は、重合性棒状液晶化合物及び重合性円盤状液晶化合物からなる群から選択される少なくとも1種の重合性液晶化合物であることが好ましい。

重合性液晶化合物が有する重合性基は特に限定されないが、ラジカル重合又はカチオン重合可能な重合性基が好ましい。重合性基としては、例えば、アクリロイル基、メタクリロイル基、エポキシ基、及び、ビニル基等が挙げられる。

[0086] 棒状液晶化合物としては、特表平 11-513019 号公報の請求項 1 又は特開 2005-289980 号公報の段落 [0026] ~ [0098] に記載のものが好ましく、ディスコティック液晶化合物としては、特開 2007-108732 号公報の段落 [0020] ~ [0067] 又は特開 2010-244038 号公報の段落 [0013] ~ [0108] に記載のものが好ましい。

[0087] 液晶化合物としては、逆波長分散性の液晶化合物（逆分散性化合物）を用いてもよい。本明細書において「逆波長分散性」の液晶化合物とは、これを用いて作製されたフィルムの特定波長（可視光範囲）における面内のレタデーション（ R_e ）値を測定した際に、測定波長が大きくなるにつれて R_e 値が同等又は高くなるものをいう。

逆波長分散性の液晶化合物は、逆波長分散性の層を形成できるものであれば特に限定されず、例えば、特開 2008-297210 号公報に記載の一般式（1）で表される化合物（特に、段落 [0034] ~ [0039] に記載の化合物）、特開 2010-084032 号公報に記載の一般式（1）で表される化合物（特に、段落 [0067] ~ [0073] に記載の化合物）、特開 2016-081035 号公報に記載の一般式（1）で表される化合物（特に、段落 [0043] ~ [0055] に記載の化合物）、及び、特開 2016-053709 号公報に記載の一般式（11）で表される化合物（特に、段落 [0036] ~ [0043] に記載の化合物）が挙げられる。

更に、特開 2011-006360 号公報の段落 [0027] ~ [0100]、特開 2011-006361 号公報の段落 [0028] ~ [0125]、特開 2012-207765 号公報の段落 [0034] ~ [0298]、特開 2012-077055 号公報の段落 [0016] ~ [0345]、WO 12/141245 号公報の段落 [0017] ~ [0072]、WO 12/147904 号公報の段落 [0021] ~ [0088]、WO 14/147904 号公報の段落 [0028] ~ [0115]、及び、国際公開第 2021/060427 号の段落 [0025] ~ [0056] に記載の化合物

が挙げられる。

[0088] 液晶化合物は、1種単独で用いてもよく、2種以上を組み合わせ用いてもよい。

液晶化合物の含有量は、組成物の全固形分に対して、50～99.99質量%が好ましく、70～99質量%がより好ましい。

[0089] 組成物は、ケイ素含有化合物及び液晶化合物以外の他の成分を含んでもよい。以下、組成物が含んでもよい他の成分について説明する。

[0090] [重合開始剤]

組成物は、重合開始剤を含むことが好ましい。

重合開始剤は、光重合開始剤及び熱重合開始剤等が挙げられ、光重合開始剤が好ましく、紫外線照射によって重合反応を開始可能な光重合開始剤が好ましい。光重合開始剤としては、例えば、アルキルフェノン化合物、 α -カルボニル化合物、アシロインエーテル、 α -炭化水素置換芳香族アシロイン化合物、多核キノン化合物、トリアリールイミダゾールダイマーとp-アミノフェニルケトンとの組み合わせ、アクリジン及びフェナジン化合物、オキサジアゾール化合物、 α -アシルオキシム化合物、及び、アシルフォスフィンオキシド化合物が挙げられる。

光重合開始剤としては市販品も用いることができ、例えば、BASF社製のイルガキュアー184、イルガキュアー907、イルガキュアー369、イルガキュアー651、イルガキュアー819、イルガキュアーOXE-01、及び、イルガキュアーOXE-02等が挙げられる。

[0091] 重合開始剤は、1種単独で用いてもよく、2種以上を組み合わせ用いてもよい。

重合開始剤の含有量は、組成物の全固形分に対して、0.01～30質量%が好ましく、0.1～15質量%がより好ましい。

[0092] [溶媒]

組成物は、塗膜を形成する作業性等の観点から、溶媒を含むことが好ましい。

溶媒としては、例えば、ケトン類（例えば、アセトン、2-ブタノン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、シクロペンタノン、及び、シクロヘキサノン）、エーテル類（例えば、ジオキサン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジオキソラン、テトラヒドロフルフリルアルコール、及び、シクロペンチルメチルエーテル）、脂肪族炭化水素類（例えば、ヘキサン）、脂環式炭化水素類（例えば、シクロヘキサン）、芳香族炭化水素類（例えば、ベンゼン、トルエン、キシレン、及び、トリメチルベンゼン）、ハロゲン化炭素類（例えば、ジクロロメタン、トリクロロメタン（クロロホルム）、ジクロロエタン、ジクロロベンゼン、及び、クロロトルエン）、エステル類（例えば、酢酸メチル、酢酸エチル、プロピオン酸エチル、酢酸ブチル、及び、炭酸ジエチル）、アルコール類（例えば、エタノール、イソプロパノール、ブタノール、及び、シクロヘキサノール）、セロソルブ類（例えば、メチルセロソルブ、エチルセロソルブ、及び、1, 2-ジメトキシエタン）、セロソルブアセテート類、スルホキシド類（例えば、ジメチルスルホキシド）、アミド類（例えば、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドン、N-エチルピロリドン、及び、1, 3-ジメチルー2-イミダゾリジノン）、及び、ヘテロ環化合物（例えば、ピリジン等）等の有機溶媒、並びに、水が挙げられる。

[0093] 溶媒は、1種単独で用いてもよく、2種以上を組み合わせ用いてもよい。

組成物が溶媒を含む場合、組成物中の溶媒の含有量としては、固形分濃度を0.5～30質量%とする量が好ましく、1～20質量%とする量がより好ましい。

[0094] 〔配向制御剤〕

組成物は、必要に応じて、上述したケイ素含有化合物とは異なる配向制御剤を含んでもよい。配向制御剤により、ホモジニアス配向の他、ホメオトロピック配向（垂直配向）、傾斜配向、ハイブリッド配向、及び、コレステリック配向等の種々の配向状態を形成することができ、また、特定の配向状態

をより均一かつより精密に制御して実現することができる。

[0095] ホモジニアス配向を促進する配向制御剤としては、例えば、低分子の配向制御剤、及び、高分子の配向制御剤を用いることができる。

低分子の配向制御剤としては、例えば、特開2002-020363号公報の[0009]～[0083]段落、特開2006-106662号公報の[0111]～[0120]段落、及び、特開2012-211306号公報の[0021]～[0029]段落の記載を参酌することができ、この内容は本明細書に組み込まれる。

高分子の配向制御剤としては、例えば、特開2004-198511号公報の[0021]～[0057]段落、及び、特開2006-106662号公報の[0121]～[0167]段落を参酌することができ、この内容は本明細書に組み込まれる。

[0096] ホメオトロピック配向を形成又は促進する配向制御剤としては、例えば、ボロン酸化合物、オニウム塩化合物が挙げられ、具体的には、特開2008-225281号公報の[0023]～[0032]段落、特開2012-208397号公報の[0052]～[0058]段落、特開2008-026730号公報の[0024]～[0055]段落、及び、特開2016-193869号公報の[0043]～[0055]段落等に記載された化合物を参酌することができ、この内容は本明細書に組み込まれる。

[0097] 組成物は、キラル剤を含んでいてもよい。

キラル剤（光学活性化合物）はコレステリック液晶相の螺旋構造を誘起する機能を有する。キラル剤は、化合物によって誘起する螺旋の捩れ方向又は螺旋ピッチが異なるため、目的に応じて選択すればよい。

キラル剤としては、特に制限はなく、例えば、「液晶デバイスハンドブック、第3章4-3項、TN (Twisted Nematic)、STN (Super Twisted Nematic) 用キラル剤、199頁、日本学術振興会第142委員会編、1989」に記載の化合物、イソソルビド、及びイソマンニド誘導体等を使用できる。

キラル剤は、一般に不斉炭素原子を含むが、不斉炭素原子を含まない軸性不斉化合物又は面性不斉化合物もキラル剤として使用できる。軸性不斉化合物又は面性不斉化合物の例には、ピナフチル、ヘリセン、パラシクロファン、及びこれらの誘導体が含まれる。

また、キラル剤は、重合性基を有していてもよい。重合性キラル剤が有する重合性基は、重合性液晶化合物が有する重合性基と同種の基が好ましい。また、キラル剤自体が、液晶化合物であってもよい。

[0098] キラル剤が光異性化部位を有してもよい。

光異性化部位としては、シンナモイル部位、カルコン部位、アゾベンゼン部位又はスチルベン部位が好ましく、シンナモイル部位、カルコン部位又はスチルベン部位がより好ましい。

キラル剤としては、特開2002-080478号公報、特開2002-080851号公報、特開2002-179668号公報、特開2002-179669号公報、特開2002-179670号公報、特開2002-179681号公報、特開2002-179682号公報、特開2002-338575号公報、特開2002-338668号公報、特開2003-313189号公報、及び特開2003-313292号公報等に記載の化合物を使用できる。

[0099] キラル剤は、1種単独で用いてもよく、2種以上を組み合わせ用いてもよい。1層中に複数の配向状態を有する膜を形成する場合、キラル剤としては、キラル剤Aと、キラル剤Aとは逆向きの螺旋を誘起するキラル剤Bを含む2種以上のキラル剤を用いることが好ましい。例えば、キラル剤Aにより誘起する螺旋が右方向の場合には、キラル剤Bにより誘起する螺旋は左方向となる。

キラル剤の含有量は、液晶化合物の含有量に対して、0.01～15質量%が好ましく、1.0～10質量%がより好ましい。

[0100] [他の添加剤]

組成物は、上述した成分以外の他の成分を含んでもよい。

他の成分としては、例えば、酸化防止剤、紫外線吸収剤、増感剤、安定剤、可塑剤、連鎖移動剤、重合禁止剤、チルト角制御剤、増粘剤、難燃剤、界面活性剤、分散剤、並びに、染料及び顔料等の色材等が挙げられる。

[0101] [光学異方性膜]

本発明の組成物により、光学異方性膜が得られる。換言すれば、本発明の組成物は、光学異方性膜の形成に好適に用いられる。

光学異方性膜における液晶化合物は、液晶性を示す状態であってもよく、配向状態が固定化された膜（液晶硬化膜）であってもよく、配向状態が固定化された膜であることが好ましい。液晶硬化膜においては、液晶化合物はもはや液晶性を示さなくてもよい。

[0102] 光学異方性膜における液晶化合物の配向状態は、水平配向、垂直配向、傾斜配向、及び、ねじれ配向のいずれの状態であってもよい。

また、WO 2021 / 033640号公報に記載の、厚み方向に沿って延びる螺旋軸に沿ってねじれ配向した液晶化合物の配向状態を固定してなる第1領域と、ホモジニアス配向した液晶化合物の配向状態を固定してなる第2領域とを、厚み方向に沿って有する液晶硬化層のように、膜内に複数の配向状態を有していてもよい。

なお、本明細書において「水平配向」とは、光学異方性膜の主面（又は、光学異方性膜が支持体及び配向膜等の部材上に形成されている場合、その部材の表面）と、液晶化合物の長軸方向とが平行であることをいう。なお、厳密に平行であることを要求するものではなく、本明細書では、液晶化合物の長軸方向と特定膜の主面とのなす角度が10°未満の配向であることを意味するものとする。

[0103] 光学異方性膜としては、例えば、Aプレート、Cプレート、及び、厚み方向に沿って延びる螺旋軸に沿ってねじれ配向した液晶化合物の配向状態を固定してなる第1領域と、ホモジニアス配向した液晶化合物の配向状態を固定してなる第2領域とを、厚み方向に沿って有する光学異方性膜（以下、この態様を「光学異方性膜A」と略す。）などが挙げられる。

[0104] Aプレートは、ポジティブAプレート（正のAプレート）とネガティブAプレート（負のAプレート）との2種があり、フィルム面内の遅相軸方向（面内での屈折率が最大となる方向）の屈折率を n_x 、面内の遅相軸と面内で直交する方向の屈折率を n_y 、厚み方向の屈折率を n_z としたとき、ポジティブAプレートは式（A1）の関係を満たすものであり、ネガティブAプレートは式（A2）の関係を満たすものである。なお、ポジティブAプレートは R_{th} が正の値を示し、ネガティブAプレートは R_{th} が負の値を示す。

$$\text{式（A1）} \quad n_x > n_y \div n_z$$

$$\text{式（A2）} \quad n_y < n_x \div n_z$$

Cプレートは、ポジティブCプレート（正のCプレート）とネガティブCプレート（負のCプレート）との2種があり、ポジティブCプレートは式（C1）の関係を満たすものであり、ネガティブCプレートは式（C2）の関係を満たすものである。なお、ポジティブCプレートは R_{th} が負の値を示し、ネガティブCプレートは R_{th} が正の値を示す。

$$\text{式（C1）} \quad n_z > n_x \div n_y$$

$$\text{式（C2）} \quad n_z < n_x \div n_y$$

なお、上記「 $\div$ 」とは、両者が完全に同一である場合だけでなく、両者が実質的に同一である場合も包含する。「実質的に同一」とは、例えば、 $(n_y - n_z) \times d$ （ただし、 d はフィルムの厚みである）が、 $-10 \sim 10 \text{ nm}$ 、好ましくは $-5 \sim 5 \text{ nm}$ の場合も「 $n_y \div n_z$ 」に含まれ、 $(n_x - n_z) \times d$ が、 $-10 \sim 10 \text{ nm}$ 、好ましくは $-5 \sim 5 \text{ nm}$ の場合も「 $n_x \div n_z$ 」に含まれる。

[0105] 上記 R_e 及び R_{th} は、本発明のフィルムの用途に応じて適宜調整すればよい。 R_e 及び R_{th} は、光学異方性膜の厚み、及び、含まれる液晶化合物の種類によって調整できる。

[0106] 液晶化合物の配向方向が螺旋軸に沿って捩れ配向している場合（特に、コレステリック液晶相を固定してなる場合）、液晶化合物の捩れ角（硬化膜の一方の表面から他方の表面にかけての角度の変化）は、目的に応じて調整で

きる。

螺旋構造のピッチは、組成物に添加するキラル剤の種類及びその添加濃度で変化し、上記いずれか1つ以上を調整することで所望のピッチの配向状態が得られる。なお、螺旋の旋回方向、及びピッチの測定方法については、「液晶化学実験入門」日本液晶学会編 シグマ出版2007年出版、46頁、及び「液晶便覧」液晶便覧編集委員会 丸善 196頁に記載の方法を使用できる。

[0107] 光学異方性膜の厚みは、用途に応じて適宜調整すればよいが、0.1～50 μm が好ましく、0.3～20 μm がより好ましく、1～10 μm が更に好ましい。

[0108] [光学異方性膜の製造方法]

光学異方性膜の形成方法としては、例えば、本発明の組成物を用いて塗膜を形成し、塗膜に含まれる液晶化合物を所望の配向状態とした後に、配向状態を重合により固定化する方法などが挙げられる。

[0109] 液晶化合物を所望の配向状態とする配向処理は特に制限されないが、例えば、塗膜に対して電場を印加する方法、及び、塗膜を加熱する方法が挙げられ、塗膜を加熱する方法が好ましい。加熱における加熱温度は、含まれる液晶化合物の種類に応じて選択すればよい。配向処理は、溶媒の除去と同時に行われてもよい。配向処理として加熱を行った場合、液晶化合物の配向方向を安定化させるために、配向処理よりも低い温度で保持することも好ましい。

[0110] 重合処理は特に制限されないが、紫外線を照射する方法が好ましい。紫外線の照射は、酸素濃度が低い環境で実施することも好ましい。なお、本明細書において、「紫外線」とは、波長200～400 nmの電磁波を主として含む電磁波をいい、波長300～400 nmの電磁波を主として含むのが好ましい。紫外線の光源は特に制限されず、公知の光源を使用でき、フィルター等を用いて任意の波長域を含む紫外線を照射してもよい。紫外線の光源としては、高圧水銀灯、メタルハライドランプ、及び発光ダイオード（LED

）等が挙げられる。また、重合反応を促進するため、加熱条件下で実施してもよい。

[0111] [光学フィルム]

本発明の組成物により形成される光学異方性膜は、光学フィルムに用いられることも好ましい。換言すれば、光学異方性膜は、他の層と組み合わせて光学フィルムとして用いることができる。

光学フィルムとしては、例えば、支持体と、配向膜と、光学異方性層とをこの順で有する光学フィルムが挙げられる。なお、上記支持体及び配向膜はいずれも任意部材である。

[0112] [光学異方性層]

上記光学異方性層は、上述した光学異方性膜であってもよく、上述した光学異方性膜と、他の液晶膜とを組み合わせた層であってもよい。すなわち、上述した光学異方性膜は、他の液晶層の表面に形成されていてもよく、上述した光学異方性膜の表面に他の液晶層が形成されていてもよい。例えば、後述する偏光板を円偏光板として用いる場合、又は、光学フィルムをIPS (In-Plane-Switching) 方式又はFFS (Fringe-Field-Switching) 方式の液晶表示装置の光学補償フィルムとして用いる場合には、光学異方性層は、ポジティブAプレートとポジティブCプレートの積層体であることが好ましい。

他の液晶層は、本発明の組成物を用いて形成される液晶層であってもよく、液晶化合物、及び、必要に応じて任意成分（例えば、重合開始剤、二色性物質、及び、レベリング剤）を含む組成物を所定の配向状態に固定化してなる液晶層であってもよい。

[0113] 上述した光学異方性膜が他の液晶層と積層される際、密着層を介して積層されることも好ましい。密着層としては、公知の接着剤層及び粘着剤層が挙げられる。

粘着剤層を形成する材料としては、例えば、動的粘弾性測定装置で測定した貯蔵弾性率 G' と損失弾性率 G'' との比（ $\tan \delta = G'' / G'$ ）が0.001～1.5である物質で形成された部材が挙げられ、いわゆる、粘着剤

、及びクリープしやすい物質などが含まれる。粘着剤としては、例えば、ポリビニルアルコール系粘着剤が挙げられる。

接着剤層としては、活性エネルギー線の照射又は加熱により硬化する硬化性接着剤組成物が好ましい。硬化性接着剤組成物としては、例えば、カチオン重合性化合物を含む硬化性接着剤組成物、及び、ラジカル重合性化合物を含む硬化性接着剤組成物などが挙げられる。

接着剤層の厚さは、 $0.01 \sim 20 \mu\text{m}$ が好ましく、 $0.01 \sim 10 \mu\text{m}$ がより好ましく、 $0.05 \sim 5 \mu\text{m}$ が更に好ましい。接着剤層の厚みがこの範囲にあれば、積層される保護層又は液晶硬化層と偏光子との間に、浮き又は剥がれが生じにくい。また、気泡の発生を抑制できる観点から、接着剤層の厚さは、 $0.4 \mu\text{m}$ 以上が好ましい。

接着剤層としては、例えば、特開2016-035579号公報の[0062]～[0080]段落を参酌でき、これらの内容は本明細書に組み込まれる。

[0114] 上述した光学異方性膜を支持体から剥離して、光学異方性膜単独で光学フィルムとして用いてもよい。

[0115] [支持体]

支持体は、フィルムを形成するための基材である。

上記支持体は、透明であることが好ましい。具体的には、光透過率が80%以上であることが好ましい。

[0116] 支持体としては、例えば、ガラス基板及びポリマーフィルムが挙げられる。ポリマーフィルムの材料としては、セルロース系ポリマー；ポリメチルメタクリレート、及びラクトン環含有重合体等のアクリル酸エステル重合体を有するアクリル系ポリマー；熱可塑性ノルボルネン系ポリマー；ポリカーボネート系ポリマー；ポリエチレンテレフタレート、及びポリエチレンナフタレート等のポリエステル系ポリマー；ポリスチレン、及びアクリロニトリル・スチレン共重合体（AS樹脂）等のスチレン系ポリマー；ポリエチレン、ポリプロピレン、及びエチレン・プロピレン共重合体等のポリオレフィン系

ポリマー；塩化ビニル系ポリマー；ナイロン、及び芳香族ポリアミド等のアミド系ポリマー；イミド系ポリマー；スルホン系ポリマー；ポリエーテルスルホン系ポリマー；ポリエーテルエーテルケトン系ポリマー；ポリフェニレンスルフィド系ポリマー；塩化ビニリデン系ポリマー；ビニルアルコール系ポリマー；ビニルブチラール系ポリマー；アリレート系ポリマー；ポリオキシメチレン系ポリマー；エポキシ系ポリマー；並びに、これらのポリマーを混合したポリマーが挙げられる。

また、後述する偏光子がこのような支持体を兼ねる態様であってもよい。

[0117] 上記支持体の厚みは特に制限されないが、 $5 \sim 100 \mu\text{m}$ が好ましく、 $5 \sim 50 \mu\text{m}$ がより好ましい。支持体は剥離可能であることが好ましい。

[0118] 〔配向膜〕

光学フィルムにおいては、支持体と光学異方性膜との間に配向膜を有していることが好ましい。なお、上述した支持体が配向膜を兼ねる態様であってもよい。

[0119] 配向膜は、一般的にはポリマーを主成分とする。配向膜用ポリマー材料としては、多数の文献に記載があり、多数の市販品を入手することができる。

本発明において利用されるポリマー材料は、ポリビニルアルコール又はポリイミド、及びその誘導体が好ましい。特に変性又は未変性のポリビニルアルコールが好ましい。

本発明に使用可能な配向膜については、例えば、国際公開第01/088574号の43頁24行～49頁8行に記載された配向膜；特許第3907735号公報の段落[0071]～[0095]に記載の変性ポリビニルアルコール；特開2012-155308号公報に記載された液晶配向剤により形成される液晶配向膜；等が挙げられる。

[0120] 本発明においては、配向膜の形成時に配向膜表面に接触しないことで面状悪化を防ぐことが可能となる理由から、配向膜としては光配向膜を利用することも好ましい。

光配向膜としては特に限定はされないが、国際公開第2005/0960

41号の段落[0024]～[0043]に記載されたポリアミド化合物やポリイミド化合物等のポリマー材料；特開2012-155308号公報に記載された桂皮酸構造を有する光配向性基を有する液晶配向剤により形成される液晶配向膜；Rollic Technologies社製の商品名LPP-PJP265CP等を用いることができる。

[0121] 上記配向膜の厚さは特に限定されないが、支持体に存在しうる表面凹凸を緩和して均一な膜厚の光学異方性層を形成するという観点から、0.01～10 μ mであることが好ましく、0.01～1 μ mであることがより好ましく、0.01～0.5 μ mであることが更に好ましい。

[0122] 光学フィルムは、外光（特に紫外線）の影響を考慮して、紫外線（UV）吸収剤を含むことも好ましい。

紫外線吸収剤は、光学異方性膜に含まれていてもよく、光学異方性膜以外の部材に含まれていてもよい。光学異方性膜以外の部材としては、例えば、支持体が好適に挙げられる。

紫外線吸収剤としては、紫外線吸収性を発現できる従来公知のものがいずれも使用できる。このような紫外線吸収剤のうち、紫外線吸収性が高く、画像表示装置で用いられる紫外線吸収能（紫外線カット能）を得る観点から、ベンゾトリアゾール系又はヒドロキシフェニルトリアジン系の紫外線吸収剤を用いることが好ましい。

また、紫外線の吸収幅を広くするために、最大吸収波長の異なる紫外線吸収剤を2種以上併用することができる。

紫外線吸収剤としては、具体的には、例えば、特開2012-018395公報の[0258]～[0259]段落に記載された化合物、特開2007-072163号公報の[0055]～[0105]段落に記載された化合物等が挙げられる。

また、市販品として、Tinuvin400、Tinuvin405、Tinuvin460、Tinuvin477、Tinuvin479、及び、Tinuvin1577（いずれもBASF社製）等を用いることができ

る。

[0123] 〔偏光板〕

本発明の組成物により形成される光学異方性膜は、偏光板に用いられることも好ましい。

偏光板としては、上述した光学フィルムと、偏光子とを有する偏光板が挙げられる。

偏光板は、光学異方性層における液晶化合物の種類及び配向状態、光学フィルムの構成、並びに、偏光子の吸収軸と光学異方性層の面内遅相軸との角度の組み合わせ等を調整することにより、円偏光板、及び、IPS方式又はFFS方式の液晶表示装置の光学補償フィルム等として好適に使用できる。

[0124] 〔偏光子〕

偏光子は、光を特定の直線偏光に変換する機能を有する部材であれば特に制限されず、従来公知の吸収型偏光子、反射型偏光子及び塗布型偏光子を利用できる。

吸収型偏光子としては、例えば、ヨウ素系偏光子、二色性染料を利用した染料系偏光子及びポリエーテル系偏光子などが挙げられる。ヨウ素系偏光子及び染料系偏光子には、塗布型偏光子と延伸型偏光子があり、いずれも適用でき、ポリビニルアルコールにヨウ素又は二色性染料を吸着させ、延伸して作製される偏光子が好ましい。

塗布型偏光子としては、液晶化合物の硬化物及び二色性色素を含む偏光子が挙げられる。

反射型偏光子としては、複屈折の異なる薄膜を積層した偏光子、ワイヤーグリッド型偏光子、及び、選択反射域を有するコレステリック液晶と1/4波長板とを組み合わせた偏光子などが挙げられる。

[0125] 偏光子の厚みは特に制限されないが、3～60 μm が好ましく、3～30 μm がより好ましく、3～10 μm が更に好ましい。

[0126] 偏光板において、光学フィルムにおける液晶硬化層と、偏光子との間に、密着層が配置されていてもよい。密着層としては、光学フィルムが有してい

てもよい密着層が挙げられる。

[0127] [画像表示装置]

本発明の組成物は、画像表示装置に用いられることも好ましい。

画像表示装置としては、上述した光学フィルム又は偏光板を有する画像表示装置が挙げられる。

画像表示装置に用いられる表示素子は特に制限されず、例えば、液晶セル、有機エレクトロルミネッセンス（以下、「有機EL（Electro Luminescence）」という。）表示パネル、及び、プラズマディスプレイパネルが挙げられ、液晶セル又は有機EL表示パネルが好ましい。

[0128] 画像表示装置の一例である液晶表示装置は、上述した偏光板と、液晶セルとを有する液晶表示装置である。

なお、液晶セルの両側に設けられる偏光板のうち、フロント側の偏光板として上述した偏光板を用いることが好ましく、フロント側及びリア側の偏光板として上述した偏光板を用いることがより好ましい。

[0129] 液晶表示装置に利用される液晶セルは、VA（Vertical Alignment）モード、OCB（Optically Compensated Bend）モード、IPS（In-Plane-Switching）モード、FFS（Fringe-Field-Switching）モード、又はTN（Twisted Nematic）モードであることが好ましいが、これらに制限されない。

[0130] 画像表示装置の一例である有機EL表示装置としては、例えば、視認側から、偏光子と、上述した液晶硬化層からなる $\lambda/4$ 板と、有機EL表示パネルとをこの順で有する態様が挙げられる。

また、有機EL表示パネルは、電極間（陰極及び陽極間）に有機発光層（有機エレクトロルミネッセンス層）を挟持してなる有機EL素子を用いて構成された表示パネルである。有機EL表示パネルの構成は、特に制限されず、公知の構成が採用される。

[0131] [化合物]

本発明は、化合物A及び化合物Bの発明も含む。

実施例

[0132] 以下に実施例に基づいて本発明を更に詳細に説明する。

以下の実施例に示す材料、使用量、割合、処理内容、及び、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更できる。したがって、本発明の範囲は以下に示す実施例により限定的に解釈されるべきではない。

なお、後段の説明において使用される略語は以下のとおりである。

DMF : N, N-ジメチルホルムアミド

THF : テトラヒドロフラン

EDCI : 1-(3-ジメチルアミノプロピル)-3-エチルカルボジイミド塩酸塩

DMA P : 4-ジメチルアミノピリジン

DMA c : N, N-ジメチルアセトアミド

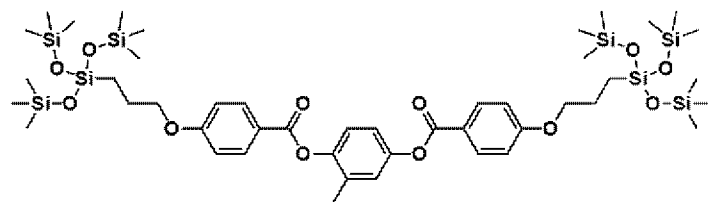
[0133] [ケイ素含有化合物]

実施例において、ケイ素含有化合物として以下の化合物A-1~A-30、B-1~B-9、及び、C-1~C-7を使用した。化合物A-1~A-30は化合物Aに該当し、B-1~B-9は化合物Bに該当し、化合物C-1~C-7は比較化合物である。

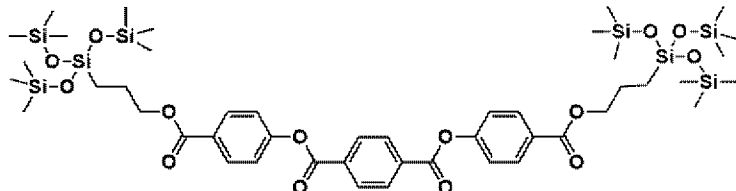
下記中、Mwは化合物の分子量を表し、Si-Me/Mwは、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値を表す。

[0134]

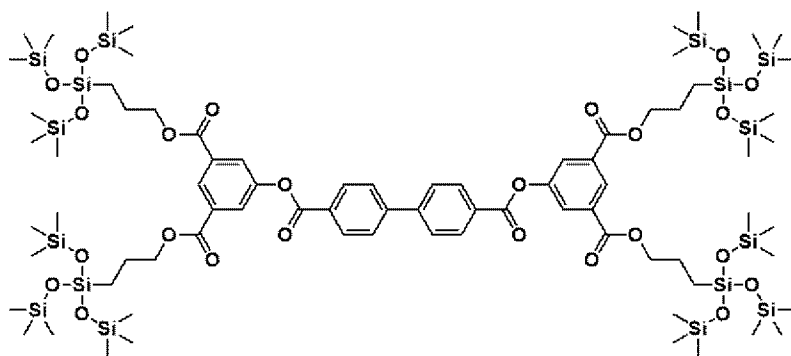
[化9]



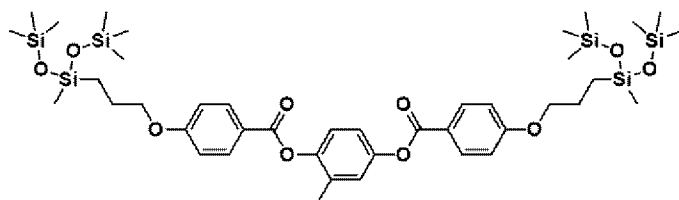
A-1
Mw=1037.8
Si-Me/Mw=0.0173



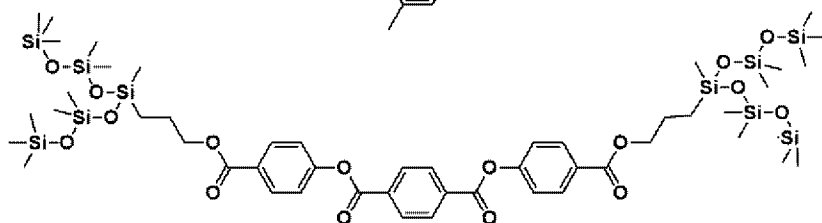
A-2
Mw=1079.8
Si-Me/Mw=0.0167



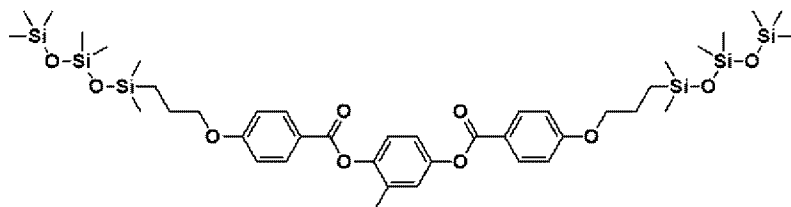
A-3
Mw=1917.36
Si-Me/Mw=0.0188



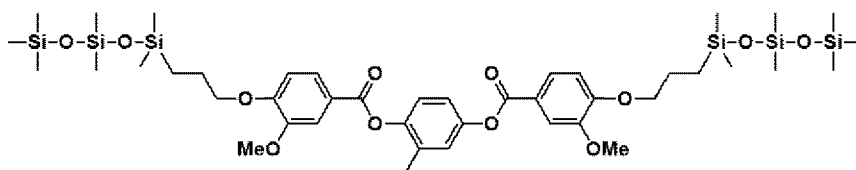
A-4
Mw=889.5
Si-Me/Mw=0.0157



A-5
Mw=1228.1
Si-Me/Mw=0.0179



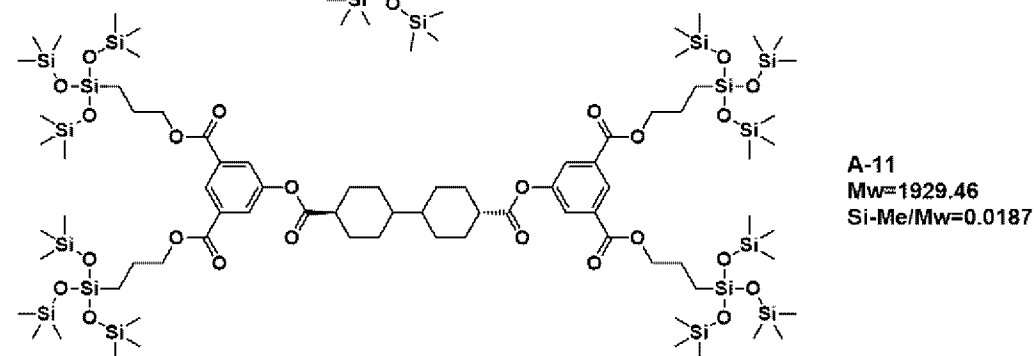
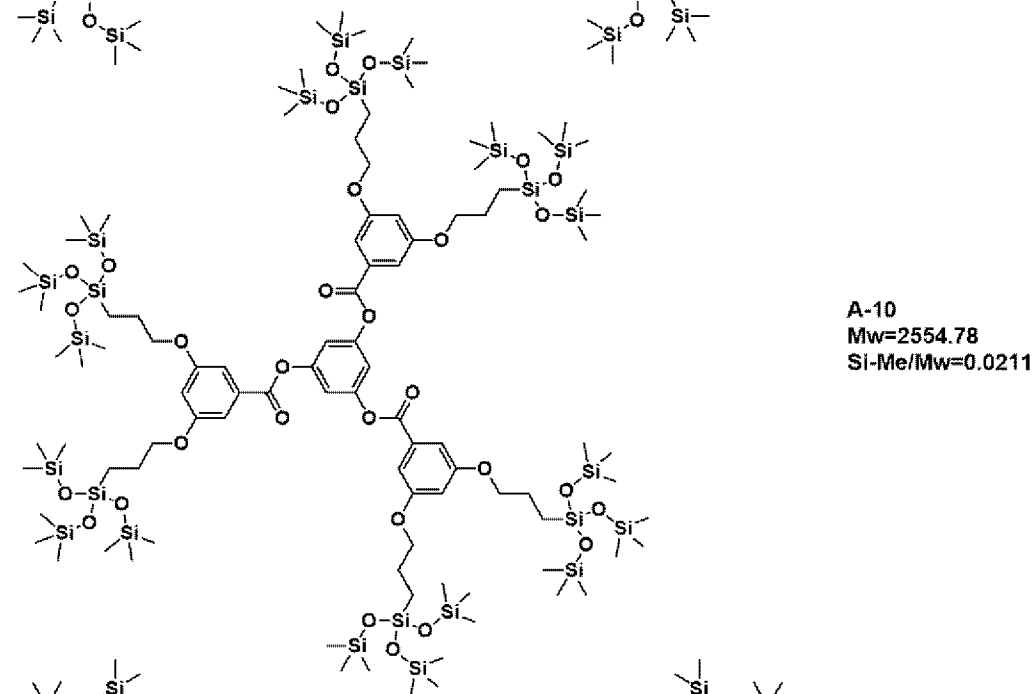
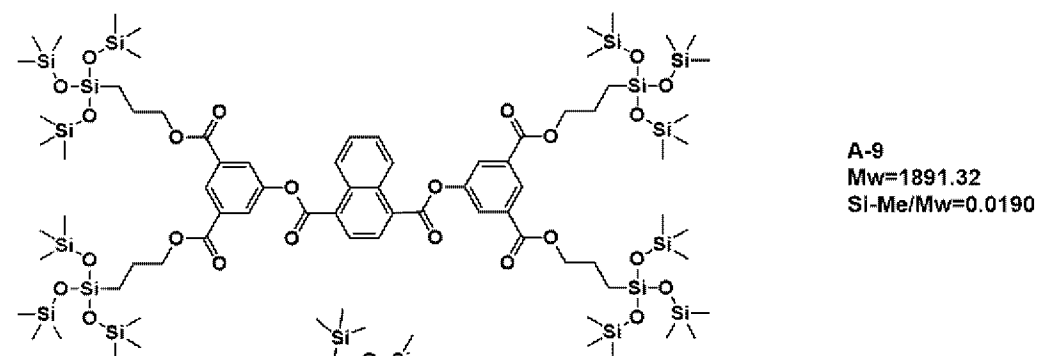
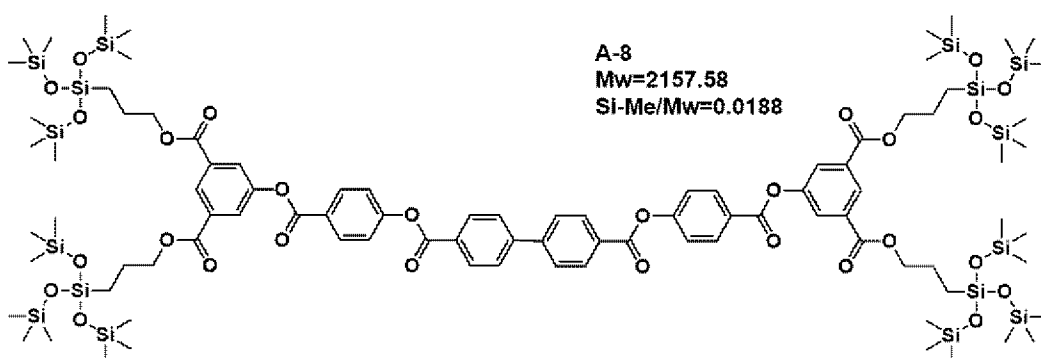
A-6
Mw=889.5
Si-Me/Mw=0.0157



A-7
Mw=949.55
Si-Me/Mw=0.0147

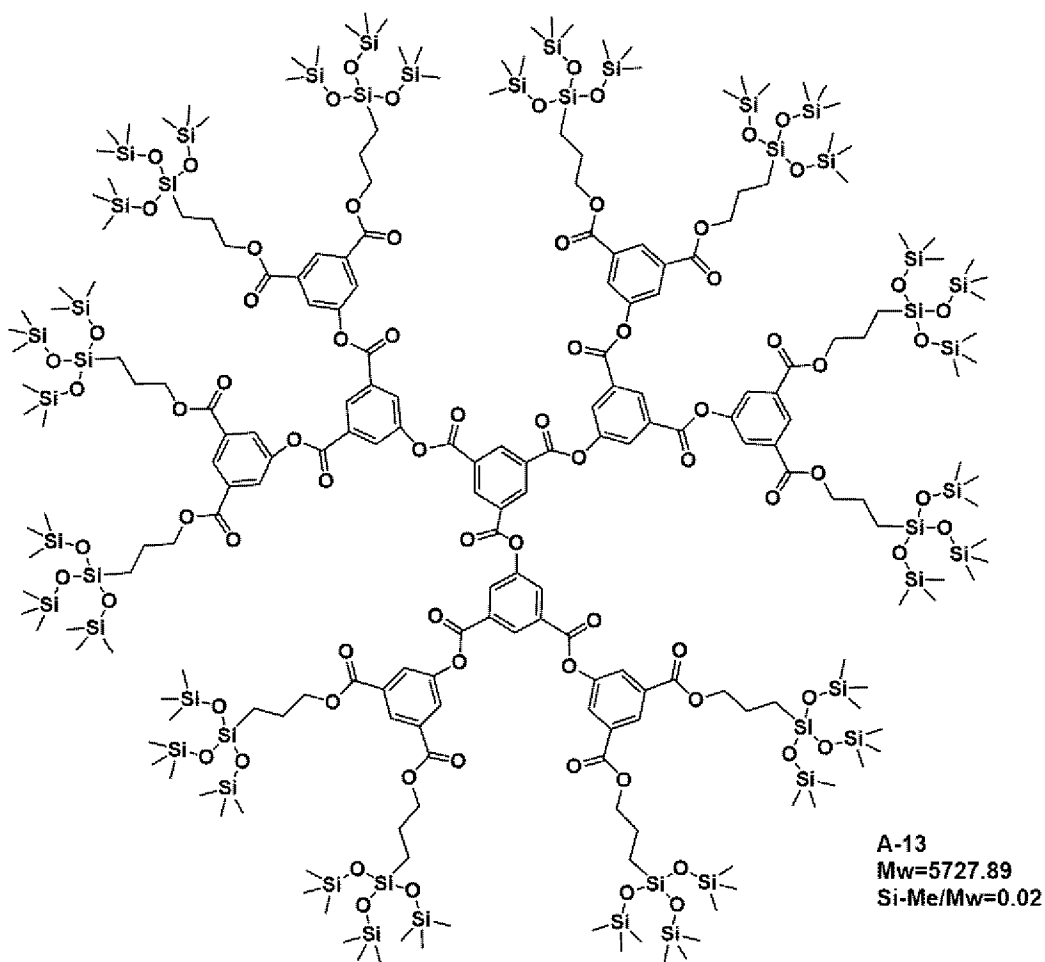
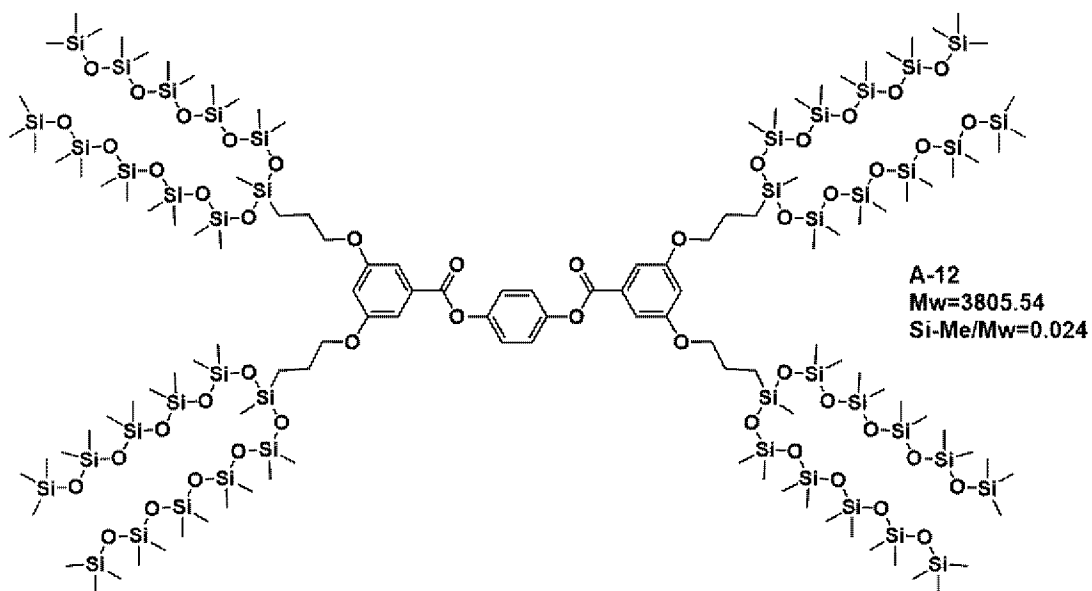
[0135]

[化10]



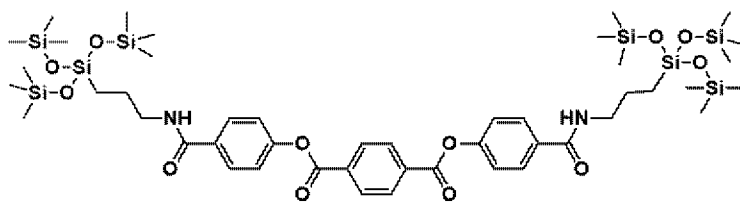
[0136]

[化11]

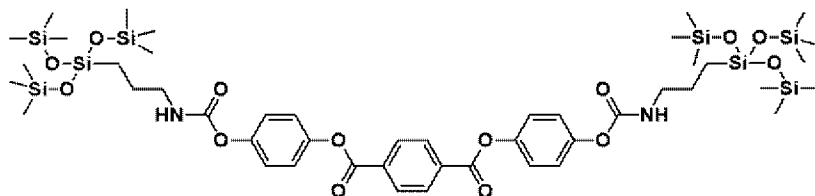


[0137]

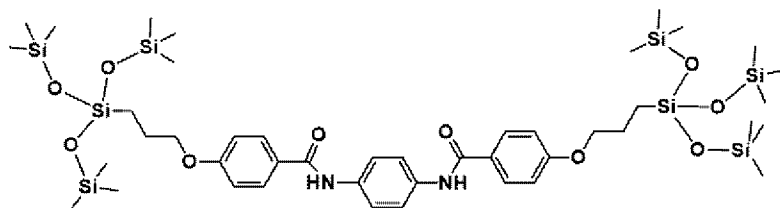
[化12]



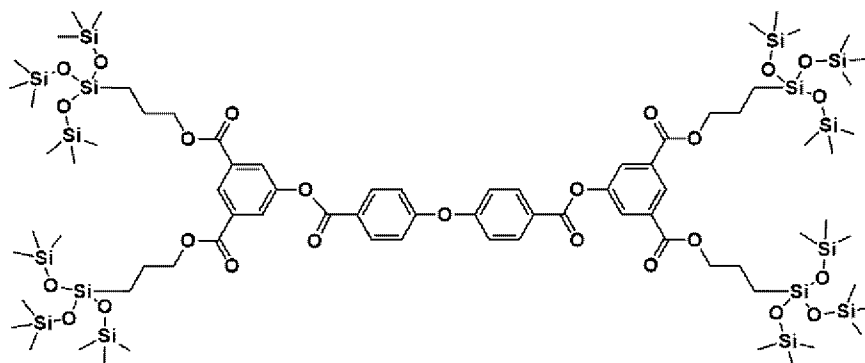
A-14
Mw=1077.83
Si-Me/Mw=0.0167



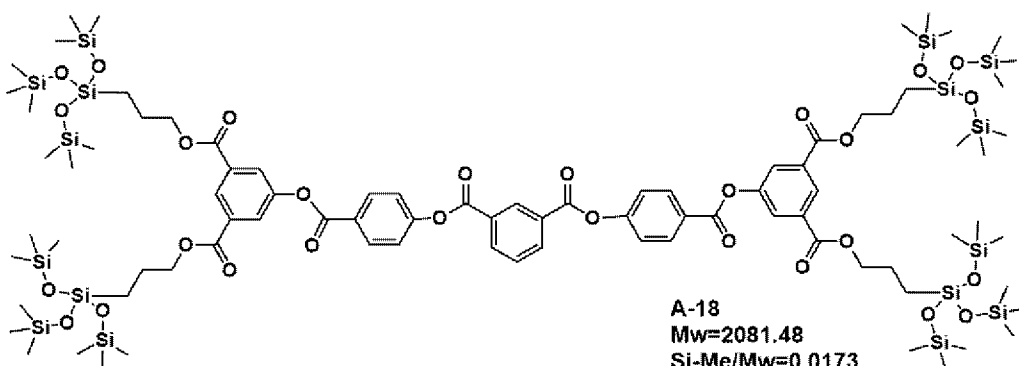
A-15
Mw=1109.83
Si-Me/Mw=0.0171



A-16
Mw=1021.81
Si-Me/Mw=0.0176



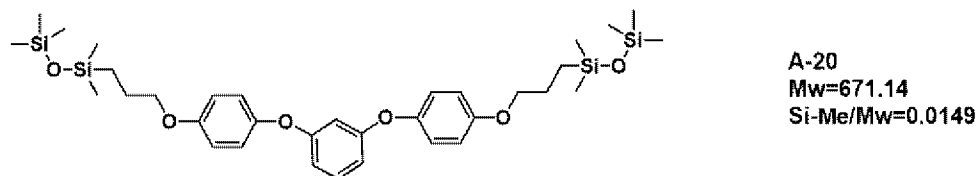
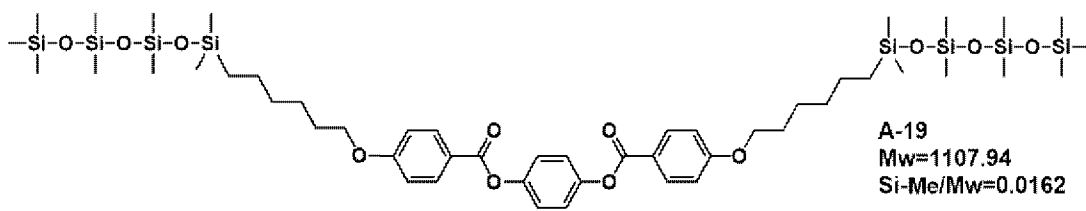
A-17
Mw=1933.36
Si-Me/Mw=0.0186



A-18
Mw=2081.48
Si-Me/Mw=0.0173

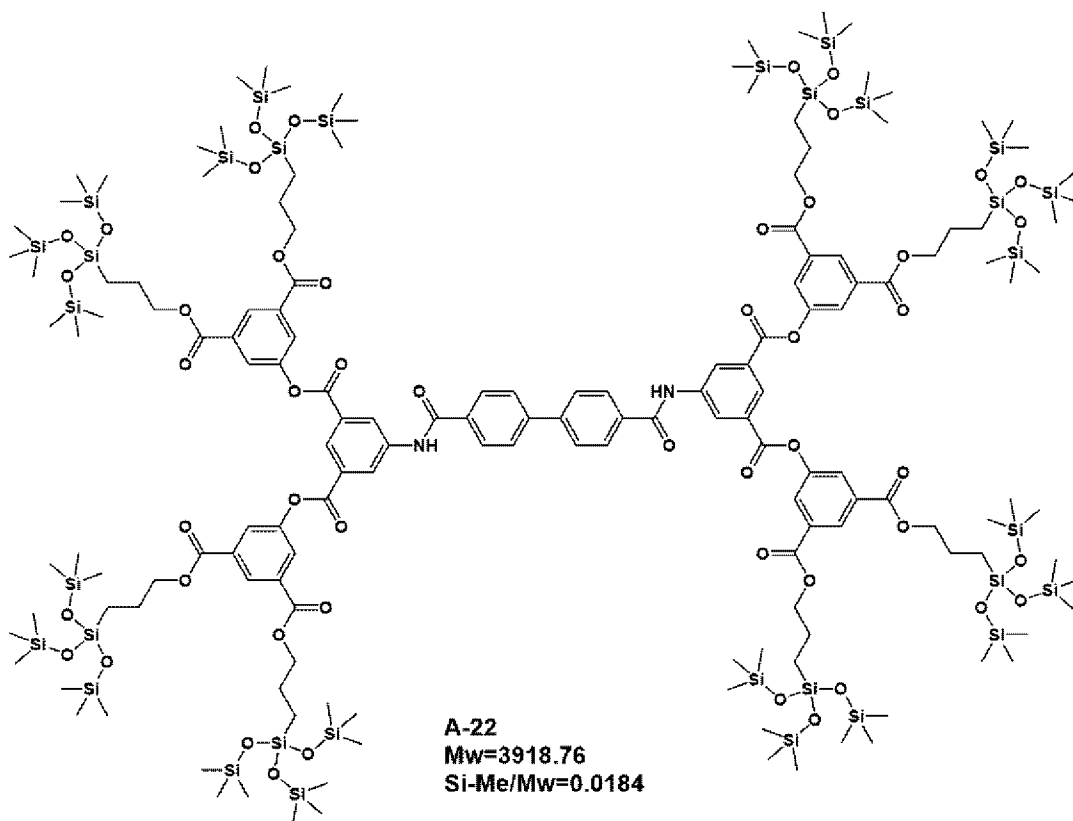
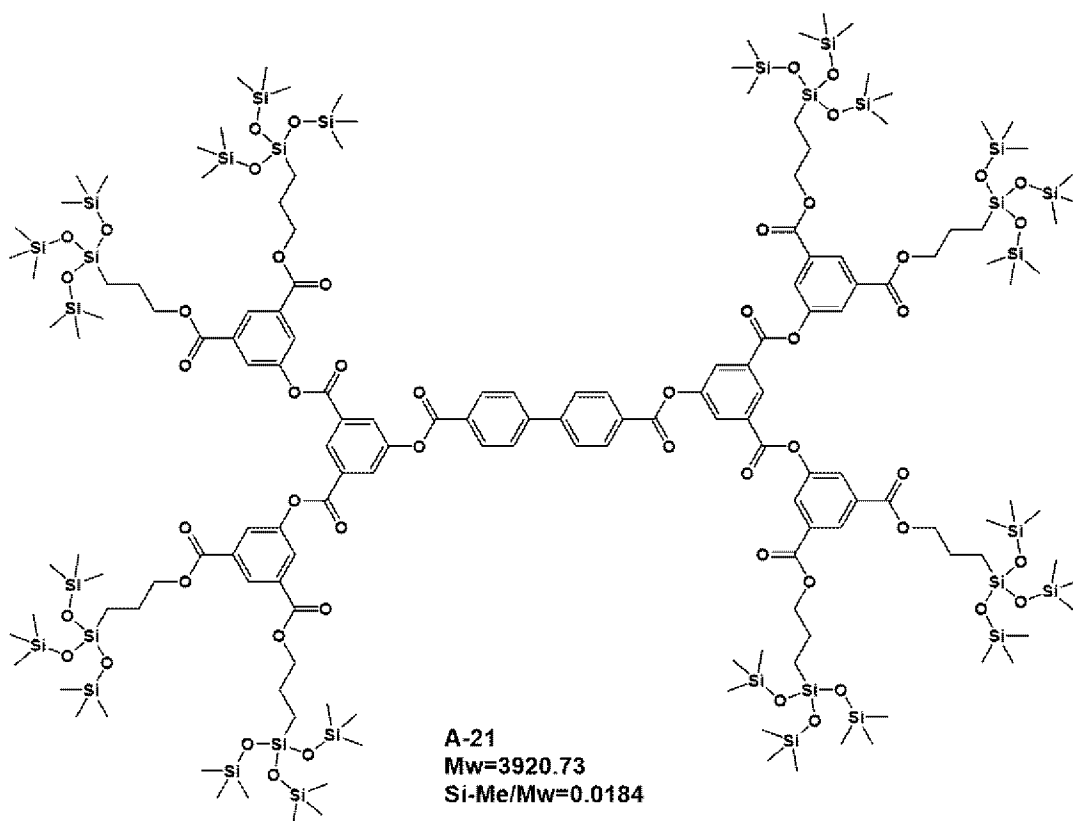
[0138]

[化13]



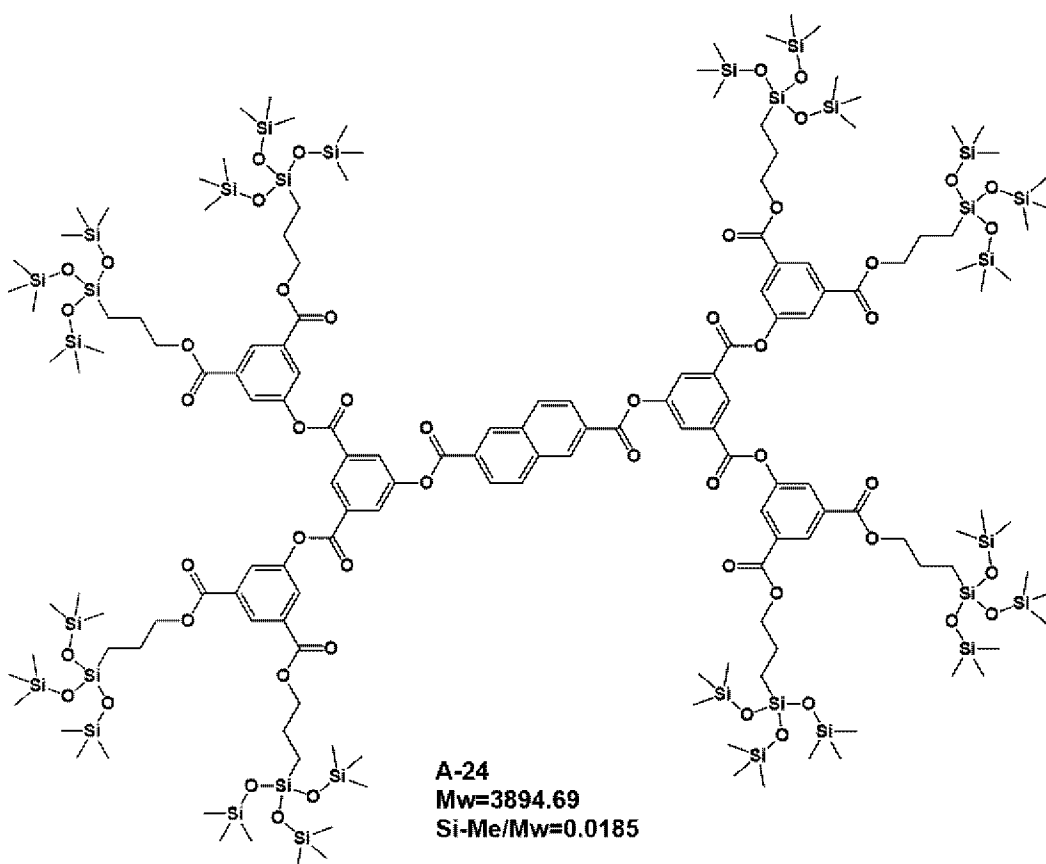
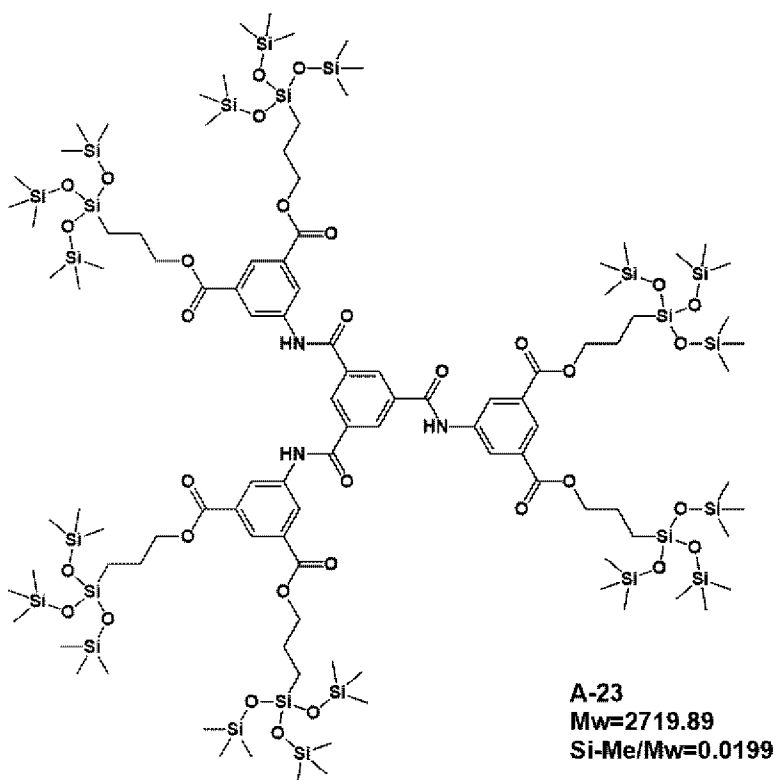
[0139]

[化14]



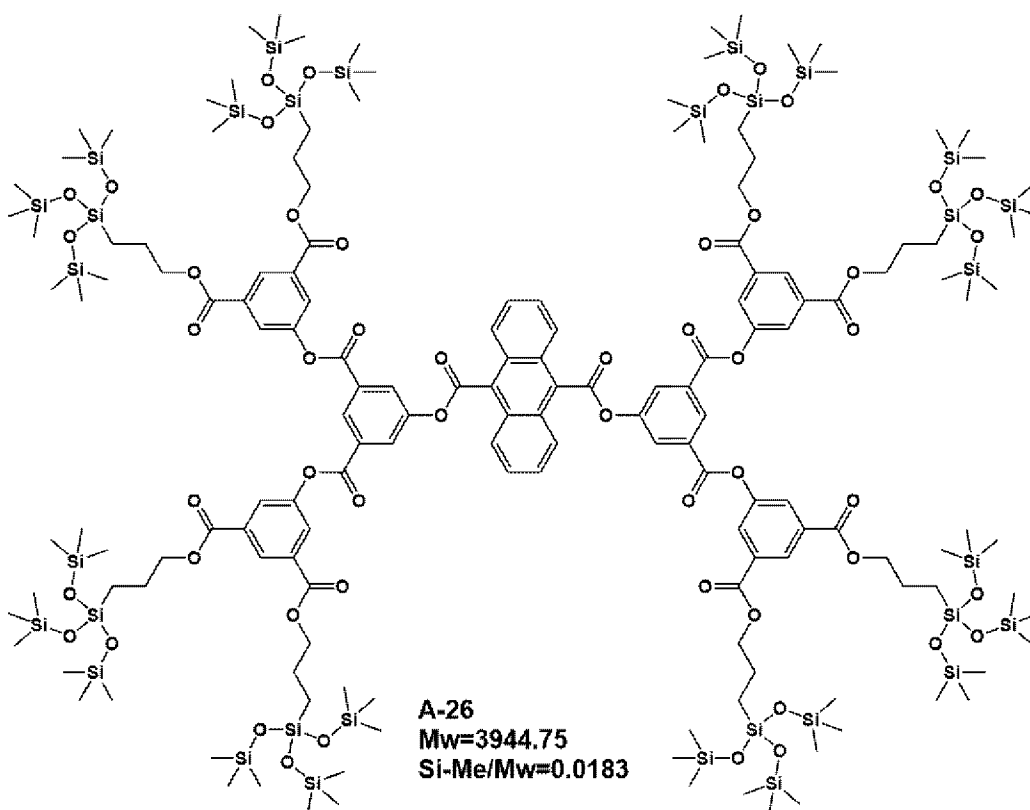
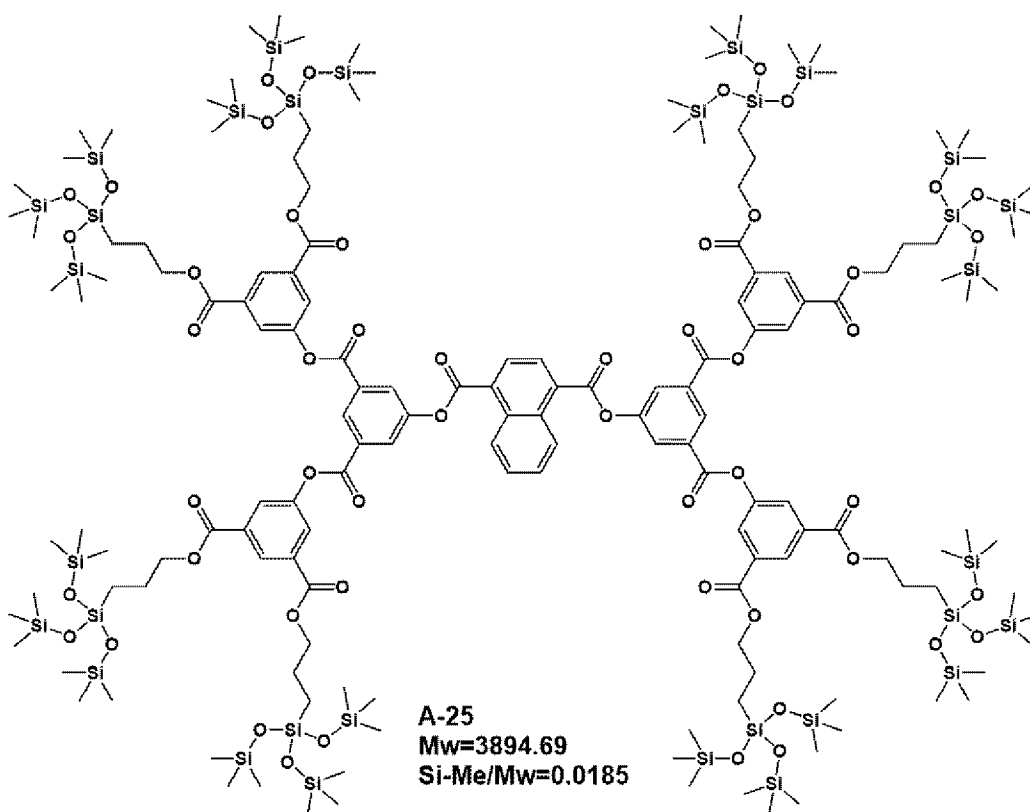
[0140]

[化15]



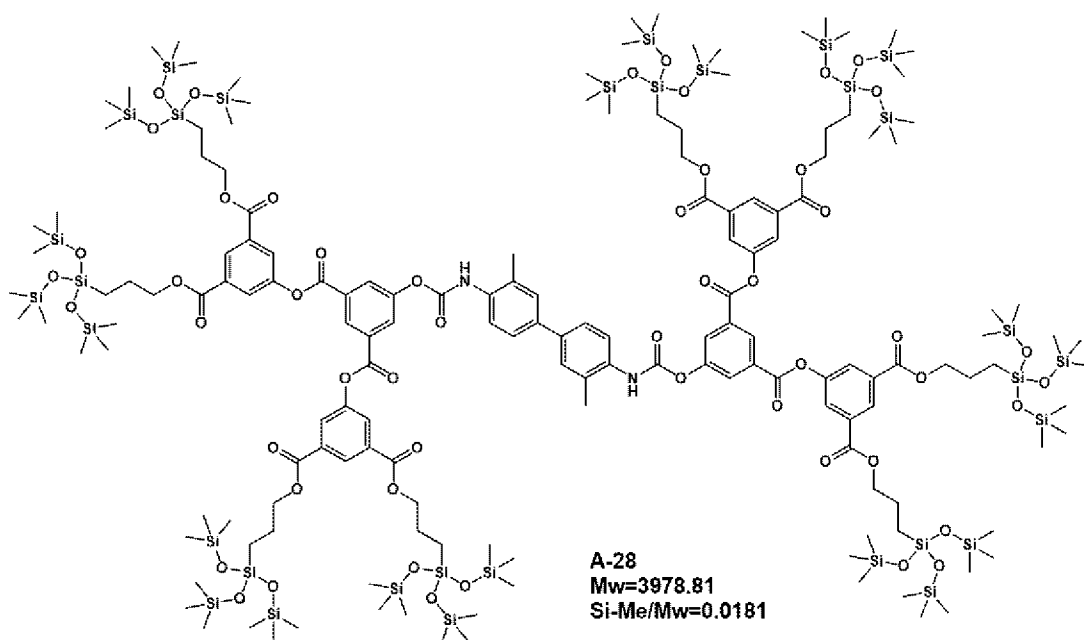
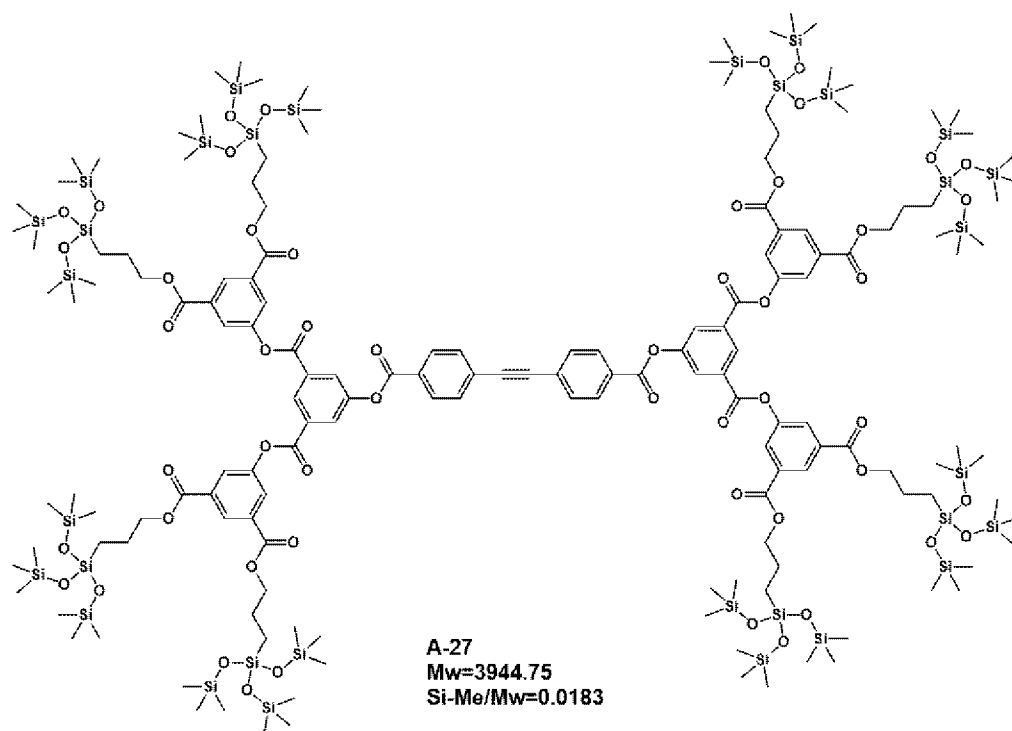
[0141]

[化16]



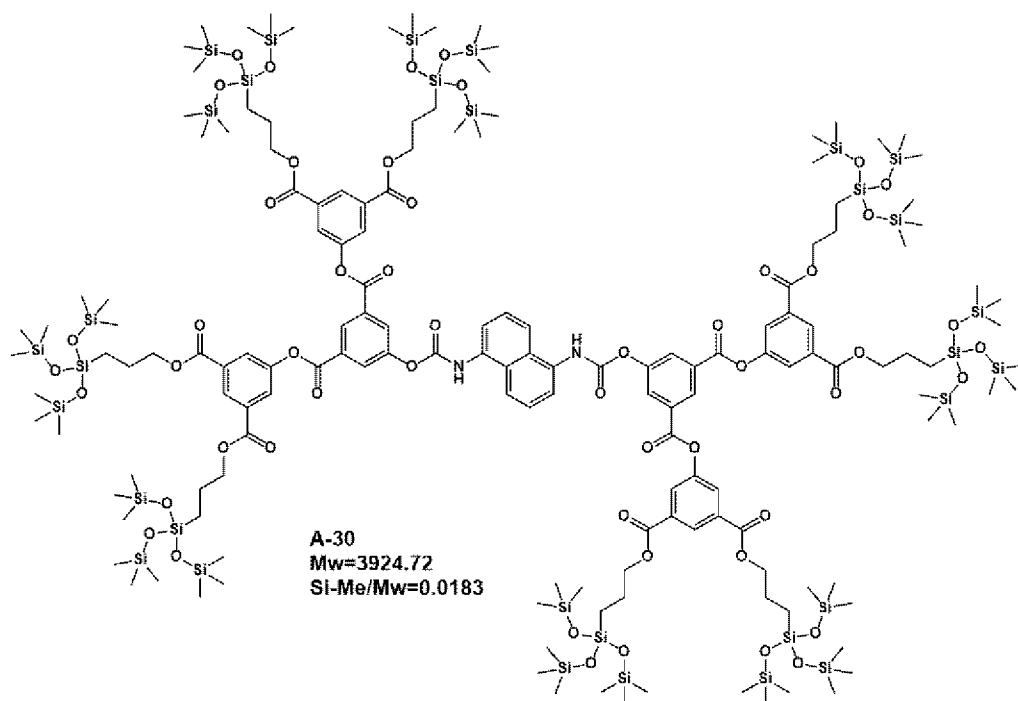
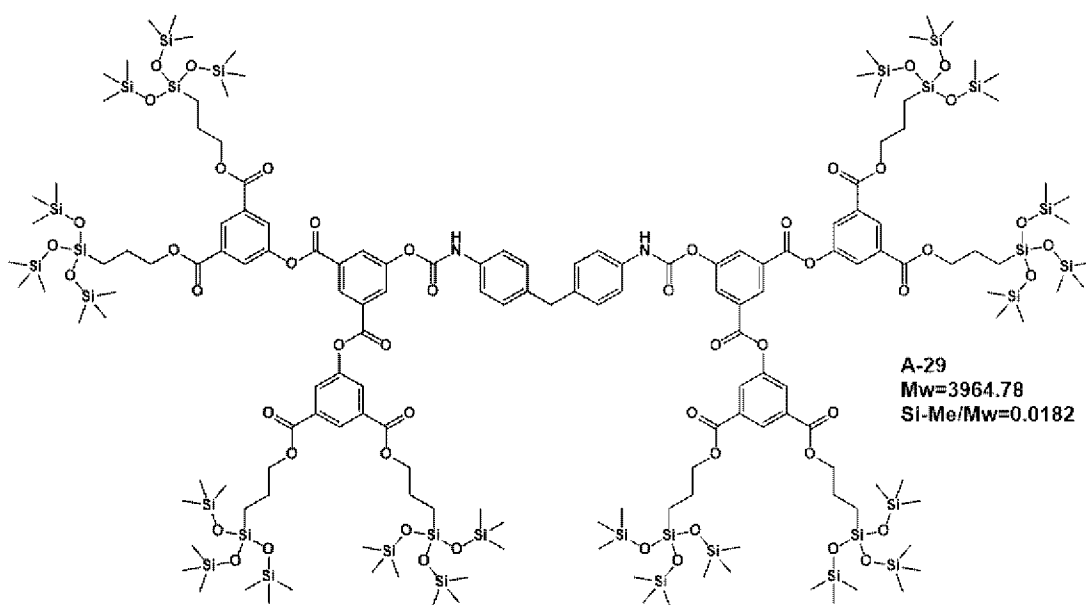
[0142]

[化17]



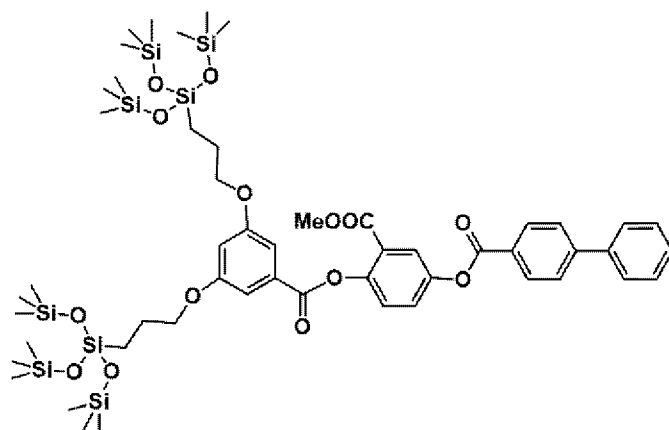
[0143]

[化18]

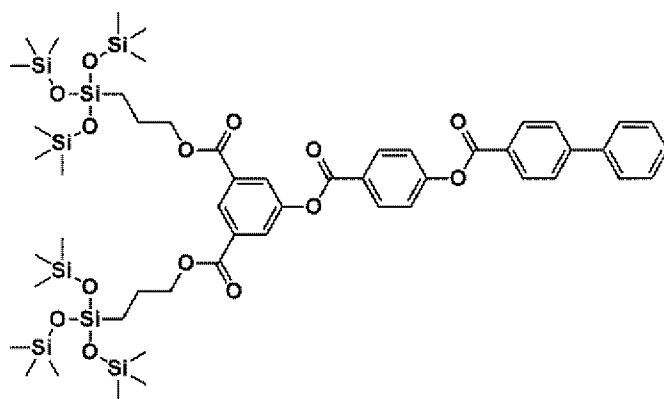


[0144]

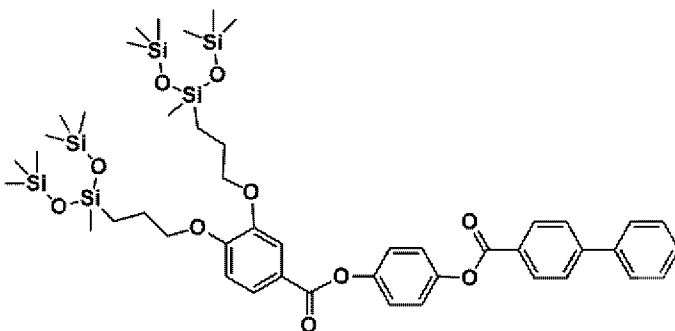
[化19]



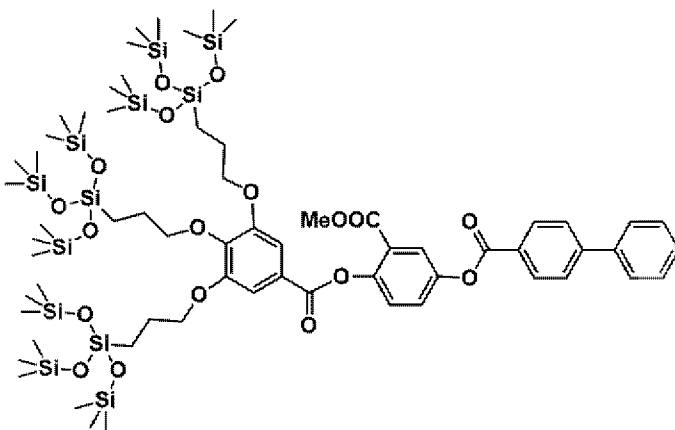
B-1
Mw=1157.91
Si-Me/Mw=0.0155



B-2
Mw=1155.89
Si-Me/Mw=0.0156



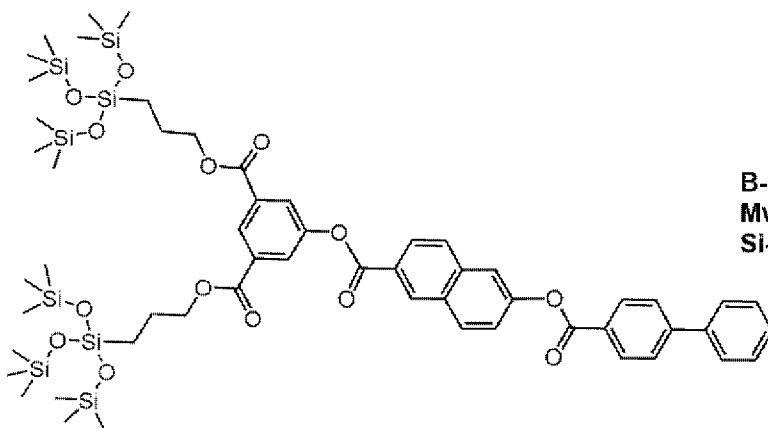
B-3
Mw=951.57
Si-Me/Mw=0.0147



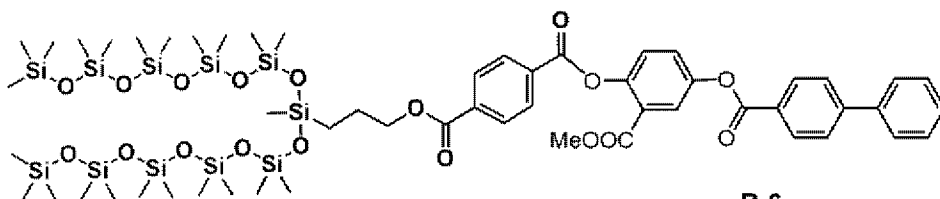
B-4
Mw=1510.63
Si-Me/Mw=0.0179

[0145]

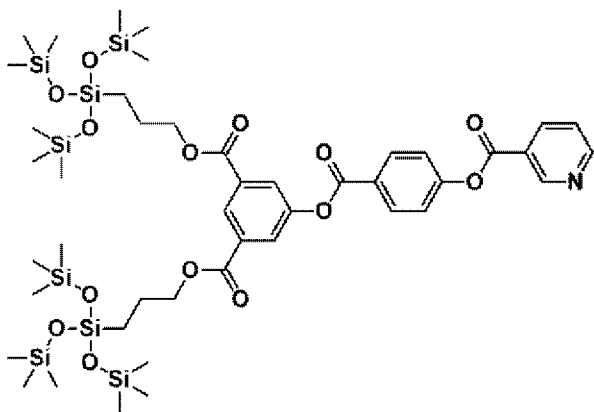
[化20]



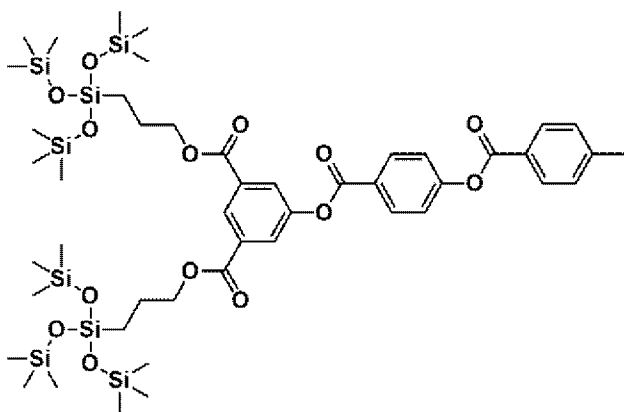
B-5
Mw=1205.95
Si-Me/Mw=0.0149



B-6
Mw=1352.27
Si-Me/Mw=0.017



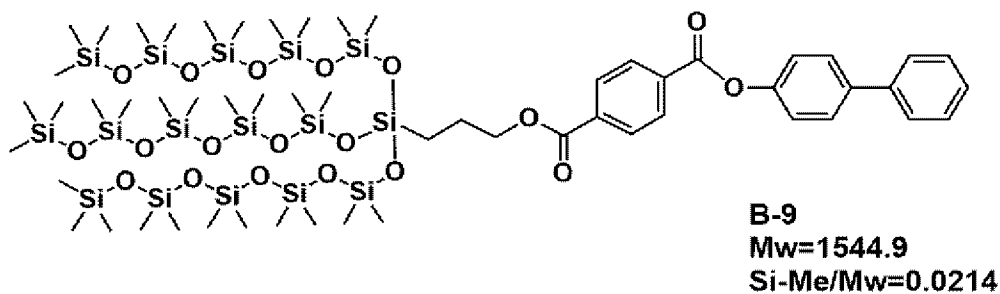
B-7
Mw=1080.78
Si-Me/Mw=0.0167



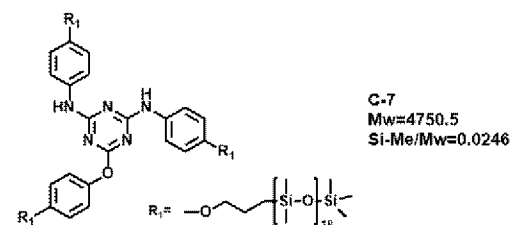
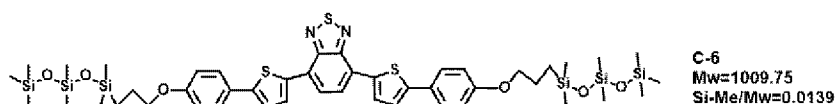
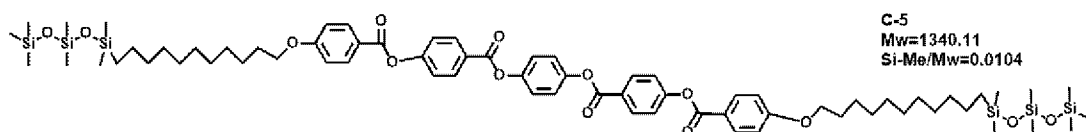
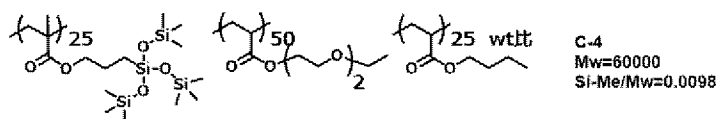
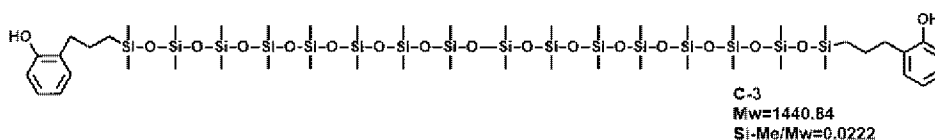
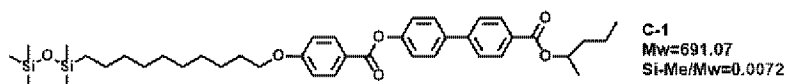
B-8
Mw=1093.82
Si-Me/Mw=0.0165

[0146]

[化21]



[0147] [化22]



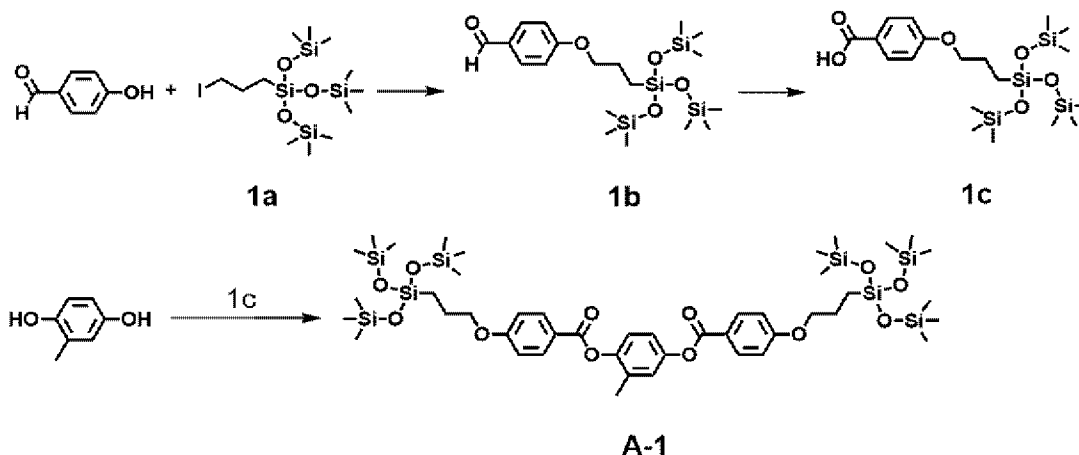
[0148] [合成例]

[化合物 A-1 の合成]

以下の手順に基づいて、化合物 A-1 を合成した。

[0149]

[化23]



[0150] ＜化合物 1 b の合成＞

p-ヒドロキシベンズアルデヒド（8.2 mmol）及び炭酸セシウム（12.3 mmol）をDMF（50 mL）に溶解させた溶液に、化合物 1 a（8.6 mmol）を加えた後、室温で6時間攪拌した。攪拌後、得られた反応液に酢酸エチル、塩酸水、及び食塩水を加えて分液処理し、溶媒を留去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン／酢酸エチル＝20／1）にて精製し、化合物 1 bを得た（収率70％）。

[0151] ＜化合物 1 c の合成＞

NaH₂PO₄二水和物（2.2 mmol）及びテトラブチルアンモニウム硫酸水素塩（0.08 mmol）を水（2.2 mL）に溶解させた溶液Aを調製した。次いで、化合物 1 b（7.8 mmol）を酢酸エチル（6 mL）及びTHF（5 mL）に溶解させた溶液Bを調製し、溶液Aを溶液Bに滴下した。得られた混合物に、更に、過酸化水素（1.3 mmol）を加え、続けてNaClO₂（9.4 mmol）水溶液（2.5 mL）を加えた後、40℃で1時間攪拌した。攪拌後、亜硫酸ナトリウム水溶液により反応をクエンチした後、酢酸エチルと塩酸水を加えて分液処理し、溶媒を留去し、化合物 1 cを得た（収率95％）。

[0152] ＜化合物 A-1 の合成＞

メチルヒドロキノン（1.0 mmol）及び化合物 1 c（2.2 mmol）をジクロロメタン（10 mL）に溶解させ、水冷下で更にEDCI（3.

0 mmol) 及びDMAP (0.1 mmol) を加えた。得られた反応液を室温で4時間攪拌した後、水を加えて分液処理を行った。シリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン／酢酸エチル＝20／1）にて精製し、化合物A-1を得た（収率80%）。

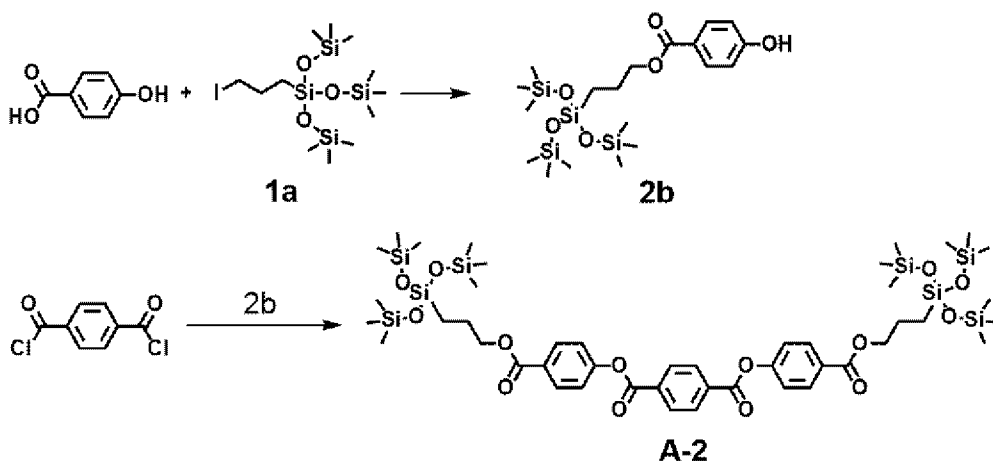
得られた化合物A-1のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1036.38 (100.0%), 1037.38 (89.7%), 1038.38 (56.4%), 1039.38 (28.2%), 1038.39 (12.6%), 1040.38 (10.6%), 1039.39 (8.2%), 1041.38 (4.1%), 1040.37 (3.1%), 1040.39 (2.8%), 1042.38 (1.3%), 1041.39 (1.2%), 1041.37 (1.0%)

[0153] [化合物A-2の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-2を合成した。

[0154] [化24]



[0155] <化合物2bの合成>

窒素雰囲気下でp-ヒドロキシ安息香酸 (17.9 mmol)、化合物1a (26.8 mmol) をシクロペンタノン (40 mL)、DMAc (40 mL) に溶解させ、100℃まで昇温後、N,N-ジイソプロピルエチルアミン (35.7 mmol) を加えた。得られた反応液を100℃で5時間加熱攪拌した。溶媒を留去し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサ

ン／酢酸エチル)にて精製し、化合物2bを得た。

[0156] <化合物A-2の合成>

テレフタル酸ジクロリド (8.0 mmol) 及び化合物6b (17.9 mmol) をシクロペンタノン (20 mL) に溶解させ、水冷下でN, N-ジイソプロピルエチルアミン (20.1 mmol)、N-メチルイミダゾール (1.6 mmol) を加えた。得られた反応液を室温で1時間攪拌した後、メタノール及びH₂Oでクエンチして析出した固体を回収し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン／酢酸エチル) にて精製し、化合物A42を得た (収率70%)。

得られた化合物A-2のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

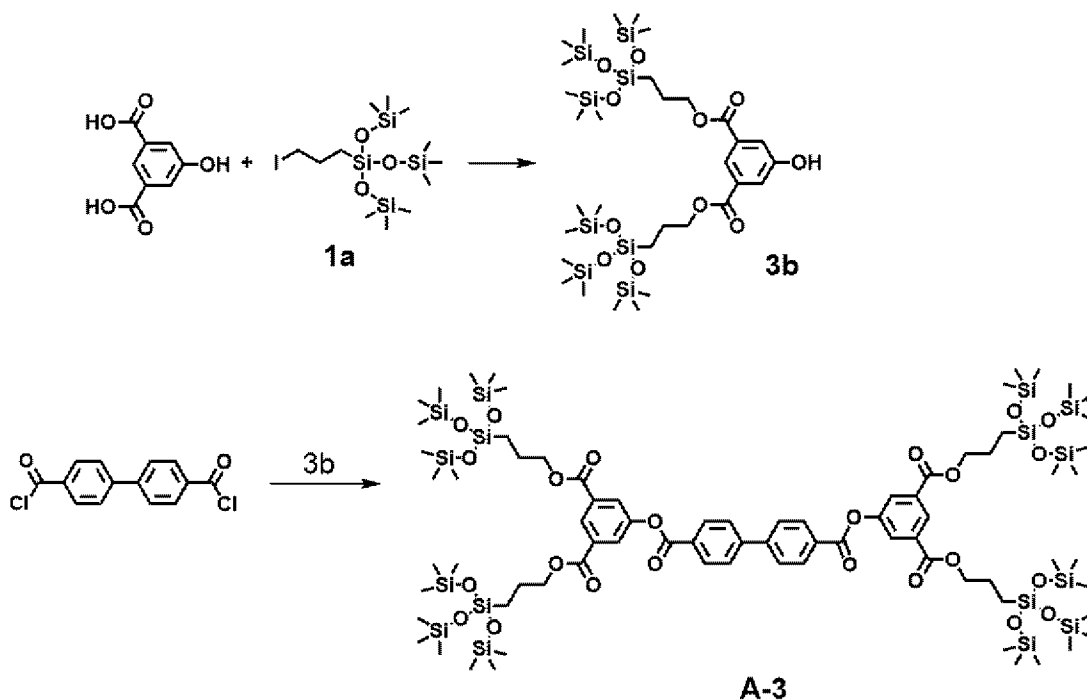
m/z : 1078.35 (100.0%), 1079.36 (51.2%), 1079.35 (40.6%), 1080.36 (36.5%), 1080.35 (34.0%), 1081.35 (23.6%), 1081.36 (13.8%), 1082.35 (9.4%), 1082.36 (7.3%), 1083.35 (3.4%), 1083.36 (2.9%), 1084.35 (1.4%)

[0157] [化合物A-3の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-3を合成した。

[0158]

[化25]



[0159] ＜化合物 3 b の合成＞

窒素雰囲気下で 5-ヒドロキシイソフタルサン (4.47 mmol)、化合物 1 a (13.4 mmol) をシクロペンタノン (20 mL)、DMAc (20 mL) に溶解させ、100℃まで昇温後、N,N-ジイソプロピルエチルアミン (17.9 mmol) を加えた。得られた反応液を 100℃で 5 時間加熱攪拌した。溶媒を留去し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン/酢酸エチル) にて精製し、化合物 3 b を得た。

[0160] ＜化合物 A-3 の合成＞

4,4'-ビフェニルジカルボニルクロリド (2.01 mmol) 及び化合物 3 b (4.47 mmol) をシクロペンタノン (10 mL) に溶解させ、水冷下で N,N-ジイソプロピルエチルアミン (5.0 mmol)、N-メチルイミダゾール (0.4 mmol) を加えた。得られた反応液を室温で 1 時間攪拌した後、メタノール及び H₂O でクエンチして析出した固体を回収し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン/酢酸エチル) にて精製し、化合物 A-3 を得た (収率 70%)。

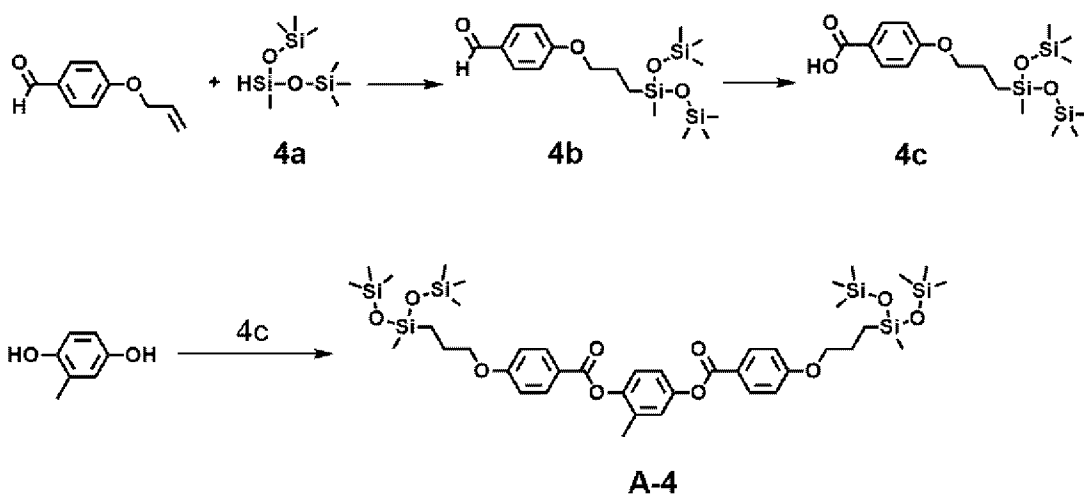
得られた化合物 A-3 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

m/z : 1915.65 (100.0%), 1916.65 (92.4%), 1917.65 (73.1%), 1914.65 (60.4%), 1918.65 (48.6%), 1917.66 (30.0%), 1919.65 (27.4%), 1916.66 (26.8%), 1918.66 (17.3%), 1920.65 (14.1%), 1919.66 (11.7%), 1918.64 (8.1%), 1921.65 (7.7%), 1920.66 (6.8%), 1919.64 (5.8%), 1920.64 (3.2%), 1921.66 (2.7%), 1922.65 (2.7%), 1915.66 (1.6%), 1921.64 (1.2%), 1922.66 (1.2%), 1922.64 (1.2%), 1923.65 (1.0%)

[0161] [化合物A-4の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-4を合成した。

[0162] [化26]



[0163] <化合物4bの合成>

窒素雰囲気下でp-アリロキシベンズアルデヒド (18.5 mmol)、化合物2a (18.5 mmol) をTHF (3 mL) に溶解させ、水冷下で更にKarstedt's 触媒 (Pt 2%キシレン溶液、30 μ L) を加えた。得られた反応液を室温で2時間攪拌した後、溶媒を留去し、シリカゲ

ルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン／酢酸エチル＝９／１）にて精製し、化合物４ｂを得た（収率７０％）。

[0164] ＜化合物４ｃの合成＞

上述の＜化合物１ｃの合成＞と同様の手順により、化合物４ｃを得た。

[0165] ＜化合物Ａ－４の合成＞

上述の＜化合物Ａ－１の合成＞と同様の手順により、化合物Ａ－４を得た。

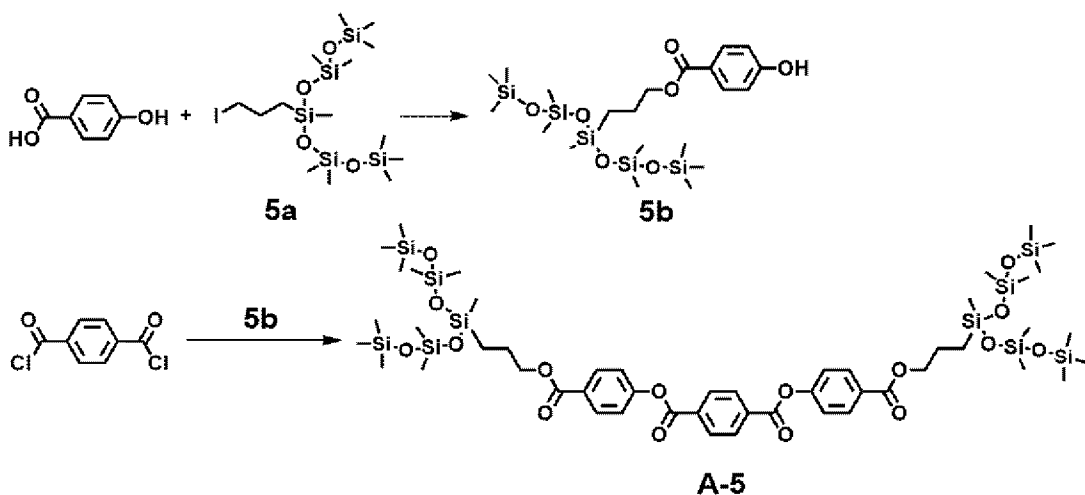
得られた化合物Ａ－４のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 888.34 (100.0%), 889.35 (45.5%), 889.34 (30.5%), 890.35 (26.0%), 890.34 (24.0%), 891.34 (14.3%), 891.35 (7.9%), 892.34 (5.0%), 892.35 (3.5%), 893.34 (1.5%), 893.35 (1.2%)

[0166] [化合物Ａ－５の合成]

以下の手順に基づいて、化合物Ａ－５を合成した。

[0167] [化27]



[0168] 化合物１ａを化合物５ａに変更した以外は、上述した〔化合物Ａ－２の合成〕と同様の手順により、化合物Ａ－５を合成した。

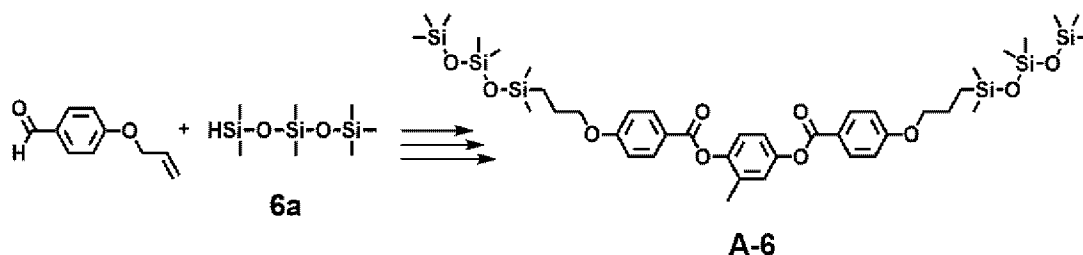
得られた化合物Ａ－５のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1226.39 (100.0%), 1227.40 (55.7%), 1227.39 (50.8%), 1228.40 (46.8%), 1228.39 (45.1%), 1229.39 (41.4%), 1230.39 (18.8%), 1229.40 (14.3%), 1230.40 (10.1%), 1231.39 (7.5%), 1231.40 (5.0%), 1232.39 (2.8%), 1232.40 (1.2%), 1233.39 (1.0%)

[0169] [化合物A-6の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-6を合成した。

[0170] [化28]



[0171] 化合物4aを化合物6aに変更した点以外は、上述の[化合物A-4の合成]と同様の手順により、化合物A-6を合成した。

得られた化合物A-6のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

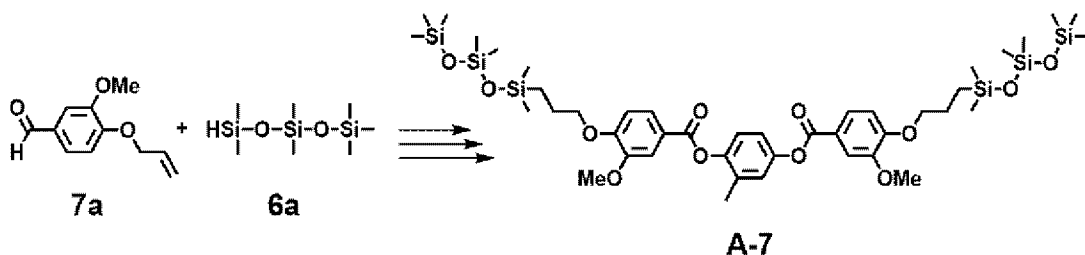
m/z : 888.34 (100.0%), 889.35 (45.5%), 889.34 (30.5%), 890.35 (26.0%), 890.34 (24.0%), 891.34 (14.3%), 891.35 (7.9%), 892.34 (5.0%), 892.35 (3.5%), 893.34 (1.5%), 893.35 (1.2%)

[0172] [化合物A-7の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-7を合成した。

[0173]

[化29]



[0174] 原料成分であるアルデヒドを化合物 7 a に変更した点以外は、上述の〔化合物 A-6 の合成〕と同様の手順により、化合物 A-7 を合成した。

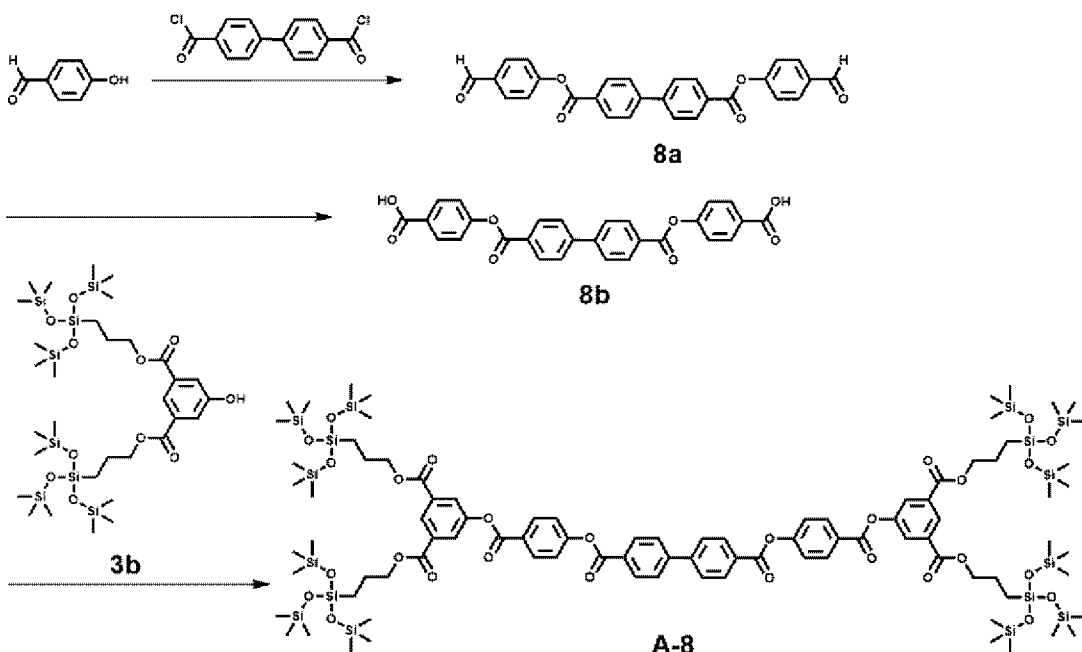
得られた化合物 A-7 のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 948.36 (100.0%), 949.37 (47.8%), 949.36 (30.5%), 950.37 (28.2%), 950.36 (24.0%), 951.36 (14.8%), 951.37 (9.0%), 952.36 (4.6%), 952.37 (4.6%), 953.36 (1.5%), 953.37 (1.4%)

[0175] [化合物 A-8 の合成]

以下の手順に基づいて、化合物 A-8 を合成した。

[0176] [化30]



[0177] 化合物 8 a は、汎用のエステル化条件で合成し、化合物 8 b は上述した＜化合物 1 c の合成＞と同様の酸化反応で合成した。原料を上記の通り変更した以外は、上述の〔化合物 A-1 の合成〕と同様の手順により、化合物 A-8 を合成した。

得られた化合物 A-8 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

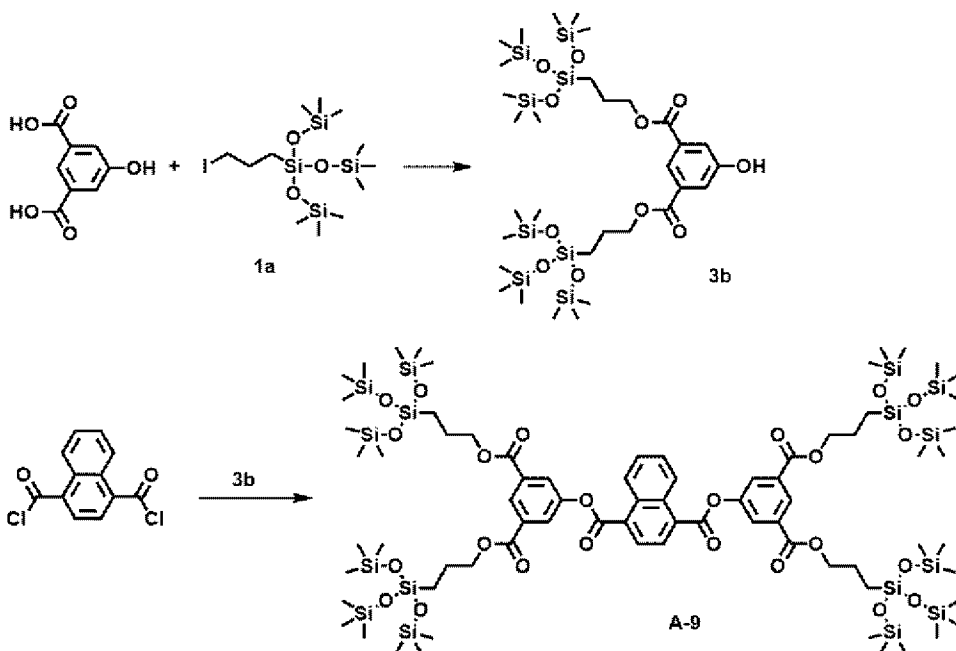
m/z : 2156.70 (100.0%), 2155.70 (72.7%), 2157.69 (72.5%), 2157.70 (72.3%), 2154.69 (71.1%), 2156.69 (60.0%), 2155.69 (57.7%), 2158.70 (53.2%), 2158.69 (52.1%), 2159.70 (34.5%), 2159.69 (31.0%), 2160.69 (17.8%), 2160.70 (17.4%), 2161.69 (9.1%), 2161.70 (8.2%), 2159.71 (4.1%), 2162.69 (4.1%), 2158.71 (3.7%), 2162.70 (3.6%), 2160.71 (2.4%), 2163.69 (1.6%), 2160.68 (1.5%), 2163.70 (1.3%), 2161.71 (1.3%), 2161.68 (1.0%)

[0178] 〔化合物 A-9 の合成〕

以下の手順に基づいて、化合物 A-9 を合成した。

[0179]

[化31]



[0180] 4, 4'-ビフェニルジカルボニルクロリドを1, 4-ナフタレンジカルボニルジクロリドに変更した以外は、〔化合物A-3の合成〕と同様の方法で、化合物A-9を合成した。

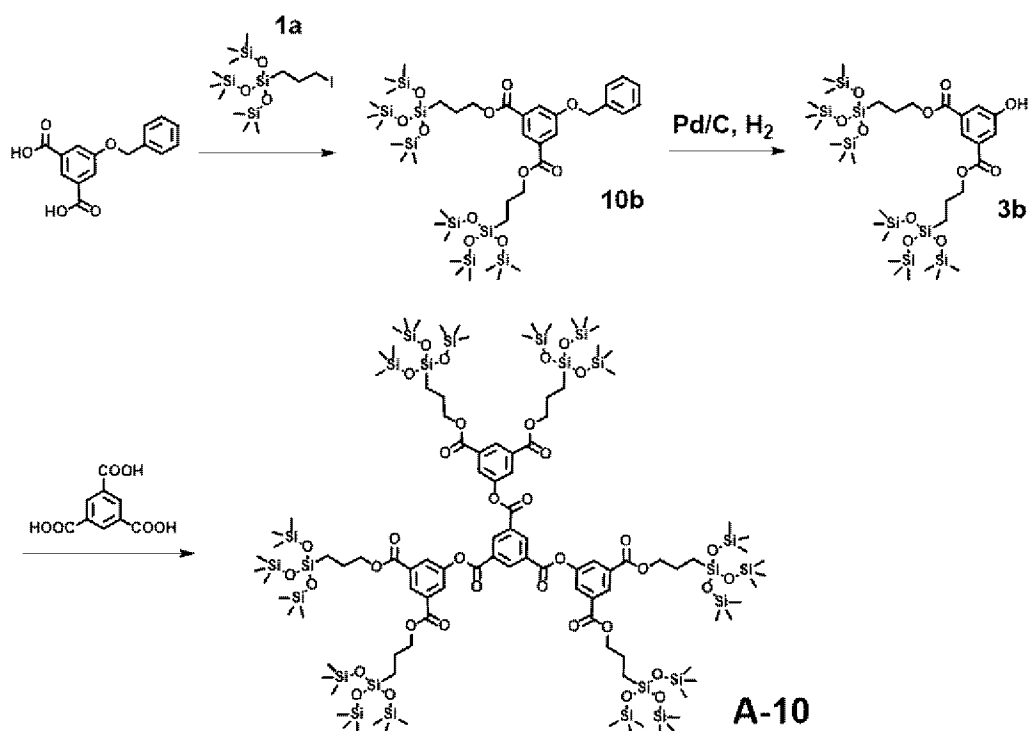
得られた化合物A-9のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1889.64 (100.0%), 1891.64 (65.4%), 1890.64 (65.0%), 1888.64 (60.2%), 1890.63 (50.9%), 1892.64 (47.2%), 1891.63 (29.0%), 1893.63 (21.7%), 1893.64 (19.5%), 1892.63 (17.6%), 1894.64 (11.5%), 1894.63 (10.2%), 1892.65 (7.0%), 1891.65 (5.9%), 1895.64 (5.7%), 1895.63 (4.5%), 1893.65 (2.7%), 1896.64 (2.5%), 1896.63 (2.0%), 1894.65 (1.9%), 1895.65 (1.1%)

[0181] 〔化合物A-10の合成〕

以下の手順に基づいて、化合物A-10を合成した。

[0182] [化32]



[0183] <化合物 10b の合成>

1-メチル-2-ピロリドン 250 mL に 5-(ベンジルオキシ)イソフタル酸 (2.90 g)、炭酸カリウム (4.42 g)、化合物 1a (10.89 g) を添加し、55℃で2時間攪拌した。反応液を室温まで冷却し、酢酸エチル (300 mL)、1規定塩酸水 (150 mL) を添加し、攪拌後、有機層を分液した。有機層を 10%食塩水 (100 mL) で2回洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。乾燥剤を濾別し、有機層を濃縮して褐色油状の粗体を得た。得られた粗体をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘキサン/酢酸エチル = 95/5) で精製し、無色油状の化合物 10b を 6.7 g 得た。

[0184] <化合物 3b の合成>

化合物 10b (6.00 g) を THF (30 mL) に溶解し、窒素置換した。そこへ、10%パラジウム炭素 (1.35 g) 添加後、水素置換し、室温で1時間攪拌した。反応液をセライト濾過し、濾液を減圧濃縮して無色油状の化合物 3b を 5.2 g 得た。

[0185] <化合物A-10の合成>

1, 3, 5-ベンゼントリカルボン酸 (50 mg) に化合物 3b (672 mg)、塩酸1-エチル-3-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド (408 mg)、N,N-ジメチルアミノピリジン (9 mg)、1-メチルイミダゾール (60 mg)、ジクロロメタン (1 mL) を混合し、室温で1時間攪拌した。反応液をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン/酢酸エチル=95/5) で精製し、無色油状の化合物A-10を440 mg得た。

得られた化合物A-10のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

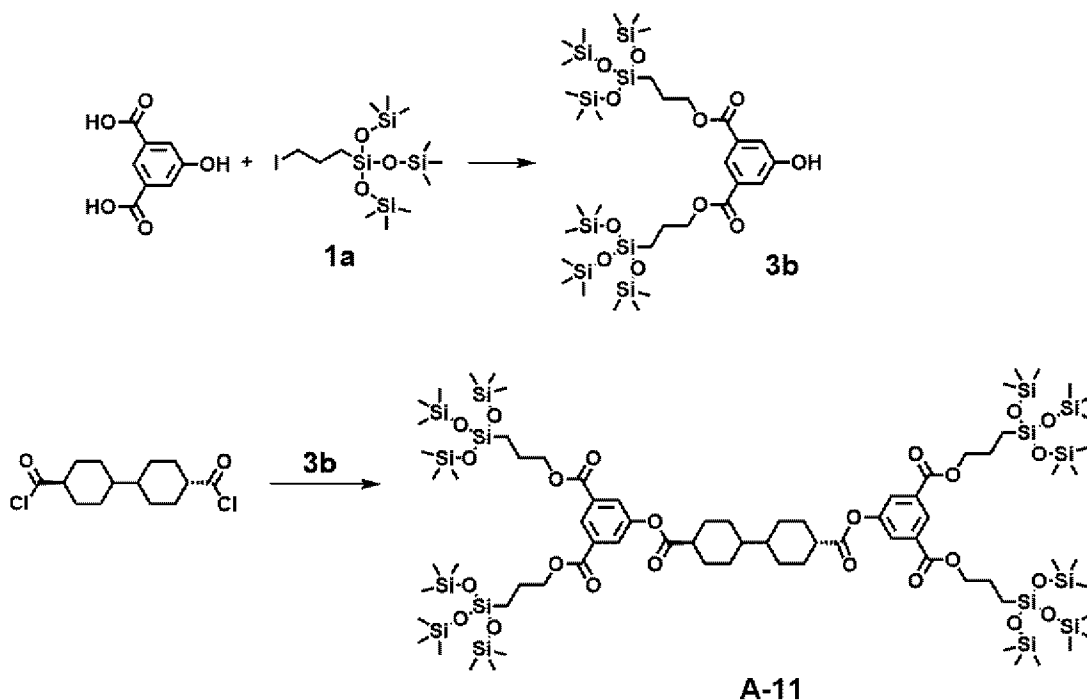
m/z : 2721.91 (100.0%), 2720.91 (95.2%), 2722.91 (87.7%), 2719.91 (79.3%), 2723.91 (64.5%), 2724.91 (42.5%), 2718.91 (33.2%), 2721.90 (31.1%), 2722.90 (30.0%), 2723.90 (29.9%), 2720.90 (26.6%), 2725.91 (24.8%), 2724.90 (24.2%), 2725.90 (17.7%), 2722.92 (15.4%), 2726.91 (14.0%), 2723.92 (12.9%), 2726.90 (10.0%), 2721.92 (9.9%), 2724.92 (9.5%), 2727.91 (6.9%), 2725.92 (6.0%), 2727.90 (5.6%), 2726.92 (3.5%), 2728.91 (3.3%), 2728.90 (2.8%), 2727.92 (1.7%), 2729.90 (1.3%), 2729.91 (1.3%) .

[0186] [化合物A-11の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-11を合成した。

[0187]

[化33]



[0188] 4, 4' -ビフェニルジカルボニルクロリドを、*trans*-[1, 1' -ビ(シクロヘキサン)]-4, 4' -ジカルボニルジクロリドに変更した以外は、上述の〔化合物 A - 3 の合成〕と同様の手順により、化合物 A - 11 を得た。

得られた化合物 A - 11 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

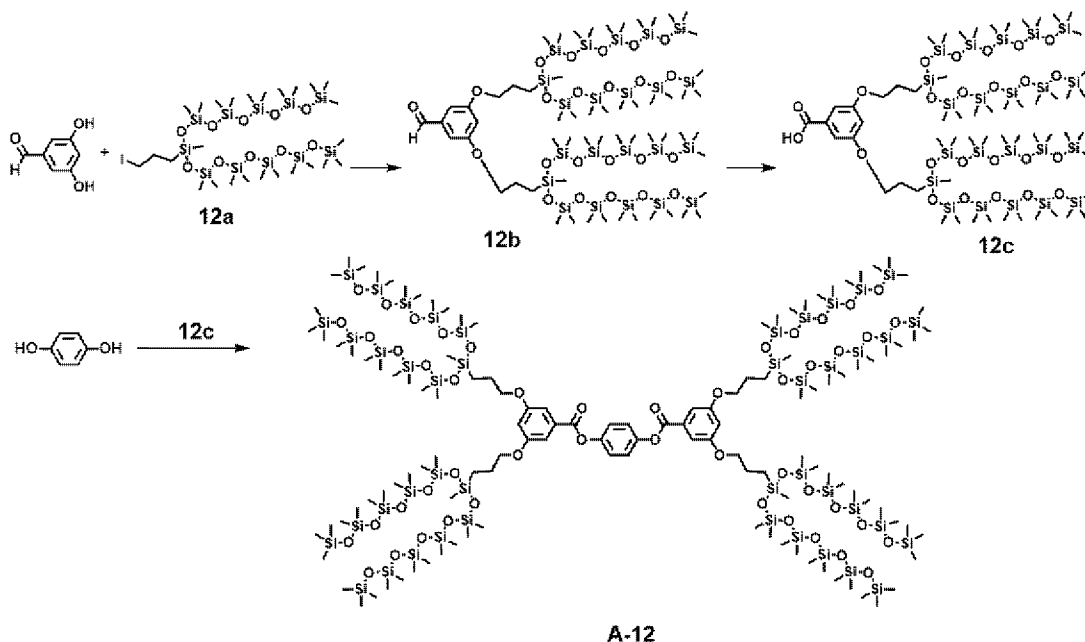
m/z : 1928.75 (100.0%), 1929.75 (99.2%), 1926.75 (88.4%), 1927.75 (77.0%), 1928.74 (74.7%), 1927.74 (71.8%), 1930.74 (56.2%), 1930.75 (48.3%), 1929.74 (42.5%), 1931.74 (32.3%), 1931.75 (30.4%), 1932.75 (17.7%), 1932.74 (15.4%), 1933.75 (9.6%), 1929.76 (9.5%), 1933.74 (6.8%), 1930.76 (4.3%), 1931.76 (4.0%), 1934.74 (3.5%), 1932.76 (3.0%), 1934.75 (2.9%), 1935.74 (1.4%), 193

5.75 (1.1%), 1933.76 (1.0%)

[0189] [化合物A-12の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-12を合成した。

[0190] [化34]



[0191] 化合物1aを化合物12aに変更し、メチルヒドロキノンをヒドロキノンに変更した以外は、上述の[化合物A-1の合成]と同様の手順により、化合物A-12を得た。

得られた化合物A-12のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

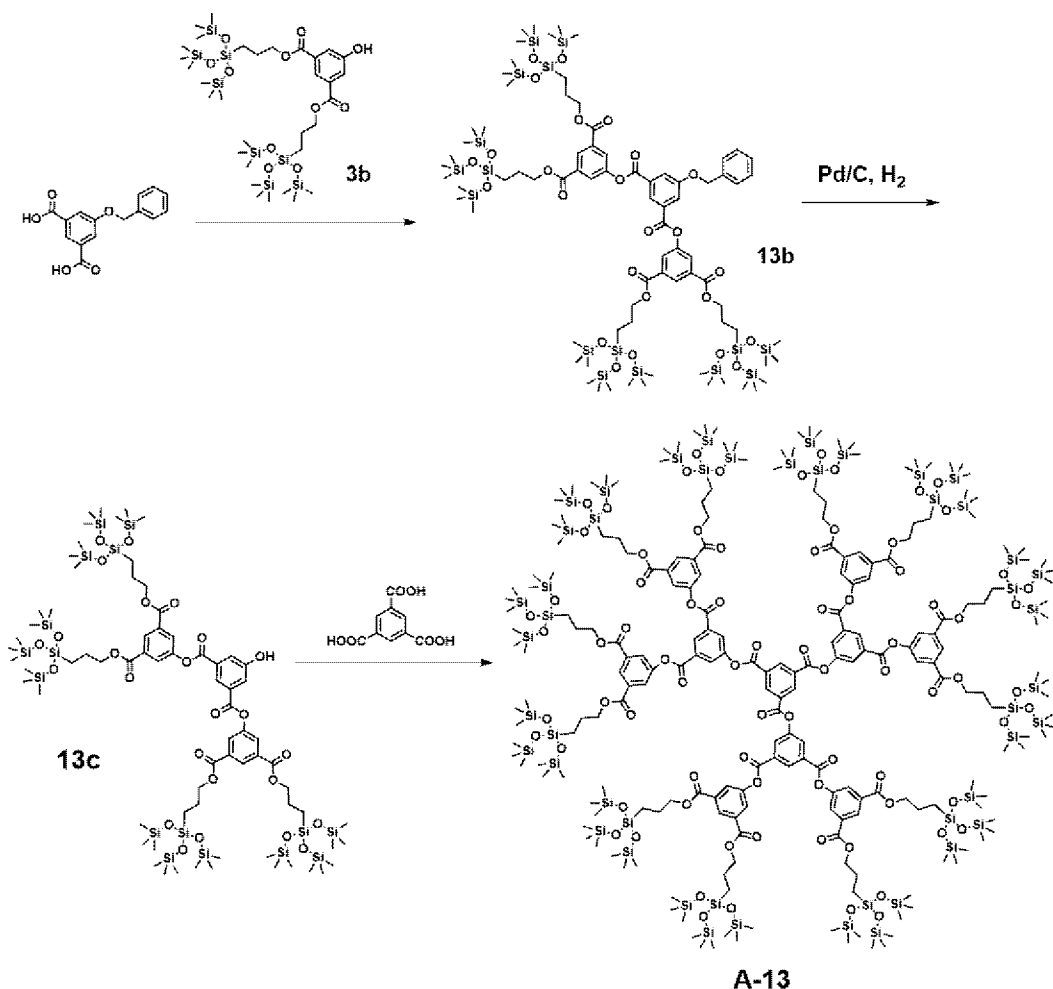
m/z : 3804.17 (100.0%), 3803.17 (94.7%), 3805.17 (90.1%), 3802.17 (82.9%), 3806.16 (74.3%), 3805.16 (62.9%), 3801.17 (57.8%), 3806.17 (57.3%), 3804.16 (57.3%), 3807.16 (54.4%), 3803.16 (48.2%), 3807.17 (38.1%), 3808.16 (37.5%), 3800.17 (32.0%), 3802.16 (28.8%), 3808.17 (21.4%), 3809.16 (21.3%), 3801.16 (13.2%), 3810.16 (11.6%), 3804.18 (10

. 5%), 3799.17 (9.0%), 3803.18 (8.8%), 3809.17 (8.4%), 3805.18 (7.8%), 3802.18 (3.5%), 3811.16 (2.3%), 3808.15 (2.1%), 3809.15 (1.4%)

[0192] [化合物A-13の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-13を合成した。

[0193] [化35]



[0194] <化合物13bの合成>

原料を化合物3bと5-(ベンジルオキシ)イソフタル酸とに変更した以外は、<化合物10bの合成>と同様の手順で、無色油状の化合物13bを1.8g得た。

[0195] <化合物13cの合成>

化合物 1 3 b に原料を変更した以外は、〔化合物 A - 1 0 の合成〕における＜化合物 3 b の合成＞と同様の手順で、無色油状の化合物 1 3 c を 1. 7 g 得た。

[0196] ＜化合物 A - 1 3 の合成＞

原料を化合物 1 3 c と 1, 3, 5 - ベンゼントリカルボン酸とに変更した以外は、化合物 A - 1 0 と同様の手順で、無色油状の化合物 A - 1 3 を 3 0 0 m g 得た。

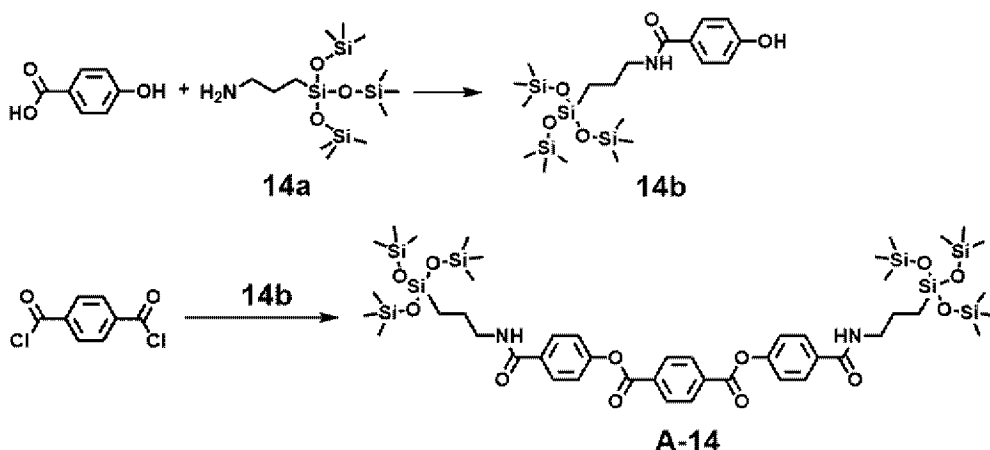
得られた化合物 A - 1 3 の M A L D I - M S 測定結果を以下に示す。

m / z : 5 7 2 7. 8 3 (1 0 0. 0 %), 5 7 2 5. 8 3 (9. 7 %), 5 7 2 6. 8 3 (9 4. 5 %), 5 7 2 4. 8 3 (9 2. 7 %), 5 7 2 3. 8 3 (6 6. 5 %), 5 7 2 8. 8 3 (6 2. 7 %), 5 7 2 6. 8 4 (6 1. 6 %), 5 7 2 5. 8 4 (5 7. 2 %), 5 7 2 2. 8 3 (4 4. 7 %), 5 7 2 3. 8 4 (4 3. 3 %), 5 7 2 9. 8 3 (4 2. 1 %), 5 7 2 4. 8 4 (3 9. 7 %), 5 7 2 7. 8 4 (3 4. 7 %), 5 7 2 8. 8 4 (2 7. 7 %), 5 7 2 1. 8 3 (2 6. 8 %), 5 7 2 2. 8 4 (2 6. 0 %), 5 7 3 0. 8 3 (2 4. 8 %), 5 7 2 9. 8 4 (1 7. 4 %), 5 7 2 8. 8 2 (1 7. 0 %), 5 7 2 4. 8 2 (1 5. 3 %), 5 7 2 0. 8 3 (1 2. 2 %), 5 7 2 6. 8 2 (1 1. 9 %), 5 7 2 5. 8 2 (1 1. 6 %), 5 7 2 7. 8 2 (1 1. 5 %), 5 7 3 1. 8 3 (9. 8 %), 5 7 2 9. 8 2 (9. 5 %), 5 7 3 0. 8 4 (9. 3 %), 5 7 2 1. 8 4 (7. 7 %), 5 7 3 0. 8 2 (5. 7 %), 5 7 3 1. 8 2 (4. 9 %), 5 7 2 6. 8 5 (3. 7 %), 5 7 2 5. 8 5 (3. 5 %), 5 7 1 9. 8 3 (2. 6 %), 5 7 2 3. 8 2 (2. 4 %), 5 7 2 4. 8 5 (1. 7 %), 5 7 3 2. 8 3 (1. 3 %), 5 7 2 7. 8 5 (1. 1 %).

[0197] 〔化合物 A - 1 4 の合成〕

以下の手順に基づいて、化合物 A-14 を合成した。

[0198] [化36]



[0199] 一般的なアミド化条件にて、化合物 14b を合成した。次いで、化合物 14b とテレフタル酸クロリドとを用いて、〔化合物 A-2 の合成〕と同様の手順で、化合物 A-14 を合成した。

得られた化合物 A-14 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

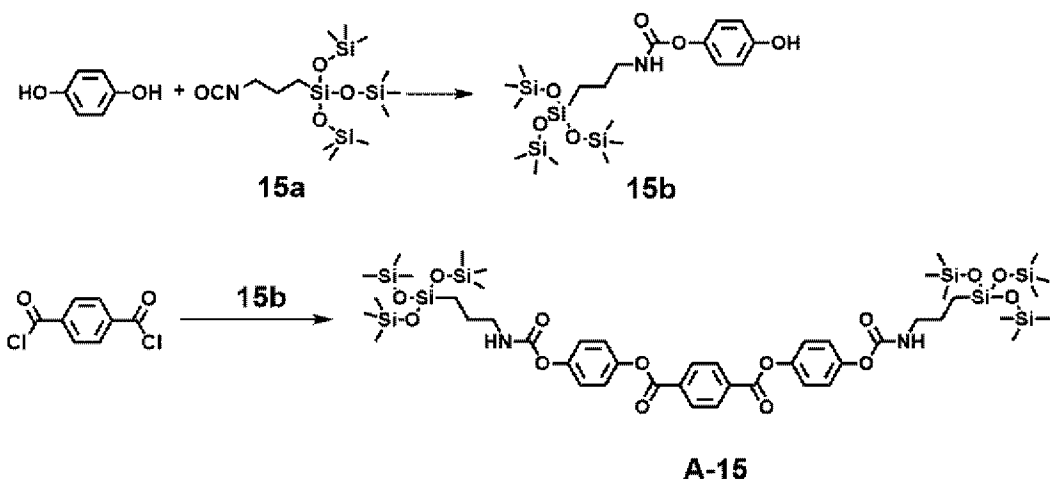
m/z : 1076.39 (100.0%), 1077.39 (91.8%), 1078.39 (43.2%), 1078.38 (27.1%), 1079.39 (25.6%), 1080.39 (11.0%), 1079.38 (9.8%), 1080.38 (4.8%), 1081.39 (3.4%), 1081.38 (2.7%), 1079.40 (2.3%), 1080.40 (1.5%), 1082.39 (1.1%)

[0200] [化合物 A-15 の合成]

以下の手順に基づいて、化合物 A-15 を合成した。

[0201]

[化37]



[0202] 一般的なウレタン化条件にて、化合物 15b を合成した。次いで、化合物 15b とテレフタル酸クロリドとを用いて、〔化合物 A-2 の合成〕と同様の手順で、化合物 A-15 を合成した。

得られた化合物 A-15 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

m/z : 1108.38 (100.0%), 1109.38 (91.8%), 1110.38 (43.6%), 1110.37 (27.1%), 1111.38 (26.0%), 1112.38 (11.3%), 1111.37 (9.8%), 1112.37 (4.8%), 1113.38 (3.5%), 1113.37 (2.7%), 1111.39 (2.3%), 1112.39 (1.5%), 1114.38 (1.2%)

[0203] 〔化合物 A-16 の合成〕

一般的なアミド化条件にて、1,4-フェニレンジアミンと、化合物 1c とを用いて、化合物 A-16 を合成した。得られた化合物 A-16 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

m/z : 1020.40 (100.0%), 1021.40 (89.5%), 1022.40 (40.7%), 1022.39 (27.1%), 1023.40 (24.0%), 1024.40 (10.1%), 1023.39 (9.8%), 1024.39 (4.8%)

%), 1025.40 (3.0%), 1025.39 (2.7%),
, 1023.41 (2.0%), 1024.41 (1.2%),
1026.40 (1.0%)

[0204] [化合物A-17の合成]

4, 4'-ビフェニルジカルボニルクロリドを、4, 4'-オキシジベンゾイルクロリドに変え、[A-3の合成]と同様の方法にて、化合物A-17を得た。得られた化合物A-17のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z: 1931.65 (100.0%), 1932.65 (84.8%), 1933.65 (66.1%), 1930.65 (59.4%), 1934.65 (48.4%), 1932.64 (31.8%), 1933.64 (28.6%), 1935.65 (25.9%), 1934.64 (17.3%), 1935.64 (14.5%), 1936.65 (13.5%), 1936.64 (8.7%), 1934.66 (7.6%), 1933.66 (7.0%), 1937.65 (6.0%), 1935.66 (4.7%), 1937.64 (4.5%), 1938.65 (2.5%), 1936.66 (2.2%), 1938.64 (2.0%), 1937.66 (1.3%)

[0205] [化合物A-18の合成]

4, 4'-ビフェニルジカルボニルクロリドをイソフタロイルクロリドに変更した以外は、[化合物A-8の合成]と同様の方法で、化合物A-18を合成した。得られた化合物A-18のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

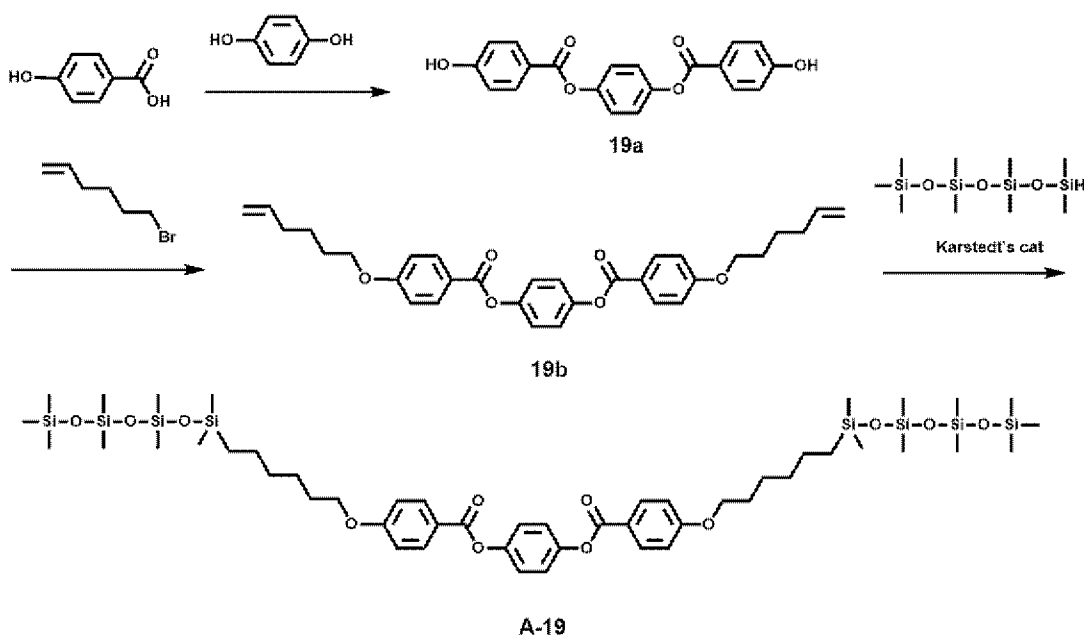
m/z: 2080.67 (100.0%), 2081.66 (98.7%), 2078.66 (77.5%), 2079.67 (74.3%), 2080.66 (65.5%), 2079.66 (63.0%), 2082.66 (60.6%), 2081.67 (48.0%)

. 3%), 2082.67 (45.7%), 2083.66 (33.5%), 2083.67 (31.9%), 2084.66 (23.1%), 2084.67 (12.0%), 2085.66 (9.7%), 2085.67 (6.7%), 2086.66 (4.2%), 2083.68 (3.2%), 2086.67 (3.2%), 2082.68 (2.6%), 2084.65 (1.6%), 2087.66 (1.6%), 2085.65 (1.6%), 2084.68 (1.3%), 2087.67 (1.2%)

[0206] [化合物A-19の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-19を合成した。

[0207] [化38]



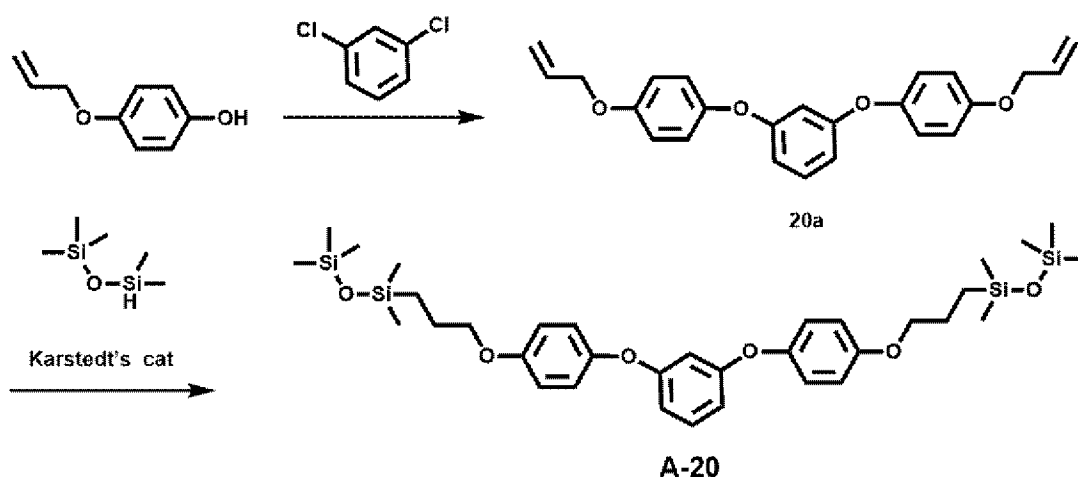
[0208] 一般的なエステル化条件にて、4-ヒドロキシ安息香酸とヒドロキノンから、化合物19aを合成した。次いで、化合物19aと6-ブロモ-1-ヘキセンを、特開2013-209631号公報に記載の条件を参考にして、化合物19bを合成した。次いで、化合物19bと、上記シラン化合物とから、Karstedt's 触媒を用いたヒドロシリル化反応により、化合物A-19を合成した。得られた化合物A-19のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1106.46 (100.0%), 1107.46 (96.2%), 1108.46 (59.0%), 1109.46 (36.0%), 1108.47 (15.1%), 1110.46 (11.5%), 1111.46 (4.7%), 1110.45 (4.6%), 1109.47 (4.4%), 1110.47 (2.6%), 1112.46 (1.6%), 1111.47 (1.4%), 1111.45 (1.1%)

[0209] [化合物A-20の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-20を合成した。

[0210] [化39]



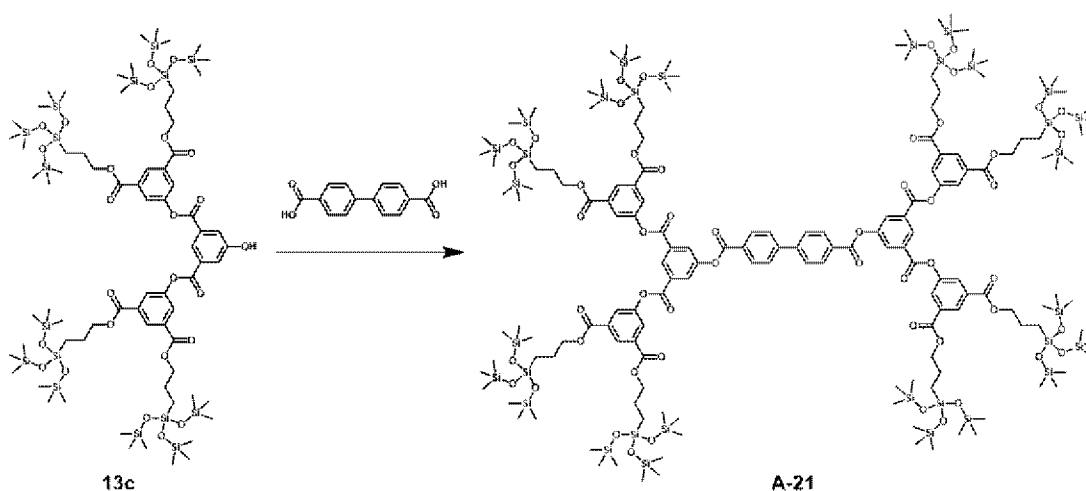
[0211] 4-(2-プロペニルオキシ)フェノールと1,3-ジクロロベンゼンを用いて、RSC Advances (2016), 6, P33249-33258に記載の条件を参照して、化合物20aを合成した。次いで、化合物20aと、上記シラン化合物とから、Karstedt's 触媒を用いたヒドロシリル化反応により、化合物A-20を合成した。得られた化合物A-20のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 670.30 (100.0%), 671.30 (57.3%), 672.30 (23.7%), 673.30 (8.0%), 672.31 (7.0%), 673.31 (2.7%), 674.30 (2.0%)

[0212] [化合物A-21の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-21を合成した。

[0213] [化40]



[0214] 原料を4, 4'-ビフェニルジカルボン酸に変更した以外は、化合物A-13と同様の手順で、化合物A-21を合成した。

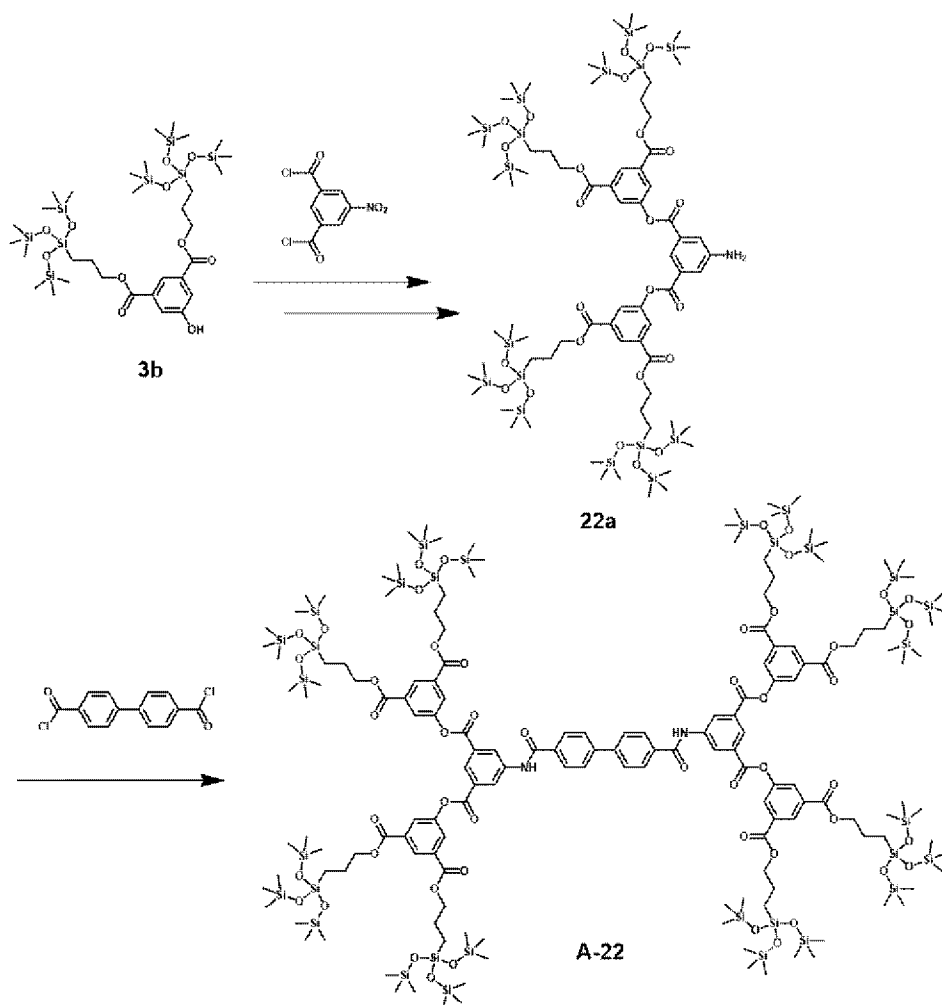
得られた化合物A-21のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 3919.27 (100.0%), 3918.27 (93.4%), 3920.27 (93.0%), 3921.27 (77.0%), 3917.27 (71.6%), 3922.27 (54.6%), 3916.27 (42.2%), 3923.27 (34.8%), 3920.26 (30.8%), 3921.26 (30.3%), 3922.26 (27.2%), 3919.26 (26.3%), 3920.28 (25.6%), 3919.28 (23.0%), 3921.28 (22.7%), 3918.26 (21.4%), 3924.27 (17.9%), 3923.26 (16.7%), 3922.28 (14.9%), 3917.26 (13.6%), 3915.27 (12.7%), 3918.28 (10.3%), 3924.26 (9.6%), 3923.28 (6.6%), 3925.27 (6.5%), 3925.26 (4.3%), 3924.28 (1.7%)

[0215] [化合物A-22の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-22を合成した。

[0216] [化41]



[0217] 化合物3bと5-ニトロイソフタロイルジクロリドから、Chemistry - A European Journal (2008), 14(12), 3544に記載の方法を参考に、化合物22aを合成した。次に、これを、4,4'-ビフェニルジカルボニルクロリドと汎用のアミド化条件で反応させることで、化合物A-22を得た。

得られた化合物A-22のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

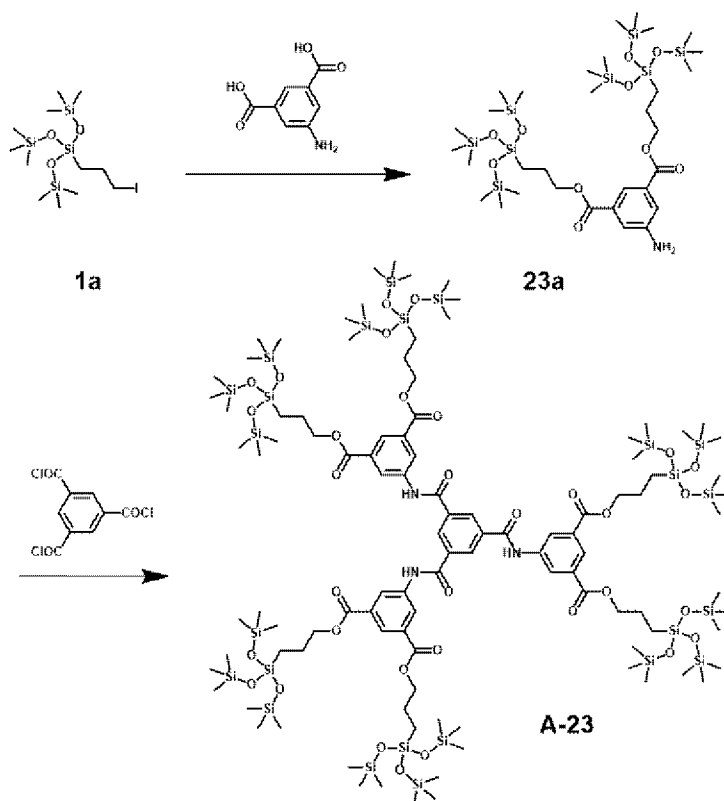
m/z : 3917.30 (100.0%), 3919.30 (94.5%), 3918.30 (92.0%), 3916.30 (91.8%), 3915.30 (67.2%), 3920.30 (54.1%), 3914.30 (42.7%), 3918.31 (38

. 4%), 3921.30 (35.0%), 3917.31 (26.8%), 3919.31 (24.0%), 3917.29 (23.6%), 3920.29 (23.2%), 3916.29 (21.6%), 3920.31 (19.5%), 3922.30 (19.5%), 3915.31 (19.0%), 3918.29 (18.7%), 3921.29 (13.0%), 3916.31 (12.9%), 3913.30 (12.8%), 3919.29 (12.0%), 3921.31 (10.4%), 3923.30 (6.5%), 3922.31 (5.0%), 3922.29 (5.0%), 3923.29 (4.4%), 3918.32 (1.4%)

[0218] [化合物A-23の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-23を合成した。

[0219] [化42]



[0220] 原料を5-アミノイソフタル酸に変更した以外は、化合物3bと同様の方法で、化合物23aを合成した。次にこれを、トリメシン酸クロリドと、汎

用のアミド化法で反応することで、化合物A-23を得た。

得られた化合物A-23のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

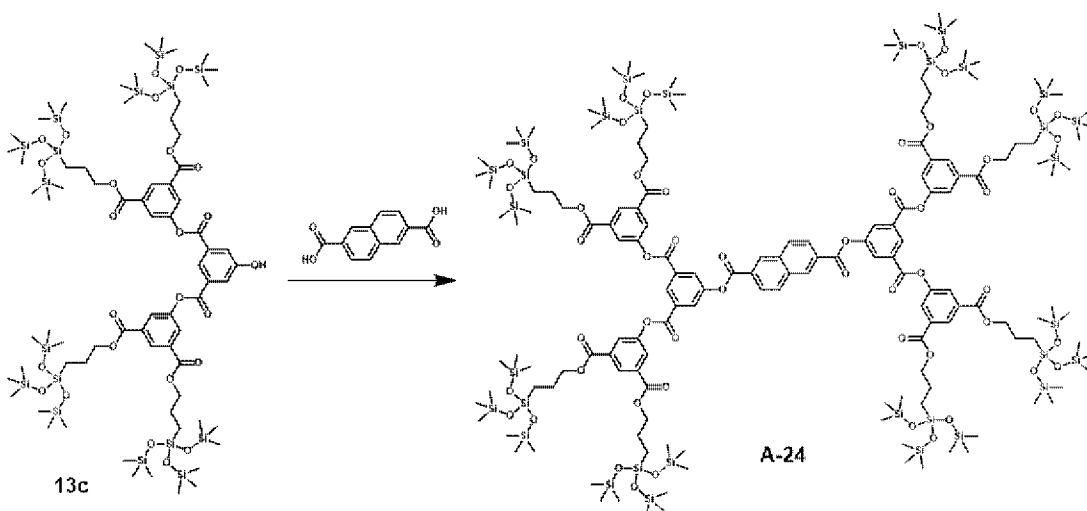
m/z : 2717.96 (100.0%), 2718.95 (98.7%), 2718.96 (96.5%), 2719.95 (92.1%), 2719.96 (86.9%), 2720.96 (72.0%), 2720.95 (70.9%), 2717.95 (70.8%), 2716.95 (56.5%), 2716.96 (53.8%), 2721.95 (51.9%), 2715.95 (45.9%), 2721.96 (45.0%), 2722.95 (32.2%), 2722.96 (27.0%), 2723.95 (18.1%), 2723.96 (15.1%), 2724.95 (10.6%), 2724.96 (7.2%), 2720.97 (6.5%), 2719.97 (6.4%), 2721.97 (5.6%), 2725.95 (4.6%), 2722.97 (4.3%), 2722.94 (3.8%), 2721.94 (3.7%), 2725.96 (3.2%), 2723.97 (2.9%), 2723.94 (2.6%), 2726.95 (1.9%), 2726.96 (1.4%), 2724.94 (1.3%), 2725.94 (1.2%), 2724.97 (1.2%), 2718.97 (1.1%)

[0221] [化合物A-24の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-24を合成した。

[0222]

[化43]



[0223] 原料を2, 6-ナフタレンジカルボン酸に変更した以外は、化合物A-13と同様の手順で、化合物A-24を合成した。

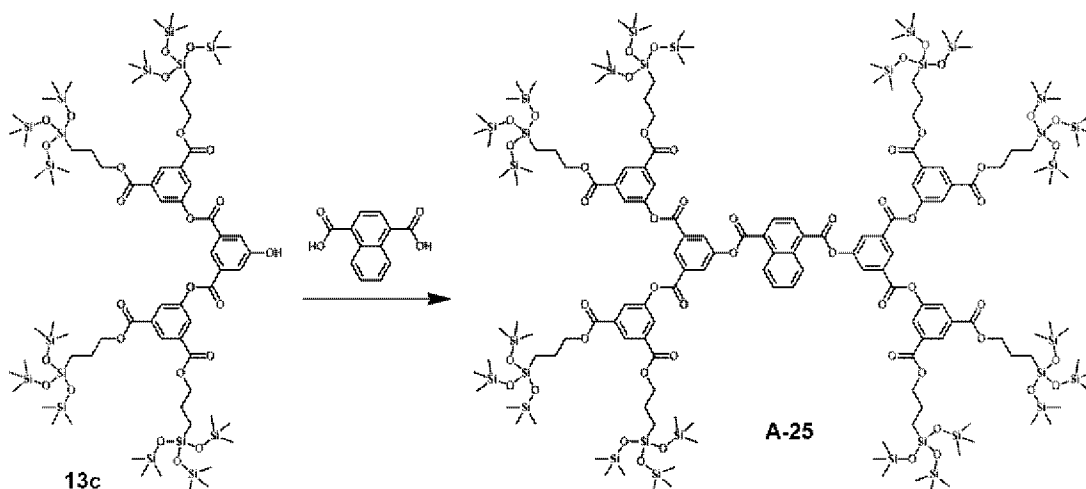
得られた化合物A-24のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 3893.25 (100.0%), 3894.25 (92.1%), 3892.25 (89.9%), 3895.25 (78.5%), 3891.25 (71.0%), 3896.25 (57.1%), 3894.26 (54.4%), 3893.26 (53.6%), 3895.26 (47.9%), 3890.25 (46.2%), 3892.26 (45.8%), 3897.25 (36.8%), 3896.26 (34.1%), 3891.26 (21.7%), 3898.25 (20.2%), 3897.26 (17.6%), 3889.25 (13.9%), 3894.24 (11.8%), 3895.24 (11.0%), 3896.24 (10.5%), 3899.25 (8.1%), 3893.24 (7.8%), 3897.24 (7.6%), 3898.26 (6.6%), 3898.24 (4.2%), 3894.27 (2.5%), 3895.27 (2.5%), 3899.24 (1.6%), 3899.26 (1.6%), 3896.27 (1.6%), 3900.25 (1.2%)

[0224] [化合物 A-25 の合成]

以下の手順に基づいて、化合物 A-25 を合成した。

[0225] [化44]



[0226] 原料を 1, 4-ナフタレンジカルボン酸に変更した以外は、化合物 A-13 と同様の手順で、化合物 A-25 を合成した。

得られた化合物 A-25 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

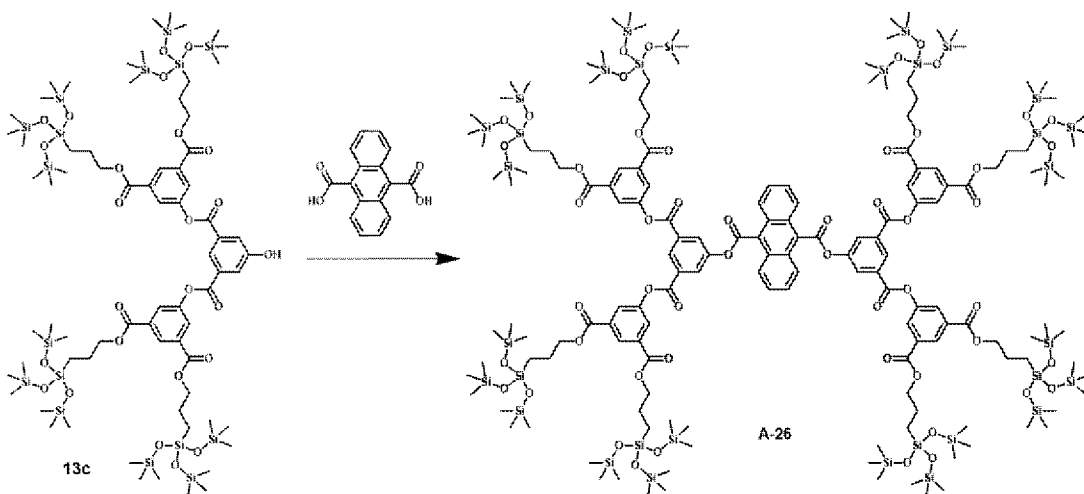
m/z : 3893.25 (100.0%), 3894.25 (92.1%), 3892.25 (89.9%), 3895.25 (78.5%), 3891.25 (71.0%), 3896.25 (57.1%), 3894.26 (54.4%), 3893.26 (53.6%), 3895.26 (47.9%), 3890.25 (46.2%), 3892.26 (45.8%), 3897.25 (36.8%), 3896.26 (34.1%), 3891.26 (21.7%), 3898.25 (20.2%), 3897.26 (17.6%), 3889.25 (13.9%), 3894.24 (11.8%), 3895.24 (11.0%), 3896.24 (10.5%), 3899.25 (8.1%), 3893.24 (7.8%), 3897.24 (7.6%), 3898.26 (6.6%), 3898.24 (4.2%), 3894.27 (2.5%), 3895.27 (2.5%), 3899.24 (1.6%), 38

99.26 (1.6%), 3896.27 (1.6%), 3900.25 (1.2%)

[0227] [化合物A-26の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-26を合成した。

[0228] [化45]



[0229] 原料をアントラセン-9,10-ジカルボン酸に変更した以外は、化合物A-13と同様の手順で、化合物A-26を合成した。

得られた化合物A-26のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

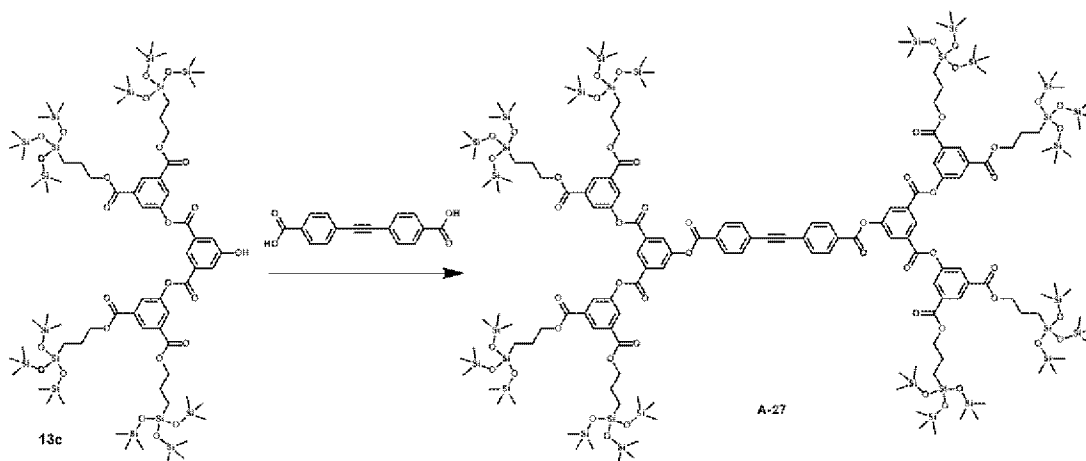
m/z : 3943.27 (100.0%), 3944.27 (93.3%), 3942.27 (93.2%), 3945.27 (77.6%), 3941.27 (71.3%), 3946.27 (55.2%), 3940.27 (41.8%), 3947.27 (35.3%), 3944.26 (30.4%), 3945.26 (30.0%), 3946.26 (27.0%), 3944.28 (26.3%), 3943.26 (25.8%), 3943.28 (23.5%), 3945.28 (23.4%), 3942.26 (21.0%), 3948.27 (18.3%), 3947.26 (16.7%), 3946.28 (15.7%), 3941.26 (13.4%), 3939.27 (12.5%), 3942.28 (10.5%), 3948.26 (9.7%), 3947.28 (7.2%)

%), 3949.27 (6.8%), 3949.26 (4.2%),
 , 3948.28 (1.8%)

[0230] [化合物A-27の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-27を合成した。

[0231] [化46]



[0232] 原料を4,4'-(エチン-1,2-ジイル)二安息香酸に変更した以外は、化合物A-13と同様の手順で、化合物A-27を合成した。

得られた化合物A-27のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

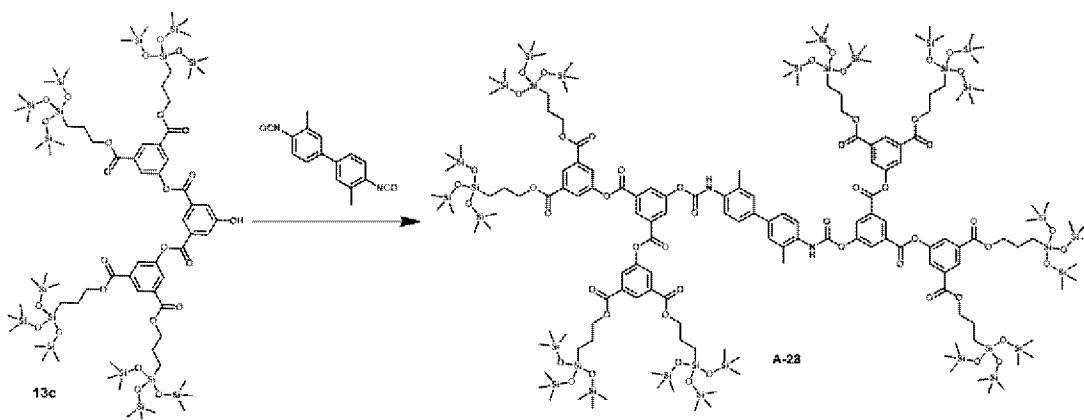
m/z : 3943.27 (100.0%), 3944.27 (93.3%), 3942.27 (93.2%), 3945.27 (77.6%), 3941.27 (71.3%), 3946.27 (55.2%), 3940.27 (41.8%), 3947.27 (35.3%), 3944.26 (30.4%), 3945.26 (30.0%), 3946.26 (27.0%), 3944.28 (26.3%), 3943.26 (25.8%), 3943.28 (23.5%), 3945.28 (23.4%), 3942.26 (21.0%), 3948.27 (18.3%), 3947.26 (16.7%), 3946.28 (15.7%), 3941.26 (13.4%), 3939.27 (12.5%), 3942.28 (10.5%), 3948.26 (9.7%), 3947.28 (7.2%)

%), 3949.27 (6.8%), 3949.26 (4.2%),
 , 3948.28 (1.8%)

[0233] [化合物A-28の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-28を合成した。

[0234] [化47]



[0235] 化合物13cと4,4'-ジイソシアナト-2,2'-ジメチルビフェニルを、汎用のウレタン化法の条件にて反応させ、化合物A-28を得た。

得られた化合物A-28のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

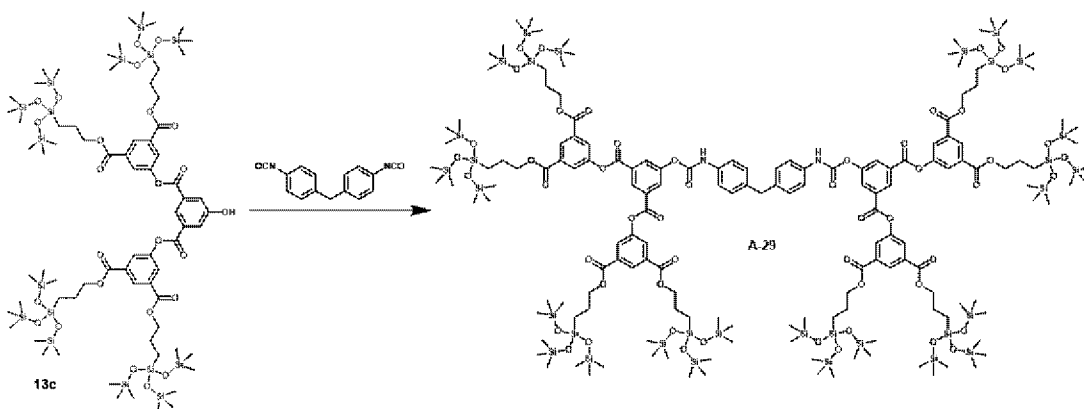
m/z : 3978.32 (100.0%), 3977.32 (92.5%), 3976.32 (82.7%), 3979.32 (76.0%), 3975.32 (66.6%), 3980.32 (54.7%), 3977.33 (51.6%), 3976.33 (43.7%), 3979.33 (42.3%), 3974.32 (42.3%), 3978.33 (39.5%), 3981.32 (35.3%), 3980.33 (32.6%), 3982.32 (19.8%), 3975.33 (19.2%), 3981.33 (17.6%), 3973.32 (12.6%), 3979.31 (11.8%), 3978.31 (10.6%), 3980.31 (9.5%), 3983.32 (7.9%), 3977.31 (7.0%), 3981.31 (6.9%), 3982.33 (5.3%), 3982.31 (4.9%), 3979.34 (2.6%), 3

980.34 (1.9%), 3983.33 (1.8%), 3978.34 (1.4%), 3983.31 (1.3%), 3984.32 (1.2%)

[0236] [化合物A-29の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-29を合成した。

[0237] [化48]



[0238] 化合物13cと4,4'-ジイソシアヌ酸-メチレンジフェニルを汎用のウレタン化法の条件にて反応させ、化合物A-29を得た。

得られた化合物A-29のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

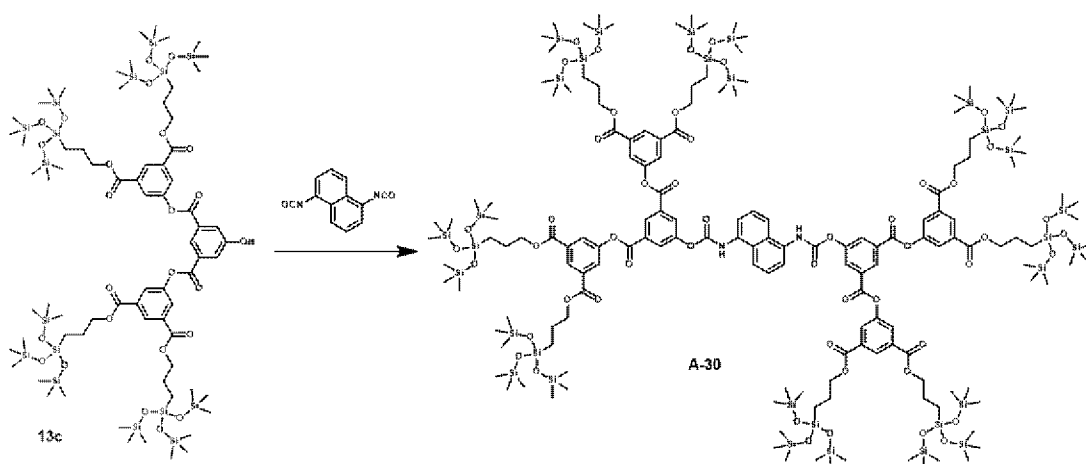
m/z : 3963.31 (100.0%), 3964.31 (98.0%), 3962.31 (88.0%), 3965.31 (81.8%), 3963.30 (75.8%), 3964.30 (71.8%), 3961.31 (67.1%), 3962.30 (63.7%), 3965.30 (62.6%), 3966.31 (57.5%), 3966.30 (48.9%), 3961.30 (36.0%), 3967.31 (34.1%), 3967.30 (34.0%), 3960.31 (26.2%), 3960.30 (24.8%), 3968.30 (19.7%), 3968.31 (15.8%), 3959.30 (15.2%), 3964.32 (11.6%), 3965.32 (11.4%), 3966.32 (8.4%), 3969.30 (7.6%), 3963.32 (5.3%)

), 3969.31 (4.9%), 3966.29 (2.9%),
3965.29 (2.8%), 3970.30 (1.7%), 3
967.32 (1.6%), 3967.29 (1.3%)

[0239] [化合物A-30の合成]

以下の手順に基づいて、化合物A-30を合成した。

[0240] [化49]



[0241] 化合物13cと1,5-ジイソシアナトナフタレンを汎用のウレタン化法の条件にて反応させ、化合物A-30を合成した。

得られた化合物A-30のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

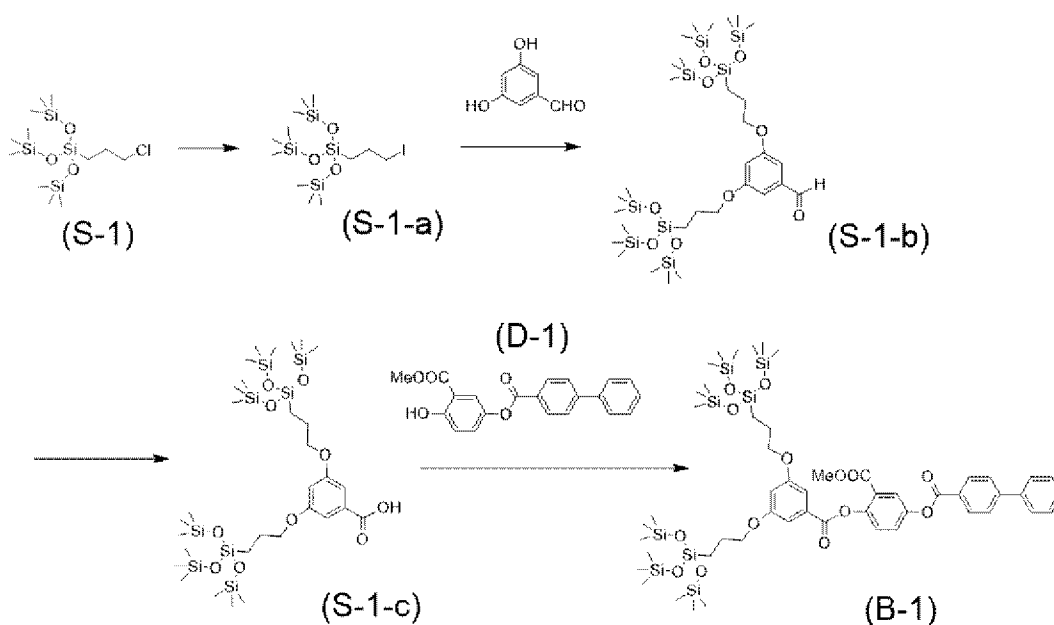
m/z : 3923.27 (100.0%), 3924.28 (94.7%), 3922.28 (91.8%), 3923.28 (84.5%), 3924.27 (83.1%), 3925.28 (82.6%), 3921.28 (70.5%), 3922.27 (68.1%), 3925.27 (67.6%), 3926.27 (66.8%), 3926.28 (47.5%), 3927.27 (39.6%), 3921.27 (38.8%), 3927.28 (30.4%), 3920.28 (27.7%), 3920.27 (26.7%), 3928.27 (20.7%), 3919.27 (16.4%), 3928.28 (15.4%), 3924.29 (11.5%), 3925.29 (11.2%), 3929.27 (8.1%).

0%), 3923.29 (5.2%), 3929.28 (4.6%),
), 3926.29 (4.0%), 3926.26 (3.2%),
 3925.26 (3.0%), 3927.26 (1.8%), 3
 930.27 (1.7%)

[0242] [化合物B-1の合成]

以下の手順に基づいて、化合物B-1を合成した。

[0243] [化50]



[0244] <化合物(S-1-a)の合成>

アセトン600mLに化合物(S-1)50.0gとヨウ化ナトリウム201.0gを添加し、60℃で12時間加熱撹拌した。撹拌後、得られた反応液にヘキサン1000mLと水600mLを加えて分液処理し、水層を除去した。次いで、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。乾燥後、無水硫酸マグネシウムを濾別した後、濾液を濃縮して無色油状の化合物(S-1-a)を54.8g得た。

[0245] <化合物(S-1-b)の合成>

DMF270mLに、3,5-ジヒドロキシベンズアルデヒド4.2g、化合物(S-1-a)29.6g、及び、炭酸セシウム29.7gを加え、室温で3時間撹拌した。撹拌後、得られた反応液に酢酸エチル500mLを

添加し、不溶物を濾別した。次いで、濾液を1規定塩酸水及び10%食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。乾燥後、無水硫酸マグネシウムを濾別した後、濾液を濃縮して淡褐色油状の粗体を得た。粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン単独からヘキサン／酢酸エチル＝93／7のグラジエント）で精製し、無色油状の化合物（S-1-b）を8.6 g得た。

[0246] <化合物（S-1-c）の合成>

酢酸エチル50 mLに化合物（S-1-b）8.6 g、リン酸二水素ナトリウム0.5 g、及びテトラブチルアンモニウム硫酸水素塩36 mgを添加した。そこへ、過酸化水素1.4 mL及び亜塩素酸ナトリウム水溶液（亜塩素酸ナトリウム1.4 gを水3.5 mLに溶解したもの）を順次滴下し、40℃で1時間攪拌した。攪拌後、反応液から水層を除去し、有機層を5%亜硫酸ナトリウム水溶液及び10%食塩水で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。乾燥後、無水硫酸ナトリウムを濾別した後、濾液を濃縮して、白色固体の化合物（S-1-c）を8.0 g得た。

[0247] <化合物（D-1）の合成>

窒素気流下、200 mLの三口フラスコに、4-フェニルベンゾイルクロリド6.0 g、ゲンチジン酸メチル30.5 g、及び、酢酸ブチル68 mLを入れ、110℃に昇温して完溶させた。上記三口フラスコの内容物に対し、メタンスルホン酸108 µLを添加し、110℃で2時間反応させた。反応後、液温を50℃以下に冷却し、冷却後、メタノール120 mLを添加し、液温を20℃まで冷却して固体を析出させた。析出した固体をろ取し、メタノール100 mLで洗浄後、一晚風乾して白色固体の化合物（D-1）を5.7 g得た（収率62%）。

[0248] <化合物B-1の合成>

化合物（D-1）0.26 g、化合物（S-1-c）0.65 g、及び4-ジメチルアミノピリジン9 mgをジクロロメタン4 mLに溶解し、そこへ1-（3-ジメチルアミノプロピル）-3-エチルカルボジイミド塩酸塩0

、43g及び1-メチルイミダゾール60 μ Lを添加し、室温で1時間攪拌した。攪拌後、反応液をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン単独からヘキサン／酢酸エチル＝95／5のグラジエント）で精製し、白色固体の化合物B-1を0.81g得た。

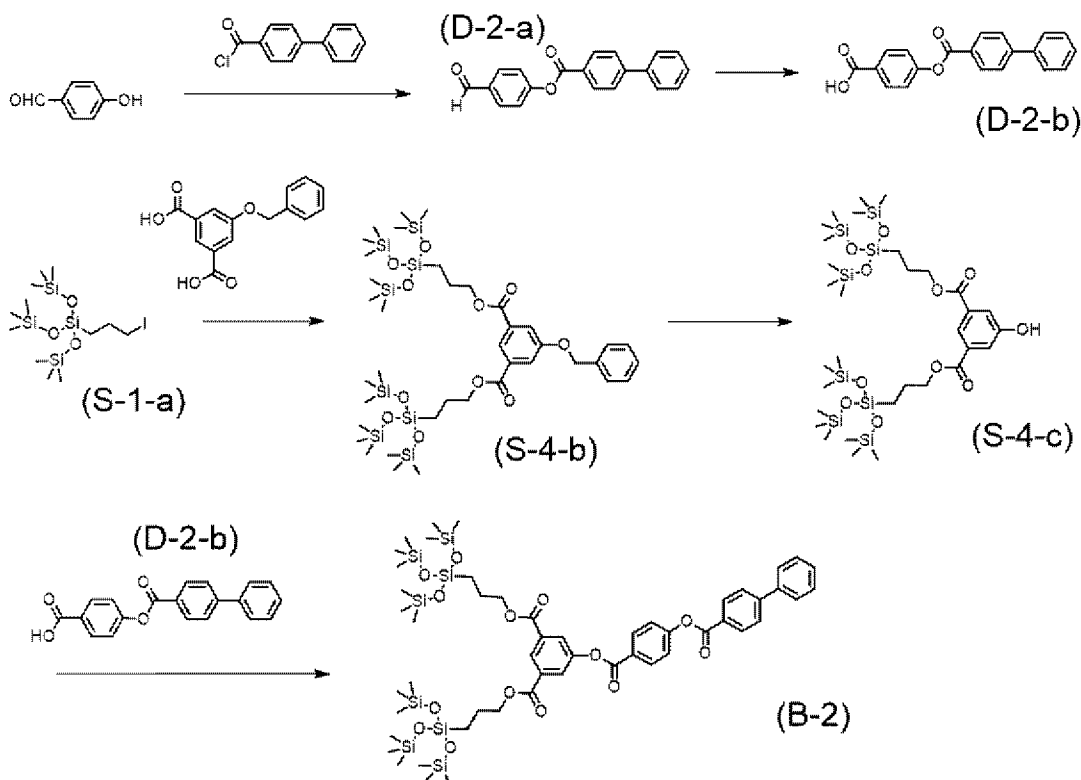
得られた化合物B-1のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1156.40 (100.0%), 1157.40 (96.9%), 1158.40 (56.8%), 1159.40 (29.8%), 1158.41 (19.8%), 1159.41 (12.6%), 1160.40 (11.5%), 1160.41 (8.3%), 1161.40 (4.6%), 1161.41 (2.2%), 1157.41 (1.5%), 1162.40 (1.5%), 1161.39 (1.0%)

[0249] [化合物B-2の合成]

以下の手順に基づいて、化合物B-2を合成した。

[0250] [化51]



[0251] <化合物(D-2-a)の合成>

4-ヒドロキシベンズアルデヒド 2.96 g、4-フェニルベンゾイルクロリド 5.00 g をテトラヒドロフラン 50 mL に溶解し、5℃に冷却した。そこへ、1-メチルイミダゾール 0.18 mL、N,N-ジイソプロピルアミン 4.32 mL を滴下し、5℃以下で2時間攪拌した。反応液にメタノール 100 mL を添加して5分間攪拌し、析出した固体をろ取し、メタノールで洗浄した。得られた固体を減圧乾燥し、白色固体の化合物 (D-2-a) を 3.28 g 得た。

[0252] <化合物 (D-2-b) の合成>

<化合物 (S-1-c) の合成>と同様の手順により、化合物 (D-2-b) を収率 91% で得た。

[0253] <化合物 (S-4-b) の合成>

1-メチル-2-ピロリドン 250 mL に5-(ベンジルオキシ)イソフタル酸 2.90 g、炭酸カリウム 4.42 g、化合物 (S-1-a) 10.89 g を添加し、55℃で2時間攪拌した。反応液を室温まで冷却し、酢酸エチル 300 mL、1規定塩酸水 150 mL を添加し、攪拌後、有機層を分液した。有機層を10%食塩水 100 mL で2回洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。乾燥剤を濾別し、有機層を濃縮して褐色油状の粗体を得た。得られた粗体をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘキサン/酢酸エチル = 9/5) で精製し、無色油状の化合物 (S-4-b) を 6.7 g 得た。

[0254] <化合物 (S-4-c) の合成>

化合物 (S-4-b) 6.00 g をテトラヒドロフラン 30 mL に溶解し、窒素置換した。そこへ、10%パラジウム炭素 1.35 g 添加後、水素置換し、室温で1時間攪拌した。反応液をセライト濾過し、ろ液を減圧濃縮して無色油状の化合物 (S-4-c) を 5.2 g 得た。

[0255] <化合物 B-2 の合成>

<化合物 B-1 の合成>と同様の手順により、化合物 B-2 を収率 76% で得た。

得られた化合物 B-2 のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1154.39 (100.0%), 1155.39 (98.3%), 1156.39 (49.4%), 1157.39 (28.8%), 1156.38 (26.8%), 1158.39 (13.2%), 1157.38 (10.3%), 1158.38 (4.6%), 1159.39 (4.2%), 1157.40 (3.3%), 1159.38 (2.9%), 1158.40 (2.1%), 1160.39 (1.4%), 1160.38 (1.0%)

[0256] [化合物B-3の合成]

＜化合物(D-1)の合成＞に関して、ゲンチジン酸メチルをベンゾキノに、3,5-ジヒドロキシベンズアルデヒドを3,4-ジヒドロキシベンズアルデヒドに変更した以外は、[化合物B-1の合成]と同様の手順により、化合物B-3を収率61%で得た。

得られた化合物B-3のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

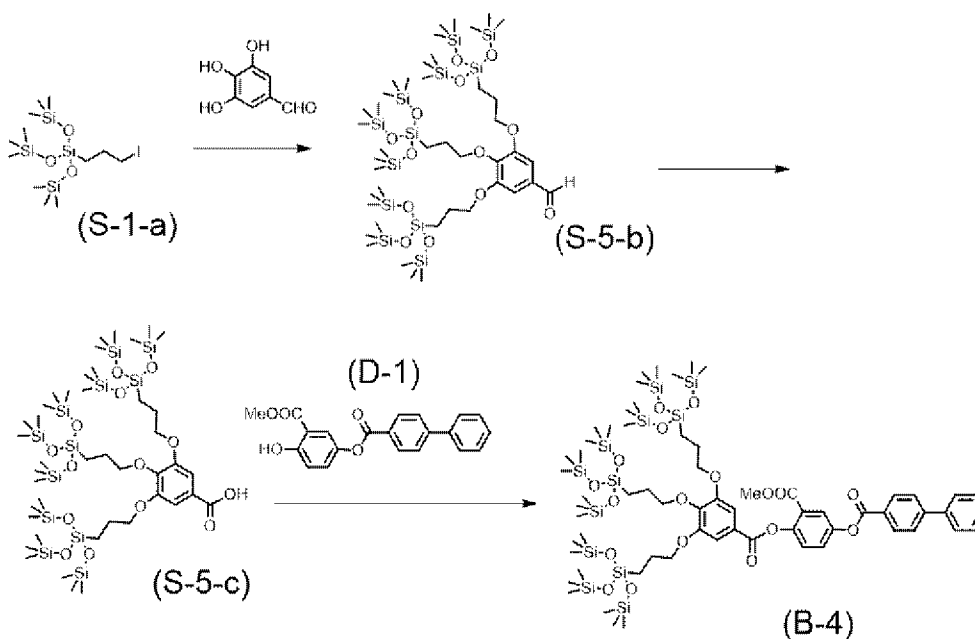
m/z : 950.36 (100.0%), 951.36 (81.4%), 952.36 (41.5%), 953.36 (16.8%), 952.37 (12.7%), 954.36 (6.3%), 953.35 (5.1%), 953.37 (3.3%), 954.35 (2.2%), 955.36 (2.1%), 954.37 (1.5%)

[0257] [化合物B-4の合成]

以下の手順に基づいて、化合物B-4を合成した。

[0258]

[化52]



[0259] ＜化合物（S－5－b）の合成＞

原料を上記の通り変更し、＜化合物（S－1－b）の合成＞と同様の手順により、化合物（S－5－b）を収率52％で得た。

[0260] ＜化合物（S－5－c）の合成＞

原料を上記の通り変更し、＜化合物（S－1－c）の合成＞と同様の手順により、化合物（S－5－c）を収率94％で得た。

[0261] ＜化合物B－4の合成＞

原料を上記の通り変更し、＜化合物B－1の合成＞と同様の手順により、化合物B－4を収率72％で得た。

得られた化合物B－4のMALDI－MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1509.54 (100.0%), 1510.54 (79.1%), 1508.54 (76.4%), 1511.54 (52.2%), 1512.54 (27.4%), 1510.55 (19.7%), 1511.55 (18.0%), 1513.54 (13.5%), 1512.55 (8.9%), 1514.54 (5.9%), 1512.53 (5.7%), 1513.55 (4.1%), 1513.53 (3.5%), 1514.55 (2.1%),

1515.54 (2.1%), 1514.53 (1.4%), 1509.55 (1.0%)

[0262] [化合物B-5の合成]

4-ヒドロキシベンズアルデヒドを、6-ヒドロキシナフトアルデヒドに変更した以外は、[化合物B-2の合成]と同様の手順により、化合物B-5を収率69%で得た。

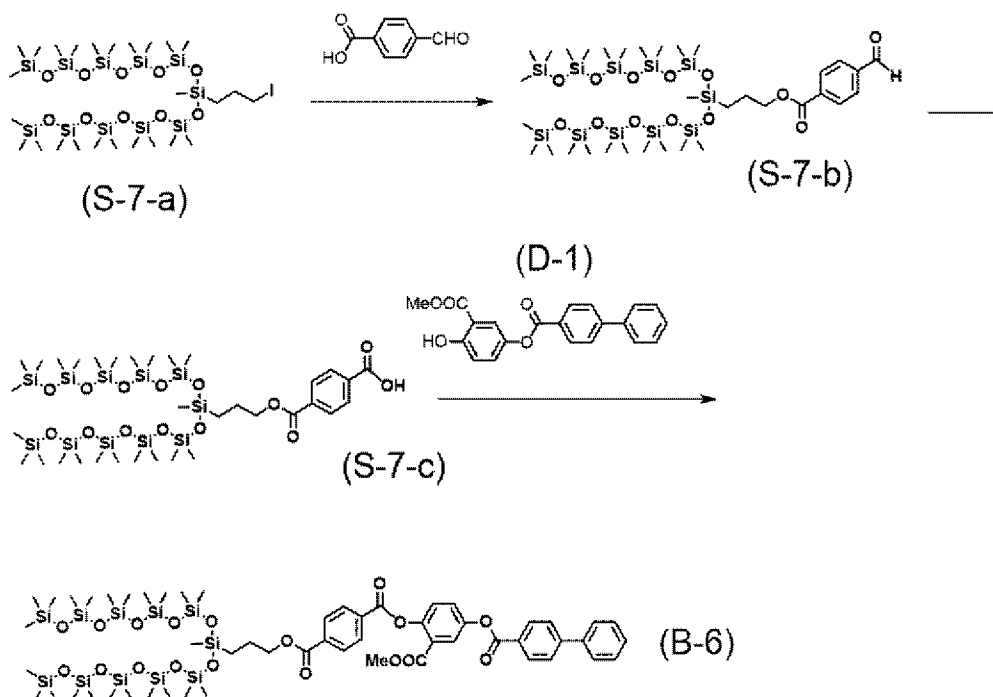
得られた化合物B-5のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z: 1205.40 (100.0%), 1204.40 (98.8%), 1206.40 (57.9%), 1207.40 (30.9%), 1206.41 (22.2%), 1207.41 (14.3%), 1208.40 (11.8%), 1208.41 (9.7%), 1209.40 (4.9%), 1209.41 (2.5%), 1210.40 (1.6%), 1205.41 (1.5%), 1210.41 (1.0%)

[0263] [化合物B-6の合成]

以下の手順に基づいて、化合物B-6を合成した。

[0264] [化53]



[0265] <化合物 (S-7-b) の合成>

原料を上記の通り変更し、<化合物 (S-4-b) の合成>と同様の手順により、化合物 (S-7-b) を収率 89% で得た。

[0266] <化合物 (S-7-c) の合成>

原料を上記の通り変更し、<化合物 (S-1-c) の合成>と同様の手順により、化合物 (S-7-c) を収率 92% で得た。

[0267] <化合物 B-6 の合成>

原料を上記の通り変更し、〔化合物 B-1 の合成〕と同様の手順により、化合物 B-6 を収率 70% で得た。

得られた化合物 B-6 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

m/z : 1351.39 (100.0%), 1350.39 (86.2%), 1352.39 (76.1%), 1353.39 (46.5%), 1354.39 (22.1%), 1352.40 (16.4%), 1353.40 (14.1%), 1355.39 (10.4%), 1354.40 (6.4%), 1354.38 (5.3%), 1356.39 (4.2%), 1355.40 (3.1%), 1355.38 (2.4%), 1356.40 (1.4%), 1357.39 (1.4%), 1356.38 (1.0%)

[0268] 〔化合物 B-7 の合成〕

4-フェニルベンゾイルクロリドを、ピリジン-3-カルボニルクロリド塩酸塩に変更した以外は、〔化合物 B-2 の合成〕と同様の手順により、化合物 B-7 を収率 69% で得た。

得られた化合物 B-7 の MALDI-MS 測定結果を以下に示す。

m/z : 1079.35 (100.0%), 1080.35 (90.2%), 1081.35 (57.2%), 1082.35 (28.5%), 1081.36 (12.6%), 1083.35 (10.9%), 1082.36 (8.5%), 1084.35 (4.3%), 1083.34 (3.2%), 1083.36 (3.0%)

, 1085.35 (1.4%), 1084.36 (1.2%),
1084.34 (1.0%)

[0269] [化合物B-8の合成]

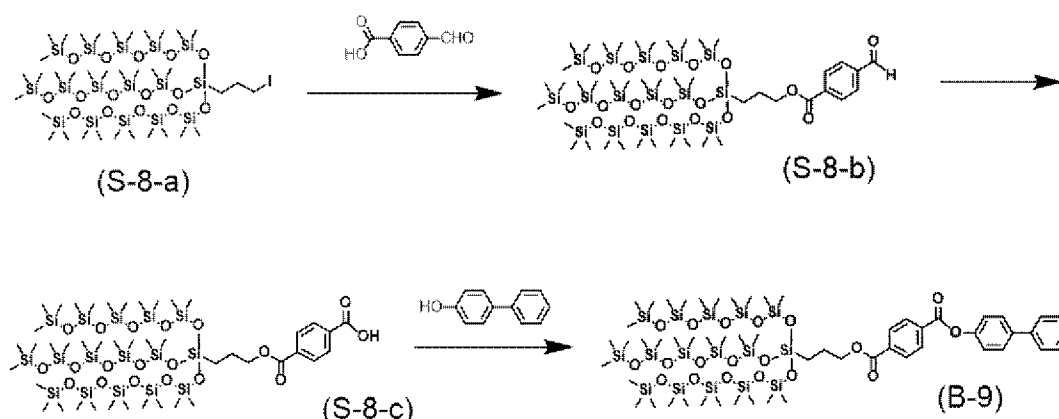
4-フェニルベンゾイルクロリドを、p-トルイルクロリドに変更した以外は、[化合物B-2の合成]と同様の手順により、化合物B-8を収率71%で得た。得られた化合物B-8のMALDI-MS測定結果を以下に示す。

m/z: 1092.37 (100.0%), 1093.37 (92.0%), 1094.37 (57.7%), 1095.37 (29.1%), 1094.38 (13.8%), 1096.37 (11.3%), 1095.38 (9.2%), 1097.37 (4.5%), 1096.38 (3.3%), 1096.36 (3.1%), 1098.37 (1.4%), 1097.38 (1.4%), 1097.36 (1.0%)

[0270] [化合物B-9の合成]

以下の手順に基づいて、化合物B-9を合成した。

[0271] [化54]



[0272] <化合物(S-8-b)の合成>

原料を上記の通り変更し、<化合物(S-4-b)の合成>と同様の手順により、化合物(S-8-b)を収率83%で得た。

[0273] <化合物(S-8-c)の合成>

原料を上記の通り変更し、＜化合物（S－1－c）の合成＞と同様の手順により、化合物（S－8－c）を収率90%で得た。

[0274] ＜化合物B－9の合成＞

原料を上記の通り変更し、〔化合物B－6の合成〕と同様の手順により、化合物B－9を収率78%で得た。

得られた化合物B－9のMALDI－MS測定結果を以下に示す。

m/z : 1543.46 (100.0%), 1544.46 (72.1%), 1542.46 (69.5%), 1545.46 (54.5%), 1544.45 (37.2%), 1546.46 (36.6%), 1545.45 (28.3%), 1546.45 (19.4%), 1547.46 (17.6%), 1547.45 (14.5%), 1548.46 (8.1%), 1548.45 (8.0%), 1545.47 (4.9%), 1549.46 (3.7%), 1549.45 (3.7%), 1546.47 (3.4%), 1547.47 (2.0%), 1550.45 (1.6%), 1550.46 (1.3%), 1548.47 (1.2%)

[0275] [光学異方性膜の形成]

[光配向膜の作製]

支持体としてガラス基板を用意した。支持体上に、光配向膜形成用塗布液をスピコートを用いて2500rpmにて30秒間塗布した。次いで、光配向膜形成用塗布液が塗布された支持体を60℃のホットプレート上で60秒間乾燥し、支持体上に乾燥膜を形成した。

[0276] —————

光配向膜形成用塗布液

—————

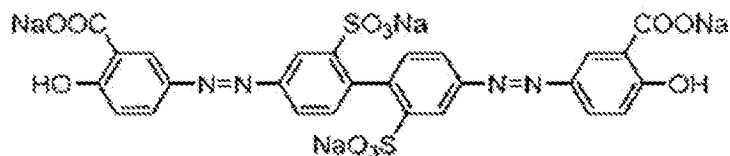
下記光配向用素材	1.00質量部
水	16.00質量部
ブトキシエタノール	42.00質量部

プロピレングリコールモノメチルエーテル

42.00質量部

[0277] 光配向用素材

[0278] [化55]



[0279] 上記乾燥膜に対し、365nmLED-UV照射装置を用いて、ワイヤーグリッド偏光板を介して10mW/cm²で30秒間、直線偏光UV照射を行い、光配向膜を形成した。

[0280] [実施例1]

下記組成の光学異方性層形成用塗布液1を調製した。なお、実施例1においては、下記表1に記載のケイ素含有化合物は、化合物A-1である。

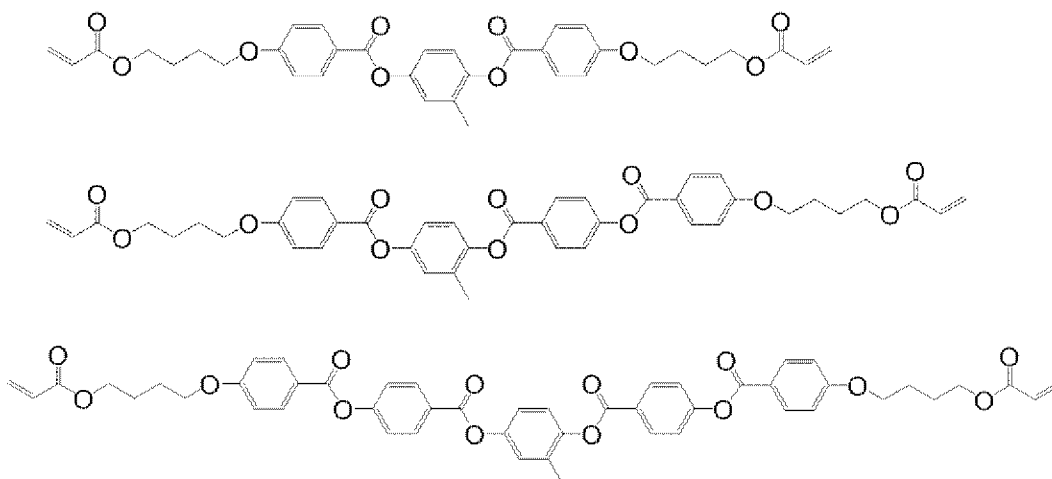
光学異方性層形成用塗布液1

- ・ 下記重合性液晶化合物1 80.00質量部
- ・ Omnirad 819 (IGM Resins B. V.) 3.00質量部
- ・ 表1に記載のケイ素含有化合物 0.10質量部
- ・ 2-ブタノン 固形分濃度が30質量%となる量

[0281] 重合性液晶化合物1 (混合物)

[0282]

[化56]



[0283] マイクロピペッターを用いて光学異方性層形成用塗布液 1 を $50\ \mu\text{L}$ 量り取り、作製した光配向膜上に滴下して $1500\ \text{rpm}$ の回転速度でスピコートした。次いで、得られた塗膜に対して、 80°C で 1 分間加熱する加熱処理を施した後、窒素雰囲気下で $365\ \text{nm}$ LED-UV 照射装置を用いて $10\ \text{mW}/\text{cm}^2$ で 30 秒間の UV 照射を行い、光学異方性層 1 A を形成した。

[0284] [実施例 2 ～ 20 及び実施例 32 ～ 41]

光学異方性層形成用塗布液 1 のケイ素含有化合物を、表 1 及び表 2 に記載の化合物に変更した以外は、実施例 1 と同様の手順により、光学異方性膜を形成した。

[0285] [実施例 21]

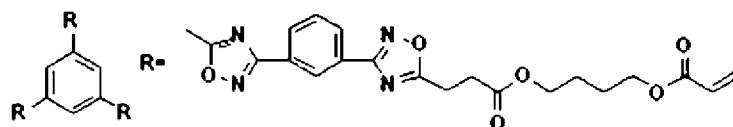
下記組成の光学異方性層形成用塗布液 3 を調製した。

光学異方性層形成用塗布液 3

- | | |
|----------------------------------|-------------------|
| ・ 下記重合性円盤状液晶化合物 M4 | 80 質量部 |
| ・ 下記重合性円盤状液晶化合物 M5 | 20 質量部 |
| ・ Omnirad 819 (IGM Resins B. V.) | 3 質量部 |
| ・ 表 1 に記載のケイ素含有化合物 | 0.50 質量部 |
| ・ メチルエチルケトン (MEK) | 固形分濃度が 33 質量%となる量 |

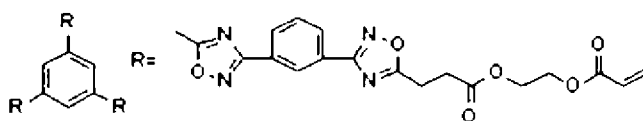
[0286] 重合性円盤状液晶化合物M 4

[0287] [化57]



[0288] 重合性円盤状液晶化合物M 5

[0289] [化58]



[0290] 光学異方性層形成用塗布液 3 を、マイクロピペッターを用いて 50 μ L 計量し、配向膜（PVA-103）付ガラス上に滴下してスピコートして塗膜を形成した。得られた塗膜に対して、110℃で2分間の加熱処理を施し、更に1分間の放冷処理を施した。次いで、放冷処理後の塗膜に対して窒素雰囲気下で紫外線を照射（紫外線強度：500 mJ/cm²）することにより、塗膜を硬化し、光学異方性膜 1 B を得た。得られた光学異方性膜の膜厚は、約 1.1 μ m であった。

[0291] [実施例 2 2]

光学異方性層形成用塗布液 3 のケイ素含有化合物を、表 1 に記載の化合物に変更した以外は、実施例 2 1 と同様の手順により、光学異方性膜を形成した。

[0292] [実施例 2 3]

下記組成の光学異方性層形成用塗布液 2 を調製した。

光学異方性層形成用塗布液 2

・ 上記重合性円盤状液晶化合物 M 4

80 質量部

・ 上記重合性円盤状液晶化合物 M 5	20 質量部
・ 上記配向膜界面配向剤 1	0.55 質量部
・ Omnirad 819 (IGM Resins B. V.)	3 質量部
・ 表 1 に記載のケイ素含有化合物	0.10 質量部
・ メチルエチルケトン (MEK)	固形分濃度が 33 質量%となる量

[0293] マイクロピペッターを用いて光学異方性層形成用塗布液 2 を $50\ \mu\text{L}$ 量り取り、作製した光配向膜上に滴下して $1500\ \text{rpm}$ の回転速度でスピコートした。次いで、得られた塗膜に対して、 80°C で 1 分間加熱する加熱処理を施した後、窒素雰囲気下で $365\ \text{nm}$ LED-UV 照射装置を用いて $10\ \text{mW}/\text{cm}^2$ で 30 秒間の UV 照射を行い、光学異方性層 2 A を形成した。

[0294] [実施例 24 ~ 31]

光学異方性層形成用塗布液 2 のケイ素含有化合物を、表 1 に記載の化合物に変更した以外は、実施例 23 と同様の手順により、光学異方性膜を形成した。

[0295] [比較例 1 ~ 2]

光学異方性層形成用塗布液 2 のケイ素含有化合物を、表 1 に記載の化合物に変更した以外は、実施例 24 と同様の手順により、光学異方性膜を形成した。

[0296] [比較例 3 ~ 7]

光学異方性層形成用塗布液 1 のケイ素含有化合物を、表 1 に記載の化合物に変更した以外は、実施例 1 と同様の手順により、光学異方性膜を形成した。

[0297] [評価]

得られた各実施例及び比較例の光学異方性層を光学顕微鏡で観察し、以下の基準に従って視認ムラ及び配向ムラを評価した。実用上、視認ムラ及び配向ムラは、「B」以上の評価が好ましい。

[0298] [視認ムラの評価基準]

「A」：視認ムラがほとんどない。

「B」：視認ムラがわずかにある。

「C」：視認ムラがある。

「D」：視認ムラがかなり多い。

[0299] (配向ムラの評価基準)

「A」：配向欠陥がほとんどない。

「B」：配向欠陥がわずかにある。

「C」：配向欠陥がある。

「D」：配向欠陥がかなり多い。

[0300] [結果]

各光学異方性膜の形成に使用したケイ素含有化合物、各光学異方性膜の形成に用いた光学異方性層形成用塗布液の種類、及び、評価結果を表に示す。

なお、表中、光学異方性層形成用塗布液中に含まれるケイ素含有化合物は、表中に記載されているケイ素含有化合物である。例えば、実施例2において用いられた光学異方性層形成用塗布液は、上述した光学異方性層形成用塗布液1におけるケイ素含有化合物が化合物A-2である組成物であり、実施例22において用いられた光学異方性層形成用塗布液は、上述した光学異方性層形成用塗布液2におけるケイ素含有化合物が化合物A-2である組成物であり、実施例24において用いられた光学異方性層形成用塗布液は、上述した光学異方性層形成用塗布液3におけるケイ素含有化合物が化合物B-2である組成物である。

表中、「Si-Me/Mw」欄は、ケイ素含有化合物のケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値を示す。

[0301]

[表1]

表1	ケイ素含有化合物	Si-Me/Mw	分子量	光学異方性層 形成用塗布液	視認ムラ	配向ムラ
実施例1	A-1	0.0173	1037.8	1	A	A
実施例2	A-2	0.0167	1079.8	1	A	A
実施例3	A-3	0.0188	1917.36	1	A	A
実施例4	A-4	0.0157	889.5	1	B	A
実施例5	A-5	0.0179	1228.1	1	A	A
実施例6	A-6	0.0157	889.5	1	B	A
実施例7	A-7	0.0147	949.55	1	B	A
実施例8	A-8	0.0167	2157.58	1	A	A
実施例9	A-9	0.0190	1891.32	1	A	A
実施例10	A-10	0.0211	2554.78	1	A	A
実施例11	A-11	0.0187	1929.46	1	A	B
実施例12	A-12	0.0240	3805.54	1	A	A
実施例13	A-13	0.0200	5727.89	1	A	A
実施例14	A-14	0.0167	1077.83	1	A	B
実施例15	A-15	0.0171	1109.83	1	A	A
実施例16	A-16	0.0176	1021.81	1	A	B
実施例17	A-17	0.0186	1933.38	1	A	A
実施例18	A-18	0.0173	2081.48	1	A	B
実施例19	A-19	0.0162	1107.94	1	B	A
実施例20	A-20	0.0149	671.14	1	B	B
実施例21	A-1	0.0173	1037.8	3	A	A
実施例22	A-2	0.0167	1079.8	3	A	A
実施例23	B-1	0.0155	1157.91	2	A	A
実施例24	B-2	0.0156	1155.89	2	A	A
実施例25	B-3	0.0147	951.57	2	A	A
実施例26	B-4	0.0179	1510.83	2	A	B
実施例27	B-5	0.0149	1205.95	2	A	A
実施例28	B-6	0.0170	1352.27	2	A	A
実施例29	B-7	0.0167	1080.78	2	A	A
実施例30	B-8	0.0165	1093.82	2	A	A
実施例31	B-9	0.0214	1544.9	2	A	B
比較例 1	C-1	0.0072	691.09	2	D	C
比較例 2	C-2	0.0113	439.75	2	D	D
比較例 3	C-3	0.0222	1440.57	1	D	C
比較例 4	C-4	0.0098	60000	1	C	C
比較例 5	C-5	0.0104	1340.11	1	D	C
比較例 6	C-6	0.0139	1009.75	1	C	C
比較例 7	C-7	0.0246	4750.5	1	C	C

[0302] [表2]

表2	ケイ素含有化合物	Si-Me/Mw	分子量	光学異方性層 形成用塗布液	視認ムラ	配向ムラ
実施例32	A-21	0.0184	3920.73	1	A	A
実施例33	A-22	0.0184	3918.76	1	A	B
実施例34	A-23	0.0199	2719.89	1	A	B
実施例35	A-24	0.0185	3894.69	1	A	A
実施例36	A-25	0.0185	3894.69	1	A	A
実施例37	A-26	0.0183	3944.75	1	A	A
実施例38	A-27	0.0183	3944.75	1	A	A
実施例39	A-28	0.0181	3978.81	1	A	A
実施例40	A-29	0.0182	3964.78	1	A	A
実施例41	A-30	0.0183	3924.72	1	A	A

[0303] 上記表に示す結果より、本発明の組成物により、視認ムラ及び配向ムラが抑制された光学異方性膜を形成できることが確認された。

[0304] 実施例4、6、7、及び、19と、他の実施例との比較より、化合物Aにおいて、 $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 構造を有するケイ素含有基が、式(C-2)で表される基又は式(C-3)で表される基を有する場合、視認ムラ抑制性能がより優れることが確認された。

実施例1～20及び32～41の比較より、 $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 構造を有するケイ素含有基が、ケイ素原子を5以上含む場合、視認ムラ抑制性能がより優れることが確認された。

実施例20と、実施例1～19及び32～41との比較より、化合物Aの分子量が700以上である場合、本発明の効果がより優れることが確認された。

実施例1～20及び32～41の比較より、化合物Aにおいて、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が0.017～0.025である場合、本発明の効果がより優れることが確認された。

実施例26及び31と他の実施例との比較より、 B^{b1} で表される基において、芳香環に置換する $-\text{L}^{\text{b1}}-\text{X}^{\text{b1}}$ で表される基の数が2以下であり、 $-\text{L}^{\text{b1}}-\text{X}^{\text{b1}}$ で表される基を2つ以上有する基中の $-\text{L}^{\text{b1}}-\text{X}^{\text{b1}}$ で表される基の数が2である場合、配向ムラ抑制性能がより優れることが確認された。

実施例 14、16、及び、33～34 と他の実施例との比較より、Z^{a1}が
—O—、—CO—、—CO—O—、又は、—NH—CO—O—である場合、
配向ムラ抑制性能がより優れることが確認された。

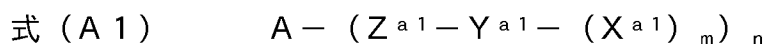
請求の範囲

[請求項1] 要件 (a 1) ~ (a 3) を満たす化合物 A 及び要件 (b 1) ~ (b 4) を満たす化合物 B からなる群から選択されるケイ素含有化合物と、

液晶化合物とを含む、組成物。

(a 1) 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140 以上である。

(a 2) 式 (A 1) で表される。



式 (A 1) 中、A は、置換基を有していてもよい、芳香環若しくは脂肪族環、又は、 $A^1 - L^A - A^2$ で表される基を表す。A¹ 及び A² は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。L^A は、 $-C \equiv C-$ 又は $-CH_2-$ を表す。

Z^{a1} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される 2 つ以上を組み合わせる基を表す。R^N は水素原子又は置換基を表す。

Y^{a1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

X^{a1} は、それぞれ独立に、 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基を表す。

n は 2 以上の整数を表す。

m は、それぞれ独立に、1 以上の整数を表す。

(a 3) 分子量が 500 ~ 8000 である。

(b 1) 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140 以上である。

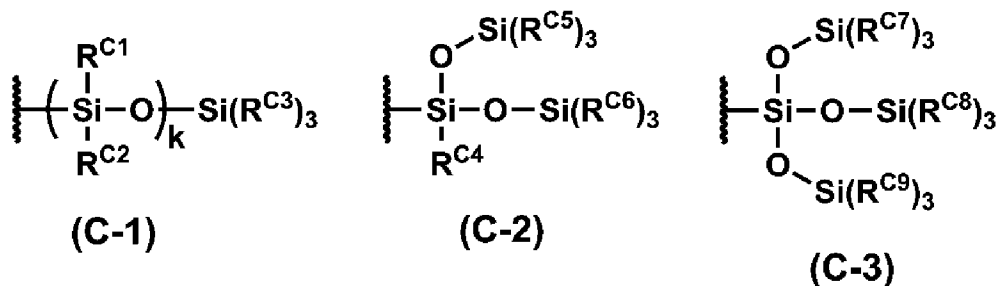
(b 2) $-L^{b1} - X^{b1}$ で表される基を 2 つ以上有する。

L^{b1} は、それぞれ独立に、ヘテロ原子を有していてもよいアルキ

レン基又は－Ｏ－を表す。

X^{b1}は、式（Ｃ－１）～式（Ｃ－３）で表される基からなる群から選択される１価の基を表す

[化1]

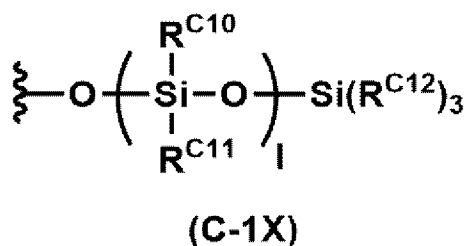


式（Ｃ－１）中、R^{C1}～R^{C3}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基を表す。kは、２～２０の整数を表す。

式（Ｃ－２）中、R^{C4}は、炭素数１～１０のアルキル基を表す。R^{C5}及びR^{C6}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基又は式（Ｃ－１Ｘ）で表される基を表す。

式（Ｃ－３）中、R^{C7}～R^{C9}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基又は式（Ｃ－１Ｘ）で表される基を表す。

[化2]



式（Ｃ－１Ｘ）中、R^{C10}～R^{C12}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０のアルキル基を表す。lは、０～２０の整数を表す。

(b3) *－(Z^{b1}－Y^{b1})_s－W^{b1}で表される部分構造を有する。

*は結合位置を表す。

Z^{b1}は、それぞれ独立に、アルキレン基、－Ｏ－、－ＣＯ－、－N R^N－、又は、これらを組み合わせた基を表す。R^Nは水素原子又

は置換基を表す。

Y^{b1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

W^{b1} は、水素原子又はケイ素原子を含まない置換基を表す。

s は、1以上の整数を表す。

(b4) 分子量が500～8000である。

[請求項2] 前記化合物Aが、式(A2)で表される化合物又は式(A3)で表される化合物である、請求項1に記載の組成物。

式(A2) $A - (Z^{a1} - (Y^{a2} - Z^{a2})_r - Y^{a3} - (T^{a1})_{m1})_n$

式(A3) $A - (Z^{a1} - Y^{a1} - (Z^{a3} - B^{a1})_{m2})_n$

式(A2)及び式(A3)中、A、 Z^{a1} 、 Y^{a1} 、及び、 n は、前記式(A1)におけるA、 Z^{a1} 、 Y^{a1} 、及び、 n と同義である。

式(A2)中、 Z^{a2} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。

Y^{a2} 及び Y^{a3} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

r は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す。

T^{a1} は、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造を有する、1価の置換基Tを表す。ただし、前記置換基T中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位が、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組み合わせた基である。

$m1$ は、1以上の整数を表す。

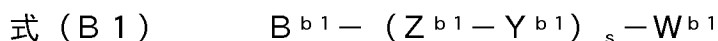
式(A3)中、 Z^{a3} は、それぞれ独立に鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基

る基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。

B^{a1} は、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造を有する1価の置換基Tが1つ以上置換している、1価の芳香環基を表す。ただし、前記置換基Tが、前記芳香環基を構成する芳香環と結合する部位が、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組み合わせた基である。

$m2$ は、2以上の整数を表す。

[請求項3] 前記化合物Bが、式(B1)で表される化合物である、請求項1に記載の組成物。



式(B1)中、 Z^{b1} 、 Y^{b1} 、 W^{b1} 、及び、 s は、前記要件(b3)中の前記部分構造における Z^{b1} 、 Y^{b1} 、 W^{b1} 、及び、 s と同義である。

B^{b1} は、 $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基が2つ以上置換している、又は、 $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基を2つ以上有する基が1つ以上置換している、芳香環を表す。

[請求項4] 前記式(A2)において、前記置換基T中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位が、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ であり、

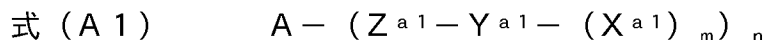
前記式(A3)において、前記置換基T中、前記芳香環基を構成する芳香環と結合する部位が、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ である、請求項2に記載の組成物。

[請求項5] 請求項1～4のいずれか1項に記載の組成物を用いて形成された、光学異方性膜。

[請求項6] 要件(a1)～(a3)を満たす化合物。

(a1) 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。

(a 2) 式 (A 1) で表される。



式 (A 1) 中、A は、置換基を有していてもよい、芳香環若しくは脂肪族環、又は、 $A^1 - L^A - A^2$ で表される基を表す。A¹ 及び A² は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。L^A は、 $-C \equiv C-$ 又は $-CH_2-$ を表す。

Z^{a1} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される 2 つ以上を組み合わせる基を表す。R^N は水素原子又は置換基を表す。

Y^{a1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

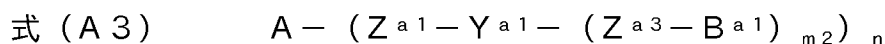
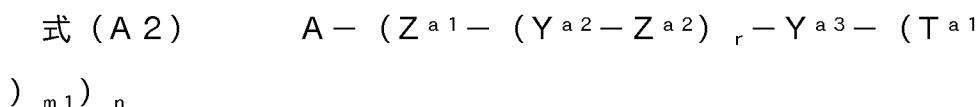
X^{a1} は、それぞれ独立に、 $Si-O-Si$ 構造を有するケイ素含有基を表す。

n は 2 以上の整数を表す。

m は、それぞれ独立に、1 以上の整数を表す。

(a 3) 分子量が 500 ~ 8000 である。

[請求項 7] 式 (A 2) 又は式 (A 3) で表される、請求項 6 に記載の化合物。



式 (A 2) 及び式 (A 3) 中、A、Z^{a1}、Y^{a1}、及び、n は、前記式 (A 1) における A、Z^{a1}、Y^{a1}、及び、n と同義である。

式 (A 2) 中、Z^{a2} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される 2 つ以上を組み合わせる基を表す。R^N は水素原子又は置換基を表す。

Y^{a2} 及び Y^{a3} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、

芳香環又は脂肪族環を表す。

r は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す。

T^{a1} は、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造を有する、1価の置換基 T を表す。ただし、前記置換基 T 中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位が、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組み合わせた基である。

$m1$ は、1以上の整数を表す。

式 (A3) 中、 Z^{a3} は、それぞれ独立に、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、又は、鎖状のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、及び、 $-NR^N-$ からなる群から選択される2つ以上を組み合わせる基を表す。 R^N は水素原子又は置換基を表す。

B^{a1} は、ケイ素原子を3つ以上含むシロキサン構造を有する1価の置換基 T が1つ以上置換している、1価の芳香環基を表す。ただし、前記置換基 T が、前記芳香環基を構成する芳香環と結合する部位が、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-NR^N-$ 、 $-S-$ 、又は、これらを組み合わせた基である。

$m2$ は、2以上の整数を表す。

[請求項8] 前記式 (A2) において、前記置換基 T 中、 Y^{a3} で表される基と結合する部位が、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ であり、

前記式 (A3) において、前記置換基 T 中、前記芳香環基を構成する芳香環と結合する部位が、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-O-$ 、 $-NH-CO-O-$ 、又は、 $-CO-O-NH-$ である、請求項7に記載の化合物。

[請求項9] 要件 (b1) ~ (b4) を満たす化合物。

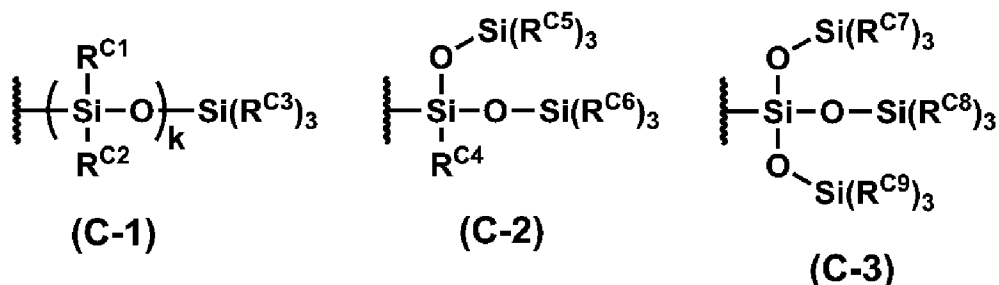
(b1) 分子中、ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値が、0.0140以上である。

(b2) $-L^{b1}-X^{b1}$ で表される基を2つ以上有する。

L^{b1}は、それぞれ独立に、ヘテロ原子を有してもよいアルキレン基又は－O－を表す。

X^{b1}は、式（C－1）～式（C－3）で表される基からなる群から選択される1価の基を表す

[化3]

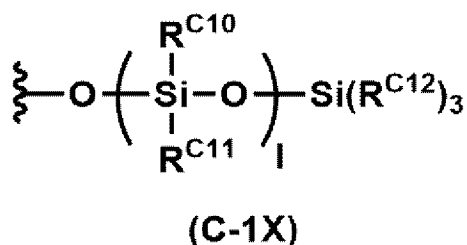


式（C－1）中、R^{C1}～R^{C3}は、それぞれ独立に、炭素数1～10のアルキル基を表す。kは、2～20の整数を表す。

式（C－2）中、R^{C4}は、炭素数1～10のアルキル基を表す。R^{C5}及びR^{C6}は、それぞれ独立に、炭素数1～10のアルキル基又は式（C－1X）で表される基を表す。

式（C－3）中、R^{C7}～R^{C9}は、それぞれ独立に、炭素数1～10のアルキル基又は式（C－1X）で表される基を表す。

[化4]



式（C－1X）中、R^{C10}～R^{C12}は、それぞれ独立に、炭素数1～10のアルキル基を表す。lは、0～20の整数を表す。

(b3) *－(Z^{b1}－Y^{b1})_s－W^{b1}で表される部分構造を有する。

*は結合位置を表す。

Z^{b1}は、それぞれ独立に、アルキレン基、－O－、－CO－、－

$\text{NR}^{\text{N}}-$ 、又は、これらを組み合わせた基を表す。 R^{N} は水素原子又は置換基を表す。

Y^{b1} は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、芳香環又は脂肪族環を表す。

W^{b1} は、水素原子又はケイ素原子を含まない置換基を表す。

s は、1以上の整数を表す。

(b4) 分子量が500～8000である。

[請求項10]

式(B1)で表される、請求項9に記載の化合物。

式(B1) $\text{B}^{\text{b1}} - (\text{Z}^{\text{b1}} - \text{Y}^{\text{b1}})_s - \text{W}^{\text{b1}}$

式(B1)中、 Z^{b1} 、 Y^{b1} 、 W^{b1} 、及び、 s は、前記部分構造における Z^{b1} 、 Y^{b1} 、 W^{b1} 、及び、 s と同義である。

B^{b1} は、 $-\text{L}^{\text{b1}}-\text{X}^{\text{b1}}$ で表される基が2つ以上置換している、又は、 $-\text{L}^{\text{b1}}-\text{X}^{\text{b1}}$ で表される基を2つ以上有する基が1つ以上置換している、芳香環を表す。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/024984

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>G02B 5/30</i> (2006.01)i; <i>C07F 7/08</i> (2006.01)i; <i>C07F 7/10</i> (2006.01)i; <i>C08F 2/44</i> (2006.01)i; <i>C08G 77/00</i> (2006.01)i; <i>C08L 83/00</i> (2006.01)i FI: G02B5/30; C07F7/08 X CSP; C07F7/10 W CSP; C08F2/44 B; C08G77/00; C08L83/00 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G02B5/30; C07F7/08; C07F7/10; C08F2/44; C08G77/00; C08L83/00 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	SUHAN, Natalie D. et al. Mesomorphic [2]Rotaxanes: Sheltering Ionic Cores with Interlocking Components. Journal of the American Chemical Society (2013). 10 December 2012, 135(1), pp. 400-408, ISSN 0002-7863 p. 401, scheme 2	1-2, 4-5
X		6-9
A		3, 10
Y	PUGH, Coleen et al. Induction of Smectic Layering in Nematic Liquid Crystals Using Immiscible Components. 2. Laterally Attached Side-Chain Liquid-Crystalline Poly(norbornene)s and Their Low-Molar-Mass Analogues with Hydrocarbon/Oligodimethylsiloxane Substituents. Macromolecules (1998). 15 July 1998, 31(16), pp. 5188-5200, ISSN 0024-9297 p. 5191, scheme 1, table 2	1-2, 5
X		6-7, 9
A		3-4, 8, 10
☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: “A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance “D” document cited by the applicant in the international application “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed “T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art “&” document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 09 September 2024		Date of mailing of the international search report 24 September 2024
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/024984

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	NICKMANS, Koen et al. 3D Orientational Control in Self-Assembled Thin Films with Sub-5 nm Features by Light. Small (2017). 24 July 2017, 13, 1701043, pp. 1-11, ISSN 1613-6810 p. 2, scheme 1	1-2, 5
X		6-7, 9
A		3-4, 8, 10
Y	JP 2008-239622 A (DAI NIPPON PRINTING CO., LTD.) 09 October 2008 (2008-10-09) paragraph [0042]	1-2, 4-5
Y	JP 5-255277 A (HOECHST AKTIENGESELLSCHAFT) 05 October 1993 (1993-10-05) paragraphs [0011], [0014]	1-2, 4-5
Y	JP 2000-235184 A (FUJI PHOTO FILM CO., LTD.) 29 August 2000 (2000-08-29) paragraphs [0009], [0034]-[0036]	5
Y	JP 2007-182423 A (CHISSO CORPORATION) 19 July 2007 (2007-07-19) claims, paragraph [0096]	5
X	WO 2018/143173 A1 (NIKON CORPORATION) 09 August 2018 (2018-08-09) paragraphs [0137], [0141]	9-10
A		1-8
X	JP 10-139648 A (L'OREAL) 26 May 1998 (1998-05-26) example 1	9-10
A		1-8
X	FAWCETT, Amanda S. et al. Thermoplastic Silicone Elastomers through Self-Association of Pendant Coumarin Groups. Macromolecules (2014). 18 February 2014, 47(5), pp. 1656-1663, ISSN: 0024-9297 fig. 2D	9-10
A		1-8

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

Document 1: SUHAN, Natalie D. et al. Mesomorphic [2]Rotaxanes: Sheltering Ionic Cores with Interlocking Components. Journal of the American Chemical Society (2013). 10 December 2012, 135(1), pp. 400-408, ISSN 0002-7863

Document 4: JP 2008-239622 A (DAI NIPPON PRINTING CO., LTD.) 09 October 2008 (2008-10-09) paragraph [0042] & US 2008/0230745 A1 paragraph [0054]

Document 5: JP 5-255277 A (HOECHST AKTIENGESELLSCHAFT) 05 October 1993 (1993-10-05) paragraphs [0011], [0014] & US 5200521 A column 2, lines 3-15, 42-50 & US 5439612 A & EP 477901 A2 & DE 4030579 A1 & KR 10-1992-0006331 A & TW 223062 B

Document 6: JP 2000-235184 A (FUJI PHOTO FILM CO., LTD.) 29 August 2000 (2000-08-29) paragraphs [0009], [0034]-[0036] (Family: none)

Document 7: JP 2007-182423 A (CHISSO CORPORATION) 19 July 2007 (2007-07-19) claims, paragraph [0096] & US 2007/0134447 A1 claims, paragraphs [0089]-[0090] & US 2011/0144293 A1

Claims are classified into the following two inventions.

(Invention 1) Parts in which a compound A is selected in claims 1 and 5, and claims 2, 4, and 6-8

Document 1 (in particular, p. 401, scheme 2) discloses a compound RSi^{2+} which exhibits liquid crystallinity.

Here, the compound RSi^{2+} has a molecular weight of 1889, and a "value obtained by dividing the total number of methyl groups bonded to silicon atoms by a molecular weight of a compound" of 0.0148, and satisfies requirements (a1) to (a3), and thus corresponds to a "compound A." In addition, the compound RSi^{2+} satisfies the structure specified in claims 2 and 4.

Document 1 does not disclose the feature in which a composition is obtained by mixing an additional liquid crystal compound to the compound and the feature in which an optically anisotropic film is formed by using the composition. However, the features are derived by adding a well-known feature, for example, disclosed in documents 4-7 (refer to parts of documents 4-5 for the former and documents 6-7 for the latter), and thus are not considered to exhibit a novel effect.

Therefore, parts in which a compound A is selected in claims 1 and 5, and claims 2 and 4 do not have a special technical feature, and are thus classified as invention 1.

Furthermore, claims 6-8 are the invention of a compound A, and are obtained by deleting a well-known feature from a part in which the compound A is selected in claim 1. Therefore, claims 6-8 are substantially identical to or similarly closely related to invention 1, and are thus classified as invention 1.

(Invention 2) Parts in which a compound B is selected in claims 1 and 5, and claims 3, and 9-10

Parts in which a compound B is selected in claims 1 and 5, and claims 3, and 9-10 do not correspond to an invention in the same category that includes all matters specifying the invention of a part in which the compound A is selected in claim 1. However, it cannot be said that the common technical feature between the two is a special technical feature. Also, parts selected from a compound B in claims 1 and 5, and claims 3, and 9-10 are not substantially identical to or similarly closely related to any of the claims classified as invention 1.

Therefore, parts in which a compound B is selected in claims 1 and 5, and claims 3, and 9-10 are not classified as invention 1, and are thus classified as invention 2.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/024984

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

1. ☒ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
- ☒ No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2024/024984

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
JP	2008-239622	A	09 October 2008	US	2008/0230745	A1	
paragraph [0054]							
JP	5-255277	A	05 October 1993	US	5200521	A	
				column 2, lines 3-15, 42-50			
				US	5439612	A	
				EP	477901	A2	
				DE	4030579	A1	
				KR	10-1992-0006331	A	
				TW	223062	B	
JP	2000-235184	A	29 August 2000	(Family: none)			
JP	2007-182423	A	19 July 2007	US	2007/0134447	A1	
				claims, paragraphs [0089]-[0090]			
				US	2011/0144293	A1	
WO	2018/143173	A1	09 August 2018	US	2019/0352260	A1	
				paragraphs [0200], [0207]			
				JP	2018-123082	A	
				CN	110198946	A	
				TW	201833124	A	
JP	10-139648	A	26 May 1998	US	6517742	B1	
				example 1			
				EP	841341	A1	
				FR	2755692	A1	
				CA	2218924	A1	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

G02B 5/30(2006.01)i; C07F 7/08(2006.01)i; C07F 7/10(2006.01)i; C08F 2/44(2006.01)i;
C08G 77/00(2006.01)i; C08L 83/00(2006.01)i
FI: G02B5/30; C07F7/08 X CSP; C07F7/10 W CSP; C08F2/44 B; C08G77/00; C08L83/00

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））
G02B5/30; C07F7/08; C07F7/10; C08F2/44; C08G77/00; C08L83/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報

1922 - 1996年

日本国公開実用新案公報

1971 - 2024年

日本国実用新案登録公報

1996 - 2024年

日本国登録実用新案公報

1994 - 2024年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）
CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	SUHAN, Natalie D. et al., Mesomorphic [2]Rotaxanes: Sheltering Ionic Cores with Interlocking Components, Journal of the American Chemical Society (2013), 2012.12.10, 135(1), p.400-408, ISSN 0002-7863 p.401, Scheme 2	1-2, 4-5
X		6-9
A		3, 10
Y	PUGH, Coleen et al., Induction of Smectic Layering in Nematic Liquid Crystals Using Immiscible Components. 2. Laterally Attached Side-Chain Liquid-Crystalline Poly(norbornene)s and Their Low-Molar-Mass Analogues with Hydrocarbon/Oligodimethylsiloxane Substituents, Macromolecules (1998), 1998.07.15, 31(16), p.5188-5200, ISSN 0024-9297 p.5191, Scheme 1, Table 2	1-2, 5
X		6-7, 9
A		3-4, 8, 10

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの

“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献

“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）

“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献

“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

09.09.2024

国際調査報告の発送日

24.09.2024

名称及びあて先

日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

権限のある職員（特許庁審査官）

沖村 美由 20 1131

電話番号 03-3581-1101 内線 3271

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	NICKMANS, Koen et al., 3D Orientational Control in Self-Assembled Thin Films with Sub-5 nm Features by Light, Small (2017), 2017.07.24, 13, 1701043, p.1-11, ISSN 1613-6810 p.2, Scheme 1	1-2, 5
X		6-7, 9
A		3-4, 8, 10
Y	JP 2008-239622 A (大日本印刷株式会社) 09.10.2008 (2008 - 10 - 09) 段落[0042]	1-2, 4-5
Y	JP 5-255277 A (ヘキスト・アクチエンゲゼルシャフト) 05.10.1993 (1993 - 10 - 05) 段落[0011], [0014]	1-2, 4-5
Y	JP 2000-235184 A (富士写真フイルム株式会社) 29.08.2000 (2000 - 08 - 29) 段落[0009], [0034]-[0036]	5
Y	JP 2007-182423 A (チッソ株式会社) 19.07.2007 (2007 - 07 - 19) 特許請求の範囲, 段落[0096]	5
X	WO 2018/143173 A1 (株式会社ニコン) 09.08.2018 (2018 - 08 - 09) 段落[0137], [0141]	9-10
A		1-8
X	JP 10-139648 A (ロレアル) 26.05.1998 (1998 - 05 - 26) 実施例1	9-10
A		1-8
X	FAWCETT, Amanda S. et al., Thermoplastic Silicone Elastomers through Self-Association of Pendant Coumarin Groups, Macromolecules (2014), 2014.02.18, 47(5), p.1656-1663, ISSN: 0024-9297 Fig.2D	9-10
A		1-8

第III欄 発明の単一性が欠如しているときの意見（第1ページの3の続き）

次に述べるようにこの国際出願に二以上の発明があるときの国際調査機関は認めた。

文献1：SUHAN, Natalie D. et al., Mesomorphic [2]Rotaxanes: Sheltering Ionic Cores with Interlocking Components, Journal of the American Chemical Society (2013), 2012.12.10, 135(1), p.400-408, ISSN 0002-7863

文献4：JP 2008-239622 A（大日本印刷株式会社）09.10.2008(2008-10-09)
段落[0042]
& US 2008/0230745 A1 段落[0054]

文献5：JP 5-255277 A（ヘキスト・アクチェンゲゼルシャフト）05.10.1993(1993-10-05)
段落[0011], [0014]
& US 5200521 A 第2欄第3-15, 42-50行
& US 5439612 A & EP 477901 A2 & DE 4030579 A1 & KR 10-1992-0006331 A & TW 223062 B

文献6：JP 2000-235184 A（富士写真フイルム株式会社）29.08.2000(2000-08-29)
段落[0009], [0034]-[0036]（ファミリーなし）

文献7：JP 2007-182423 A（チッソ株式会社）19.07.2007(2007-07-19)
特許請求の範囲, 段落[0096]
& US 2007/0134447 A1 請求項, 段落[0089]-[0090] & US 2011/0144293 A1

請求の範囲は、以下の2つの発明に区分される。

（発明1）請求項1，5のうち化合物Aを選択した部分、及び請求項2，4，6-8

文献1の特にp.401, Scheme 2には、液晶性を示す化合物 RSi^{2+} が記載されている。

ここで、上記化合物 RSi^{2+} は、分子量が1889であり、「ケイ素原子に結合したメチル基の合計数を化合物の分子量で除した値」は0.0148であって、要件(a1)～(a3)を満たすことから、「化合物A」に相当する。また、請求項2，4で特定される構造を満たす。

文献1には、上記化合物に別の液晶化合物を混合して組成物とすること、及び当該組成物を用いて光学異方性膜を形成することは記載されていないが、これらは例えば文献4-7（前者について文献4-5、後者について文献6-7の上記箇所を参照。）に示される周知技術の付加であって、新たな効果を奏するものではないと認められる。

よって、請求項1，5のうち化合物Aを選択した部分、及び請求項2，4は特別な技術的特徴を有しないから、発明1に区分する。

また、請求項6-8は化合物Aの発明であり、請求項1のうち化合物Aを選択した部分から周知技術の削除をしたものであって、実質同一に準ずる関係にあるので、発明1に区分する。

（発明2）請求項1，5のうち化合物Bを選択した部分、及び請求項3，9-10

請求項1，5のうち化合物Bを選択した部分及び請求項3，9-10は、請求項1のうち化合物Aを選択した部分に対して、その発明特定事項を全て含む同一カテゴリーの発明には該当しない。また、両者の間の共通の技術的特徴が特別な技術的特徴であるとはいえない。さらに、発明1に区分されたいずれの請求項に対しても実質同一又はそれに準ずる関係にはない。

よって、請求項1，5のうち化合物Bを選択した部分、及び請求項3，9-10は、発明1に区分できないので、発明2に区分する。

第Ⅲ欄 発明の単一性が欠如しているときの意見（第1ページの3の続き）

1. ☒ 出願人が必要な追加調査手数料をすべて期間内に納付したので、この国際調査報告は、すべての調査可能な請求項について作成した。
2. ☐ 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求項について調査することができたので、追加調査手数料の納付を求めなかった。
3. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、手数料の納付のあった次の請求項のみについて作成した。
4. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料を期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、請求の範囲の最初に記載されている発明に係る次の請求項について作成した。

追加調査手数料の異議の
申立てに関する注意

- ☐ 追加調査手数料及び、該当する場合には、異議申立手数料の納付と共に、出願人から異議申立てがあった。
- ☐ 追加調査手数料の納付と共に出願人から異議申立てがあったが、異議申立手数料が納付命令書に示した期間内に支払われなかった。
- ☒ 追加調査手数料の納付はあったが、異議申立てはなかった。

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/024984

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
JP	2008-239622	A	09.10.2008	US	2008/0230745	A1	
				段落[0054]			
JP	5-255277	A	05.10.1993	US	5200521	A	
				第2欄第3-15, 42-50行			
				US	5439612	A	
				EP	477901	A2	
				DE	4030579	A1	
				KR	10-1992-0006331	A	
				TW	223062	B	
JP	2000-235184	A	29.08.2000	(ファミリーなし)			
JP	2007-182423	A	19.07.2007	US	2007/0134447	A1	
				請求項, 段落[0089]-[0090]			
				US	2011/0144293	A1	
WO	2018/143173	A1	09.08.2018	US	2019/0352260	A1	
				段落[0200], [0207]			
				JP	2018-123082	A	
				CN	110198946	A	
				TW	201833124	A	
JP	10-139648	A	26.05.1998	US	6517742	B1	
				実施例1			
				EP	841341	A1	
				FR	2755692	A1	
				CA	2218924	A1	