



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0106953
(43) 공개일자 2017년09월22일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 19/38 (2006.01) *C07D 285/12* (2006.01)
C07D 285/135 (2006.01) *C08F 20/10* (2006.01)
G02B 5/30 (2006.01) *G02F 1/13363* (2006.01)

(52) CPC특허분류
C09K 19/38 (2013.01)
C07D 285/12 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-7013895

(22) 출원일자(국제) 2016년01월14일
심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2017년05월23일

(86) 국제출원번호 PCT/JP2016/050983

(87) 국제공개번호 WO 2016/114345
국제공개일자 2016년07월21일

(30) 우선권주장

JP-P-2015-006294 2015년01월16일 일본(JP)

(71) 출원인
디아이씨 가부시끼가이샤
일본국 도쿄 174-8520 이타바시쿠 사카시타 3쵸메
35-58

(72) 발명자
호리구치 마사히로
일본국 사이타마켄 기타아다치군 이나마치 오아자
고무로 4472-1 디아이씨 가부시끼가이샤 사이타마
공장 내
고이소 아키히로

(74) 대리인
문두현

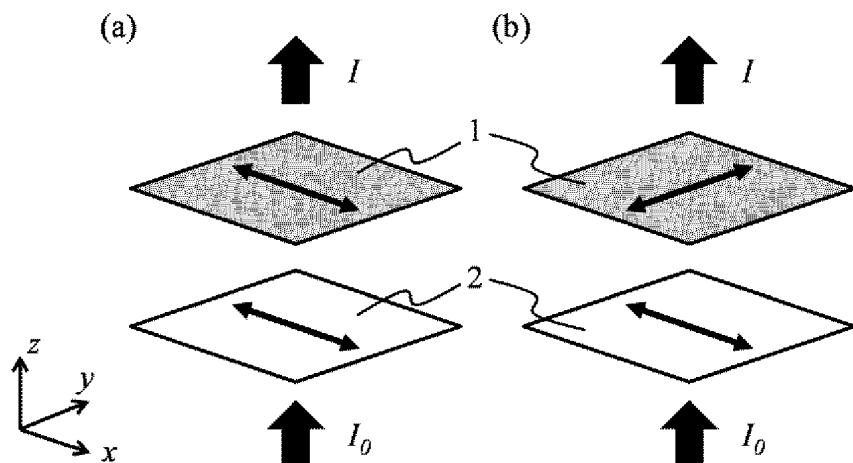
전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 발명의 명칭 중합성 화합물 및 광학 이방체

(57) 요 약

본 발명은, 중합시켜서 얻어진 필름상의 중합물에 대해서 고온에서 장시간의 자외·가시광을 조사했을 경우에, 위상차의 저하나 변색을 일으키기 어려운 중합성 화합물 및 중합성 조성물을 제공하는 것을 과제로 한다. 또한, 당해 중합성 조성물을 중합시킴으로써 얻어지는 중합체 및 당해 중합체를 사용한 광학 이방체를 제공하는 것을 과제로 한다. 그 결과, 중합성 조성물의 구성 부재로서 유용한 화합물이 얻어졌다. 또한, 본 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을 사용한 광학 이방체는 광학 필름 등의 용도에 유용하다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 285/135 (2013.01)

C08F 20/10 (2013.01)

G02B 5/30 (2013.01)

G02F 1/13363 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

수평 배향 처리한 기재 상에 배향시켰을 경우에, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡수 극대 파장 λ_{omax} 를 320nm 내지 420nm에 갖는 중합성 액정 화합물.

청구항 2

제1항에 있어서,

수평 배향 처리한 기재 상에 배향시켰을 경우에, 파장 λ_{omax} 에 있어서의, 배향 방향과 평행한 방향의 흡광도 Ae와, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡광도 Ao가, 하기 식(식 I)

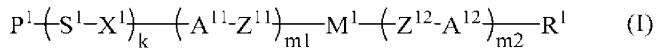
$$Ae/Ao > 1 \quad (\text{식 I})$$

을 충족시키는, 화합물.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,

일반식(I)



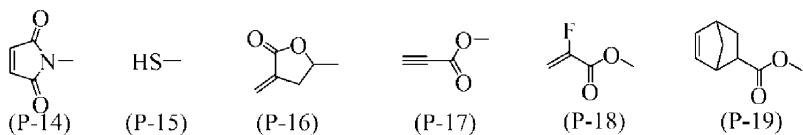
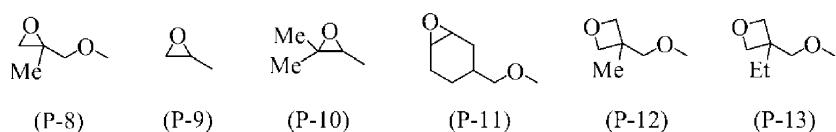
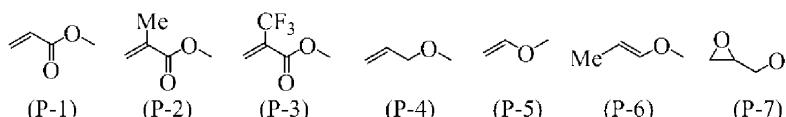
(식 중, P^1 는 중합성기를 나타내고, S^1 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S^1 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^1 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내지만, X 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, $P^1 - (S^1 - X^1)_k -$ 에는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다), A^{11} 및 A^{12} 는 각각 독립해서 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 피리딘-2,5-디일기, 피리미딘-2,5-디일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라히드로나프탈렌-2,6-디일기, 데카히드로나프탈렌-2,6-디일기 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기를 나타내지만, 이들 기는 무치환하거나 또는 1개 이상의 L에 의해서 치환되어도 되고, A^{11} 및/또는 A^{12} 가 복수 나타나는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고, Z^{11} 및 Z^{12} 는 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CH_2CH_2-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-OCO-NH-$, $-NH-COO-$, $-NH-CO-NH-$, $-NH-O-$, $-O-NH-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내지만, Z^{11} 및/또는 Z^{12} 가 복수 나타나는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고, R^1 은 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 시아노기, 니트로기, 이소시아노기, 티오이소시아노기, 또는, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 가 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$ 또는 $C\equiv C-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 혹은 R^1 은 $-(X^R - S^R)_{kR} - P^R$ 로 표시되는 기(식 중, P^R 는 중합성기를 나타내고, S^R 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내

지만, S^R 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^R 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-$ $OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내지만, X^R 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, $-(X^R-S^R)_{kR}-P^R$ 에는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다), kR 은 0 내지 8의 정수를 나타낸다)를 나타내도 되고, M^L 은 공역계를 포함하는 2가의 탄화수소기를 나타내고, L 은 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 히드록시기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 가 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$ 또는 $-C\equiv C-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, L 이 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 혹은 L 은 $-(X^L-S^L)_{kL}-P^L$ 로 표시되는 기(식 중, P^L 는 중합성기를 나타내고, S^L 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^L 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-$ $OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내지만, X 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, $-(X^L-S^L)_{kL}-P^L$ 에는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다), kL 은 0 내지 8의 정수를 나타낸다)를 나타내도 되고, k 는 0 내지 8의 정수를 나타내고, $m1$ 및 $m2$ 는 각각 독립해서 0 내지 5의 정수를 나타내지만, $m1+m2$ 는 1 내지 5의 정수를 나타낸다)으로 표시되는, 화합물.

청구항 4

제3항에 있어서,

일반식(I)에 있어서, P^1 가 하기의 식(P-1) 내지 식(P-20)



에서 선택되는 기를 나타내는 화합물.

청구항 5

제3항 또는 제4항에 있어서,

일반식(I)에 있어서, S^1 가 각각 독립해서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 가 각각 독립해서 $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-OCO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-$ 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬렌기를 나타내는, 화합물.

청구항 6

제3항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서,

일반식(I)에 있어서, M^1 에 포함되는 π 전자의 총수가 4 내지 50인, 화합물.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 함유하는 조성물.

청구항 8

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 함유하는 액정 조성물.

청구항 9

제7항 또는 제8항에 기재된 조성물을 중합함에 의해 얻어지는 중합체.

청구항 10

제9항에 기재된 중합체를 사용한 광학 이방체.

청구항 11

제10항에 있어서,

수평 배향 처리한 기재 상에 배향시켰을 경우에, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡수 극대 파장 λ_{omax} 를 320nm 내지 420nm에 갖는 광학 이방체.

청구항 12

제10항 또는 제11항에 있어서,

수평 배향 처리한 기재 상에 배향시켰을 경우에, 파장 λ_{omax} 에 있어서의, 배향 방향과 평행한 방향의 흡광도 Ae 와, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡광도 Ao 가, 하기 식(식 I)

$$Ao/Ae > 1 \quad (\text{식 I})$$

을 충족시키는, 광학 이방체.

청구항 13

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 사용한 수지, 수지첨가제, 오일, 필터, 접착제, 접착제, 유지(油脂), 잉크, 의약품, 화장품, 세제, 건축 재료, 포장재, 액정 재료, 유기 EL 재료, 유기 반도체 재료, 전자 재료, 표시 소자, 전자 디바이스, 통신기기, 자동차 부품, 항공기 부품, 기계 부품, 농약 및 식품 그리고 그들을 사용한 제품.

발명의 설명**기술 분야**

[0001] 본 발명은 중합성기를 갖는 화합물, 당해 화합물을 함유하는 중합성 조성물, 중합성 액정 조성물 및 당해 중합성 액정 조성물을 사용한 광학 이방체에 관한 것이다.

배경기술

[0002]

중합성기를 갖는 화합물(중합성 화합물)은 각종 광학 재료에 사용된다. 예를 들면, 중합성 화합물을 포함하는 중합성 조성물을 액정 상태로 배열시킨 후, 중합시킴에 의해, 균일한 배향을 갖는 중합체를 제작하는 것이 가능하다. 이와 같은 중합체는, 디스플레이에 필요한 편광판, 위상차판 등에 사용할 수 있다. 많은 경우, 요구되는 광학 특성, 중합 속도, 용해성, 용점, 유리 전이 온도, 중합체의 투명성, 기계적 강도, 표면 경도, 내열성 및 내광성을 충족시키기 위해서, 2종류 이상의 중합성 화합물을 포함하는 중합성 조성물이 사용된다. 그때, 사용하는 중합성 화합물에는, 다른 특성에 악영향을 끼치지 않고, 중합성 조성물에 양호한 물성을 초래하는 것이 요구된다.

[0003]

옥외 또는 고온에 노출되는 장소에서 사용되는 액정 디스플레이에는, 통상의 액정 디스플레이와 비교하여 높은 신뢰성이 요구된다. 예를 들면 모바일 제품 및 차재 제품 등의 분야에 있어서는, 특히 높은 내열성 및 내광성이 필요하게 되어 있다. 액정 디스플레이의 시야각을 향상시키기 위한 위상차 필름 용도로서, 각종 중합성 화합물이 보고되어 왔다. 그러나, 그들 중합성 화합물을 사용해서 제작한 필름은, 고온에서 장시간의 자외·가시광을 조사했을 경우에, 위상차의 저하의 우려나, 변색할 우려가 있었다(특허문헌 1, 2). 위상차가 저하할 우려나, 변색할 우려가 있는 필름을, 예를 들면 모바일 제품 및 차재(車載) 제품 등의 액정 디스플레이에 사용했을 경우, 장시간의 사용에 의해서 화면의 밝기에 불균일이 발생하거나, 색감이 부자연하게 되어 버려서, 당해 제품의 품질을 크게 저하시켜 버리는 문제가 있다. 그 때문에, 이와 같은 문제를 해결할 수 있는 중합성 화합물의 개발이 요구되고 있었다.

선행기술문헌

특허문헌

[0004]

(특허문헌 0001) 일본 특표 2010-537955호 공보

(특허문헌 0002) 일본 특개2008-291218호 공보

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005]

본 발명이 해결하려고 하는 과제는, 중합시켜서 얻어진 필름상의 중합물에 대해서 고온에서 장시간의 자외·가시광을 조사했을 경우에, 위상차의 저하나 변색을 일으키기 어려운 중합성 화합물 및 중합성 조성물을 제공하는 것이다. 또한, 당해 중합성 조성물을 중합시킴으로써 얻어지는 중합체 및 당해 중합체를 사용한 광학 이방체를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0006]

본 발명자들은, 상기 과제를 해결하기 위하여, 예의 연구를 행한 결과, 하기 화합물의 개발에 이르렀다. 즉, 본원 발명은 수평 배향 처리한 기재 상에 배향시켰을 경우에, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡수 극 대 파장 λ_{omax} 를 320nm 내지 420nm에 갖는 중합성 액정 화합물을 제공하고, 아울러서 당해 화합물을 함유하는 중합성 조성물, 중합성 액정 조성물, 당해 중합성 액정 조성물을 중합시킴에 의해 얻어지는 중합체 및 당해 중합체를 사용한 광학 이방체를 제공한다.

발명의 효과

[0007]

본원 발명의 화합물은, 중합성 조성물에 첨가하고 중합시켜, 얻어진 필름상의 중합물에 대해서 고온에서 장시간의 자외·가시광을 조사했을 경우에, 밀착성의 저하나 변색을 일으키기 어려우므로, 중합성 조성물의 구성 부재로서 유용하다. 또한, 본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을 사용한 광학 이방체는, 위상차 필름 등의 광학 재료의 용도에 유용하다.

도면의 간단한 설명

[0008]

도 1은 평가 대상의 필름 및 편광판의 배치를 나타내는 도면.

도 1의 (a)는 평가 대상의 필름의 배향 방향과 편광판의 편광 방향이 평행인 상태.

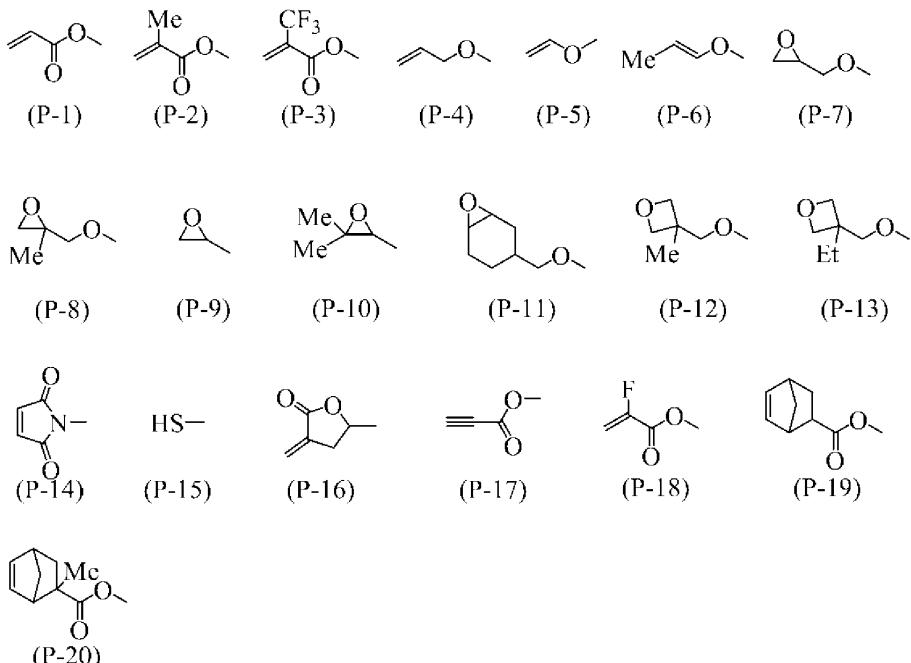
도 1의 (b)는 평가 대상의 필름의 배향 방향과 편광판의 편광 방향이 수직인 상태.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0009] 이하에 본 발명에 따른 중합성 액정 화합물의 최량의 형태에 대하여 설명하지만, 본 발명에 있어서, 「액정성 화합물」이란, 메소겐성 골격을 갖는 화합물을 나타내는 것을 의도하는 것이며, 화합물 단독으로는, 액정성을 나타내지 않아도 된다.
- [0010] 본원 발명은 수평 배향 처리한 기재 상에 배향시켰을 경우에, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡수 극대 파장 λ_{omax} 를 320nm 내지 420nm에 갖는 중합성 액정 화합물을 제공하고, 아울러서 당해 화합물을 함유하는 중합성 조성물, 중합성 액정 조성물, 당해 중합성 액정 조성물을 중합시킴에 의해 얻어지는 중합체 및 당해 중합체를 사용한 광학 이방체를 제공한다.
- [0011] 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡수 극대 파장 λ_{omax} 는 이하와 같이 해서 측정할 수 있다. 측정에는 분광 광도계를 사용하여, 평가 대상의 필름의 검출기측의 면에, 필름의 배향 방향과 편광판의 편광 방향이 수직으로 되도록 배치하고 흡수 스펙트럼을 측정함에 의해서 얻어진다(도면 참조). 평가 대상의 화합물은, 단독으로 기재 상에 도포해도 되며, 용매로 희석해서 도포해도 되고, 또한, 다른 성분과 혼합해서 도포해도 된다. 320nm 내지 420nm에 복수의 흡수 극대를 가질 경우, 복수의 흡수 극대 중의 최대값을 나타내는 파장을 λ_{omax} 로 정의한다.
- [0012] 얻어진 필름의 위상차의 저하나 변색의 일어나기 어려움의 관점에서, 수평 배향 처리한 기재 상에 배향시켰을 경우에, 파장 λ_{omax} 에 있어서의, 배향 방향과 평행한 방향의 흡광도 Ae와, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡광도 Ao가, 하기 식(식 I)
- [0013] $Ao/Ae > 1$ (식 I)
- [0014] 을 충족시키는 것이 바람직하다.
- [0015] 파장 λ_{omax} 에 있어서의, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡광도 Ao는, 상기 λ_{omax} 의 측정 방법에 의해서 얻어진다. 또한, 배향 방향과 평행한 방향의 흡광도 Ae는, 평가 대상의 필름의 검출기측의 면에, 필름의 배향 방향과 편광판의 편광 방향이 평행하게 되도록 배치하고 흡수 스펙트럼을 측정함에 의해서 얻어진다(도면 참조).
- [0016] 또한, 얻어진 필름의 위상차의 저하나 변색의 일어나기 어려움의 관점에서, 상기 식(식 I)을 충족시키며 또한 λ_{omax} 가 330nm 내지 370nm인 것이 보다 바람직하다.
- [0017] 또한, 하기의 일반식(I)
- [0018]
$$P^1 - (S^1 - X^1)_k - (A^{11} - Z^{11})_{m1} - M^1 - (Z^{12} - A^{12})_{m2} - R^1 \quad (I)$$
- [0019] (식 중, P^1 는 중합성기를 나타내고, S^1 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S^1 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^1 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내지만, X^1 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, $P-(S-X)_k$ -에는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다), A^{11} 및 A^{12} 는 각각 독립해서 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 피리딘-2,5-디일기, 피리미딘-2,5-디일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라히드로나프탈렌-2,6-디일기, 테카히드로나프탈렌-2,6-디일기 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기를 나타내지만, 이를 기는 무치환이거나 또는 1개 이상의 L에 의해서 치환되어도 되고, A^{11} 및/또는 A^{12} 가 복수 나타나는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고, Z^{11} 및 Z^{12} 는 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$,

-CH₂CH₂-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -OCO-NH-, -NH-COO-, -NH-CO-NH-, -NH-O-, -O-NH-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -COO-CH₂CH₂-, -OCO-CH₂CH₂-, -CH₂CH₂-COO-, -CH₂CH₂-OCO-, -COO-CH₂-, -OCO-CH₂-, -CH₂-COO-, -CH₂-OCO-, -CH=CH-, -N=N-, -N=CH-, -CH=N-N=CH-, -CF=CF-, -C≡C- 또는 단결합을 나타내지만, Z¹¹ 및/또는 Z¹²가 복수 나타나는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고, R¹은 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 시아노기, 니트로기, 이소시아노기, 티오이소시아노기, 또는, 1개의 -CH₂- 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 -CH₂-가 각각 독립해서 -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO- 또는 -C≡C-에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 혹은 R¹은 -(X^R-S^R)_{kR}-P^R로 표시되는 기(식 중, P^R는 중합성기를 나타내고, S^R는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S^R가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^R는 -O-, -S-, -OCH₂-, -CH₂O-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -OCO-CH=CH-, -COO-CH₂CH₂-, -OCO-CH₂CH₂-, -CH₂CH₂-COO-, -CH₂CH₂-OCO-, -OCO-CH₂-, -CH₂-COO-, -CH=CH-, -N=N-, -CH=N-N=CH-, -CF=CF-, -C≡C- 또는 단결합을 나타내지만, X^R가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, -(X^R-S^R)_{kR}-P^R에는 -O-O- 결합을 포함하지 않는다), kR은 0 내지 8의 정수를 나타낸다)를 나타내도 되고, M¹은 공역계를 포함하는 2가의 탄화수소기를 나타내고, L은 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 히드록시기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는, 1개의 -CH₂- 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 -CH₂-가 각각 독립해서 -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -OCO-CH=CH-, -CH=CH-, -CF=CF- 또는 -C≡C-에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, L이 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 혹은 L은 -(X^L-S^L)_{kL}-P^L로 표시되는 기(식 중, P^L는 중합성기를 나타내고, S^L는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S^L가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^L는 -O-, -S-, -OCH₂-, -CH₂O-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -OCO-CH=CH-, -COO-CH₂CH₂-, -OCO-CH₂CH₂-, -CH₂CH₂-COO-, -CH₂CH₂-OCO-, -OCO-CH₂-, -CH₂-COO-, -CH=CH-, -N=N-, -CH=N-N=CH-, -CF=CF-, -C≡C- 또는 단결합을 나타내지만, X^L가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, -(X^L-S^L)_{kL}-P^L에는 -O-O- 결합을 포함하지 않는다), kL은 0 내지 8의 정수를 나타낸다)를 나타내도 되고, k는 0 내지 8의 정수를 나타내고, m1 및 m2는 각각 독립해서 0 내지 5의 정수를 나타내지만, m1+m2는 1 내지 5의 정수를 나타낸다)으로 표시되는 화합물이 보다 바람직하다.

[0020] 일반식(I)에 있어서 P¹는 중합성기를 나타내지만, 하기의 식(P-1) 내지 식(P-20)



[0021]

[0022]에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, 이들 중합성기는 라디칼 중합, 라디칼 부가 중합, 양이온 중합 및 음이온 중합에 의해 중합한다. 특히 중합 방법으로서 자외선 중합을 행하는 경우에는, 식(P-1), 식(P-2), 식(P-3), 식(P-4), 식(P-5), 식(P-7), 식(P-11), 식(P-13), 식(P-15) 또는 식(P-18)이 바람직하고, 식(P-1), 식(P-2), 식(P-7), 식(P-11) 또는 식(P-13)이 보다 바람직하고, 식(P-1), 식(P-2) 또는 식(P-3)이 더 바람직하고, 식(P-1) 또는 식(P-2)이 특히 바람직하다.

[0023]

S¹는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S¹가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 된다. 또한, 스페이서기로서는, 1개의 -CH₂- 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 -CH₂-가 각각 독립해서 -O-, -COO-, -OCO-, -OCO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -CH=CH- 또는 -C≡C-로 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬렌기를 나타내는 것이 바람직하다. S¹는 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 복수 존재하는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고, 각각 독립해서, 1개의 -CH₂- 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 -CH₂-가 각각 독립해서 -O-, -COO-, -OCO-로 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 10의 알킬렌기 또는 단결합을 나타내는 것이 보다 바람직하고, 각각 독립해서 탄소 원자수 1 내지 10의 알킬렌기 또는 단결합을 나타내는 것이 더 바람직하고, 복수 존재하는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고 각각 독립해서 탄소 원자수 1 내지 8의 알킬렌기를 나타내는 것이 특히 바람직하다.

[0024]

X¹는 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, 복수 존재하는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고, 각각 독립해서 -O-, -S-, -OCH₂-, -CH₂O-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -COO-CH₂CH₂-, -OCO-CH₂CH₂-, -CH₂CH₂-COO-, -CH₂CH₂-OCO- 또는 단결합을 나타내는 것이 바람직하고, 각각 돋립해서 -O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -COO-, -OCO-, -COO-CH₂CH₂-, -OCO-CH₂CH₂-, -CH₂CH₂-COO-, -CH₂CH₂-OCO- 또는 단결합을 나타내는 것이 보다 바람직하고, 복수 존재하는 경우는 각각 동일해도 되며 달라도 되고, 각각 돋립해서 -O-, -COO-, -OCO- 또는 단결합을 나타내는 것이 특히 바람직하다.

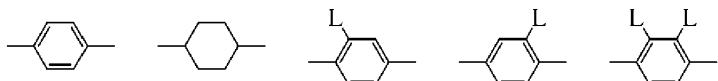
[0025]

k는 0 내지 8의 정수를 나타내지만, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 0 내지 4의 정수를 나타내는 것이 바람직하고, 0 내지 3의 정수를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 0 내지 2의 정수를 나타내는 것이 더 바람직하고, 1을 나타내는 것이 특히 바람직하다.

[0026]

A¹¹ 및 A¹²는 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 각각 돋립해서 무치환 또는 1개 이상의 L에 의해 치환되어도 되는 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기 또는 나프탈렌-2,6-디일을 나타내는 것이 바람직하고,

각각 독립해서 하기의 식(A-1) 내지 식(A-11)

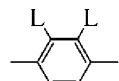


(A-1)

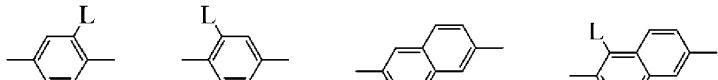
(A-2)



(A-3)

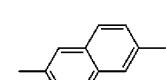


(A-4)

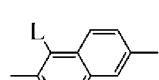


(A-6)

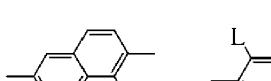
(A-7)



(A-8)



(A-9)



(A-10)

(A-11)

[0027]

[0028]에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 각각 독립해서 식(A-1) 내지 식(A-8)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 더 바람직하고, 각각 독립해서 식(A-1) 내지 식(A-4)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 특히 바람직하다.

[0029]

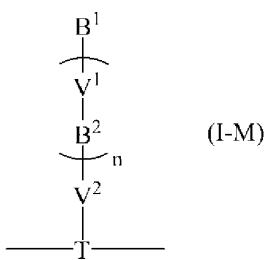
Z^{11} 및 Z^{12} 는 화합물의 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, 각각 독립해서 단결합, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CF_2CF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내는 것이 바람직하고, 각각 독립해서 $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CH_2CH_2-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내는 것이 보다 바람직하고, 각각 독립해서 $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$ 또는 단결합을 나타내는 것이 더 바람직하고, 각각 독립해서 $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$ 또는 단결합을 나타내는 것이 특히 바람직하다.

[0030]

R^1 은 액정성 및 합성의 용이함의 관점에서 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 시아노기, 혹은, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 가 각각 독립해서 $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 12의 직쇄 또는 분기 알킬기, 혹은 $-(X^R-S^R)_{kR}-P^R$ 로 표시되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 시아노기, 탄소 원자수 1 내지 12의 직쇄 알킬기 또는 직쇄 알콕시기, 또는, $-(X^R-S^R)_{kR}-P^R$ 로 표시되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하고, $-(X^R-S^R)_{kR}-P^R$ 로 표시되는 기를 나타내는 것이 특히 바람직하다. P^R 는 중합성기를 나타내고, S^R 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S^R 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^R 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내지만, X 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, $-(X^R-S^R)_{kR}-P^R$ 에는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다), kR 은 0 내지 8의 정수를 나타내지만, P^R , S^R , X^R , kR 의 바람직한 구조로서는, 각각 P^1 , S^1 , X^1 , k 에 있어서의 바람직한 구조와 마찬가지이다.

[0031]

M^1 은 공역계를 포함하는 2가의 탄화수소기를 나타내지만, 위상차의 저하나 변색의 일어나기 어려움의 관점에서, M^1 에 포함되는 π 전자의 총수는 4 내지 50인 것이 바람직하고, 4 내지 24인 것이 보다 바람직하다. 또한, M^1 은 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 하기의 식(I-M)

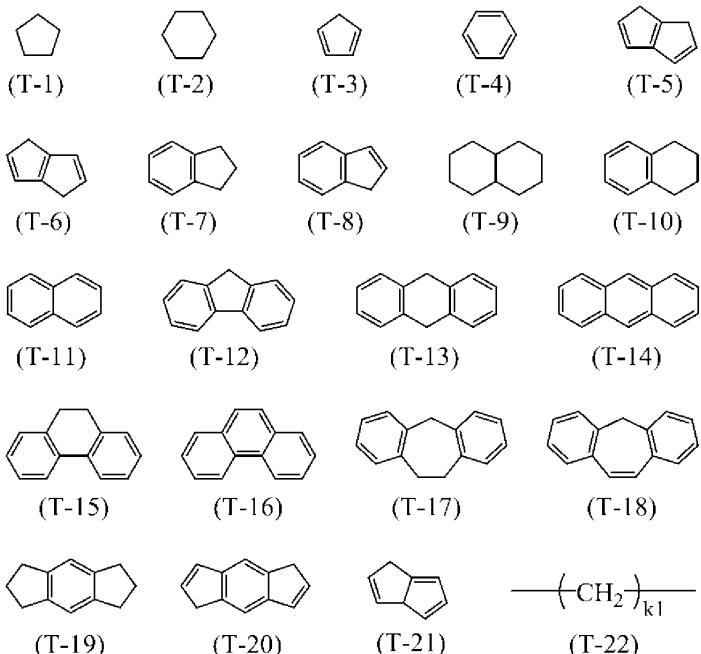


[0032]

(식 중, T는 3가의 탄화수소기를 나타내고, B¹는 수소 원자, 메틸기, 메틸리덴기 또는 환식 탄화수소기를 나타내지만, 이를 기는 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B에 의해서 치환되어도 되고, B²는 단결합, 이중 결합 또는 2가의 환식 탄화수소기를 나타내지만, 이를 기는 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B에 의해서 치환되어도 되고, L^B은 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 히드록시기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는, 1개의 -CH₂- 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 -CH₂-가 각각 독립해서 -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -OCO-CH=CH-, -CH=CH-, -CF=CF- 또는 -C≡C-에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, L^B이 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, V¹ 및 V²는 단결합, 이중 결합 또는 2가의 결합기를 나타내고, n은 0 내지 10의 정수를 나타내지만, B¹-V¹, V¹-B², B²-V¹, B²-V², V²-T를 연결하는 결합기는 각각 독립해서 단결합이어도 되며 이중 결합이어도 된다)으로 표시되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0034]

T는 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 하기의 식(T-1) 내지 식(T-22)

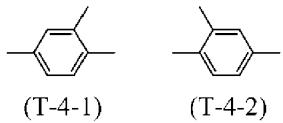


[0035]

(식 중, 임의의 위치에 결합수(結合手)를 가져도 되고, 임의의 -CH=는 각각 독립해서 -N=으로 치환되어도 되고, -CH₂-는 각각 독립해서 -O-, -S-, -NR⁰-(식 중, R⁰은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다), -CS- 또는 -CO-로 치환되어도 되지만, -O-O- 결합을 포함하지 않는다. 여기에서, 임의의 위치에 결합수를 가져도 된다는 것은, 예를 들면, T는 3가의 기이므로, 임의의 위치에 결합수를 3개 갖는 것을 의도한다(이하, 본 발명에 있어서, 임의의 위치에 결합수를 가져도 된다는 것은 마찬가지의 의미를 나타낸다). 또한, 이들 기

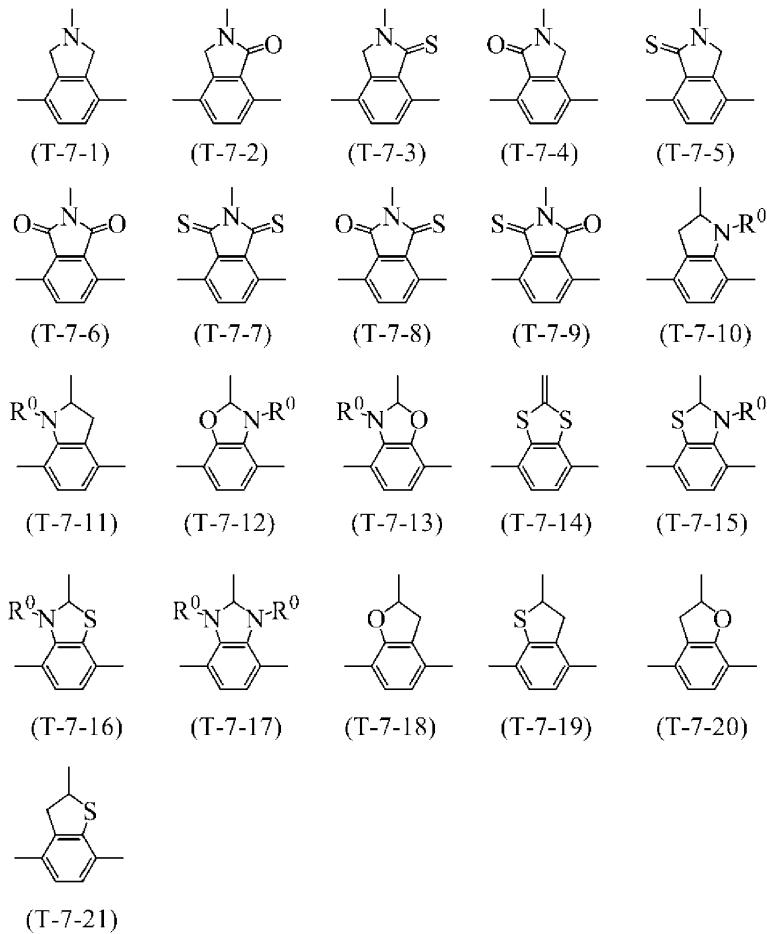
는 무치환 또는 1개 이상의 L^T 에 의해서 치환되어도 되고, L^T 은 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 히드록시기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오아노시아노기, 또는, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 가 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$ 또는 $-C\equiv C-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 칙쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, L^T 이 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, k_1 은 1 내지 20의 정수를 나타낸다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, 식(T-4), 식(T-7), 식(T-8), 식(T-11)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 식(T-4), 식(T-11)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 더 바람직하다.

[0037] 또한, T가 상기 식(T-4)에서 선택되는 기를 나타낼 경우, 보다 구체적으로는 하기의 식(T-4-1) 또는 식(T-4-2)



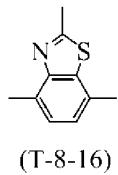
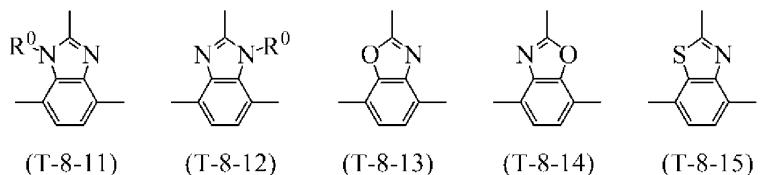
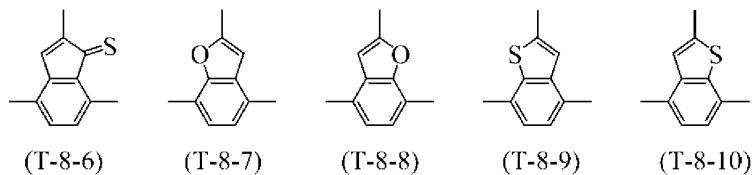
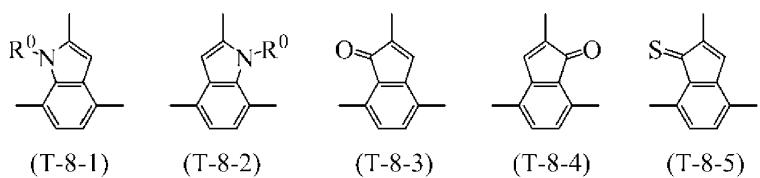
[0038]

[0039] 으로 표시되는 기인 것이 바람직하고, T가 상기 식(T-7)에서 선택되는 기를 나타낼 경우, 보다 구체적으로는 하기의 식(T-7-1) 내지 식(T-7-21)



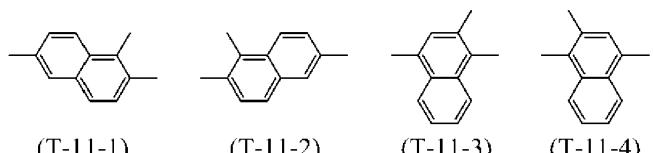
[0040]

[0041] (식 중, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, T가 상기 식(T-8)에서 선택되는 기를 나타낼 경우, 보다 구체적으로는 하기의 식(T-8-1) 내지 식(T-8-16)



[0042]

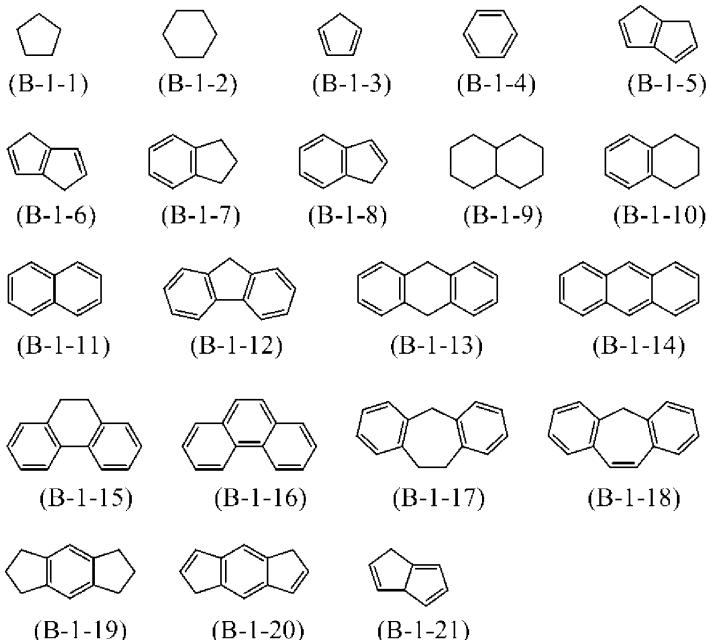
[0043] (식 중, R⁰은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, T가 상기 식(T-11)에서 선택되는 기를 나타낼 경우, 보다 구체적으로는 하기의 식(T-11-1) 내지 식(T-11-4)



[0044]

[0045]에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0046] B¹는 수소 원자 혹은, 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B에 의해서 치환되어도 되는 메틸기, 메틸리덴기 또는 환식 탄화수소기를 나타내지만, 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 수소 원자 혹은, 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B에 의해서 치환되어도 되는 메틸기, 메틸리덴기, 하기의 식(B-1-1) 내지 식(B-1-21)

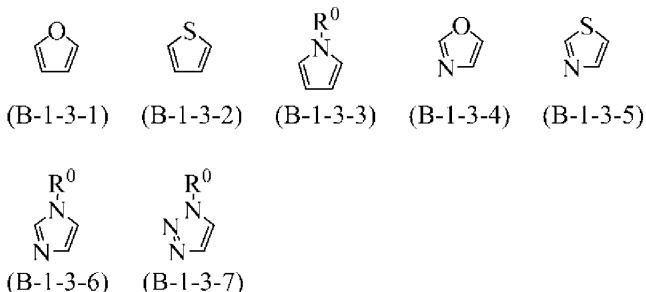


[0047]

[0048] (식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, 임의의 $-CH=$ 는 각각 독립해서 $-N=$ 으로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-NR^0-$ (식 중, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다), $-CS-$ 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 되지만, $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, B^1 은 수소 원자 혹은, 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 메틸기, 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 메틸리덴기, 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 상기한 식(B-1-3), 식(B-1-4), 식(B-1-8), 식(B-1-10), 식(B-1-11)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하고, B^1 은 수소 원자 혹은, 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 메틸기, 무치환 이거나 또는 1개 이상의 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 메틸리덴기, 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 상기한 식(B-1-8), 식(B-1-10)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 더 바람직하다.

[0049]

또한, 식(B-1-3)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-3-1) 내지 식(B-1-3-7)

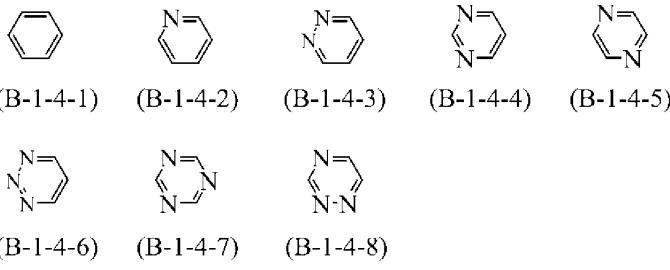


[0050]

[0051] (식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0052]

식(B-1-4)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-4-1) 내지 식(B-1-4-8)



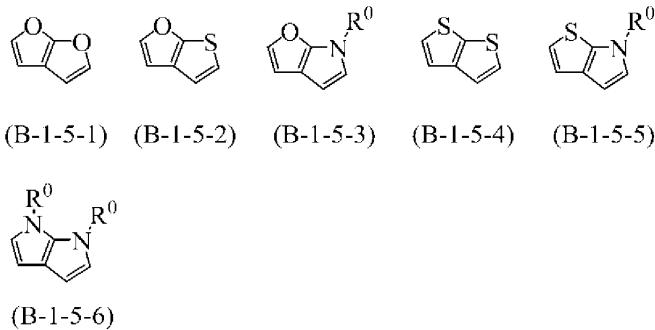
[0053]

[0054]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 된다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0055]

식(B-1-5)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-5-1) 내지 식(B-1-5-6)

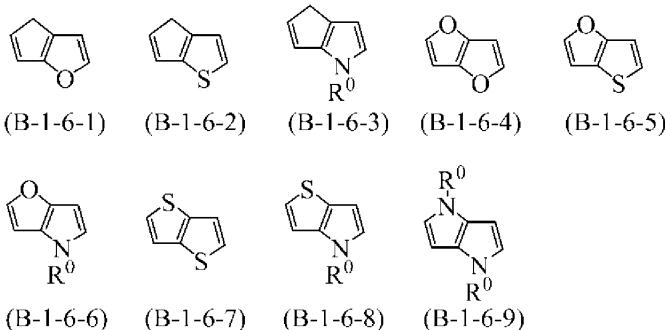


[0056]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0058]

식(B-1-6)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-6-1) 내지 식(B-1-6-9)



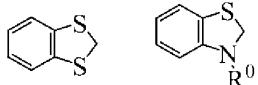
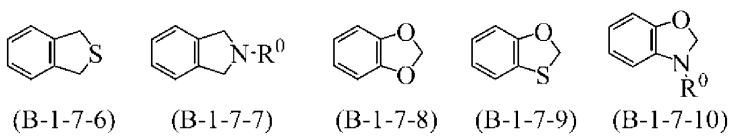
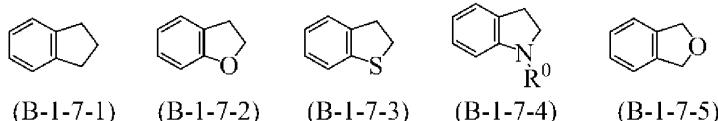
[0059]

[0060]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0061]

식(B-1-7)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-7-1) 내지 식(B-1-7-12)

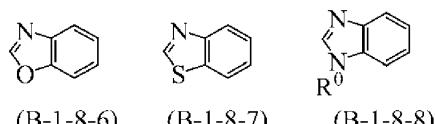
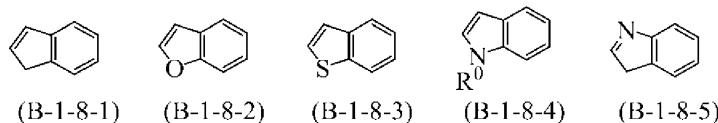


[0062]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R⁰은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0064]

식(B-1-8)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-8-1) 내지 식(B-1-8-8)

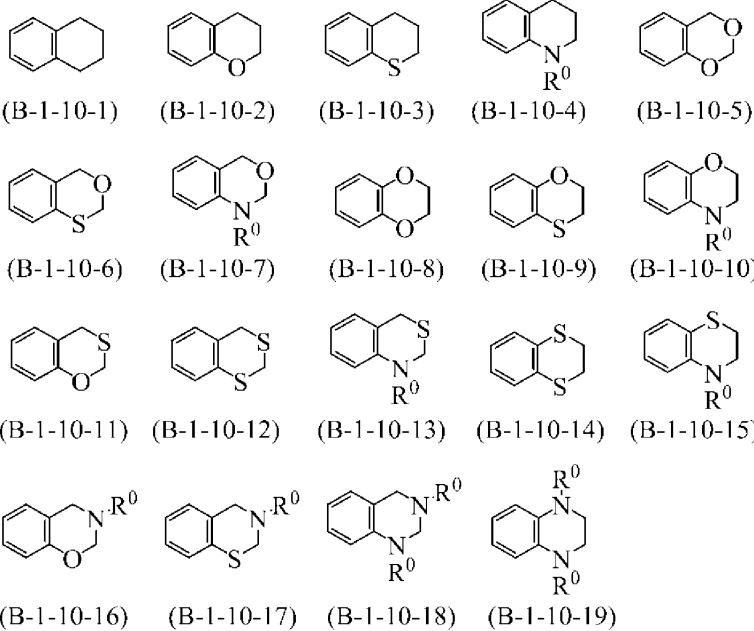


[0065]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R⁰은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 식(B-1-8-6), 식(B-1-8-7) 및 식(B-1-8-8)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하다.

[0067]

식(B-1-10)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-10-1) 내지 식(B-1-10-19)

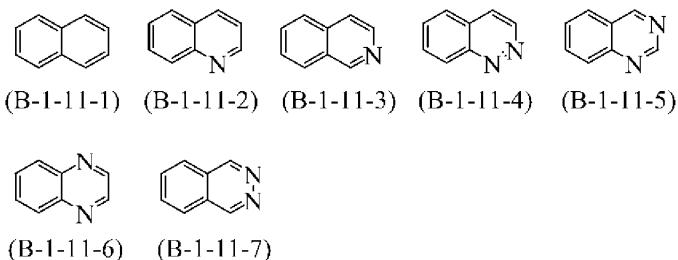


[0068]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 식(B-1-10-1), 식(B-1-10-2) 및 식(B-1-10-3)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하다.

[0070]

식(B-1-11)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-11-1) 내지 식(B-1-11-7)

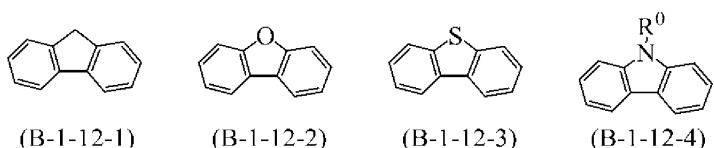


[0071]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0073]

식(B-1-12)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-12-1) 내지 식(B-1-12-4)

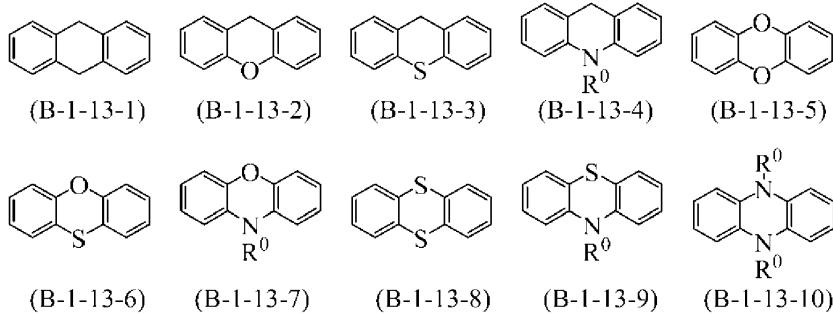


[0074]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0076]

식(B-1-13)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-13-1) 내지 식(B-1-13-10)

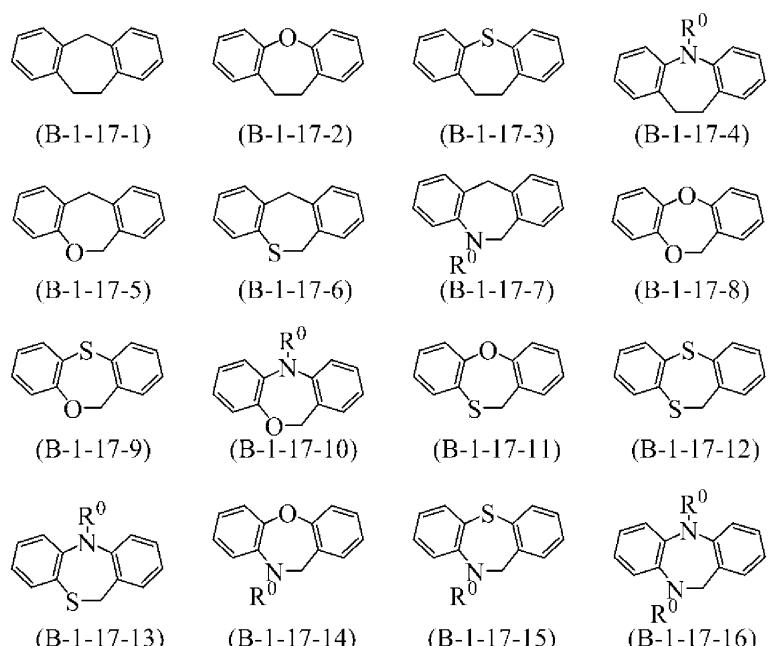


[0077]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0079]

식(B-1-17)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-17-1) 내지 식(B-1-17-16)

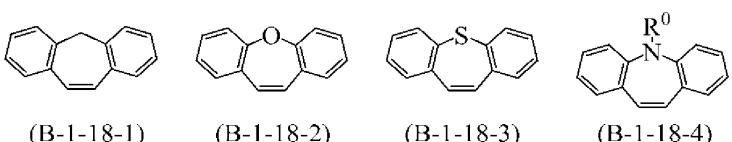


[0080]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0082]

식(B-1-18)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-18-1) 내지 식(B-1-18-4)

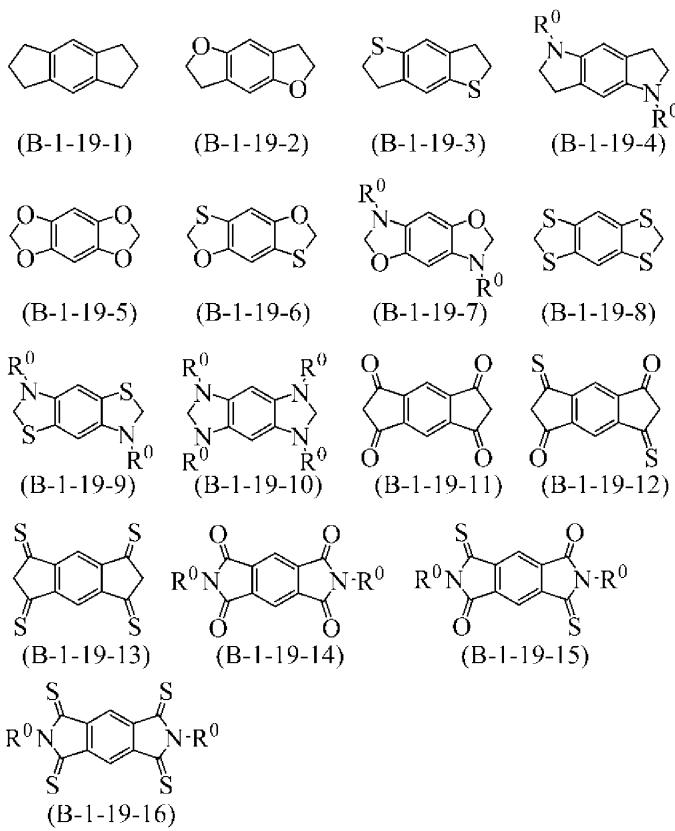


[0083]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0085]

식(B-1-19)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-19-1) 내지 식(B-1-19-16)

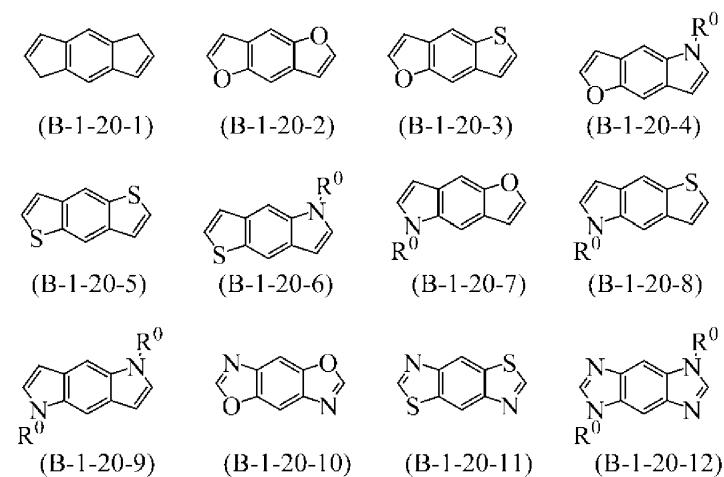


[0086]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0088]

식(B-1-20)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-20-1) 내지 식(B-1-20-12)

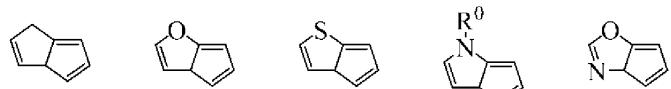


[0089]

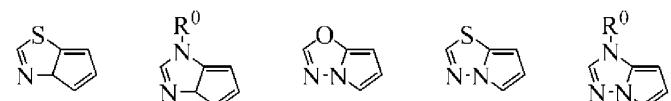
(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0091]

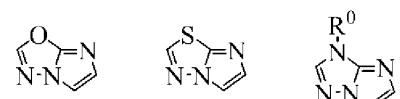
(식(B-1-21)으로 표시되는 기로서는 하기의 식(B-1-21-1) 내지 식(B-1-21-13)



(B-1-21-1) (B-1-21-2) (B-1-21-3) (B-1-21-4) (B-1-21-5)



(B-1-21-6) (B-1-21-7) (B-1-21-8) (B-1-21-9) (B-1-21-10)

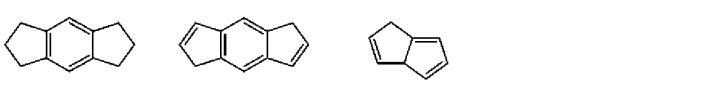
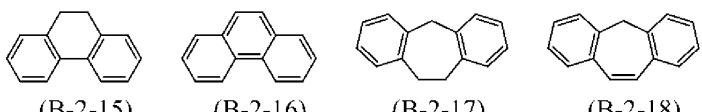
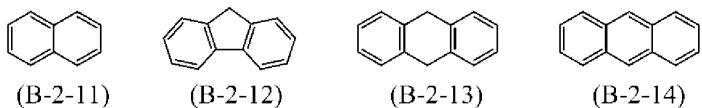
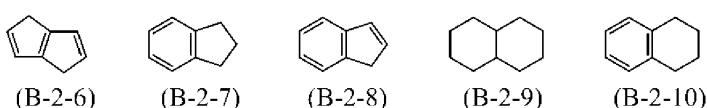
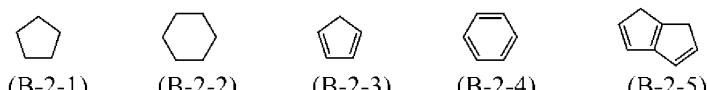


[0092] (B-1-21-11) (B-1-21-12) (B-1-21-13)

[0093]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0094]

 B^2 는 단결합, 이중 결합 또는 무치환이거나 또는 1개 이상의 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 2가의 환식 탄화수소 기를 나타내지만, 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 단결합, 이중 결합 또는 하기의 식(B-2-1) 내지 식(B-2-21)

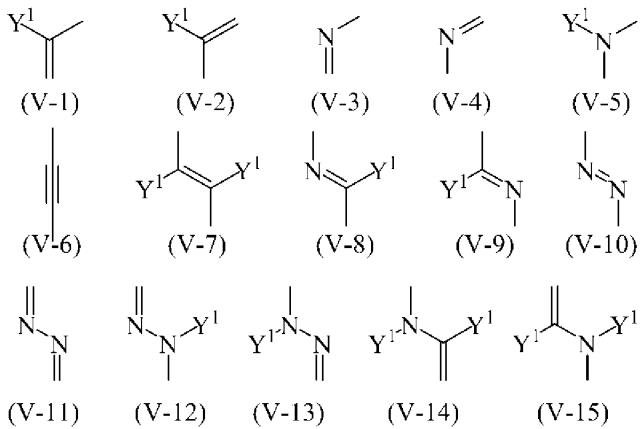
[0095]

(식 중, 환 구조에는, 임의의 위치에 결합수를 가져도 되고, 임의의 $-CH=$ 는 각각 독립해서 $-N=$ 으로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-NR^0-$ (식 중, R^0 은 수소 원자 또는 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기를 나타낸다), $-CS-$ 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 되지만, $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다. 또한, 이들 기는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 된다)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 바람직하고, B^2 는 단결합, 이중 결합 또는 무치환 또는 1개 이상의 치환기 L^B 에 의해서 치환되어도 되는 식(B-2-3), 식(B-2-4)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하다.

[0097]

 V^1 및 V^2 는 단결합, 이중 결합 또는 2가의 결합기를 나타내지만, 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함

의 관점에서 각각 독립해서 단결합, 이중 결합, 하기의 식(V-1) 내지 식(V-15)



[0098]

[0099] (식 중, Y^1 는 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 히드록시기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 혹은 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 가 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$ 또는 $-C\equiv C-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되지만, Y^1 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, 혹은 Y^1 는 $P^Y-(S^Y-X^Y)_{kY}$ -로 표시되는 기를 나타내도 되고, P^Y 는 중합성기를 나타내고, S^Y 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내지만, S^Y 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고, X^Y 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2OCO-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내지만, X 가 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 되고(단, $P^Y-(S^Y-X^Y)_{kY}$ -에는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않는다), kY 는 0 내지 10의 정수를 나타낸다), $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-CH_2-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CS-NH-$, $-NH-CS-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH_2CH_2-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2OCO-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$ 에서 선택되는 기인 것이 바람직하고, V^1 및 V^2 는 각각 독립해서 단결합, 이중 결합, 상기 식(V-2), 식(V-5) 내지 식(V-15), $-CS-NH-$, $-NH-CS-$ 에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 바람직하고, V^1 및 V^2 는 각각 독립해서 단결합, 식(V-2), 식(V-5), 식(V-6), 식(V-7), 식(V-8), 식(V-13)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 더 바람직하고, V^1 및 V^2 는 각각 독립해서 단결합, 식(V-5), 식(V-6), 식(V-7)에서 선택되는 기를 나타내는 것이 보다 더 바람직하다.

[0100]

n은 0 내지 10의 정수를 나타내지만, 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 0 내지 5의 정수를 나타내는 것이 바람직하고, 0, 1, 2 또는 3을 나타내는 것이 보다 바람직하다.

[0101]

L은 액정성, 원료의 입수 용이함, 합성의 용이함의 관점에서, L은 불소 원자, 염소 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 또는, 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 는 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$ 또는 $-C\equiv C-$ 에서 선택되는 기에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내는 것이 바람직하고, 불소 원자, 시아노기, 또는, 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이

상의 $-\text{CH}_2-$ 는 각각 독립해서 $-0-$, $-\text{COO}-$ 또는 $-\text{OCO}-$ 에서 선택되는 기에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 12의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내는 것이 보다 바람직하다.

[0102] L^B 은 합성의 용이함, 원료의 입수 용이함, 액정성의 관점에서, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내는 것이 바람직하고, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$, $-\text{S}-$ 또는 $-\text{CO}-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내는 것이 바람직하고, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 10의 직쇄상 알킬기를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 디메틸아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 또는 2의 직쇄상 알킬기를 나타내는 것이 보다 더 바람직하다.

[0103] L^T 은 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 히드록시기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{CO-S}-$, $-\text{S-CO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{CO-NH}-$, $-\text{NH}-\text{CO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{OCO}-$, $-\text{COO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내지만, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, L^T 이 복수 존재할 경우 그들은 동일해도 되며 달라도 된다.

L^T 은 합성의 용이함, 원료의 입수 용이함, 액정성의 관점에서, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내는 것이 바람직하고, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내는 것이 바람직하고, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 디메틸아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 10의 직쇄상 알킬기를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 디메틸아미노기, 또는, 기 중의 임의의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-0-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 또는 2의 직쇄상 알킬기를 나타내는 것이 보다 더 바람직하다.

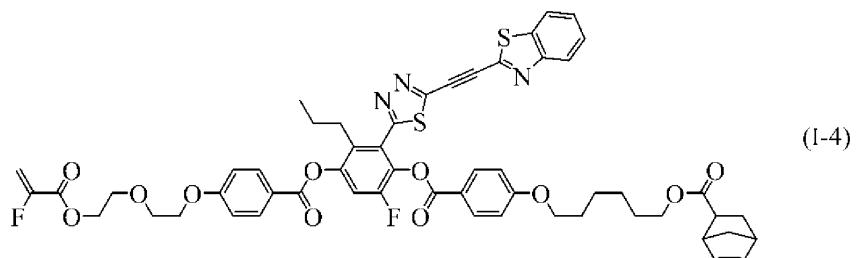
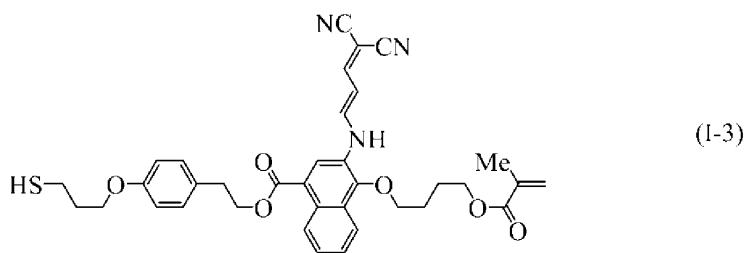
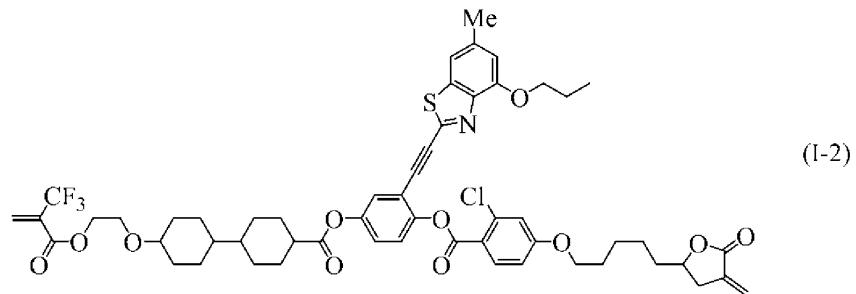
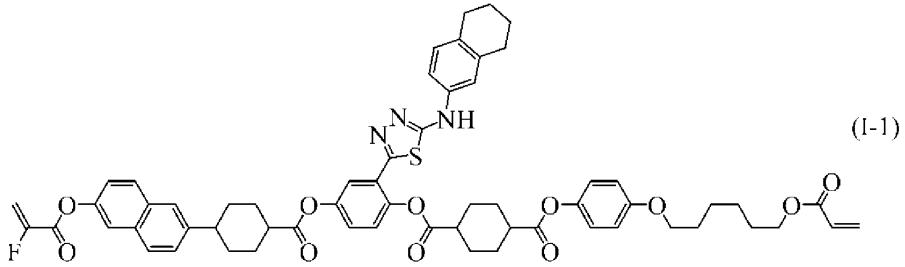
[0104] k 는 0 내지 8의 정수를 나타내지만, 액정성, 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서 0 내지 4의 정수를 나타내는 것이 바람직하고, 0 내지 2의 정수를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 0 또는 1을 나타내는 것이 더 바람직하고, 1을 나타내는 것이 특히 바람직하다.

[0105] m_1 및 m_2 는 각각 독립해서 0 내지 5의 정수를 나타내지만, m_1+m_2 는 1 내지 5의 정수를 나타낸다. 액정성, 합성의 용이함 및 용매에의 용해성의 관점에서, m_1 및 m_2 는 각각 독립해서 1 내지 4의 정수를 나타내는 것이 바람직하고, 1 내지 3의 정수를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 1 또는 2를 나타내는 것이 특히 바람직하다. m_1+m_2 는 1 내지 4의 정수를 나타내는 것이 바람직하고, 2, 3 또는 4를 나타내는 것이 보다 바람직하고, 2 또는 4를

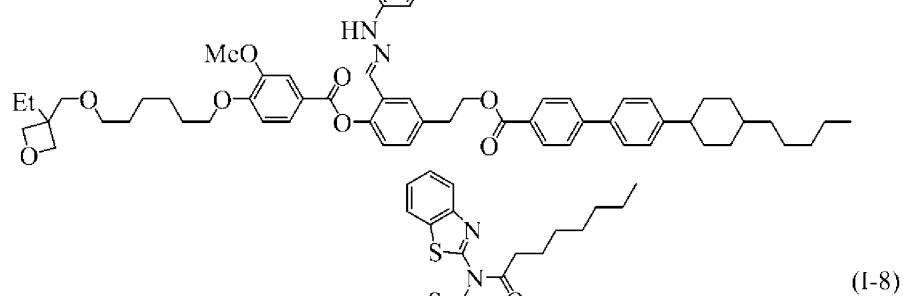
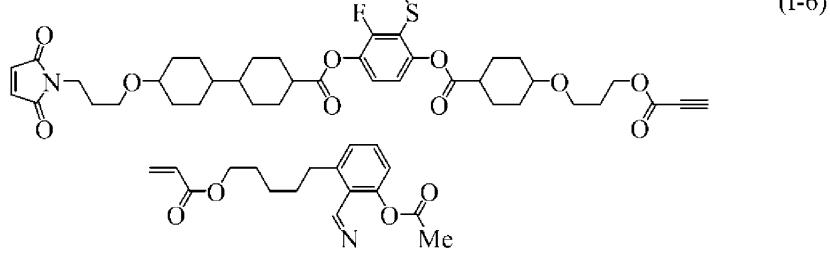
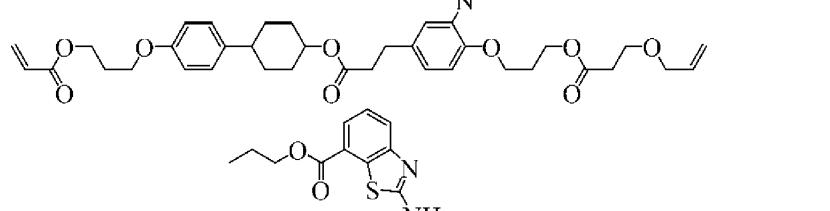
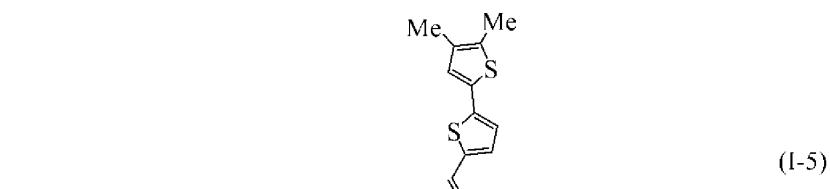
나타내는 것이 특히 바람직하다.

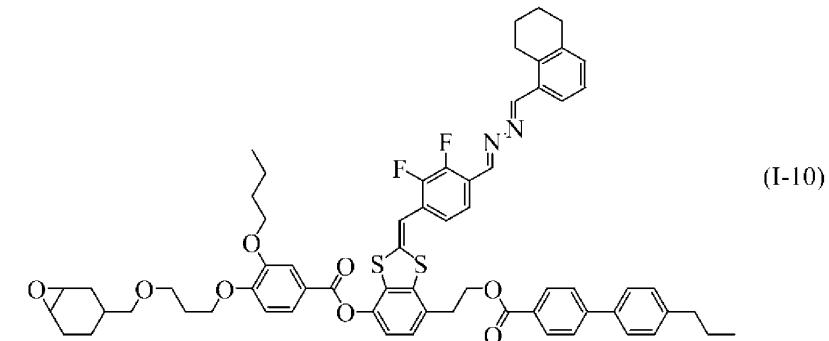
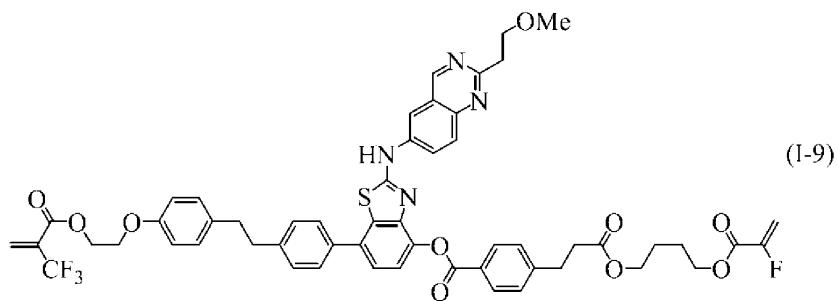
[0106]

일반식(I)으로 표시되는 화합물로서 구체적으로는, 하기의 식(I-1) 내지 식(I-10)으로 표시되는 화합물이 바람직하다.



[0107]





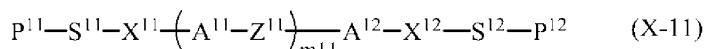
[0109]

[0110]

본원 발명의 화합물은, 네마틱 액정 조성물, 스메틱 액정 조성물, 키랄스메틱 액정 조성물 및 콜레스테릭 액정 조성물에 사용하는 것이 바람직하다. 본원 발명의 반응성 화합물을 사용하는 액정 조성물에 있어서 본원 발명 이외의 화합물을 첨가해도 상관없다.

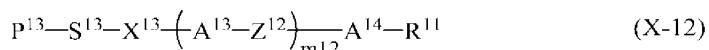
[0111]

본원 발명의 중합성 화합물과 혼합해서 사용되는 다른 중합성 화합물로서는, 구체적으로는 일반식(X-11)



[0112]

및/또는 일반식(X-12)

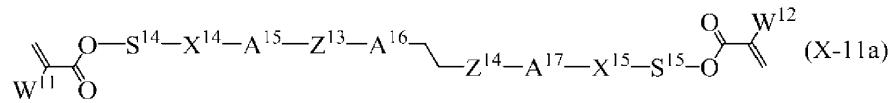


[0113]

[0114]

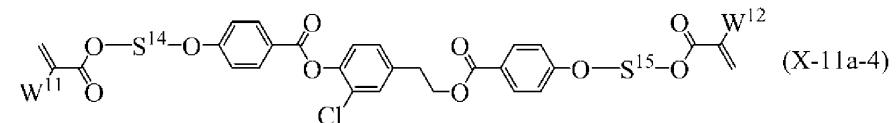
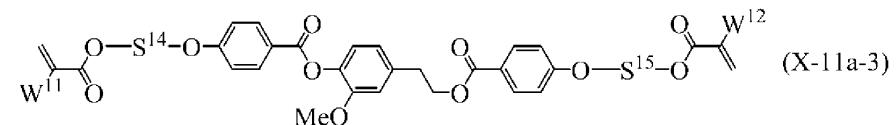
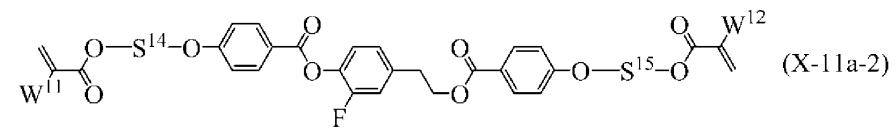
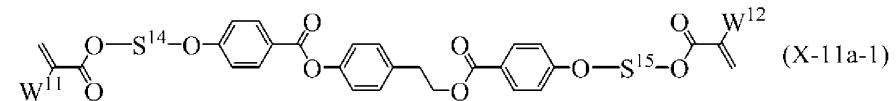
(식 중, P^{11} , P^{12} 및 P^{13} 는 각각 독립해서 중합성기를 나타내고, S^{11} , S^{12} 및 S^{13} 는 각각 독립해서 단결합 또는 탄소 원자수 1~20개의 알킬렌기를 나타내지만, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 는 $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-OCOO-$ 로 치환되어도 되고, X^1 , X^2 및 X^3 는 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내고, Z^{11} 및 Z^{12} 는 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH_2CF_2-$, $-CF_2CH_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$ 또는 단결합을 나타내고, A^{11} , A^{12} , A^{13} 및 A^{14} 는 각각 독립해서, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 피리딘-2,5-디일기, 피리미딘-2,5-디일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라하이드로나프탈렌-2,6-디일기 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기를 나타내지만, A^{11} , A^{12} , A^{13} 및 A^{14} 는 각각 독립해서 무치환이거나 또는 알킬기, 할로겐화알킬기, 알콕시기, 할로겐화알콕시기, 할로겐원자, 시아노기 또는 니트로기로 치환되어 있어도 되고, R^{11} 은 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 시아노기, 니트로기, 이소시아노기, 티오이소시아노기,

혹은, 1개의 $-CH_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-CH_2-$ 가 각각 독립해서 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$ 또는 $-C\equiv C-$ 에 의해서 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄 또는 분기 알킬기를 나타내고, m_{11} 및 m_{12} 는 0, 1, 2 또는 3을 나타내지만, m_{11} 및/또는 m_{12} 가 2 또는 3을 나타낼 경우, 2개 혹은 3개 존재하는 A^{11} , A^{13} , Z^{11} 및/또는 Z^{12} 는 동일해도 되며 달라도 된다)으로 표시되는 화합물이 바람직하고, P^{11} , P^{12} 및 P^{13} 가 아크릴기 또는 메타크릴기인 경우가 특히 바람직하다. 일반식(X-11)으로 표시되는 화합물로서 구체적으로는, 일반식(X-11a)



[0116]

(식 중, W^{11} 및 W^{12} 는 각각 독립해서 수소 원자 또는 메틸기를 나타내고, S^{14} 및 S^{15} 는 각각 독립해서 탄소 원자수 2 내지 18의 알킬렌기, X^{14} 및 X^{15} 는 각각 독립해서 $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$ 또는 단결합을 나타내고, Z^{13} 및 Z^{14} 는 각각 독립해서 $-COO-$ 또는 $-OCO-$ 를 나타내고, A^{15} , A^{16} 및 A^{17} 는 각각 독립해서 무치환 혹은 불소 원자, 염소 원자, 탄소 원자수 1 내지 4의 직쇄상 또는 분기상 알킬기, 탄소 원자수 1 내지 4의 직쇄상 또는 분기상 알콕시기에 의해서 치환되어 있어도 되는 1,4-페닐렌기를 나타낸다)으로 표시되는 화합물이 바람직하고, 하기 식(X-11a-1) 내지 식(X-11a-4)

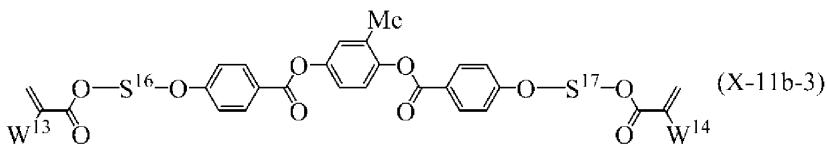
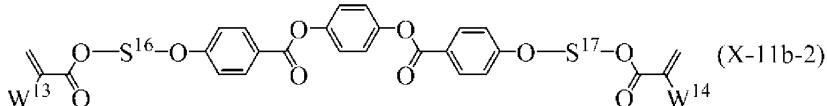
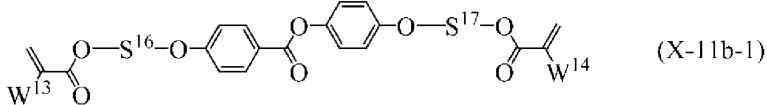


[0118]

(식 중, W^{11} , W^{12} , S^{14} 및 S^{15} 는 일반식(X-11a)과 마찬가지의 의미를 나타낸다)으로 표시되는 화합물이 특히 바람직하다. 상기 식(X-11a-1) 내지 식(X-11a-4)에 있어서, S^{14} 및 S^{15} 가 각각 독립해서 탄소 원자수 2 내지 8의 알킬렌기인 화합물이 특히 바람직하다.

[0120]

이) 외에, 바람직한 2관능 중합성 화합물로서는 하기 일반식(X-11b-1) 내지 식(X-11b-3)

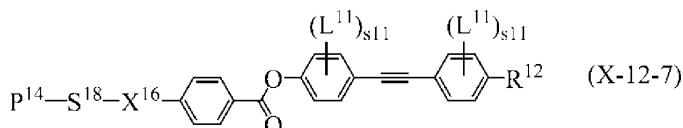
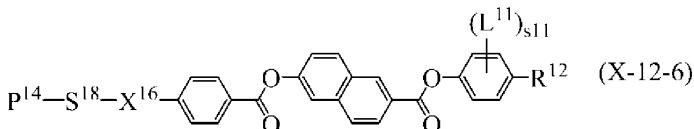
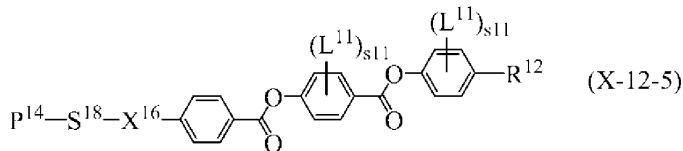
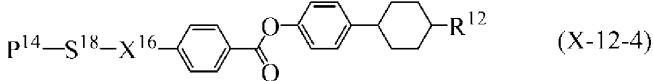
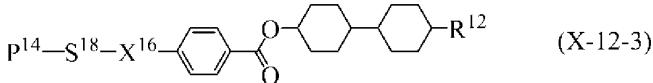
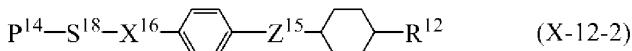
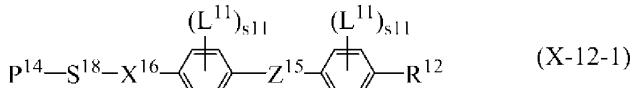


[0121]

[0122] (식 중, W^{13} 및 W^{14} 는 각각 독립해서 수소 원자 또는 메틸기를 나타내고, S^{16} 및 S^{17} 는 각각 독립해서 탄소 원자수 2 내지 18의 알킬렌기를 나타낸다)으로 표시되는 화합물을 들 수 있다. 상기 식(X-11b-1) 내지 식(X-11b-3)에 있어서, S^{16} 및 S^{17} 가 각각 독립해서 탄소 원자수 2 내지 8의 알킬렌기인 화합물이 특히 바람직하다.

[0123]

또한, 일반식(X-12)으로 표시되는 화합물로서 구체적으로는, 하기 일반식(X-12-1) 내지 식(X-12-7)



[0124]

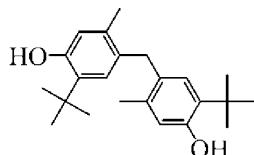
[0125] (식 중, P^{14} 는 중합성기를 나타내고, S^{18} 는 단결합 또는 탄소 원자수 1 내지 20개의 알킬렌기를 나타내지만, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 는 $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$ 로 치환되어도 되고, X^{16} 는 단결합, $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, 또는 $-\text{OCO}-$ 를 나타내고, Z^{15} 는 단결합, $-\text{COO}-$ 또는 $-\text{OCO}-$ 를 나타내고, L^{11} 은 불소 원자, 염소 원자, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$ 로 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 10의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고, $s11$ 은 0 내지 4의 정수를 나타내고, R^{12} 은 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 시아노기, 니트로기, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 인접하고 있지 않은 2개 이상의 $-\text{CH}_2-$ 가 각각 독립해서 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{CO-S}-$, $-\text{S-CO}-$, $-\text{O-CO-O}-$, $-\text{CO-NH}-$, $-\text{NH}-$

CO^- , $-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}^-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{OCO}^-$, $-\text{COO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 치환되어도 되는 탄소 원자수 1 내지 20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타낸다)으로 표시되는 화합물을 들 수 있다.

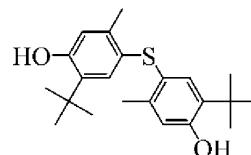
[0126] 본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물에는, 당해 조성물의 액정성을 크게 손상시키지 않을 정도로, 액정성을 나타내지 않는 중합성 화합물을 첨가하는 것도 가능하다. 구체적으로는, 이 기술분야에서 고분자 형성성 모노머 혹은 고분자 형성성 올리고머로서 인식되는 화합물이면 특히 제한 없이 사용 가능하다. 구체예로서 예를 들면 「광경화 기술 데이터북, 재료편(모노머, 올리고머, 광중합개시제)」(이치무라 구니히로, 가토 키요미 감수, 테크노넷사) 기재의 것을 들 수 있다.

[0127] 또한, 본원 발명의 화합물은 광중합개시제를 사용하지 않아도 중합시키는 것이 가능하지만, 목적에 따라 광중합개시제를 첨가해도 상관없다. 그 경우는 광중합개시제의 농도는, 본원 발명의 화합물에 대하여 0.1질량% 내지 15질량%가 바람직하고, 0.2질량% 내지 10질량%가 보다 바람직하고, 0.4질량% 내지 8질량%가 더 바람직하다. 광중합개시제로서는, 벤조인에테르류, 벤조페논류, 아세토페논류, 벤질케탈류, 아실포스핀옥사이드류 등을 들 수 있다. 광중합개시제의 구체예로서는 2-메틸-1-(4-메틸티오페닐)-2-모르폴리노프로판-1-온(IRGACURE 907), 벤조산[1-[4-(페닐티오)벤조일]헵틸리덴]아미노(IRGACURE OXE 01) 등을 들 수 있다. 열중합개시제로서는, 아조화합물, 과산화물 등을 들 수 있다. 열중합개시제의 구체예로서는 2,2'-아조비스(4-메톡시)-2,4-디메틸발레로니트릴, 2,2'-아조비스(이소부티로니트릴) 등을 들 수 있다. 또한, 1종류의 중합개시제를 사용해도 되며, 2종류 이상의 중합개시제를 병용해서 사용해도 된다.

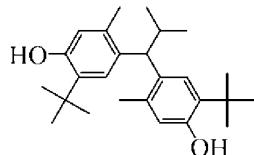
[0128] 또한, 본 발명의 액정 조성물에는, 그 보존안정성을 향상시키기 위해서, 안정제를 첨가할 수도 있다. 사용할 수 있는 안정제로서는, 예를 들면, 히드로퀴논류, 히드로퀴논모노알킬에테르류, 제삼부틸카테콜류, 피로갈룰류, 티오페놀류, 니트로화합물류, β -나프틸아민류, β -나프톨류, 니트로소화합물 등을 들 수 있다. 안정제를 사용하는 경우의 첨가량은, 조성물에 대해서 0.005질량% 내지 1질량%의 범위가 바람직하고, 0.02질량% 내지 0.8질량%가 보다 바람직하고, 0.03질량% 내지 0.5질량%가 더 바람직하다. 또한, 1종류의 안정제를 사용해도 되며, 2종류 이상의 안정제를 병용해서 사용해도 된다. 안정제로서는, 구체적으로는 식(X-13-1) 내지 식(X-13-5)



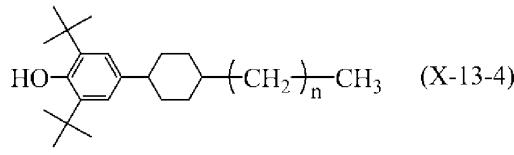
(X-13-1)



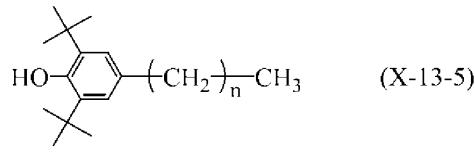
(X-13-2)



(X-13-3)

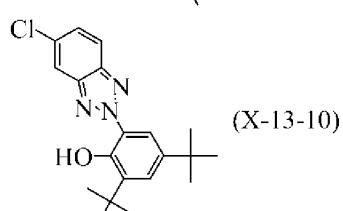
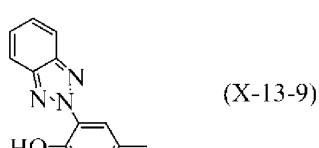
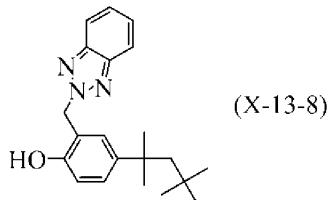
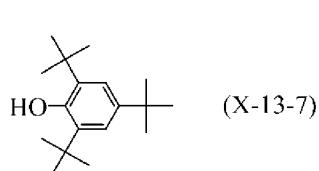
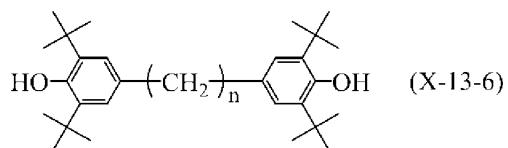


(X-13-4)

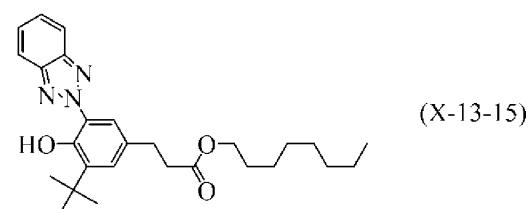
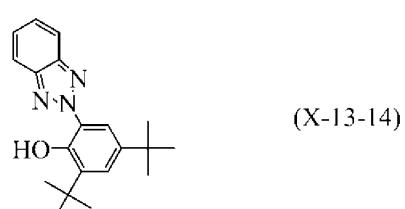
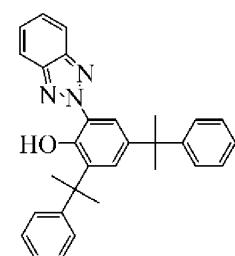
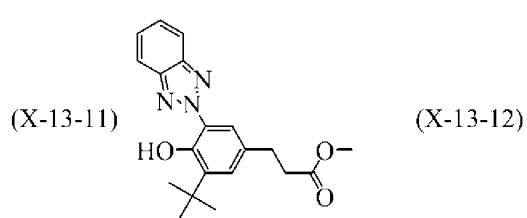
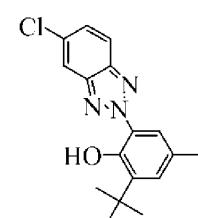


(X-13-5)

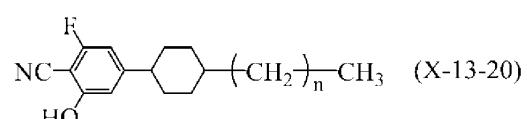
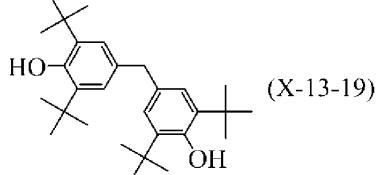
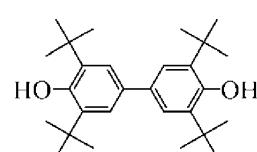
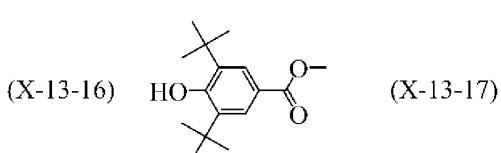
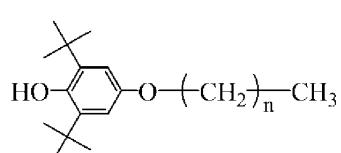
[0129]



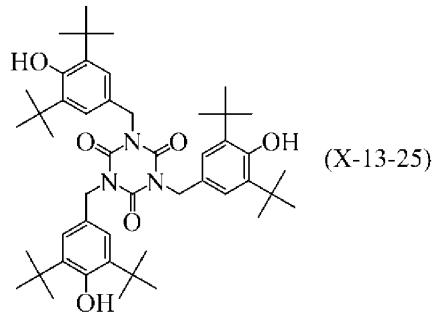
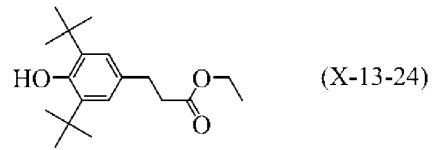
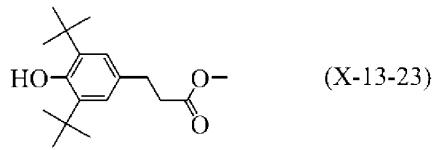
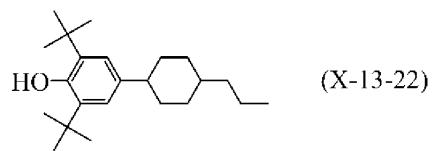
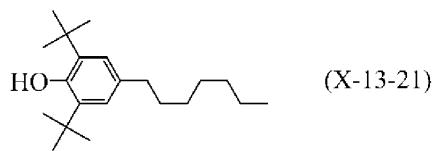
[0130]



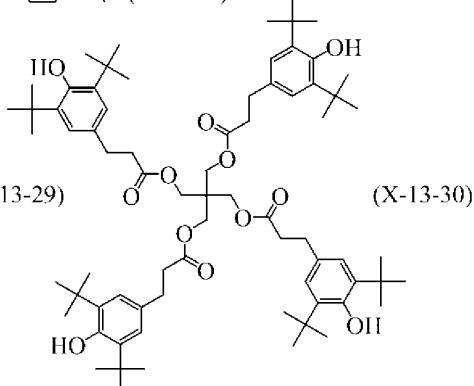
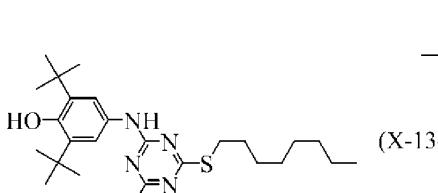
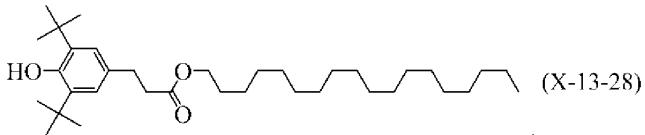
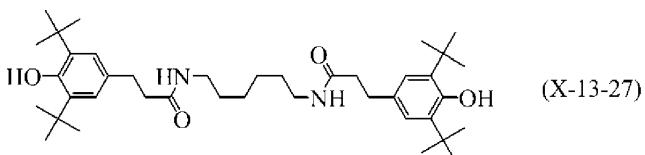
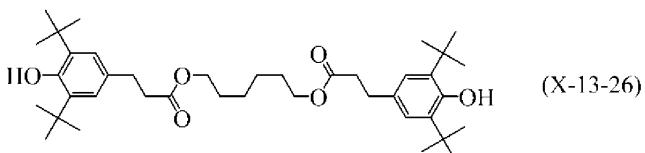
[0131]



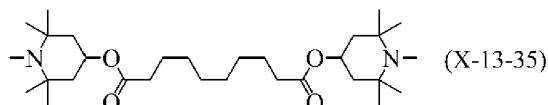
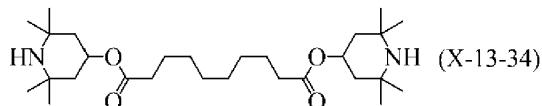
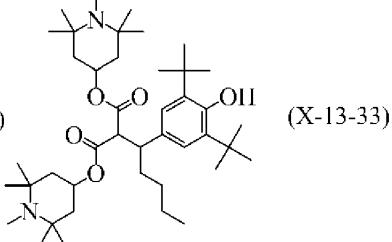
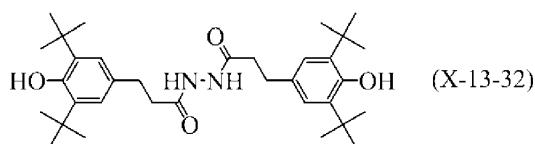
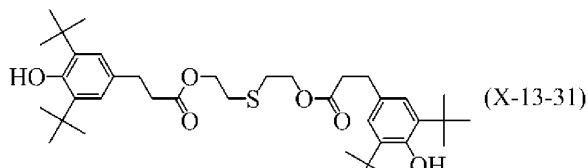
[0132]



[0133]



[0134]



[0135]

[0136] (식 중, n은 0 내지 20의 정수를 나타낸다)으로 표시되는 화합물이 바람직하다.

[0137]

또한, 본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을 필름류, 광학 소자류, 기능성 안료류, 의약품류, 화장품류, 코팅제류, 합성 수지류 등의 용도에 이용하는 경우에는, 그 목적에 따라서 금속, 금속 치체, 염료, 안료, 색소, 형광 재료, 인광 재료, 계면활성제, 레벨링제, 틱소제, 겔화제, 다당류, 자외선 흡수제, 적외선 흡수제, 항산화제, 이온 교환 수지, 산화티타늄 등의 금속 산화물 등을 첨가할 수도 있다.

[0138]

본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을 중합함에 의해 얻어지는 폴리머는 각종 용도에 이용할 수 있다. 예를 들면, 본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을, 배향시키지 않고 중합함에 의해 얻어지는 폴리머는, 광산란판, 편광 해소판, 무아레호 방지판으로서 이용 가능하다. 또한, 배향시킨 후에 중합함에 의해 얻어지는 폴리머는, 광학이방성을 갖고 있어 유용하다. 이와 같은 광학 이방체는, 예를 들면, 본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을, 포(布) 등으로 러빙 처리한 기판, 유기 박막을 형성한 기판 또는 SiO_2 를 사방(斜方) 증착한 배향막을 갖는 기판에 담지(擔持)시키거나, 기판 간에 협지(挾持)시킨 후, 당해 중합성 액정 조성물을 중합함에 의해서 제조할 수 있다.

[0139]

중합성 액정 조성물을 기판 상에 담지시킬 때의 방법으로서는, 스판 코팅, 다이 코팅, 익스트루전 코팅, 롤 코팅, 와이어바 코팅, 그라비어 코팅, 스프레이 코팅, 딥핑, 프린트법 등을 들 수 있다. 또한 코팅 시에, 중합성 액정 조성물에 유기 용매를 첨가해도 된다. 유기 용매로서는, 탄화수소계 용매, 할로겐화탄화수소계 용매, 에테르계 용매, 알코올계 용매, 케톤계 용매, 에스테르계 용매, 비프로토ن성 용매 등을 사용할 수 있지만, 예를 들면 탄화수소계 용매로서는 톨루엔 또는 헥산을, 할로겐화탄화수소계 용매로서는 염화메틸렌을, 에테르계 용매로서는 테트라히드로퓨란, 아세톡시-2-에톡시에탄 또는 프로필렌글리콜모노메틸에테르아세테이트를, 알코올계 용매로서는 메탄올, 에탄올 또는 이소프로필알코올을, 케톤계 용매로서는 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥산온, γ -부틸락톤 또는 N-메틸피롤리디논류를, 에스테르계 용매로서는 아세트산에틸 또는 셀로솔브를, 비프로토ن성 용매로서는 디메틸포름아미드 또는 아세토니트릴을 들 수 있다. 이들은 단독으로 사용해도 되며, 조합해서 사용해도 되고, 그 중기압과 중합성 액정 조성물의 용해성을 고려하여, 적의(適宜) 선택하면 된다. 첨가한 유기 용매를 휘발시키는 방법으로서는, 자연 건조, 가열 건조, 감압 건조, 감압 가열 건조를 사용할 수 있다. 중합성 액정 재료의 도포성을 더 향상시키기 위해서는, 기판 상에 폴리이미드 박막 등의 중간층을 마련하는 것이나, 중합성 액정 재료에 레벨링제를 첨가하는 것도 유효하다. 기판 상에 폴리이미드 박막 등의 중간층을 마련하는 방법은, 중합성 액정 재료를 중합함에 의해 얻어지는 폴리머와 기판과의 밀착성을 향상시키기 위해서 유효하다.

[0140]

상기 이외의 배향 처리로서는, 액정 재료의 유동 배향의 이용, 전장 또는 자장의 이용을 들 수 있다. 이들 배향 수단은 단독으로 사용해도 되며, 또한 조합해서 사용해도 된다. 또한, 러빙을 대신하는 배향 처리 방법으로서, 광배향법을 사용할 수도 있다. 기판의 형상으로서는, 평판 외에, 곡면을 구성 부분으로서 갖고 있어도 된다. 기판을 구성하는 재료는, 유기 재료, 무기 재료를 불문하고 사용할 수 있다. 기판의 재료로 되는 유기 재료로서는, 예를 들면, 폴리에틸렌테레프탈레이트, 폴리카보네이트, 폴리이미드, 폴리아미드, 폴리메타크릴산메

틸, 폴리스티렌, 폴리염화비닐, 폴리테트라플루오로에틸렌, 폴리클로로트리플루오로에틸렌, 폴리아릴레이트, 폴리설론, 트리아세틸셀룰로오스, 셀룰로오스, 폴리에테르에테르케톤 등을 들 수 있고, 또한, 무기 재료로서는, 예를 들면, 실리콘, 유리, 방해석 등을 들 수 있다.

[0141] 본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을 중합시킬 때, 신속하게 중합이 진행하는 것이 바람직하기 때문에, 자외선 또는 전자선 등의 활성 에너지선을 조사함에 의해 중합시키는 방법이 바람직하다. 자외선을 사용할 경우, 편광 광원을 사용해도 되며, 비편광 광원을 사용해도 된다. 또한, 액정 조성물을 2매의 기판 간에 협지시킨 상태에서 중합을 행할 경우, 적어도 조사면측의 기판은 활성 에너지선에 대해서 적당한 투명성을 갖고 있어야 한다. 또한, 광조사 시에 마스크를 사용해서 특정의 부분만을 중합시킨 후, 전장이나 차장 또는 온도 등의 조건을 변화시킴에 의해, 미중합 부분의 배향 상태를 변화시키고, 추가로 활성 에너지선을 조사해서 중합시킨다는 수단을 사용해도 된다. 또한, 조사 시의 온도는, 본 발명의 중합성 액정 조성물의 액정 상태가 유지되는 온도 범위 내인 것이 바람직하다. 특히, 광중합에 의해서 광학 이방체를 제조하려고 하는 경우에는, 의도하지 않은 열중합의 유기(誘起)를 피하는 의미에서도 가능한 한 실온에 가까운 온도, 즉, 전형적으로는 25°C에서의 온도에서 중합시키는 것이 바람직하다. 활성 에너지선의 강도는, 0.1mW/cm²~2W/cm²가 바람직하다. 강도가 0.1mW/cm² 이하일 경우, 광중합을 완료시키는데 다대한 시간이 필요하게 되어 생산성이 악화해 버리고, 2W/cm² 이상일 경우, 중합성 액정 화합물 또는 중합성 액정 조성물이 열화(劣化)해 버릴 위험이 있었다.

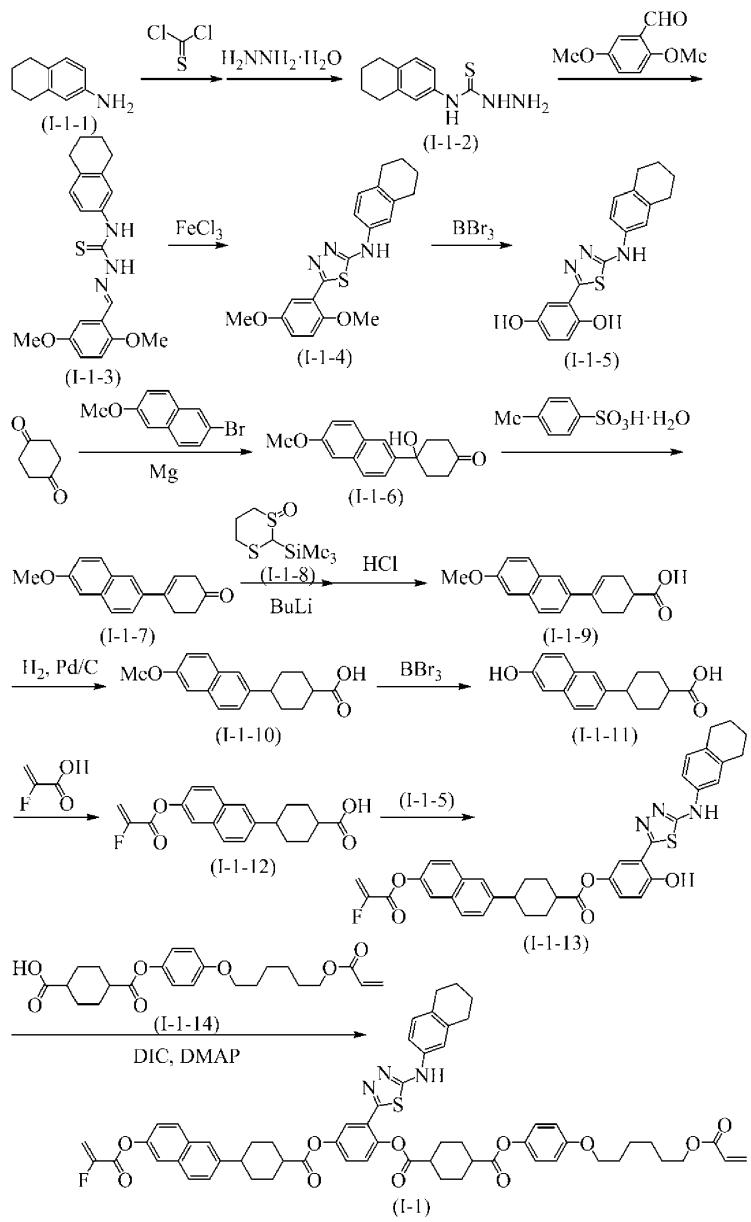
[0142] 중합에 의해서 얻어진 당해 광학 이방체는, 초기의 특성 변화를 경감하여, 안정적인 특성 발현을 도모하는 것을 목적으로 해서 열처리를 실시할 수도 있다. 열처리의 온도는 50~250°C의 범위인 것이 바람직하고, 열처리 시간은 30초~12시간의 범위인 것이 바람직하다.

[0143] 이와 같은 방법에 의해서 제조되는 당해 광학 이방체는, 기판으로부터 박리해서 단체(單體)로 사용해도 되며, 박리하지 않고 사용해도 된다. 또한, 얻어진 광학 이방체를 적층해도 되며, 다른 기판에 첨합해서 사용해도 된다.

[0144] (실시예)

[0145] 이하, 실시예를 들어서 본 발명을 더 기술하지만, 본 발명은 이들 실시예로 한정되는 것은 아니다. 또한, 이하의 실시예 및 비교예의 조성물에 있어서의 「%」는 『질량%』를 의미한다. 각 공정에 있어서 산소 및/또는 수분에 불안정한 물질을 취급할 때는, 질소 가스, 아르곤 가스 등의 불활성 가스 중에서 작업을 행하는 것이 바람직하다. 통상의 후처리란, 반응액으로부터 목적의 화합물을 얻기 위해서 행하는 작업이며, 분액·추출, 중화, 세정, 건조, 농축 등의 당업자 간에 있어서 통상 행해지고 있는 작업을 의미한다.

[0146] (실시예 1) 식(I-1)으로 표시되는 화합물의 제조



[0147]

[0148] Journal of Medicinal Chemistry지, 2009년, 52권, 9호, 2989-3000페이지에 기재된 방법에 의해서 식(I-1-1)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-1-1)으로 표시되는 화합물, 트리에틸아민, 아세트산에틸을 더 했다. 빙냉(氷冷)하면서 티오포스겐의 아세트산에틸 용액을 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 봇고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행했다. 얻어진 화합물을 2-프로판올에 용해시키고, 히드라진일수화물, 2-프로판올을 더한 반응 용기에 적하하고 교반했다. 석출물을 여과하고 건조시킴에 의해 식(I-1-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0149]

반응 용기에 식(I-1-2)으로 표시되는 화합물, 2,5-디메톡시벤즈알데히드, 에탄올을 더하고 교반했다. 석출물을 여과하고 건조시킴에 의해 식(I-1-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0150]

반응 용기에 식(I-1-3)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 에탄올, 물을 더했다. 염화철(III)을 더하고 교반했다. 석출물을 여과하고 건조시킴에 의해 식(I-1-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0151]

반응 용기에 식(I-1-4)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. -78°C로 냉각하고 삼브롬화붕소를 더하고 교반했다. 반응액을 물에 봇고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-1-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0152]

반응 용기에 마그네슘 및 테트라히드로퓨란을 더했다. 6-브로모-2-메톡시나프탈렌의 테트라히드로퓨란 용액을

더하여 그리냐르 시약을 조제했다. 1,4-시클로헥산디온의 테트라히드로퓨란 용액을 적하하고 교반했다. 염산을 적하하고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-1-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0153] 반응 용기에 식(I-1-6)으로 표시되는 화합물, p-톨루엔설폰산일수화물, 톨루엔을 더하고, 물을 제거하면서 가열 환류시켰다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-1-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0154] Synthesis지, 2010년, 15호, 2616-2620페이지에 기재된 방법에 의해서 식(I-1-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-1-8)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란을 더했다. -78°C로 냉각하면서 부틸리튬의 헥산 용액을 적하하고 교반했다. 식(I-1-7)으로 표시되는 화합물의 테트라히드로퓨란 용액을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 반응액을 염화암모늄 수용액에 붓고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행했다. 반응 용기에 얻어진 화합물, 아세토니트릴, 6M 염산을 더하고 가열 교반했다. 반응액을 물에 붓고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-1-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0155] 반응 용기에 식(I-1-9)으로 표시되는 화합물, 5% 팔라듐탄소, 에탄올을 더하고, 수소압 0.5MPa 하, 교반했다. 팔라듐탄소를 여과하고 용매를 중류 제거함에 의해 식(I-1-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0156] 반응 용기에 식(I-1-10)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. -78°C로 냉각하고 삼브롬화붕소를 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 붓고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-1-11)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0157] 반응 용기에 식(I-1-11)으로 표시되는 화합물, 2-플루오로아크릴산, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-1-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

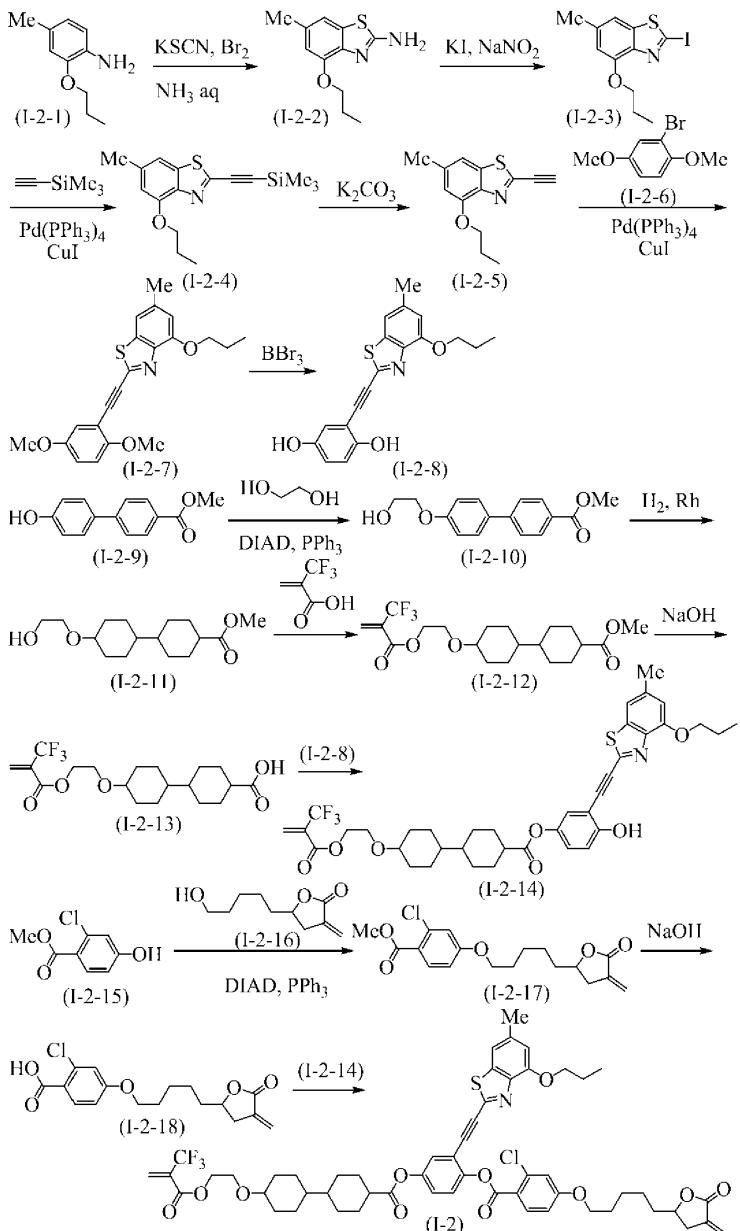
[0158] 반응 용기에 식(I-1-12)으로 표시되는 화합물, 식(I-1-5)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-1-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0159] WO2009-116657A1호 공보에 기재된 방법에 의해서 식(I-1-14)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-1-13)으로 표시되는 화합물, 식(I-1-14)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-1)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0160] MS(m/z): 1064[M⁺1]

[0161]

(실시예 2) 식(I-2)으로 표시되는 화합물의 제조



[0162]

[0163]

반응 용기에 식(I-2-1)으로 표시되는 화합물, 티오시안칼륨, 아세트산을 더했다. 빙냉하면서 브롬을 적하하고 교반했다. 석출물을 여과하고 전조시켰다. 얻어진 고체를 온수에 용해시키고 암모니아 수용액을 더하고 교반했다. 고체를 여과하고, 칼럼 크로마토그래피 및 채결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0164]

반응 용기에 식(I-2-2)으로 표시되는 화합물, p-톨루엔설폰산일수화물, 아세토니트릴을 더했다. 빙냉하면서 아질산나트륨 수용액, 요오드화칼륨 수용액을 적하하고, 실온에서 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0165]

반응 용기에 식(I-2-3)으로 표시되는 화합물, 트리메틸실릴아세틸렌, 요오드화구리(I), 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐(0), 트리에틸아민, N,N-디메틸포름아미드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0166]

반응 용기에 식(I-2-4)으로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 메탄올을 더하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0167]

반응 용기에 식(I-2-5)으로 표시되는 화합물, 식(I-2-6)으로 표시되는 화합물, 요오드화구리(I), 테트라카이스(트

리페닐포스핀)팔라듐(0), 트리에틸아민, N,N-디메틸포름아미드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0168] 반응 용기에 식(I-2-7)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. -78°C에서 삼브롬화붕소를 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 끓고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0169] 반응 용기에 식(I-2-9)으로 표시되는 화합물, 에틸렌글리콜, 트리페닐포스핀, 테트라히드로퓨란을 더했다. 아조디카르복시산디이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0170] 반응 용기에 식(I-2-10)으로 표시되는 화합물, 로듐, 디이소프로필알코올을 더하고, 수소압 5atm 하 가열 교반했다. 촉매를 제거한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-11)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0171] 반응 용기에 식(I-2-11)으로 표시되는 화합물, 2-(트리플루오로메틸)아크릴산, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0172] 반응 용기에 식(I-2-12)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 수산화나트륨 수용액을 더하고 가열 교반했다. 염산으로 중화하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0173] 반응 용기에 식(I-2-13)으로 표시되는 화합물, 식(I-2-8)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-14)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0174] Synthesis지, 2001년, 10호, 1519-1522페이지에 기재된 방법에 의해서 식(I-2-16)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-2-15)으로 표시되는 화합물, 식(I-2-16)으로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 테트라히드로퓨란을 더했다. 아조디카르복시산디이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-17)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

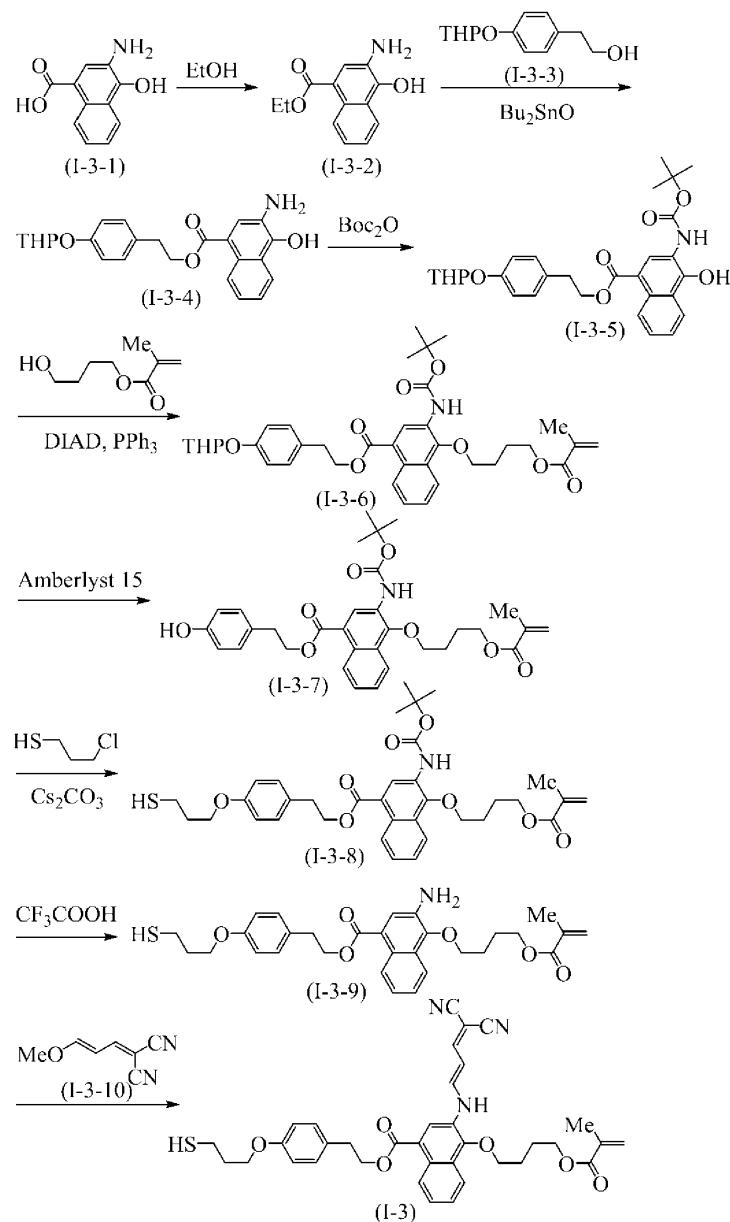
[0175] 반응 용기에 식(I-2-17)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 수산화나트륨 수용액을 더하고 가열 교반했다. 염산으로 중화하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-2-18)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0176] 반응 용기에 식(I-2-18)으로 표시되는 화합물, 식(I-2-14)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0177] MS(m/z): 1034[M⁺1]

[0178]

(실시예 3) 식(I-3)으로 표시되는 화합물의 제조



[0179]

반응 용기에 식(I-3-1)으로 표시되는 화합물, 진한 황산, 에탄올을 더하고, 가열 환류시켰다. 아세트산에틸로 희석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0180]

Tetrahedron Letters지, 2010년, 51권, 17호, 2323-2325페이지에 기재된 방법에 의해서 식(I-3-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-3-2)으로 표시되는 화합물, 식(I-3-3)으로 표시되는 화합물, 디부틸주석옥사이드, 툴루엔을 더하고, 용매를 갈아 넣으면서 가열 환류시켰다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0181]

반응 용기에 식(I-3-4)으로 표시되는 화합물, 이탄산디-tert-부틸, 테트라하이드로퓨란을 더하고 가열 환류시켰다. 용매를 증류 제거한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0182]

반응 용기에 식(I-3-5)으로 표시되는 화합물, 메타크릴산4-히드록시부틸, 트리페닐포스핀, 테트라하이드로퓨란을 더했다. 빙냉하면서 아조디카르복시산디이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0183]

반응 용기에 식(I-3-6)으로 표시되는 화합물, 메탄올, Amberlyst 15를 더하고 가열 환류시켰다. 여과한 후, 용

매를 증류 제거하고 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

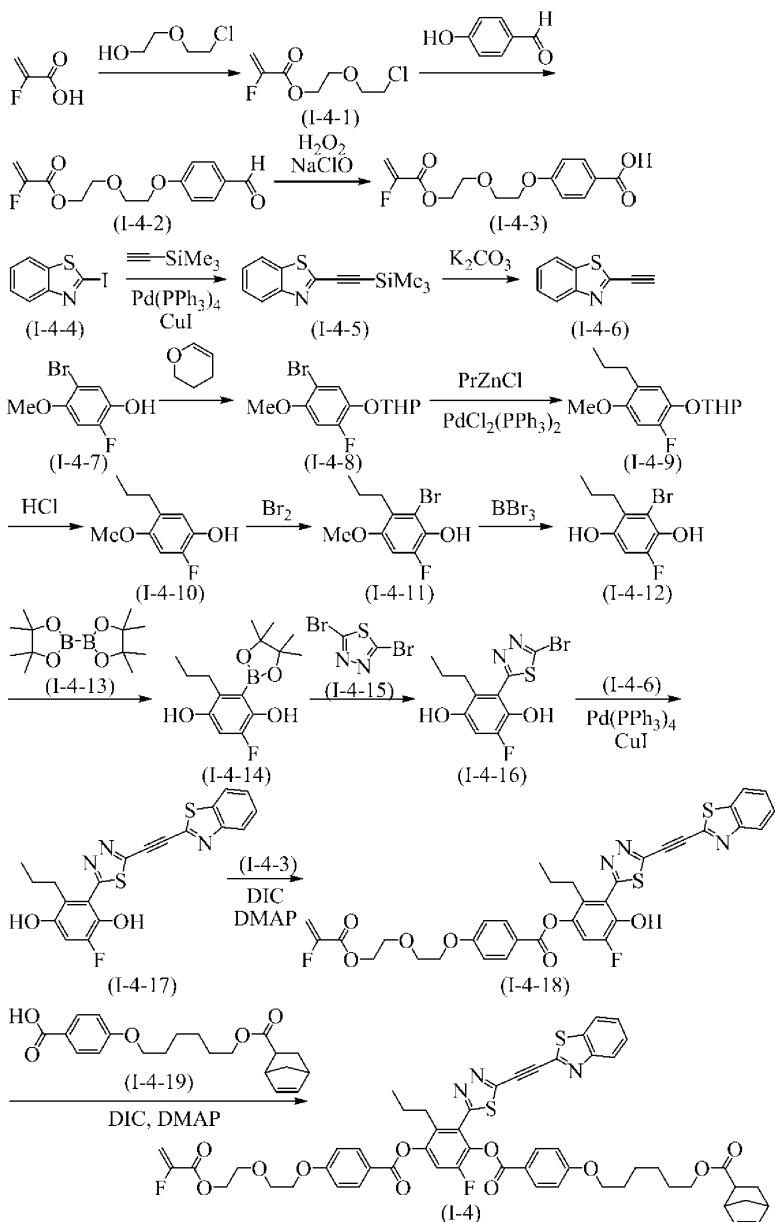
[0185] 반응 용기에 식(I-3-7)으로 표시되는 화합물, 3-클로로-1-프로판티올, 탄산세슘, 디메틸설폐시드를 더하고 가열 교반했다. 디클로로메탄으로 회석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0186] 반응 용기에 식(I-3-8)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 트리플루오로아세트산을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0187] 반응 용기에 식(I-3-9)으로 표시되는 화합물, 트리에틸아민, 아세트산에틸을 더했다. 식(I-3-10)으로 표시되는 화합물을 더하고 가열 교반했다. 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0188] MS(m/z): 640[M⁺1]

[0189] (실시예 4) 식(I-4)으로 표시되는 화합물의 제조



[0190]

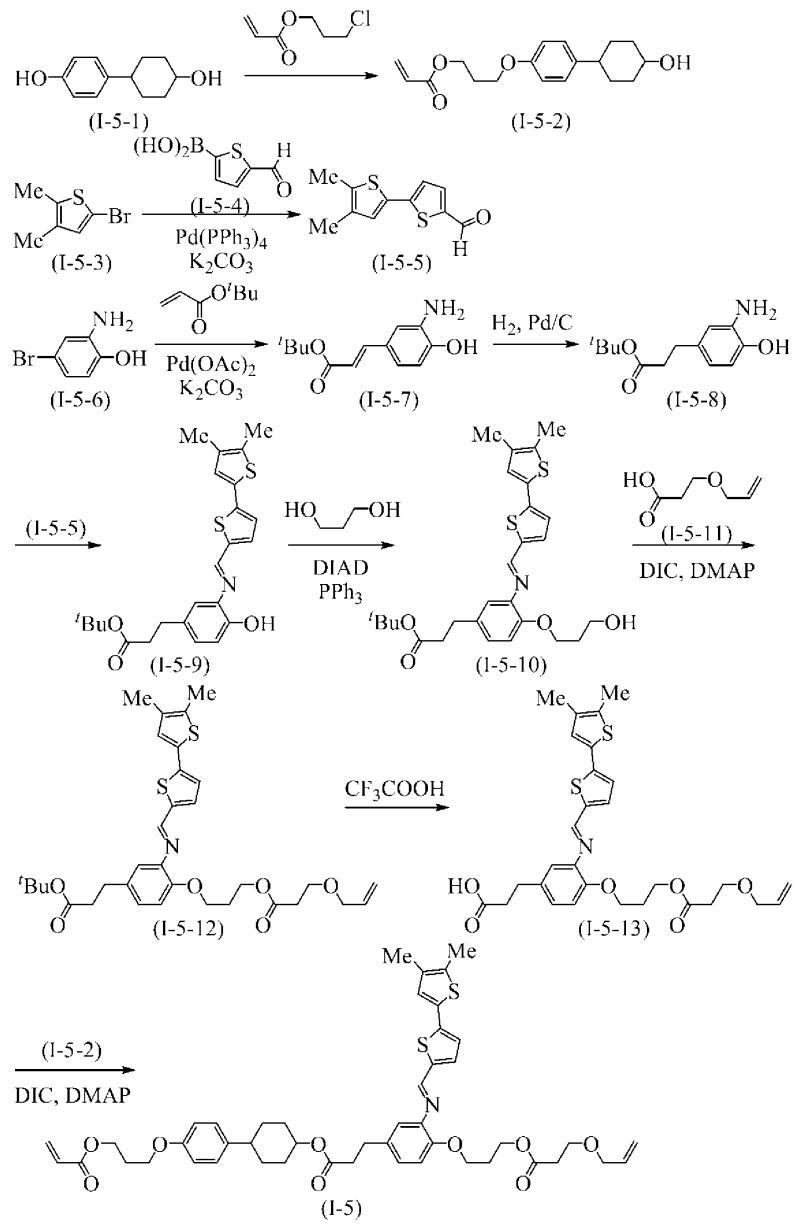
[0191] 반응 용기에 2-플루오로아크릴산, 에틸렌글리콜모노-2-클로로에틸에테르, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼

크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-1)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

- [0192] 반응 용기에 식(I-4-1)으로 표시되는 화합물, 4-히드록시벤즈알데히드, 탄산세슘, 디메틸설폐시드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0193] 반응 용기에 식(I-4-2)으로 표시되는 화합물, 인산이수소나트륨이수화물, 메탄올, 물, 과산화수소수를 더했다. 아염소산나트륨 수용액을 적하하고 가열 교반했다. 물을 더하여 냉각하고, 석출물을 여과했다. 건조시킴에 의해, 식(I-4-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-4-4)으로 표시되는 화합물, 트리메틸실릴아세틸렌, 요오드화구리(I), 트리에틸아민, N,N-디메틸포름아미드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0194] 반응 용기에 식(I-4-5)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 탄산칼륨을 더하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0195] 반응 용기에 식(I-4-7)으로 표시되는 화합물, p-톨루엔설폰산파리디늄, 디클로로메탄을 더했다. 3,4-디히드로-2H-피란을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0196] 반응 용기에 염화아연, 테트라히드로퓨란을 더했다. 프로필마그네슘브로미드의 테트라히드로퓨란 용액을 적하하고 교반했다. 얻어진 반응액을, 식(I-4-3)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II)디클로리드를 혼합한 반응 용기에 적하했다. 가열 교반하고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0197] 반응 용기에 식(I-4-9)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 진한 염산을 더하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0198] 반응 용기에 식(I-4-10)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. 냉각하고 브롬을 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 붓고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-11)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0199] 반응 용기에 식(I-4-11)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. -78°C로 냉각하고 삼브롬화붕소를 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 붓고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0200] 반응 용기에 식(I-4-12)으로 표시되는 화합물, 식(I-4-13)으로 표시되는 화합물, 아세트산칼륨, 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II)디클로리드, 디메틸설폐시드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-14)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0201] 반응 용기에 식(I-4-14)으로 표시되는 화합물, 식(I-4-15)으로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐(0), 에탄올, 물을 더하고 가열 환류시켰다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-16)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0202] 반응 용기에 식(I-4-16)으로 표시되는 화합물, 식(I-4-6)으로 표시되는 화합물, 요오드화구리(I), 트리에틸아민, N,N-디메틸포름아미드, 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-17)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0203] 반응 용기에 식(I-4-17)으로 표시되는 화합물, 식(I-4-3)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 냉각하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-4-18)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0204] WO993770A1호 공보 기재의 방법에 의해서, 식(I-4-19)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-4-18)으로 표시되는 화합물, 식(I-4-19)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0205] MS(m/z): 1032[M^+]

[0206]

(실시예 5) 식(I-5)으로 표시되는 화합물의 제조



[0207]

[0208]

반응 용기에 식(I-5-1)으로 표시되는 화합물, 아크릴산3-클로로프로필, 탄산세슘, 디메틸설폐시드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0209]

반응 용기에 식(I-5-3)으로 표시되는 화합물, 식(I-5-4)으로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 에탄올, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)을 더하고 가열 환류시켰다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0210]

반응 용기에 식(I-5-6)으로 표시되는 화합물, 아크릴산tert-부틸, 탄산칼륨, N,N-디메틸포름아미드, 아세트산팔라듐(II)을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0211]

반응 용기에 식(I-5-7)으로 표시되는 화합물, 5% 팔라듐탄소, 테트라하이드로퓨란을 더하고, 수소압 0.5MPa 하 교반했다. 촉매를 여과하고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0212]

반응 용기에 식(I-5-8)으로 표시되는 화합물, 식(I-5-5)으로 표시되는 화합물, 에탄올을 더하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0213] 반응 용기에 식(I-5-9)으로 표시되는 화합물, 1,3-프로판디올, 트리페닐포스핀, 테트라하이드로퓨란을 더했다. 빙냉하면서 아조디카르복시산이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

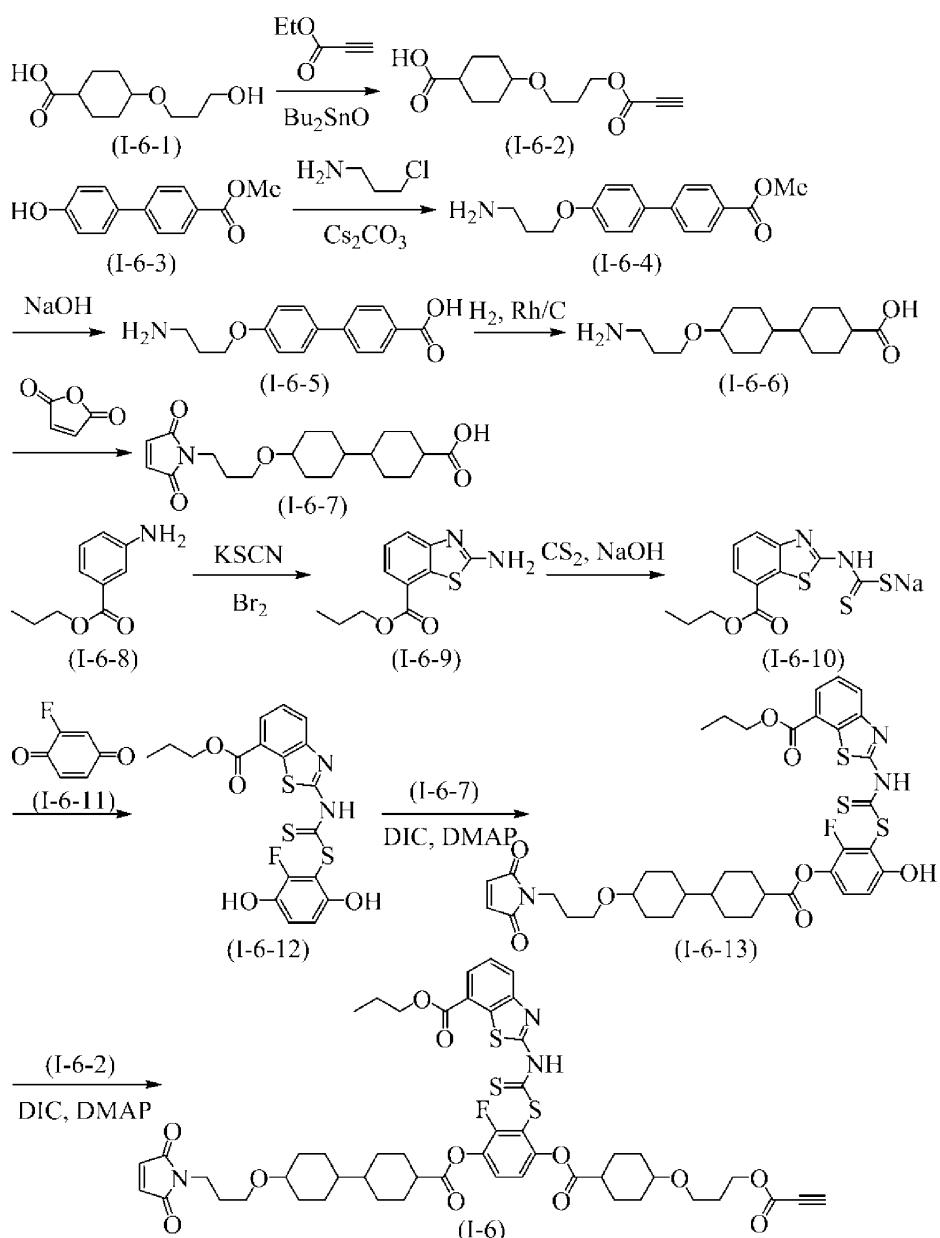
[0214] 반응 용기에 식(I-5-10)으로 표시되는 화합물, 식(I-5-11)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노파리딘, 디클로로메탄을 더했다. 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0215] 반응 용기에 식(I-5-12)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 트리플루오로아세트산을 더하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-5-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0216] 반응 용기에 식(I-5-13)으로 표시되는 화합물, 식(I-5-2)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노파리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0217] MS(m/z): 842[M⁺+1]

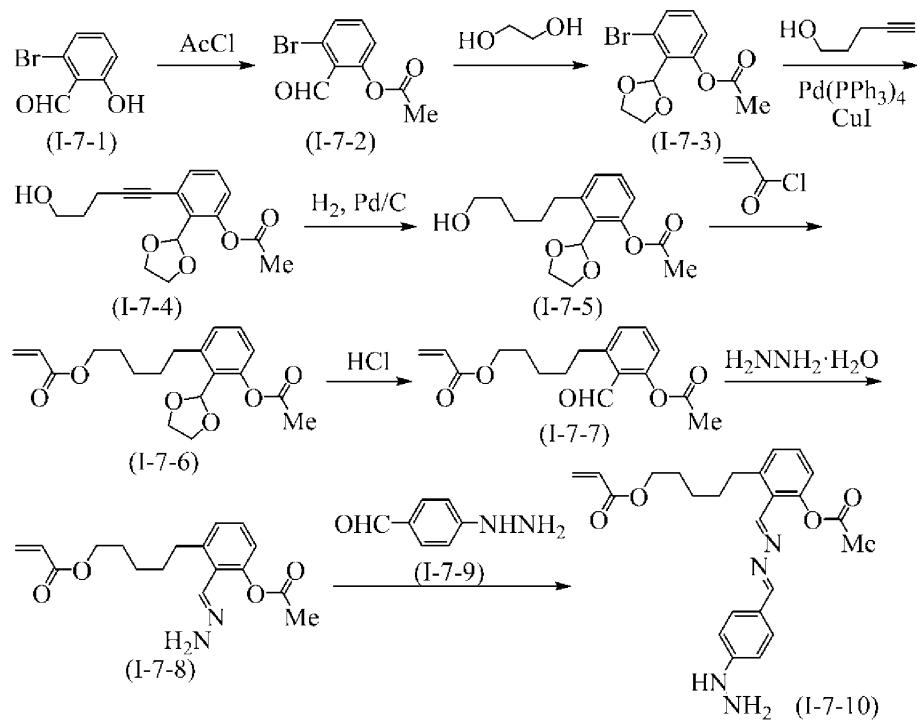
[0218] (실시예 6) 식(I-6)으로 표시되는 화합물의 제조



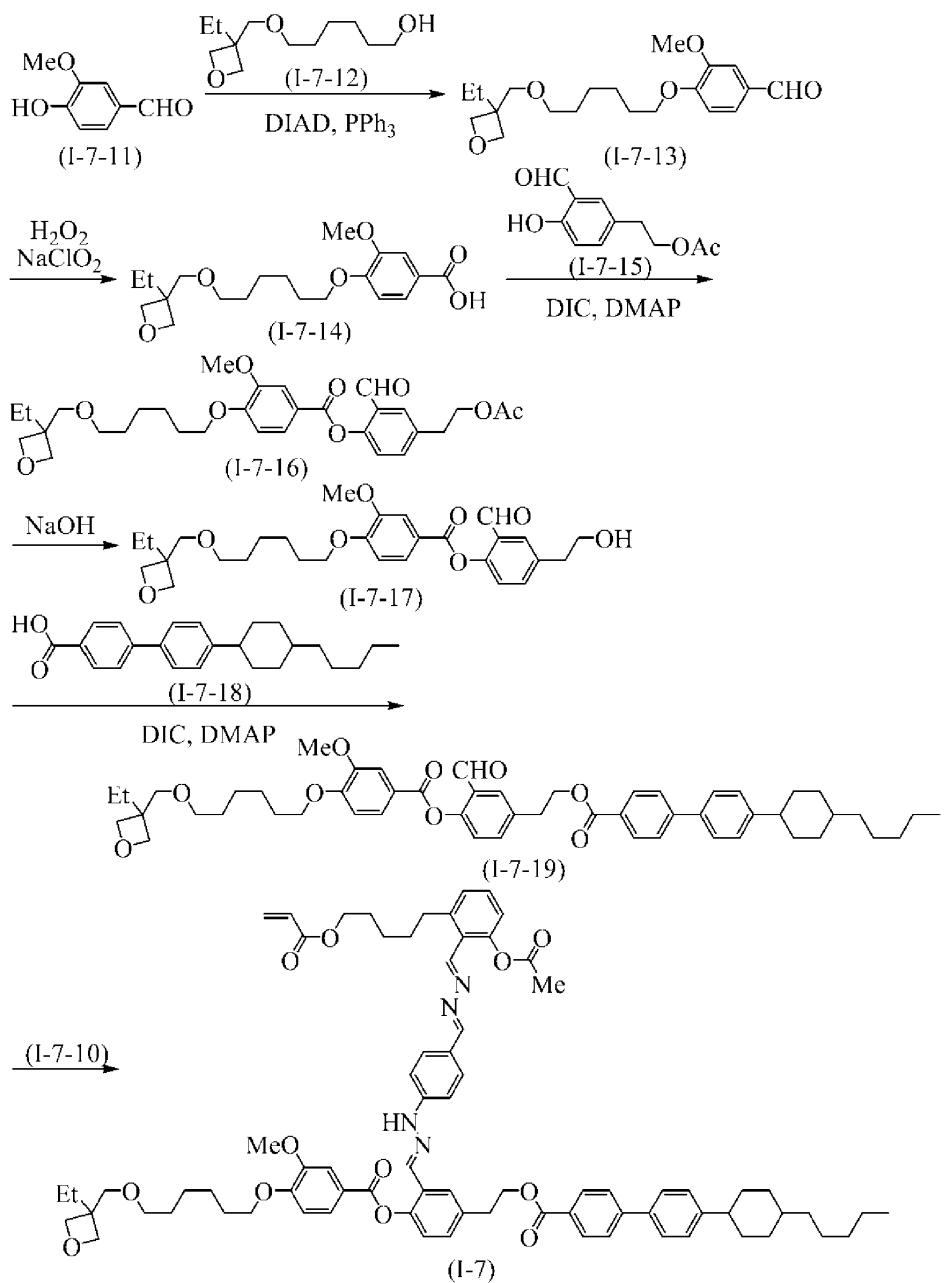
- [0220] 반응 용기에 식(I-6-1)으로 표시되는 화합물, 툴루엔, 프로피올산에틸, 디부틸주석옥사이드를 더하고 가열 환류시켰다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-6-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0221] 반응 용기에 식(I-6-3)으로 표시되는 화합물, 3-클로로프로필아민, 탄산세슘, 디메틸설록시드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-6-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0222] 반응 용기에 식(I-6-4)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 수산화나트륨 수용액을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-6-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0223] 반응 용기에 식(I-6-5)으로 표시되는 화합물, 아세트산, 5% 로듐탄소를 더하고 수소 분위기 하 가열 교반했다. 촉매를 제거한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-6-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0224] 반응 용기에 식(I-6-6)으로 표시되는 화합물, 무수말레산, 아세트산을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-6-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0225] 반응 용기에 티오시안산칼륨, 아세트산을 더하고 교반했다. 식(I-6-8)으로 표시되는 화합물을 아세트산에 용해시킨 용액을 적하하고 교반했다. 브롬의 아세트산 용액을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-6-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0226] 반응 용기에 식(I-6-9)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸포름아미드, 이황화탄소, 수산화나트륨을 더하고 교반했다. 클로로포름을 더하고, 석출물을 여과하고 건조시킴에 의해, 식(I-6-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0227] 반응 용기에 식(I-6-10)으로 표시되는 화합물, 물, 메탄올을 더했다. 불활성 분위기 하, 냉각하면서 식(I-6-11)으로 표시되는 화합물의 아세트산 및 메탄올 용액을 적하하고 교반했다. 불활성 분위기 하, 통상의 후처리를 행하여, 식(I-6-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0228] 불활성 분위기 하, 반응 용기에 식(I-6-12)으로 표시되는 화합물, 식(I-6-7)으로 표시되는 화합물, 디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 냉각하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-6-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0229] 반응 용기에 식(I-6-13)으로 표시되는 화합물, 식(I-6-2)으로 표시되는 화합물, 디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 냉각하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0230] MS(m/z): 1020[M⁺1]

[0231]

(실시예 7) 식(I-7)으로 표시되는 화합물의 제조



[0232]



[0233]

[0234] 반응 용기에 식(I-7-1)으로 표시되는 화합물, 피리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 염화아세틸의 디클로로메탄 용액을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0235]

[0235] 반응 용기에 식(I-7-2)으로 표시되는 화합물, 에틸렌글리콜, 툴루엔, p-톨루엔설폰산일수화물을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0236]

[0236] 불활성 분위기 하, 반응 용기에 식(I-7-3)으로 표시되는 화합물, 4-페틴-1-올, 요오드화구리(I), 테트라카스(트리페닐포스핀)팔라듐(0), N,N-디메틸포름아미드, 트리에틸아민을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0237]

[0237] 반응 용기에 식(I-7-4)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 5% 팔라듐탄소를 더하고, 수소 분위기 하 교반했다. 촉매를 제거한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0238]

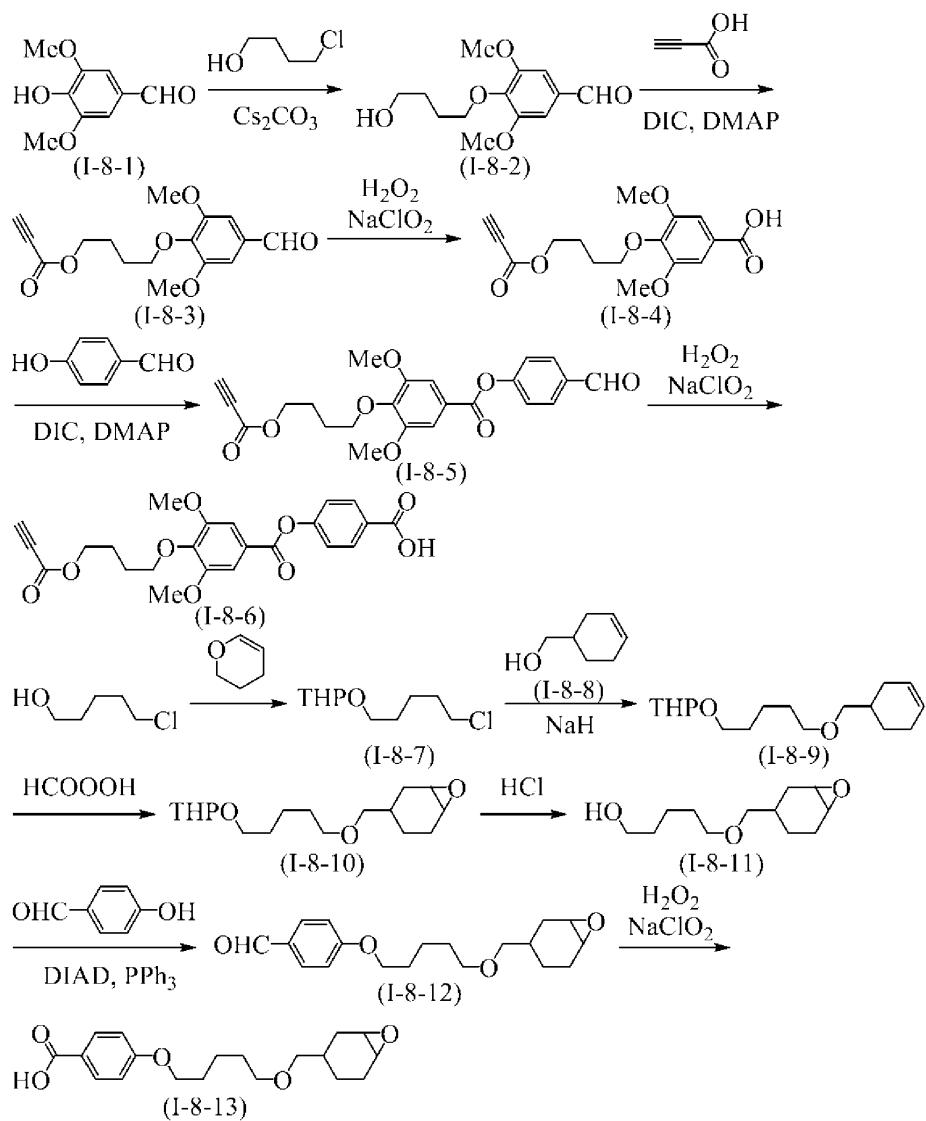
[0238] 반응 용기에 식(I-7-5)으로 표시되는 화합물, 디이소프로필에틸아민, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 염화아크릴로일을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식

(I-7-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

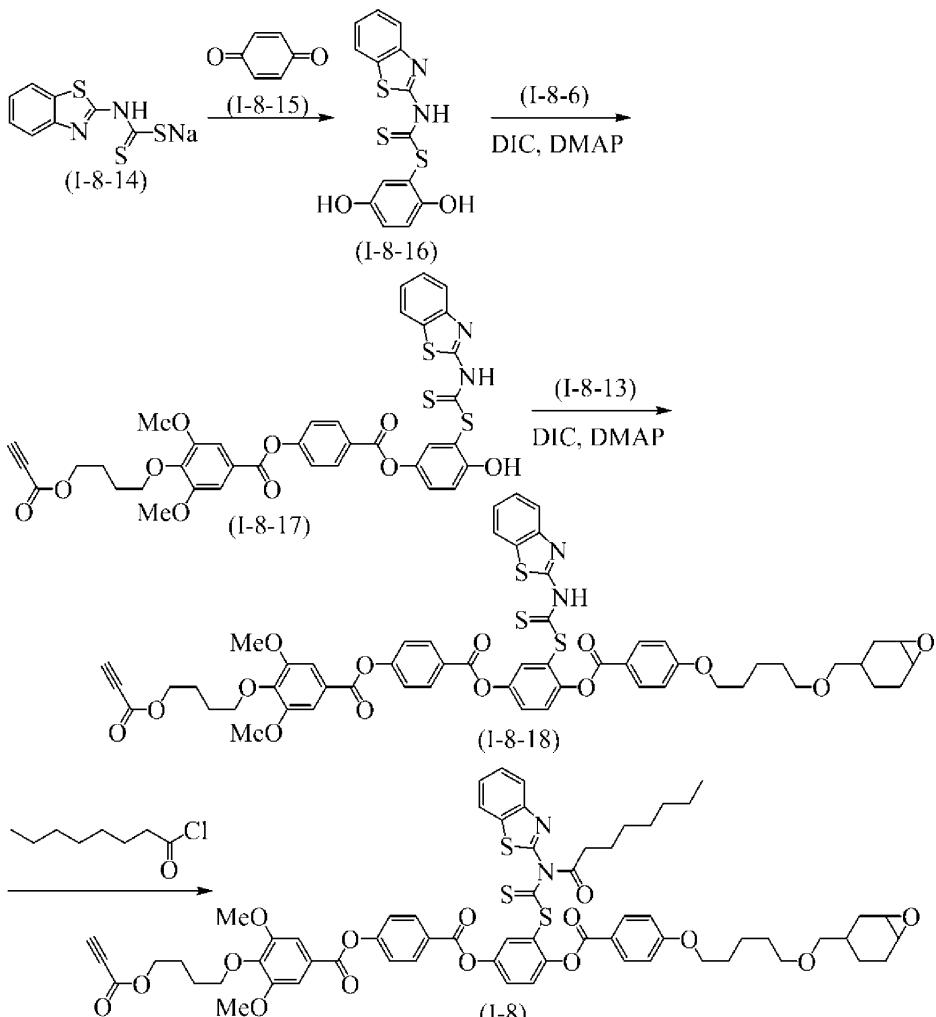
- [0239] 반응 용기에 식(I-7-6)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 진한 염산을 더하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0240] 반응 용기에 식(I-7-7)으로 표시되는 화합물, 에탄올, 히드라진일수화물을 더하고 교반했다. 디클로로메탄으로 희석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0241] 반응 용기에 식(I-7-8)으로 표시되는 화합물, 식(I-7-9)으로 표시되는 화합물, 에탄올을 더하고 교반했다. 디클로로메탄으로 희석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0242] Macromolecular Chemistry and Physics지, 2009년, 210권, 7호, 531-541페이지에 기재된 방법에 의해서 식(I-7-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-7-11)으로 표시되는 화합물, 식(I-7-12)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 트리페닐포스핀을 더했다. 빙냉하면서 아조디카르복시산디이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0243] 반응 용기에 식(I-7-13)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 물, 인산이수소나트륨이수화물, 아염소산나트륨, 과산화수소를 더하고 가열 교반했다. 물을 더하고 석출물을 여과하고 건조시킴에 의해, 식(I-7-14)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0244] 반응 용기에 식(I-7-14)으로 표시되는 화합물, 식(I-7-15)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-16)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0245] 반응 용기에 식(I-7-16)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 수산화나트륨 수용액을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-17)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0246] 반응 용기에 식(I-7-17)으로 표시되는 화합물, 식(I-7-18)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-7-19)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0247] 반응 용기에 식(I-7-19)으로 표시되는 화합물, 식(I-7-10)으로 표시되는 화합물, (\pm)-10-캠퍼설폰산, 에탄올, 테트라히드로퓨란을 더하고 교반했다. 석출물을 여과한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0248] MS(m/z): 1265[M⁺1]

[0249]

(실시예 8) 식(I-8)으로 표시되는 화합물의 제조



[0250]



[0251]

반응 용기에 식(I-8-1)으로 표시되는 화합물, 4-클로로부탄올, 탄산세슘, 디메틸설폐시드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0252]

반응 용기에 식(I-8-2)으로 표시되는 화합물, 프로피올산, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0253]

반응 용기에 식(I-8-3)으로 표시되는 화합물, 인산이수소나트륨이수화물, 메탄올, 물, 아염소산나트륨, 과산화 수소수를 더하고 가열 교반했다. 아세트산에틸로 희석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0254]

반응 용기에 식(I-8-4)으로 표시되는 화합물, 4-히드록시벤즈알데히드, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0255]

반응 용기에 식(I-8-5)으로 표시되는 화합물, 인산이수소나트륨이수화물, 메탄올, 물, 아염소산나트륨, 과산화 수소수를 더하고 가열 교반했다. 아세트산에틸로 희석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0256]

반응 용기에 5-클로로펜탄올, p-톨루엔설폰산페리디늄, 디클로로메탄을 더했다. 3,4-디히드로-2H-페란을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0257]

반응 용기에 식(I-8-8)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 수소화나트륨을 더하고 교반했다. 식(I-8-7)으로 표시되는 화합물의 테트라히드로퓨란 용액을 적하하고 가열 교반했다. 물을 적하하고, 통상의 후처리를

행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0259] 반응 용기에 포름산, 과산화수소를 더하고 교반했다. 식(I-8-9)으로 표시되는 화합물의 디클로로메탄 용액을 적하하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0260] 반응 용기에 식(I-8-10)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 테트라히드로퓨란, 진한 염산을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-11)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0261] 반응 용기에 식(I-8-11)으로 표시되는 화합물, 4-히드록시벤즈알데히드, 트리페닐포스핀, 테트라히드로퓨란을 더했다. 빙냉하면서 아조디카르복시산디이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0262] 반응 용기에 식(I-8-12)으로 표시되는 화합물, 인산이수소나트륨이수화물, 메탄올, 물, 아염소산나트륨, 과산화수소수를 더하고 가열 교반했다. 아세트산에틸로 희석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0263] European Journal of Organic Chemistry지, 2004년, 20호, 4203-4214페이지에 기재된 방법에 의해서, 식(I-8-14)으로 표시되는 화합물을 얻었다. 반응 용기에 식(I-8-14)으로 표시되는 화합물, 물, 메탄올을 더했다. 불활성 분위기 하, 냉각하면서 식(I-8-15)으로 표시되는 화합물의 아세트산 및 메탄올 용액을 적하하고 교반했다. 불활성 분위기 하, 통상의 후처리를 행하여, 식(I-8-16)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0264] 불활성 분위기 하, 반응 용기에 식(I-8-16)으로 표시되는 화합물, 식(I-8-6)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노파리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-17)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

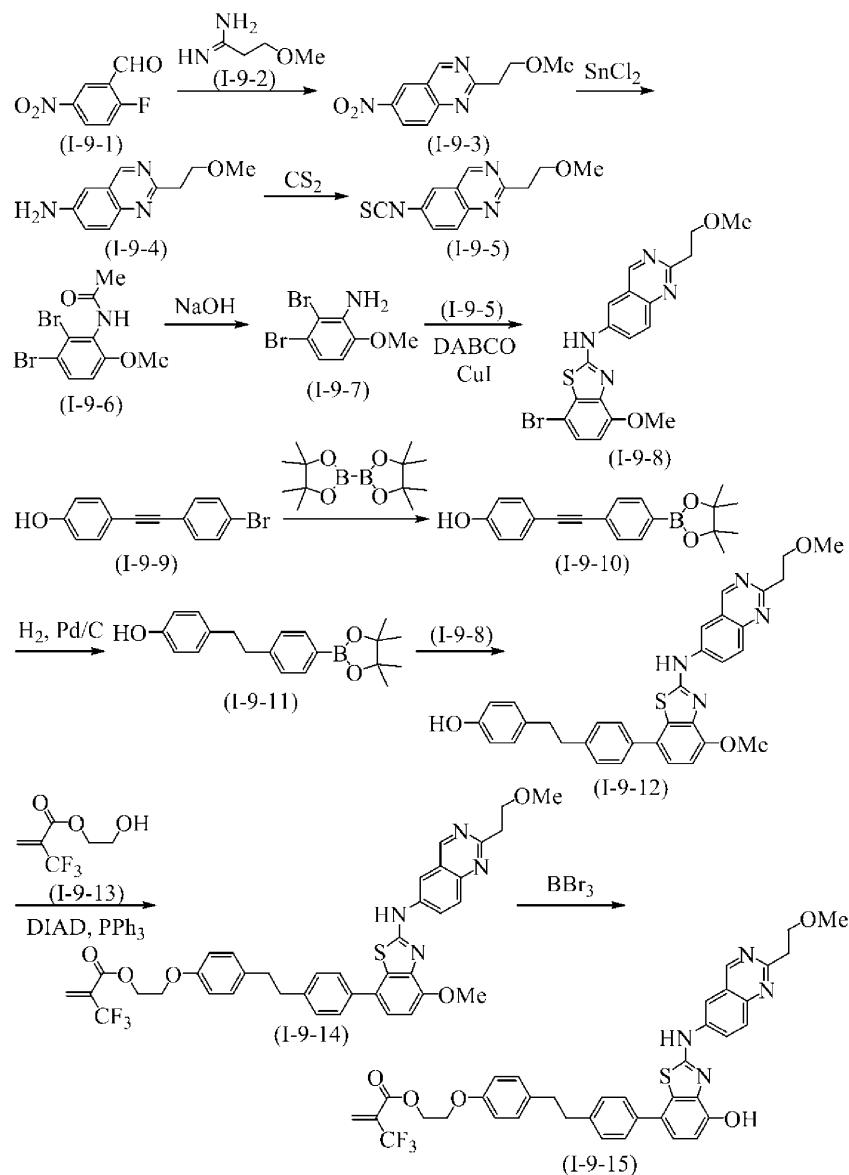
[0265] 반응 용기에 식(I-8-17)으로 표시되는 화합물, 식(I-8-13)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노파리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-8-18)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0266] 반응 용기에 식(I-8-18)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄, 트리에틸아민을 더했다. 옥타노일클로리드의 디클로로메탄 용액을 적하하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

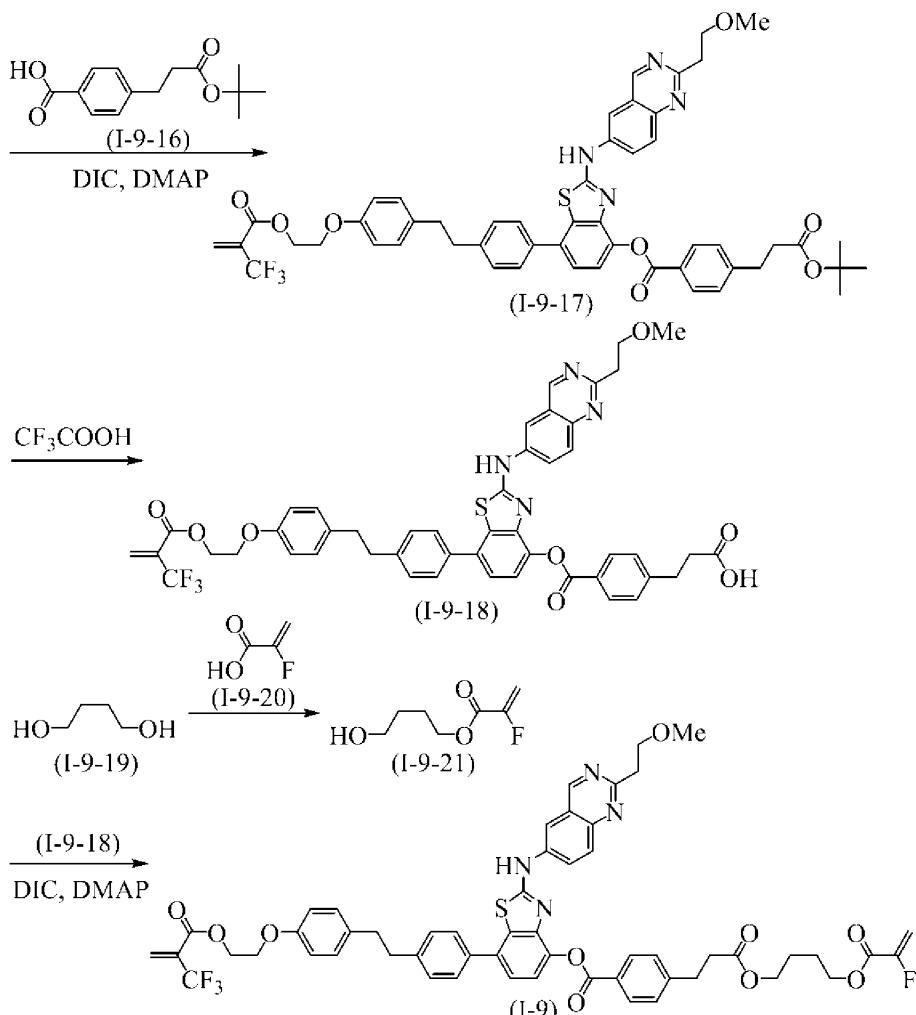
[0267] MS(m/z): 1201[M⁺1]

[0268]

(실시예 9) 식(I-9)으로 표시되는 화합물의 제조



[0269]



[0270]

[0271]

반응 용기에 식(I-9-2)으로 표시되는 화합물, 아세토니트릴, 탄산칼륨, 식(I-9-1)으로 표시되는 화합물을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0272]

반응 용기에 식(I-9-3)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 염화주석(II), 진한 염산을 더하고 교반했다. 반응액을 중조수(重曹水)에 봇고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0273]

반응 용기에 식(I-9-4)으로 표시되는 화합물, 트리에틸아민, 이황화탄소를 더하고 교반했다. 빙냉하면서 이탄산디-tert-부틸의 에탄올 용액, 1,4-디아자비시클로[2.2.2]옥탄을 더하고 교반했다. 용매를 중류 제거함에 의해, 식(I-9-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0274]

반응 용기에 식(I-9-6)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 수산화나트륨 수용액을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0275]

반응 용기에 식(I-9-7)으로 표시되는 화합물, 1,4-디아자비시클로[2.2.2]옥탄, 요오드화구리, 1,10-페난트롤린, 톨루엔을 더했다. 식(I-9-5)으로 표시되는 화합물의 톨루엔 용액을 적하하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0276]

불활성 분위기 하, 반응 용기에 식(I-9-9)으로 표시되는 화합물, 비스피나콜라토디보론, 아세트산칼륨, 디클로로비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II), 디메틸실록시드를 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행하여, 식(I-9-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0277]

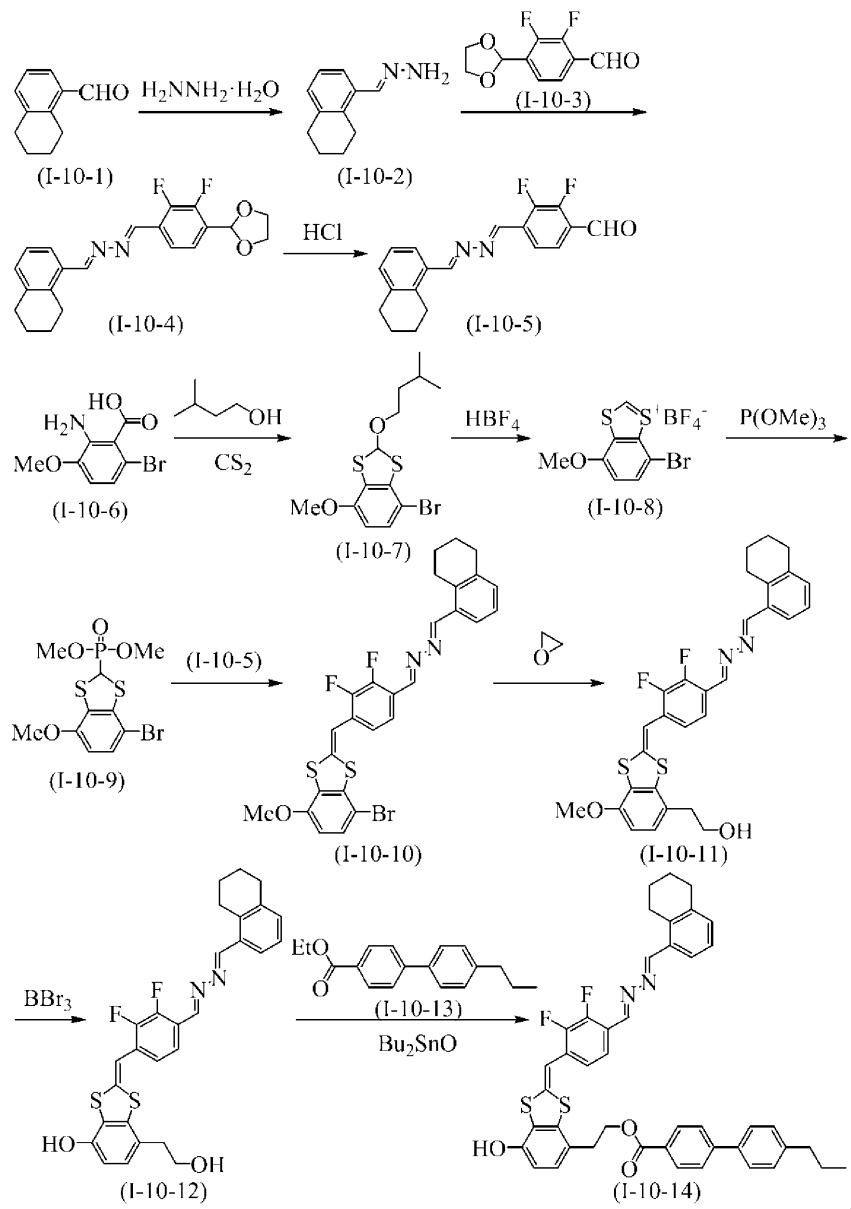
반응 용기에 식(I-9-10)으로 표시되는 화합물, 테트라하이드로퓨란, 5% 팔라듐탄소를 더하고 수소 분위기 하 교반했다. 촉매를 제거한 후 용매를 중류 제거하여, 식(I-9-11)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

- [0278] 불활성 분위기 하, 반응 용기에 식(I-9-11)으로 표시되는 화합물, 식(I-9-8)으로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 에탄올, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0279] 반응 용기에 식(I-9-12)으로 표시되는 화합물, 식(I-9-13)으로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 테트라히드로퓨란을 더했다. 빙냉하면서 아조디카르복시산디이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-14)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0280] 반응 용기에 식(I-9-14)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. -78°C로 냉각하고 삼브롬화붕소를 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 끓고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-15)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0281] 반응 용기에 식(I-9-15)으로 표시되는 화합물, 식(I-9-16)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-17)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0282] 반응 용기에 식(I-9-17)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 트리플루오로아세트산을 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 끓고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-18)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0283] 반응 용기에 식(I-9-19)으로 표시되는 화합물, 식(I-9-20)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-9-21)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0284] 반응 용기에 식(I-9-21)으로 표시되는 화합물, 식(I-9-18)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

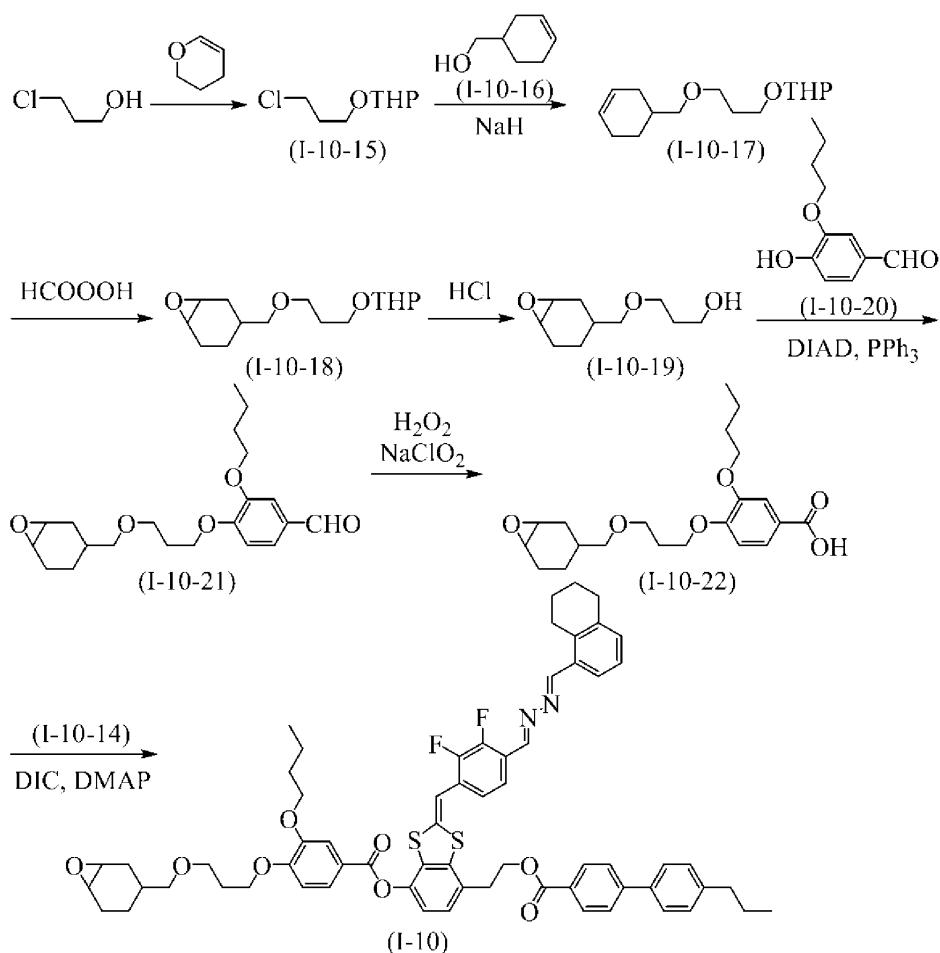
[0285] MS(m/z): 1035[$M^+ + 1$]

[0286]

(실시예 10) 식(I-10)으로 표시되는 화합물의 제조



[0287]



[0288]

반응 용기에 식(I-10-1)으로 표시되는 화합물, 에탄올을 더했다. 히드라진일수화물을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-2)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0289]

반응 용기에 식(I-10-3)으로 표시되는 화합물, 에탄올을 더했다. 식(I-10-2)으로 표시되는 화합물의 에탄올 용액을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-4)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0290]

반응 용기에 식(I-10-4)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 진한 염산을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-5)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0291]

반응 용기에 질산이소아밀, 3-메틸부탄올, 이황화탄소, 1,2-디클로로에탄을 더했다. 식(I-10-6)으로 표시되는 화합물을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-7)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0292]

반응 용기에 디에틸에테르를 더하고 석출한 고체를 여과하고 건조시킴에 의해, 식(I-10-8)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

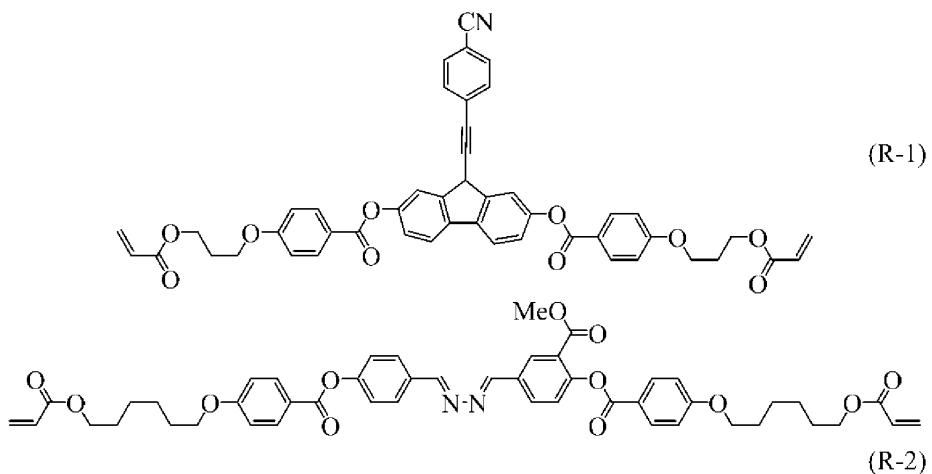
[0293]

반응 용기에 식(I-10-8)으로 표시되는 화합물, 아세토니트릴을 더했다. 아인산트리메틸, 요오드화나트륨을 더하고 교반했다. 용매를 중류 제거하고 물을 더하고, 고체를 여과하고 건조시킴에 의해, 식(I-10-9)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0294]

반응 용기에 식(I-10-9)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란을 더했다. -78°C로 냉각하고 부틸리튬의 헥산 용액을 적하하고 교반했다. 식(I-10-5)으로 표시되는 화합물의 테트라히드로퓨란 용액을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

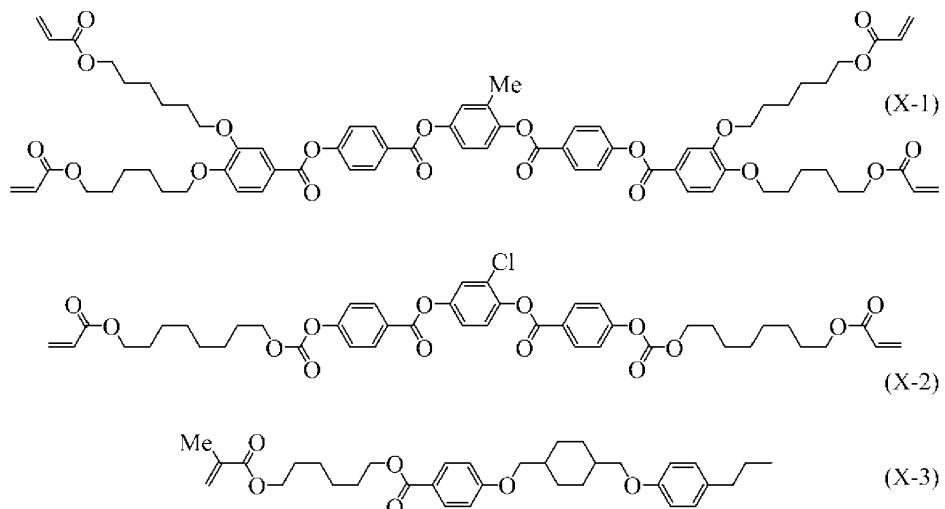
- [0296] 반응 용기에 식(I-10-10)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란을 더했다. -78°C로 냉각하고 부틸리튬의 헥산 용액을 적하하고 교반했다. 에틸렌옥사이드의 테트라히드로퓨란 용액을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-11)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0297] 반응 용기에 식(I-10-11)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄을 더했다. -78°C로 냉각하고 삼브롬화붕소를 적하하고 교반했다. 반응액을 물에 뜯고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-12)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0298] 반응 용기에 식(I-10-12)으로 표시되는 화합물, 식(I-10-13)으로 표시되는 화합물, 디부틸주석옥사이드, 톨루엔을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-14)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0299] 반응 용기에 3-클로로프로판올, p-톨루엔설폰산페리디늄, 디클로로메탄을 더했다. 3,4-디히드로-2H-페란을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-15)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0300] 반응 용기에 식(I-10-16)으로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 수소화나트륨을 더하고 교반했다. 식(I-10-15)으로 표시되는 화합물의 테트라히드로퓨란 용액을 적하하고 가열 교반했다. 물을 적하하고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-17)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0301] 반응 용기에 포름산, 과산화수소를 더하고 교반했다. 식(I-10-17)으로 표시되는 화합물의 디클로로메탄 용액을 적하하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-18)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0302] 반응 용기에 식(I-10-18)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 테트라히드로퓨란, 진한 염산을 더하고 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-19)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0303] 반응 용기에 식(I-10-19)으로 표시되는 화합물, 식(I-10-20)으로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 테트라히드로퓨란을 더했다. 빙냉하면서 아조디카르복시산디이소프로필을 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-21)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0304] 반응 용기에 식(I-10-21)으로 표시되는 화합물, 인산이수소나트륨이수화물, 메탄올, 물, 아염소산나트륨, 과산화수소수를 더하고 가열 교반했다. 아세트산에틸로 화석하고 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제를 행하여, 식(I-10-22)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0305] 반응 용기에 식(I-10-22)으로 표시되는 화합물, 식(I-10-14)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 디클로로메탄을 더했다. 빙냉하면서 디이소프로필카르보디이미드를 적하하고 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제를 행하여, 식(I-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.
- [0306] MS(m/z): 1105[M⁺1]
- [0307] (실시예 11~30, 비교예 1~4)
- [0308] 실시예 1 내지 실시예 10 기재의 식(I-1) 내지 식(I-10)으로 표시되는 화합물 및 특허문헌 1 기재의 화합물(R-1), 특허문헌 2 기재의 화합물(R-2)을 평가 대상의 화합물로 했다.



[0309]

[0310]

일본 특개2002-030042호 공보 기재의 화합물(X-1) : 30%, 일본 특표평11-513019호 공보 기재의 화합물(X-2) : 30% 및 일본 특개평10-87565호 공보 기재의 화합물(X-3) : 40%로 이루어지는 액정 조성물을 모체 액정(X)으로 했다.



[0311]

[0312]

배향막용 폴리이미드 용액을 두께 0.7mm의 유리 기재에 스판 코트법을 사용해서 도포하고, 100°C에서 10분 건조한 후, 200°C에서 60분 소성함에 의해 도막을 얻었다. 얻어진 도막을 러빙 처리했다. 러빙 처리는, 시판의 러빙 장치를 사용해서 행했다.

[0313]

모체 액정(X)에 평가 대상으로 되는 화합물을 30% 첨가함에 의해 조제한 조성물 각각에 대하여, 광중합개시제 Irgacure907(BASF사제)을 1%, 4-메톡시페놀을 0.1% 및 클로로포름을 80% 첨가하여 도포액을 조제했다. 이 도포액을 러빙한 유리 기재에 스판 코트법에 의해 도포했다. 80°C에서 1분간 건조시킨 후, 추가로 120°C에서 1분간 건조했다. 그 후, 고압 수은 램프를 사용해서, 자외선을 40mW/cm²의 강도로 25초간 조사함에 의해, 평가 대상의 필름을 제작했다. 얻어진 필름은 모두 수평 배향이었다. 평가 대상의 필름과 사용한 평가 대상의 화합물과의 대응 관계에 대하여 하기 표에 나타낸다.

[0314]

[표 1]

실시예	평가 대상의 필름	평가 대상의 화합물
실시예 11	광학 이방체 (X I - 1)	분원 발명의 화합물 (I - 1)
실시예 12	광학 이방체 (X I - 2)	분원 발명의 화합물 (I - 2)
실시예 13	광학 이방체 (X I - 3)	분원 발명의 화합물 (I - 3)
실시예 14	광학 이방체 (X I - 4)	분원 발명의 화합물 (I - 4)
실시예 15	광학 이방체 (X I - 5)	분원 발명의 화합물 (I - 5)
실시예 16	광학 이방체 (X I - 6)	분원 발명의 화합물 (I - 6)
실시예 17	광학 이방체 (X I - 7)	분원 발명의 화합물 (I - 7)
실시예 18	광학 이방체 (X I - 8)	분원 발명의 화합물 (I - 8)
실시예 19	광학 이방체 (X I - 9)	분원 발명의 화합물 (I - 9)
실시예 20	광학 이방체 (X I - 10)	분원 발명의 화합물 (I - 10)
비교예 1	광학 이방체 (X I - R - 1)	비교 화합물 (R - 1)
비교예 2	광학 이방체 (X I - R - 2)	비교 화합물 (R - 2)

[0315]

[0316]

얻어진 평가 대상의 필름에 대하여, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡수 극대 파장 λ_{omax} 를 측정했다. 측정에는 분광 광도계(니혼분코가부시키가이샤제 V-560)를 사용하여, 2매의 편광판의 사이에 평가 대상의 필름을 끼우고, 평가 대상의 필름의 배향 방향과 편광판의 편광 방향이 수직의 상태로 되도록 배치하고 측정을 행했다(도면 참조). 또한, 평가 대상의 필름의 배향 방향과 편광판의 편광 방향이 수직의 상태로 되도록 배치하고, 파장 λ_{omax} 에 있어서의, 배향 방향에 대하여 수직인 면내 방향의 흡광도 Ao 를 측정했다. 마찬가지로, 평가 대상의 필름의 배향 방향과 편광판의 편광 방향이 평행의 상태로 되도록 배치하고, 파장 λ_{omax} 에 있어서의, 배향 방향과 평행한 방향의 흡광도 Ae 를 측정했다. 얻어진 Ao 및 Ae 내지 Ao/Ae 를 산출했다. 결과를 하기 표에 나타낸다.

[0317]

[표 2]

실시예	평가 대상의 필름	λ_{omax} (nm)	Ao/Ae
실시예 11	광학 이방체 (X I - 1)	3 4 5	1. 1 3
실시예 12	광학 이방체 (X I - 2)	3 6 5	1. 0 1
실시예 13	광학 이방체 (X I - 3)	3 3 2	1. 1 2
실시예 14	광학 이방체 (X I - 4)	3 7 8	1. 1 1
실시예 15	광학 이방체 (X I - 5)	4 0 5	1. 0 1
실시예 16	광학 이방체 (X I - 6)	3 2 0	1. 0 2
실시예 17	광학 이방체 (X I - 7)	4 2 0	1. 0 1
실시예 18	광학 이방체 (X I - 8)	3 2 1	0. 8 8
실시예 19	광학 이방체 (X I - 9)	3 5 0	1. 0 1
실시예 20	광학 이방체 (X I - 10)	4 1 8	1. 0 5
비교예 1	광학 이방체 (X I - R - 1)	3 1 5	1. 0 2
비교예 2	광학 이방체 (X I - R - 2)	3 1 0	0. 7 6

[0318]

[0319]

다음으로, 평가 대상의 필름의 내열성 및 내광성에 대하여 평가했다. 시험에는, 측진 내후성 시험기(광원 : 체논 램프, 온도 : BPT 65°C, 습도 : 50% RH, 강도 : 200W/m²)를 사용하여, 600시간 광조사를 행했다. 얻어진 평가 대상의 필름과 사용한 평가 대상의 화합물과의 대응 관계에 대하여 하기 표에 나타낸다.

[0320]

[표 3]

실시예	평가 대상의 필름	평가 대상의 화합물
실시예 21	광학 이방체 (X I I - 1)	본원 발명의 화합물 (I - 1)
실시예 22	광학 이방체 (X I I - 2)	본원 발명의 화합물 (I - 2)
실시예 23	광학 이방체 (X I I - 3)	본원 발명의 화합물 (I - 3)
실시예 24	광학 이방체 (X I I - 4)	본원 발명의 화합물 (I - 4)
실시예 25	광학 이방체 (X I I - 5)	본원 발명의 화합물 (I - 5)
실시예 26	광학 이방체 (X I I - 6)	본원 발명의 화합물 (I - 6)
실시예 27	광학 이방체 (X I I - 7)	본원 발명의 화합물 (I - 7)
실시예 28	광학 이방체 (X I I - 8)	본원 발명의 화합물 (I - 8)
실시예 29	광학 이방체 (X I I - 9)	본원 발명의 화합물 (I - 9)
실시예 30	광학 이방체 (X I I - 10)	본원 발명의 화합물 (I - 10)
비교예 3	광학 이방체 (X I I - R - 1)	비교 화합물 (R - 1)
비교예 4	광학 이방체 (X I I - R - 2)	비교 화합물 (R - 2)

[0321]

[0322] 평가 대상의 각 필름에 대하여, 내열성·내광성 시험의 전후에 있어서의 위상차 Re(550)의 유지율(위상차 유지율(%))=(Re(550)(시험 후))/(Re(550)(시험 전))×100으로 정의한다)을 산출했다. 위상차의 측정에는, 검사 장치(오크카덴시가부시키가이샤제 RETS-100)를 사용했다. 또한, 시험의 전후에 있어서의 변색의 정도($\Delta YI = (YI(\text{시험 후}) - YI(\text{시험 전}))$)로 정의한다)를 구했다. 황색도(YI)의 측정에는 분광 광도계(니혼분코가부시키가이샤제 V-560)를 사용하여, 컬러 진단 프로그램으로 황색도(YI)를 계산했다. 계산식은,

[0323]

$$YI = 100(1.28X - 1.06Z)/Y$$

[0324]

(식 중, YI는 황색도, X, Y, Z는 XYZ 표색계에 있어서의 삼자극값을 나타내는 것(JIS K7373)이다. 결과를 하기 표에 나타낸다.

[0325]

[표 4]

실시예	평가 대상의 필름	위상차 유지를	ΔYI
실시예 21	광학 이방체 (X I I - 1)	9 5 %	0. 4
실시예 22	광학 이방체 (X I I - 2)	9 6 %	0. 3
실시예 23	광학 이방체 (X I I - 3)	9 5 %	0. 4
실시예 24	광학 이방체 (X I I - 4)	8 9 %	0. 7
실시예 25	광학 이방체 (X I I - 5)	9 1 %	0. 6
실시예 26	광학 이방체 (X I I - 6)	8 8 %	0. 8
실시예 27	광학 이방체 (X I I - 7)	9 0 %	0. 7
실시예 28	광학 이방체 (X I I - 8)	8 4 %	1. 2
실시예 29	광학 이방체 (X I I - 9)	9 5 %	0. 4
실시예 30	광학 이방체 (X I I - 10)	8 9 %	0. 7
비교예 3	광학 이방체 (X I I - R - 1)	7 0 %	5. 1
비교예 4	광학 이방체 (X I I - R - 2)	6 5 %	5. 9

[0326]

[0327] 이상의 결과로부터, 실시예 1 내지 실시예 10 기재의 본원 발명인 식(I-1) 내지 식(I-10)으로 표시되는 화합물은, 위상차의 저하가 일어나기 어려워, 변색이 일어나기 어려운 것을 알 수 있다. 따라서, 본원 발명의 화합물은, 중합성 조성물의 구성 부재로서 유용하다. 또한, 본원 발명의 화합물을 함유하는 중합성 액정 조성물을 사용한 광학 이방체는 광학 필름 등의 용도에 유용하다.

부호의 설명

[0328]

1 : 편광판(화살표는 편광판의 편광 방향을 의미)

2 : 평가 대상의 필름(화살표는 배향 방향을 의미)

I0 : 입사광

I : 투과광

도면

도면1

