(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2023年9月28日(28.09.2023)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2023/181907 A1

(51) 国際特許分類:
C09B 31/043 (2006.01) *G02B 5/30* (2006.01)
C09B 31/18 (2006.01) *G02F 1/1335* (2006.01)
C09B 67/20 (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2023/008490

(22) 国際出願日： 2023年3月7日(07.03.2023)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2022-044888 2022年3月22日(22.03.2022) JP

(71) 出願人: 三菱ケミカル株式会社(**MITSUBISHI CHEMICAL CORPORATION**) [JP/JP]; 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 朝戸 良輔 (**ASATO, Ryousuke**); 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 三菱ケミカル株式会社内 Tokyo (JP). 志賀 靖(**SHIGA, Yasushi**); 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 三菱ケミカル株式会社内 Tokyo (JP). ▲高▼見 芳恵(**TAKAMI, Yoshie**); 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 三菱ケミカル株式会社内 Tokyo (JP). 秋山 誠治(**AKIYAMA, Seiji**); 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 三菱ケミカル株式会社内 Tokyo (JP). 大澤 輝恒(**OSAWA, Terutsune**); 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 三菱ケミカル株式会社内 Tokyo (JP). 小島 奏也(**KOJIMA, Souya**); 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 三菱ケミカル株式会社内 Tokyo (JP). 大泉 淳一(**OIZUMI, Junichi**); 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目１番１号 三菱ケミカル株式会社内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 重野 剛, 外(**SHIGENO, Tsuyoshi** et al.); 〒1600022 東京都新宿区新宿二丁目５番１０号日伸ビル９階 Tokyo (JP).

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

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

(54) **Title:** COMPOUND, COMPOSITION FOR FORMING ANISOTROPIC DYE FILM, ANISOTROPIC DYE FILM, AND OPTICAL ELEMENT

(54) 発明の名称： 化合物、異方性色素膜形成用組成物、異方性色素膜及び光学素子

$$X^1\text{-}A^{11}\text{-}N{=}N{-}A^{12}\text{-}N{=}N{-}A^{13}\text{-}N{=}N{-}A^{14}\text{-}N\begin{matrix}R^{11}\\R^{12}\end{matrix} \quad (1)$$

(57) **Abstract:** A compound represented by formula (1). (In formula (1), $-X^1$ represents a monovalent organic group. $-R^{11}$ represents an alkyl group substituted by one or more fluorine atoms. $-R^{12}$ represents a hydrogen atom, an alkyl group, or an alkyl group substituted by one or more fluorine atoms. $-R^{11}$ and $-R^{12}$ may together form a ring. $-A^{11}-$, $-A^{12}-$, $-A^{13}-$, and $-A^{14}-$ each independently represent a 1,4-phenylene group that may have a substituent.)

(57) 要約：下記式（１）で示される化合物。（式（１）中、－Ｘ^{1}は１価の有機基を表す。－Ｒ^{11}は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。－Ｒ^{12}は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。－Ｒ^{11}及び－Ｒ^{12}は、一体となって環を形成してもよい。－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基を表す。）

［続葉有］

WO 2023/181907 A1

CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

一　国際調査報告（条約第21条(3)）

明　細　書

発明の名称 ：

化合物、異方性色素膜形成用組成物、異方性色素膜及び光学素子

技術分野

[0001] 本発明は、調光素子、液晶素子（ＬＣＤ）及び有機エレクトロルミネッセンス素子（ＯＬＥＤ）の表示素子に具備される偏光膜等に有用な化合物に関する。本発明はまた、異方性色素膜形成用組成物、異方性色素膜及び光学素子に関する。

背景技術

[0002] ＬＣＤでは、表示における旋光性や複屈折性を制御するために、直線偏光膜及び円偏光膜が用いられている。ＯＬＥＤにおいても、明所での外光の反射防止のために円偏光膜が用いられている。

[0003] 従来、このような偏光膜として、例えば、ポリビニルアルコール（ＰＶＡ）を低濃度のヨウ素で染色した偏光膜（ヨウ素－ＰＶＡ偏光膜）を含むものが知られている（特許文献１）。しかし、低濃度としたヨウ素－ＰＶＡ偏光板は、使用環境によっては、ヨウ素が昇華したり、変質したりして、色目が変わってしまうといった問題や、ＰＶＡの延伸が緩和されることによる反りが発生するといった問題がある。

[0004] これに対し、色素を含有した液晶組成物を塗布して形成される異方性色素膜が偏光膜として機能することも知られている（特許文献２）。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特開平１－１０５２０４号公報

特許文献2：特開２０１３－２１０６２４号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] 色素を含有した液晶組成物を塗布して形成される偏光膜においては、薄膜

でも高い光吸収選択性能を有し、３５０ｎｍ～８００ｎｍの波長領域において光抜けの無いことが所望されている。そのために、二色比が良好な色素が複数用いられているが、この場合において、３５０ｎｍ～８００ｎｍの波長領域を網羅的に吸収するよう、用いる色素の吸収波長を調節する必要がある。

[0007] 本発明は、吸収波長に適合して、吸収極大波長の短波長化が可能であり、得られる異方性色素膜が短波長領域でも高い二色性を発現するような化合物、それを含む異方性色素膜形成用組成物、異方性色素膜及び光学素子を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0008] 本発明者らは、特定構造を有する化合物が前記課題を解決できることを見出した。

本発明は、以下の態様を有する。

[0009] ［１］ 下記式（１）で示される化合物。

[0010] [化1]

$$X^{1}\text{-}A^{11}\text{-}N{=}N{-}A^{12}\text{-}N{=}N{-}A^{13}\text{-}N{=}N{-}A^{14}\text{-}N\begin{matrix}R^{11}\\R^{12}\end{matrix} \quad (1)$$

[0011] （式（１）中、

－Ｘ^{1}は１価の有機基を表す。

－Ｒ^{11}は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{12}は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{11}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基は、更に置換基を有していてもよい。

また、－Ｒ^{11}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}の

アルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_2$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

－Ｒ^{11}及び－Ｒ^{12}は、一体となって環を形成してもよく、該環は置換基を有していてもよい。

－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基を表す。）

[0012] ［２］　前記式（１）における－Ｒ^{11}が、１つ以上５つ以下のフッ素原子で置換されたアルキル基である、［１］に記載の化合物。

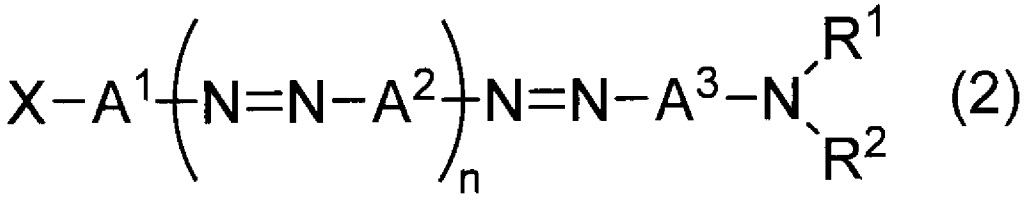
[0013] ［３］　前記式（１）における－Ｒ^{11}が、１つ以上のフッ素原子で置換された、炭素数が１以上１０以下のアルキル基である、［１］に記載の化合物。

[0014] ［４］　前記式（１）における－Ｘ^{1}が、水素原子、－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、又は－Ｓ－Ｒ^{a}（－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}は、それぞれ独立に、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基、環を構成する原子の数が５～１４のシクロアルキル基、又は環を構成する原子の数が５～１４のアリール基を表す。前記アルキル基、シクロアルキル基及びアリール基は、それぞれ置換基を有していてもよい。また、－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}は、一体となって炭素数２～１５の環を形成していてもよく、該環は置換基を有していてもよい。また、前記アルキル基、シクロアルキル基、アリール基及びＲ^{a}とＲ^{b}が一体となって形成される環に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＦ－、－ＣＦ$_2$－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_2$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃ

ｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。）である、［１］～［３］のいずれかに記載の化合物。

[0015] ［５］　下記式（２）で示される化合物と重合性液晶化合物とを含む異方性色素膜形成用組成物。

[0016] [化2]



[0017] （式（２）中、

－Ｘは１価の有機基を表す。

－Ｒ[1]は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ[2]は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ[1]の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ[2]のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基は、更に置換基を有していてもよい。

また、－Ｒ[1]の以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ[2]のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_2$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

－Ｒ[1]及び－Ｒ[2]は、一体となって環を形成してもよく、該環は置換基を有していてもよい。

－Ａ[1]－、－Ａ[2]－及び－Ａ[3]－はそれぞれ独立に、置換基を有していてもよ

い芳香族炭素水素環の２価基を表す。

ｎは１、２又は３を表す。

ｎが２又は３の場合、複数の－Ａ^{2}－は互いに同一でも異なっていてもよい。）

[0018] ［６］　前記式（２）における－Ａ^{3}－が、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基である、［５］に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0019] ［７］　前記式（２）における－Ａ^{2}－が、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基である、［５］又は［６］に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0020] ［８］　前記式（２）における－Ａ^{1}－が、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基である、［５］～［７］のいずれかに記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0021] ［９］　前記式（２）におけるｎが２である、［５］～［８］のいずれかに記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0022] ［１０］　前記式（２）における－Ｒ^{1}が、１つ以上５つ以下のフッ素原子で置換されたアルキル基である、［５］～［９］のいずれかに記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0023] ［１１］　前記式（２）における－Ｒ^{1}が、１つ以上のフッ素原子で置換された、炭素数が１以上１０以下のアルキル基である、［５］～［９］のいずれかに記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0024] ［１２］　前記式（２）におけるＸが、水素原子、－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、又は－Ｓ－Ｒ^{a}（－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}は、それぞれ独立に、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基、環を構成する原子の数が５～１４のシクロアルキル基、又は環を構成する原子の数が５～１４のアリール基を表す。前記アルキル基、シクロアルキル基及びアリール基は、それぞれ置換基を有していてもよい。ま

た、－R^a及び－R^bは、一体となって炭素数２～１５の環を形成していてもよく、該環は置換基を有していてもよい。また、前記アルキル基、シクロアルキル基、アリール基及びR^aとR^bが一体となって形成される環に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＦ－、－CF_2－、－ＣＨＣｌ－、又は－CCl_2－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。）である、［５］～［１１］のいずれかに記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0025] ［１３］　前記重合性液晶化合物が、繰り返し単位構造を有しない低分子重合性液晶化合物である、［５］～［１２］のいずれかに記載の異方性色素膜形成用組成物。

[0026] ［１４］　［５］～［１３］のいずれかに記載の異方性色素膜形成用組成物を用いて形成された異方性色素膜。

[0027] ［１５］　［１４］に記載の異方性色素膜を含む光学素子。

発明の効果

[0028] 本発明の化合物は、吸収波長の調節として吸収極大波長の短波長化が可能であり、また高い二色性を発現するものである。

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、前記化合物を含み、高い二色比を実現できる。

本発明の異方性色素膜形成用組成物を用いた異方性色素膜及び光学素子によれば、優れた光学性能、特に十分な二色比を実現できる。

発明を実施するための形態

[0029] 以下、本発明の実施の形態を具体的に説明する。本発明は、以下の実施の形態に限定されるものではなく、その要旨の範囲内で種々に変更して実施することができる。

[0030] 本発明でいう異方性色素膜とは、異方性色素膜の厚み方向及び任意の直交する面内２方向の立体座標系における合計３方向から選ばれる、任意の２方

向における電磁気的性質に異方性を有する色素膜である。電磁気学的性質としては、例えば、吸収、屈折等の光学的性質、抵抗、容量等の電気的性質が挙げられる。

吸収、屈折等の光学的異方性を有する膜としては、例えば、直線偏光膜、円偏光膜等の偏光膜、位相差膜、導電異方性色素膜が挙げられる。本発明の異方性色素膜は、偏光膜、又は導電異方性色素膜として用いられることが好ましく、偏光膜に用いられることがより好ましい。

[0031] 本発明でいう異方性色素膜形成用組成物は、色素及び重合性液晶化合物を含む。

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、相分離を引き起こさない状態であれば、溶液であっても、液晶であっても、分散状態であってもよい。異方性色素膜形成用組成物としては、基材への塗布が容易である観点から、溶液であることが好ましい。一方、異方性色素膜形成用組成物から溶剤を除いた固形分成分は、後述のように基板上に配向させる観点から、任意の温度で液晶相の状態であることが好ましい。

[0032] 本発明において液晶相の状態であるとは、具体的には、「液晶の基礎と応用」（松本正一、角田市良著；１９９１年）の１～１６ページに記載されているように、液体と結晶の双方又は中間の性質を示す液晶状態であり、ネマティック相、スメクチック相、コレステリック相、又はディスコティック相であることを言う。

[0033] 本発明において色素とは、可視光領域（３５０ｎｍ～８００ｎｍ）の波長の少なくとも一部を吸収する物質又は化合物である。本発明に用いることができる色素としては、二色性色素が挙げられる。

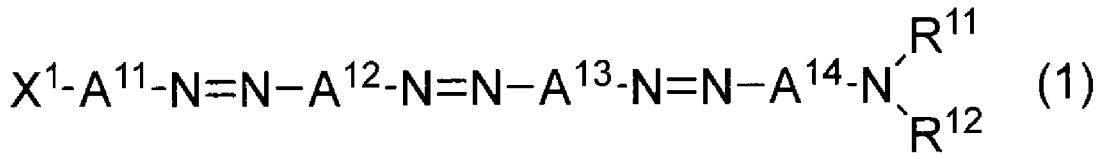
二色性色素とは、分子の長軸方向における吸光度と、短軸方向における吸光度とが異なる性質を有する色素を言う。

色素は、液晶性を有する色素であってもよいし、液晶性を有さなくてもよい。液晶性を有するとは、任意の温度で液晶相を発現することを言う。

[0034] ［化合物］

本発明の化合物は、下記式（１）で示される化合物である。

[0035] [化3]



$$X^1\text{-}A^{11}\text{-}N{=}N{-}A^{12}\text{-}N{=}N{-}A^{13}\text{-}N{=}N{-}A^{14}\text{-}N\begin{matrix}R^{11}\\R^{12}\end{matrix} \quad (1)$$

[0036] 式（１）中、

－Ｘ^{1}は１価の有機基を表す。

－Ｒ^{11}は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{12}は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{11}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基は、更に置換基を有していてもよい。

また、－Ｒ^{11}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_{2}$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

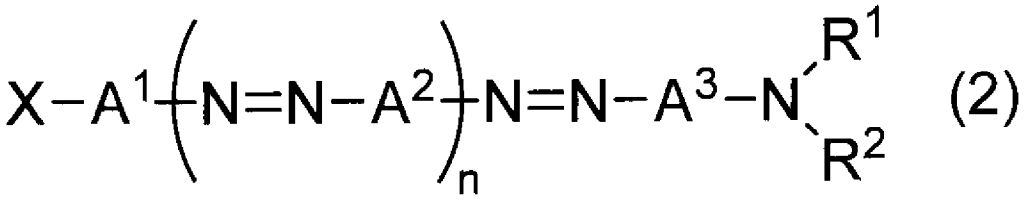
－Ｒ^{11}及び－Ｒ^{12}は、一体となって環を形成してもよく、該環は置換基を有していてもよい。

－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基を表す。

[0037] 本発明の異方性色素膜形成用組成物は、下記式（２）で示される化合物と重合性液晶化合物とを含む。

[0038]

[化4]



[0039] 式（２）中、

－Ｘは１価の有機基を表す。

－Ｒ[1]は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ[2]は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ[1]の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ[2]のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基は、更に置換基を有していてもよい。

また、－Ｒ[1]の以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ[2]のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_2$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

－Ｒ[1]及び－Ｒ[2]は、一体となって環を形成してもよく、該環は置換基を有していてもよい。

－Ａ[1]－、－Ａ[2]－及び－Ａ[3]－はそれぞれ独立に、置換基を有していてもよい芳香族炭素水素環の２価基を表す。

ｎは１、２又は３を表す。

ｎが２又は３の場合、複数の－Ａ[2]－は互いに同一でも異なっていてもよい。

[0040] 以下において、式（１）で示される化合物を「化合物（１）」と称するこ

とがある。式（２）で示される化合物を「化合物（２）」と称することがある。また、化合物（１）と化合物（２）をまとめて「本発明の化合物」と称することがある。

[0041] （－Ｘ^{1}、－Ｘ）

式（１）において－Ｘ^{1}は１価の有機基を表す。

[0042] 式（２）において－Ｘは１価の有機基を表す。

[0043] －Ｘ^{1}、－Ｘにおける１価の有機基としては、例えば、水素原子、ヒドロキシ基、アミノ基、シアノ基、カルバモイル基、ニトロ基、ハロゲン原子、－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｓ－Ｒ^{a}が挙げられる。高い二色比が得られる傾向から、水素原子、－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｓ－Ｒ^{a}が好ましく、－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}がより好ましい。

[0044] ここで、－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}は、それぞれ独立に、分岐を有していてもよい炭素数１～１５、好ましくは１～１０、より好ましくは１～６のアルキル基、環を構成する原子の数が５～１４、好ましくは５～１０のシクロアルキル基、又は環を構成する原子の数が５～１４、好ましくは５～１０のアリール基を表す。

前記アルキル基、シクロアルキル基及びアリール基は、それぞれ置換基を有していてもよい。

また、－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}は、一体となって炭素数２～１５、好ましくは２～１０の環を形成していてもよく、該環は置換基を有していてもよい。

[0045] －Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}における、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基としては、例えば、ｎ－プロピル基、ｎ－ブチル基、ｎ－ペンチル基

、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、ｎ－ノニル基、１－メチルエチル基、１，１－ジメチルエチル基、１－メチルプロピル基、２－メチルプロピル基、１，２－ジメチルプロピル基、２，２－ジメチルプロピル基、１，２，２－トリメチルプロピル基、１－メチルブチル基、２－メチルブチル基、３－メチルブチル基、３，３－ジメチルブチル基、２，３－ジメチルブチル基、１，３－ジメチルブチル基、１，３，３－トリメチルブチル基、２，３，３－トリメチルブチル基、２，２，３－トリメチルブチル基、１，２，２－トリメチルブチル基、４－メチルペンチル基、３－メチルペンチル基、２－メチルペンチル基、１－メチルペンチル基、４，４－ジメチルペンチル基、３，３－ジメチルペンチル基、２，２－ジメチルペンチル基、３，４－ジメチルペンチル基、２，４－ジメチルペンチル基、１，４－ジメチルペンチル基、３，４，４－トリメチルペンチル基、２，４，４－トリメチルペンチル基、１，４，４－トリメチルペンチル基、３，３，４－トリメチルペンチル基、２，３，３－トリメチルペンチル基、１，３，３－トリメチルペンチル基、２，２，４－トリメチルペンチル基、２，２，３－トリメチルペンチル基、１，２，２－トリメチルペンチル基、２，３，４－トリメチルペンチル基、５－メチルヘキシル基、４－メチルヘキシル基、３－メチルヘキシル基、２－メチルヘキシル基、１－メチルヘキシル基、５，５－ジメチルヘキシル基、４，４－ジメチルヘキシル基、３，３－ジメチルヘキシル基、２，２－ジメチルヘキシル基、４，５－ジメチルヘキシル基、３，５－ジメチルヘキシル基、２，５－ジメチルヘキシル基、１，５－ジメチルヘキシル基、１，４－ジメチルヘキシル基、４，５，５－トリメチルヘキシル基、３，５，５－トリメチルヘキシル基、２，５，５－トリメチルヘキシル基、１，５，５－トリメチルヘキシル基、６－メチルヘプチル基、５－メチルヘプチル基、６，６－ジメチルヘプチル基、５，６－ジメチルヘプチル基、４，６－ジメチルヘプチル基、３，６－ジメチルヘプチル基、２，６－ジメチルヘプチル基、１，６－ジメチルヘプチル基、６－メチルオクチル基、３－メチルオクチル基、１－メチルオクチル基、１－メチルノニル基が挙

げられる。本発明で用いる重合性液晶化合物との分子配向が良好になる観点から、ｎ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、２－メチルプロピル基、３－メチルブチル基、３，３－ジメチルブチル基、２，３，３－トリメチルブチル基、４－メチルペンチル基、３－メチルペンチル基、２－メチルペンチル基、４，４－ジメチルペンチル基、３，３－ジメチルペンチル基、２，４－ジメチルペンチル基、３，４，４－トリメチルペンチル基、２，４，４－トリメチルペンチル基、３，３，４－トリメチルペンチル基、２，３，３－トリメチルペンチル基、５－メチルヘキシル基、４－メチルヘキシル基、３－メチルヘキシル基、２－メチルヘキシル基、５，５－ジメチルヘキシル基、４，４－ジメチルヘキシル基、３，３－ジメチルヘキシル基、３，５，５－トリメチルヘキシル基、５－メチルヘプチル基、６－メチルオクチル基、３－メチルオクチル基、１－メチルオクチル基、１－メチルノニル基が好ましい。

[0046] －Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}における、環を構成する原子の数が５～１４のシクロアルキル基におけるシクロアルカン環としては、例えば、シクロプロパン環、シクロブタン環、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、シクロヘプタン環、シクロオクタン環、シクロヘキセン環、ノルボルナン環、ボルナン環、アダマンタン環、テトラヒドロナフタレン環、ビシクロ［２．２．２］オクタン環、４－メチルシクロヘキサン環、４－エチルシクロヘキサン環、４－プロピルシクロヘキサン環、４－ブチルシクロヘキサン環が挙げられる。

[0047] －Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}における、環を構成する原子の数が５～１４のアリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基が挙げられる。

[0048] －Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}が一体となって炭素数２～１５の環を形成する場合、該環としては、例えば、シクロプロパン環、シクロブタン環、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、シクロヘプタン環、シクロオクタン環、シクロヘキセン環、ノルボルナン環、ボルナン環、アダマンタン環、テトラヒドロナフタレン環、ビシクロ［２．２．２］オクタン環が挙げられる。

[0049] 前記分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基、前記環を構成

する原子の数が５～１４のシクロアルキル基、前記環を構成する原子の数が５～１４のアリール基、前記－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}が一体となって形成した炭素数２～１５の環に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＦ－、－ＣＦ$_{2}$－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_{2}$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

[0050] －Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}における、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基に許容される置換基としては、例えば、－ＯＨ、－Ｏ－Ｒ^{f}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{f}、－ＮＨ$_{2}$、－ＮＨ－Ｒ^{f}、－Ｎ（－Ｒ^{g}）－Ｒ^{f}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{f}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{f}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ$_{2}$、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{f}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{g}）－Ｒ^{f}、－ＳＨ、－Ｓ－Ｒ^{f}、スルファモイル基、カルボキシ基、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基などの重合性基が挙げられる。

－Ｒ^{f}及び－Ｒ^{g}は、それぞれ独立に、炭素数１～１５、好ましくは１～１０の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。

前記－Ｒ^{f}及び－Ｒ^{g}である炭素数１～１５の直鎖状又は分枝状のアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｎ（－Ｒ^{h}）－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＦ－、－ＣＦ$_{2}$－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_{2}$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。ここで、－Ｒ^{h}は、炭素数１～６の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。

[0051] －Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}における分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基に許容される置換基としては、－Ｏ－Ｒ^{f}が好ましい。－Ｏ－Ｒ^{f}として

は、例えば、メトキシ基、エトキシ基、ｎ－プロポキシ基、ｎ－ブトキシ基、ｎ－ペントキシ基、ｎ－ヘキソキシ基、ｎ－ヘプトキシ基、ｎ－オクトキシ基、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基が挙げられる。

[0052] －Ｒ^{a}及びＲ^{b}における環を構成する原子の数が５～１４のシクロアルキル基、並びに環を構成する原子の数が５～１４のアリール基に許容される置換基としては、例えば、－Ｒ^{i}、－ＯＨ、－Ｏ－Ｒ^{i}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{i}、－ＮＨ$_{2}$、－ＮＨ－Ｒ^{i}、－Ｎ（－Ｒ^{j}）－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ$_{2}$、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{j}）－Ｒ^{i}、－ＳＨ、－Ｓ－Ｒ^{i}、トリフルオロメチル基、スルファモイル基、カルボキシ基、シアノ基、ニトロ基、ハロゲンが挙げられる。ここで、－Ｒ^{i}及び－Ｒ^{j}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０、好ましくは１～５の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。

－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}における環を構成する原子の数が５～１４のシクロアルキル基、並びに環を構成する原子の数が５～１４のアリール基に許容される置換基としては、－Ｒ^{i}、－Ｏ－Ｒ^{i}が好ましい。－Ｒ^{i}、－Ｏ－Ｒ^{i}としては、例えば、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、ｎ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、２－エチルヘキシル基、メトキシ基、エトキシ基、ｎ－プロポキシ基、ｎ－ブトキシ基、ｎ－ペントキシ基、ｎ－ヘキソキシ基、ｎ－ヘプトキシ基、ｎ－オクトキシ基、２－エチルヘキシルオキシ基、５，５－ジメチル－３－メチルヘキシルオキシ基が挙げられる。

[0053] －Ｒ^{a}とＲ^{b}が一体となって炭素数２～１５の環を形成する場合、該環に許容される置換基としては、例えば、－Ｒ^{i}、－ＯＨ、－Ｏ－Ｒ^{i}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{i}、－ＮＨ$_{2}$、－ＮＨ－Ｒ^{i}、－Ｎ（－Ｒ^{j}）－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ$_{2}$、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{i}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{j}）－Ｒ^{i}、－ＳＨ、－Ｓ－Ｒ^{i}、トリフルオロメチル基、スルファモイル基、カルボキシ基、シアノ基、ニトロ基、ハロゲ

ンが挙げられる。ここで、－Ｒ^{i}及び－Ｒ^{j}は、それぞれ独立に、炭素数１～１０、好ましくは１～５の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。

－Ｒ^{a}と－Ｒ^{b}が一体となって炭素数２～１５の環を形成する場合、該環に許容される置換基としては、－Ｒ^{i}、－Ｏ－Ｒ^{i}が好ましい。－Ｒ^{i}、－Ｏ－Ｒ^{i}としては、例えば、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、ｎ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、２－エチルヘキシル基、メトキシ基、エトキシ基、ｎ－プロポキシ基、ｎ－ブトキシ基、ｎ－ペントキシ基、ｎ－ヘキソキシ基、ｎ－ヘプトキシ基、ｎ－オクトキシ基、２－エチルヘキシルオキシ基、５，５－ジメチル－３－メチルヘキシルオキシ基が挙げられる。

[0054] －Ｘ^{1}、－Ｘにおける１価の有機基としては、重合性液晶化合物との分子配向を良好にさせる観点の場合には、重合性基を有していない方が好ましい。一方、－Ｘ^{1}、－Ｘにおける１価の有機基としては、異方性色素膜の機械強度を向上させる観点の場合には、重合性基を有することが好ましい。

[0055] （－Ｒ^{11}、－Ｒ^{12}、－Ｒ^{1}、－Ｒ^{2}）

式（１）において、－Ｒ^{11}は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{12}は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{11}及び－Ｒ^{12}は、一体となって環を形成してもよい。

[0056] 式（２）において、－Ｒ^{1}は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{2}は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{1}及び－Ｒ^{2}は、一体となって環を形成してもよく、該環は置換基を有していてもよい。

[0057] －Ｒ^{11}、－Ｒ^{1}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基の炭素数は、本発明で用いる重合性液晶化合物との分子配向性が良好となる観点から、

１以上１０以下が好ましく、１以上６以下がより好ましく、２以上４以下がさらに好ましい。該アルキル基は分岐を有していてもよく、直鎖であってもよく、環状のシクロアルキル基であってもよい。

また、溶解性の観点から、該アルキル基が有するフッ素原子数は５つ以下が好ましく、３つ以下がより好ましく、２つ以下がさらに好ましい。

[0058] －Ｒ^{11}、－Ｒ^{1}としては、例えば、１－フルオロメチル基、１－フルオロエチル基、２－フルオロエチル基、１，２－ジフルオロエチル基、２，２－ジフルオロエチル基、２，２，２－トリフルオロエチル基、１，２，２，２－テトラフルオロエチル基、１，１，２，２，２－ペンタフルオロエチル基、１－フルオロプロピル基、２－フルオロプロピル基、３－フルオロプロピル基、２，２－ジフルオロプロピル基、３，３－ジフルオロプロピル基、３，３，３－トリフルオロプロピル基、２，３，３，３－テトラフルオロプロピル基、２，２，３，３，３－ペンタフルオロプロピル基、１－フルオロブチル基、２－フルオロブチル基、３－フルオロブチル基、４－フルオロブチル基、１，１－ジフルオロブチル基、２，２－ジフルオロブチル基、３，３－ジフルオロブチル基、４，４－ジフルオロブチル基、４，４，４－トリフルオロブチル基、３，４，４，４－テトラフルオロブチル基、３，３，４，４，４－ペンタフルオロブチル基、１－フルオロペンチル基、２－フルオロペンチル基、３－フルオロペンチル基、４－フルオロペンチル基、５－フルオロペンチル基、１，１－ジフルオロペンチル基、２，２－ジフルオロペンチル基、３，３－ジフルオロペンチル基、４，４－ジフルオロペンチル基、５，５－ジフルオロペンチル基、５，５，５－トリフルオロペンチル基、４，５，５，５－テトラリフルオロペンチル基、４，４，５，５，５－ペンタフルオロペンチル基、１－フルオロヘキシル基、２－フルオロヘキシル基、３－フルオロヘキシル基、４－フルオロヘキシル基、５－フルオロヘキシル基、６－フルオロヘキシル基、６，６－ジフルオロヘキシル基、６，６，６－トリフルオロヘキシル基、２－フルオロ－１－メチルエチル基、２，２－ジフルオロ－１－メチルエチル基、２，２，２－トリフルオロ－１－メチルエ

チル基、２－フルオロ－１，１－ジメチルエチル基、２，２－ジフルオロ－１，１－ジメチルエチル基、２，２，２－トリフルオロ－１，１－ジメチルエチル基、３－フルオロ－１－メチルプロピル基、３，３－ジフルオロ－１－メチルプロピル基、３，３，３－トリフルオロ－１－メチルプロピル基、３－フルオロ－２－メチルプロピル基、３，３－ジフルオロ－２－メチルプロピル基、３，３，３－トリフルオロ－２－メチルプロピル基、３－フルオロ－１，２－ジメチルプロピル基、３，３－ジフルオロ－１，２－ジメチルプロピル基、３，３，３－トリフルオロ－１，２－ジメチルプロピル基、３－フルオロ－２，２－ジメチルプロピル基、３，３－ジフルオロ－２，２－ジメチルプロピル基、３，３，３－トリフルオロ－２，２－ジメチルプロピル基、３－フルオロ－１，２，２－トリメチルプロピル基、３，３－ジフルオロ－１，２，２－トリメチルプロピル基、３，３，３－トリフルオロ－１，２，２－トリメチルプロピル基、２－フルオロシクロヘキシル基、３－フルオロシクロヘキシル基、４－フルオロシクロヘキシル基、２－フルオロ－４－メチルシクロヘキシル基、３－フルオロ－４－メチルシクロヘキシル基、２－フルオロ－４－エチルシクロヘキシル基、３－フルオロ－４－エチルシクロヘキシル基、２－フルオロ－４－プロピルシクロヘキシル基、３－フルオロ－４－プロピルシクロヘキシル基、２－フルオロ－４－ブチルシクロヘキシル基、３－フルオロ－４－ブチルシクロヘキシル基が挙げられる。なかでも、重合性液晶化合物との分子配向性と溶解性のバランスを取る観点から、２－フルオロエチル基、２，２－ジフルオロエチル基、２，２，２－トリフルオロエチル基、３－フルオロプロピル基、３，３－ジフルオロプロピル基、３，３，３－トリフルオロプロピル基、４－フルオロブチル基、４，４－ジフルオロブチル基、４，４，４－トリフルオロブチル基が好ましく、２－フルオロエチル基、２，２－ジフルオロエチル基、２，２，２－トリフルオロエチル基がより好ましい。

[0059] －R^{12}、－R^{2}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基の炭素数は、本発明で用いる重合性液晶化合物との分子配向性が良好とな

る観点から、１以上１０以下が好ましく、１以上６以下がより好ましく、２以上４以下がさらに好ましい。該アルキル基は分岐を有していてもよく、直鎖であってもよく、環状のシクロアルキル基であってもよい。また、溶解性の観点から、フッ素原子で置換されたアルキル基が有するフッ素原子数は５つ以下が好ましく、３つ以下がより好ましく、２つ以下がさらに好ましい。

[0060] －R^{12}、－R^{2}のアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、ｎ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、１－メチルエチル基、１，１－ジメチルエチル基、１－メチルプロピル基、２－メチルプロピル基、１，２－ジメチルプロピル基、２，２－ジメチルプロピル基、１，２，２－トリメチルプロピル基、１－メチルブチル基、２－メチルブチル基、３－メチルブチル基、３，３－ジメチルブチル基、２，３－ジメチルブチル基、１，３－ジメチルブチル基、１，３，３－トリメチルブチル基、２，３，３－トリメチルブチル基、２，２，３－トリメチルブチル基、１，２，２－トリメチルブチル基、１，１，２－トリメチルブチル基、１，１，３－トリメチルブチル基、４－メチルペンチル基、３－メチルペンチル基、２－メチルペンチル基、１－メチルペンチル基、４，４－ジメチルペンチル基、３，３－ジメチルペンチル基、２，２－ジメチルペンチル基、３，４－ジメチルペンチル基、２，４－ジメチルペンチル基、１，４－ジメチルペンチル基、３，４，４－トリメチルペンチル基、２，４，４－トリメチルペンチル基、１，４，４－トリメチルペンチル基、３，３，４－トリメチルペンチル基、２，３，３－トリメチルペンチル基、１，３，３－トリメチルペンチル基、２，２，４－トリメチルペンチル基、２，２，３－トリメチルペンチル基、１，２，２－トリメチルペンチル基、１，１，２－トリメチルペンチル基、１，１，３－トリメチルペンチル基、１，１，４－トリメチルペンチル基、２，３，４－トリメチルペンチル基、１，２，３－トリメチルペンチル基、１，３，４－トリメチルペンチル基、５－メチルヘキシル基、４－メチルヘキシル基、３－メチルヘキシル基、２－メチルヘキシル基、１－メチルヘキシル基、５，５－ジメチルヘキシル基、４，４－ジメチルヘキシル

基、３，３－ジメチルヘキシル基、２，２－ジメチルヘキシル基、４，５－ジメチルヘキシル基、３，５－ジメチルヘキシル基、２，５－ジメチルヘキシル基、１，５－ジメチルヘキシル基、１，４－ジメチルヘキシル基、４，５，５－トリメチルヘキシル基、３，５，５－トリメチルヘキシル基、２，５，５－トリメチルヘキシル基、１，５，５－トリメチルヘキシル基、６－メチルヘプチル基、５－メチルヘプチル基、６，６－ジメチルヘプチル基、５，６－ジメチルヘプチル基、４，６－ジメチルヘプチル基、３，６－ジメチルヘプチル基、２，６－ジメチルヘプチル基、１，６－ジメチルヘプチル基、７－メチルオクチル基、６－メチルオクチル基、５－メチルオクチル基、４－メチルオクチル基、３－メチルオクチル基、２－メチルオクチル基、１－メチルオクチル基、８－メチルノニル基、７－メチルノニル基、６－メチルノニル基、５－メチルノニル基、４－メチルノニル基、３－メチルノニル基、２－メチルノニル基、１－メチルノニル基、シクロヘキシル基、４－メチルシクロヘキシル基、４－エチルシクロヘキシル基、４－プロピルシクロヘキシル基、４－ブチルシクロヘキシル基が挙げられる。

[0061] －R^{12}、－R^{2}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基としては、－R^{11}、－R^{1}として例示した１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基が挙げられ、好ましいものも同じである。

[0062] －R^{12}、－R^{2}としては、重合性液晶化合物との分子配向性が良好となる観点から、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、ｎ－ブチル基、２－フルオロエチル基、２，２－ジフルオロエチル基、２，２，２－トリフルオロエチル基、３－フルオロプロピル基、３，３－ジフルオロプロピル基、３，３，３－トリフルオロプロピル基、４－フルオロブチル基、４，４－ジフルオロブチル基、４，４，４－トリフルオロブチル基が好ましい。

[0063] －R^{11}及び－R^{12}、或いは－R^{1}及び－R^{2}が一体となって形成する環としては、例えば、２－フルオロアジリジン環、２，２－ジフルオロアジリジン環、２－フルオロアゼチジン環、２，２－ジフルオロアゼチジン環、３－フルオロアゼチジン環、３，３－ジフルオロアゼチジン環、２－フルオロピロ

リジン環、２，２－ジフルオロピロリジン環、３－フルオロピロリジン環、３，３－フルオロピロリジン環、３，４－ジフルオロピロリジン環、２，５－ジフルオロピロリジン環、３，３，４，４－テトラフルオロピロリジン環、２－フルオロピペリジン環、２，２－ジフルオロピペリジン環、３－フルオロピペリジン環、３，３－ジフルオロピペリジン環、４，４－ジフルオロピペリジン環、２，６－ジフルオロピペリジン環、３，５－ジフルオロピペリジン環、３，３，５，５－テトラフルオロピロリジンが挙げられる。なかでも、重合性液晶化合物との分子配向性が良好となる観点から、２，２－ジフルオロピロリジン環、３，３，４，４－テトラフルオロピロリジン環、３，３－ジフルオロピペリジン環、３，３，５，５－テトラフルオロピロリジン環が好ましい。一方、溶解性の観点からは、－Ｒ^{11}及び－Ｒ^{12}、－Ｒ^{1}及び－Ｒ^{2}は一体となって環を形成しない方が好ましい。

[0064] －Ｒ^{11}、－Ｒ^{12}、－Ｒ^{1}、－Ｒ^{2}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基において、フッ素原子はアルキル基末端炭素原子において置換されていることが、溶解性の観点から好ましい。また、－Ｒ^{11}と－Ｒ^{12}の置換フッ素原子数の合計及び－Ｒ^{1}と－Ｒ^{2}の置換フッ素原子数の合計はそれぞれ１つ以上６つ以下が好ましく、１つ以上４つ以下がより好ましい。前記範囲となることで、溶解性が良好な傾向となる。

[0065] －Ｒ^{11}、－Ｒ^{1}の以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}、－Ｒ^{2}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_2$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

[0066] －Ｒ^{11}、－Ｒ^{1}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}、－Ｒ^{2}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基は、それぞれ置換基を有していてもよい。許容される置換基としては、例えば、－Ｏ

Ｈ、－Ｏ－Ｒ^{p}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{p}、－ＮＨ$_2$、－ＮＨ－Ｒ^{p}、－Ｎ（－Ｒ^{q}）－Ｒ^{p}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{p}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{p}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ$_2$、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{p}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{q}）－Ｒ^{p}、－ＳＨ、－Ｓ－Ｒ^{p}、スルファモイル基、カルボキシ基、シアノ基、ニトロ基、フッ素原子以外のハロゲン、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基などの重合性基が挙げられる。

－Ｒ^{p}及び－Ｒ^{q}は、それぞれ独立に、炭素数１～１５、好ましくは１～１０の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。

[0067] （－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－、－Ａ^{14}－）

式（１）において－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基を表す。

[0068] －Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－の１，４－フェニレン基に許容される置換基としては、例えば、－Ｒ^{A}、－ＯＨ、－Ｏ－Ｒ^{A}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{A}、－ＮＨ$_2$、－ＮＨ－Ｒ^{A}、－Ｎ（－Ｒ^{B}）－Ｒ^{A}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{A}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{A}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ$_2$、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{A}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{B}）－Ｒ^{A}、－ＳＨ、－Ｓ－Ｒ^{A}、トリフルオロメチル基、スルファモイル基、カルボキシ基、シアノ基、ニトロ基、ハロゲンが挙げられる。ここで、－Ｒ^{A}及び－Ｒ^{B}は、それぞれ独立に、炭素数１～１５の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。－Ｒ^{A}及び－Ｒ^{B}の炭素数としては、本発明で用いる重合性液晶化合物との分子配向が良好になる観点で、１以上１２以下が好ましく、１以上９以下がさらに好ましい。なお、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基には、ナフタレン環の２価基（ナフチレン基）は含まれない。

[0069] －Ｒ^{A}及び－Ｒ^{B}における直鎖状若しくは分枝状のアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、エーテル性酸素原子、チオエーテル性硫黄原子、アミン性窒素原子（－ＮＨ－、－Ｎ（Ｒ^{z}）－：ここで、Ｒ^{z}は、炭素数１～６、好ましくは炭素数１～４の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。）、カルボニル基、エステル結合、アミド結合、－ＣＨＦ－、－ＣＦ$_2$－、

－ＣＨＣｌ－、－ＣＣｌ$_2$－によって置き換えられた構造とされていてもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基が置換していてもよい。

[0070] －Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－の１，４－フェニレン基に許容される置換基としては、化合物（１）の分子配向が良好になる観点から、－Ｒ^{A}、－Ｏ－Ｒ^{A}、トリフルオロメチル基、フルオロ基が好ましい。－Ｒ^{A}としては、例えば、ｎ－プロピル基、ｎ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、５，５－ジメチル－３－メチルヘキシル基が挙げられる。

[0071] －Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－としては、二色比の観点からは、置換基を有しない１，４－フェニレン基が好ましい。

[0072] （－Ａ^{1}－、－Ａ^{2}－、－Ａ^{3}－）

式（２）において－Ａ^{1}－、－Ａ^{2}－及び－Ａ^{3}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい芳香族炭素水素環の２価基を表す。

[0073] －Ａ^{1}－、－Ａ^{2}－、－Ａ^{3}－の芳香族炭化水素環としては、例えば、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、アセナフテン環、フルオランテン環、フルオレン環が挙げられる。

[0074] －Ａ^{1}－、－Ａ^{2}－、－Ａ^{3}－の芳香族炭化水素環の２価基としては、化合物（２）の吸収遷移モーメントが色素の長軸方向に一致する傾向となり、二色比を高くできることから、置換基を有していてもよい、ベンゼン環の２価基（フェニレン基）、ナフタレン環の２価基（ナフチレン基）が好ましく、ベンゼン環の２価基（フェニレン基）がより好ましい。特に、１，４－フェニレン基、１，４－ナフチレン基、２，６－ナフチレン基がより好ましく、１，４－フェニレン基がさらに好ましく、置換基を有さない１，４－フェニレン基が特に好ましい。上記であることで、化合物（２）の吸収の遷移モーメントが化合物（２）の長軸方向に一致する傾向となり、二色比を高くできる。なお、置換基を有していてもよいベンゼン環の２価基（フェニレン基）に

は、ナフタレン環の２価基（ナフチレン基）は含まれない。

[0075] －Ａ^{1}－、－Ａ^{2}－、－Ａ^{3}－の芳香族炭化水素環の２価基に許容される置換基としては、上述した－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－の１，４－フェニレン基に許容される置換基が挙げられ、好ましい置換基も－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－と同様である。

[0076] （ｎ）

式（２）において、ｎは１、２又は３を表す。

ｎが２又は３の場合、複数の－Ａ^{2}－は互いに同一でも異なっていてもよい。

本発明における重合性液晶化合物との分子配向性を良好にすること、また、溶解性の観点から、ｎは１又は２であることが好ましく、２であることがより好ましい。

[0077] （－Ｎ＝Ｎ－）

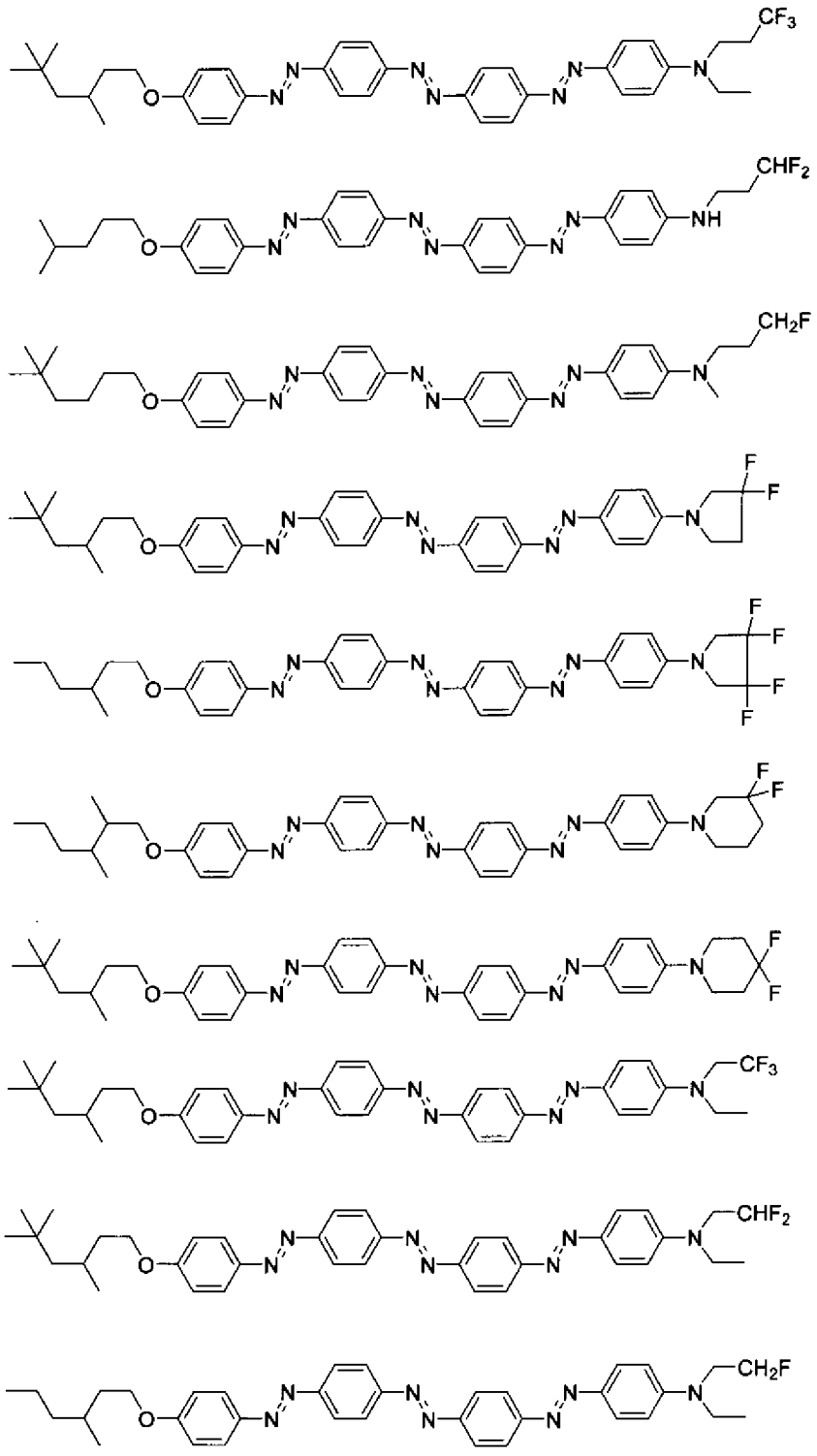
式（１）及び（２）中の－Ｎ＝Ｎ－は、トランス型であることが本発明の化合物の直線性を高める観点で好ましい。

[0078] （本発明の化合物の具体例）

本発明の化合物の具体例としては、以下の化合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

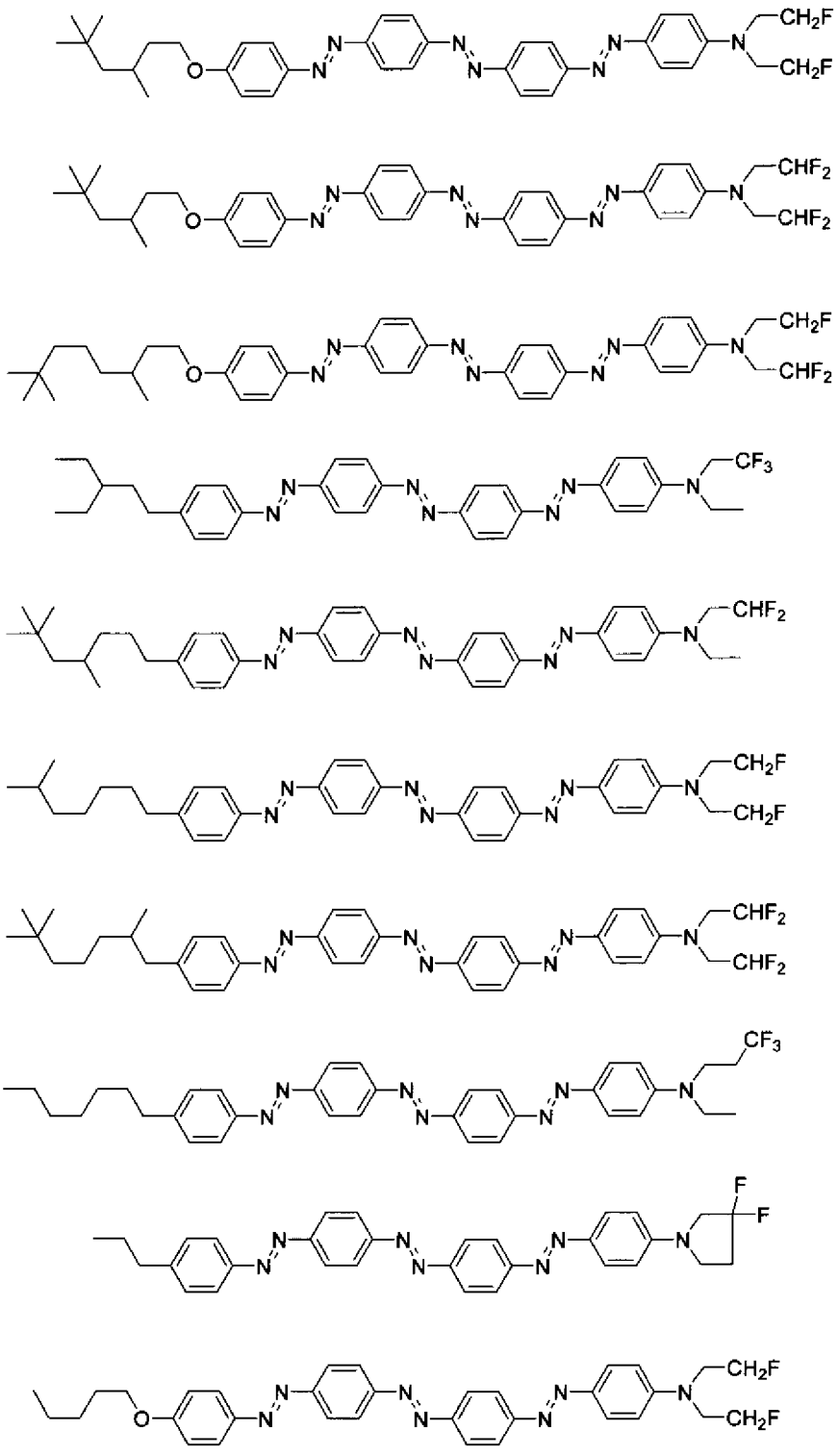
[0079]

[化5]



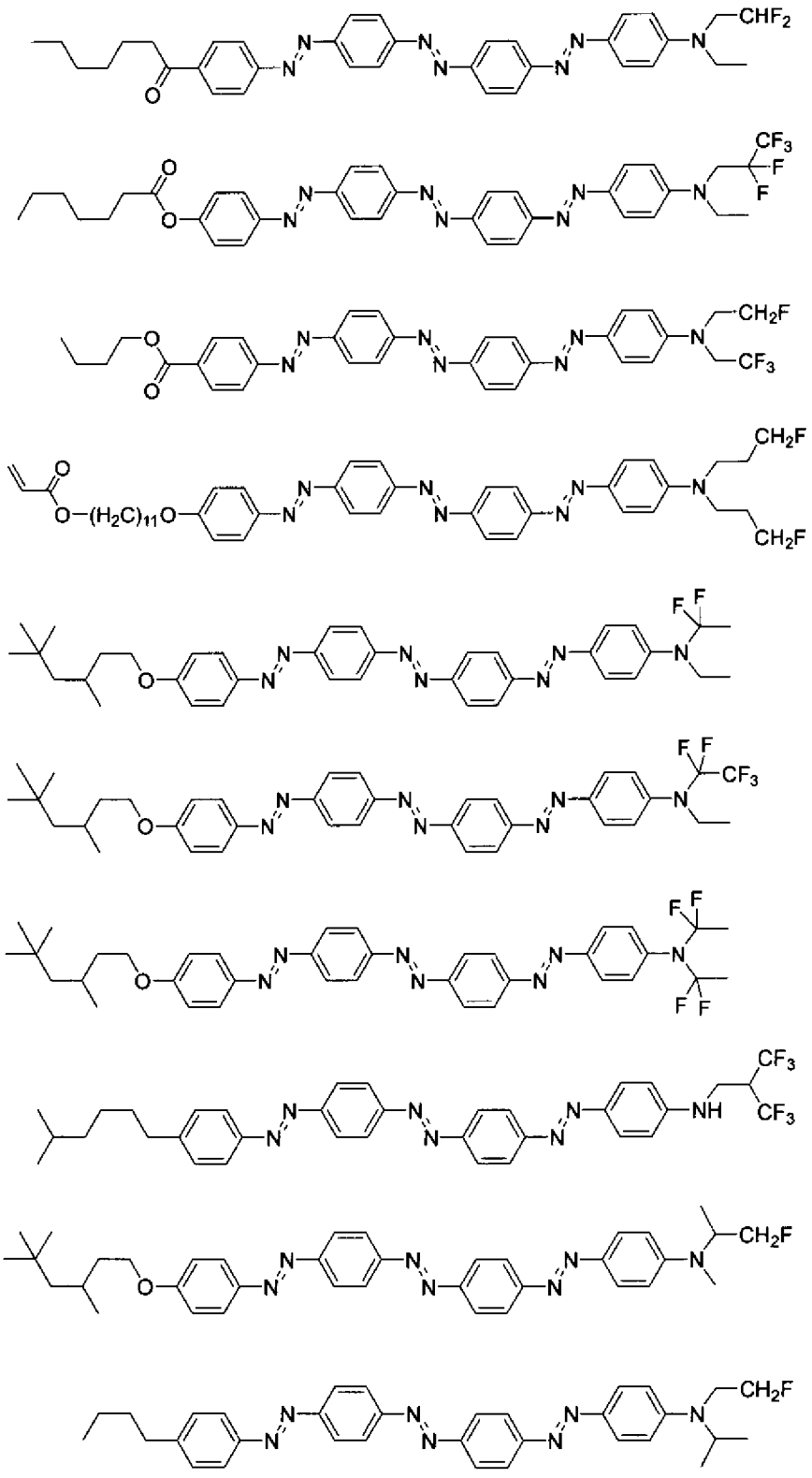
[0080]

[化6]



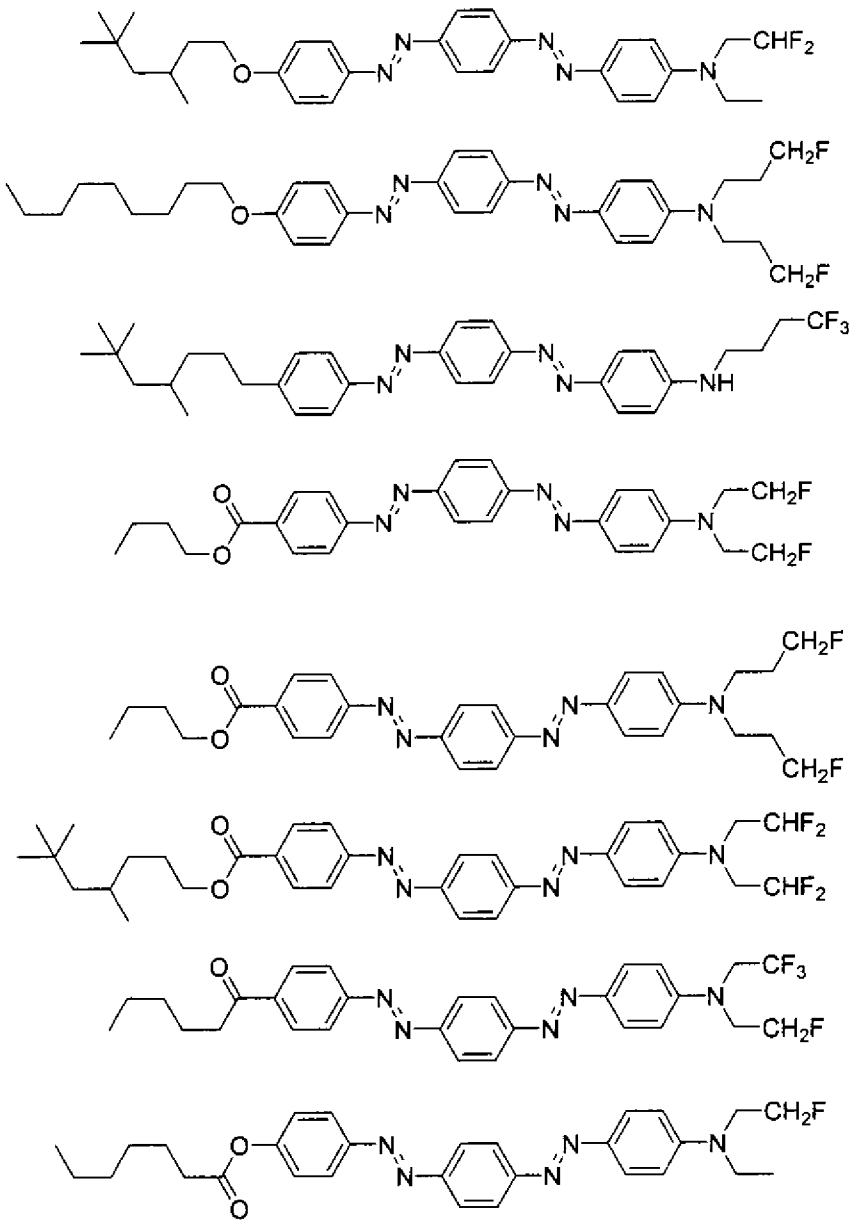
[0081]

[化7]



[0082]

[化8]



[0083] （吸収特性）

本発明の化合物は、後述する方法で作成した異方性色素膜中において、３５０～８００ｎｍの波長範囲に極大吸収（λｍａｘ１）を有していてもよく、好ましくは３８０～６００ｎｍの波長範囲に極大吸収を有しており、より好ましくは４００～５６０ｎｍの波長範囲に有しており、さらに好ましくは４２０～５５０ｎｍの波長範囲に有している。この波長範囲に極大吸収（λ

ｍａｘ１）を有することで、より長波長側に極大吸収を有する色素と組み合わせた場合、３５０～８００ｎｍの波長範囲を網羅的に吸収することが可能となる傾向にある。

[0084] 本発明の化合物は、溶剤に溶解して測定した極大吸収（λｍａｘ２）に比べて、異方性色素膜中における極大吸収（上述のλｍａｘ１）が長波長に存在していることが好ましい。この長波長シフトは、本発明の化合物が、重合性液晶化合物及び／又は重合性液晶化合物に基づく単位を有する重合物中に分散することによって発現する現象であり、本発明の化合物と、重合性液晶化合物及び／又は重合性液晶化合物に基づく単位を有する重合物とが強く分子間相互作用していることを示している。長波長シフトとは、吸収極大の差分（λｍａｘ１－λｍａｘ２）が正の値となることを意味し、その差は、１０ｎｍ以上であることが好ましく、２０ｎｍ以上であることがより好ましく、３０ｎｍ以上であることがさらに好ましい。

[0085]（溶解度）

本発明の化合物の溶解度は特に限定されないが、シクロペンタノンに対する溶解度が０．４質量％以上であることが好ましく、０．９質量％以上であることがより好ましく、１．５質量％以上であることがさらに好ましい。溶解度が上記下限以上であることで、良好な塗膜性能が得られる傾向にある。溶解度の上限は特に限定されないが、５０質量％以下である。

[0086]［異方性色素膜形成用組成物］

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、色素と重合性液晶化合物を含むものであり、前記色素として少なくとも化合物（２）を含む。

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、化合物（２）の１種のみを含むものであってもよく、２種以上を含むものであってもよい。

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、組成物中での析出を抑制する観点から、色素として、式（２）中の－Ａ^{1}－、－Ａ^{2}－、－Ａ^{3}－が同じである本発明の化合物を１種のみ含むものが好ましく、本発明の化合物を１種のみ含むものがより好ましい。

[0087] 本発明の異方性色素膜形成用組成物は、色素として、化合物（２）を含むが、化合物（２）以外の色素を含んでいてもよい。

本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる化合物（２）以外の色素としては、例えば、アゾ系色素、キノン系色素（ナフトキノン系色素、アントラキノン系色素等を含む。）、スチルベン系色素、シアニン系色素、フタロシアニン系色素、インジゴ系色素、縮合多環系色素（ペリレン系色素、オキサジン系色素、アクリジン系色素等を含む。）が挙げられる。

本発明の異方性色素膜形成用組成物には、化合物（２）以外の色素の１種のみが単独で含まれていてもよく、２種以上が任意の組み合わせ及び比率で含まれていてもよい。

[0088] 上記に例示した化合物（２）以外の色素の中でも、異方性色素膜中で高い分子配列をとり得るため、アゾ系色素が好ましい。

以下、化合物（２）以外のアゾ系色素を「その他アゾ系色素」とも称する。

[0089] アゾ系色素とは、アゾ基（－Ｎ＝Ｎ－）を少なくとも１個以上有する色素を言い、その一分子中のアゾ基の数は、溶剤への溶解性、液晶化合物との相溶性、色調及び製造容易性の観点から、１以上が好ましく、２以上がより好ましく、また、６以下が好ましく、４以下がより好ましく、３以下がさらに好ましい。

[0090] その他アゾ系色素としては、例えば、下記式（３）で表される化合物が挙げられる。

$$R^{31}-E^{1}-N=N-(E^{2}-N=N)_{p}-E^{3}-R^{32} \quad \cdots (3)$$

（式（３）中、

－Ｅ^{1}－、－Ｅ^{2}－及び－Ｅ^{3}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよいフェニレン基、置換基を有していてもよいナフチレン基、又は置換基を有していてもよい２価の複素環基を表す。

ｐは０～４の整数を表す。

ｐが２以上の整数である場合、複数の－Ｅ^{2}－は互いに同一でも異なってい

てもよい。

－Ｒ^{31}及び－Ｒ^{32}は、それぞれ独立に、１価の有機基を表す。）

[0091] －Ｅ^{1}－、－Ｅ^{2}－及び－Ｅ^{3}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよいフェニレン基、置換基を有していてもよいナフチレン基、又は置換基を有していてもよい２価の複素環基を表す。

フェニレン基の置換位置としては、分子の直線性が高いため、１，４－フェニレン基が好ましい。

ナフチレン基の置換位置としては、分子の直線性が高いため、１，４－ナフチレン基又は２，６－ナフチレン基が好ましい。

[0092] ２価の複素環基としては、環を形成する炭素数が好ましくは３以上１４以下であり、さらに好ましくは３以上１０以下の複素環基である。特に単環又は２環式の複素環基が好ましい。

２価の複素環基を構成する炭素以外の原子としては、窒素原子、硫黄原子及び酸素原子から選択される少なくとも１つが挙げられる。複素環基が炭素以外の環を構成する原子を複数有する場合、これらは同一であっても異なっていてもよい。

２価の複素環基としては、例えば、ピリジンジイル基、キノリンジイル基、イソキノリンジイル基、チアゾールジイル基、ベンゾチアゾールジイル基、チエノチアゾールジイル基、チエノチオフェンジイル基、ベンズイミダゾリジノンジイル基、ベンゾフランジイル基、フタルイミドジイル基、オキサゾールジイル基、ベンゾオキサゾールジイル基が挙げられる。

[0093] －Ｅ^{1}－、－Ｅ^{2}－及び－Ｅ^{3}－におけるフェニレン基、ナフチレン基、及び２価の複素環基が任意に有する置換基としては、例えば、炭素数１～４のアルキル基；メトキシ基、エトキシ基及びブトキシ基などの炭素数１～４のアルコキシ基；トリフルオロメチル基などの炭素数１～４のフッ化アルキル基；シアノ基；ニトロ基；水酸基；ハロゲン原子；アミノ基、ジエチルアミノ基、及びピロリジノ基などの置換又は無置換アミノ基が挙げられる。上記の置換アミノ基とは、炭素数１～４のアルキル基を１つ又は２つ有するアミノ

基、あるいは２つの置換アルキル基が互いに結合して炭素数２～８のアルカンジイル基を形成しているアミノ基を意味する。無置換アミノ基は、－NH_2である。上記炭素数１～４のアルキル基としては、メチル基、エチル基及びブチル基などが挙げられる。上記炭素数２～８のアルカンジイル基としては、エチレン基、プロパン－１，３－ジイル基、ブタン－１，３－ジイル基、ブタン－１，４－ジイル基、ペンタン－１，５－ジイル基、ヘキサン－１，６－ジイル基、ヘプタン－１，７－ジイル基、オクタン－１，８－ジイル基などが挙げられる。

[0094] 分子直線性が高い点から、－E^1－、－E^2－及び－E^3－におけるフェニレン基、ナフチレン基、及び２価の複素環基は、無置換であるか、又は、置換されている場合には、メチル基、メトキシ基、水酸基、フッ素原子、塩素原子、ジメチルアミノ基、ピロリジニル基、ピペリジニル基で置換されていることが好ましい。

[0095] ｐは０～４の整数を表す。溶剤への溶解性、重合性液晶化合物との相溶性、色調及び製造容易性の観点から、ｐは１以上が好ましく、また、４以下が好ましく、３以下がより好ましい。

[0096] －R^{31}及び－R^{32}は、同一の又はそれぞれ異なる１価の有機基を表す。

－R^{31}及び－R^{32}における１価の有機基としては、例えば、水素原子、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基；脂環式の炭素数１～１５のアルキル基；メトキシ基、エトキシ基及びブトキシ基などの分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルコキシ基；トリフルオロメチル基などの分岐を有していてもよい炭素数１～１５のフッ化アルキル基；シアノ基；ニトロ基；水酸基；ハロゲン原子；アミノ基、ジエチルアミノ基、及びピロリジノ基などの置換又は無置換アミノ基；カルボキシ基；ブトキシカルボニル基などの分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルオキシカルボニル基；２－（４－ブチルフェニル）エテニル基などのアルキルフェニルアルケニル基；カルバモイル基；ブチルカルバモイル基などの分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルカルバモイル基；スルファモイル基；ブチ

ルスルファモイル基などの分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルスルファモイル基；ブチルカルボニルアミノ基などの分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアシルアミノ基；ブチルカルボニルオキシ基などの分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアシルオキシ基；スルファニル基；ブチルスルファニル基などの炭素数１～１５のアルキルスルファニル基；後述の液晶化合物における－R^{41}及び－R^{42}が挙げられる。上記の置換アミノ基とは、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基を１つ又は２つ有するアミノ基、あるいは２つの置換アルキル基が互いに結合して炭素数２～１５のアルカンジイル基を形成しているアミノ基を意味する。無置換アミノ基は、－NH_2である。上記炭素数１～１５のアルキル基としては、メチル基、エチル基及びブチル基などが挙げられる。上記炭素数２～１５のアルカンジイル基としては、エチレン基、プロパン－１，３－ジイル基、ブタン－１，３－ジイル基、ブタン－１，４－ジイル基、ペンタン－１，５－ジイル基、ヘキサン－１，６－ジイル基、ヘプタン－１，７－ジイル基、オクタン－１，８－ジイル基などが挙げられる。

[0097] －R^{31}及び－R^{32}としては、水素原子、鎖状基、脂肪族有機基（「脂肪族有機基」は、鎖状のもの及び環状のものを含む。）、炭素原子の一部が窒素原子及び／又は酸素原子で置き換えられた脂肪族有機基（「炭素原子の一部が窒素原子及び／又は酸素原子で置き換えられた脂肪族有機基」は、鎖状のもの及び環状のものを含み、脂肪族有機基の一部のメチル基が水酸基、オキソ基（＝Ｏ）、アミノ基、イミノ基等にそれぞれ置き換えられたものを含む。）等が挙げられ、ある態様としては、水素原子、鎖状基が好ましく、別の態様としては、水素原子、脂肪族有機基が好ましく、さらに別の態様としては、水素原子、炭素原子の一部が窒素原子及び／又は酸素原子で置き換えられた脂肪族有機基が好ましい。

[0098] 鎖状基としては、例えば、上記の、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルコキシ基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のフッ化アルキル基；置換又は無置

換アミノ基（置換アミノ基とは、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基を１つ又は２つ有するアミノ基を意味する。無置換アミノ基は、－ＮＨ$_2$である。）；カルボキシ基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルオキシカルボニル基；カルバモイル基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルカルバモイル基；スルファモイル基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルスルファモイル基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアシルアミノ基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアシルオキシ基；スルファニル基；炭素数１～１５のアルキルスルファニル基が挙げられる。なお、鎖状基と脂肪族有機基とは一部重複する。

[0099] 脂肪族有機基としては、例えば、上記の、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基、脂環式の炭素数１～１５のアルキル基が挙げられる。

炭素原子の一部が窒素原子及び／又は酸素原子で置き換えられた脂肪族有機基としては、例えば、上記の、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルコキシ基；置換又は無置換アミノ基；カルボキシ基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルオキシカルボニル基；カルバモイル基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキルカルバモイル基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアシルアミノ基；分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアシルオキシ基が挙げられる。上記の置換アミノ基とは、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基を１つ又は２つ有するアミノ基、あるいは２つの置換アルキル基が互いに結合して炭素数２～１５のアルカンジイル基を形成しているアミノ基を意味する。無置換アミノ基は、－ＮＨ$_2$である。上記炭素数１～１５のアルキル基としては、メチル基、エチル基及びブチル基などが挙げられる。上記炭素数２～１５のアルカンジイル基としては、エチレン基、プロパン－１，３－ジイル基、ブタン－１，３－ジイル基、ブタン－１，４－ジイル基、ペンタン－１，５－ジイル基、ヘキサン－１，６－ジイル基、ヘプタン－１，７－ジイル基、オクタン－１，

８－ジイル基などが挙げられる。

[0100] 分子直線性が高い点から、－Ｒ^{31}及び－Ｒ^{32}としては、それぞれ独立に、水素原子、又は、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基などの炭素数１～１０のアルキル基；ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、ヘプチルオキシ基、オクチルオキシ基などの炭素数１～１０のアルコキシ基、ジエチルアミノ基、ピロリジノ基、ピペリジニル基が好ましい。また、後述の液晶化合物における－Ｒ^{41}及び－Ｒ^{42}も好ましい。

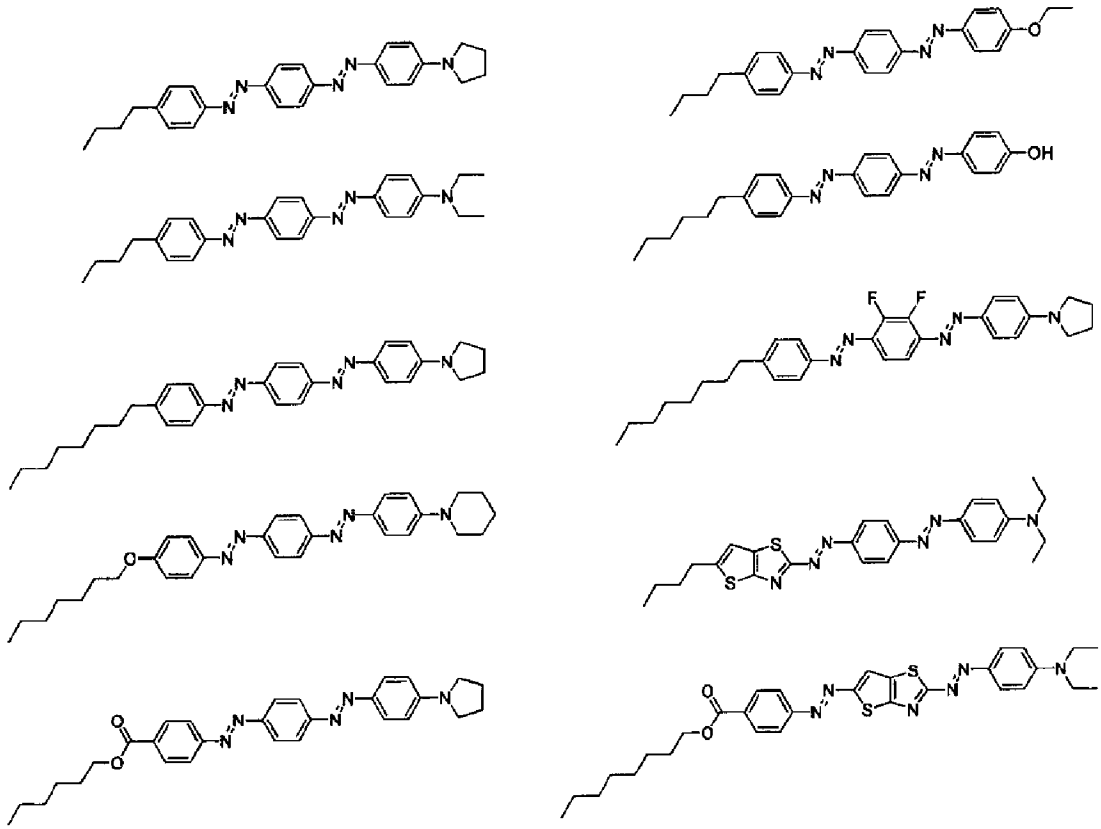
[0101] 本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれていてもよい、その他アゾ系色素としては、特に限定されることなく、公知のアゾ系色素を用いることもできる。

公知のアゾ系色素としては、例えば、上述の特許文献１、特許第５９８２７６２号公報、特開２０１７－０２５３１７号公報、特開２０１４－０９５８９９号公報に記載の色素（二色性色素、二色性染料）が挙げられる。

[0102] その他アゾ系色素として、具体的には、以下に記載のアゾ系色素が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

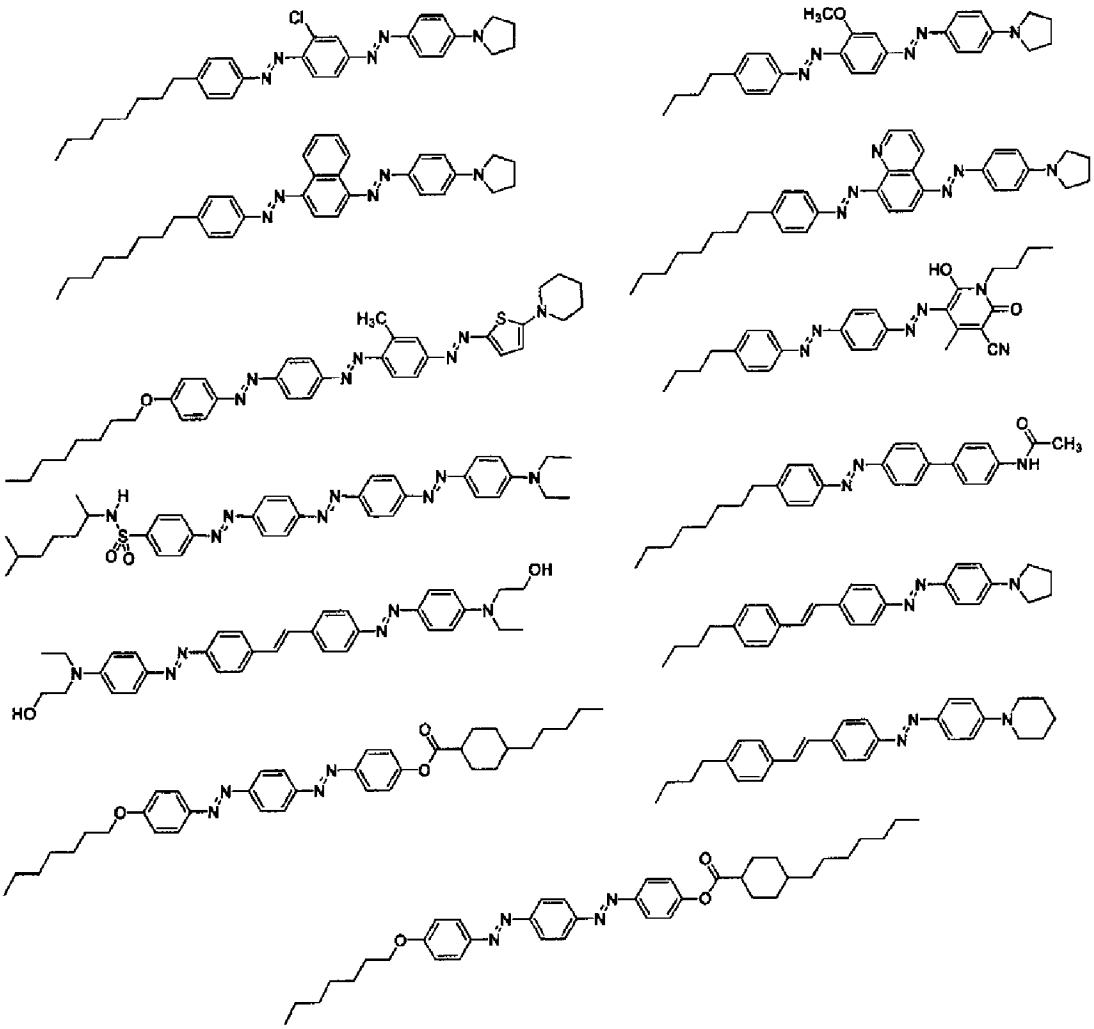
[0103]

[化9]



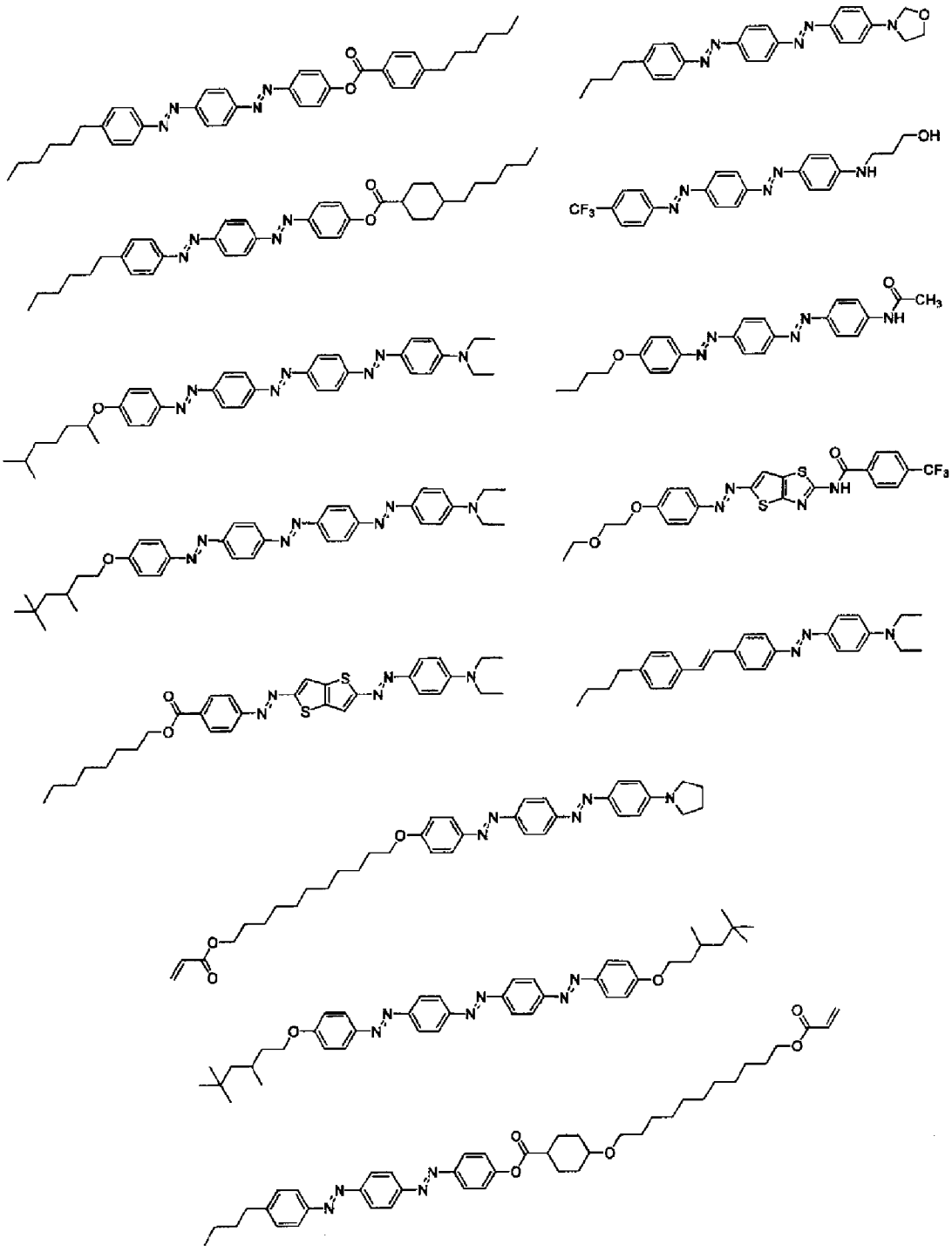
[0104]

[化10]



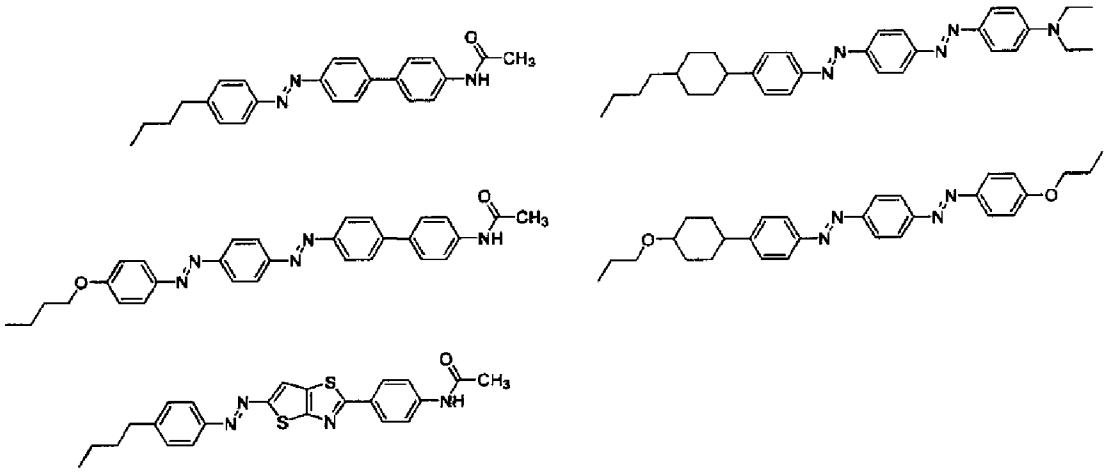
[0105]

[化11]



[0106]

[化12]



[0107] 本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる、化合物（２）以外の色素としては、３５０～８００ｎｍの波長域の吸収曲線における極大値を示す波長が、異方性色素膜形成用組成物に含まれる、化合物（２）の３５０～８００ｎｍの波長域の吸収曲線における最大値を示す波長よりも長い色素であることが好ましく、アゾ系色素が好ましい。また、その波長の差が、５ｎｍ以上であることが好ましく、１０ｎｍ以上であることが好ましい。上記であることで、本発明の異方性色素膜形成用組成物を用いて形成した異方性色素膜をディスプレイ等の偏光素子に適用する場合に、可視領域の広い範囲で偏光特性を発現することができる。

[0108] （本発明の化合物及び色素の分子量）

本発明の化合物の分子量（２種以上の本発明の化合物を併用する場合には、それぞれの分子量）は、３００以上が好ましく、３５０以上がより好ましく、３８０以上がさらに好ましく、１５００以下が好ましく、また、１２００以下がより好ましく、１０００以下がさらに好ましい。具体的には、本発明の化合物の分子量は、３００～１５００が好ましく、３５０～１２００がより好ましく、３８０～１０００がさらに好ましい。上記範囲であることで適切な分子長、嵩高さとなるため、本発明の化合物の分子配向が良好になる傾向にある。

[0109] 本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる化合物（２）以外の色素の

分子量（２種以上の色素を併用する場合には、それぞれの分子量）は、３００以上が好ましく、３５０以上がより好ましく、３８０以上がさらに好ましく、１５００以下が好ましく、また、１２００以下がより好ましく、１０００以下がさらに好ましい。具体的には、化合物（２）以外の色素の分子量は、３００～１５００が好ましく、３５０～１２００がより好ましく、３８０～１０００がさらに好ましい。上記範囲であることで適切な分子長、嵩高さとなるため、化合物（２）以外の色素の分子配向が良好になる傾向にある。

[0110] 本発明の化合物、及び化合物（２）以外の色素の分子量は、色素に含まれる原子量の総和である。

[0111]（色素の含有量）

本発明の異方性色素膜形成用組成物における二色性色素等の色素が占める含有量（２種以上の色素を併用する場合は、それぞれの含有量の総和）としては、例えば、異方性色素膜形成用組成物の固形分に対して、０．０１質量％以上が好ましく、０．０５質量％以上がより好ましく、また、３０質量％未満が好ましく、２５質量％未満がより好ましく、２０質量％未満がさらに好ましく、１０質量％未満が特に好ましい。具体的には、異方性色素膜形成用組成物における色素（二色性色素）が占める含有量としては、例えば、異方性色素膜形成用組成物の固形分（１００質量％）に対して、０．０１質量％以上３０質量％未満であり、好ましくは０．０５質量％以上２０質量％未満であり、より好ましくは０．０５質量％以上１０質量％未満である。

[0112] 色素が占める含有量が前記範囲内であれば、本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物の配向を乱すことなく、本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物を重合させることができる傾向にある。また、色素が占める含有量が前記下限値以上であれば、十分な光吸収が得られ、十分な偏光性能が得られる傾向にある。また、色素が占める含有量が前記上限値以下であれば、液晶分子の配向の阻害が抑制されやすい傾向にある。

なお、ここで、異方性色素膜形成用組成物の固形分とは異方性色素膜形成

用組成物中の溶剤以外のすべての成分の合計に相当する。

[0113] 本発明の異方性色素膜形成用組成物は、色素として本発明の化合物を必須成分として含有していればよく、前述の化合物（２）以外の色素を化合物（２）と共に含有するものであってもよいが、本発明の異方性色素膜形成用組成物が化合物（２）以外の色素を含有する場合、化合物（２）を用いることによる本発明の効果をより有効に得る観点から、本発明の異方性色素膜形成用組成物中の色素の総量１００質量％中の化合物（２）は、５質量％以上であることが好ましく、１０質量％以上であることがより好ましい。一方、１５質量％以上であることがさらに好ましく、２０質量％以上であることが特に好ましい。一方、可視領域の広い範囲で偏光特性を発現させる観点からは、この割合は、８０質量％以下であることが好ましく、６０質量％以下であることがより好ましく、５０質量％以下であることがさらに好ましく、４０質量％以下であることが特に好ましい。

[0114] （色素の製造方法）

本発明の化合物や本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる化合物（２）以外の色素は、アルキル化反応、エステル化反応、アミド化反応、エーテル化反応、イプソ置換反応、ジアゾカップリング反応、金属触媒を用いたカップリング反応等の公知の化学反応を組み合わせることにより製造することができる。

例えば、本発明の化合物は、後掲の実施例に記載の方法や、「新染料化学」（細田豊著、昭和４８年１２月２１日、技報堂）、「総説合成染料」（堀口博著、１９６８年、三共出版）、「理論製造　染料化学」（細田豊著、１９５７年、技報堂）に記載の方法にしたがって合成することができる。

[0115] ＜重合性液晶化合物＞

本発明において、液晶化合物とは、液晶状態を示す物質を指し、具体的には、「液晶便覧」（丸善株式会社、平成１２年１０月３０日発行）の１～２８ページに記載されているように、結晶から液体には直接転移せず、結晶と液体の両方の性質を示す中間の状態を経て液体になる化合物をいう。

[0116] 本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物は、後述する重合性基を有する液晶化合物である。

[0117] 重合性液晶化合物において、重合性基は液晶化合物分子内の任意の位置に配置することができるが、重合性基は液晶化合物分子の末端に置換していることが重合しやすさの観点から好ましい。

重合性液晶化合物において、重合性基は液晶化合物分子内に１つ以上存在することができるが、２つ以上存在する場合は、液晶化合物分子の両末端にそれぞれ存在していることが重合しやすさの観点から好ましい。

[0118] また、重合性液晶化合物は、液晶化合物分子内に炭素－炭素三重結合を有する化合物であることが好ましい。炭素－炭素三重結合を有する化合物であると、該炭素－炭素三重結合が、回転運動が可能でありながら、液晶分子のコアとなることが可能で、分子の運動性が高く、かつ液晶分子同士や色素分子などのπ共役系を有する化合物と分子間相互作用が強く、分子配向が高くなる傾向にある。

[0119] 本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物としては、特に限定されることなく重合性基を有する液晶化合物を用いることができる。高い二色比を得やすい傾向があることから、繰り返し単位構造を有しない低分子重合性液晶化合物が好ましい。

繰り返し単位構造を有しない低分子重合性化合物の分子量は、２０００以下が好ましく、１５００以下がより好ましく、１０００以下がさらに好ましい。重合性液晶化合物の分子量の下限値は特に限定されないが、４００以上が好ましく、５００以上がより好ましい。分子量が上記上限値以下であれば、製膜時の液晶化合物が配向するための運動性を有することで分子配向性が良好となる傾向があり、上記下限値以上であれば、液晶化合物の分子直線性が高くなることで分子配向性が良好となる傾向がある。

上記の上限及び下限は任意に組み合わせることができる。重合性液晶化合物の分子量は、例えば、４００以上２０００以下であってよく、４００以上１５００以下であってよく、５００以上１０００以下であってよい。

[0120] 例えば、本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物としては、下記式（４）で表される化合物（以下、「重合性液晶化合物（４）」と称す場合がある。）を挙げることができる。

[0121] $Q^{1}-R^{41}-A^{41}-Y^{1}-A^{42}-(Y^{2}-A^{43})_{k}-R^{42}-Q^{2}$ …（４）

[0122] （式（４）中、

$-Q^{1}-$は、水素原子又は重合性基を表す。

$-Q^{2}-$は、重合性基を表す。

$-R^{41}-$及び$-R^{42}-$は、それぞれ独立に、鎖状有機基を表す。

$-A^{41}-$及び$-A^{43}-$は、それぞれ独立に、下記式（５）で表される部分構造、２価有機基、又は単結合を表す。

$-A^{42}-$は、下記式（５）で表される部分構造又は２価有機基を表す。

$-Y^{1}-$及び$-Y^{2}-$は、それぞれ独立に、単結合、$-C(=O)O-$、$-OC(=O)-$、$-C(=S)O-$、$-OC(=S)-$、$-C(=O)S-$、$-SC(=O)-$、$-CH_{2}CH_{2}-$、$-CH=CH-$、$-C\equiv C-$、$-C(=O)NH-$、$-NHC(=O)-$、$-CH_{2}O-$、$-OCH_{2}-$、$-CH_{2}S-$、又は$-SCH_{2}-$を表す。

$-A^{41}-$及び$-A^{43}-$の一方は、下記式（５）で表される部分構造又は２価有機基である。

ｋは１又は２である。

ｋが２の場合、２つの$-Y^{2}-A^{43}-$は互いに同一でも異なっていてもよい。）

[0123] $-C^{y}-X^{52}-C\equiv C-X^{51}-$ …（５）

（式（５）中、

$-C^{y}-$は、炭化水素環基又は複素環基を表す。

$-X^{51}-$は、$-C(=O)O-$、$-OC(=O)-$、$-C(=S)O-$、$-OC(=S)-$、$-C(=O)S-$、$-SC(=O)-$、$-CH_{2}CH_{2}-$、$-CH=CH-$、$-C(=O)NH-$、$-NHC(=O)-$、$-CH_{2}O-$

、－ＯＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｓ－、又は－ＳＣＨ$_2$－を表す。

－Ｘ^{52}－は、単結合、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｓ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｓ）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｓ－、－ＳＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）ＮＨ－、－ＮＨＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｓ－、又は－ＳＣＨ$_2$－を表す。）

[0124] なお、－Ａ^{41}－が、式（５）で表される部分構造である場合、式（４）は、下記式（４Ａ）であってもよく、下記式（４Ｂ）であってもよい。

Ｑ^1－Ｒ^{41}－Ｃ^y－Ｘ^{52}－Ｃ≡Ｃ－Ｘ^{51}－Ｙ^1－Ａ^{42}－（Ｙ^2－Ａ^{43}）$_k$－Ｒ^{42}－Ｑ^2…（４Ａ）

Ｑ^1－Ｒ^{41}－Ｘ^{51}－Ｃ≡Ｃ－Ｘ^{52}－Ｃ^y－Ｙ^1－Ａ^{42}－（Ｙ^2－Ａ^{43}）$_k$－Ｒ^{42}－Ｑ^2…（４Ｂ）

[0125] また、－Ａ^{42}－が、式（５）で表される部分構造である場合、式（４）は、下記式（４Ｃ）であってもよく、下記式（４Ｄ）であってもよい。

Ｑ^1－Ｒ^{41}－Ａ^{41}－Ｙ^1－Ｃ^y－Ｘ^{52}－Ｃ≡Ｃ－Ｘ^{51}－（Ｙ^2－Ａ^{43}）$_k$－Ｒ^{42}－Ｑ^2…（４Ｃ）

Ｑ^1－Ｒ^{41}－Ａ^{41}－Ｙ^1－Ｘ^{51}－Ｃ≡Ｃ－Ｘ^{52}－Ｃ^y－（Ｙ^2－Ａ^{43}）$_k$－Ｒ^{42}－Ｑ^2…（４Ｄ）

[0126] また、－Ａ^{43}－が、式（５）で表される部分構造である場合、式（４）は、下記式（４Ｅ）であってもよく、下記式（４Ｆ）であってもよい。

Ｑ^1－Ｒ^{41}－Ａ^{41}－Ｙ^1－Ａ^{42}－（Ｙ^2－Ｃ^y－Ｘ^{52}－Ｃ≡Ｃ－Ｘ^{51}）$_k$－Ｒ^{42}－Ｑ^2…（４Ｅ）

Ｑ^1－Ｒ^{41}－Ａ^{41}－Ｙ^1－Ａ^{42}－（Ｙ^2－Ｘ^{51}－Ｃ≡Ｃ－Ｘ^{52}－Ｃ^y）$_k$－Ｒ^{42}－Ｑ^2…（４Ｆ）

[0127] 同様に、－Ａ^{41}－、－Ａ^{42}－、及び－Ａ^{43}－のうち、二つ以上が式（５）で表される部分構造である場合、それぞれ独立に、式（５）で表される部分構造の向きが反転していてもよい。

[0128] また、上記のように、－Ａ^{41}－、－Ａ^{42}－、及び－Ａ^{43}－は、それぞれ独立に、式（５）で表される部分構造又は２価有機基であり、加えて、－Ａ^{41}

－及び－Ａ^{43}－は、単結合であってもよいが、－Ａ^{41}－及び－Ａ^{43}－が、ともに単結合であることはない。

[0129] （－Ｃ^{y}－）

－Ｃ^{y}－における炭化水素環基は、芳香族炭化水素環基と非芳香族炭化水素環基とを含む。

芳香族炭化水素環基は、非連結芳香族炭化水素環基と連結芳香族炭化水素環基とを含む。

[0130] 非連結芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の２価基であり、その炭素数は６～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結芳香族炭化水素環基の炭素数は６～１５がより好ましい。芳香族炭化水素環としては、例えば、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、アセナフテン環、フルオランテン環、フルオレン環等が挙げられる。

[0131] 連結芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。単環もしくは縮合環の炭素数は６～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。単環もしくは縮合環の炭素数は６～１５がより好ましい。連結芳香族炭化水素環基としては、例えば、第１の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環と第２の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、第１の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。連結芳香族炭化水素環基としては、具体的には、ビフェニル－４，４’－ジイル基が挙げられる。

[0132] 芳香族炭化水素環基としては、非連結芳香族炭化水素環基が液晶化合物の間に働く分子間相互作用を最適とすることで分子配向性が良好となる理由で

好ましい。

これらのうち、芳香族炭化水素環基としては、ベンゼン環の２価基、ナフタレン環の２価基が好ましく、ベンゼン環の２価基（フェニレン基）がより好ましい。フェニレン基としては、１，４－フェニレン基が好ましい。－Ｃ^{y}－がこれらの基であることで液晶分子の直線性が高まり、分子配向性向上の効果が得られる傾向にある。

[0133] 非芳香族炭化水素環基は、非連結非芳香族炭化水素環基と連結非芳香族炭化水素環基とを含む。

[0134] 非連結非芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の２価基であり、その炭素数は３～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結非芳香族炭化水素環基の炭素数は３～１５がより好ましい。非芳香族炭化水素環としては、例えば、シクロプロパン環、シクロブタン環、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、シクロヘプタン環、シクロオクタン環、シクロヘキセン環、ノルボルナン環、ボルナン環、アダマンタン環、テトラヒドロナフタレン環、ビシクロ［２．２．２］オクタン環等が挙げられる。

[0135] 非連結非芳香族炭化水素環基は、非芳香族炭化水素環の環を構成する原子間結合として不飽和結合を有さない脂環式炭化水素環基と、非芳香族炭化水素環の環を構成する原子間結合として不飽和結合を有する不飽和非芳香族炭化水素環基とを含む。非連結非芳香族炭化水素環基としては、生産性の観点から脂環式炭化水素環基が好ましい。

[0136] 連結非芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基；あるいは、単環の芳香族炭化水素環、縮合した芳香族炭化水素環、単環の非芳香族炭化水素環、及び縮合した非芳香族炭化水素環からなる群より選択される１つ以上の環と、単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。

単環もしくは縮合環の炭素数は適切なコアの大きさにより分子配向性が良

好となる理由で３～２０であることが好ましい。

連結非芳香族炭化水素環基としては例えば、第１の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環と第２の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、第１の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。さらに、例えば、炭素数３～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環と炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、炭素数３～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。

連結非芳香族炭化水素環基としては、具体的には、例えば、ビス（シクロヘキサン）－４，４’－ジイル基、１－シクロヘキシルベンゼン－４，４’－ジイル基が挙げられる。

[0137] 非芳香族炭化水素環基としては、液晶化合物の間に働く分子間相互作用を最適とすることで分子配向性が良好となる理由で非連結非芳香族炭化水素環基が好ましい。

[0138] 非連結非芳香族炭化水素環基としては、シクロヘキサンの２価基（シクロヘキサンジイル基）が好ましく、シクロヘキサンジイル基としては、シクロヘキサン－１，４－ジイル基が好ましい。－Ｃʸ－がこれらの基であることで液晶分子の直線性が高まり、分子配向性向上の効果が得られる傾向にある。

[0139] －Ｃʸ－における複素環基は、芳香族複素環基と非芳香族複素環基とを含む。

[0140] 芳香族複素環基は、非連結芳香族複素環基と連結芳香族複素環基とを含む。

[0141] 非連結芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した芳香族複素環の２価基で

あり、その炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結芳香族複素環基の炭素数は４～１５がより好ましい。

芳香族複素環としては、例えば、フラン環、ベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、トリアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピロロイミダゾール環、ピロロピラゾール環、ピロロピロール環、チエノピロール環、チエノチオフェン環、フロピロール環、フロフラン環、チエノフラン環、チエノチアゾール環、ベンゾイソオキサゾール環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、シノリン環、キノキサリン環、フェナントリジン環、キナゾリン環、キナゾリノン環、アズレン環が挙げられる。

[0142] 連結芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した芳香族複素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。単環もしくは縮合環の炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。連結芳香族複素環基の炭素数は４～１５がより好ましい。

連結芳香族複素環基としては、例えば、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環と第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環とが単結合で結合し、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。

[0143] 非芳香族複素環基は、非連結非芳香族複素環基と連結非芳香族複素環基とを含む。

[0144] 非連結非芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族複素環の２価

基であり、その炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結非芳香族複素環基の炭素数は４～１５がより好ましい。

炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環の２価基の非芳香族複素環としては、テトラヒドロフラン環、テトラヒドロピラン環、ジオキサン環、テトラヒドロチオフェン環、テトラヒドロチオピラン環、ピロリジン環、ピペリジン環、ジヒドロピリジン環、ピペラジン環、テトラヒドロチアゾール環、テトラヒドロオキサゾール環、オクタヒドロキノリン環、テトラヒドロキノリン環、オクタヒドロキナゾリン環、テトラヒドロキナゾリン環、テトラヒドロイミダゾール環、テトラヒドロベンゾイミダゾール環、キヌクリジン環等が挙げられる。

[0145] 連結非芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族複素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。単環もしくは縮合環の炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。連結非芳香族複素環基の炭素数は４～１５がより好ましい。

連結芳香族複素環基としては、例えば、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環と第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環とが単結合で結合し、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。

[0146] －C^{y}－における芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基は、それぞれ、－R^{k}、－ＯＨ、－Ｏ－R^{k}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－R^{k}、－NH_2、－ＮＨ－R^{k}、－Ｎ（－$R^{k'}$）－R^{k}、－Ｃ（＝Ｏ）－R^{k}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－R^{k}、－Ｃ（＝Ｏ）－NH_2、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－R^{k}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－$R^{k'}$）－R^{k}、－ＳＨ、－Ｓ－R^{k}、トリフルオロメチル基、スルファモイル基、カルボキシ基、スルホ基、シアノ基、

ニトロ基、及びハロゲンからなる群より選択される１以上の基で置換されていてもよい。－Ｒ^{k}及び－Ｒ$^{k'}$は、それぞれ独立に、炭素数１～６の直鎖状もしくは分枝状のアルキル基を表す。

[0147] －Ｃ^{y}－における芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基は、分子構造の直線性が高く、重合性液晶化合物（４）同士が会合しやすく液晶状態を発現しやすい点から、それぞれ独立に、無置換であるか、メチル基、メトキシ基、フッ素原子、塩素原子、臭素原子が置換していることが好ましく、無置換であることがより好ましい。

[0148] －Ｃ^{y}－における芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基が有する置換基は、同一でも異なっていてもよく、また、芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基の全部が置換されていてもよく、全部が無置換であってもよく、一部が置換されていて一部が無置換であってもよい。

[0149] －Ｃ^{y}－としては、重合性液晶化合物（４）の分子配向性が良好となることから炭化水素環基が好ましく、フェニレン基、シクロヘキサンジイル基がより好ましい。重合性液晶化合物（４）の分子構造の直線性を高くすることができることから、－Ｃ^{y}－としては、１，４－フェニレン基、シクロヘキサン－１，４－ジイル基がさらに好ましく、１，４－フェニレン基がとりわけ好ましい。

[0150] （－Ｘ^{51}－）

－Ｘ^{51}－は、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｓ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｓ）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｓ－、－ＳＣ（＝Ｏ）－、－CH_2CH_2－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）ＮＨ－、－ＮＨＣ（＝Ｏ）－、－CH_2O－、－OCH_2－、－CH_2S－又は－SCH_2－を表すが、このうち、重合性液晶化合物（４）の直線性や分子短軸周りの回転運動がしやすい傾向にあることから、－Ｘ^{51}－としては、π結合性の小さい、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｓ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｓ）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｓ－、－ＳＣ（＝Ｏ）－、－CH_2CH_2－、－CH_2O－、－OCH_2－、－CH_2S－

、－ＳＣＨ$_2$－が好ましいものとして挙げられる。これらの中でもより好ましくは、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－であり、さらに好ましくは、－Ｘ^{51}－は、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－又は－ＯＣ（＝Ｏ）－である。別の態様として、－Ｘ^{51}－は、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、又は－ＯＣＨ$_2$－であることが好ましい。

[0151] （－Ｘ^{52}－）

－Ｘ^{52}－は、単結合、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｓ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｓ）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｓ－、－ＳＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）ＮＨ－、－ＮＨＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｓ－、又は－ＳＣＨ$_2$－を表す。

重合性液晶化合物（４）のコアを大きくし、異方性色素膜形成用組成物から形成される異方性色素膜の二色性を大きくする観点から直線性が高い基で－Ｃ^{y}－と－Ｃ≡Ｃ－を連結することが好ましい。具体的には、－Ｘ^{52}－としては、単結合、又はπ結合性を有する－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｓ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｓ）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｓ－、－ＳＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）ＮＨ－、－ＮＨＣ（＝Ｏ）－であることが好ましく、より直線性が高いことから単結合であることがさらに好ましい。

[0152] （－Ｑ^{1}及び－Ｑ^{2}）

－Ｑ^{1}及び－Ｑ^{2}における重合性基は、光、熱、及び／又は放射線によって重合することが可能な部分構造を有する基であり、重合の機能を担保するために必要な官能基ないし原子団である。該重合性基は、光重合性基であることが異方性色素膜の製造の観点から好ましい。

[0153] 重合性基としては、例えば、アクリロイル基、メタクリロイル基、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、アクリロイルアミノ基、メタクリロイルアミノ基、ビニル基、ビニルオキシ基、エチニル基、エチニルオキシ基、１，３－ブタジエニル基、１，３－ブタジエニルオキシ基、オキシラニル基、オキセタニル基、グリシジル基、グリシジルオキシ基、スチリル基

、スチリルオキシ基が挙げられる。アクリロイル基、メタクリロイル基、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、アクリロイルアミノ基、メタクリロイルアミノ基、オキシラニル基、グリシジル基、グリシジルオキシ基が好ましく、アクリロイル基、メタクリロイル基、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、アクリロイルアミノ基、メタクリロイルアミノ基、グリシジル基、グリシジルオキシ基がより好ましく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基がさらに好ましい。

[0154] （－R^{41}－及び－R^{42}－）

－R^{41}－及び－R^{42}－における鎖状有機基は、前述の芳香族炭化水素環、非芳香族炭化水素環、芳香族複素環、非芳香族複素環等の環状構造を含まない２価の有機基である。

このような鎖状有機基としては、－（アルキレン基）－、－Ｏ－（アルキレン基）－、－Ｓ－（アルキレン基）－、－ＮＨ－（アルキレン基）－、－Ｎ（アルキル基）－（アルキレン基）－、－ＯＣ（＝Ｏ）－（アルキレン基）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－（アルキレン基）－が挙げられる。

[0155] これらの鎖状有機基におけるアルキレン基としては、炭素数１～２５の直鎖状もしくは分枝状のアルキレン基が挙げられる。アルキレン基の炭素－炭素結合は、一部が不飽和結合になっていてもよい。アルキレン基に含まれる一つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｎ（R^{m}）－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＦ－、－CF_2－、－ＣＨＣｌ－、－CCl_2－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造とされていてもよい。R^{m}は、炭素数１～６の直鎖状又は分枝状のアルキル基を表す。

[0156] これらの鎖状有機基におけるアルキレン基としては、分子直線性が高いことから、アルキレン基の炭素の一部が不飽和結合になっていてもよく、また、アルキレン基に含まれる一つ又はそれ以上のメチレン基が上述の基によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造とされていてもよい、炭素数１～２５の直鎖状のアルキレン基であることが好ましい。

[0157] 鎖状有機基における主鎖（鎖状有機基におけるもっとも長い鎖状部分を意味する。）の原子の数は、３～２５が好ましく、５～２０がより好ましく、６～２０がさらに好ましい。

[0158] 鎖状有機基としては、－（CH_2）$_r$－CH_2－、－O－（CH_2）$_r$－CH_2－、－（O）$_{r1}$－（CH_2CH_2O）$_{r2}$－（CH_2）$_{r3}$－、－（O）$_{r1}$－（CH_2）$_{r2}$－（CH_2CH_2O）$_{r3}$－が好ましい。これらの式中のｒは、１～２４の整数であり、２～２４の整数が好ましく、４～１９の整数がより好ましく、５～１９の整数がさらに好ましい。また、これらの式中のｒ１、ｒ２、ｒ３は、それぞれ独立に、整数を表し、鎖状有機基における主鎖（鎖状有機基におけるもっとも長い鎖状部分を意味する。）の原子の数が、好ましくは３～２５、より好ましくは５～２０、さらに好ましくは６～２０となるように適宜調整される。

[0159] －R^{41}－及び－R^{42}－は、それぞれ独立に、－（アルキレン基）－、－O－（アルキレン基）－であることが好ましく、－（アルキレン基）－、－O－（アルキレン基）－であることがより好ましい。ある態様として、－R^{41}－及び－R^{42}－における鎖状有機基としては、－（アルキレン基）－であり、別の態様として、－O－（アルキレン基）－である。

[0160] 前記式（４Ｂ）、式（４Ｅ）のように、－X^{51}－と－R^{41}－又は－X^{51}－と－R^{42}－が結合している場合；前記式（４Ｂ）において－A^{43}－が単結合であるか或いは、前記式（４Ｅ）において－A^{41}－が単結合であって、－R^{41}－もしくは－R^{42}－が、－Y^{1}－又は－Y^{2}－と結合している場合；には、－X^{51}－、－Y^{1}－もしくは－Y^{1}－と直接結合する－R^{41}－又は－R^{42}－は、－（アルキレン基）－であることが好ましい。

[0161] 上記以外で、－X^{51}－、－Y^{1}－もしくは－Y^{2}－と直接結合しない－R^{41}－又は－R^{42}－は、－O－（アルキレン基）－であることが好ましい。

[0162] （－A^{41}－、－A^{42}－、及び－A^{43}－における２価有機基）

－A^{41}－、－A^{42}－、及び－A^{43}－における２価有機基は、下記式（６）で表される基であることが好ましい。

[0163] －Q^3－ …（６）

（式（６）中、Q^3は、炭化水素環基又は複素環基を表す。）

[0164] －Q^3－における炭化水素環基は、芳香族炭化水素環基と非芳香族炭化水素環基とを含む。

芳香族炭化水素環基は、非連結芳香族炭化水素環基と連結芳香族炭化水素環基とを含む。

[0165] 非連結芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の２価基であり、その炭素数は６～２０であることが適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結芳香族炭化水素環基の炭素数は６～１５がより好ましい。芳香族炭化水素環としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、アセナフテン環、フルオランテン環、フルオレン環等が挙げられる。

[0166] 連結芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。単環もしくは縮合環の炭素数は６～２０であることが、適切なコアの大きさにより配向性が良好となる理由で好ましい。連結芳香族炭化水素環基の炭素数は６～１５がより好ましい。連結芳香族炭化水素環基としては、例えば、第１の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環と第２の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、第１の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数６～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。連結芳香族炭化水素環基としては、具体的には、ビフェニル－４，４’－ジイル基が挙げられる。

[0167] 芳香族炭化水素環基としては、非連結芳香族炭化水素環基が液晶化合物の間に働く分子間相互作用を最適とすることで分子配向性が良好となる理由で好ましい。

これらのうち、芳香族炭化水素環基としては、ベンゼン環の２価基、ナフタレン環の２価基が好ましく、ベンゼン環の２価基（フェニレン基）がより好ましい。フェニレン基としては、１，４－フェニレン基が好ましい。－Q^3－がこれらの基であることで液晶分子の直線性が高まり、分子配向性向上の効果が得られる傾向にある。

[0168] 非芳香族炭化水素環基は、非連結非芳香族炭化水素環基と連結非芳香族炭化水素環基とを含む。

[0169] 非連結非芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の２価基であり、その炭素数は３～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結非芳香族炭化水素環基の炭素数は３～１５がより好ましい。非芳香族炭化水素環としては、シクロプロパン環、シクロブタン環、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、シクロヘプタン環、シクロオクタン環、シクロヘキセン環、ノルボルナン環、ボルナン環、アダマンタン環、テトラヒドロナフタレン環、ビシクロ［２．２．２］オクタン環等が挙げられる。

[0170] 非連結非芳香族炭化水素環基は、非芳香族炭化水素環の環を構成する原子間結合として不飽和結合を有さない脂環式炭化水素環基と、非芳香族炭化水素環の環を構成する原子間結合として不飽和結合を有する不飽和非芳香族炭化水素環基とを含む。非連結非芳香族炭化水素環基としては、生産性の観点から脂環式炭化水素環基が好ましい。

[0171] 連結非芳香族炭化水素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基；あるいは、単環の芳香族炭化水素環、縮合した芳香族炭化水素環、単環の非芳香族炭化水素環、及び縮合した非芳香族炭化水素環からなる群より選択される１つ以上の環と、単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。

単環もしくは縮合環の炭素数は適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で３～２０であることが好ましい。

連結非芳香族炭化水素環基としては例えば、第１の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環と第２の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、第１の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。さらに、例えば、炭素数３～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環と炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環とが単結合で結合し、炭素数３～２０の単環もしくは縮合した芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、炭素数３～２０の単環もしくは縮合した非芳香族炭化水素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。

連結非芳香族炭化水素環基としては、具体的には、ビス（シクロヘキサン）－４，４’－ジイル基、１－シクロヘキシルベンゼン－４，４’－ジイル基が挙げられる。

[0172] 非芳香族炭化水素環基としては、液晶化合物の間に働く分子間相互作用を最適とすることで分子配向性が良好となる理由で非連結非芳香族炭化水素環基が好ましい。

[0173] 非連結非芳香族炭化水素環基としては、シクロヘキサンの２価基（シクロヘキサンジイル基）が好ましく、シクロヘキサンジイル基としては、シクロヘキサン－１，４－ジイル基が好ましい。

[0174] －Q^3－における複素環基は、芳香族複素環基と非芳香族複素環基とを含む。

[0175] 芳香族複素環基は、非連結芳香族複素環基と連結芳香族複素環基とを含む。

[0176] 非連結芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した芳香族複素環の２価基であり、その炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結芳香族複素環基の炭素数は４～

１５がより好ましい。

芳香族複素環としては、例えば、フラン環、ベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、チアゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピロロイミダゾール環、ピロロピラゾール環、ピロロピロール環、チエノピロール環、チエノチオフェン環、フロピロール環、フロフラン環、チエノフラン環、チエノチアゾール環、ベンゾイソオキサゾール環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、シノリン環、キノキサリン環、フェナントリジン環、キナゾリン環、キナゾリノン環、アズレン環が挙げられる。

[0177] 連結芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した芳香族複素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。単環もしくは縮合環の炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。連結芳香族複素環基の炭素数は４～１５がより好ましい。

連結芳香族複素環基としては、例えば、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環と第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環とが単結合で結合し、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した芳香族複素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。

[0178] 非芳香族複素環基は、非連結非芳香族複素環基と連結非芳香族複素環基とを含む。

[0179] 非連結非芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族複素環の２価基であり、その炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。非連結非芳香族複素環基の炭素数は４～１５がより好ましい。

炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環の２価基の非芳香族複素環としては、例えば、テトラヒドロフラン環、テトラヒドロピラン環、ジオキサン環、テトラヒドロチオフェン環、テトラヒドロチオピラン環、ピロリジン環、ピペリジン環、ジヒドロピリジン環、ピペラジン環、テトラヒドロチアゾール環、テトラヒドロオキサゾール環、オクタヒドロキノリン環、テトラヒドロキノリン環、オクタヒドロキナゾリン環、テトラヒドロキナゾリン環、テトラヒドロイミダゾール環、テトラヒドロベンゾイミダゾール環、キヌクリジン環が挙げられる。

[0180] 連結非芳香族複素環基は、単環もしくは縮合した非芳香族複素環の複数が単結合で結合し、環を構成する原子上に結合手を有する２価基である。単環もしくは縮合環の炭素数は４～２０であることが、適切なコアの大きさにより分子配向性が良好となる理由で好ましい。連結非芳香族複素環基の炭素数は４～１５がより好ましい。

連結芳香族複素環基としては、例えば、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環と第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環とが単結合で結合し、第１の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環の環を構成する原子上に第１の結合手を有し、第２の炭素数４～２０の単環もしくは縮合した非芳香族複素環の環を構成する原子上に第２の結合手を有する２価基が挙げられる。

[0181] －Q^3－における芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基は、それぞれ、－R^n、－ＯＨ、－Ｏ－R^n、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－R^n、－NH_2、－ＮＨ－R^n、－Ｎ（－$R^{n'}$）－R^n、－Ｃ（＝Ｏ）－R^n、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－R^n、－Ｃ（＝Ｏ）－NH_2、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－R^n、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－$R^{n'}$）－R^n、－ＳＨ、－Ｓ－R^n、トリフルオロメチル基、スルファモイル基、カルボキシ基、スルホ基、シアノ基、ニトロ基、及びハロゲンからなる群より選択される１以上の基で置換されていてもよい。－R^n及び－$R^{n'}$は、それぞれ独立に、炭素数１～６の直鎖状もしくは分枝状のアルキル基を表す。

[0182] －Q^{3}－における芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基は、分子構造の直線性が高く、重合性液晶化合物（４）同士が会合しやすく液晶状態を発現しやすい点から、それぞれ独立に、無置換であるか、メチル基、メトキシ基、フッ素原子、塩素原子、臭素原子が置換していることが好ましく、無置換であることがより好ましい。

[0183] －Q^{3}－における芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基が有する置換基は、同一でも異なっていてもよく、また、芳香族炭化水素環基、非芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、非芳香族複素環基の全部が置換されていてもよく、全部が無置換であってもよく、一部が置換されていて一部が無置換であってもよい。

－A^{41}－、－A^{42}－及び－A^{43}－における２価有機基が有する置換基は、同一でも異なっていてもよく、－A^{41}－、－A^{42}－及び－A^{43}－における２価有機基の全部が置換されていてもよく、全部が無置換であってもよく、一部が置換されていて一部が無置換であってもよい。

[0184] －Q^{3}－としては、炭化水素環基が好ましく、フェニレン基、シクロヘキサンジイル基がより好ましい。重合性液晶化合物（４）の分子構造の直線性を高くすることができることから、－Q^{3}－としては、１，４－フェニレン基、シクロヘキサン－１，４－ジイル基がさらに好ましい。

[0185] －A^{41}－、－A^{42}－及び－A^{43}－の２価有機基としては、－Q^{3}－が炭化水素環基であること、すなわち、２価有機基として炭化水素環基であることが好ましい。２価有機基としては、フェニレン基、シクロヘキサンジイル基がより好ましく、重合性液晶化合物（４）の分子構造の直線性を高くすることができることから、１，４－フェニレン基、シクロヘキサン－１，４－ジイル基がさらに好ましい。

[0186] 重合性液晶化合物（４）としては、－A^{41}－、－A^{42}－及び－A^{43}－のうち、一つが、式（５）で表される部分構造であり、それ以外の二つが、それぞれ独立に、２価有機基であることが好ましく、－A^{41}－、－A^{42}－及び－A^{43}－のうち、式（５）で表される部分構造の－C^{y}－が炭化水素環基である

ことがより好ましく、２価有機基が炭化水素環基であることが特に好ましい。さらに、該炭化水素環基が、１，４－フェニレン基又はシクロヘキサン－１，４－ジイル基であることが好ましい。また、－Ａ^{41}－及び－Ａ^{43}－の一方が、シクロヘキサン－１，４－ジイル基であることが好ましい。

また、－Ａ^{41}－及び－Ａ^{43}－のうち、一つが、式（５）で表される部分構造であり、それ以外の一つ及び－Ａ^{42}－が２価有機基であることがより好ましい。この場合、－Ａ^{41}－及び－Ａ^{43}－のうち、２価有機基である一方は、シクロヘキサン－１，４－ジイル基であることが好ましく、－Ａ^{42}－が１，４－フェニレン基であることが特に好ましい。

[0187] （－Ｙ^{1}－及び－Ｙ^{2}－）

－Ｙ^{1}－及び－Ｙ^{2}－は、それぞれ独立に、単結合、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｓ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｓ）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｓ－、－ＳＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ≡Ｃ－、－Ｃ（＝Ｏ）ＮＨ－、－ＮＨＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｓ－、又は－ＳＣＨ$_2$－を表す。重合性液晶化合物（４）の直線性や分子短軸周りの回転運動がしやすい傾向にあることから、－Ｙ^{1}－及び－Ｙ^{2}－としては、それぞれ独立に、π結合性の小さい、単結合、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｓ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｓ）－、－Ｃ（＝Ｏ）Ｓ－、－ＳＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）ＮＨ－、－ＮＨＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｓ－、又は－ＳＣＨ$_2$－が好ましく、単結合、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－ＯＣ（＝Ｏ）－、－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$－、－ＣＨ$_2$Ｏ－、－ＯＣＨ$_2$－がより好ましい。

[0188] 前記式（４Ａ）、式（４Ｃ）、式（４Ｄ）、式（４Ｆ）のように、－Ｘ^{51}－と－Ｙ^{1}－又は－Ｘ^{51}－と－Ｙ^{2}－が結合している場合には、－Ｘ^{51}－と結合する－Ｙ^{1}－又は－Ｘ^{51}－と結合する－Ｙ^{2}－は単結合であることが好ましい。－Ｘ^{51}－と－Ｙ^{1}－及び－Ｙ^{2}－の他方は、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－又は－ＯＣ（＝Ｏ）－であることが好ましい。

前記式（４Ｂ）、式（４Ｅ）のように、－Ｘ^{51}－が－Ｙ^{1}－及び－Ｙ^{2}－の

いずれとも結合していない場合には、－X^{51}－は、－CH_2CH_2－、－CH_2O－、又は－OCH_2－であることが好ましく、－Y^1－及び－Y^2－はいずれも、－C（＝O）O－又は－OC（＝O）－であることが好ましい。

[0189]（ｋ）

ｋは１又は２である。ある態様としては、ｋは１であることが好ましい。別の態様としては、ｋは２であることが好ましい。

ｋが２である場合、それぞれの－Y^2－は互いに同一でも異なっていてもよく、それぞれの－A^{43}－は互いに同一でも異なっていてもよい。

[0190]（好適構造）

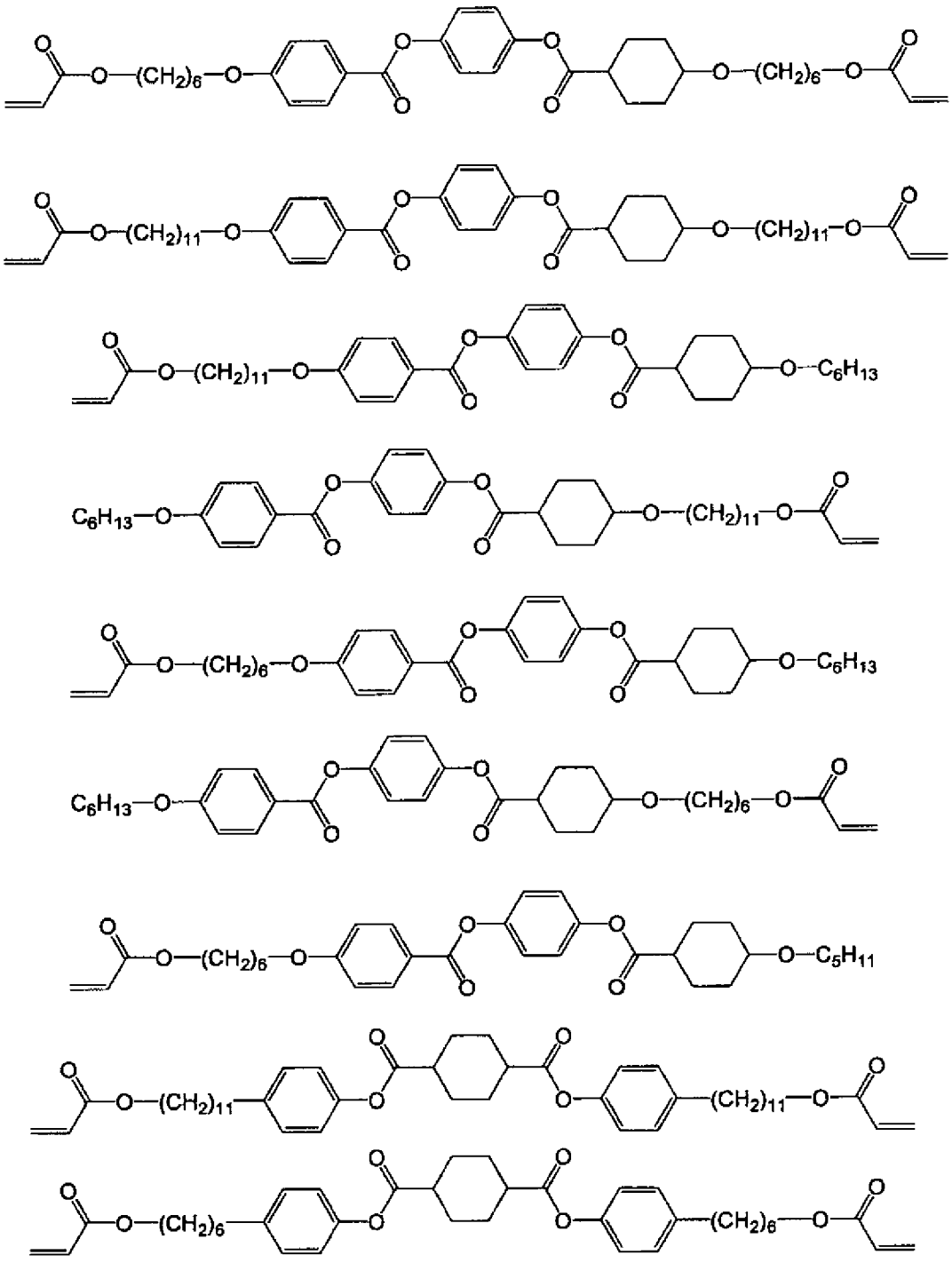
重合性液晶化合物（４）としては、前記式（４Ａ）、（４Ｂ）、（４Ｅ）又は（４Ｆ）で表される化合物であることが液晶化合物の間に働く分子間相互作用を最適とし、かつ適切なコアの大きさとなり分子配向性が良好となる理由で好ましい。

[0191]（重合性液晶化合物の具体例）

本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物として、具体的には、以下に記載の重合性液晶化合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。以下の例示式中、－C_6H_{13}はｎ－ヘキシル基、－C_5H_{11}はｎ－ペンチル基を意味する。

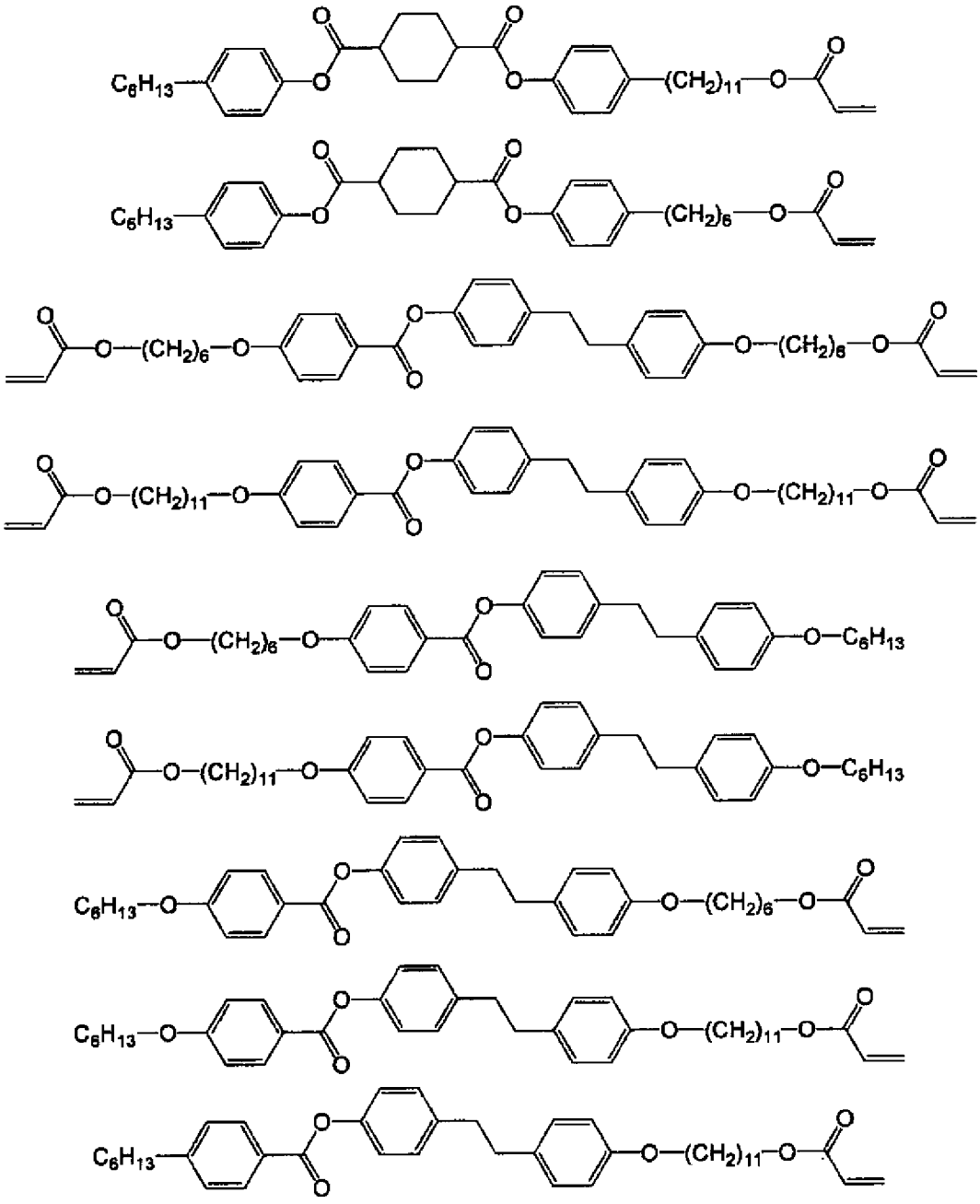
[0192]

[化13]



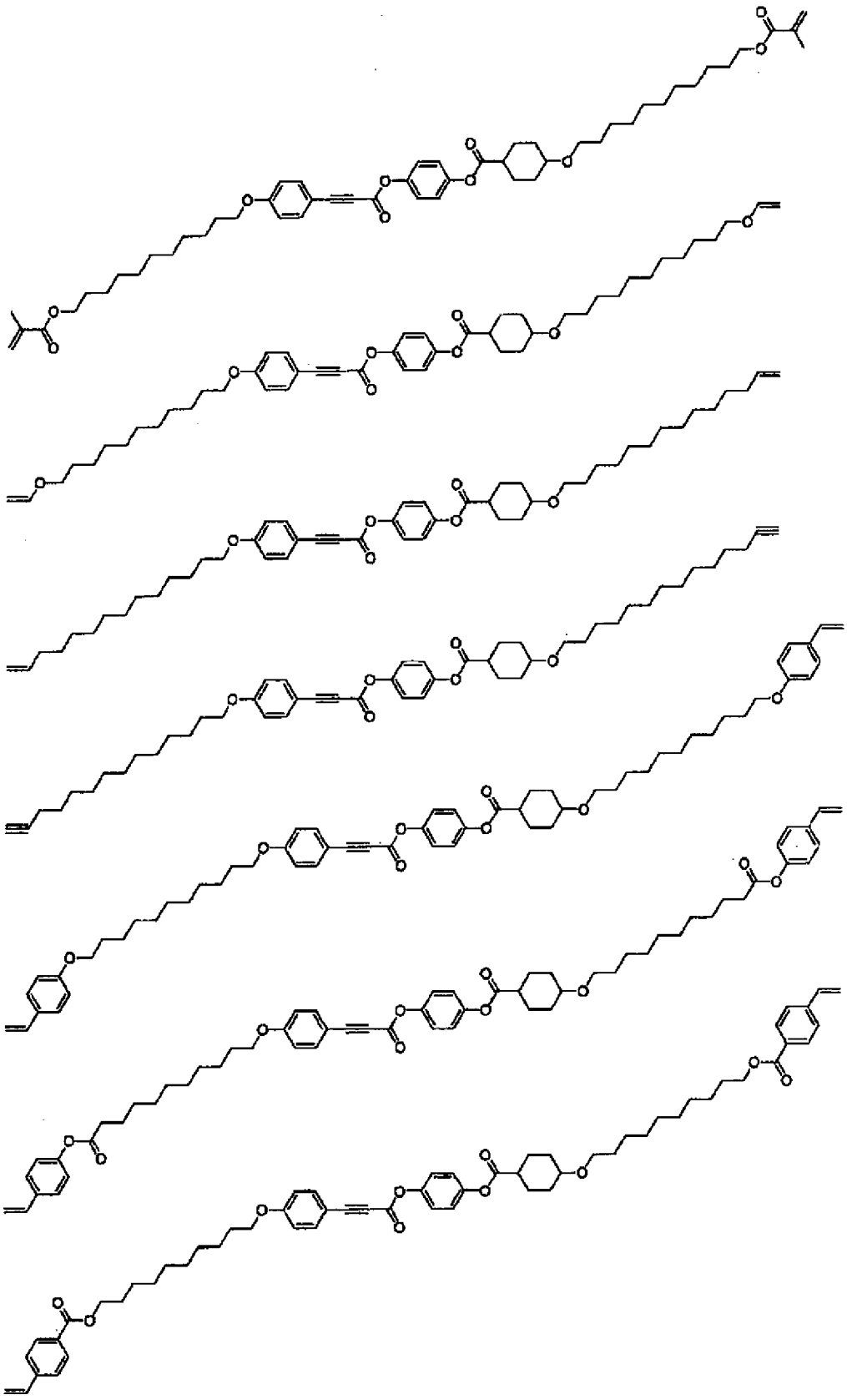
[0193]

[化14]

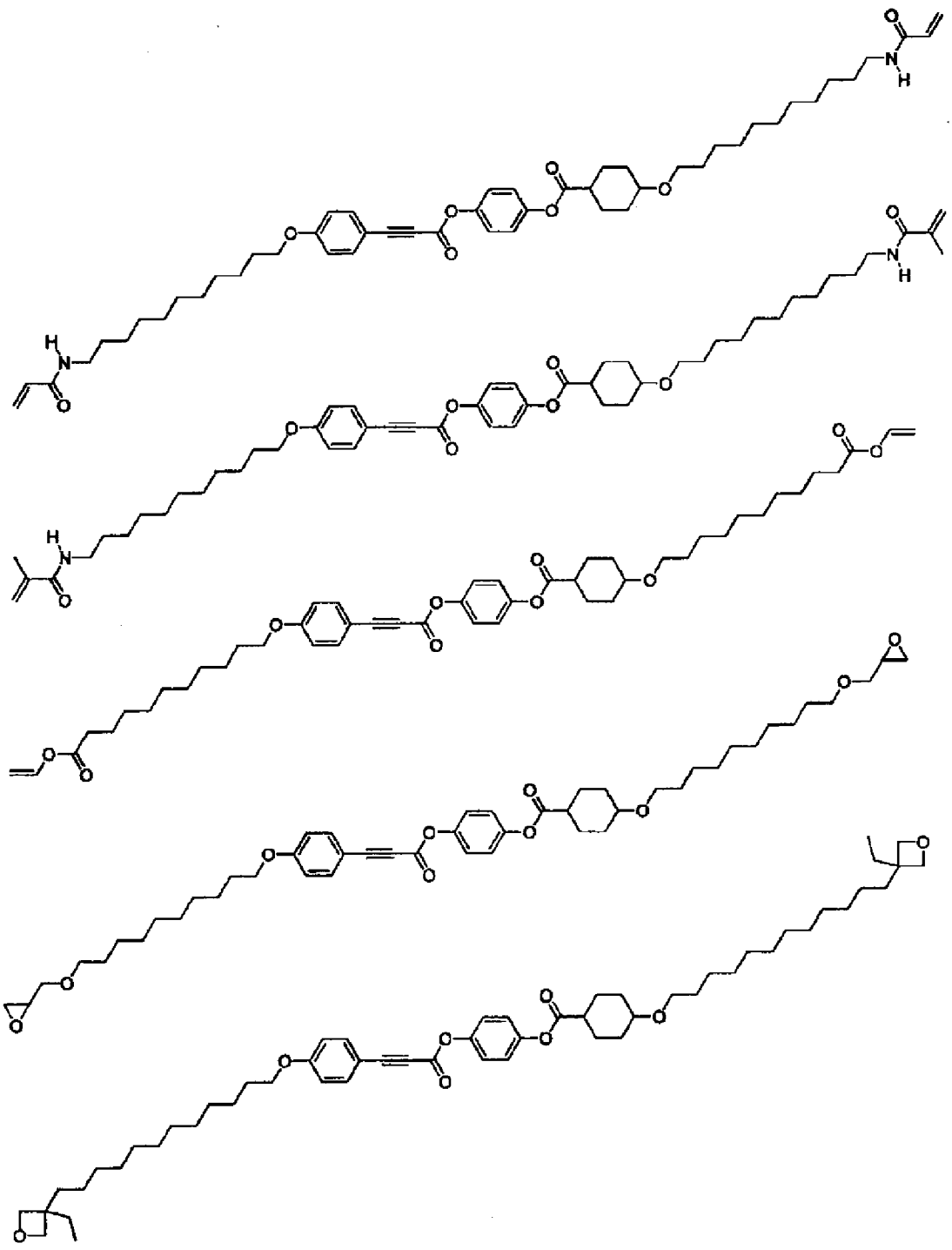


[0194]

[化15]

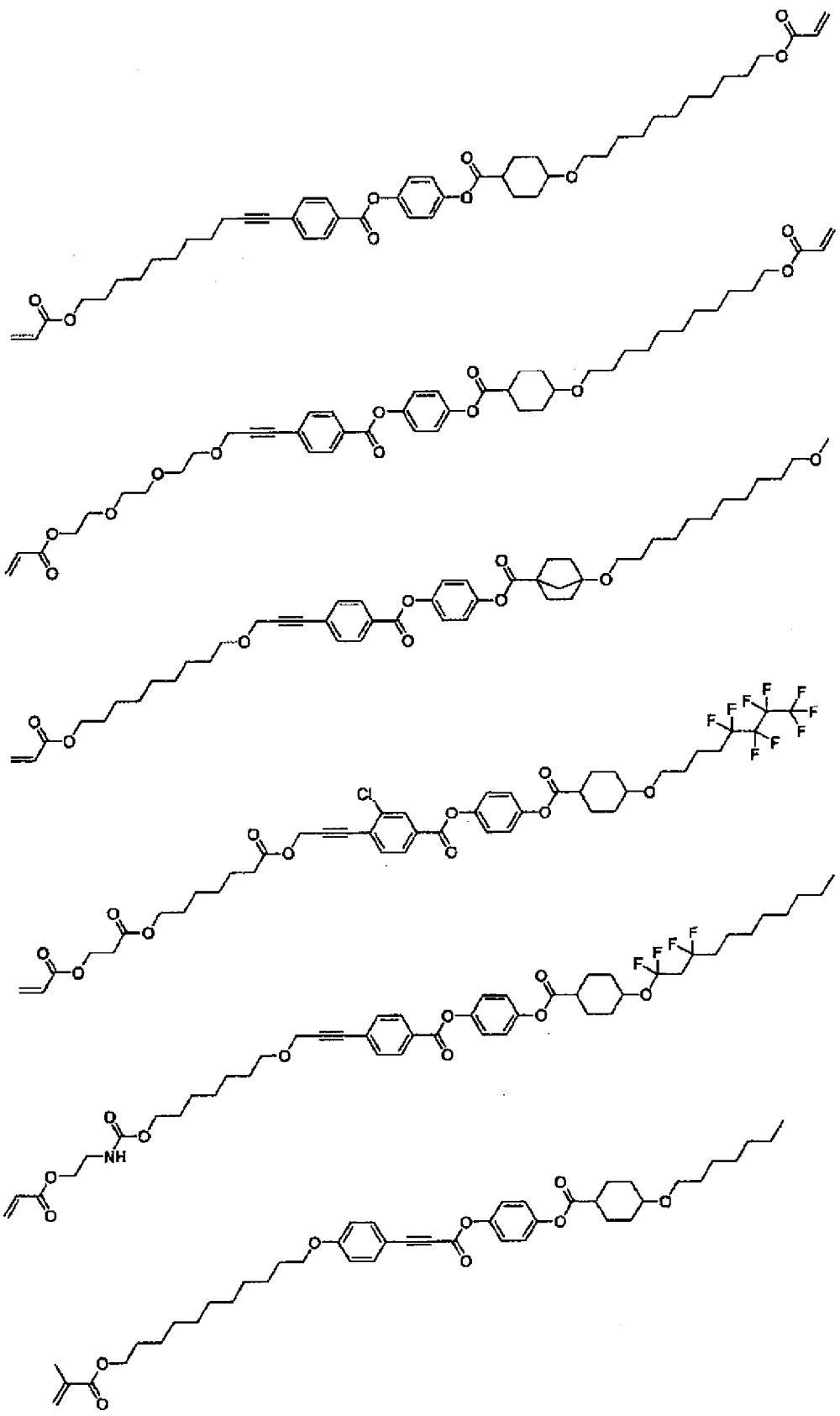


[0195] [化16]



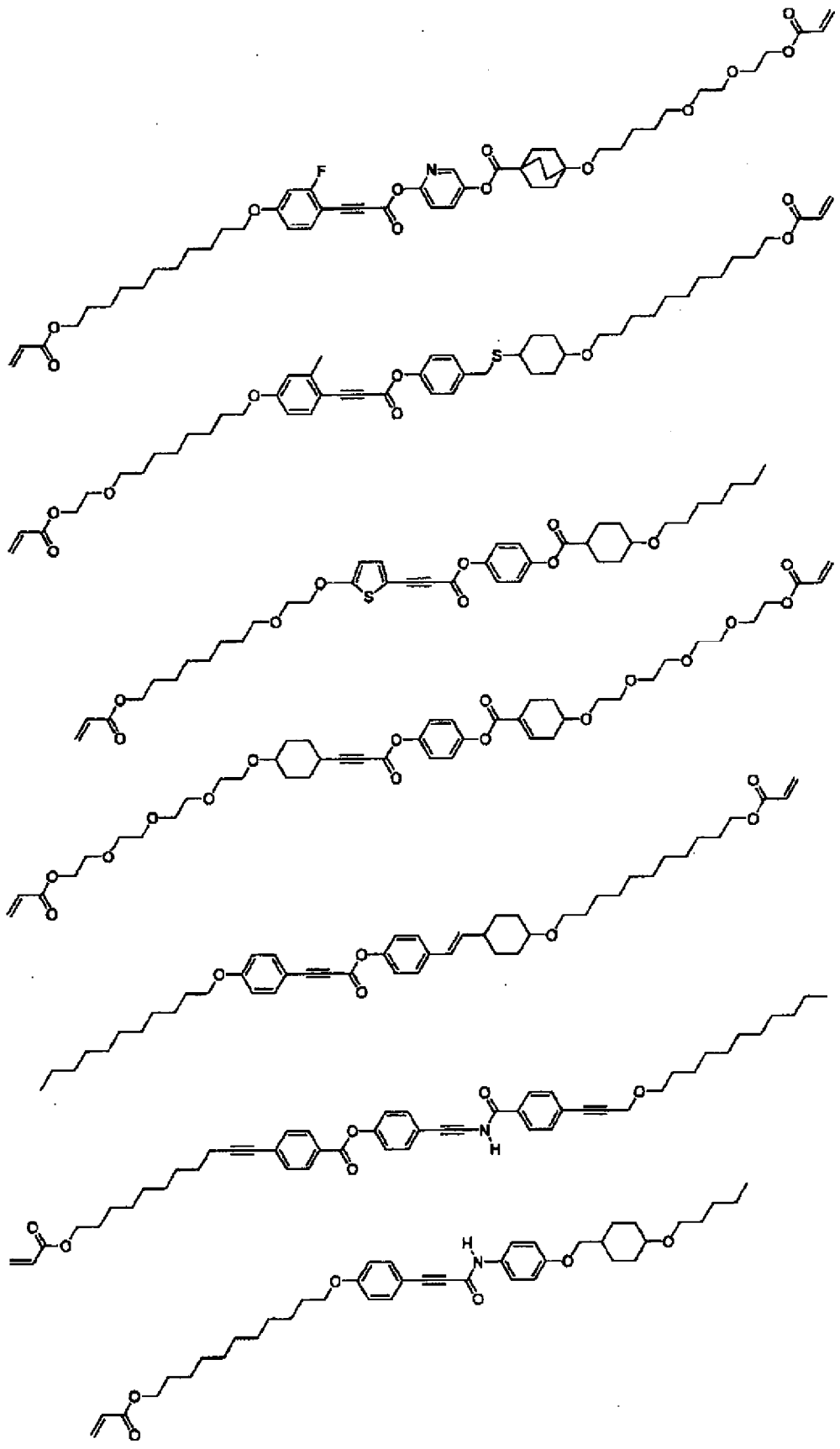
[0196]

[化17]



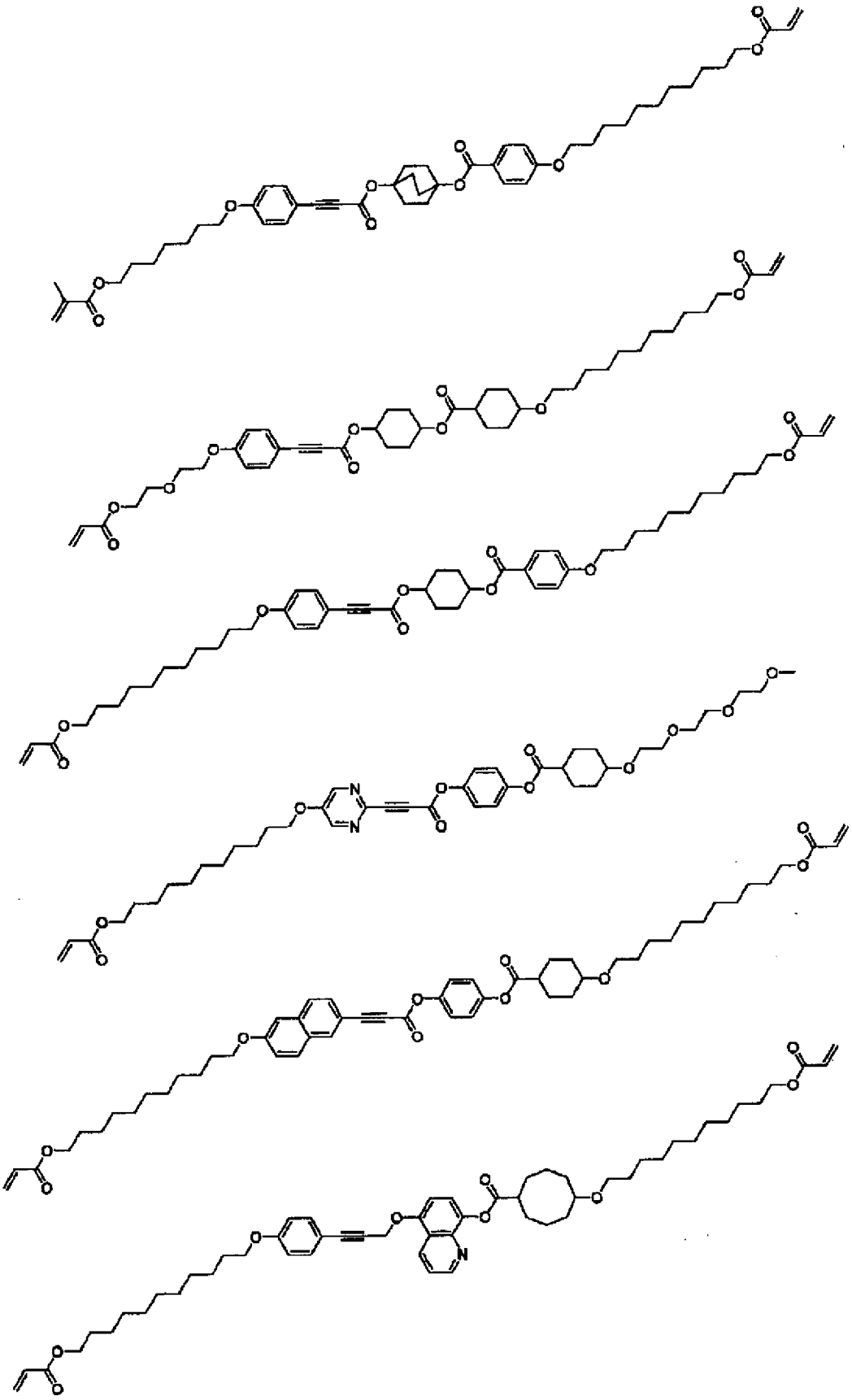
[0197]

[化18]

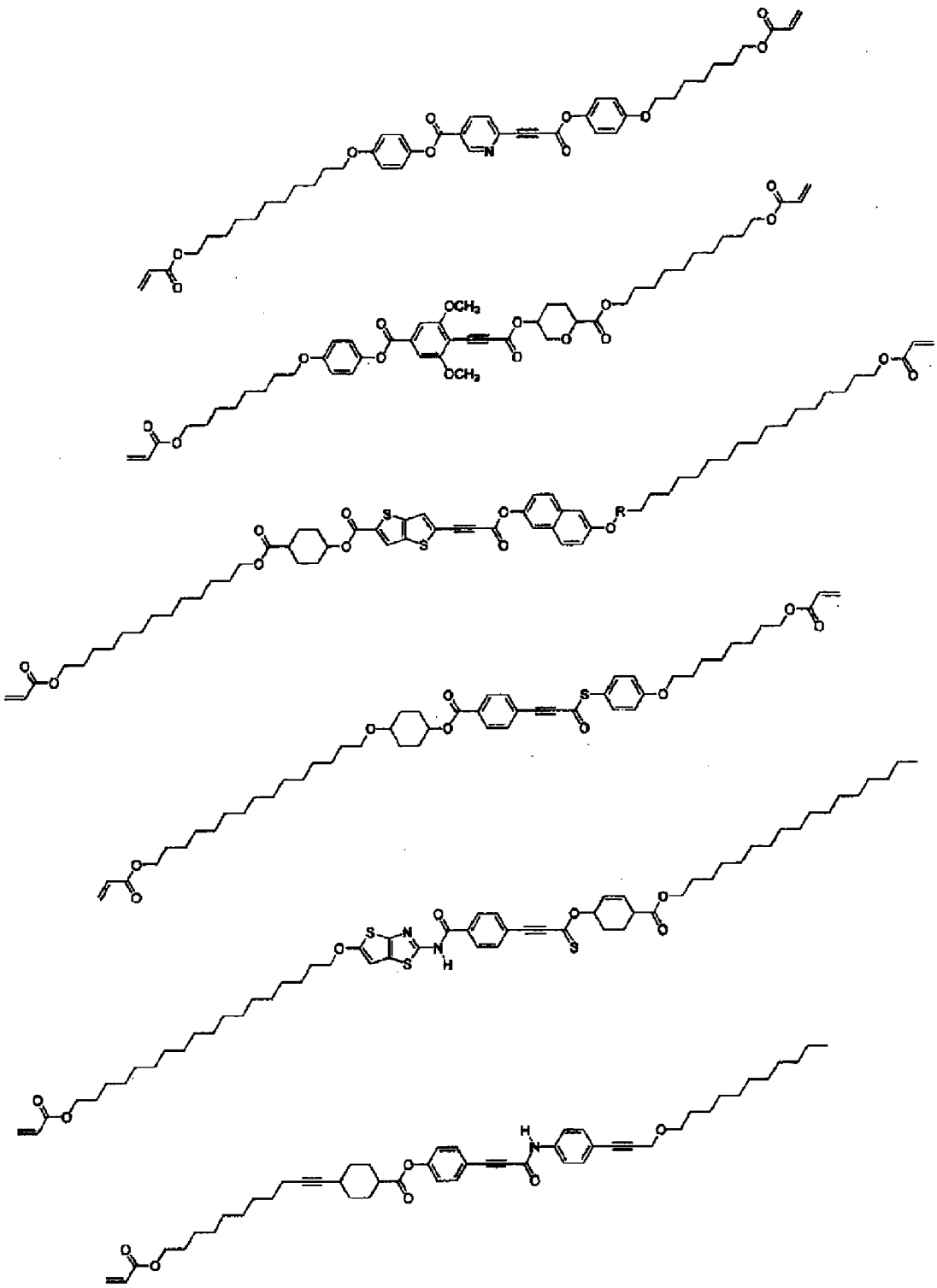


[0198]

[化19]

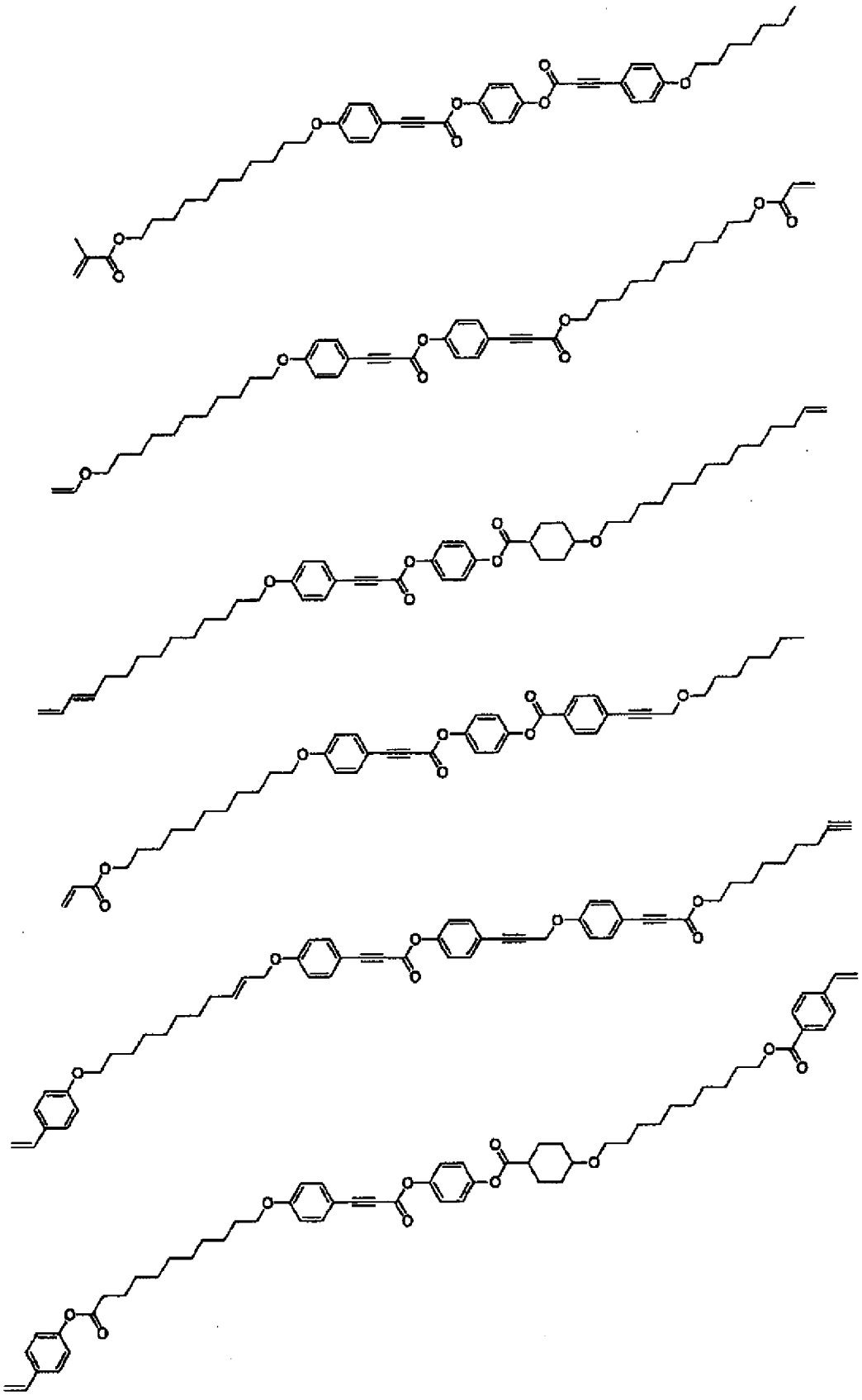


[0199] [化20]

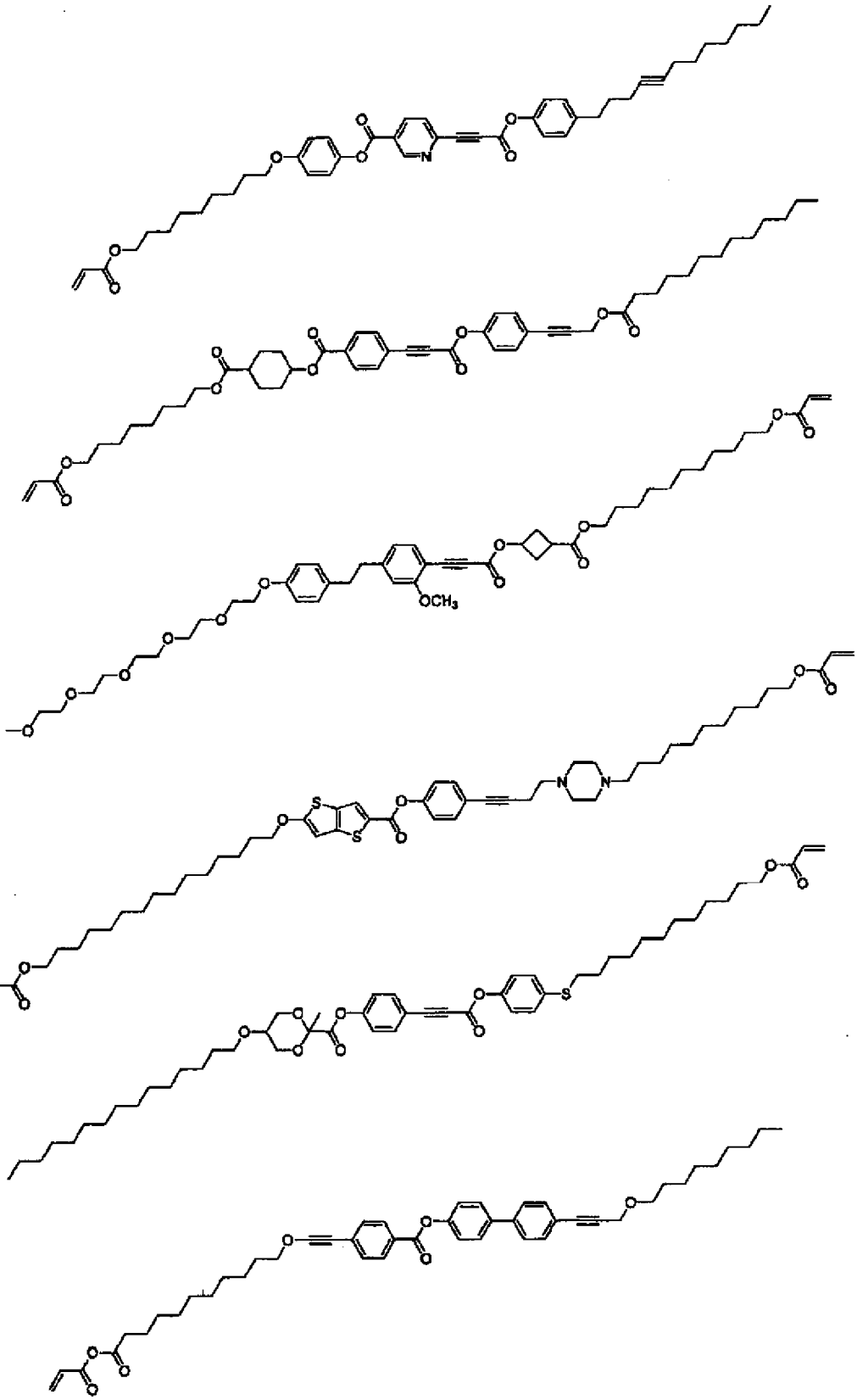


[0200]

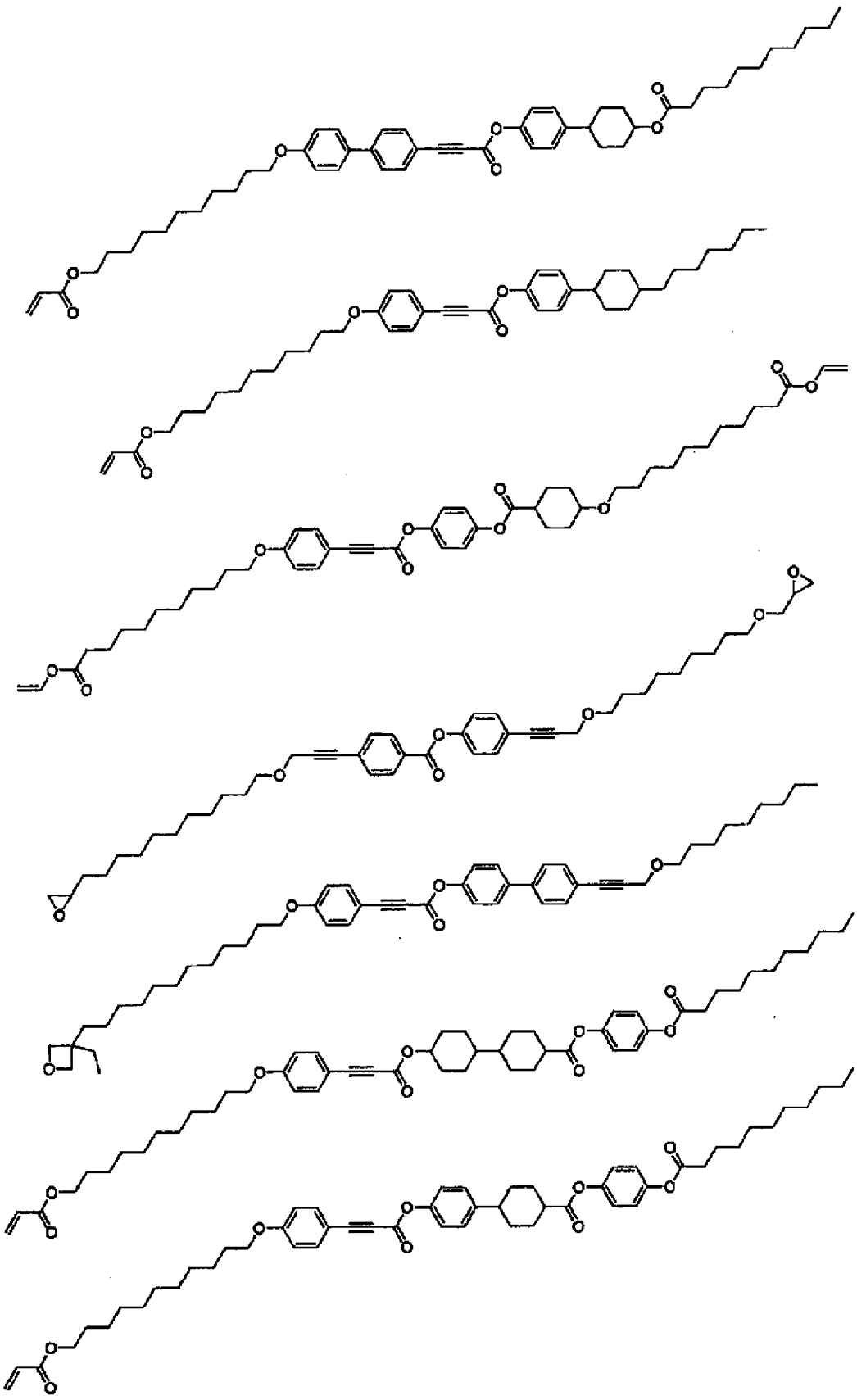
[化21]



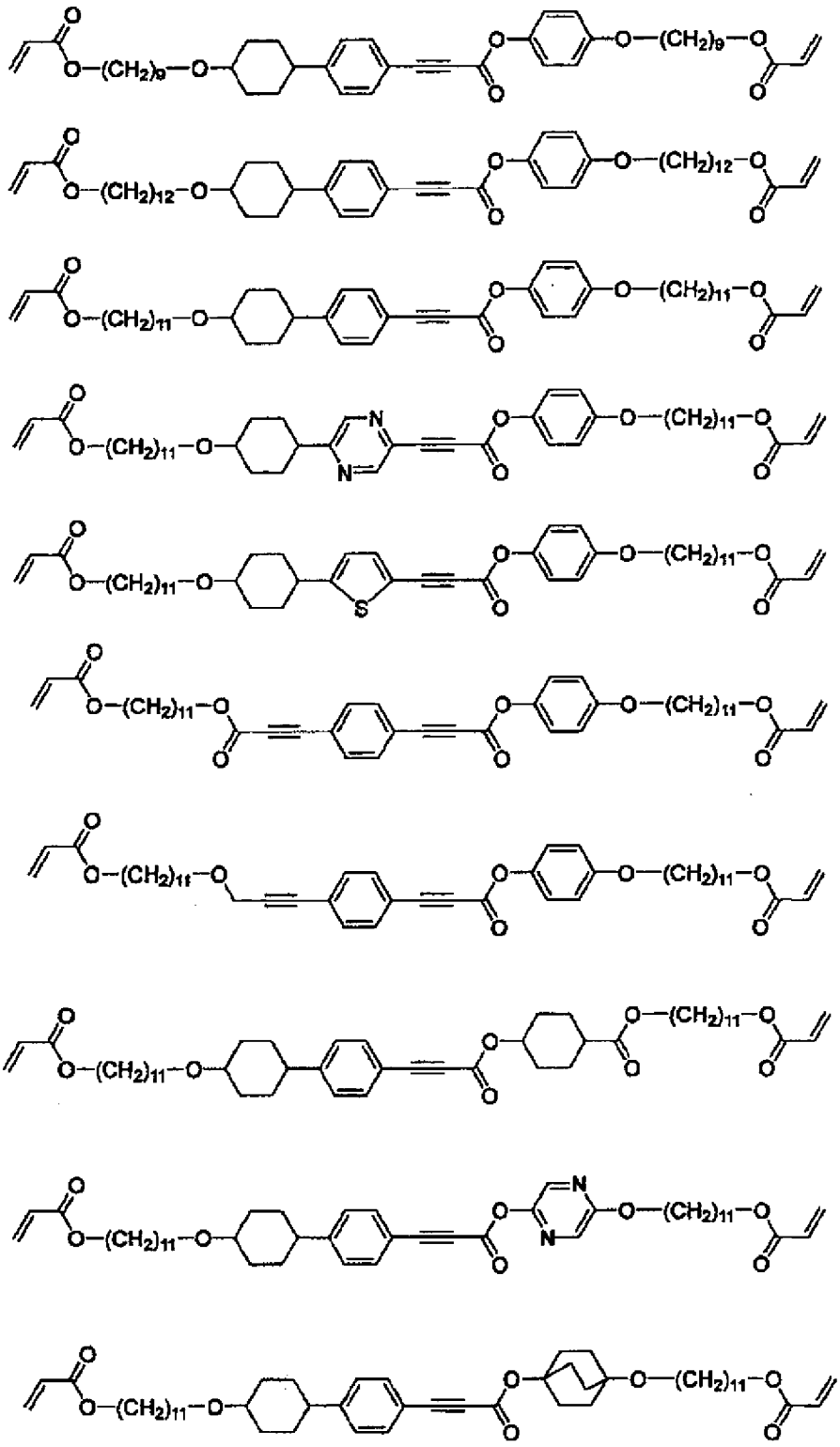
[0201] [化22]



[0202] [化23]

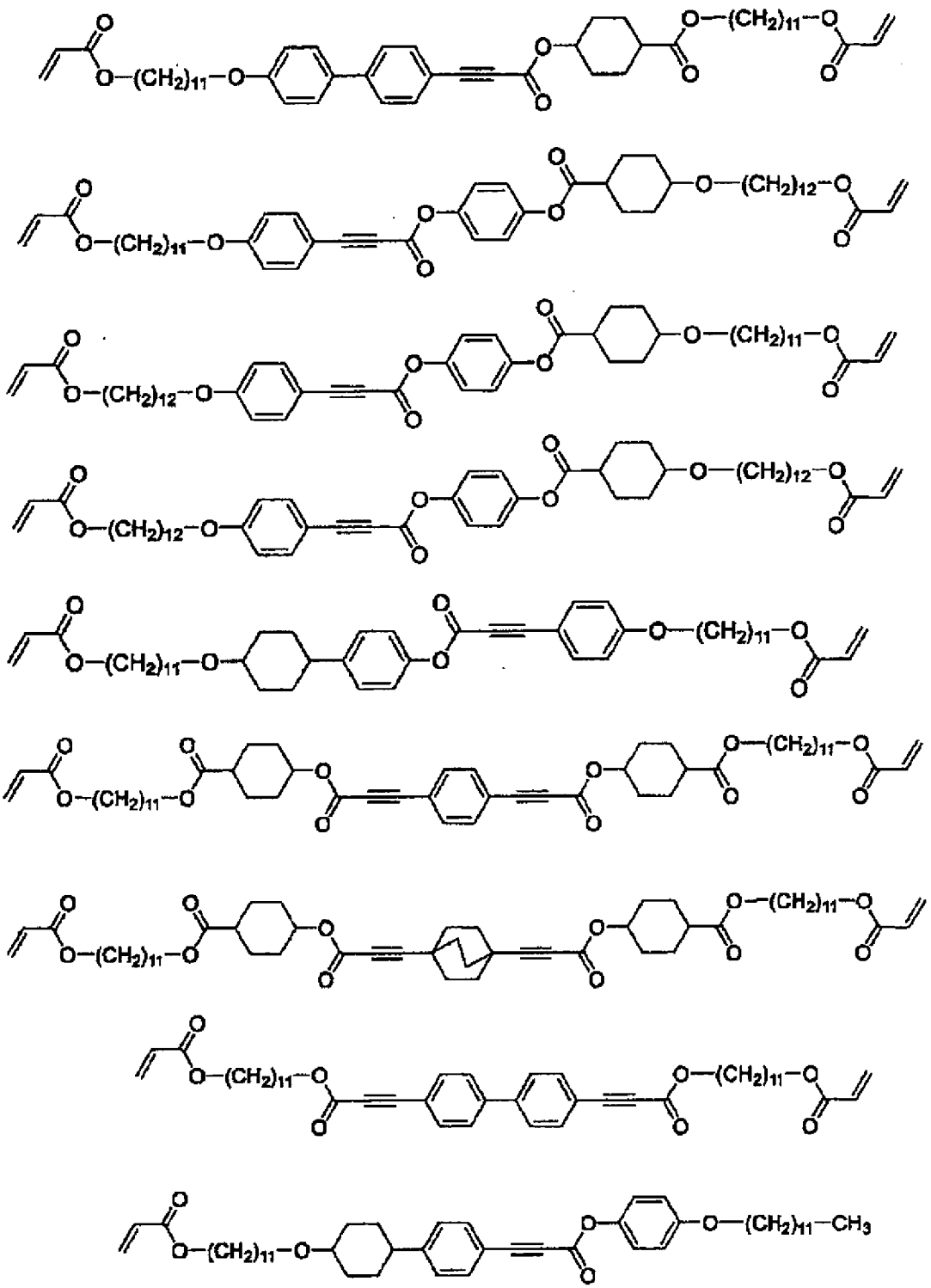


[0203] [化24]



[0204]

[化25]



[0205] （液晶化合物の含有量）

本発明の異方性色素膜形成用組成物に含有される液晶化合物は、重合性液

晶化合物（４）からなることが好ましい。本発明の異方性色素膜形成用組成物には、重合性液晶化合物の１種のみが単独で含まれていてもよく、２種以上が任意の組み合わせ及び比率で含まれていてもよい。

[0206] 本発明の異方性色素膜形成用組成物における液晶化合物の含有量（２種以上の液晶化合物を併用する場合は、それぞれの含有量の総和）は、異方性色素膜形成用組成物の固形分（１００質量部）に対して、３５質量部以上が好ましく、５０質量部以上がより好ましく、５５質量部以上がさらに好ましく、９９質量部以下が好ましく、９８質量部以下がより好ましい。異方性色素膜形成用組成物の液晶化合物の含有量が上記下限以上上限以下であれば液晶分子の配向性が高くなる傾向にある。

[0207] 本発明の異方性色素膜形成用組成物は、重合性液晶化合物（４）以外の他の重合性または非重合性の液晶化合物の１種または２種以上を含むものであってもよいが、重合性液晶化合物（４）を用いることによる本発明の効果をより一層有効に得る観点から、本発明の異方性色素膜形成用組成物に含まれる液晶化合物の総量１００質量％中の重合性液晶化合物（４）の割合は、５質量％以上であることが好ましく、１０質量％以上であることがより好ましく、特に１５～１００質量％であることが好ましい。

[0208] また、本発明の異方性色素膜形成用組成物は、重合性液晶化合物を、その異方性色素膜形成用組成物中の質量濃度が、本発明の化合物の濃度に対して、後述の質量濃度となるように含有することが好ましい。

[0209]（等方相出現温度）

本発明の異方性色素膜形成用組成物に含有される重合性液晶化合物は、プロセスの観点から、その等方相出現温度が、１６０℃以下であることが好ましく、１４０℃以下がより好ましく、１１５℃以下がさらに好ましく、１１０℃以下がよりさらに好ましく、１０５℃以下が特に好ましい。

ここで等方相出現温度とは、液晶から液体への相転移温度及び液体から液晶への相転移温度を意味する。本発明においては、これらの相転移温度の少なくとも一方が上記上限以下であることが好ましく、これらの相転移温度の

両方が上記上限以下であることがより好ましい。

[0210]（重合性液晶化合物の製造方法）

本発明の異方性色素膜形成用組成物に含有される重合性液晶化合物は、アルキル化反応、エステル化反応、アミド化反応、エーテル化反応、イプソ置換反応、金属触媒を用いたカップリング反応等の公知の化学反応を組み合わせることにより製造することができる。

例えば、本発明の異方性色素膜形成用組成物に含有される重合性液晶化合物は、後掲の実施例に記載の方法や、「液晶便覧」（丸善株式会社、平成１２年１０月３０日発行）の４４９～４６８ページに記載の方法にしたがって合成することができる。

[0211]（重合性液晶化合物と本発明の化合物との関係）

異方性色素膜形成用組成物を用いて形成される異方性色素膜の配向性を向上させやすいとの観点で、異方性色素膜形成用組成物においては、重合性液晶化合物の分子長と色素の分子長との差が小さいほうが液晶分子と色素分子の分子間相互作用が強く、色素分子が液晶分子同士の会合を阻害し難いため好ましい。

[0212] したがって、本発明の異方性色素膜形成用組成物においては、異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物が有する環構造の数（r_{n1}）と、異方性色素膜形成用組成物に含まれる本発明の化合物が有する環構造の数（r_{n2}）との比（r_{n1}/r_{n2}）が、０．７～１．５であることが好ましい。

なお、２つ以上の環が縮合する縮合環は、環構造としては１つとして数える。

[0213] ここで、本発明の化合物、例えば化合物（１）が有する環構造の数（r_{n2}）とは、式（１）において$-A^{11}-$、$-A^{12}-$、$-A^{13}-$及び$-A^{14}-$の総和であり、r_{n2}は４である。

式（１）の$-X^{1}$がピロリジニル基やピペリジニル基のような環状の官能基であっても、$-X^{1}$に含まれる環構造は本発明の化合物が有する環構造の数（r_{n2}）には含めない。

また、本発明の化合物、例えば化合物（２）が有する環構造の数（r_{n2}）とは、式（２）においては、－A^1－、－A^2－、及び－A^3－の総和であり、具体的には、ｎが１の場合、r_{n2}は３；ｎが２の場合、r_{n2}は４；ｎが３の場合、r_{n2}は５である。

式（２）の－Ｘがピロリジニル基やピペリジニル基のような環状の官能基であっても、－Ｘに含まれる環構造は本発明の化合物が有する環構造の数（r_{n2}）には含めない。

[0214] より具体的には、r_{n2}が３である場合、r_{n1}は３又は４であり；r_{n2}が４である場合、r_{n1}は３、４、５又は６であり；r_{n2}が５である場合、r_{n1}は４、５、６、又は７であれば、異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物が有する環構造の数（r_{n1}）と、異方性色素膜形成用組成物に含まれる本発明の化合物が有する環構造の数（r_{n2}）との比（$r_{n1}／r_{n2}$）が０．７～１．５となるため好ましい。

[0215] 異方性色素膜形成用組成物に含まれる重合性液晶化合物が有する環構造の数（r_{n1}）には、重合性液晶化合物における重合性基に含まれる環構造（例えば、オキシラン環やオキセタン環など。）は含めない。

[0216] 本発明の異方性色素膜形成用組成物は、重合性液晶化合物の質量濃度が本発明の化合物の質量濃度の１倍以上となるように含むことが好ましい。重合性液晶化合物の質量濃度が本発明の化合物の質量濃度の１倍以上であれば高い二色比が得られる傾向があり、異方性色素膜の機械強度を向上できる観点から好ましい。本発明の異方性色素膜形成用組成物の重合性液晶化合物の質量濃度は、本発明の化合物の質量濃度の１．５倍以上であることがより好ましく、２倍以上であることがさらに好ましく、３倍以上であることが特に好ましく、７倍以上であることがより特に好ましい。一方で、重合性液晶化合物が本発明の化合物に対して多過ぎると異方性色素膜としての吸光度が小さくなる傾向であることから、本発明の異方性色素膜形成用組成物中の重合性液晶化合物の質量濃度は、本発明の化合物の質量濃度の１０００倍以下であることが好ましく、７００倍以下であることがより好ましく、５００倍以下

であることがさらに好ましい。

[0217] ＜重合開始剤＞

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、必要に応じて、重合開始剤を含んでもよい。

重合開始剤は、重合性液晶化合物の重合反応を開始し得る化合物である。重合開始剤としては、光の作用により活性ラジカルを発生する光重合開始剤が好ましい。

[0218] 使用しうる重合開始剤としては、例えば、チタノセン誘導体類；ビイミダゾール誘導体類；ハロメチル化オキサジアゾール誘導体類；ハロメチル－ｓ－トリアジン誘導体類；アルキルフェノン誘導体類；オキシムエステル系誘導体類；ベンゾイン類；ベンゾフェノン誘導体類；アシルホスフィンオキサイド誘導体類；ヨードニウム塩類；スルホニウム塩類；アントラキノン誘導体類；アセトフェノン誘導体類；チオキサントン誘導体類；安息香酸エステル誘導体類；アクリジン誘導体類；フェナジン誘導体類；アンスロン誘導体類が挙げられる。

これらの光重合開始剤の中では、アルキルフェノン誘導体類、オキシムエステル系誘導体類、ビイミダゾール誘導体類、アセトフェノン誘導体類、及びチオキサントン誘導体類がより好ましい。

[0219] 具体的には、チタノセン誘導体類としては、例えば、ジシクロペンタジエニルチタニウムジクロライド、ジシクロペンタジエニルチタニウムビスフェニル、ジシクロペンタジエニルチタニウムビス（２，３，４，５，６－ペンタフルオロフェニ－１－イル）、ジシクロペンタジエニルチタニウムビス（２，３，５，６－テトラフルオロフェニ－１－イル）、ジシクロペンタジエニルチタニウムビス（２，４，６－トリフルオロフェニ－１－イル）、ジシクロペンタジエニルチタニウムジ（２，６－ジフルオロフェニ－１－イル）、ジシクロペンタジエニルチタニウムジ（２，４－ジフルオロフェニ－１－イル）、ジ（メチルシクロペンタジエニル）チタニウムビス（２，３，４，５，６－ペンタフルオロフェニ－１－イル）、ジ（メチルシクロペンタジエ

ニル）チタニウムビス（２，６－ジフルオロフェニ－１－イル）、ジシクロペンタジエニルチタニウム〔２，６－ジ－フルオロ－３－（ピロ－１－イル）－フェニ－１－イル〕が挙げられる。

[0220] ビイミダゾール誘導体類としては、例えば、２－（２’－クロロフェニル）－４，５－ジフェニルイミダゾール２量体、２－（２’－クロロフェニル）－４，５－ビス（３’－メトキシフェニル）イミダゾール２量体、２－（２’－フルオロフェニル）－４，５－ジフェニルイミダゾール２量体、２－（２’－メトキシフェニル）－４，５－ジフェニルイミダゾール２量体、（４’－メトキシフェニル）－４，５－ジフェニルイミダゾール２量体が挙げられる。

[0221] ハロメチル化オキサジアゾール誘導体類としては、例えば、２－トリクロロメチル－５－（２’－ベンゾフリル）－１，３，４－オキサジアゾール、２－トリクロロメチル－５－〔β－（２’－ベンゾフリル）ビニル〕－１，３，４－オキサジアゾール、２－トリクロロメチル－５－〔β－（２’－（６’’－ベンゾフリル）ビニル）〕－１，３，４－オキサジアゾール、２－トリクロロメチル－５－フリル－１，３，４－オキサジアゾールが挙げられる。

[0222] ハロメチル－ｓ－トリアジン誘導体類としては、例えば、２－（４－メトキシフェニル）－４，６－ビス（トリクロロメチル）－ｓ－トリアジン、２－（４－メトキシナフチル）－４，６－ビス（トリクロロメチル）－ｓ－トリアジン、２－（４－エトキシナフチル）－４，６－ビス（トリクロロメチル）－ｓ－トリアジン、２－（４－エトキシカルボニルナフチル）－４，６－ビス（トリクロロメチル）－ｓ－トリアジンが挙げられる。

[0223] アルキルフェノン誘導体類としては、例えば、ジエトキシアセトフェノン、２－メチル－１－〔４－（メチルチオ）フェニル〕－２－モルフォリノプロパン－１－オン、２－ベンジル－２－ジメチルアミノ－１－（４－モルフォリノフェニル）－ブタノン－１、２－ベンジル－２－ジメチルアミノ－１－（４－モルフォリノフェニル）ブタン－１－オン、４－ジメチルアミノエ

チルベンゾエート、４－ジメチルアミノイソアミルベンゾエート、４－ジエチルアミノアセトフェノン、４－ジメチルアミノプロピオフェノン、２－エチルヘキシル－１，４－ジメチルアミノベンゾエート、２，５－ビス（４－ジエチルアミノベンザル）シクロヘキサノン、７－ジエチルアミノ－３－（４－ジエチルアミノベンゾイル）クマリン、４－（ジエチルアミノ）カルコンが挙げられる。

[0224] オキシムエステル系誘導体類としては、例えば、２－（ベンゾイルオキシイミノ）－１－［４－（フェニルチオ）フェニル］－１－オクタノン、Ｏ－アセチル－１－［６－（２－メチルベンゾイル）－９－エチル－９Ｈ－カルバゾール－３－イル］エタノンオキシム、特開２０００－８００６８号公報、特開２００６－３６７５０号公報、国際公開第２００９／１３１１８９号等に記載されているオキシムエステル誘導体が挙げられる。

[0225] ベンゾイン類としては、例えば、ベンゾイン、ベンゾインメチルエーテル、ベンゾインフェニルエーテル、ベンゾインイソブチルエーテル、ベンゾインイソプロピルエーテルが挙げられる。

[0226] ベンゾフェノン誘導体類としては、例えば、ベンゾフェノン、ミヒラーズケトン、２－メチルベンゾフェノン、３－メチルベンゾフェノン、４－メチルベンゾフェノン、２－クロロベンゾフェノン、４－ブロモベンゾフェノン、２－カルボキシベンゾフェノン、ｏ－ベンゾイル安息香酸メチル、４－フェニルベンゾフェノン、４－ベンゾイル－４’－メチルジフェニルサルファイド、３，３’，４，４’－テトラ（ｔｅｒｔ－ブチルパーオキシカルボニル）ベンゾフェノン、及び２，４，６－トリメチルベンゾフェノンが挙げられる。

[0227] アシルホスフィンオキサイド誘導体類としては、例えば、２，４，６－トリメチルベンゾイルジフェニルホスフィンオキサイド、ビス－（２，６－ジメトキシベンゾイル）－２，４，４－トリメチルペンチルホスフィンオキサイド及びビス（２，４，６－トリメチルベンゾイル）フェニルホスフィンオキサイド等が挙げられる。

[0228] ヨードニウム塩類としては、例えば、ジフェニルヨードニウム・テトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、ジフェニルヨードニウム・ヘキサフルオロホスフェート、ジフェニルヨードニウム・ヘキサフルオロアンチモネート、ジ（４－ノニルフェニル）ヨードニウム・ヘキサフルオロホスフェートが挙げられる。

[0229] スルホニウム塩類としては、例えば、トリフェニルスルホニウム・ヘキサフルオロホスフェート、トリフェニルスルホニウム・ヘキサフルオロアンチモネート、トリフェニルスルホニウム・テトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、ジフェニル〔４－（フェニルチオ）フェニル〕スルホニウム・ヘキサフルオロホスフェート、４，４’－ビス〔ジフェニルスルホニオ〕ジフェニルスルフィド・ビスヘキサフルオロホスフェート、４，４’－ビス〔ジ（β－ヒドロキシエトキシ）フェニルスルホニオ〕ジフェニルスルフィド・ビスヘキサフルオロアンチモネート、４，４’－ビス〔ジ（β－ヒドロキシエトキシ）フェニルスルホニオ〕ジフェニルスルフィド・ビスヘキサフルオロホスフェート、７－〔ジ（ｐ－トルイル）スルホニオ〕－２－イソプロピルチオキサントン・ヘキサフルオロアンチモネート、７－〔ジ（ｐ－トルイル）スルホニオ〕－２－イソプロピルチオキサントン・テトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、４－フェニルカルボニル－４’－ジフェニルスルホニオ－ジフェニルスルフィド・ヘキサフルオロホスフェート、４－（ｐ－ｔｅｒｔ－ブチルフェニルカルボニル）－４’－ジフェニルスルホニオ－ジフェニルスルフィド・ヘキサフルオロアンチモネート、４－（ｐ－ｔｅｒｔ－ブチルフェニルカルボニル）－４’－ジ（ｐ－トルイル）スルホニオ－ジフェニルスルフィド・テトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレートが挙げられる。

[0230] アントラキノン誘導体類としては、例えば、２－メチルアントラキノン、２－エチルアントラキノン、２－ｔ－ブチルアントラキノン、１－クロロアントラキノンが挙げられる。

[0231] アセトフェノン誘導体類としては、例えば、２，２－ジメトキシ－２－フ

ェニルアセトフェノン、２，２－ジエトキシアセトフェノン、１－ヒドロキシシクロヘキシルフェニルケトン、α－ヒドロキシ－２－メチルフェニルプロパノン、１－ヒドロキシ－１－メチルエチル－（ｐ－イソプロピルフェニル）ケトン、１－ヒドロキシ－１－（ｐ－ドデシルフェニル）ケトン、２－メチル－（４’－メチルチオフェニル）－２－モルホリノ－１－プロパノン、１，１，１－トリクロロメチル－（ｐ－ブチルフェニル）ケトン等が挙げられる。

[0232] チオキサントン誘導体類としては、例えば、チオキサントン、２－エチルチオキサントン、２－イソプロピルチオキサントン、２－クロロチオキサントン、２，４－ジメチルチオキサントン、２，４－ジエチルチオキサントン、２，４－ジイソプロピルチオキサントンが挙げられる。

[0233] 安息香酸エステル誘導体類としては、例えば、ｐ－ジメチルアミノ安息香酸エチル、ｐ－ジエチルアミノ安息香酸エチルが挙げられる。

[0234] アクリジン誘導体類としては、例えば、９－フェニルアクリジン、９－（ｐ－メトキシフェニル）アクリジンが挙げられる。

[0235] フェナジン誘導体類としては、例えば、９，１０－ジメチルベンズフェナジンが挙げられる。

[0236] アンスロン誘導体類としては、例えば、ベンズアンスロンが挙げられる。

[0237] 重合開始剤は、１種を単独で用いてもよく、２種以上を併用してもよい。

[0238] 重合開始剤として、市販品を用いることもできる。

市販品としては、例えば、ＩＲＧＡＣＵＲＥ（登録商標。以下同様。）２５０、ＩＲＧＡＣＵＲＥ ６５１、ＩＲＧＡＣＵＲＥ １８４、ＤＡＲＯＣＵＲＥ １１７３、ＩＲＧＡＣＵＲＥ ２９５９、ＩＲＧＡＣＵＲＥ １２７、ＩＲＧＡＣＵＲＥ ９０７、ＩＲＧＡＣＵＲＥ ３６９、ＩＲＧＡＣＵＲＥ ３７９ＥＧ、ＬＵＣＩＲＩＮ ＴＰＯ、ＩＲＧＡＣＵＲＥ ８１９、ＩＲＧＡＣＵＲＥ ７８４、ＯＸＥ－０１、ＯＸＥ－０２（いずれも、ＢＡＳＦ社製）；セイクオール（登録商標）ＢＺ、Ｚ、及びＢＥＥ（精工化学株式会社製）；カヤキュアー（ｋａｙａｃｕｒｅ）（登録商標）ＢＰ１００

、及びＵＶＩ－６９９２（ダウ・ケミカル株式会社製）；アデカオプトマーＳＰ－１５２、及びＳＰ－１７０（株式会社ＡＤＥＫＡ製）；ＴＡＺ－Ａ、及びＴＡＺ－ＰＰ（日本シイベルヘグナー株式会社製）；並びに、ＴＡＺ－１０４（株式会社三和ケミカル製）；ＴＲＯＮＬＹＴＲ－ＰＢＧ－３０４、ＴＲＯＮＬＹＴＲ－ＰＢＧ－３０９、ＴＲＯＮＬＹＴＲ－ＰＢＧ－３０５、ＴＲＯＮＬＹＴＲ－ＰＢＧ－３１４（常州強力電子新材料有限公司社（ＣＨＡＮＧＺＨＯＵ　ＴＲＯＮＬＹ　ＮＥＷ　ＥＬＥＣＴＲＯＮＩＣ　ＭＡＴＥＲＩＡＬＳ　ＣＯ．，ＬＴＤ）製）が挙げられる。

[0239] 本発明の異方性色素膜形成用組成物が重合開始剤を含む場合、本発明の異方性色素膜形成用組成物における重合開始剤の含有量は、重合性液晶化合物の配向を乱し難いという観点から、重合性液晶化合物１００質量部に対して、好ましくは０．１～３０質量部であり、より好ましくは０．５～１０質量部であり、さらに好ましくは０．５～８質量部である。

[0240] また、必要に応じて重合開始剤に重合加速剤を併用してもよい。用いられる重合加速剤としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノ安息香酸エチルエステル等のＮ，Ｎ－ジアルキルアミノ安息香酸アルキルエステル類；２－メルカプトベンゾチアゾール、２－メルカプトベンゾオキサゾール、２－メルカプトベンゾイミダゾール等の複素環を有するメルカプト化合物；脂肪族多官能メルカプト化合物等のメルカプト化合物類が挙げられる。

重合加速剤は、１種を単独で用いてもよく、２種以上を併用してもよい。

[0241] また、必要に応じて感応感度を高める目的で、増感色素を併用してもよい。増感色素は、露光光源の波長に応じて、適切なものが用いられるが、例えば、特開平４－２２１９５８号公報、特開平４－２１９７５６号公報等に記載のキサンテン系色素；特開平３－２３９７０３号公報、特開平５－２８９３３５号公報等に記載の複素環を有するクマリン系色素；特開平３－２３９７０３号公報、特開平５－２８９３３５号公報等に記載の３－ケトクマリン系色素；特開平６－１９２４０号公報等に記載のピロメテン系色素；特開昭４７－２５２８号公報、特開昭５４－１５５２９２号公報、特公昭４５－３

７３７７号公報、特開昭４８－８４１８３号公報、特開昭５２－１１２６８１号公報、特開昭５８－１５５０３号公報、特開昭６０－８８００５号公報、特開昭５９－５６４０３号公報、特開平２－６９号公報、特開昭５７－１６８０８８号公報、特開平５－１０７７６１号公報、特開平５－２１０２４０号公報、特開平４－２８８８１８号公報等に記載のジアルキルアミノベンゼン骨格を有する色素が挙げられる。

増感色素は、１種を単独で用いてもよく、２種以上を併用してもよい。

[0242] ＜溶剤＞

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、必要に応じて、溶剤を含有してもよい。

本発明の異方性色素膜形成用組成物に使用しうる溶剤としては、重合性液晶化合物中に色素又はその他の添加剤を十分に分散又は溶解させ得るものであれば特に限定されない。

溶剤としては、例えば、メタノール、エタノール、エチレングリコール、イソプロピルアルコール、プロピレングリコール、エチレングリコールメチルエーテル、エチレングリコールブチルエーテル、プロピレングリコールモノメチルエーテル等のアルコール溶剤；酢酸エチル、酢酸ブチル、エチレングリコールメチルエーテルアセテート、γ－ブチロラクトン、プロピレングリコールメチルエーテルアセテート、乳酸エチル等のエステル溶剤；アセトン、メチルエチルケトン、シクロペンタノン、シクロヘキサノン、２－ヘプタノン、メチルイソブチルケトン等のケトン溶剤；ペンタン、ヘキサン、ヘプタン等の脂肪族炭化水素溶剤；トルエン、キシレン等の芳香族炭化水素溶剤；アセトニトリル等のニトリル溶剤；テトラヒドロフラン、ジメトキシエタン、エチレングリコールジメチルエーテル、エチレングリコールジエチルエーテル等のエーテル溶剤；ペルフルオロベンゼン、ペルフルオロトルエン、ペルフルオロデカリン、ペルフルオロメチルシクロヘキサン、ヘキサフルオロ－２－プロパノール等のフッ素含有溶剤；及び、クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン等の塩素含有溶剤；が挙げら

れる。

これら溶剤は、一種類のみを用いてもよく、二種類以上を組み合わせて用いてもよい。

[0243] 溶剤は、重合性液晶化合物及び色素を溶解し得る溶剤であることが好ましく、重合性液晶化合物及び色素が完全に溶解する溶剤であることがさらに好ましい。溶剤は、重合性液晶化合物の重合反応に不活性な溶剤であることが好ましい。溶剤は、後述する本発明の異方性色素膜形成用組成物を塗布する観点から、沸点が５０～２００℃の範囲である溶剤が好ましい。

[0244] 本発明の異方性色素膜形成用組成物が溶剤を含む場合において、異方性色素膜形成用組成物において溶剤が占める含有割合は、本発明の異方性色素膜形成用組成物の総量（１００質量％）に対して、５０質量％以上９８質量％以下が好ましい。換言すると、本発明の異方性色素膜形成用組成物における固形分は、２質量％以上５０質量％以下が好ましい。

異方性色素膜形成用組成物における固形分含有量が前記上限値以下であれば、異方性色素膜形成用組成物の粘度が高くなりすぎず、得られる偏光膜の厚みが均一になり、偏光膜にムラが生じにくくなる傾向がある。また、前記下限値以上であれば、適切な厚みの偏光膜を得ることが容易となる傾向がある。

かかる固形分含有量は、製造しようとする偏光膜の厚さを考慮して定めることができる。

[0245] 本発明の異方性色素膜形成用組成物の粘度は、後述の塗布方法により、厚みムラのない均一な膜を作製することができれば、特に限定されない。大面積での厚み均一性、塗布速度などの生産性、光学特性の面内均一性を得る観点からは、本発明の異方性色素膜形成用組成物の粘度は、０．１ｍＰａ・ｓ以上が好ましく、５００ｍＰａ・ｓ以下が好ましく、１００ｍＰａ・ｓ以下がより好ましく、５０ｍＰａ・ｓ以下がさらに好ましい。

[0246] ＜その他の添加剤＞

本発明の異方性色素膜形成用組成物は、さらに必要に応じて、色素及び重

合性液晶化合物以外の成分として、前述の重合開始剤等の他に、重合禁止剤、重合助剤、重合性非液晶化合物、界面活性剤、レベリング剤、カップリング剤、ｐＨ調整剤、分散剤、酸化防止剤、有機・無機フィラー、有機・無機ナノシート、有機・無機ナノファイバー、金属酸化物等のその他の添加剤を含有してもよい。これらの添加剤を含有することにより、本発明の異方性色素膜形成用組成物の塗布性や安定性等を向上させたり、本発明の異方性色素膜形成用組成物から形成される異方性色素膜の安定性を向上させたりし得る場合がある。

[0247] ＜異方性色素膜形成用組成物の製造方法＞

本発明の異方性色素膜形成用組成物を製造する方法は特に限定されない。例えば、色素、重合性液晶化合物、必要に応じて溶剤、その他の添加剤等を混合し、０～８０℃で撹拌、振盪して色素を溶解する。難溶性の場合は、ホモジナイザー、ビーズミル分散機等を用いてもよい。

[0248] 本発明の異方性色素膜形成用組成物を製造する方法として、組成物中の異物等を除去する目的で、濾過工程を有していてもよい。

[0249] 本発明の異方性色素膜形成用組成物は、異方性色素膜形成用組成物から溶剤の除いた組成物が、任意の温度で液晶であってもなくてもよいが、任意の温度で液晶性を示すことが好ましい。本発明の異方性色素膜形成用組成物から溶剤を除いた組成物は、下記に記載の塗工プロセスの観点からその等方相出現温度が、１６０℃未満であることが好ましく、１４０℃未満がより好ましく、１１５℃未満がさらに好ましく、１１０℃未満がよりさらに好ましく、１０５℃未満が特に好ましい。

[0250] ［異方性色素膜］

本発明の異方性色素膜は、本発明の異方性色素膜形成用組成物を用いて形成される。したがって、本発明の異方性色素膜は、色素と、重合性液晶化合物及び重合性液晶化合物に基づく構成単位を有する重合物の一方又は両方とを含み、色素は、本発明の化合物を含む。

[0251] 本発明の異方性色素膜形成用組成物を用いて形成される本発明の異方性色

素膜は、好ましくは重合性液晶化合物及び重合性液晶化合物に基づく構成単位を有する重合物の合計質量濃度が、本発明の化合物の質量濃度の１倍以上、より好ましくは１．５倍以上、さらに好ましくは２倍以上、特に好ましくは３倍以上、また、好ましくは１０００倍以下、より好ましくは７００倍以下、さらに好ましくは５００倍以下となるように含むものである。

[0252] 本発明の異方性色素膜は、その他の成分として、必要に応じて非重合性液晶化合物、重合開始剤、重合禁止剤、重合助剤、重合性非液晶化合物、非重合性非液晶化合物、界面活性剤、レベリング剤、カップリング剤、ｐＨ調整剤、分散剤、酸化防止剤、有機・無機フィラー、有機・無機ナノシート、有機・無機ナノファイバー、金属酸化物等を含んでもよい。

[0253] 本発明の異方性色素膜は、光吸収の異方性を利用して、直線偏光、円偏光、楕円偏光等を得る偏光膜として機能しうる他、膜形成プロセスと基板や有機化合物（色素や透明材料）を含有する組成物の選択により、屈折異方性や伝導異方性等の各種異方性色素膜として機能化が可能である。

[0254] 本発明の異方性色素膜を液晶ディスプレイ用や、ＯＬＥＤ用反射防止膜の偏光素子として使う場合は、異方性色素膜の配向特性は二色比を用いて表すことができる。異方性色素膜の二色比は８以上あれば偏光素子として機能するが、１５以上が好ましく、２０以上がより好ましく、２５以上がさらに好ましく、３０以上が特に好ましく、４０以上がとりわけ好ましい。二色比は高いほど好ましい。二色比が前記下限値以上であることで、後述する光学素子、特に偏光素子として有用である。さらに、波長３５０ｎｍ～８００ｎｍの広い領域で偏光性能を発現させる観点からは、波長４５０ｎｍにおける二色比も８以上あれば偏光素子として機能するが、この二色比も１２以上が好ましく、１５以上がより好ましく、２０以上がさらに好ましい。

[0255] ＯＬＥＤ用反射防止膜の偏光素子として用いる場合、位相差膜等の周辺材料の性能が低くても、偏光素子の性能が高ければ、反射防止膜としての特性は向上する。そのため、偏光素子の性能が高ければ、層構成を簡素化させやすく、薄膜構成でも十分な機能を発現しやすくなり、折る、曲げる、を含む

変形させて使用する用途にも好適に使用できる。また、コストも低く抑えることが可能となる。

[0256] 本発明で言う二色比（Ｄ）は、色素が一様に配向している場合、以下の式で表される。

Ｄ＝Ａｚ／Ａｙ

ここで、Ａｚは異方性色素膜に入射した光の偏光方向が異方性色素の配向方向に平行な場合に観測される吸光度である。Ａｙは異方性色素膜に入射した光の偏光方向が垂直な場合に観測される吸光度である。

[0257] それぞれの吸光度（Ａｚ、Ａｙ）は同じ波長のものを用いれば特に制限はなく、目的によっていずれの波長を選択してもよい。異方性色素膜の配向の度合を表す場合は、異方性色素膜の３５０ｎｍ～８００ｎｍの特定波長域に視感度で補正した値や、可視域の極大吸収波長における値を用いることが好ましい。

[0258] また、本発明の異方性色素膜の透過率は、使用する目的の波長において、好ましくは２５％以上であり、３５％以上がさらに好ましく、４０％以上が特に好ましい。本発明の異方性色素膜を可視光波長域全体において異方性を有する色素膜として用いる場合には、異方性色素膜の可視光波長域における透過率は、好ましくは２５％以上であり、３５％以上がさらに好ましく、４０％以上が特に好ましい。本発明の異方性色素膜の透過率は用途に応じた上限であればよい。例えば、偏光度を高くする場合には、透過率は５０％以下であることが好ましい。透過率が上記範囲であることで、後述する光学素子として有用であり、特にカラー表示に用いる液晶ディスプレイ用や、異方性色素膜と位相差膜とを組み合わせた反射防止膜用の光学素子として有用である。

[0259] 異方性色素膜の膜厚は、乾燥膜厚として、好ましくは１０ｎｍ以上、より好ましくは１００ｎｍ以上、さらに好ましくは５００ｎｍ以上であり、好ましくは３０μｍ以下、より好ましくは１０μｍ以下、さらに好ましくは５μｍ以下、とりわけ好ましくは３μｍ以下である。異方性色素膜の膜厚が上記

範囲にあることで、膜内で色素の均一な配向及び均一な膜厚を得られる傾向にある。

[0260] ［異方性色素膜の製造方法］

本発明の異方性色素膜は、本発明の異方性色素膜形成用組成物を用いて、湿式成膜法により作製することが好ましい。

本発明で言う湿式成膜法とは、異方性色素膜形成用組成物を基板上に何らかの手法により塗布、配向させる方法である。そのため、異方性色素膜形成用組成物は流動性を持てばよく、溶剤を含んでいても、含んでいなくてもよい。塗布する際の粘度や膜均一性の観点から、溶剤を含んでいることがより好ましい。

[0261] 異方性色素膜中の液晶や色素の配向は、塗布過程で剪断などにより配向してもよいし、溶剤が乾燥する過程で配向してもよい。また、塗布、乾燥後に加熱し、液晶や色素等を再配向させるプロセスを経て、液晶や色素等を基板上で配向、積層させてもよい。湿式成膜法では、異方性色素膜形成用組成物を基板上に付与すると、すでに異方性色素膜形成用組成物中で、又は溶剤が乾燥する過程で、又は溶剤が完全に除去された後で、色素や液晶化合物が自己会合（液晶状態等の分子会合状態）を取ることにより微小面積での配向が起こる。この状態に外場を与えることにより、マクロな領域で一定方向に配向させ、所望の性能を有する異方性色素膜を得ることができる。この点で、ポリビニルアルコール（ＰＶＡ）フィルム等を、色素を含む溶液で染色して延伸し、延伸工程だけで色素を配向させることを原理とする方法とは異なる。ここで外場とは、あらかじめ基板上に施された配向処理層の影響、せん断力、磁場、電場、熱等が挙げられ、これらを単独で用いてもよく、複数組み合わせて用いてもよい。必要があれば、加熱工程を経てもよい。

[0262] 異方性色素膜形成用組成物を基板上に付与し成膜する過程、外場を与えて配向させる過程、溶剤を乾燥させる過程は、逐次行ってもよいし、同時に行ってもよい。

[0263] 湿式成膜法における異方性色素膜形成用組成物の基板上へ付与する方法と

しては、例えば、塗布法、ディップコート法、ＬＢ膜形成法、公知の印刷法等が挙げられる。また、このようにして得た異方性色素膜を別の基板に転写する方法もある。

[0264] これらのなかでも、塗布法を用いて異方性色素膜形成用組成物を基板上に付与することが好ましい。

異方性色素膜の配向方向は塗布方向と異なっていてもよい。本発明において異方性色素膜の配向方向とは、例えば、偏光膜であれば、偏光の透過軸（偏光軸）又は吸収軸のことであり、位相差膜であれば、進相軸又は遅相軸のことである。

[0265] 異方性色素膜形成用組成物を塗布し、異方性色素膜を得る方法としては、特に限定されないが、例えば、原崎勇次著「コーティング工学」（株式会社朝倉書店、１９７１年３月２０日発行）の２５３～２７７ページに記載の方法、市村國宏監修「分子協調材料の創製と応用」（株式会社シーエムシー出版、１９９８年３月３日発行）の１１８～１４９ページに記載の方法、段差構造を有する基板（予め配向処理を施してもよい）上にスロットダイコート法、スピンコート法、スプレーコート法、バーコート法、ロールコート法、ブレードコート法、カーテンコート法、ファウンテン法、ディップ法等で塗布する方法が挙げられる。なかでも、スロットダイコート法やバーコート法を採用すると、均一性の高い異方性色素膜が得られるため好適である。

[0266] スロットダイコート法に用いるダイコーターは、一般的に塗布液を吐出する塗布機、いわゆるスリットダイを備えている。スリットダイは、例えば、特開平２－１６４４８０号公報、特開平６－１５４６８７号公報、特開平９－１３１５５９号公報、「分散・塗布・乾燥の基礎と応用」（２０１４年、株式会社テクノシステ、ＩＳＢＮ９７８４９２４７２８７０７　Ｃ　３０５）、「ディスプレイ・光学部材における湿式コーティング技術」（２００７年、情報機構、ＩＳＢＮ９７８４９０１６７７７５２）、「エレクトロニクス分野における精密塗布・乾燥技術」（２００７年、技術情報協会、ＩＳＢＮ９７８４８６１０４１３８９）に開示されている。これら公知のスリット

ダイは、フィルムやテープなどの可撓性を有した部材やガラス基板のような硬い部材であっても塗布が実施できる。

[0267] 本発明の異方性色素膜形成に使用される基板として、例えば、ガラスや、トリアセテート、アクリル、ポリエステル、ポリイミド、ポリエーテルイミド、ポリエーテルエーテルケトン、ポリカーボネート、シクロオレフィンポリマー、ポリオレフィン、ポリ塩化ビニル、トリアセチルセルロース又はウレタン系のフィルムが挙げられる。

[0268] 基板表面には、色素の配向方向を制御するために、「液晶便覧」（丸善株式会社、平成１２年１０月３０日発行）の２２６～２３９ページ等に記載の公知の方法（ラビング法、配向膜表面上にグルーブ（微細な溝構造）を形成する方法、偏光紫外光・偏光レーザーを用いる方法（光配向法）、ＬＢ膜形成による配向方法、無機物の斜め蒸着による配向方法等）により、配向処理（配向膜）を施していてもよい。特に、ラビング法、光配向法による配向処理を好ましく挙げることができる。ラビング法に用いる材料としては、例えば、ポリビニルアルコール（ＰＶＡ）、ポリイミド（ＰＩ）、エポキシ樹脂、アクリル樹脂が挙げられる。光配向法に用いる材料としては、例えば、ポリシンナメート系、ポリアミック酸・ポリイミド系、アゾベンゼン系が挙げられる。配向処理層を設けた場合、配向処理層の配向処理の影響と、塗布時に異方性色素膜形成用組成物にかかるせん断力によって、液晶化合物や色素が配向すると考えられる。

[0269] 異方性色素膜形成用組成物を塗布する際の、異方性色素膜形成用組成物の供給方法、供給間隔は特に限定されない。塗布液の供給操作が繁雑になったり、塗布液の開始時と停止時に塗布膜厚の変動を生じたりする場合があるため、異方性色素膜の膜厚が薄い時には、連続的に異方性色素膜形成用組成物を供給しながら塗布することが望ましい。

[0270] 異方性色素膜形成用組成物を塗布する速度は、好ましくは０．００１ｍ／分以上であり、より好ましくは０．０１ｍ／分以上であり、さらに好ましくは０．１ｍ／分以上であり、よりさらに好ましくは１．０ｍ／分以上であり

、特に好ましくは５．０ｍ／分以上である。また、好ましくは４００ｍ／分以下であり、より好ましくは２００ｍ／分以下であり、さらに好ましくは１００ｍ／分以下であり、よりさらに好ましくは５０ｍ／分以下である。塗布速度が上記範囲であることで、異方性色素膜の異方性が得られ、均一に塗布できる傾向にある。

[0271] 異方性色素膜形成用組成物の塗布温度は、好ましくは０℃以上１００℃以下、より好ましくは８０℃以下、さらに好ましくは６０℃以下である。

異方性色素膜形成用組成物の塗布時の湿度は、好ましくは１０％ＲＨ以上であり、好ましくは８０％ＲＨ以下である。

[0272] 異方性色素膜には、不溶化処理を行ってもよい。不溶化とは、異方性色素膜中の化合物の溶解性を低下させることにより、化合物の異方性色素膜からの溶出を制御し、膜の安定性を高める処理を意味する。

具体的には、膜の重合やオーバーコートなどが、後工程の容易さ、異方性色素膜の耐久性等の点から好ましい。

[0273] 膜の重合を行う場合、液晶化合物と色素が配向した膜に対して、光、熱、及び／又は放射線を用いて重合を行う。

[0274] 光又は放射線を用いて重合を行う場合、波長が１９０～４５０ｎｍの範囲にある活性エネルギー線を照射することが好ましい。

波長１９０～４５０ｎｍの活性エネルギー線の光源は、特に限定されるものではないが、例えば、キセノンランプ、ハロゲンランプ、タングステンランプ、高圧水銀灯、超高圧水銀灯、メタルハライドランプ、中圧水銀灯、低圧水銀灯、カーボンアーク、蛍光ランプ等のランプ光源；アルゴンイオンレーザー、ＹＡＧレーザー、エキシマレーザー、窒素レーザー、ヘリウムカドミニウムレーザー、半導体レーザー等のレーザー光源が挙げられる。特定の波長の光を照射して使用する場合には、光学フィルターを利用することもできる。活性エネルギー線の露光量は、１０～１０，０００Ｊ／m^2が好ましい。

[0275] 熱を用いて重合を行う場合は、５０～２００℃の範囲で行うことが好まし

く、６０～１５０℃の範囲で行うことがさらに好ましい。

光、熱、及び／又は放射線を用いて重合を行ってもよいが、光重合を用いる、又は、光重合と熱重合を併用するのが膜形成プロセスの時間が短く、装置も簡易であることから好ましい。

[0276] ［光学素子］

本発明の光学素子は、本発明の異方性色素膜を含む。

[0277] 本発明における光学素子は、光吸収の異方性を利用して、直線偏光、円偏光、楕円偏光等を得る偏光素子、位相差素子、屈折異方性や伝導異方性等の機能を有する素子を表す。これらの機能は、異方性色素膜形成プロセスと、基板や有機化合物（色素や透明材料）を含有する組成物の選択により、適宜調整することができる。

[0278] 本発明の光学素子は、偏光素子として用いることが好ましい。

本発明の光学素子は、基板上に塗布等により異方性色素膜を形成することで偏光素子を得ることができるという点から、フレキシブルディスプレイ等の用途にも好適に使用することができる。

[0279] 光学素子は、異方性色素膜の機能を維持、向上させるために、他の層が設けられていてもよい。他の層としては、例えば、耐光性、耐熱性、耐水性等の耐久性を向上させるために用いる、特定の波長を遮断する機能を有する層や特定の物質を遮断する機能を有する層（酸素遮断フィルム、水蒸気遮断フィルムなどのバリアフィルム等）；色域を変更したり、光学特性を向上させたりするために用いる、波長カットフィルターや特定の波長を吸収する材料を含有する層；が挙げられる。

[0280] ［偏光素子］

本発明の異方性色素膜を用いて偏光素子（以下、「本発明の偏光素子」と称す場合がある。）を製造することができる。

本発明の偏光素子は、本発明の異方性色素膜を有するものであれば他の如何なる膜（層）を有するものであってもよい。例えば、基板上に配向膜を設け、配向膜の表面に、本発明の異方性色素膜を形成することにより製造する

ことができる。

[0281] 偏光素子は異方性色素膜だけに限らず、偏光性能を向上させる、機械的強度を向上させる等の機能を有するオーバーコート層；粘着層又は反射防止層；配向膜；位相差フィルムとしての機能、輝度向上フィルムとしての機能、反射又は反射防止フィルムとしての機能、半透過反射フィルムとしての機能、拡散フィルムとしての機能などの光学機能を有する層；等、と組み合わせて使用してもよい。具体的には、前述の様々な機能を有する層を塗布や貼合等により積層形成し、積層体として使用してもよい。

[0282] これらの層は、製造プロセス、特性及び機能に合わせ適宜設けることができ、その積層の位置、順番等は特に限定されない。例えば、各層を形成する位置は、異方性色素膜の上であってもよく、異方性色素膜を設けた基板の反対面であってもよい。また、各層を形成する順番は、異方性色素膜を形成する前でも形成した後でもよい。

[0283] これら光学機能を有する層は、以下の様な方法により形成することができる。

[0284] 位相差フィルムとしての機能を有する層は、位相差フィルムを、偏光素子を構成する他の層に塗布や貼合等を行うことにより形成することができる。位相差フィルムは、例えば、特開平２－５９７０３号公報、特開平４－２３０７０４号公報等に記載の延伸処理を施したり、特開平７－２３０００７号公報等に記載された処理を施したりすることにより形成することができる。

[0285] 輝度向上フィルムとしての機能を有する層は、輝度向上フィルムを、偏光素子を構成する他の層に塗布や貼合等を行うことにより形成することができる。輝度向上フィルムは、例えば、特開２００２－１６９０２５号公報及び特開２００３－２９０３０号公報に記載されるような方法で微細孔を形成することにより、又は、選択反射の中心波長が異なる２層以上のコレステリック液晶層を重畳することにより形成することができる。

[0286] 反射フィルム又は半透過反射フィルムとしての機能を有する層は、例えば、蒸着やスパッタリングなどで得られた金属薄膜を、偏光素子を構成する他

の層に塗布や貼合等を行うことにより形成することができる。

拡散フィルムとしての機能を有する層は、例えば、偏光素子を構成する他の層に微粒子を含む樹脂溶液をコーティングすることにより形成することができる。

[0287] 位相差フィルムや光学補償フィルムとしての機能を有する層は、ディスコティック液晶性化合物、ネマティック液晶性化合物、スメクチック液晶性化合物、コレステリック液晶性化合物等の液晶性化合物を、偏光素子を構成する他の層に塗布して配向させることにより形成することができる。その際に、基板上に配向膜を設け、配向膜の表面に、位相差フィルムや光学補償フィルムを形成してもよい。

[0288] 本発明の異方性色素膜を、液晶素子（ＬＣＤ）や有機エレクトロルミネッセンス素子（ＯＬＥＤ）等の各種の表示素子に異方性色素膜等として用いる場合には、これらの表示素子を構成する電極基板等の表面に直接、本発明の異方性色素膜を形成してもよいし、本発明の異方性色素膜を形成した基板を、これら表示素子の構成部材として用いてもよい。

実施例

[0289] 以下に実施例により本発明をさらに具体的に説明する。本発明はその要旨を超えない限り、以下の実施例に限定されるものではない。

以下の記載において、「部」は「質量部」を意味する。

[0290] ［液晶相の同定方法］

得られた異方性色素膜形成用組成物の液晶性は、示差走査熱量測定（セイコーインスツルメンツ社「ＤＳＣ２２０ＣＵ」）、Ｘ線構造解析（株式会社リガク「ＮＡＮＯ－Ｖｉｅｗｅｒ」）、ホットステージ（株式会社東陽テクニカ「ＨＣＳ３０２－ＬＮ１９０」）が付属する偏光顕微鏡（株式会社ニコンインステック「ＥＣＬＩＰＳＥ　ＬＶ１００Ｎ　ＰＯＬ」）にて観察し、「液晶便覧」（丸善株式会社、平成１２年１０月３０日発行）の９～５０ページ、１１７～１７６ページ等に記載の方法にしたがって、液晶であることの同定を行った。

[0291] ［異方性色素膜の吸収軸／偏光軸方向の偏光に対する透過率の測定及び二色比］

得られた異方性色素膜の吸収軸／偏光軸方向の偏光に対する透過率は、グラントムソン偏光子を備える分光光度計（大塚電子（株）製、製品名「ＲＥＴＳ－１００」）を用いて測定した。

異方性色素膜に直線偏光の測定光を入射し、異方性色素膜の吸収軸方向の偏光に対する透過率及び異方性色素膜の偏光軸方向の偏光に対する透過率を測定し、次式により二色比（Ｄ）を算出した。

また、吸収軸方向の偏光に対する吸収が極大となる波長を、異方性色素膜の極大吸収波長とした。

Ｄ＝Ａｚ／Ａｙ

（式中、

Ａｙ＝－ｌｏｇ（Ｔｙ）であり；

Ａｚ＝－ｌｏｇ（Ｔｚ）であり；

Ｔｚは、異方性色素膜の吸収軸方向の偏光に対する透過率であり；

Ｔｙは、異方性色素膜の偏光軸方向の偏光に対する透過率である。）

[0292] 具体的には、基材としてガラス上にポリイミドの配向膜（ＬＸ１４００、日立化成デュポンマイクロシステムズ社製）が形成されたサンドイッチセル（セルギャップ：８．０μｍ又は１０．０μｍ、成膜済みのポリイミドにあらかじめ布でラビング処理を施したもの）に、異方性色素膜形成用組成物を等方相で注入し、１０℃／ｍｉｎで８０℃まで冷却することにより異方性色素膜を得、さらに１０℃／ｍｉｎで４０℃まで冷却しながら、各温度で二色比を測定した。その中で、最大の二色比を示した温度での波長４５０ｎｍにおける二色比を、その異方性色素膜の波長４５０ｎｍにおける二色比と決定した。

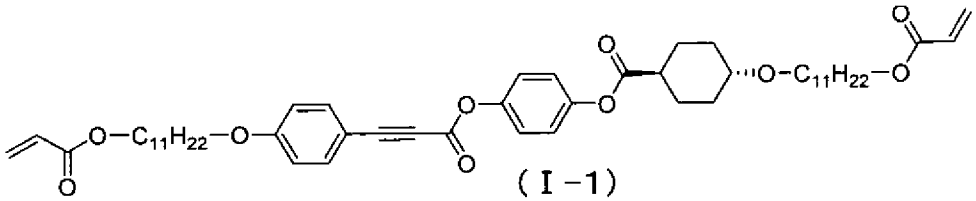
[0293] 上記測定した異方性色素膜の二色比としては、波長４５０ｎｍでの値が１２以上であれば、実用上充分であり好ましく、１５以上がより好ましく、２０以上がさらに好ましい。

[0294] ［重合性液晶化合物の合成］

＜重合性液晶化合物（Ｉ－１）＞

下記構造式で表わされる重合性液晶化合物（Ｉ－１）を特開２０２０－０４２３０５号公報の記載に従い合成した。下記式中、$C_{11}H_{22}$はメチレン鎖が直鎖状に１１個結合していることを意味する。

[0295] [化26]



（Ｉ-1）

[0296] 重合性液晶化合物（Ｉ－１）について、等方相出現温度（液晶から液体への相転移温度及び液体から液晶への相転移温度）を示差走査熱量測定により求めた。示差走査熱量測定には、重合性液晶化合物（Ｉ－１）１００質量部に対して、重合禁止剤として４－メトキシフェノールを０．２質量部添加したものを用いた。

重合性液晶化合物（Ｉ－１）の液晶から液体への相転移温度は１１１．０℃、液体から液晶への相転移温度は１０９．４℃であった。

この温度が等方相出現温度であることは、偏光顕微鏡観察及びＸ線構造解析により確認した。

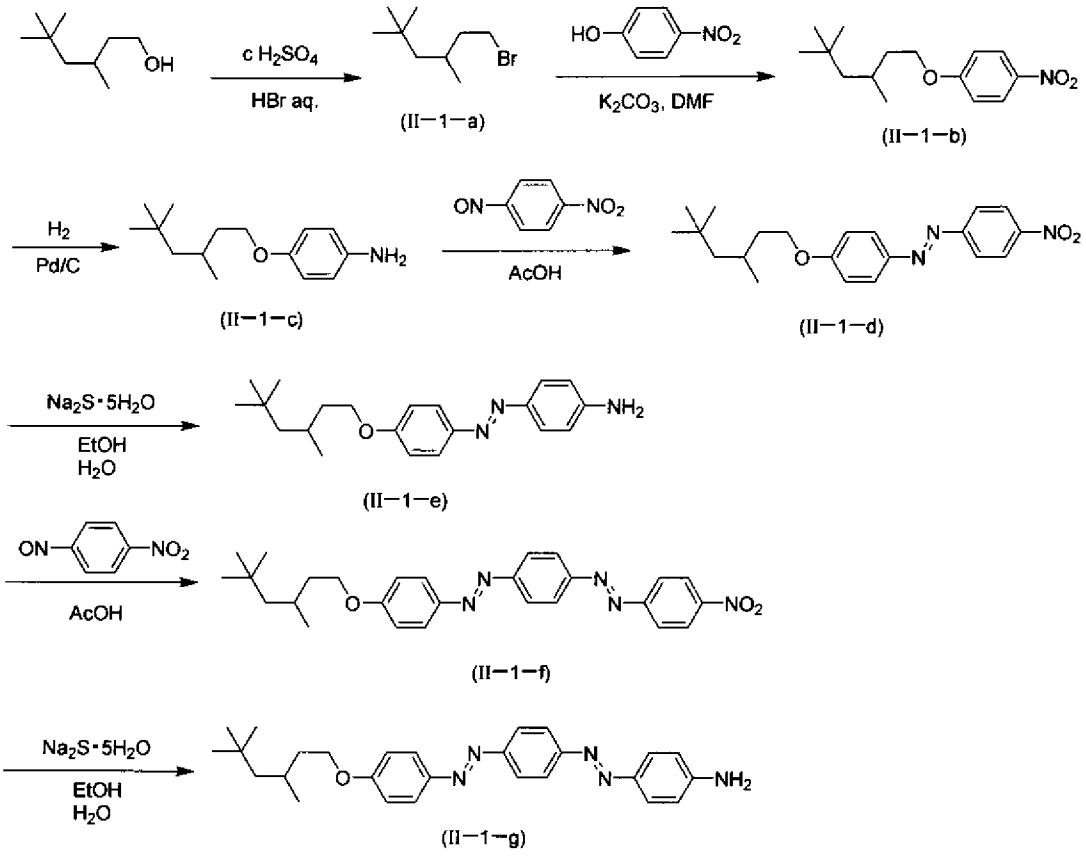
[0297] ［色素の合成］

＜色素（ＩＩ－１）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩ－１）を合成した。

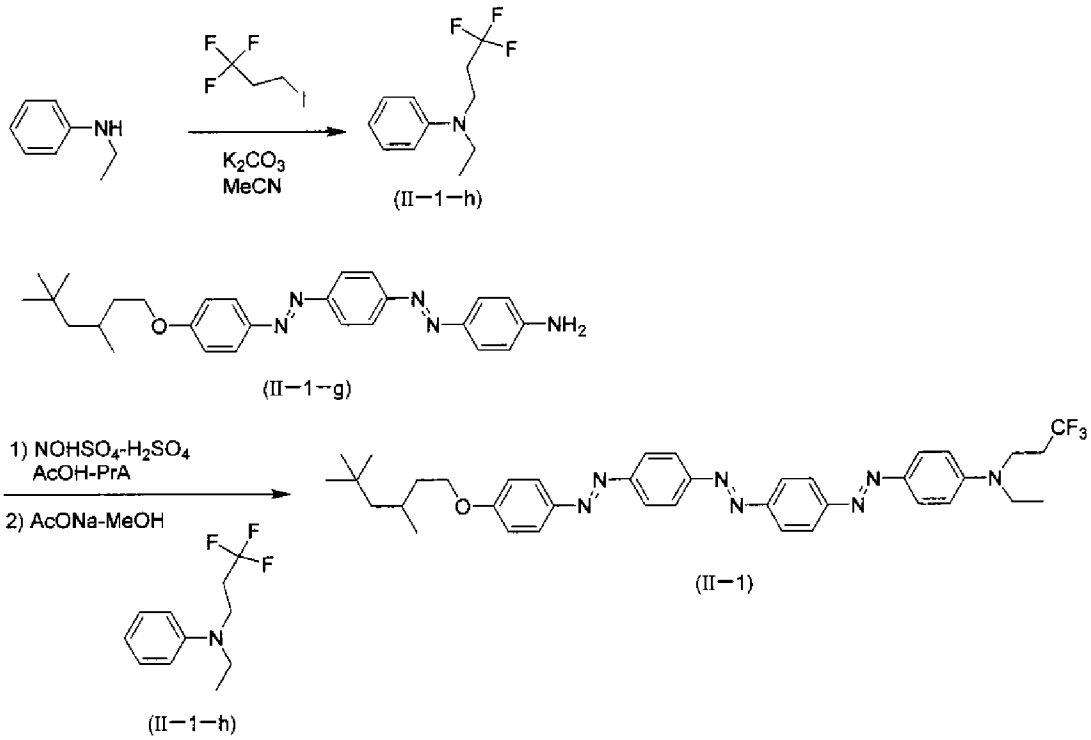
[0298]

[化27]


OH
c H2SO4
HBr aq.
Br
(II−1−a)
HO
NO2
K2CO3, DMF
O
NO2
(II−1−b)
H2
Pd/C
O
NH2
(II−1−c)
ON
NO2
AcOH
O
N
N
NO2
(II−1−d)
Na2S·5H2O
EtOH
H2O
O
N
N
NH2
(II−1−e)
ON
NO2
AcOH
O
N
N
N
N
NO2
(II−1−f)
Na2S·5H2O
EtOH
H2O
O
N
N
N
N
NH2
(II−1−g)

[0299]

[化28]



[0300] （ＩＩ－１－ａ）の合成：

３，５，５－トリエチル－１－ヘキサノール（７６．８ｇ，５３２ｍｍｏｌ）、４７％臭化水素（ＨＢｒ）水溶液（１００．８ｇ，５８６ｍｍｏｌ）、濃硫酸（１６．６ｇ，１８５ｍｍｏｌ）を混合し、１２０℃で５時間撹拌した。２５℃まで冷却した後、ヘキサン（１２００ｍＬ）へ添加し、精製水（２４００ｍＬ×３回）で洗浄した。有機層を濃縮した後、シリカゲルクロマトグラフィー（ヘキサン）で精製し、（ＩＩ－１－ａ）を７１．０ｇ得た。

[0301] （ＩＩ－１－ｂ）の合成：

窒素気流下、４－ニトロフェノール（６５．０ｇ，４６７ｍｍｏｌ）、（ＩＩ－１－ａ）（１１６．２ｇ，５６０ｍｍｏｌ）、ジメチルホルムアミド（５２０ｍＬ）、炭酸カリウム（１２９．１ｇ，９３４ｍｍｏｌ）を混合し、９０℃で６時間撹拌した。ここへ精製水（１０００ｍＬ）を添加し、酢酸

エチル／ヘキサン＝１／４混合液で抽出し、油層を濃縮した。シリカゲルクロマトグラフィー（酢酸エチル／ヘキサン）で精製し、（ＩＩ－１－ｂ）を１１３．５ｇ得た。

[0302] （ＩＩ－１－ｃ）の合成：

アルゴン気流下、（ＩＩ－１－ｂ）（１１３．５ｇ，４２７．７ｍｍｏｌ）、酢酸エチル（１１００ｍＬ）を混合した後、パラジウム炭素（５％Ｐｄ／Ｃ，含水量５５質量％，１１．４ｇ）を添加し、水素雰囲気下２５℃で６０時間撹拌した。容器内をアルゴン置換した後、触媒を濾別した。触媒をジクロロメタンで抽出し、有機層を合わせて濃縮した後、シリカゲルクロマトグラフィー（ジクロロメタン）で精製し、（ＩＩ－１－ｃ）を９９．５ｇ得た。

[0303] （ＩＩ－１－ｄ）の合成：

窒素気流下室温にて、（ＩＩ－１－ｃ）（４３．３ｇ，０．１８４ｍｏｌ）、酢酸（１．３Ｌ）を加え、撹拌溶解し、１－ニトロソ－４－ニトロベンゼン（２８．０ｇ，１．０ｅｑ．）を分割投入した。４時間撹拌後、１－ニトロソ－４－ニトロベンゼン（８．４ｇ，０．３ｅｑ．）を追加添加し、室温にて一夜撹拌継続した。ジクロロメタン（３．９Ｌ）、精製水（１．３Ｌ）を注ぎ、暫く撹拌後油水分離した。水層をジクロロメタン（１．３Ｌ）で抽出した後、元の有機層と合わせ、精製水（１．３Ｌ）、飽和重曹水（１．３Ｌ）、飽和食塩水（５００ｍＬ）で順次洗浄後、無水硫酸マグネシウム乾燥、濾過、濾液を濃縮し赤茶色固体を得た。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン／ジクロロメタン＝３／１）で精製し、（ＩＩ－１－ｄ）を５２．０８ｇ得た。

[0304] （ＩＩ－１－ｅ）の合成：

（ＩＩ－１－ｄ）（５２．０ｇ，０．１４１ｍｏｌ）とエタノール（５２０ｍＬ）、精製水（５２ｍＬ）と硫化ナトリウム五水和物（$Na_2S \cdot 5H_2O$）（４７．４ｇ，２．０ｅｑｕｉｖ．）を加え外温８０℃で６時間撹拌した。室温まで放冷後、反応液を精製水（５００ｍＬ）に注ぎ暫く撹拌後、吸

引濾取し、精製水（２５０ｍＬ）でリンスした。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン）で精製し、（ＩＩ－１－ｅ）を３４．４０ｇ得た。

[0305] （ＩＩ－１－ｆ）の合成：

窒素気流下室温にて、（ＩＩ－１－ｅ）（３４．４ｇ，０．１０１ｍｏｌ）、酢酸（１．０Ｌ）を加え、撹拌溶解し、１－ニトロソ－４－ニトロベンゼン（２０．０ｇ，１．３ｅｑ．）を分割投入し、室温にて一夜撹拌継続した。反応液を精製水に注ぎ、暫く室温撹拌した後、吸引濾取し、精製水でリンスした。この固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（クロロホルム）で精製し、（ＩＩ－１－ｆ）を３８．６ｇ得た。

[0306] （ＩＩ－１－ｇ）の合成：

窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－１－ｆ）（３８．６ｇ，８１．５ｍｍｏｌ）とエタノール（３８６ｍＬ）、精製水（３９ｍＬ）と$Na_2S \cdot 5H_2O$（２７．４ｇ，２．０ｅｑｕｉｖ．）を加え外温８０℃で６時間撹拌した。室温まで放冷後、反応液を精製水（４００ｍＬ）に注ぎ暫く撹拌後、吸引濾取し、精製水（２００ｍＬ）でリンスした。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン／ジクロロメタン＝１／１）で精製し、（ＩＩ－１－ｇ）を３０．２０ｇ得た。

[0307] （ＩＩ－１－ｈ）の合成：

Ｎ－エチルアニリン（２．７１ｇ，２２．３ｍｍｏｌ）、１，１，１－トリフルオロ－３－ヨードプロパン（９．９８ｇ，２．０ｅｑ．）、アセトニトリル（１５ｍＬ）、炭酸カリウム（６．４５ｇ，２．３ｅｑ．）を仕込み、窒素雰囲気下９０℃にて２４時間加熱撹拌した。室温へ冷却後、精製水（５０ｍＬ）を加え、酢酸エチル／ヘキサン（＝１０／４０ｍＬ）で抽出した。有機層を濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝１／９）で精製し、（ＩＩ－１－ｈ）を８６５ｍｇ得た。

[0308] 色素（ＩＩ－１）の合成：

反応器に、窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－１－ｇ）（７５０ｍｇ，１．

６９ｍｍｏｌ）を酢酸（２０ｍＬ）とプロピオン酸（１０ｍＬ）に溶解させた後、内温０℃に冷却した。ニトロシル硫酸／硫酸溶液（４０質量％，６９８ｍｇ，１．３ｅｑ．）を滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。

別の反応器に、窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－１－ｈ）（５１５ｍｇ，１．５ｅｑ．）をメタノール（６ｍＬ）、テトロヒドロフラン（ＴＨＦ）（６ｍＬ）に溶解させた後、酢酸ナトリウム（３６１ｍｇ，２．６ｅｑ．）を加え、内温０℃に冷却した。

ここに先の（ＩＩ－１－ｇ）溶液を内温０～３℃以内で２０分間掛けて添加し、内温０℃で２時間、室温へ戻しながら５時間撹拌継続した。精製水（２０ｍＬ）を滴下し沈殿を吸引濾取し、精製水（３０ｍＬ）で掛け洗いし、赤色湿固体（１．０２ｇ）を得た。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝１／３）にて分離精製し、色素（ＩＩ－１）を４０４ｍｇ得た。

[0309] 色素（ＩＩ－１）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は４８２ｎｍであった。

また、核磁気共鳴（ＮＭＲ）スペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$，４００ＭＨｚ）δ０．９２（ｓ，９Ｈ），δ１．０２（ｄ，３Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ１．１４－１．３３（ｍ，５Ｈ），δ１．６５－１．８７（ｍ，３Ｈ），δ２．４８（ｍ，２Ｈ），δ３．５１（ｑ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ３．６９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝８．０Ｈｚ），δ４．０８（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ６．７６（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．０３（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．９２－８．１０（ｍ，１２Ｈ）

[0310] 色素（ＩＩ－１）のシクロペンタノンに対する溶解度を測定した。

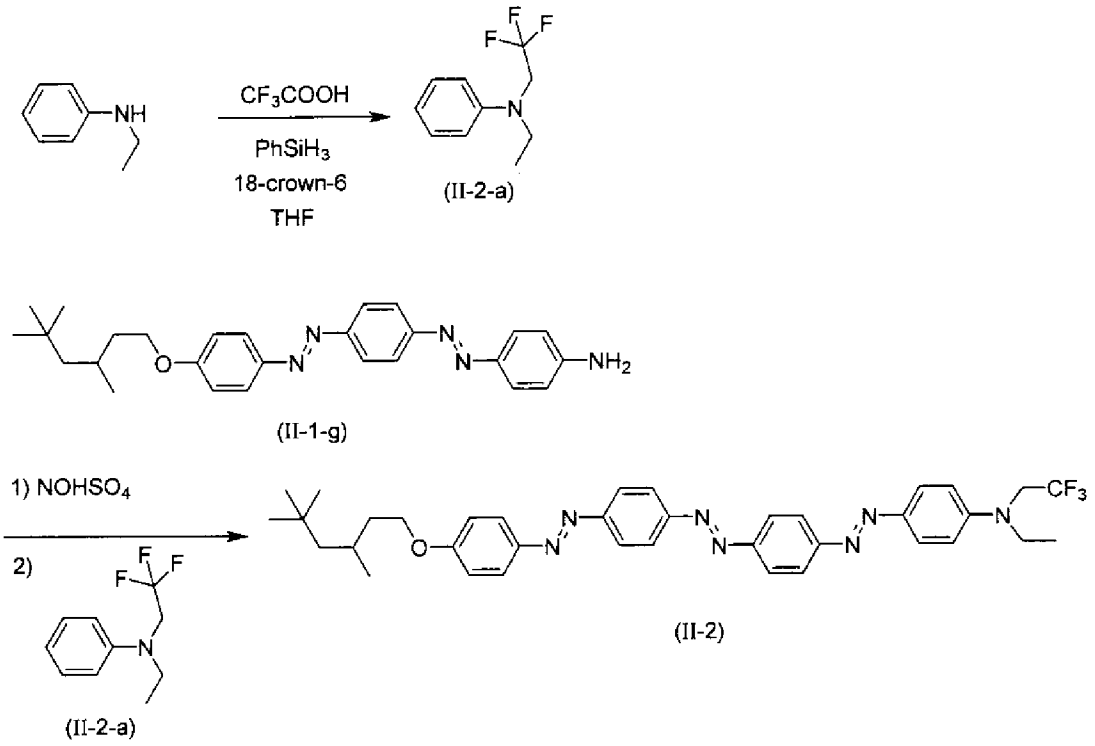
シクロペンタノン１０３ｍｇに色素（ＩＩ－１）３ｍｇを加え、８０℃で５分間撹拌した。その後、１時間室温で静置し、得られた混合液をシリンジフィルター（ＡＤＶＡＮＴＥＣ社製、ＤＩＳＭＩＣ　０３ＪＰ０５０ＡＮ

３９１０２２５１、口径０．５μｍ）を備えたシリンジを用いて濾過することで色素（ＩＩ－１）のシクロペンタノン飽和溶液を得た。この溶液をテトラヒドロフラン７４６ｍｇにて希釈し、濃度を液体クロマトグラフ（ＨＰＬＣ）（日立ハイテクノロジーズ製Ｌ－２３００シリーズ）を用いて決定した。色素（ＩＩ－１）をテトラヒドロフランに０．１質量％溶解した溶液を作製し、吸収波長２５４ｎｍにて検量線を作成した。この検量線を用いて、シクロペンタノン飽和溶液の濃度を測定した。結果を表１に示す。

[0311] ＜色素（ＩＩ－２）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩ－２）を合成した。

[0312] [化29]



[0313] （ＩＩ－２－ａ）の合成：

窒素気流下室温にて、モレキュラーシーブ４Ａ（２．０ｇ）、トリポタシウムホスファイト（１．１７ｇ，０．１ｅｑｕｉｖ．）、１８－クラウン６－エーテル（２．９０ｇ，０．２ｅｑｕｉｖ．）、ＴＨＦ（３３０ｍＬ）を加え、Ｎ－エチルアニリン（６．６５ｇ，５０．８ｍｍｏｌ）、トリフルオ

ロ酢酸（２８．８ｇ，４．６ｅｑｕｉｖ．）、フェニルシラン（２３．７ｇ，４．０ｅｑｕｉｖ．）を加え、外温８０℃、加熱還流下６時間撹拌した。放冷後、精製水（２００ｍＬ）を加え、固体を濾別した。濾液をジクロロメタン（１００ｍＬｘ２）で抽出し、減圧濃縮することで、淡黄色オイル状粗体（４４．０ｇ）を得た。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝２０／１）で精製し、（ＩＩ－２－ａ）を５．８５ｇ得た。

[0314] 色素（ＩＩ－２）の合成：

窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－１－ｇ）（７５０ｍｇ，１．６９ｍｍｏｌ）を酢酸（２０ｍＬ）とプロピオン酸（１０ｍＬ）に溶解させた後、内温０℃に冷却した。ニトロシル硫酸／硫酸溶液（４０質量%，６９８ｍｇ，１．３ｅｑ．）を内温０～３℃以内で滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。

別の反応器に、窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－２－ａ）（４８２ｍｇ，１．５ｅｑ．）をメタノール（６ｍＬ）、ＴＨＦ（６ｍＬ）に溶解させた後、酢酸ナトリウム（３６１ｍｇ，２．６ｅｑ．）を加え、内温０℃に冷却した。

ここに先の（ＩＩ－１－ｇ）溶液を内温０～５℃以内で２０分間掛けて添加し、内温０～５℃で２時間、室温へ戻しながら６時間撹拌した。精製水（２０ｍＬ）を滴下し沈殿を吸引濾取し、得た固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝１／３）にて分離精製し、色素（ＩＩ－２）を２４９ｍｇ得た。

[0315] 色素（ＩＩ－２）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は４４６ｎｍであった。

また、ＮＭＲスペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$，４００ＭＨｚ）δ０．９２（ｓ，９Ｈ），δ１．０２（ｄ，３Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ１．１４－１．３４（ｍ，５Ｈ）

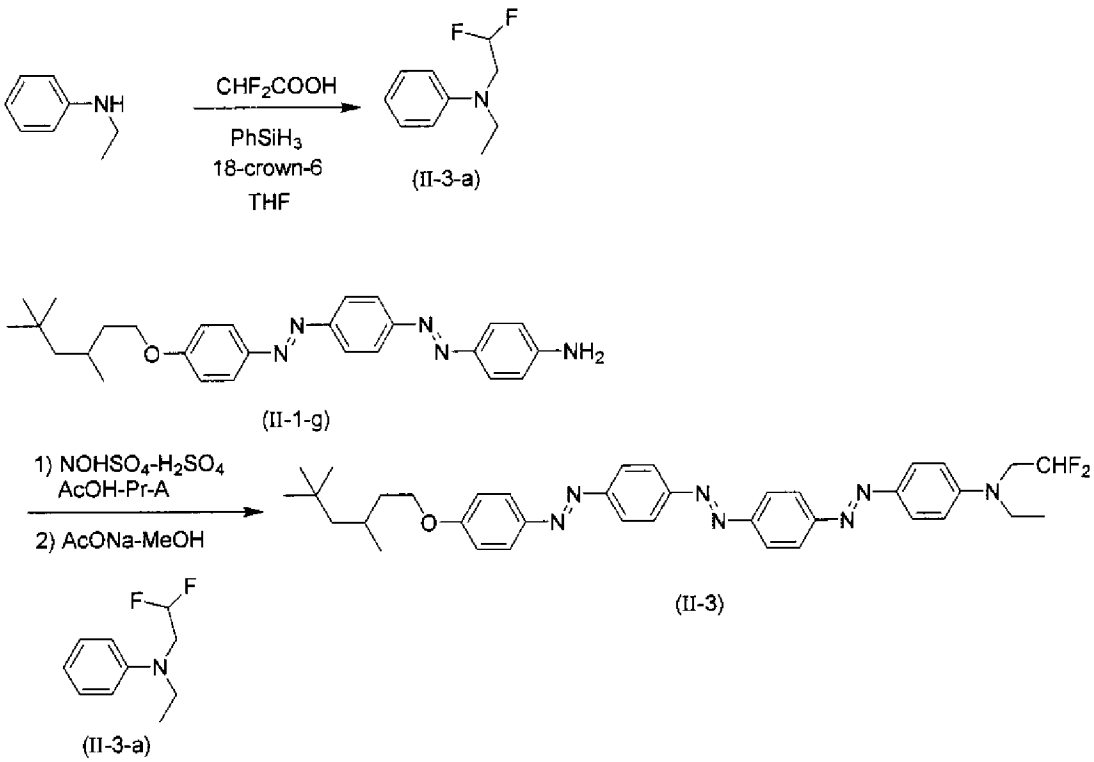
，δ１．６５－１．８７（ｍ，３Ｈ），δ３．６２（ｑ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ３．９８（ｑ，２Ｈ，Ｊ＝８．８Ｈｚ），δ４．０９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ６．９０（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．０３（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．９２－８．１０（ｍ，１２Ｈ）

[0316] 色素（ＩＩ－２）についても色素（ＩＩ－１）と同様にシクロペンタノン飽和溶液の濃度を測定した。結果を表１に示す。

[0317] ＜色素（ＩＩ－３）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩ－３）を合成した。

[0318] [化30]



[0319] （ＩＩ－３－ａ）の合成：

窒素気流下室温にて、モレキュラーシーブ４Ａ（２．０ｇ）、トリポタシウムホスファイト（１．０８ｇ，０．１ｅｑｕｉｖ．）、１８－クラウン６－エーテル（２．６８ｇ，０．２ｅｑｕｉｖ．）、ＴＨＦ（３００ｍＬ）を加え、Ｎ－エチルアニリン（６．１６ｇ，５０．８ｍｍｏｌ）、ジフルオロ酢酸（１１．２ｇ，２．３ｅｑｕｉｖ．）、フェニルシラン（２２．０ｇ，

４．０ｅｑｕｉｖ．）を加え、外温８０℃、加熱還流下６時間撹拌した。放冷後、精製水（２００ｍＬ）を加え、固体を濾別した。濾液をジクロロメタン（１００ｍＬｘ２）で抽出し、減圧濃縮することで、淡黄色オイル状粗体（４０．０ｇ）を得た。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝２０／１）で精製し、（ＩＩ－３－ａ）を５．７３ｇ得た。

[0320] 色素（ＩＩ－３）の合成：

窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－１－ｇ）（７５０ｍｇ，１．６９ｍｍｏｌ）を酢酸（２０ｍＬ）とプロピオン酸（１０ｍＬ）に溶解させた後、内温０℃に冷却した。ニトロシル硫酸／硫酸溶液（４０質量%，６９８ｍｇ，１．３ｅｑ．）を内温０～３℃以内で滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。

別の反応器に、窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－３－ａ）（４７０ｍｇ，１．５ｅｑ．）をメタノール（６ｍＬ）、ＴＨＦ（６ｍＬ）に溶解させた後、酢酸ナトリウム（３６１ｍｇ，２．６ｅｑ．）を加え、内温０℃に冷却した。

ここに先の（ＩＩ－１－ｇ）溶液を内温０～５℃以内で２２分間掛けて添加し、内温０～５℃で１時間４０分間、室温へ戻しながら６時間撹拌継続した。精製水（２０ｍＬ）を滴下し沈殿を吸引濾取し、赤色湿固体（１．０４ｇ）を得た。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝１／３）にて精製し、色素（ＩＩ－３）を２９９ｍｇ得た。

[0321] 色素（ＩＩ－３）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は４６５ｎｍであった。

また、ＮＭＲスペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$，４００ＭＨｚ）δ０．９２（ｓ，９Ｈ），δ１．０２（ｄ，３Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ１．１６－１．３４（ｍ，５Ｈ）

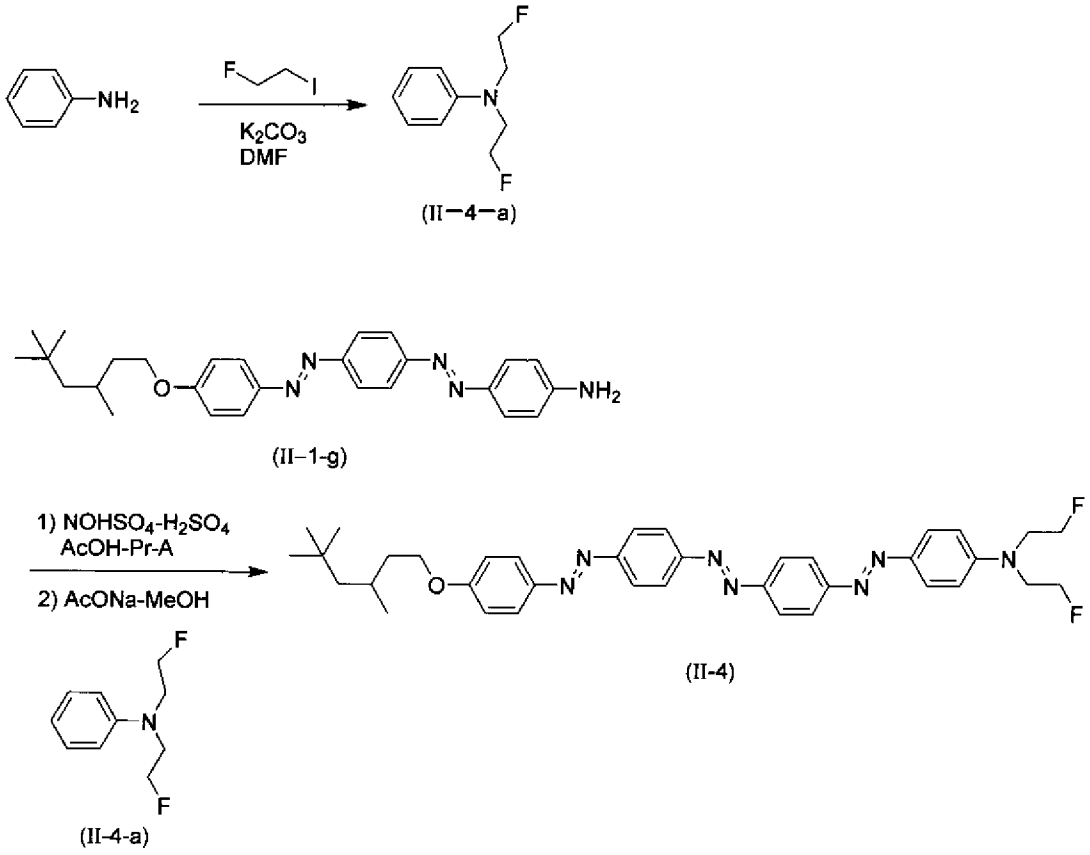
，δ１．６５－１．８７（ｍ，３Ｈ），δ３．６２（ｑ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ３．９８（ｑ，２Ｈ，Ｊ＝８．８Ｈｚ），δ４．０９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ６．９０（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．０３（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．９２－８．１０（ｍ，１２Ｈ）

[0322] 色素（ＩＩ－３）についても色素（ＩＩ－１）と同様にシクロペンタノン飽和溶液の濃度を測定した。結果を表１に示す。

[0323] ＜色素（ＩＩ－４）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩ－４）を合成した。

[0324] [化31]



[0325] （ＩＩ－４－ａ）の合成：

反応容器に、アニリン（６７０ｍｇ，７．１９ｍｍｏｌ）、１－フルオロ－２－ヨードエタン（２．５０ｇ，２．０ｅｑ．）、ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）（２５ｍＬ）、炭酸カリウム（３．９８ｇ，４．０ｅｑ．）を仕

込み、窒素雰囲気下８５℃にて１７時間加熱撹拌した。室温へ冷却後、精製水（５０ｍＬ）でクエンチし、酢酸エチル／ヘキサン（＝１０／４０ｍＬ）で抽出した。有機層を精製水（２５ｍＬ×３回）、飽和食塩水（１０ｍＬ）で順次洗浄後、濾過、濾液を濃縮し、黄色油状粗体（１．３１ｇ）を得た。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝１／９）にて分離精製し、（ＩＩ－４－ａ）を２０２ｍｇ得た。

[0326] 色素（ＩＩ－４）の合成：

窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－１－ｇ）（３．０ｇ，６．７６ｍｍｏｌ）を酢酸（８０ｍＬ）とプロピオン酸（４０ｍＬ）に溶解させた後、内温０℃に冷却した。ニトロシル硫酸／硫酸溶液（４０質量%，２．８ｇ，１．３ｅｑ．）を内温０～３℃以内で滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。

別の反応器に、窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－４－ａ）（１．８７ｇ，１．５ｅｑ．）をメタノール（２４ｍＬ）、ＴＨＦ（２４ｍＬ）に溶解させた後、酢酸ナトリウム（１．４４ｇ，２．６ｅｑ．）を加え、内温０℃に冷却した。

ここに先の（ＩＩ－１－ｇ）溶液を内温０～５℃以内で３０分間掛けて添加し、内温０～５℃で２時間、室温へ戻しながら６時間撹拌した。精製水（８０ｍＬ）を滴下し沈殿を吸引濾取し、赤色湿固体（２．７４ｇ）を得た。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／ヘキサン＝１／３及び、トルエン）にてカラム精製し、色素（ＩＩ－４）（８５６ｍｇ）を得た。

[0327] 色素（ＩＩ－４）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は４６５ｎｍであった。

また、ＮＭＲスペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$，４００ＭＨｚ）δ１．００（ｔ，３Ｈ，Ｊ＝７．８Ｈｚ），δ１．４７－１．５６（ｍ，４Ｈ），δ１．７６－１．８３（ｍ，２Ｈ），δ２．６７（ｓ，１Ｈ，Ｊ＝１３．６Ｈｚ，６．０Ｈｚ），δ

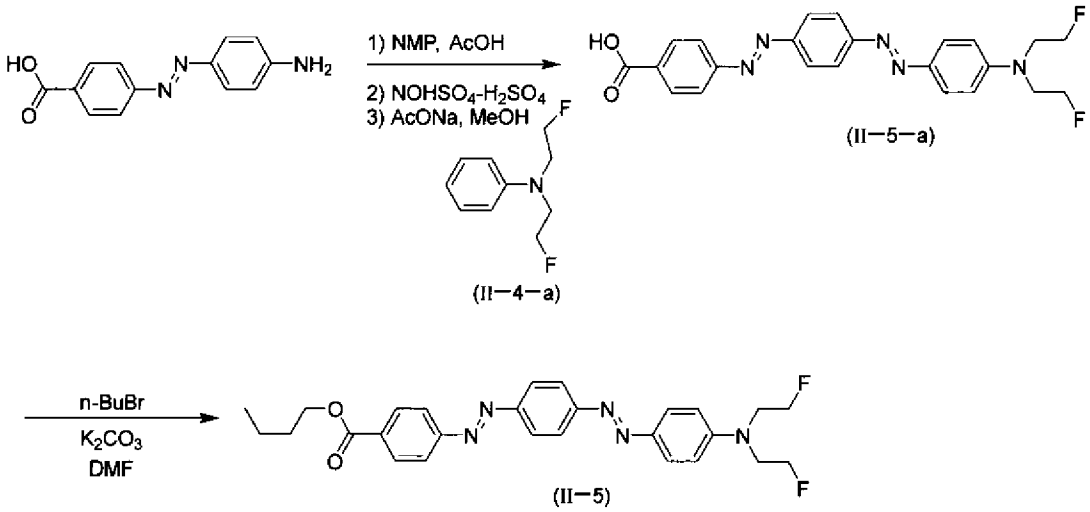
１．２９－１．３０（ｍ，１Ｈ），δ１．６５－１．８７（ｍ，３Ｈ），δ３．８３（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝５．６Ｈｚ），δ３．８９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝５．６Ｈｚ），δ４．３７（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝５．２Ｈｚ），δ４．６２（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．２Ｈｚ），δ４．７４（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．２Ｈｚ），δ６．７９（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．０２（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．９２－８．０９（ｍ，８Ｈ），δ８．２０（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝８．５Ｈｚ）

[0328] 色素（ＩＩ－４）についても色素（ＩＩ－１）と同様にシクロペンタノン飽和溶液の濃度を測定した。結果を表１に示す。

[0329] ＜色素（ＩＩ－５）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩ－５）を合成した。

[0330] [化32]



[0331] （ＩＩ－５－ａ）の合成：

窒素雰囲気下室温にて、４－［（４－アミノフェニル）ジアゼニル］安息香酸（５００ｍｇ，２．０７ｍｍｏｌ）を酢酸（１５ｍＬ）とＮ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）（５ｍＬ）に溶解させた後、内温０℃に冷却した。ニトロシル硫酸／硫酸溶液（４０質量％，８５０ｍｇ，１．３ｅｑ．）を内温０～３℃以内で滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。別の反応器

に、窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－４－ａ）（５７２ｍｇ，１．５ｅｑ．）をメタノール（６ｍＬ）、ＴＨＦ（６ｍＬ）に溶解させた後、酢酸ナトリウム（４４０ｍｇ，２．６ｅｑ．）を加え、内温０℃に冷却した。

ここに先の４－［（４－アミノフェニル）ジアゼニル］安息香酸溶液を添加し、内温０～５℃で１時間５０分間、室温へ戻しながら１４時間撹拌継続した。精製水（２０ｍＬ）を加え、沈殿を吸引濾取し、（ＩＩ－５－ａ）を４２５ｍｇ得た。

[0332] 色素（ＩＩ－５）の合成：

（ＩＩ－５－ａ）（４２５ｍｇ，０．９６０ｍｍｏｌ）、ｎ－ＢｕＢｒ（１９８ｍｇ，１．５ｅｑ．）、ＤＭＦ（４ｍＬ）、炭酸カリウム（２００ｍｇ，１．５ｅｑ．）を仕込み、窒素雰囲気下９０℃にて４．５時間加熱撹拌した。室温へ冷却後、精製水（３０ｍＬ）を加え、析出した個体を濾別し、赤茶色固体３８０ｍｇを得た。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン／酢酸エチル／ヘキサン＝５／３／５０）にて精製し、色素（ＩＩ－５）を１４９ｍｇ得た。

[0333] 色素（ＩＩ－５）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は４５６ｎｍであった。

また、ＮＭＲスペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（$CDCl_3$，４００ＭＨｚ）δ１．００（ｔ，３Ｈ，Ｊ＝７．８Ｈｚ），δ１．４７－１．５６（ｍ，４Ｈ），δ１．７６－１．８３（ｍ，２Ｈ），δ２．６７（ｓ，１Ｈ，Ｊ＝１３．６Ｈｚ，６．０Ｈｚ），δ１．２９－１．３０（ｍ，１Ｈ），δ１．６５－１．８７（ｍ，３Ｈ），δ３．８３（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝５．６Ｈｚ），δ３．８９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝５．６Ｈｚ），δ４．３７（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝５．２Ｈｚ），δ４．６２（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．２Ｈｚ），δ４．７４（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．２Ｈｚ），δ６．７９（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．０２（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．９２－８．０９（ｍ，８Ｈ），δ８．２０（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝８

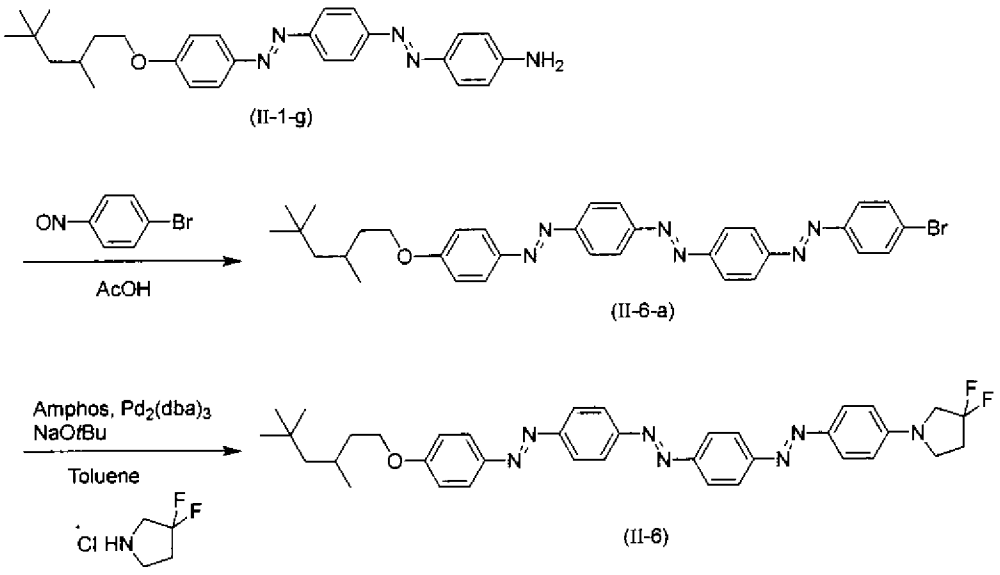
．５Ｈｚ）

[0334] 色素（ＩＩ－５）についても色素（ＩＩ－１）と同様にシクロペンタノン飽和溶液の濃度を測定した。結果を表１に示す。

[0335] ＜色素（ＩＩ－６）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩ－６）を合成した。

[0336] [化33]



[0337] （ＩＩ－６－ａ）の合成：

（ＩＩ－１－ｇ）（５００ｍｇ，１．１３ｍｍｏｌ）及び１－ニトロソ－４－ブロモベンゼン（２７３ｍｇ，１．４７ｍｍｏｌ）を酢酸（３０ｍＬ）に溶解させ、室温で６時間撹拌した。精製水を加え、沈殿をアセトニトリルで洗浄、濾過することで、赤色固体（ＩＩ－６－ａ）を４６９ｍｇ得た。

[0338] 色素（ＩＩ－６）の合成：

窒素雰囲気下室温にて、Ａｍｐｈｏｓ（３．９０ｍｇ，３ｍｏｌ％）、Ｐｄ$_2$（ｄｂａ）$_3$（２．２４ｍｇ，０．５ｍｏｌ％）をトルエン（１０ｍＬ）に溶解させ、６０℃で１５分撹拌した。

別の反応器で、窒素雰囲気下室温にて、（ＩＩ－６－ａ）（０．４０ｇ，０．４９ｍｍｏｌ）、３，３－ジフルオロピロリジン塩酸塩（０．２１２ｍ

ｇ、１．９６ｍｍｏｌ）をトルエン（２０ｍＬ）に溶解させた後、１００℃まで加熱し、先のパラジウム溶液をここに滴下した。８時間撹拌した後、精製水（８０ｍＬ）を滴下し沈殿を吸引濾取した。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン／ジクロロメタン＝１／１）にてカラム精製し、色素（ＩＩ－６）を２０７ｍｇ得た。

[0339] 色素（ＩＩ－６）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は４６６ｎｍであった。

また、ＮＭＲスペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

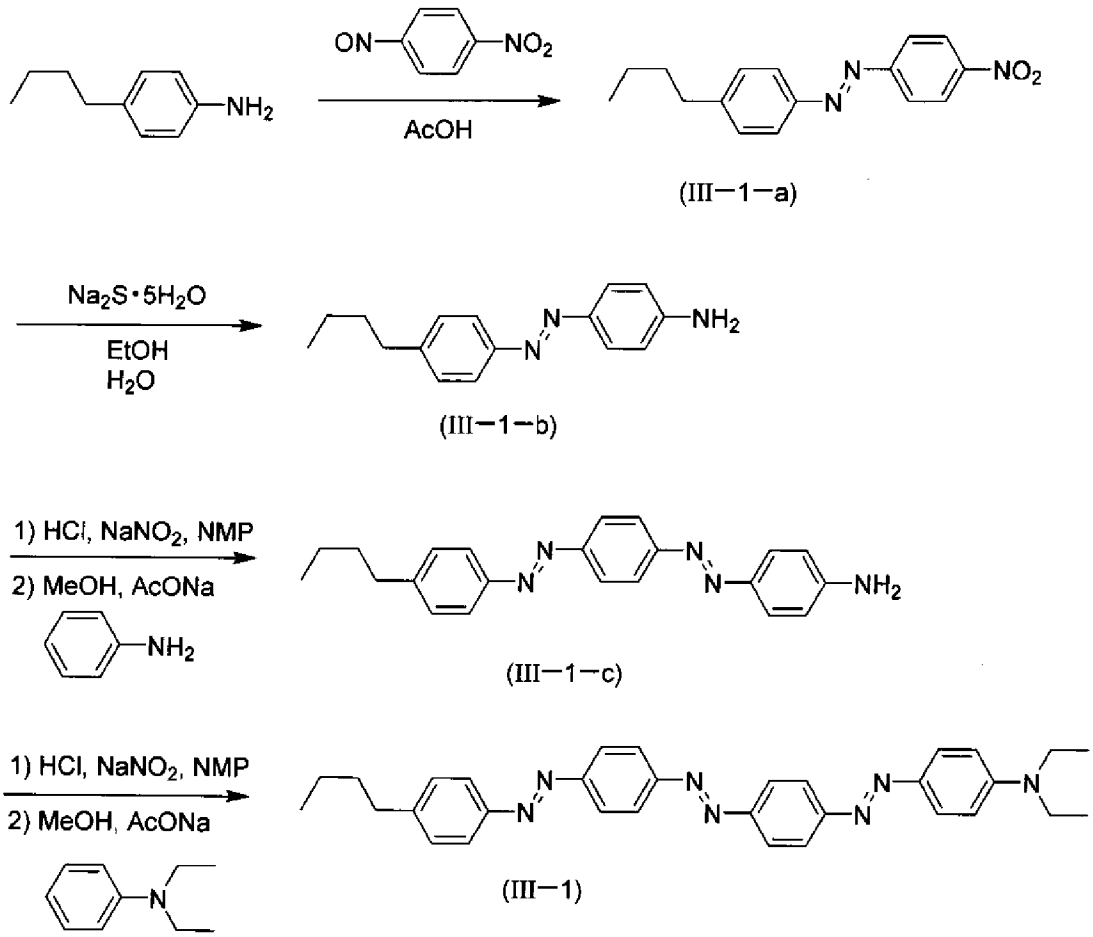
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（$CDCl_3$，４００ＭＨｚ）δ０．９２（ｓ，９Ｈ），δ１．０２（ｄ，３Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ１．１２－１．３３（ｍ，５Ｈ），δ１．６５－１．８９（ｍ，３Ｈ），δ２．５０－２．５９（ｍ，２Ｈ），δ３．６９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ３．８１（ｑ，２Ｈ，Ｊ＝１２．９Ｈｚ），δ４．０９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ６．６５（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．０３（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．０Ｈｚ），δ７．９５－８．１０（ｍ，１２Ｈ）

[0340] ＜色素（ＩＩＩ－１）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩＩ－１）を合成した。

[0341]

[化34]



[0342] （ＩＩＩ－１－ａ）の合成：

窒素気流下室温にて、４－ブチルアニリン（４３．３ｇ，０．２９０ｍｏｌ）、酢酸（２Ｌ）を加え、撹拌溶解し、１－ニトロソ－４－ニトロベンゼン（４３．７ｇ，１．０ｅｑ．）を分割投入し、室温にて一夜撹拌継続した。ジクロロメタン（５Ｌ）、精製水（１．５Ｌ）を注ぎ、暫く撹拌後、有機相を飽和重曹水（１．３Ｌ）、飽和食塩水（５００ｍＬ）で順次洗浄後、濾過、濾液を濃縮し赤茶色固体を得た。この粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン／ジクロロメタン＝３／１）で精製し、（ＩＩＩ－１－ａ）を５２．０８ｇ得た。

[0343] （ＩＩＩ－１－ｂ）の合成：

（ＩＩＩ－１－ａ）（５２．０ｇ，０．１８４ｍｏｌ）とエタノール（５

２０ｍＬ）、精製水（５２ｍＬ）と$Na_2S \cdot 5H_2O$（６２．１３ｇ，２．０ｅｑｕｉｖ．）を加え外温８０℃で６時間撹拌した。室温まで放冷後、反応液を精製水（５００ｍＬ）に注ぎ暫く撹拌後、吸引濾取し、精製水（２５０ｍＬ）でリンスした。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ジクロロメタン）で精製し、（ＩＩＩ－１－ｂ）を３４．４０ｇ得た。

[0344] （ＩＩＩ－１－ｃ）の合成：

（ＩＩＩ－１－ｂ）（２．００ｇ，５．６０ｍｍｏｌ）、塩酸（ＨＣｌ）（２．６３ｍＬ）をＮＭＰ（５０ｍＬ）に溶解させ、内温０℃に冷却した。硝酸ナトリウム（０．５３８ｇ，７．７６ｍｍｏｌ）を５ｍＬの精製水に溶解させ、先の溶液に内温０～３℃以内で滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。

別の反応器に、窒素雰囲気下室温にて、アニリン（２．５４ｇ，１．５ｅｑ．）をメタノール（２４ｍＬ）に溶解させた後、酢酸ナトリウム（１．９６ｇ）を加え、内温０℃に冷却した。ここに先の（ＩＩＩ－１－ｂ）溶液を内温０～５℃以内で３０分間掛けて添加し、内温０～５℃で２時間、室温へ戻しながら３時間撹拌継続した。精製水を添加し、メタノールにて濾過、洗浄を行い、得た粗体について、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン／ジクロロメタン＝１／１）にてカラム精製し、（ＩＩＩ－１－ｃ）を２．５０ｇ得た。

[0345] 色素（ＩＩＩ－１）の合成：

（ＩＩＩ－１－ｃ）（２．００ｇ，５．４４ｍｍｏｌ）、ＨＣｌ（１．９３ｍＬ）をＮＭＰ（５０ｍＬ）に溶解させ、内温０℃に冷却した。硝酸ナトリウム（０．３９５ｇ，５．７１２ｍｍｏｌ）を５ｍＬの精製水に溶解させ、先の溶液に内温０～３℃以内で滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。

別の反応器に、窒素雰囲気下室温にて、アニリン（１．２２ｇ，１．５ｅｑ．）をメタノール（４０ｍＬ）に溶解させた後、酢酸ナトリウム（１．４４ｇ）を加え、内温０℃に冷却した。ここに先の（ＩＩＩ－１－ｃ）溶液を

内温０～５℃以内で３０分間掛けて添加し、内温０～５℃で１時間、室温へ戻しながら２時間撹拌した。精製水を添加し、メタノールにて濾過、洗浄を行い、得た粗体について、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン／ジクロロメタン＝１／３）にてカラム精製し、色素（ＩＩＩ－１）を２．３９ｇ得た。

[0346] 色素（ＩＩＩ－１）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は５０９ｎｍであった。

[0347] また、ＮＭＲスペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$，４００ＭＨｚ）δ０．９６（ｔ，３Ｈ），δ１．２５（ｔ，６Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ１．３７－１．４２（ｍ，２Ｈ），δ１．６３－１．７１（ｍ，２Ｈ），δ２．７１（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝７．８Ｈｚ），δ３．４８（ｑ，４Ｈ，Ｊ＝８．２Ｈｚ），δ６．７４（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．３４（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝８．４Ｈｚ），δ７．７４－８．１０（ｍ，１２Ｈ）

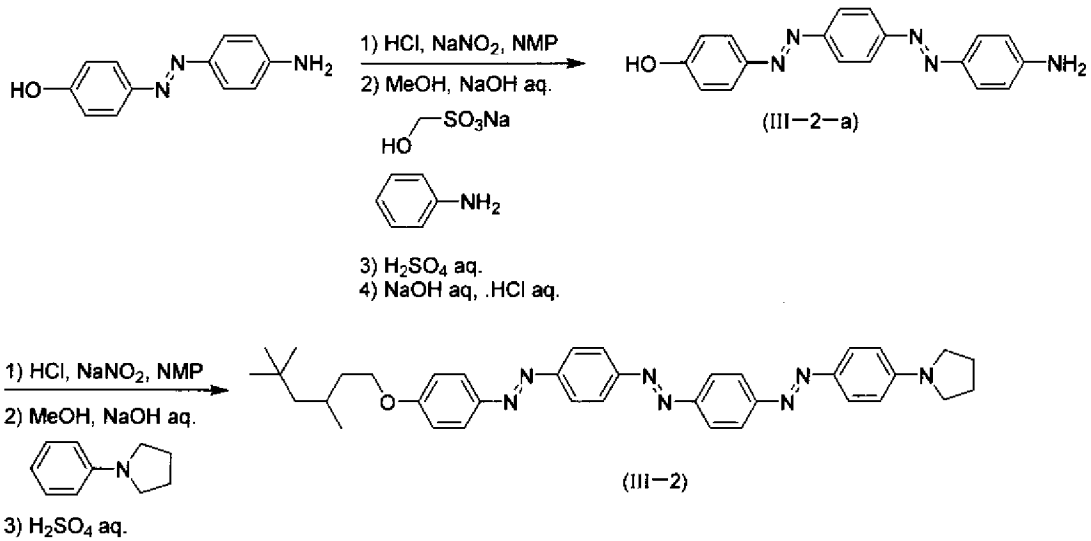
[0348] 色素（ＩＩＩ－１）についても色素（ＩＩ－１）と同様にシクロペンタノン飽和溶液の濃度を測定した。結果を表１に示す。

[0349] ＜色素（ＩＩＩ－２）＞

下記に記載の合成法に従い、色素（ＩＩＩ－２）を合成した。

[0350]

[化35]



[0351] （ＩＩＩ－２－ａ）の合成：

４－アミノ－４’－ヒドロキシアゾベンゼン（２３．０ｇ，１０８ｍｍｏｌ）、ＨＣｌ（１９ｍＬ，２３０ｍｍｏｌ）をＮＭＰ（４６０ｍＬ）、精製水（３３０ｍＬ）に溶解させ、内温０℃に冷却した。硝酸ナトリウム（８．２１ｇ，１１９ｍｍｏｌ）を精製水（３３ｍＬの）に溶解させ、先の溶液に滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。スルファミン酸（２．１０ｇ，２１．６ｍｍｏｌ）を精製水（１９ｍＬ）に溶解した水溶液を先の溶液に滴下し、内温０～２℃にて１０分間撹拌した。

別の反応器に、窒素雰囲気下室温にて、アニリン（１２．１ｇ，１３０ｍｍｏｌ）、ヒドロキシメタンスルホン酸ナトリウム（１７．４ｇ，１３０ｍｍｏｌ）、精製水（３４０ｍＬ）を入れ、７０℃で３時間撹拌した。放冷後、メタノール（３４０ｍＬ）に溶解させ氷冷し、先の４－アミノ－４’－ヒドロキシアゾベンゼン溶液を内温０～５℃以内で４０分間掛けて添加した。この際、２５％ＮａＯＨ水溶液でｐＨ４－５に調製しながら滴下を行った。内温０～５℃で１時間撹拌し、７０％硫酸を加えてｐＨ２．５とした。５％ＮａＣｌ水溶液（１Ｌ）に反応溶液を注ぎ込み、析出した固体を濾過して飽和食塩水で洗浄した。

この固体を別の反応容器に入れ、１Ｍ　ＮａＯＨ水溶液（１．１Ｌ）を加えて９０℃で２．５時間撹拌した。放冷後、濃塩酸と２Ｍ塩酸でｐＨ６とし、析出した固体をろ取して精製水、ヘキサンで洗浄した。得た粗体について、ジクロロメタンで懸濁洗浄を行い、酢酸エチルにて再結晶を行うことで、（ＩＩＩ－２－ａ）を１３．０ｇ得た。

[0352] 色素（ＩＩＩ－２）の合成：

（ＩＩＩ－２－ａ）（１．００ｇ，３．１５ｍｍｏｌ）、ＨＣｌ（０．５５ｍＬ，６．６ｍｍｏｌ）をＮＭＰ（２０ｍＬ）に溶解させ、内温０℃に冷却した。硝酸ナトリウム（０．２３９ｇ，３．４６ｍｍｏｌ）を１ｍＬの精製水に溶解させ、（ＩＩＩ－２－ａ）溶液に滴下し、内温０～２℃にて１時間撹拌した。スルファミン酸（６１ｍｇ，０．６３ｍｍｏｌ）を精製水（０．５５ｍＬ）に溶解した水溶液を先の溶液に滴下し、内温０～２℃にて１０分間撹拌した。

別の反応器で、窒素雰囲気下室温にて、Ｎ－フェニルピロリジン（０．４６４ｍｇ，３．１５ｍｍｏｌ）をメタノール（１０ｍＬ）に溶解させた後、２Ｍ塩酸を加え、ｐＨ５としたのち、内温０℃に冷却した。ここに先の（ＩＩ－２－ａ）溶液を内温０～５℃以内で４０分間掛けて添加した。この際、２５％ＮａＯＨ水溶液でｐＨ４－５に調製しながら滴下を行った。内温０～５℃で３０分間撹拌し、７０％硫酸を加えてｐＨ２．５とした。精製水を添加し、メタノール、ヘキサンにて濾過、洗浄を行い粗体を得た。粗体について、アセトニトリル、ジクロロメタン／メタノール＝１／１にて懸濁洗浄を行い、色素（ＩＩＩ－２）を０．８６ｇ得た。

[0353] 色素（ＩＩＩ－２）の１０ｐｐｍクロロホルム溶液での極大吸収波長（λｍａｘ２）は５１０ｎｍであった。

また、ＮＭＲスペクトル測定による構造確認を行った。結果を以下に示す。

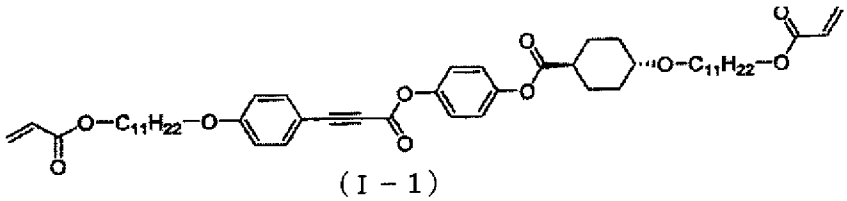
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$，４００ＭＨｚ）δ０．９２（ｓ，９Ｈ），δ１．０２（ｄ，３Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ１．１２－１．３３（ｍ，４Ｈ）

，δ１．６５－１．８９（ｍ，３Ｈ），δ２．５０－２．５９（ｍ，４Ｈ），δ３．７８－３．８０（ｍ，４Ｈ），δ４．０９（ｔ，２Ｈ，Ｊ＝６．８Ｈｚ），δ６．６５（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．２Ｈｚ），δ７．０３（ｄ，２Ｈ，Ｊ＝９．０Ｈｚ），δ７．９５－８．１０（ｍ，１２Ｈ）

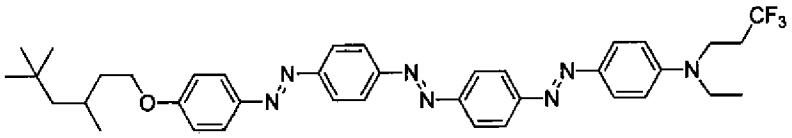
[0354] 上記で合成した重合性液晶化合物（Ｉ－１）及び色素（ＩＩ－１）～（ＩＩ－６）、（ＩＩＩ－１）、（ＩＩＩ－２）の化学構造を以下に示す。

[0355]

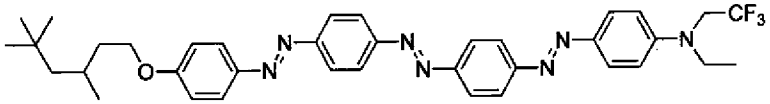
[化36]



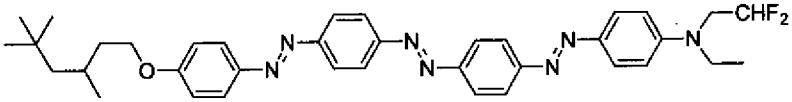
(Ⅰ－1)



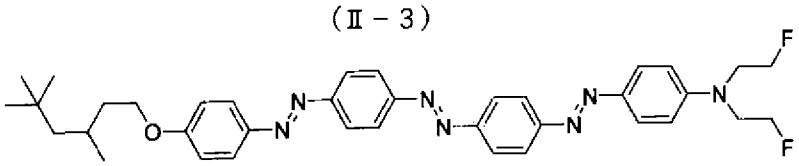
(Ⅱ－1)



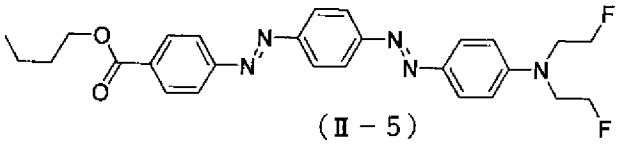
(Ⅱ－2)



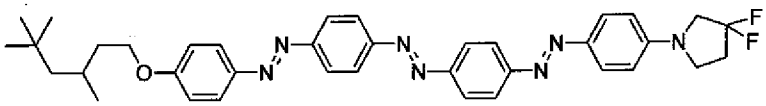
(Ⅱ－3)



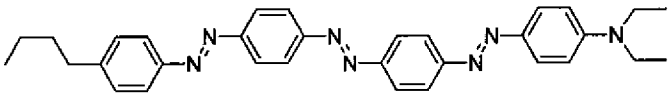
(Ⅱ－4)



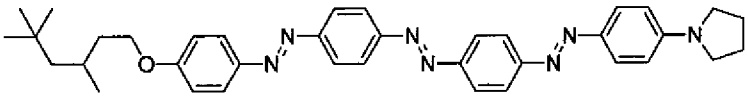
(Ⅱ－5)



(Ⅱ－6)



(Ⅲ－1)



(Ⅲ－2)

[0356] [実施例１]

クロロホルム：８０３２．１部に、重合性液晶化合物（Ｉ－１）：４０．００部、色素（ＩＩ－１）：０．８０部を加え、撹拌して相溶させた後、溶剤を除去することにより、異方性色素膜形成用組成物１を得た。異方性色素膜形成用組成物１のrn_1/rn_2は、０．７５である。

異方性色素膜形成用組成物１が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

得られた異方性色素膜形成用組成物１を用いて、上述の方法で二色比を決定するため、セルギャップ８．０μｍのサンドウィッチセルを使用して異方性色素膜１を作製し、異方性色素膜１の二色比を決定した。

その結果を表１に示す。

[0357] ［実施例２］

色素（ＩＩ－１）：０．８０部に代えて、色素（ＩＩ－２）：０．８３部を加えたほかは実施例１と同様にして、異方性色素膜形成用組成物２及び異方性色素膜２を得た。異方性色素膜形成用組成物２のrn_1/rn_2は、０．７５である。

異方性色素膜形成用組成物２が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

また、異方性色素膜２の二色比を決定した。

その結果を表１に示す。

[0358] ［実施例３］

色素（ＩＩ－１）：０．８０部に代えて、色素（ＩＩ－３）：０．７５部を加えたほかは実施例１と同様にして、異方性色素膜形成用組成物３及び異方性色素膜３を得た。異方性色素膜形成用組成物３のrn_1/rn_2は、０．７５である。

異方性色素膜形成用組成物３が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

また、異方性色素膜３の二色比を決定した。

その結果を表１に示す。

[0359] ［実施例４］

色素（ＩＩ－１）：０．８０部に代えて、色素（ＩＩ－４）：０．７８部を加えたほかは実施例１と同様にして、異方性色素膜形成用組成物４及び異方性色素膜４を得た。異方性色素膜形成用組成物４のrn_1/rn_2は、０．７５である。

異方性色素膜形成用組成物４が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

また、異方性色素膜４の二色比を決定した。

その結果を表１に示す。

[0360] ［実施例５］

色素（ＩＩ－１）：０．８０部に代えて、色素（ＩＩ－５）：０．８４部を加えたほかは実施例１と同様にして、異方性色素膜形成用組成物５及び異方性色素膜５を得た。異方性色素膜形成用組成物５のrn_1/rn_2は、１である。

異方性色素膜形成用組成物５が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

また、異方性色素膜５の二色比を決定した。

その結果を表１に示す。

[0361] ［比較例１］

色素（ＩＩ－１）：０．８０部に代えて、色素（ＩＩＩ－１）：０．６０部を用いたほかは実施例１と同様にして、異方性色素膜形成用組成物６及び異方性色素膜６を得た。異方性色素膜形成用組成物６のrn_1/rn_2は、０．７５である。

異方性色素膜形成用組成物６が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

また、異方性色素膜６の二色比を決定した。

その結果を表１に示す。

[0362]

[表1]

	実施例1	実施例2	実施例3	実施例4	実施例5	比較例1
重合性液晶化合物	I－1	I－1	I－1	I－1	I－1	I－1
色素	II－1	II－2	II－3	II－4	II－5	III－1
極大吸収波長（nm）	470	455	535	535	535	575
波長450nmにおける二色比	15	17	18	18	17	11
用いた色素のシクロペンタノンへの溶解度（質量%）	≧3.0	≧3.0	≧3.0	1.3	≧3.0	0.8

[0363] 表１より、実施例１に用いた色素（ＩＩ－１）、実施例２に用いた色素（ＩＩ－２）、実施例３に用いた色素（ＩＩ－３）、実施例４に用いた色素（ＩＩ－４）、実施例５に用いた色素（ＩＩ－５）はシクロペンタノンへの溶解性が高く、且つ得られた異方性色素膜の極大吸収波長は比較例１に比べて短波長化しており、二色比は短波長域である波長４５０ｎｍにおいて良好な値を示した。一方、比較例１では、二色比及びシクロペンタノンへの溶解性が実施例に比較して低いことが示された。

[0364] ［実施例６］

色素（ＩＩ－１）：０．８０部に代えて、色素（ＩＩ－６）：０．８６部を加えたほかは実施例１と同様にして、異方性色素膜形成用組成物７及び異方性色素膜７を得た。異方性色素膜形成用組成物７の$\mathrm{rn}_1/\mathrm{rn}_2$は、０．７５である。

異方性色素膜形成用組成物７が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

また、異方性色素膜７の二色比を決定した。

その結果を表２に示す。

[0365] ［比較例２］

色素（ＩＩ－１）：０．８０部に代えて、色素（ＩＩＩ－２）：０．７６部を用いたほかは実施例１と同様にして、異方性色素膜形成用組成物８及び

異方性色素膜８を得た。異方性色素膜形成用組成物８のrn_1/rn_2は、０．７５である。

異方性色素膜形成用組成物８が液晶性を示すことは、ホットステージが付属する偏光顕微鏡にて、４０℃で複屈折が観察されたことで確認した。

また、異方性色素膜８の二色比を決定した。

その結果を表２に示す。

[0366] [表2]

	実施例6	比較例2
重合性液晶化合物	I－1	I－1
色素	II－6	III－2
極大吸収波長(nm)	525	570
波長450nmにおける二色比	12	4

[0367] 表２より、実施例６に用いた色素（ＩＩ－６）は得られた異方性色素膜の極大吸収波長は比較例２に比べて短波長化しており、二色比は短波長域である波長４５０ｎｍにおいて良好な値を示した。一方、比較例２では、得られた異方性色素膜において二色比が低いことが示された。

[0368] 本発明を特定の態様を用いて詳細に説明したが、本発明の意図と範囲を離れることなく様々な変更が可能であることは当業者に明らかである。

本出願は、２０２２年３月２２日付で出願された日本特許出願２０２２－０４４８８８に基づいており、その全体が引用により援用される。

請求の範囲

[請求項1] 下記式（１）で示される化合物。

[化1]

$$X^1\text{-}A^{11}\text{-}N{=}N{-}A^{12}\text{-}N{=}N{-}A^{13}\text{-}N{=}N{-}A^{14}\text{-}N\begin{matrix}R^{11}\\R^{12}\end{matrix} \quad (1)$$

（式（１）中、

－Ｘ^{1}は１価の有機基を表す。

－Ｒ^{11}は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{12}は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ^{11}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基は、更に置換基を有していてもよい。

また、－Ｒ^{11}の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ^{12}のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_{2}$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

－Ｒ^{11}及び－Ｒ^{12}は、一体となって環を形成してもよく、該環は置換基を有していてもよい。

－Ａ^{11}－、－Ａ^{12}－、－Ａ^{13}－及び－Ａ^{14}－は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基を表す。）

[請求項2] 前記式（１）における－Ｒ^{11}が、１つ以上５つ以下のフッ素原子

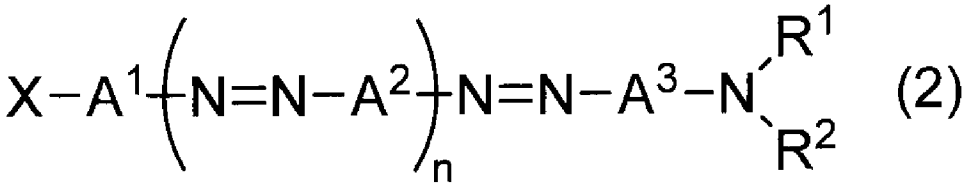
で置換されたアルキル基である、請求項１に記載の化合物。

[請求項3] 前記式（１）における－R^{11}が、１つ以上のフッ素原子で置換された、炭素数が１以上１０以下のアルキル基である、請求項１に記載の化合物。

[請求項4] 前記式（１）における－X^{1}が、水素原子、－R^{a}、－Ｏ－R^{a}、－ＮＨ－R^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－R^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－R^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－R^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－R^{b}）－R^{a}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－R^{a}、－ＮＨ－Ｃ（＝Ｏ）－R^{a}、－Ｎ（－R^{b}）－Ｃ（＝Ｏ）－R^{a}、又は－Ｓ－R^{a}（－R^{a}及び－R^{b}は、それぞれ独立に、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基、環を構成する原子の数が５～１４のシクロアルキル基、又は環を構成する原子の数が５～１４のアリール基を表す。前記アルキル基、シクロアルキル基及びアリール基は、それぞれ置換基を有していてもよい。また、－R^{a}及び－R^{b}は、一体となって炭素数２～１５の環を形成していてもよく、該環は置換基を有していてもよい。また、前記アルキル基、シクロアルキル基、アリール基及びR^{a}とR^{b}が一体となって形成される環に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＦ－、－CF_2－、－ＣＨＣｌ－、又は－CCl_2－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。）である、請求項１～３のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項5] 下記式（２）で示される化合物と重合性液晶化合物とを含む異方性色素膜形成用組成物。

[化2]



（式（２）中、

－Ｘは１価の有機基を表す。

－Ｒ[1]は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ[2]は水素原子、アルキル基、又は１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基を表す。

－Ｒ[1]の１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ[2]のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基は、更に置換基を有していてもよい。

また、－Ｒ[1]の以上のフッ素原子で置換されたアルキル基、－Ｒ[2]のアルキル基、１つ以上のフッ素原子で置換されたアルキル基に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＣｌ－、又は－ＣＣｌ$_2$－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。

－Ｒ[1]及び－Ｒ[2]は、一体となって環を形成してもよく、該環は置換基を有していてもよい。

－Ａ[1]－、－Ａ[2]－及び－Ａ[3]－はそれぞれ独立に、置換基を有していてもよい芳香族炭素水素環の２価基を表す。

ｎは１、２又は３を表す。

ｎが２又は３の場合、複数の－Ａ[2]－は互いに同一でも異なっていてもよい。）

[請求項6] 前記式（２）における－Ａ^{3}－が、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基である、請求項５に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項7] 前記式（２）における－Ａ^{2}－が、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基である、請求項５又は６に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項8] 前記式（２）における－Ａ^{1}－が、置換基を有していてもよい１，４－フェニレン基である、請求項５～７のいずれか一項に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項9] 前記式（２）におけるｎが２である、請求項５～８のいずれか一項に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項10] 前記式（２）における－Ｒ^{1}が、１つ以上５つ以下のフッ素原子で置換されたアルキル基である、請求項５～９のいずれか一項に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項11] 前記式（２）における－Ｒ^{1}が、１つ以上のフッ素原子で置換された、炭素数が１以上１０以下のアルキル基である、請求項５～９のいずれか一項に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項12] 前記式（２）におけるＸが、水素原子、－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－Ｒ^{a}、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｒ^{a}、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－ＮＨ－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、－Ｎ（－Ｒ^{b}）－Ｃ（＝Ｏ）－Ｒ^{a}、又は－Ｓ－Ｒ^{a}（－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}は、それぞれ独立に、分岐を有していてもよい炭素数１～１５のアルキル基、環を構成する原子の数が５～１４のシクロアルキル基、又は環を構成する原子の数が５～１４のアリール基を表す。前記アルキル基、シクロアルキル基及びアリール基は、それぞれ置換基を有していてもよい。また、－Ｒ^{a}及び－Ｒ^{b}は、一体となって炭素数２～１５の環を形成していてもよく、該環は置換基を有していてもよい。また、前記アルキル基、シクロア

ルキル基、アリール基及びR^aとR^bが一体となって形成される環に含まれる１つ又はそれ以上のメチレン基は、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＮＨ－、－Ｃ（＝Ｏ）－、－Ｃ（＝Ｏ）－Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）－ＮＨ－、－ＣＨＦ－、－CF_2－、－ＣＨＣｌ－、又は－CCl_2－によって置き換えられた（ｄｉｓｐｌａｃｅ）構造であってもよく、アクリロイルオキシ基、メタクリロイルオキシ基、グリシジルオキシ基の重合性基に置き換えられた構造であってもよい。）である、請求項５～１１のいずれか一項に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項13] 前記重合性液晶化合物が、繰り返し単位構造を有しない低分子重合性液晶化合物である、請求項５～１２のいずれか一項に記載の異方性色素膜形成用組成物。

[請求項14] 請求項５～１３のいずれか一項に記載の異方性色素膜形成用組成物を用いて形成された異方性色素膜。

[請求項15] 請求項１４に記載の異方性色素膜を含む光学素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2023/008490

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C09B 31/043(2006.01)i; ***C09B 31/18***(2006.01)i; ***C09B 67/20***(2006.01)i; ***G02B 5/30***(2006.01)i; ***G02F 1/1335***(2006.01)i
FI: C09B31/043; C09B31/18; C09B67/20 K; G02B5/30; G02F1/1335 510

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C09B31/043; C09B31/18; C09B67/20; G02B5/30; G02F1/1335

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

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2023
Registered utility model specifications of Japan 1996-2023
Published registered utility model applications of Japan 1994-2023

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

CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 10-060446 A (MITSUBISHI CHEMICAL CORP.) 03 March 1998 (1998-03-03) claims, paragraphs [0001]-[0004], [0035], table 1 (in particular, compound No. 8), etc.	1-4
Y	claims, paragraphs [0001]-[0004], [0035], table 1 (in particular, compound No. 8), etc.	5-15
Y	JP 05-132628 A (MITSUBISHI KASEI CORP.) 28 May 1993 (1993-05-28) claims, paragraphs [0040], [0041], table 1 (in particular, compound No. 4), etc.	5-15
Y	JP 07-224282 A (MITSUBISHI CHEMICAL CORP.) 22 August 1995 (1995-08-22) claims, paragraphs [0026]-[0036], table 1 (in particular, compound No. 14), etc.	5-15
Y	WO 2020/045216 A1 (FUJIFILM CORP.) 05 March 2020 (2020-03-05) claims, paragraphs [0193]-[0221], etc.	5-15
Y	JP 2017-082217 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 18 May 2017 (2017-05-18) claims, paragraphs [0033]-[0101], [0179]-[0241], etc.	5-15
Y	JP 2010-026024 A (MITSUBISHI CHEMICAL CORP.) 04 February 2010 (2010-02-04) claims, paragraphs [0069]-[0145], etc.	5-15

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☑ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
26 April 2023	**16 May 2023**
Name and mailing address of the ISA/JP **Japan Patent Office (ISA/JP)** **3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915** **Japan**	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2023/008490

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 10-060446 A	03 March 1998	(Family: none)	
JP 05-132628 A	28 May 1993	(Family: none)	
JP 07-224282 A	22 August 1995	(Family: none)	
WO 2020/045216 A1	05 March 2020	US 2021/0173135 A1 claims, paragraphs [0502]-[0558], etc. CN 112654903 A	
JP 2017-082217 A	18 May 2017	US 2017/0121605 A1 claims, paragraphs [0030]-[0225], etc. KR 10-2017-0051305 A CN 106978196 A	
JP 2010-026024 A	04 February 2010	(Family: none)	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2023/008490

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

C09B 31/043(2006.01)i; C09B 31/18(2006.01)i; C09B 67/20(2006.01)i; G02B 5/30(2006.01)i; G02F 1/1335(2006.01)i
FI: C09B31/043; C09B31/18; C09B67/20 K; G02B5/30; G02F1/1335 510

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

C09B31/043; C09B31/18; C09B67/20; G02B5/30; G02F1/1335

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２３年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２３年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２３年

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

CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	JP 10-060446 A (三菱化学株式会社) 03.03.1998 (1998-03-03) 特許請求の範囲、段落[0001]-[0004], [0035]、表-1（特に、化合物No.8）等	1-4
Y	特許請求の範囲、段落[0001]-[0004], [0035]、表-1（特に、化合物No.8）等	5-15
Y	JP 05-132628 A (三菱化成株式会社) 28.05.1993 (1993-05-28) 特許請求の範囲、段落[0040]-[0041]、表-1（特に、化合物No.4）等	5-15
Y	JP 07-224282 A (三菱化学株式会社) 22.08.1995 (1995-08-22) 特許請求の範囲、段落[0026]-[0036]、表1（特に、化合物No.14）等	5-15
Y	WO 2020/045216 A1 (富士フイルム株式会社) 05.03.2020 (2020-03-05) 請求の範囲、段落[0193]-[0221]等	5-15
Y	JP 2017-082217 A (住友化学株式会社) 18.05.2017 (2017-05-18) 特許請求の範囲、段落[0033]-[0101], [0179]-[0241]等	5-15
Y	JP 2010-026024 A (三菱化学株式会社) 04.02.2010 (2010-02-04) 特許請求の範囲、段落[0069]-[0145]等	5-15

☐ Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
26.04.2023	16.05.2023

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

権限のある職員（特許庁審査官）
井上　恵理 4Z 4767

電話番号 03-3581-1101 内線 3483

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2023/008490

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 10-060446 A	03.03.1998	（ファミリーなし）	
JP 05-132628 A	28.05.1993	（ファミリーなし）	
JP 07-224282 A	22.08.1995	（ファミリーなし）	
WO 2020/045216 A1	05.03.2020	US 2021/0173135 A1 CLAIMS, 段落[0502]-[0558] 等 CN 112654903 A	
JP 2017-082217 A	18.05.2017	US 2017/0121605 A1 CLAIMS, 段落[0030]-[0225] 等 KR 10-2017-0051305 A CN 106978196 A	
JP 2010-026024 A	04.02.2010	（ファミリーなし）	