



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0096450  
(43) 공개일자 2016년08월16일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 19/32 (2006.01) C09K 19/08 (2006.01)  
G02F 1/1333 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 19/322 (2013.01)  
C09K 19/08 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2015-0018121

(22) 출원일자 2015년02월05일

심사청구일자 2016년02월11일

(71) 출원인

주식회사 엘지화학

서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)

서강대학교산학협력단

서울특별시 마포구 백범로 35 (신수동, 서강대학교)

(72) 발명자

최지영

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
문봉진

경기도 고양시 일산동구 강송로 196, 108동 1202호 (마두동, 강촌마을1단지아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

유미특허법인

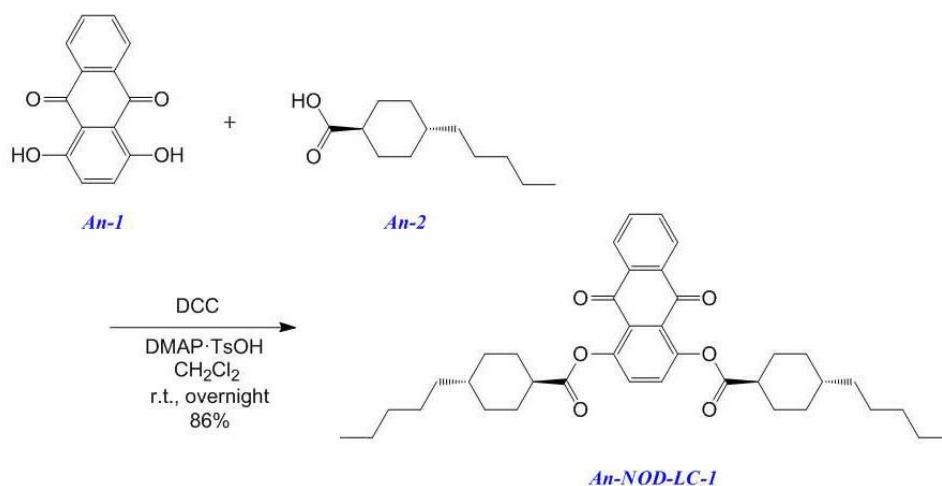
전체 청구항 수 : 총 6 항

(54) 발명의 명칭 역 파장 분산성 화합물, 이를 포함하는 역 파장 분산성 조성물 및 광학 이방체

(57) 요약

본 발명은 역 파장 분산성 화합물, 이를 포함하는 역 파장 분산성 조성물 및 광학 이방체에 관한 것이다. 본 발명에 따른 역 파장 분산성 화합물은 향상된 배향성을 가져, 광학적 물성이 우수한 광학 이방체의 제공을 가능케 한다.

대표도



(52) CPC특허분류  
**G02F 1/1333** (2013.01)

**서경창**  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

(72) 발명자  
**전성호**  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
**이정현**  
서울특별시 송파구 올림픽로4길 42, 15동 302호 (잠실동, 우성아파트)

---

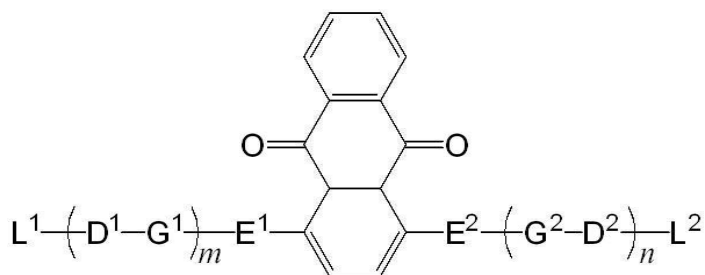
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 역 파장 분산성 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$E^1$ ,  $E^2$ ,  $D^1$ , 및  $D^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 2가의 연결기, 또는 3가의 연결기이고;

$G^1$  및  $G^2$ 는 각각 독립적으로 탄소수 5 내지 8의 비방향족인 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹, 또는 탄소수 6 내지 20의 방향족 또는 헤테로 방향족 그룹이고;

$L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -Br, -I, -CN, -NC, -NCO, -OCN, -SCN, -C(=O)NR¹R², -C(=O)R¹, -O-C(=O)R¹, -NH₂, -SH, -SR¹, -SO₃H, -SO₂R¹, -OH, -NO₂, -CF₃, -SF₃, 치환 또는 비치환된 실릴, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 카빌 또는 하이드로카빌, 또는 -Sₚ-P로서, 상기 P는 중합성 그룹이고, 상기 Sₚ는 스페이서 그룹 또는 단일 결합이며, 상기 R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이고;

m 및 n은 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수로서; 상기 m 또는 n이 2 이상이면, 둘 이상 반복되는 -(D¹-G¹)- 또는 -(G²-D²)-의 각 반복 단위는 서로 동일하거나 다른 것으로 될 수 있다.

#### 청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1의  $G^1$  및  $G^2$ 는 각각 독립적으로 사이클로헥산 고리, 사이클로헥센 고리, 벤젠 고리, 나프탈렌 고리, 또는 페난트렌 고리인, 역 파장 분산성 화합물.

#### 청구항 3

제 1 항에 있어서,

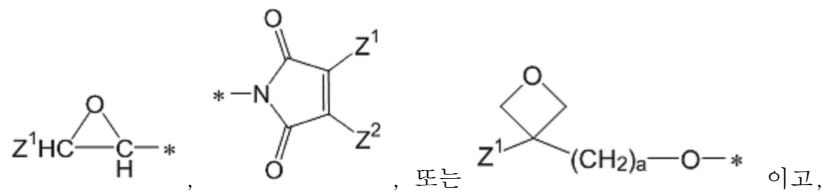
상기 화학식 1의  $E^1$ ,  $E^2$ ,  $D^1$ , 및  $D^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -O-COO-, -CO-NR¹-, -NR¹-CO-, -NR¹-CO-NR¹-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CH₂CH₂-, -(CH₂)₃-, -(CH₂)₄-, -CF₂CH₂-, -CH=CH-, -CY¹=CY²-, -CH=N-, -N=CH-, -N=N-, -CH=CR¹-, -C=C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, -CR¹R²-, 또는 3가의 아민 연결기로서, 상기 Y¹ 및 Y²는 각각 독립적으로 -H, -F,

-Cl, -CN, 또는  $-R^1$ 이고, 상기  $R^1$  및  $R^2$ 는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬인, 역 파장 분산성 화합물.

#### 청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기  $-S_p-P$ 에서 P는  $CH_2=CZ^1-COO-$ ,  $CH_2=CZ^1-CO-$ ,  $CH_2=CZ^2-(O)_a-$ ,  $CH_3-CH=CH-O-$ ,  $(CH_2=CH)_2CH-OCO-$ ,  $(CH_2=CH-CH_2)_2CH-OCO-$ ,  $(CH_2=CH)_2CH-O-$ ,  $(CH_2=CH-CH_2)_2N-$ ,  $(CH_2=CH-CH_2)_2N-CO-$ ,  $HO-CZ^1Z^2-$ ,  $HS-CZ^1Z^2-$ ,  $HZ^1N-$ ,  $HO-CZ^1Z^2-NH-$ ,  $CH_2=CZ^1-CO-NH-$ ,  $CH_2=CH-(COO)_a-Phe-(O)_b-$ ,  $CH_2=CH-(CO)_a-Phe-(O)_b-$ ,  $Phe-CH=CH-$ ,  $HOOC-$ ,  $OCN-$ ,  $Z^1Z^2Z^3Si-$ ,



상기  $Z^1$  내지  $Z^3$ 는 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -CN,  $-CF_3$ , 페닐, 또는 탄소수 1 내지 5의 알킬이고,

상기 Phe는 -F, -Cl, -Br, -I, -CN, -NC, -NCO, -OCN, -SCN,  $-C(=O)NR^1R^2$ ,  $-C(=O)R^1$ ,  $-NH_2$ , -SH,  $-SR^1$ ,  $-SO_3H$ ,  $-SO_2R^1$ , -OH,  $-NO_2$ ,  $-CF_3$ , 또는  $-SF_3$ 에 의해 치환 또는 비치환된 1,4-페닐렌이고,

상기 a 및 b는 각각 독립적으로 0 또는 1인, 역 파장 분산성 화합물.

#### 청구항 5

제 1 항에 있어서,

상기  $-S_p-P$ 에서  $S_p$ 는  $-S_p-P$ 가  $-X'-S_p'-P$ 가 되도록 하는 화학식  $-X'-S_p'$ 로부터 선택되고,

상기  $S_p'$ 는 -F, -Cl, -Br, -I, 또는 -CN으로 일치환 또는 다중치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬렌이고, 상기 알킬렌에서 하나 이상의  $-CH_2-$  그룹은  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-NR^1-$ ,  $SiR^1R^2-$ ,  $-CO-$ ,  $-COO-$ ,  $-OCO-$ ,  $-OCO-O-$ ,  $-S-CO-$ ,  $-CO-S-$ ,  $-NR^1-CO-O-$ ,  $-O-CO-NR^1-$ ,  $-NR^1-CO-NR^1-$ ,  $-CH=CH-$ , 또는  $-C=C-$ 로 대체될 수 있고,

상기  $X'$ 는  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-CO-$ ,  $-COO-$ ,  $-OCO-$ ,  $-O-COO-$ ,  $-CO-NR^1-$ ,  $-NR^1-CO-$ ,  $-NR^1-CO-NR^1-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-SCH_2-$ ,  $-CH_2S-$ ,  $-OCF_2-$ ,  $-CF_2O-$ ,  $-SCF_2-$ ,  $-SF_2O-$ ,  $-CF_2CH_2-$ ,  $-CF_2CF_2-$ ,  $-CH=N-$ ,  $-N=CH-$ ,  $-N=N-$ ,  $-CH=CR^1-$ ,  $-CY^1=CY^2-$ ,  $-C=C-$ ,  $-CH=CH-COO-$ ,  $-OCO-CH=CH-$ , 또는 단일 결합이고,

상기  $Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -CN, 또는  $-R^1$ 이고,

상기  $R^1$  및  $R^2$ 는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬인, 역 파장 분산성 화합물.

#### 청구항 6

제 1 항에 따른 역 파장 분산성 화합물을 포함하는 조성물로부터 수득되며, 하기 식 I을 만족하는 광학 이방체:

(식 I)

$$\Delta n(450\text{nm})/\Delta n(550\text{nm}) < 1.0$$

상기 식 1에서,  $\Delta n(\lambda)$ 는 파장  $\lambda$ 에서의 비복굴절율을 의미한다.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 역 파장 분산성 화합물, 이를 포함하는 역 파장 분산성 조성물 및 광학 이방체에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 디스플레이 분야에서 LCD (Liquid crystal display)의 점유율이 상승하면서, 차세대 디스플레이로 거론되고 있는 OLED(Organic light emitting diodes)에 대한 관심이 점차 높아지고 있다.

[0003] OLED 방식의 디스플레이는 두께, 소비 전력, 응답 속도, 시야각 등 여러 부문에서 LCD 보다 탁월하고, 투명 제품과 플렉시블 제품 등 다양한 응용이 가능해 미래의 디스플레이로 각광을 받고 있다.

[0004] 다만, OLED는 수명이 비교적 짧고 발광 효율이 낮아 대형화에 아직 한계가 있으며, 특히 외부광의 간섭으로 인해 완벽한 검정색을 구현하기 어려운 단점이 있다.

[0005] 보다 완벽한 검정색의 구현을 위하여, OLED 방식의 디스플레이에 두 장의 편광 필름을 사용하여 외부광에 의한 간섭을 최소화하는 방법이 제안되었다. 두 장의 편광 필름을 사용하는 방법은 비교적 간단하지만, 디스플레이의 선명도에 영향을 미칠 수 있고, 제조 비용이 상승하게 되는 문제점이 있다.

[0006] 그에 따라, 상기 편광 필름 대신 역 파장 분산성 필름을 사용하는 방법 등 외부광에 의한 간섭을 최소화하는 다양한 방법들이 제안되고 있다. 이와 관련하여, 역 파장 분산성 화합물은 미국 등록 특허 공보 제 6,139,771 호, 미국 등록 특허 공보 제 6,203,724 호, 미국 공개 특허 공보 제 2011-0147659 호, 국제 특허 공개 공보 제 W02005/085222 호, 국제 특허 공개 공보 제 W02011/050896 호 등 다양한 문헌에 개시되어 있다. 하지만, 지금까지 제안된 역 파장 분산성 화합물들은 배향이 잘 이루어지지 않는 문제점이 있다.

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

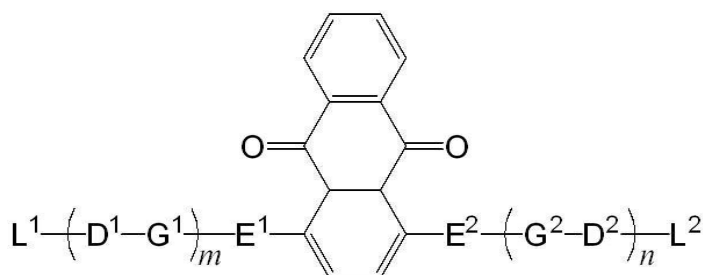
[0007] 본 발명은 향상된 배향성을 가져 광학적 물성이 우수한 광학 이방체의 제공을 가능케 하는 역 파장 분산성 화합물을 제공하기 위한 것이다.

[0008] 또한, 본 발명은 상기 화합물을 포함하는 역 파장 분산성 조성물과 광학 이방체를 제공하기 위한 것이다.

### 과제의 해결 수단

[0009] 본 발명에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 역 파장 분산성 화합물이 제공된다:

[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1에서,

[0013]  $E^1$ ,  $E^2$ ,  $D^1$ , 및  $D^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 2가의 연결기, 또는 3가의 연결기이고;

- [0014]  $G^1$  및  $G^2$ 는 각각 독립적으로 탄소수 5 내지 8의 비방향족인 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹, 또는 탄소수 6 내지 20의 방향족 또는 헤테로 방향족 그룹이고;
- [0015]  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -Br, -I, -CN, -NC, -NCO, -OCN, -SCN,  $-C(=O)NR^1R^2$ ,  $-C(=O)R^1$ ,  $-O-C(=O)R^1$ ,  $-NH_2$ , -SH,  $-SR^1$ ,  $-SO_3H$ ,  $-SO_2R^1$ , -OH,  $-NO_2$ ,  $-CF_3$ ,  $-SF_3$ , 치환 또는 비치환된 실릴, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 카빌 또는 하이드로카빌, 또는  $-S_p-P$ 로서, 상기 P는 중합성 그룹이고, 상기  $S_p$ 는 스페이서 그룹 또는 단일 결합이며, 상기  $R^1$  및  $R^2$ 는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이고;
- [0016] m 및 n은 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수로서; 상기 m 또는 n이 2 이상이면, 둘 이상 반복되는  $-(D^1-G^1)-$  또는  $-(G^2-D^2)-$  의 각 반복 단위는 서로 동일하거나 다른 것으로 될 수 있다.
- [0017] 또한, 본 발명에 따르면, 상기 역 과장 분산성 화합물을 포함하는 조성물로부터 수득되며, 하기 식 I을 만족하는 광학 이방체가 제공된다:
- [0018] (식 I)
- [0019]  $\Delta n(450nm)/\Delta n(550nm) < 1.0$
- [0020] 상기 식 I에서,  $\Delta n(\lambda)$ 는 파장  $\lambda$ 에서의 비복굴절율을 의미한다.
- [0021] 이하, 발명의 구현 예들에 따른 역 과장 분산성 화합물 및 이를 포함하는 조성물로부터 수득되는 광학 이방체에 대하여 설명하기로 한다.
- [0022] 그에 앞서, 본 명세서 전체에서 명시적인 언급이 없는 한, 전문용어는 단지 특정 구현예를 언급하기 위한 것이며, 본 발명을 한정하는 것을 의도하지 않는다. 그리고, 여기서 사용되는 단수 형태들은 문구들이 이와 명백히 반대의 의미를 나타내지 않는 한 복수 형태들도 포함한다.
- [0023] 또한, 명세서에서 사용되는 "포함"의 의미는 특정 특성, 영역, 정수, 단계, 동작, 요소 또는 성분을 구체화하며, 다른 특정 특성, 영역, 정수, 단계, 동작, 요소, 또는 성분의 부가를 제외시키는 것은 아니다.
- [0024] 한편, "역 과장 분산성 화합물"은 그 자체로 액정성과 역 과장 분산성을 나타내거나, 또는 그 자체로 액정성을 나타내진 않지만 임의의 액정성 화합물과 중합 또는 가교되어 상기 액정성 화합물이 역 과장 분산성을 나타낼 수 있도록 하는 화합물을 의미한다. 구체적으로, 상기 역 과장 분산성 화합물, 또는 상기 역 과장 분산성 화합물 및 액정성 화합물(예를 들어, 액정성을 가지는 반응성 메소제닉 화합물)을 함유하는 조성물을 액정 상태로 배향시킨 후, 그 상태에서 자외선 등의 활성 에너지를 조사하면, 액정 분자의 배향 구조를 고정화한 중합물을 얻을 수 있다. 이렇게 얻어진 중합물은 굴절율, 유전율, 자화율, 탄성율, 열팽창율 등의 물리적 성질의 이방성을 가지고 있으므로, 예를 들어 위상차판, 편광판, 편광 프리즘, 휘도 향상 필름, 광 섬유의 피복재 등의 광학 이방체로서 응용 가능하다.
- [0025] 그리고, "비복굴절율" (specific birefringent index)이라 함은 광학 필름을 투과하는 투과광의 파장( $\lambda$ )에 있어서의 위상차 값을 의미하는 것으로서,  $\Delta n(\lambda)$ 로 표시될 수 있다.
- [0026] 또한, "메소제닉 그룹"은 액정상 거동을 유도할 수 있는 능력을 갖는 그룹을 의미한다.
- [0027] 그리고, "스페이서 그룹"은 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 공지되어 있고, 예를 들어 문헌 [C. Tschierske, G. Pelzl, S. Diele, Angew. Chem. 2004, 116, 6340-6368]에 기술되어 있다. 상기 스페이서 그룹은 메소제닉 그룹과 중합성 그룹을 연결하는 가요성 유기 그룹(flexible organic group)을 지칭한다.
- [0028] 그리고, "카빌 그룹"은 임의의 비-탄소 원자가 없는 하나 이상의 탄소 원자 (예컨데,  $-C=C-$ )를 포함하거나, 또는 선택적으로 하나 이상의 비-탄소 원자 (예컨데, N, O, S, P, Si)와 조합된 하나 이상의 탄소 원자 (예컨데, 카보닐)를 포함하는 임의의 1가 또는 다가 유기 라디칼 잔기를 의미한다. "하이드로카빌 그룹"은 추가적으로 하나 이상의 H 원자를 함유하고, 선택적으로 하나 이상의 헤테로원자 (예컨데, N, O, S, P, Si)를 함유하는 카빌 그룹을 의미한다.

[0029] 한편, 이색성(dichroism)이란 연신한 필름에 수직으로 편광되는 빛과 연신 방향과 평행으로 편광되는 빛을 쪼여 주었을 때 두 경우의 흡광도가 일치하지 않는 현상을 의미한다. 이색성 염료(dichroic dye)는 이러한 이색성을 가지는 염료로서 다양하게 개발되어 왔다. 현재 이색성 염료는 컬러 필터부터 열적으로 불안정한 요오드 편광판의 대체 물질에 이르기까지 다양한 용도로 사용되고 있다.

[0030] 이색성 염료는 주변의 다른 분자들, 특히 액정 분자들과 배열하는 정도 (배향도)로 그 성질이 결정될 수 있다. 배향도는 배열에 평행한 빛과 수직인 빛 각각에 대한 광 밀도와 관련이 있다. 이색성 염료는 배향도와 더불어 구조적인 측면에서의 이방성(anisotropy)으로도 성질이 결정될 수 있다. 이색성 염료에서의 이방성은 분자가 빛을 받았을 때 분자 구조의 축마다 서로 다른 광학적 성질을 갖는 것이다. 이색성 염료는 장축 (긴 파장의 빛을 흡수하는 축)과 단축 (짧은 파장의 빛을 흡수하는 축) 각각에서의 흡광도가 다르기 때문에 연신 후에 편광된 빛을 쪼여주면 축마다 다른 흡광도를 보여준다. 보통의 경우 분자의 장축 방향으로 더 긴 파장의 빛을 흡수하는데, 이 축을 LETO (long wave electron transition oscillator)라고 한다.

[0031] 이색성 염료의 대표적인 두 가지 성질인 배향도와 이방성은 서로 연관되어 있다. 배향도(S 값)는 연신 방향과 평행인 축으로부터 이색성 염료의 LETO 축이 얼마나 벗어나 있는지에 따라서도 결정될 수 있다. 벗어난 정도는 필름의 연신 방향과 이루는 각도( $\beta$ )를 의미한다.

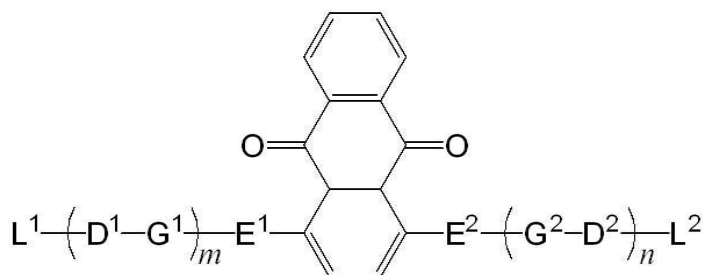
[0032]  $\beta$ 에 따른 S 값을 기준으로 이색성 염료는 L-염료 (longitudinal dyes; positive dichroism,  $S > 0$ ), T-염료 (transverse dyes; negative dichroism,  $S < 0$ ), I-염료 (isotropic dyes;  $S = 0$ ) 세 가지로 구분될 수 있다. S 값은 LETO와 액정 물질의 배향 방향 사이의 각도와 관계가 깊기 때문에, S 값은 염료의 배열 모양과 같이 생각할 수 있다. S 값이 음의 값으로 치우친 경우에는 배향 방향과 더 수직이 되려는 성질이 강하고, 반대로 양의 값으로 치우칠수록 배향 방향과 평행하게 배열되려는 성질이 강하다.

[0033] 이러한 이론을 바탕으로, 세 가지 이색성 염료 중에서 T-염료는 빛을 많이 흡수하는 부분이 다른 액정 물질 배열과 수직으로 높이기 때문에, 본 발명에서 요구되는 역 파장 분산성 액정 물질로 응용될 수 있다.

# [0034] I. 역 파장 분산성 화합물

[0035] 발명의 일 구현 예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 역 파장 분산성 화합물이 제공된다:

[0036] [화학식 1]



[0037]

[0038] 상기 화학식 1에서,

[0039]  $E^1$ ,  $E^2$ ,  $D^1$ , 및  $D^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 2가의 연결기, 또는 3가의 연결기이고;

[0040]  $G^1$  및  $G^2$ 는 각각 독립적으로 탄소수 5 내지 8의 비방향족인 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹, 또는 탄소수 6 내지 20의 방향족 또는 헤테로 방향족 그룹이고;

[0041]  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -Br, -I, -CN, -NC, -NCO, -OCN, -SCN,  $-C(=O)NR^1R^2$ ,  $-C(=O)R^1$ ,  $-O-C(=O)R^1$ ,  $-NH_2$ , -SH,  $-SR^1$ ,  $-SO_3H$ ,  $-SO_3R^1$ , -OH,  $-NO_2$ ,  $-CF_3$ ,  $-SF_3$ , 치환 또는 비치환된 실릴, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 카빌 또는 하이드로카빌, 또는  $-S_p-P$ 로서, 상기 P는 중합성 그룹이고, 상기  $S_p$ 는 스페이서 그룹 또는 단일 결합이며, 상기  $R^1$  및  $R^2$ 는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이고;

[0042] m 및 n은 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수로서; 상기 m 또는 n이 2 이상이면, 둘 이상 반복되는  $-(D^1-G^1)-$  또

는  $-(G^2-D^2)-$  의 각 반복 단위는 서로 동일하거나 다른 것으로 될 수 있다.

- [0043] 상기 화학식 1과 같은 구조를 가지는 화합물은 높은 분극률을 가지는 수직 발색단 (안트라퀴논 그룹)을 액정성 막대형 그룹  $(L^1-(D^1-G^1))_m-$  그룹 및  $-(G^2-D^2)_n-L^2$  그룹과 수직하게 두어 역 파장 분산성을 가질 수 있도록 설계되었다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 필름으로 연신할 경우, 상기 액정성 막대형 그룹은 주변의 액정 분자들이 배열된 방향으로 놓이고, 그와 수직으로 상기 수직 발색단이 놓이게 된다.
- [0044] 상기 수직 발색단으로 도입되는 안트라퀴논 그룹은 광화학적으로 안정하며 구조에서의 대칭축이 LETO와 거의 일치한다. 그에 따라 상기 화학식 1의 화합물을 디자인함에 있어서 메소젠이 수직으로 놓일 수 있는 정도를 쉽게 예측할 수 있다. 그리고, T-염료의 성질이 강할수록 분극률이 높은 부분이 수직에 놓인다고 볼 수 있는데, 안트라퀴논 그룹을 포함하는 T-염료는 그러한 기준을 충족시킬 수 있다.
- [0045] 구체적으로, 상기 화학식 1에서  $E^1$ ,  $E^2$ ,  $D^1$ , 및  $D^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 2가의 연결기, 또는 3가의 연결기일 수 있다.
- [0046] 구체적으로, 상기  $E^1$ ,  $E^2$ ,  $D^1$ , 및  $D^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-CO-$ ,  $-COO-$ ,  $-OCO-$ ,  $-O-COO-$ ,  $-CO-NR^1-$ ,  $-NR^1-CO-$ ,  $-NR^1-CO-NR^1-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-SCH_2-$ ,  $-CH_2S-$ ,  $-CF_2O-$ ,  $-OCF_2-$ ,  $-CF_2S-$ ,  $-SCF_2-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-(CH_2)_3-$ ,  $-(CH_2)_4-$ ,  $-CF_2CH_2-$ ,  $-CF_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-CY^1=CY^2-$ ,  $-CH=N-$ ,  $-N=CH-$ ,  $-N=N-$ ,  $-CH=CR^1-$ ,  $-C=C-$ ,  $-CH=CH-COO-$ ,  $-OCO-CH=CH-$ ,  $-CR^1R^2-$ , 또는 3가의 아민 연결기일 수 있다. 여기서, 상기  $Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로  $-H$ ,  $-F$ ,  $-Cl$ ,  $-CN$ , 또는  $-R^1$ 이고, 상기  $R^1$  및  $R^2$ 는 각각 독립적으로  $-H$  또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이다.
- [0047] 여기서, 상기  $E^1$  및/또는  $E^2$ 가 3가의 연결기인 경우, 상기 화학식 1에서 상기  $E^1$  및/또는  $E^2$ 에는 각각 두 개의 상기  $L^1-(D^1-G^1)_m-$  그룹 및/또는  $-(G^2-D^2)_n-L^2$  그룹이 연결될 수 있다. 그리고, 상기  $D^1$  및/또는  $D^2$ 가 3가의 연결기인 경우, 상기 화학식 1에서 상기  $D^1$  및/또는  $D^2$ 에는 각각 두 개의 상기  $L^1-(D^1-G^1)_m-$  그룹,  $-(G^2-D^2)_n-L^2$  그룹,  $L^1$  그룹, 및/또는  $L^2$  그룹이 연결될 수 있다.
- [0048] 발명의 구현 예에 따르면, 상기  $E^1$  및  $E^2$ 의 위치에 아미드 결합이 도입된 화합물은 최대 흡수 파장이 가시광선 영역에 존재할 수 있고, 진한 색을 나타내는 성질을 가질 수 있다. 비제한적인 예로, 실시예에 따른 화합물 An-NOD-LC-2는 S 값이 좋은 대표적인 T-염료로서, 최대 흡수 파장이 495 nm 정도로 가시광선 영역이지만, 필름으로 코팅하였을 때 두께가 얇기 때문에 이러한 성질은 문제가 되지 않을 수 있다.
- [0049] 한편, 상기 화학식 1에서  $G^1$  및  $G^2$ 는 각각 독립적으로 탄소수 5 내지 8의 비방향족인 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹, 또는 탄소수 6 내지 20의 방향족 또는 헤테로 방향족 그룹이다.
- [0050] 상기  $G^1$  및  $G^2$ 에서 상기 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹은 5원 고리 (예컨대, 사이클로펜탄, 테트라하이드로퓨란, 테트라하이드로티오퍼란, 피롤리딘; 6원 고리 (예컨대, 사이클로헥산, 실리난, 사이클로헥센, 테트라하이드로피란, 테트라하이드로티오피란, 1,3-다이옥산, 1,3-다이티안, 피페리딘); 7원 고리 (예컨대, 사이클로헵탄); 또는 융합된 그룹 (예컨대, 테트라하이드로나프탈렌, 데카하이드로나프탈렌, 인단, 바이사이클로[1.1.1]펜탄-1,3-다이일, 바이사이클로[2.2.2]옥탄-1,4-다이일, 스파이로[3.3]헵탄-2,6-다이일, 옥타하이드로-4,7-메타노-인단-2,5-다이일) 등일 수 있다.
- [0051] 상기  $G^1$  및  $G^2$ 에서 상기 방향족 그룹은 벤젠, 바이페닐렌, 트라이페닐렌, 나프탈렌, 안트라센, 바이나프틸렌, 페난트렌, 파이렌, 다이하이드로파이렌, 크리센, 페릴렌, 테트라센, 펜타센, 벤즈파이렌, 플루오렌, 인텐, 인데노플루오렌, 스파이로바이플루오렌 등일 수 있다. 그리고, 상기  $G^1$  및  $G^2$ 에서 헤테로방향족 그룹은 5원 고리 (예컨

대, 피롤, 피라졸, 이미다졸, 1,2,3-트라이아졸, 1,2,4-트라이아졸, 테트라졸, 퓨란, 티오펜, 셀레노펜, 옥사졸, 아이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 1,2,3-옥사다리아졸, 1,2,4-옥사다리아졸, 1,2,5-옥사다리아졸, 1,3,4-옥사다리아졸, 1,2,3-티아다리아졸, 1,2,4-티아다리아졸, 1,2,5-티아다리아졸, 1,3,4-티아다리아졸); 6원 고리 (예컨대, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 1,3,5-트라이아진, 1,2,4-트라이아진, 1,2,3-트라이아진, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진); 또는 융합된 그룹 (예컨대, 카바졸, 인돌, 아이소인돌, 인돌리진, 인다졸, 벤즈이미다졸, 벤조트리아아졸, 푸린, 나프티이미다졸, 페난트르이미다졸, 피리드이미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트르옥사졸, 페난트르옥사졸, 아이속사졸, 벤조티아졸, 벤조퓨란, 아이소벤조퓨란, 다이벤조퓨란, 퀴놀린, 아이소퀴놀린, 프테리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 벤조아이소퀴놀린, 아크리딘, 페노티아진, 펜옥사진, 벤조피리다진, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 펜아진, 나프티리딘, 아자카바졸, 벤조카볼린, 페난트리딘, 페난트롤린, 티에노[2,3-b]티오펜, 티에노[3,2-b]티오펜, 다이티에노티오펜, 다이티에노피리딘, 아이소벤조티오펜, 다이벤조티오펜, 벤조티아다리아조티오펜) 등일 수 있다.

[0052] 바람직하게는, 상기  $G^1$  및  $G^2$ 는 각각 독립적으로 사이클로헥산 고리, 사이클로헥센 고리, 벤젠 고리, 나프탈렌 고리, 또는 페난트렌 고리일 수 있다. 보다 바람직하게는, 상기  $G^1$  및  $G^2$ 는 트랜스-1,4-사이클로헥실렌, 1,4-페닐렌, 1,5-나프틸렌, 및 2,6-나프틸렌으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

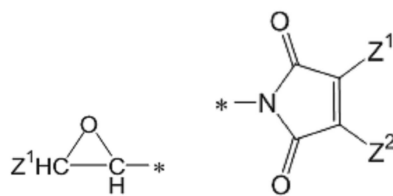
[0053] 그리고, 상기 화학식 1에서  $L^1$  및  $L^2$ 는 메인 사슬의 메소제닉 그룹의 말단으로서, 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -Br, -I, -CN, -NC, -NCO, -OCN, -SCN, -C(=O)NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, -C(=O)R<sup>1</sup>, -O-C(=O)R<sup>1</sup>, -NH<sub>2</sub>, -SH, -SR<sup>1</sup>, -SO<sub>3</sub>H, -SO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -OH, -NO<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -SF<sub>3</sub>, 치환 또는 비치환된 실릴, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 카빌 또는 하이드로 카빌, 또는 -S<sub>p</sub>-P 이다. 여기서, 상기 P는 중합성 그룹이고, 상기 S<sub>p</sub>는 스페이서 그룹 또는 단일 결합이며, 상기 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이다.

[0054] 구체적으로, 상기  $L^1$  및  $L^2$ 는 F, Cl, Br, I, 또는 CN으로 일치환 또는 다치환되거나 치환되지 않은 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 환형 알킬기로부터 선택될 수 있고; 이때 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub> 그룹은 각각 독립적으로 -O-, -S-, -NH-, -NR<sup>1</sup>-, SiR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>-, -CO-, -COO-, -OCO-, -OCO-O-, -S-CO-, -CO-S-, -SO<sub>2</sub>-, -CO-NR<sup>1</sup>-, -NR<sup>1</sup>-CO-, -NR<sup>1</sup>-CO-NR<sup>1</sup>-, -CY<sup>1</sup>=CY<sup>2</sup>-, 또는 -C=C-로 대체될 수 있다. 여기서, 상기 Y<sup>1</sup> 및 Y<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -CN, 또는 -R<sup>1</sup>이고, 상기 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이다.

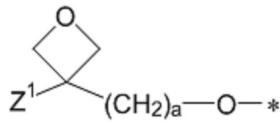
[0055] 또한, 상기  $L^1$  및  $L^2$ 는 탄소수 1 내지 20의 알킬, 탄소수 1 내지 20의 옥사알킬, 탄소수 1 내지 20의 알콕시, 탄소수 2 내지 20의 알켄일, 탄소수 2 내지 20의 알킨일, 탄소수 1 내지 20의 실릴, 탄소수 1 내지 20의 에스터, 탄소수 1 내지 20의 아미노, 및 탄소수 1 내지 20의 플루오로알킬로부터 선택될 수 있다.

[0056] 또한, 상기  $L^1$  및  $L^2$ 의 일 예인 -S<sub>p</sub>-P에서, 상기 P는 중합성기로서, 바람직하게는, CH<sub>2</sub>=CZ<sup>1</sup>-COO-, CH<sub>2</sub>=CZ<sup>1</sup>-CO-, CH<sub>2</sub>=CZ<sup>2</sup>-(O)<sub>a</sub>-, CH<sub>3</sub>-CH=CH-O-, (CH<sub>2</sub>=CH)<sub>2</sub>CH-OCO-, (CH<sub>2</sub>=CH-CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CH-OCO-, (CH<sub>2</sub>=CH)<sub>2</sub>CH-O-, (CH<sub>2</sub>=CH-CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N-, (CH<sub>2</sub>=CH-CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N-CO-, HO-CZ<sup>1</sup>Z<sup>2</sup>-, HS-CZ<sup>1</sup>Z<sup>2</sup>-, HZ<sup>1</sup>N-, HO-CZ<sup>1</sup>Z<sup>2</sup>-NH-, CH<sub>2</sub>=CZ<sup>1</sup>-CO-NH-, CH<sub>2</sub>=CH-(COO)<sub>a</sub>-Phe-(O)<sub>b</sub>-,

CH<sub>2</sub>=CH-(CO)<sub>a</sub>-Phe-(O)<sub>b</sub>-, Phe-CH=CH-, HOOC-, OCN-, Z<sup>1</sup>Z<sup>2</sup>Z<sup>3</sup>Si-,



, 또는

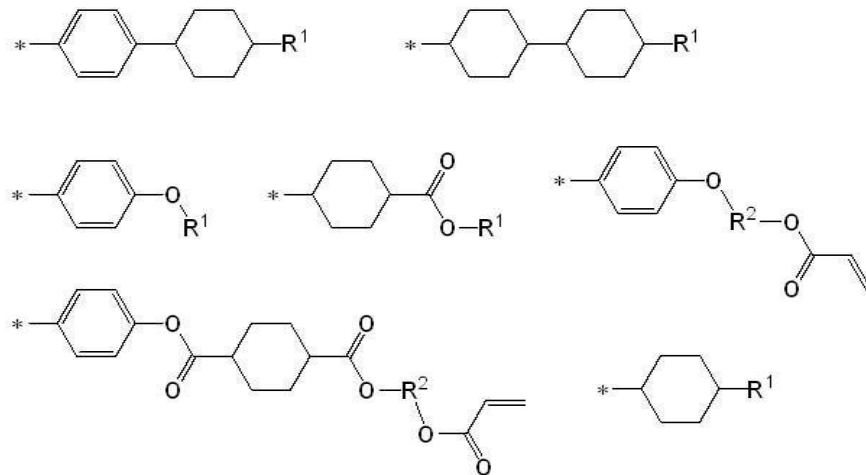


일 수 있다. 여기서, 상기  $Z^1$  내지  $Z^3$ 은 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -CN, -CF<sub>3</sub>, 페닐, 또는 탄소수 1 내지 5의 알킬이고, 상기 Phe는 -F, -Cl, -Br, -I, -CN, -NC, -NCO, -OCN, -SCN, -C(=O)NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, -C(=O)R<sup>1</sup>, -NH<sup>2</sup>, -SH, -SR<sup>1</sup>, -SO<sub>3</sub>H, -SO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -OH, -NO<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, 또는 -SF<sub>3</sub>에 의해 치환 또는 비치환된 1,4-페닐렌이고, 상기 a 및 b는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

[0057] 그리고, 상기 L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>의 일 예인 -S<sub>p</sub>-P에서, 상기 S<sub>p</sub>는 -S<sub>p</sub>-P가 -X'-S<sub>p</sub>'-P가 되도록 하는 화학식 -X'-S<sub>p</sub>'로부터 선택된다. 상기 S<sub>p</sub>'는 -F, -Cl, -Br, -I, 또는 -CN으로 일치환 또는 다중치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬렌이고, 상기 알킬렌에서 하나 이상의 -CH<sub>2</sub>- 그룹은 -O-, -S-, -NH-, -NR<sup>1</sup>-, SiR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>-, -CO-, -COO-, -OCO-, -OCO-O-, -S-CO-, -CO-S-, -NR<sup>1</sup>-CO-O-, -O-CO-NR<sup>1</sup>-, -NR<sup>1</sup>-CO-NR<sup>1</sup>-, -CH=CH-, 또는 -C=C-로 대체될 수 있다. 그리고, 상기 X'는 -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -O-COO-, -CO-NR<sup>1</sup>-, -NR<sup>1</sup>-CO-, -NR<sup>1</sup>-CO-NR<sup>1</sup>-, -OCH<sub>2</sub>-, -CH<sub>2</sub>O-, -SCH<sub>2</sub>-, -CH<sub>2</sub>S-, -OCF<sub>2</sub>-, -CF<sub>2</sub>O-, -SCF<sub>2</sub>-, -SF<sub>2</sub>O-, -CF<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-, -CF<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>-, -CH=N-, -N=CH-, -N=N-, -CH=CR<sup>1</sup>-, -CY<sup>1</sup>=CY<sup>2</sup>-, -C=C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, 또는 단일 결합이다. 여기서, 상기 Y<sup>1</sup> 및 Y<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 -H, -F, -Cl, -CN, 또는 -R<sup>1</sup>이고, 상기 R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 -H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이다.

[0058] 그리고, 상기 화학식 1에서 m 및 n은 서로 같거나 다른 값을 가질 수 있으며, 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수이다. 여기서, 상기 m 또는 n이 2 이상이면, 둘 이상 반복되는 -(D<sup>1</sup>-G<sup>1</sup>)- 또는 -(G<sup>2</sup>-D<sup>2</sup>)-의 각 반복 단위는 서로 동일하거나 다른 것으로 될 수 있다. 예를 들어, 상기 m이 2인 경우, -(D<sup>1</sup>-G<sup>1</sup>)-(D<sup>1</sup>-G<sup>1</sup>)-의 각 반복 단위에 포함되는 D<sup>1</sup> 또는 G<sup>1</sup>은 각각 서로 동일하거나 다른 것으로 될 수 있다.

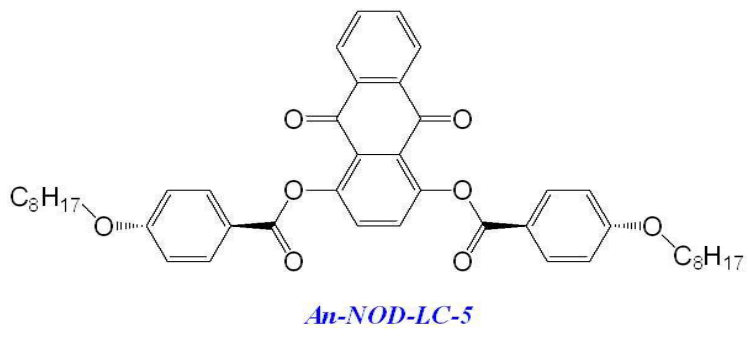
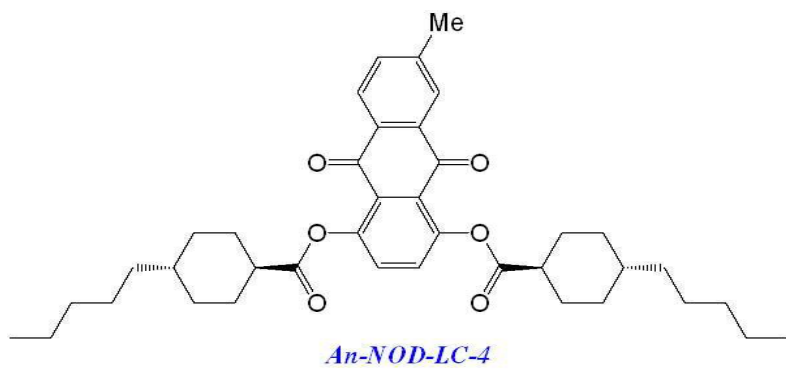
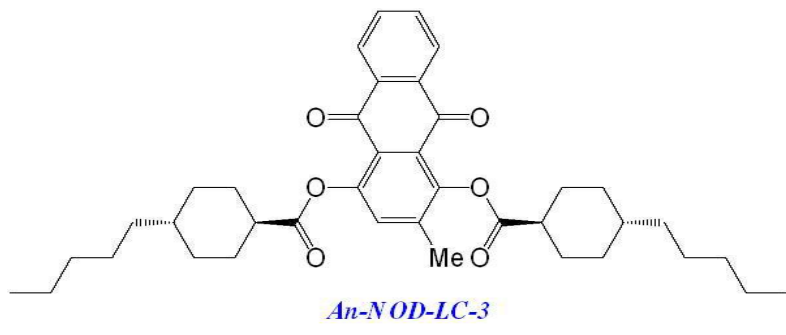
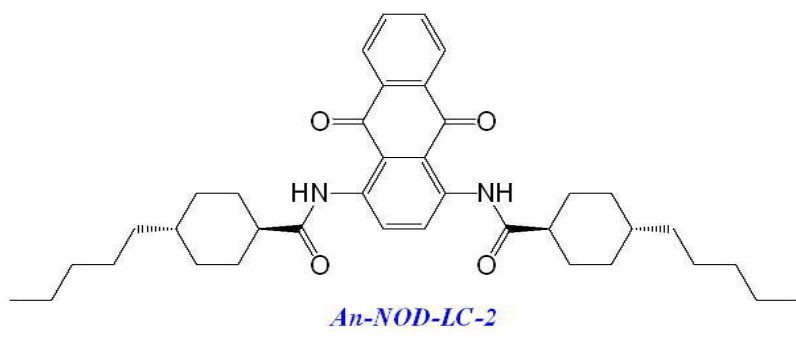
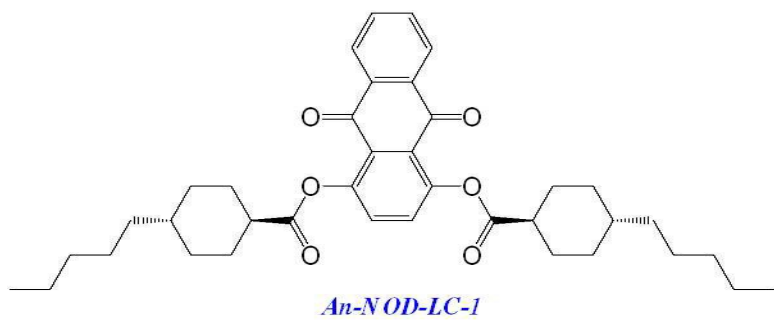
[0059] 구체적으로, 상기 화학식 1에서 액정성 막대형 그룹 (L<sup>1</sup>-(D<sup>1</sup>-G<sup>1</sup>)<sub>m</sub>- 그룹 및 -(G<sup>2</sup>-D<sup>2</sup>)<sub>n</sub>-L<sup>2</sup> 그룹)은 각각 독립적으로 다음과 같은 구조를 가질 수 있다.

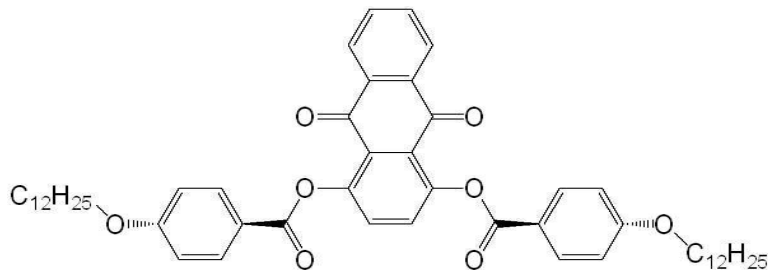


[0060]

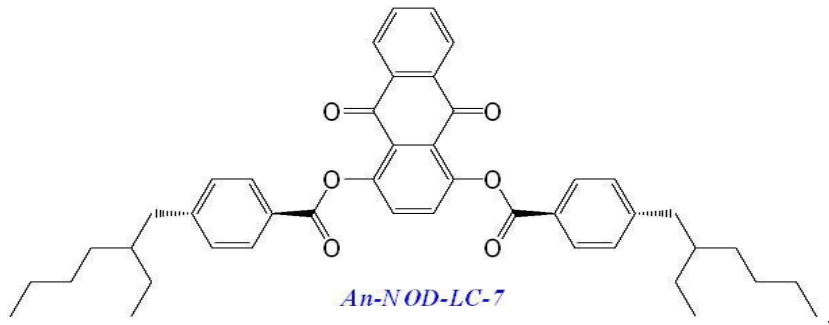
[0061] 상기 예시에서, R<sup>1</sup>은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 12의 알킬이고, R<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 12의 알킬렌이다.

[0062] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물로는 하기 화합물 An-NOD-LC-1 내지 An-NOD-LC-8을 예로 들 수 있다. 다만, 상기 화학식 1의 화합물이 하기 예들만으로 한정되는 것은 아니며, 전술한 범위에서 다양한 조합으로 구현될 수 있다.

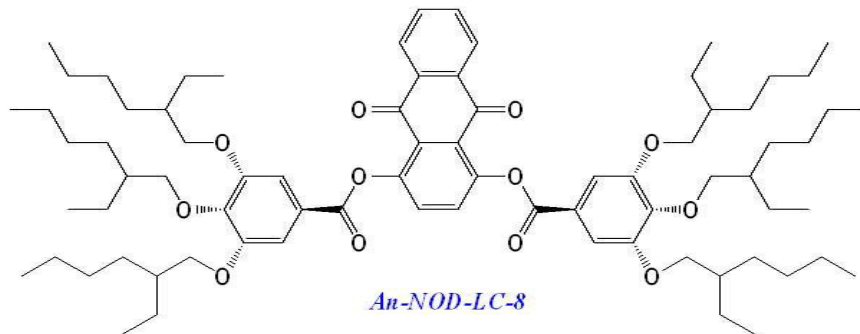




*An-NOD-LC-6*



*An-NOD-LC-7*



*An-NOD-LC-8*

그리고, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 공지의 반응들 (예를 들어, *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide coupling mechanism)을 응용하여 합성될 수 있으며, 보다 자세한 합성 방법은 실시예를 통해 설명한다.

## II. 역 파장 분산성 조성물

한편, 발명의 다른 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 역 파장 분산성 조성물이 제공된다.

상기 역 파장 분산성 조성물은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 중합 개시제와 함께 용제에 용해시킨 조성물일 수 있다. 그리고, 상기 조성물에는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 단독 또는 2종 이상의 조합으로 포함될 수 있다.

여기서, 상기 중합 개시제로는 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상적인 라디칼 중합 개시제가 사용될 수 있다. 그리고, 상기 중합 개시제의 함량은 상기 역 파장 분산성 화합물의 중합 반응을 효율적으로 이끌어낼 수 있는 통상적인 범위에서 결정될 수 있다. 발명의 구현 예에 따르면, 상기 중합 개시제는 조성물 전체 중량을 기준으로 10 중량% 이하, 바람직하게는 0.5 내지 8 중량%로 포함될 수 있다.

그리고, 상기 용제는 벤젠, 톨루엔, 자일렌, 메시틸렌(mesitylene), *n*-부틸벤젠, 디에틸벤젠, 테트라린(tetralin), 메톡시벤젠, 1,2-디메톡시벤젠, 에틸렌글리콜디메틸에테르, 디에틸렌글리콜디메틸에테르, 아세톤, 메틸에틸케톤, 메틸이소부틸케톤, 시클로헥산, 시클로헥사논, 아세트산에틸, 락트산메틸, 락트산에틸, 에틸렌글리콜모노메틸에테르아세테이트, 프로필렌글리콜모노메틸에테르아세테이트, 프로필렌글리콜모노에틸에테르아세테이트,  $\gamma$ -부티로락톤, 2-피롤리돈, *N*-메틸-2-피롤리돈, 디메틸포름아미드, 클로로포름, 디클로로메탄, 사염화

탄소, 디클로로에탄, 트리클로로에틸렌, 테트라클로로에틸렌, 클로로벤젠, t-부틸알코올, 디아세톤알코올, 글리세린, 모노아세틴, 에틸렌글리콜, 트리에틸렌글리콜, 헥실렌글리콜, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 에틸셀로솔브, 부틸셀로솔브, 또는 이들의 혼합물일 수 있다. 이들 용제 중에서도 비점이 60 내지 250 °C인 것이 조성물의 도포시 균일한 막 두께를 형성하는데 유리하고, 용매의 잔류나 배향성의 저하를 최소화하는데 유리하다.

[0077] 그리고, 상기 역 파장 분산성 조성물에는, 필요에 따라 선택적으로, 크산톤(xanthone), 티오크산톤, 클로로티오크산톤, 페노티아진, 안트라센, 디페닐안트라센 등의 증감제가 더욱 포함될 수 있다.

[0078] 또한, 상기 역 파장 분산성 조성물에는, 필요에 따라 선택적으로, 4급 암모늄염, 알킬아민옥사이드, 폴리아민 유도체, 폴리옥시에틸렌-폴리옥시프로필렌 축합물, 라우릴황산나트륨, 라우릴황산암모늄, 알킬치환 방향족 술폰산염, 알킬인산염, 퍼플루오로알킬술폰산염 등의 계면활성제; 하이드로퀴논, 하이드로퀴논모노알킬에테르류, 피로갈롤류, 티오페놀류, 2-나프틸아민류, 2-하이드록시나프탈렌류 등의 보존 안정제; 2,6-디-t-부틸-p-크레졸, 트리페닐포스파이트 등의 산화 방지제; 살리실산 에스테르계 화합물, 벤조페논계 화합물, 벤조트리아졸계 화합물, 시아노아크릴레이트계 화합물, 니켈착염계 화합물 등의 자외선 흡수제가 더욱 포함될 수 있다.

[0079] 그리고, 상기 역 파장 분산성 조성물에는, 필요에 따라 선택적으로, 광학 이방성을 조절하거나 중합막의 강도를 향상시키기 위한 미립자화물이 더욱 포함될 수 있다. 상기 미립자화물은 헥토라이트, 몬모틸로나이트, 카올리나이트, ZnO, TiO<sub>2</sub>, CeO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZrO<sub>2</sub>, MgF<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub>, SrCO<sub>3</sub>, Ba(OH)<sub>2</sub>, Ca(OH)<sub>2</sub>, Ga(OH)<sub>3</sub>, Al(OH)<sub>3</sub>, Mg(OH)<sub>2</sub>, Zr(OH)<sub>4</sub> 등의 무기 미립자화물; 카본 나노튜브, 풀러렌, 덴드리머, 폴리비닐알코올, 폴리메타크릴레이트, 폴리이미드 등의 유기 미립자화물일 수 있다.

[0080] 그리고, 상기 역 파장 분산성 조성물에는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 이외에, 임의의 액정 화합물이 더욱 포함될 수 있다. 상기 임의의 액정 화합물은 중합성을 갖거나 갖지 않는 것일 수 있다. 여기서, 상기 임의의 액정 화합물로는 에틸렌성 불포화 결합을 가지는 액정 화합물, 광학 활성기를 가지는 화합물, 봉상 액정 화합물 등을 예로 들 수 있다. 그리고, 상기 임의의 액정 화합물은 그들의 구조에 따라 적절한 양으로 혼합될 수 있는데, 바람직하게는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 전체 화합물 중량의 20 중량% 이상, 또는 50 중량% 이상으로 포함되도록 하는 것이, 전술한 목적의 달성 측면에서 유리할 수 있다.

### [0081] III. 광학 이방체

[0082] 한편, 발명의 또 다른 구현 예에 따르면, 상기 역 파장 분산성 조성물을 사용하여 형성된 광학 이방체가 제공된다.

[0083] 특히, 상기 광학 이방체는 전술한 역 파장 분산성 화합물을 사용하여 형성됨에 따라, 하기 식 I을 만족하는 역 파장 분산성을 나타낼 수 있다:

[0084] (식 I)

[0085]  $\Delta n(450\text{nm})/\Delta n(550\text{nm}) < 1.0$

[0086] 상기 식 I에서,  $\Delta n(\lambda)$ 는 파장  $\lambda$ 에서의 비복굴절율을 의미한다.

[0087] 상기 광학 이방체는 전술한 역 파장 분산성 조성물을 지지 기판에 도포하고, 상기 역 파장 분산성 조성물 중의 액정 화합물을 배향시킨 상태로 탈용매하고, 이어서 에너지선을 조사하여 중합함으로써 얻을 수 있다.

[0088] 여기서, 상기 지지 기판은 특별히 한정되지 않으나, 바람직한 예로는 유리판, 폴리메틸렌테레프탈레이트 필름, 폴리이미드 필름, 폴리아미드 필름, 폴리메타크릴산메틸 필름, 폴리스티렌 필름, 폴리염화비닐 필름, 폴리테트라플루오로에틸렌 필름, 셀룰로오스계 필름, 실리콘 필름 등이 이용될 수 있다. 그리고, 상기 지지 기판상에 폴리이미드 배향막 또는 폴리비닐알코올 배향막을 시행한 것이 바람직하게 사용될 수 있다.

[0089] 상기 지지 기판에 조성물을 도포하는 방법으로는 공지의 방법이 이용될 수 있으며, 예를 들면 롤 코팅법, 스펀 코팅법, 바 코팅법, 딥 코팅법, 스프레이 코팅법 등이 적용될 수 있다. 그리고, 상기 조성물에 의해 형성되는 막의 두께는 용도에 따라 달라질 수 있는데, 바람직하게는 0.01 내지 100  $\mu\text{m}$ 의 범위에서 선택될 수 있다.

[0090] 한편, 상기 액정 화합물을 배향시키는 방법으로는, 비제한적인 예로, 지지 기판상에 사전 배향 처리를 실시하는

방법을 들 수 있다. 배향 처리를 실시하는 방법으로는, 각종 폴리이미드계 배향막 또는 폴리비닐알코올계 배향막을 포함하는 액정 배향층을 지지 기판상에 형성하고, 러빙 등의 처리를 행하는 방법을 들 수 있다. 또한, 지지 기판상의 조성물에 자장 또는 전장 등을 인가하는 방법 등도 들 수 있다.

[0091] 그리고, 상기 역 과장 분산성 조성물을 중합시키는 방법은, 광, 열 또는 전자파를 이용하는 공지의 방법일 수 있다.

[0092] 그리고, 상기 광학 이방체는 액정 디스플레이 또는 OLED 방식의 디스플레이의 위상차 필름, 편광 소자, 반사 방지 필름, 선택 방사막, 시야각 보상막 등에 사용될 수 있다. 특히, 상기 조성물을 사용하여 형성된 광학 이방체를 OLED 방식의 디스플레이에 적용할 경우, 외부광에 의한 간섭이 최소화될 수 있어 보다 완벽한 검정색의 구현이 가능하다.

### 발명의 효과

[0093] 본 발명에 따른 역 과장 분산성 화합물은 향상된 배향성을 가져, 광학적 물성이 우수한 광학 이방체의 제공을 가능케 한다.

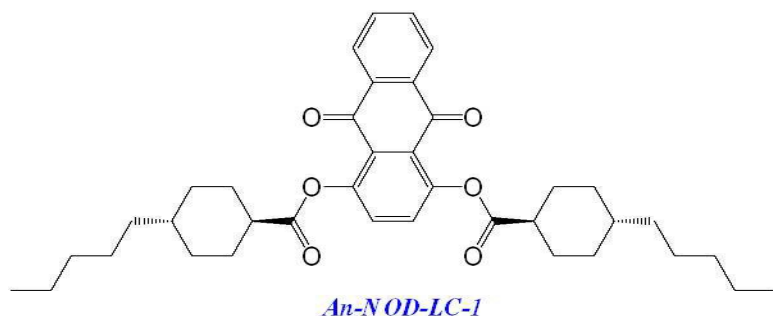
### 도면의 간단한 설명

[0094] 도 1 내지 도 8은 각각 본 발명의 구현 예들에 따른 역 과장 분산성 화합물의 합성에 관한 scheme을 나타낸 것이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0095] 이하, 구체적인 실시예들을 통해, 발명의 작용 및 효과를 보다 상세히 서술하기로 한다. 다만, 이러한 실시예들은 발명의 예시로 제시된 것에 불과하며, 이에 의해 발명의 권리범위가 정해지는 것은 아니다.

#### [0096] 실시예 1



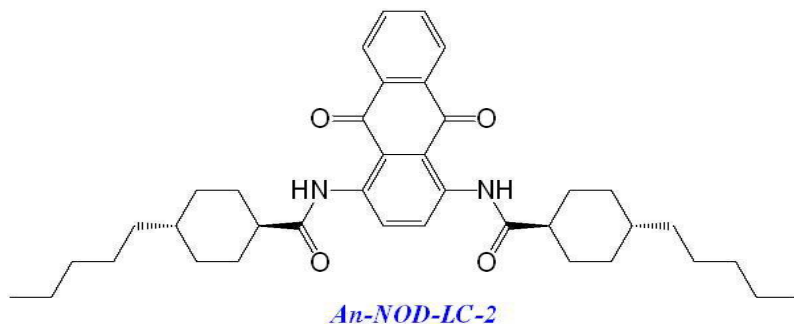
[0097]

[0098] 도 1에 나타난 scheme에 따라 다음과 같은 방법으로 상기 화합물 *An-NOD-LC-1*을 합성하였다.

[0099] Dry  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (10 ml)에 1,4-dihydroxyanthraquinone (2.00 g, 8.33 mmol), *trans*-4-pentylcyclohexanecarboxylic acid (4.13 g, 20.8 mmol), 및 4-(dimethylamino)pyridinium/tosylate (DMAP-TsOH, 736 mg, 2.50 mmol)가 용해된 용액을 준비하였다. 상기 용액에, dry  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (9 ml)에 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide (DCC, 4.29 g, 20.8 mmol)가 용해된 용액을 적가하였다. 반응 혼합물은 실온 하에서 밤새 교반되었다. 그 후 상기 반응 혼합물을 여과하였고, 여과액을 농축하였다. 농축물은 테트라하이드로퓨란(THF)에 용해되었고 메틸알코올에 침전되어 얻은 노란색의 고체 (화합물 *An-NOD-LC-1*; 4.32 g, 수율 86%; m.p. 151.8°C, 172.4°C)로 얻어졌다.

[0100]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 8.16 (dd, 2H,  $J_1 = 6.8$  Hz,  $J_2 = 4$  Hz), 7.73 (dd, 2H,  $J_1 = 5.6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.37 (s, 2H), 2.70 (tt, 2H,  $J_1 = 10.8$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 2.33 (bt dt, 4H,  $J_1 = 10.8$  Hz,  $J_2 = 4.8$  Hz), 1.93 (br dt, 4H,  $J_1 = 10.8$  Hz,  $J_2 = 4.8$  Hz), 1.66 (dq, 4H,  $J_1 = 13.2$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 1.38–1.21 (m, 18H), 1.05 (dq, 4H,  $J_1 = 13.2$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 0.90 (t, 6H,  $J = 7.2$  Hz).

[0101] 실시예 2



[0102]

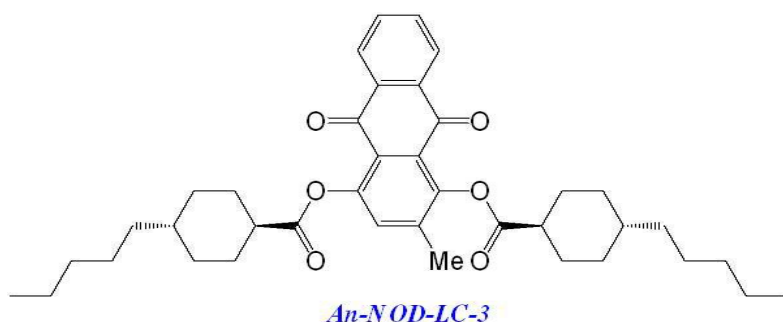
[0103] 화학식 1에서 E<sup>1</sup> 및 E<sup>2</sup>의 위치에 아마이드 결합이 도입된 화합물 *An-NOD-LC-2*를 합성함에 있어서, 아민의 비공유 전자쌍이 방향족 고리의 파이 전자와 비편재화되려는 성질이 있어 반응성이 작아지는 것으로 나타났다. 이러한 이유로, 실시예 1과 같은 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide coupling mechanism 으로는 상기 화합물 *An-NOD-LC-2*를 합성하기 어려웠다. 그에 따라 도 2에 나타낸 scheme에 따라 상기 화합물 *An-NOD-LC-2*를 합성하였다.

[0104] Dry CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 *trans*-4-pentylcyclohexane-carboxylic acid (485 mg, 2.45 mmol)가 용해된 용액을 준비하였다. 상기 용액에 oxalyl chloride (525 mg, 4.14 mmol)를 적가하였다. 여기에 3 방울의 *N,N'*-dimethylformamide를 첨가한 후, 상온 하에서 반응 혼합물을 2 시간 동안 교반하였다. 반응물을 농축하여 *trans*-4-pentylcyclohexanecarbonyl chloride (화합물 *An-5*)를 얻었고, 추가적인 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

[0105] Dry CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (10 ml)에 1,4-diaminoanthraquinone (2.00 g, 8.39 mmol), *trans*-4-pentylcyclohexanecarbonyl chloride 및 triethylamine (5.06 g, 50.0 mmol)이 용해된 용액을 상온 하에서 5 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 농축하였고 ether로 세척하였다. 침전물은 테트라하이드로퓨란에 용해되었고 메틸알코올에 침전되어 짙은 보라색의 고체 (화합물 *An-NOD-LC-2*, 2.56 g, 수율 51%)로 얻어졌다.

[0106] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 표준물질 TMS) δ(ppm): 12.55 (s, 2H), 9.16 (s, 2H), 8.27 (dd, 2H, *J*<sub>1</sub> = 5.6 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.2 Hz), 7.81 (dd, 2H, *J*<sub>1</sub> = 6 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.2 Hz), 2.37 (tt, 2H, *J*<sub>1</sub> = 12.4 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.2 Hz), 2.14 (br d, 4H, *J* = 11.6 Hz), 1.93 (br d, 4H, *J* = 11.6 Hz), 1.62 (dq, 4H, *J*<sub>1</sub> = 13.2 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.2 Hz), 1.39-1.2 (m, 18H), 1.05 (dq, 4H, *J*<sub>1</sub> = 13.2 Hz, *J*<sub>2</sub> = 2.14 Hz), 0.90 (t, 6H, *J* = 6 Hz).

[0107] 실시예 3



[0108]

[0109] 도 3에 나타낸 scheme에 따라 다음과 같은 방법으로 상기 화합물 *An-NOD-LC-3*을 합성하였다.

[0110] [1] 화합물 *An-8* (2-methyl-1,4-dihydroxyanthraquinone)의 합성

[0111] : 건조된 니트로벤젠(nitrobenzene)에서 AlCl<sub>3</sub> (2.67 g, 20 mmol)와 메틸 하이드로퀴논 (methyl hydroquinone, 1.24 g, 10 mmol)의 혼합물을 만들고, 그 혼합물에 *o*-phthaloyl dichloride (2.30 g, 10 mmol)을 천천히 적가하였다. 반응 혼합물은 100 °C에서 30분간 교반되었다. 그 혼합물을 상온으로 식힌 후 0.2 N 옥살산 수용액을 적가하여 반응을 중단시켰다. 얻어진 혼합물은 디에틸 에테르로 추출하였다. 모아진 유기층들은 MgSO<sub>4</sub>로 건조

되었고, 거른 후 여액을 농축시켜 빨간색 고체 (화합물 *An-8*, 673 mg, 26%)를 얻었다.

[0112]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 13.37 (s, 1H), 12.98 (s, 1H), 8.36 (m, 2H), 7.83 (m, 2H), 7.18 (s, 1H), 2.39 (s, 3H).

[0113] [2] 화합물 *An-NOD-LC-3*의 합성

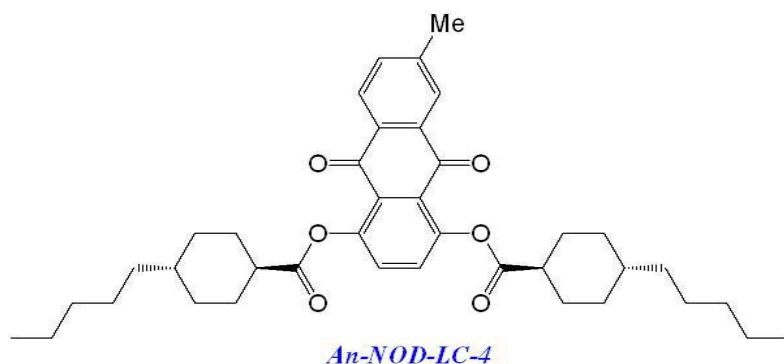
[0114] : 화합물 *An-8* (1.02 g, 4.0 mmol), *trans*-4-pentylcyclohexane-carboxylic acid (화합물 *An-2*, 1.82 g, 9.20 mmol), 및 4-(dimethylamino)pyridinium/tosylate (DMAP-TsOH, 353 mg, 1.20 mmol)를 건조된  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 녹였다. 건조된  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 녹인 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide (DCC, 1.90 g, 9.20 mmol) 용액을 앞의 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물은 밤새 상온에서 교반되었다. 생성된 *N,N'*-dicyclohexyl urea를 여과하여 제거하였고, 여과액을 농축시켰다. 얻어진 잔여물은 THF에 녹인 후 메탄올에 떨어뜨려 침전을 수행하였다. 얻어진 침전물을 거른 후 말려 노란색 고체 (화합물 *An-NOD-LC-3*, 1.07 g, 44%, m.p. 178.9°C, 179.7°C)를 얻었다.

[0115]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 8.14 (dd, 2H,  $J_1 = 5.6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.71 (dd, 2H,  $J_1 = 6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.25 (s, 2H), 2.75 (t, 1H,  $J_1 = 12.4$  Hz,  $J_2 = 3.6$  Hz), 2.69 (tt, 1H,  $J_1 = 12$  Hz,  $J_2 = 3.6$  Hz), 2.33 (m, 4H), 2.29 (br t, 3H,  $J = 9.2$  Hz), 1.93 (br d, 4H,  $J = 13.2$  Hz), 1.85-1.61 (m, 4H), 1.35-1.00 (m, 4H), 0.90 (t, 6H,  $J = 6.8$  Hz);

[0116]  $^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 181.89, 181.43, 174.45, 173.86, 147.87, 146.94, 140.87, 133.75, 133.52, 133.44, 132.02, 131.83, 126.82, 126.72, 126.01, 124.34, 43.69, 43.57, 37.21, 37.00, 32.38, 32.16, 29.32, 28.83, 26.56, 22.70, 16.79, 16.71, 14.10;

[0117] IR (ZnSe)  $\text{cm}^{-1}$ : 2956, 2917, 2843, 1757, 1674, 1592, 1449, 1327, 1272, 1256, 1211, 1165, 1128, 1089, 1031, 985, 927, 899, 817, 796, 722.

#### [0118] 실시예 4



[0119]

[0120] 도 4에 나타낸 scheme에 따라 다음과 같은 방법으로 상기 화합물 *An-NOD-LC-4*를 합성하였다.

[0121] [1] 화합물 *An-11* (6-methyl-1,4-dihydroxyanthraquinone)의 합성

[0122] : 뜨거운  $\text{AlCl}_3$  (3.71 g, 27.8 mmol)와  $\text{NaCl}$  (725 mg, 12.4 mmol) 혼합물에 4-methylphthalic anhydride (50 mg, 3.08 mmol), hydroquinone (374 mg, 3.40 mmol), 그리고 또 다른  $\text{AlCl}_3$  (1.50 g, 11.2 mmol)의 혼합물을 한번에 첨가하였다. 이 혼합물은 220 °C까지 가열되었다. 상온으로 식힌 후, 30 mL의 얼음물에 부었고,  $\text{HCl}$  수용액으로 산성화시켰다. 이 반응물은 에틸 아세테이트로 추출되었다. 모아진 유기층은  $\text{MgSO}_4$ 로 건조되었고, 여과되었다. 얻어진 여과액을 농축하여 빨간색 고체 (화합물 *An-11*, 124 mg, 16%)를 얻었다.

[0123]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 12.96 (s, 1H), 12.92 (s, 1H), 8.25 (d, 1H,  $J = 8$  Hz), 8.15 (s, 1H), 7.67 (d, 1H,  $J = 8$  Hz), 7.31 (s, 2H), 2.56 (s, 3H).

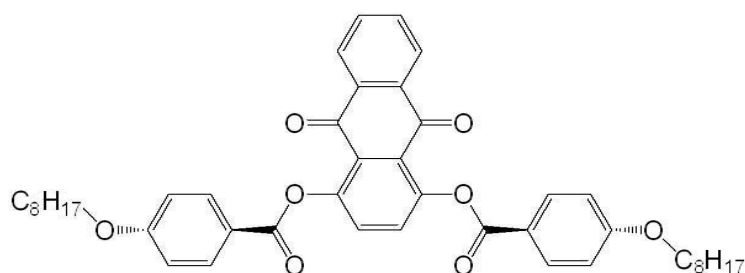
[0124] [2] 화합물 *An-NOD-LC-4*의 합성

[0125] : 화합물 *An-11* (124 mg, 0.49 mmol), *trans*-4-pentylcyclohexane-carboxylic acid (화합물 *An-2*, 222 mg, 1.12 mmol), 및 4-(dimethylamino)pyridinium/tosylate (DMAP-TsOH, 44 mg, 0.15 mmol)를 건조된 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 녹였다. 건조된 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 녹인 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide (DCC, 231 mg, 1.12 mmol) 용액을 앞의 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물은 밤새 상온에서 교반되었다. 생성된 *N,N'*-dicyclohexyl urea를 여과하여 제거하였고, 여과액을 농축시켰다. 얻어진 잔여물은 THF에 녹인 후 메탄올에 떨어뜨려 침전을 수행하였다. 얻어진 침전물을 거른 후 말려 노란색 고체 (화합물 *An-NOD-LC-4*, 116 mg, 39%, m.p. 115.8°C, 158.3°C)를 얻었다.

[0126] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 표준물질 TMS) δ (ppm): 8.05 (d, 1H, 8 Hz), 7.94 (s, 1H), 7.52 (dd, 1H, *J*<sub>1</sub> = 6.8 Hz, *J*<sub>2</sub> = 1.2 Hz), 7.34 (s, 1H), 2.69 (tt, 2H, *J*<sub>1</sub> = 12 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.2 Hz), 2.49 (s, 3H), 2.32 (br d, 4H, *J* = 11.2 Hz), 1.93 (br d, 4H, *J* = 12.8 Hz), 1.65 (br q, 4H, *J* = 13.2 Hz), 1.38-1.12 (m, 18H), 1.05 (qd, 4H, *J*<sub>1</sub> = 13.2 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.6 Hz), 0.90 (t, 6H, *J* = 6.8 Hz);

[0127] IR (ZnSe) cm<sup>-1</sup>: 2950, 2971, 2846, 1754, 1674, 1604, 1577, 1455, 1406, 1317, 1266, 1156, 1116, 1089, 973, 924, 850, 744.

## [0128] 실시예 5



*An-NOD-LC-5*

[0129]

[0130] 도 5에 나타낸 scheme에 따라 다음과 같은 방법으로 상기 화합물 *An-NOD-LC-5*를 합성하였다.

[0131] [1] 화합물 *An-12* (*p*-octyloxybenzoic acid)의 합성

[0132] : 벤조산 (10.00 g, 72.4 mmol)과 1-bromo-*n*-octane (33.6 g, 173.9 mmol)을 150 mL의 에탄올에 녹인 후, KOH (8.50 g, 166.5 mmol)을 천천히 적가하였다. 이 반응 혼합물은 24 시간 동안 환류되었다. 이 혼합물을 농축시켜 얻은 고체를 물에 녹였다. 이 용액은 10% 염산 수용액으로 산성화되었다. 얻어진 흰색 침전물을 거른 후 에탄올에서 재결정하여 하얀색 고체 (화합물 *An-12*, 7.37 g, 44%)를 얻었다.

[0133] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 표준물질 TMS) δ (ppm): 8.05 (d, 2H, *J* = 14.8 Hz), 6.93 (d, 2H, *J* = 14.4 Hz), 4.02 (t, 2H, *J* = 6.4 Hz), 1.81 (qu, 2H, *J* = 6.8 Hz), 1.50-1.40 (m, 2H), 1.40-1.25 (m, 8H), 0.89 (t, 3H, *J* = 6.8 Hz).

[0134] [2] 화합물 *An-NOD-LC-5*의 합성

[0135] : 1,4-Dihydroanthraquinone (2.00 g, 8.33 mmol), 화합물 *An-12* (5.21 g, 20.8 mmol), 및 4-(dimethylamino)pyridinium/tosylate (DMAP-TsOH, 736 mg, 2.50 mmol)를 건조된 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 녹였다. 건조된 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 녹인 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide (DCC, 3.94 g, 20.8 mmol) 용액을 앞의 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물은 밤새 상온에서 교반되었다. 생성된 *N,N'*-dicyclohexyl urea를 여과하여 제거하였고, 여과액을 농축시켰다. 얻어진 잔여물은 THF에 녹인 후 메탄올에 떨어뜨려 침전을 수행하였다. 얻어진 침전물을 거른 후 말려 노란색 고체 (화합물 *An-NOD-LC-5*, 2.79 g, 47%, m.p. 207.7°C, 212.4°C)를 얻었다.

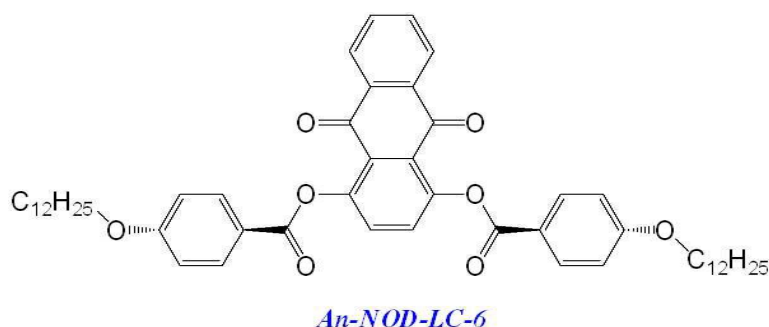
[0136] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 표준물질 TMS) δ (ppm): 8.25 (d, 4H, *J* = 8.8 Hz), 8.12 (dd, 2H, *J*<sub>1</sub> = 6 Hz, *J*<sub>2</sub> =

3.2 Hz), 7.69 (dd, 2H,  $J_1 = 6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.59 (s, 2H), 7.04 (d, 4H,  $J = 8.8$  Hz), 4.08 (t, 4H,  $J = 6.4$  Hz), 1.85 (qu, 4H,  $J = 7.2$  Hz), 1.50 (br qu, 4H,  $J = 7.2$  Hz), 1.45-1.16 (m, 16H), 0.91 (t, 6H,  $J = 7.2$  Hz);

[0137]  $^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 181.60, 164.91, 163.78, 148.67, 133.99, 133.45, 132.73, 131.32, 127.02, 126.57, 121.44, 114.51, 68.41, 31.92, 29.44, 29.35, 29.20, 26.10, 22.78, 14.24;

[0138] IR (ZnSe)  $\text{cm}^{-1}$ : 2919, 2839, 1744, 1673, 1601, 1584, 1512, 1468, 1317, 1250, 1219, 1170, 1076, 1041, 894, 836, 756, 716, 685.

[0139] **실시예 6**



[0140]

[0141] 도 6에 나타난 scheme에 따라 다음과 같은 방법으로 상기 화합물 An-NOD-LC-6을 합성하였다.

[0142] [1] 화합물 An-13 (*p*-dodecyloxybenzoic acid)의 합성

[0143] : 벤조산 (10.00 g, 72.4 mmol)과 1-bromo-*n*-dodecane (43.3 g, 173.9 mmol)을 150 mL의 에탄올에 녹인 후, KOH (8.50 g, 166.5 mmol)을 천천히 적가하였다. 이 반응 혼합물은 24 시간 동안 환류되었다. 이 혼합물을 농축시켜 얻은 고체를 물에 녹였다. 이 용액은 10% 염산 수용액으로 산성화되었다. 얻어진 흰색 침전물을 거른 후 에탄올에서 재결정하여 하얀색 고체 (화합물 An-13, 13.84 g, 62%)를 얻었다.

[0144]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 8.05 (d, 2H,  $J = 8.8$  Hz), 6.93 (d, 2H,  $J = 8.8$  Hz), 4.02 (t, 2H,  $J = 6.4$  Hz), 1.81 (qu, 2H,  $J = 6.8$  Hz), 1.50-1.40 (m, 2H), 1.40-1.25 (m, 16H), 0.88 (t, 3H,  $J = 6.4$  Hz).

[0145] [2] 화합물 An-NOD-LC-6의 합성

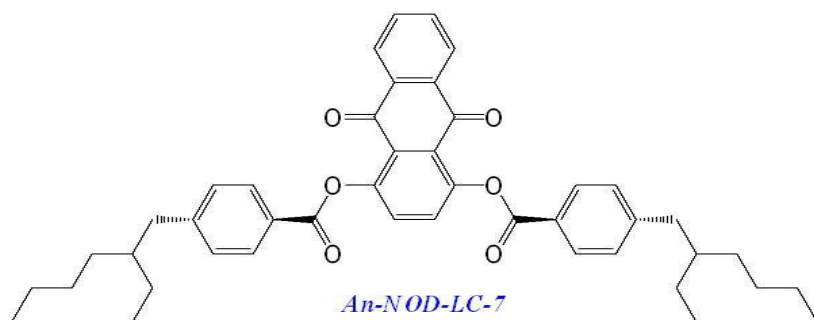
[0146] : 1,4-Dihydroanthraquinone (2.00 g, 8.33 mmol), 화합물 An-13 (5.87 g, 19.1 mmol), 및 4-(dimethylamino)pyridinium/tosylate (DMAP-TsOH, 736 mg, 2.50 mmol)를 건조된  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 녹였다. 건조된  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 녹인 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide (DCC, 3.94 g, 19.1 mmol) 용액을 앞의 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물은 밤새 상온에서 교반되었다. 생성된 *N,N'*-dicyclohexyl urea를 여과하여 제거하였고, 여과액을 농축시켰다. 얻어진 잔여물은 THF에 녹인 후 메탄올에 떨어뜨려 침전을 수행하였다. 얻어진 침전물을 거른 후 말려 노란색 고체 (화합물 An-NOD-LC-6, 3.80 g, 56%, m.p. 187.4°C, 207.2°C)를 얻었다.

[0147]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 8.25 (d, 4H,  $J = 8.8$  Hz), 8.12 (dd, 2H,  $J_1 = 6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.69 (dd, 2H,  $J_1 = 6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.52 (s, 2H), 7.04 (d, 4H,  $J = 8.8$  Hz), 4.08 (t, 4H,  $J = 6.4$  Hz), 1.85 (qu, 4H,  $J = 7.2$  Hz), 1.50 (br qu, 4H,  $J = 7.2$  Hz), 1.45-1.16 (m, 32H), 0.89 (t, 6H,  $J = 7.2$  Hz);

[0148]  $^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 181.62, 164.92, 163.79, 148.68, 134.02, 133.47, 132.74, 131.32, 127.04, 126.60, 121.46, 114.53, 68.42, 32.04, 29.79, 29.77, 29.73, 29.70, 29.50, 29.48, 29.21, 26.11, 22.81, 14.26;

[0149] IR (ZnSe)  $\text{cm}^{-1}$ : 2952, 2911, 2841, 1736, 1676, 1606, 1581, 1464, 1318, 1277, 1252, 1169, 1078, 1040, 1017, 1005, 894, 865, 840, 808, 751, 723, 682.

[0150] **실시예 7**



[0151]

[0152] 도 7에 나타낸 scheme에 따라 다음과 같은 방법으로 상기 화합물 *An-NOD-LC-7*을 합성하였다.

[0153] [1] 화합물 *An-14* (ethyl *p*-hydroxybenzoate)의 합성

[0154] : 4-Hydroxybenzoic acid (5.00 g, 36.2 mmol)를 90 mL 에탄올에 녹인 후, 여기에 농축된  $\text{H}_2\text{SO}_4$  4방울을 떨어트렸다. 이 반응 혼합물은 밤새 환류되었다. 반응물을 상온까지 식힌 후 농축시켰다. 얻어진 잔여물을  $\text{CHCl}_3$ 에 녹인 후, 그 용액을 10% sodium bicarbonate 수용액으로 씻어냈다. 유기층은 anhydrous  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ 로 건조하고 여과한 후, 여과액을 농축시켜 흰색 고체 (화합물 *An-14*, 5.17 g, 86%)를 얻었다. 얻어진 고체는 더 정제하지 않고 다음 단계 반응을 진행하였다.

[0155]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 7.96 (d, 2H,  $J = 6.8$  Hz), 6.87 (d, 2H,  $J = 6.8$  Hz), 5.95 (br s, 1H), 4.35 (q, 2H,  $J = 7.2$  Hz), 1.38 (t, 3H,  $J = 7.2$  Hz).

[0156] [2] 화합물 *An-15* (ethyl *p*-(2-ethylhexyl)oxybenzoate)의 합성

[0157] : 화합물 *An-14* (5.17 g, 31.1 mmol), 3-(bromomethyl)heptane (6.01 g, 31.1 mmol)를 30 mL의 에탄올에 녹인 후,  $\text{K}_2\text{CO}_3$  (9.89 g, 71.5 mmol)를 넣었다. 반응 혼합물은 18 시간 동안 환류되었다. 혼합물을 식힌 후, 농축시키고 에틸 아세테이트로 세 번 추출하였다. 모아진 유기층을  $\text{MgSO}_4$ 로 건조한 후 농축시켰다. 컬럼 크로마토그래피 ( $\text{SiO}_2$ , Hexanes:EtOAc = 10:1)를 통해 정제하여 무색의 오일 (화합물 *An-15*, 5.21 g, 60%)을 얻었다.

[0158]  $R_f = 0.49$  (TLC,  $\text{SiO}_2$ , Hexanes:EtOAc = 10:1)

[0159]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 7.98 (d, 2H,  $J = 9.2$  Hz), 6.91 (d, 2H,  $J = 10$  Hz), 4.34 (q, 2H,  $J = 7.2$  Hz), 3.89 (dd, 2H,  $J = 6$  Hz), 1.74 (qu, 1H,  $J = 6.4$  Hz), 1.54-1.30 (m, 11H), 0.95-0.89 (m, 6H).

[0160] [3] 화합물 *An-16* (*p*-(2-ethylhexyl)oxybenzoic acid)의 합성

[0161] : 화합물 *An-15* (3.34 g, 12.0 mmol)를 31 mL 에탄올에 녹인 후, 여기에 KOH (2.02 g, 36.0 mmol)를 적가하였다. 반응 혼합물은 밤새 환류되었다. 반응이 종결된 후, 반응 혼합물을 상온까지 식혔고, 용매를 제거하였다. 잔여물을 녹인 후 HCl 수용액으로 산성화시켰다. 얻어진 침전물을 거른 후 말려 흰색 고체 (화합물 *An-16*, 3.31 g, 71%)를 얻었다.

[0162]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 8.05 (d, 2H,  $J = 8.8$  Hz), 6.94 (d, 2H,  $J = 8.8$  Hz), 3.91 (dd, 2H,  $J = 5.6$  Hz), 1.75 (qu, 1H,  $J = 6.4$  Hz), 1.60-1.40 (m, 4H), 1.40-1.30 (m, 4H), 0.95-0.89 (m, 6H).

[0163] [4] 화합물 *An-NOD-LC-7*의 합성

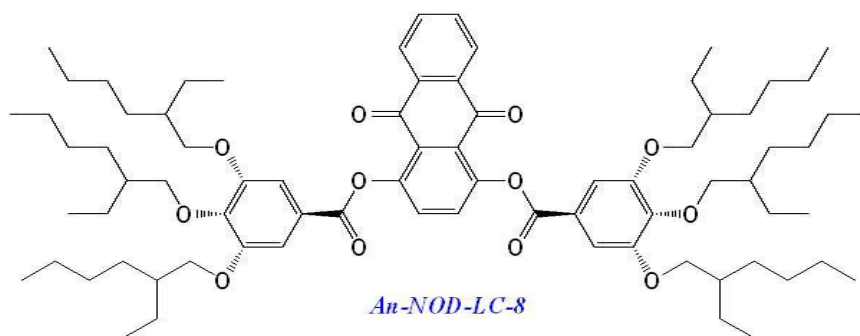
[0164] : 1,4-Dihydroanthraquinone (1.15 g, 4.79 mmol), 화합물 *An-16* (3.00 g, 12.0 mmol), 및 4-(dimethylamino)pyridinium/tosylate (DMAP-TsOH, 423 mg, 1.44 mmol)를 건조된 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 녹였다. 건조된 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 녹인 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide (DCC, 2.48 g, 12.0 mmol) 용액을 앞의 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물은 밤새 상온에서 교반되었다. 생성된 *N,N'*-dicyclohexyl urea를 여과하여 제거하였고, 여과액을 농축시켰다. 얻어진 잔여물은 THF에 녹인 후 메탄올에 떨어트리 침전을 수행하였다. 얻어진 침전물을 거른 후 말려 노란색 고체 (화합물 *An-NOD-LC-7*, 2.40 g, 71%, m.p. 206.3°C, 208.7°C)를 얻었다.

[0165] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 표준물질 TMS) δ(ppm): 8.25 (d, 4H, *J* = 8.8 Hz), 8.12 (dd, 2H, *J*<sub>1</sub> = 6 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.6 Hz), 7.69 (dd, 2H, *J*<sub>1</sub> = 5.6 Hz, *J*<sub>2</sub> = 3.2 Hz), 7.59 (s, 2H), 7.05 (d, 4H, *J* = 8.4 Hz), 3.97 (dd, 4H, *J* = 6 Hz), 1.79 (qu, 2H, *J* = 6 Hz), 1.60-1.40 (m, 8H), 1.42-1.26 (m, 8H), 0.98-0.88 (m, 12H);

[0166] <sup>13</sup>C NMR (100 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 표준물질 TMS) δ(ppm): 181.64, 164.95, 164.05, 148.69, 134.01, 133.45, 132.73, 131.33, 127.05, 126.60, 121.40, 114.57, 70.83, 39.36, 30.56, 29.16, 23.91, 23.15, 14.23, 11.22;

[0167] IR (ZnSe) cm<sup>-1</sup>: 3075, 2955, 2854, 1749, 1736, 1676, 1606, 1581, 1464, 1404, 1325, 1277, 1255, 1220, 1166, 1081, 1043, 1021, 1005, 973, 891, 862, 840, 824, 808, 755, 720, 682.

# [0168] 실시예 8



[0169] 도 8에 나타낸 scheme에 따라 다음과 같은 방법으로 상기 화합물 *An-NOD-LC-8*을 합성하였다.

[0170] [1] 화합물 *An-17* (methyl 3,4,5-tris((2-ethylhexyl)oxy)benzoate)의 합성

[0171] : 건조된 4.5 mL의 DMF에 있는 methyl 3,4,5-trihydroxybenzoate (1.00 g, 5.43 mmol)와 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.51 g, 32.6 mmol) 혼합물에 3-(bromomethyl)heptane (3.46 g, 17.9 mmol)를 적가하였다. 반응 혼합물은 80°C에서 밤새 교반되었다. 혼합물을 상온까지 식힌 후 에틸 아세테이트로 세 번 추출하였다. 모아진 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 농축시켰다. 컬럼 크로마토그래피 (SiO<sub>2</sub>, Hexanes:EtOAc = 19:1)를 통해 정제하여 노란색의 오일 (화합물 *An-17*, 2.03 g, 72%)을 얻었다.

[0172] R<sub>f</sub> = 0.38 (TLC, SiO<sub>2</sub>, Hexanes:EtOAc = 19:1)

[0173] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 표준물질 TMS) δ(ppm): 7.25 (s, 2H), 3.89 (m, 9H), 1.76 (qu, 2H, *J* = 6 Hz), 1.69 (qu, 1H, *J* = 5.6 Hz), 1.58-1.38 (m, 10H), 1.38-1.25 (m, 14H), 0.95-0.87 (m, 18H).

[0174] [2] 화합물 *An-18* (3,4,5-tris((2-ethylhexyl)oxy)benzoic acid)의 합성

[0175] : 화합물 *An-17* (2.03 g, 3.90 mmol)를 에탄올 (6.3 mL)과 물 (1.3 mL)의 혼합 용매에 녹인 후, KOH (1.15 g, 20.5 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물은 밤새 환류되었고, 상온까지 식혔다. 용매를 제거하고 남은 잔여물을 물에 녹인 후 HCl 수용액으로 산성화시켰다. 이 수용액층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 농축시켰다. 컬럼 크로마토그래피 (SiO<sub>2</sub>, Hexanes:EtOAc = 19:1)를 통해 정제하여 노란색의 오일 (화합물 *An-18*, 2.00 g, 101%)을 얻었다.

- [0177]  $R_f = 0.38$  (TLC,  $\text{SiO}_2$ , Hexanes:EtOAc = 19:1)
- [0178]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 7.32 (d, 2H, 2H,  $J = 3.6$  Hz), 3.96-3.90 (m, 6H), 1.76 (qu, 2H,  $J = 6$  Hz), 1.69 (qu, 1H,  $J = 6$  Hz), 1.64-1.40 (m, 12H), 1.40-1.30 (m, 12H), 0.95-0.89 (m, 18H).
- [0179] [3] 화합물 *An-NOD-LC-8*의 합성
- [0180] : 1,4-Dihydroanthraquinone (380 mg, 1.58 mmol), 화합물 An-18 (2.00 g, 3.95 mmol), 및 4-(dimethylamino)pyridinium/tosylate (DMAP-TsOH, 140 mg, 0.47 mmol)를 건조된  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 녹였다. 건조된  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 녹인 *N,N'*-dicyclohexylcarbodiimide (DCC, 815 mg, 3.95 mmol) 용액을 앞의 혼합물에 적가하였다. 반응 혼합물은 밤새 상온에서 교반되었다. 생성된 *N,N'*-dicyclohexyl urea를 여과하여 제거하였고, 여과액을 농축시켰다. 얻어진 잔여물은 THF에 녹인 후 메탄올에 떨어뜨려 침전을 수행하였다. 얻어진 침전물을 거른 후 말려 노란색 고체 (화합물 *An-NOD-LC-8*, 1.59 g, 83%, m.p. 80.4°C, 97.6°C)를 얻었다.
- [0181]  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 8.16 (dd, 2H,  $J_1 = 6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.71 (dd, 2H,  $J_1 = 6$  Hz,  $J_2 = 3.2$  Hz), 7.61 (s, 2H), 7.51 (s, 4H), 3.99-3.95 (m, 12H), 1.57 (m, 6H), 1.56-1.40 (m, 22H), 1.40-1.31 (m, 26H), 1.00-0.80 (m, 36H);
- [0182]  $^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CDCl}_3$ , 표준물질 TMS)  $\delta$  (ppm): 181.71, 165.09,
- [0183] 153.33, 148.73, 143.20, 134.14, 133.50, 131.29, 126.70, 123.50, 108.33, 76.10, 71.34, 40.75, 39.70, 30.66, 30.55, 29.43, 29.42, 29.23, 23.97, 23.77, 23.28, 23.22, 14.30, 14.24, 11.35, 11.33, 11.31, 11.27;
- [0184] IR (ZnSe)  $\text{cm}^{-1}$ : 2952, 2923, 2914, 2866, 2957, 1739, 1676, 1587, 1496, 1470, 1461, 1426, 1401, 1382, 1331, 1261, 1233, 1182, 1166, 1112, 1100, 1024, 1002, 970, 948, 865, 831, 799, 745, 717.
- [0185] **제조예 1**
- [0186] 실시예 1에 따른 화합물 *An-NOD-LC-1* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8 g)에 혼합한 조성물을 준비하였다. 상기 조성물을, 롤 코팅 방법에 의해, 노보넨계 광배향물질이 코팅된 COP 필름 위에 코팅한 후, 약 80 °C 하에서 2 분 동안 건조하여 액정 분자가 배향되도록 하였다. 그 후, 상기 필름에 200 mW/cm<sup>2</sup>의 고압 수은등을 광원으로 하는 비편광 UV를 조사하여 액정의 배향 상태를 고정화시키는 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.
- [0187] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450\text{nm})/\Delta n(550\text{nm}) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.
- [0188] **제조예 2**
- [0189] 실시예 2에 따른 화합물 *An-NOD-LC-2* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8 g)에 혼합한 조성물을 준비하고, 이를 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.
- [0190] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450\text{nm})/\Delta n(550\text{nm}) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

[0191] **제조예 3**

[0192] 실시예 3에 따른 화합물 *An-NOD-LC-3* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8 g)에 혼합한 조성물을 준비하고, 이를 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.

[0193] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450nm)/\Delta n(550nm) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

[0194] **제조예 4**

[0195] 실시예 4에 따른 화합물 *An-NOD-LC-4* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8 g)에 혼합한 조성물을 준비하고, 이를 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.

[0196] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450nm)/\Delta n(550nm) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

[0197] **제조예 5**

[0198] 실시예 5에 따른 화합물 *An-NOD-LC-5* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8 g)에 혼합한 조성물을 준비하고, 이를 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.

[0199] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450nm)/\Delta n(550nm) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

[0200] **제조예 6**

[0201] 실시예 6에 따른 화합물 *An-NOD-LC-6* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8 g)에 혼합한 조성물을 준비하고, 이를 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.

[0202] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450nm)/\Delta n(550nm) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

[0203] **제조예 7**

[0204] 실시예 7에 따른 화합물 *An-NOD-LC-7* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8 g)에 혼합한 조성물을 준비하고, 이를 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.

[0205] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450nm)/\Delta n(550nm) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

[0206] **제조예 8**

[0207] 실시예 8 따른 화합물 *An-NOD-LC-8* (12 g) 및 RMM907 (8 g, Merck사 제조 정분산 액정 혼합물)을 톨루엔 (78.8

g)에 혼합한 조성물을 준비하고, 이를 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.

[0208] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정하였으며, 이때 독립적으로 두께를 측정하고, 수득된 값으로부터 위상차 값을 구하였다. 그 결과, 상기 위상차 필름은  $\Delta n(450\text{nm})/\Delta n(550\text{nm}) = 0.99$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하는 역 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

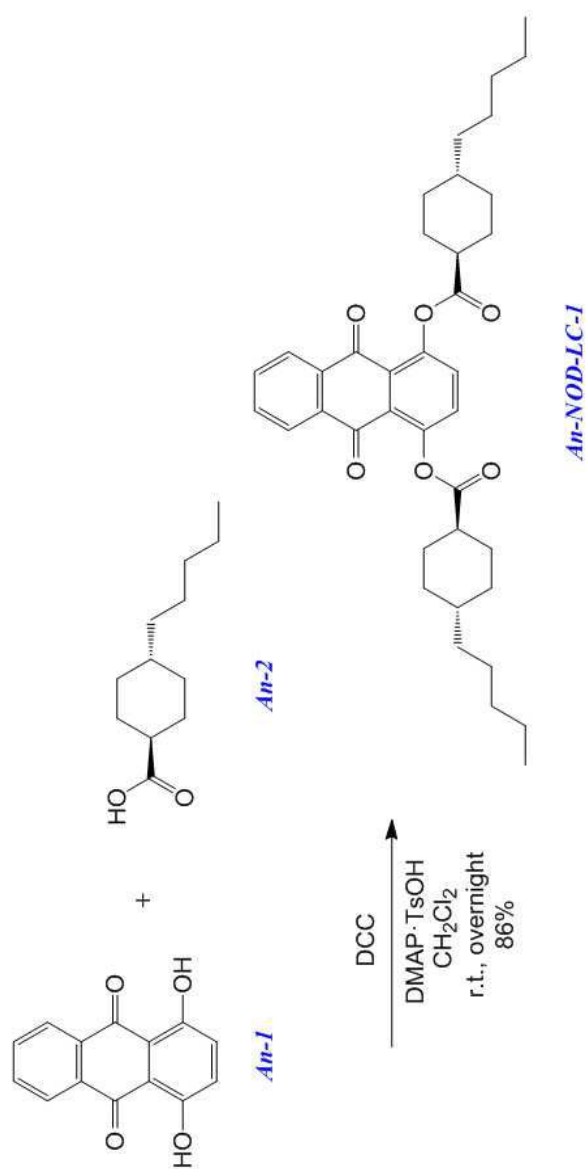
[0209] **비교 제조예**

[0210] 화합물 *An-NOD-LC-1*을 첨가하지 않고 20 g의 상기 RMM907을 사용한 것을 제외하고, 제조예 1과 동일한 방법으로 위상차 필름을 제조하였다.

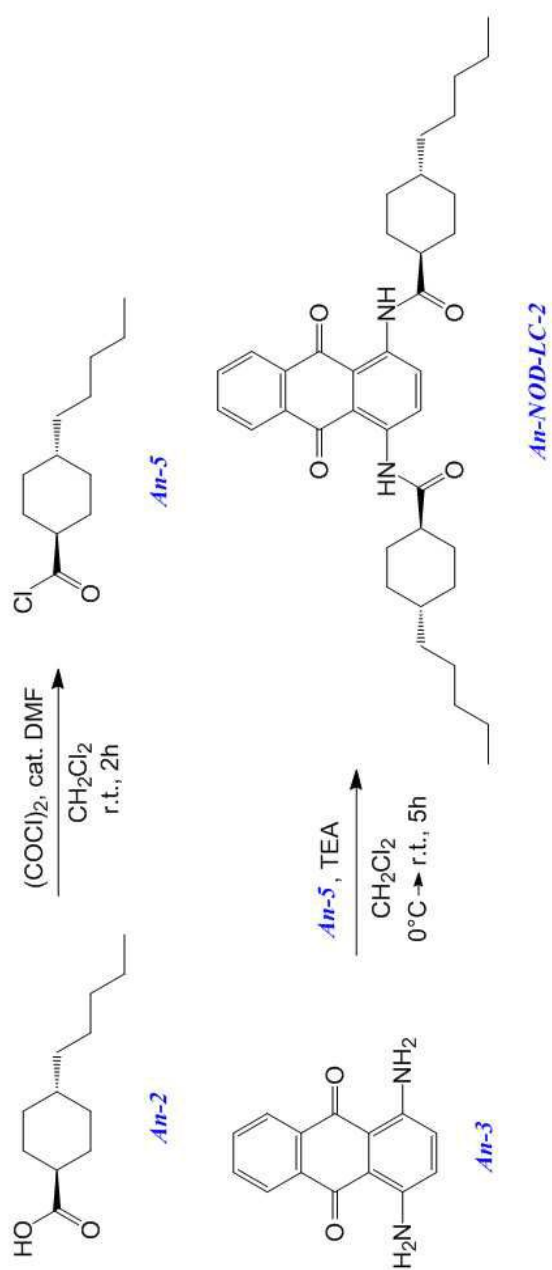
[0211] 상기 위상차 필름에 대해 Axoscan (Axomatrix사 제조)을 이용하여 정량적인 위상차 값을 측정한 결과,  $\Delta n(450\text{nm})/\Delta n(550\text{nm}) = 1.07$ 로서, 상기 식 I에 따른 조건을 만족하지 못하는 정 파장 분산을 나타내는 것으로 확인되었다.

도면

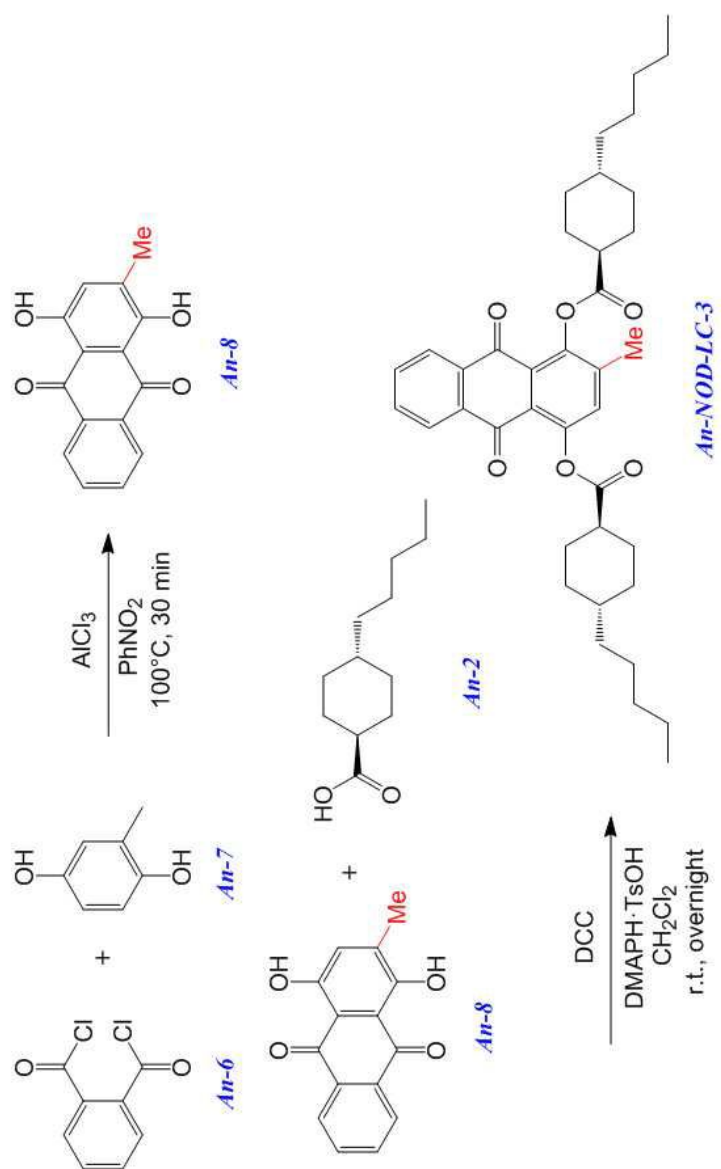
도면1



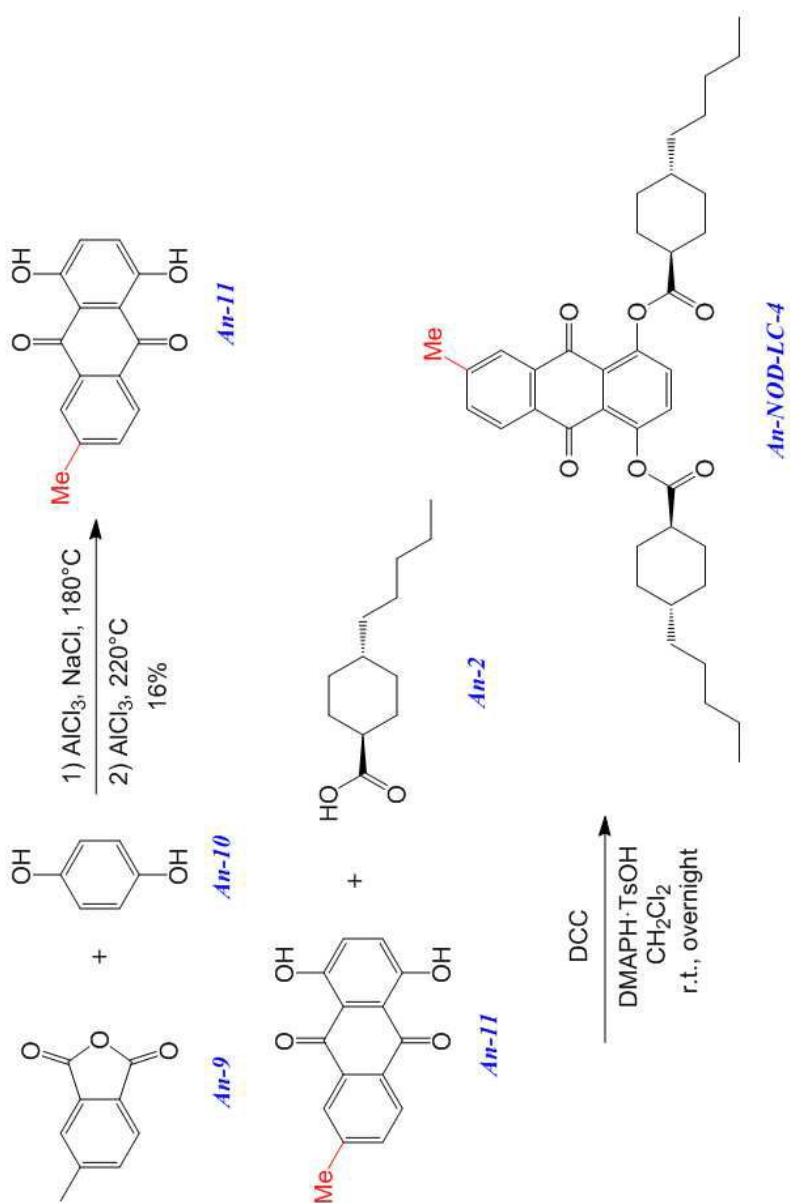
도면2



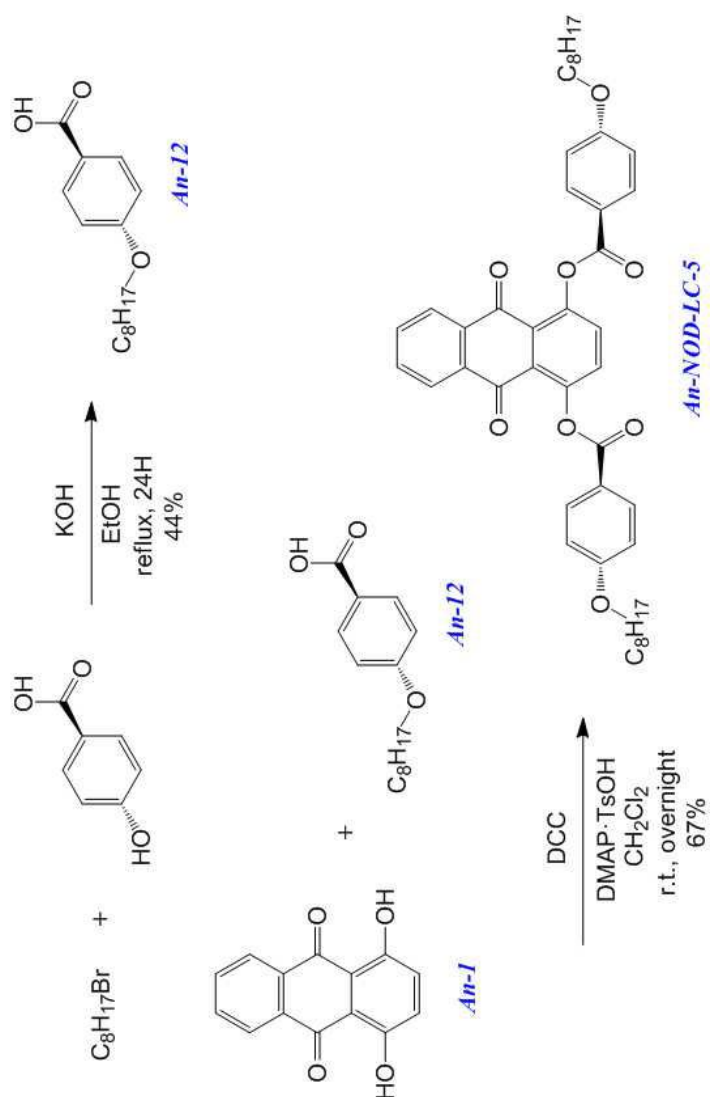
도면3



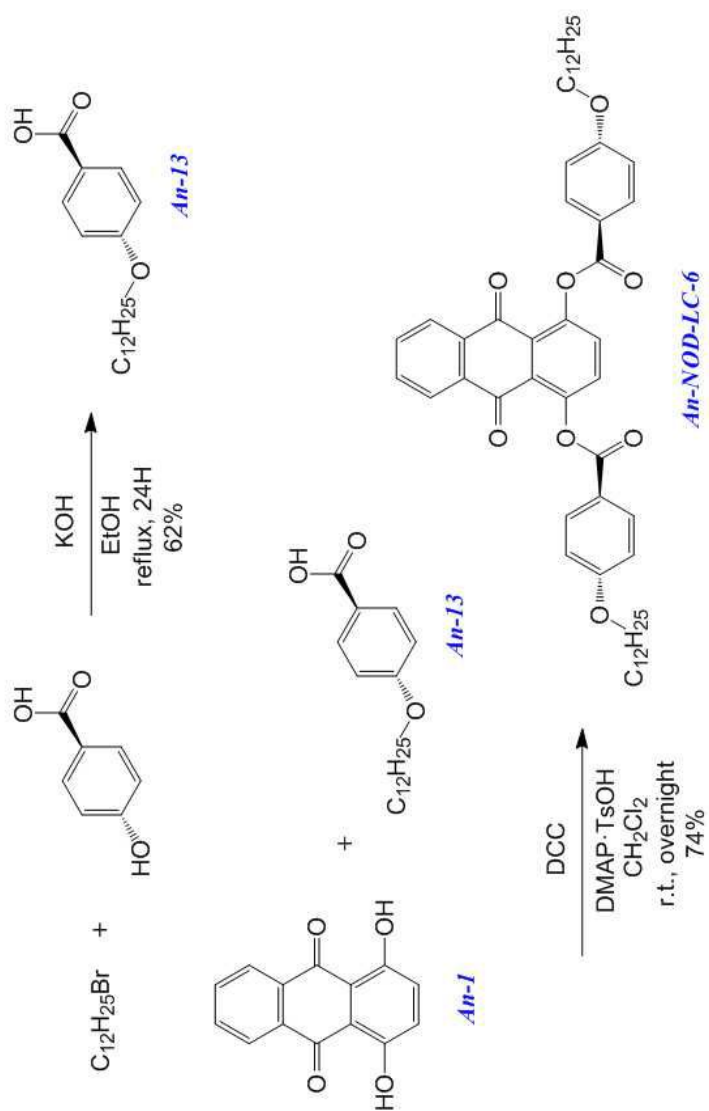
도면4



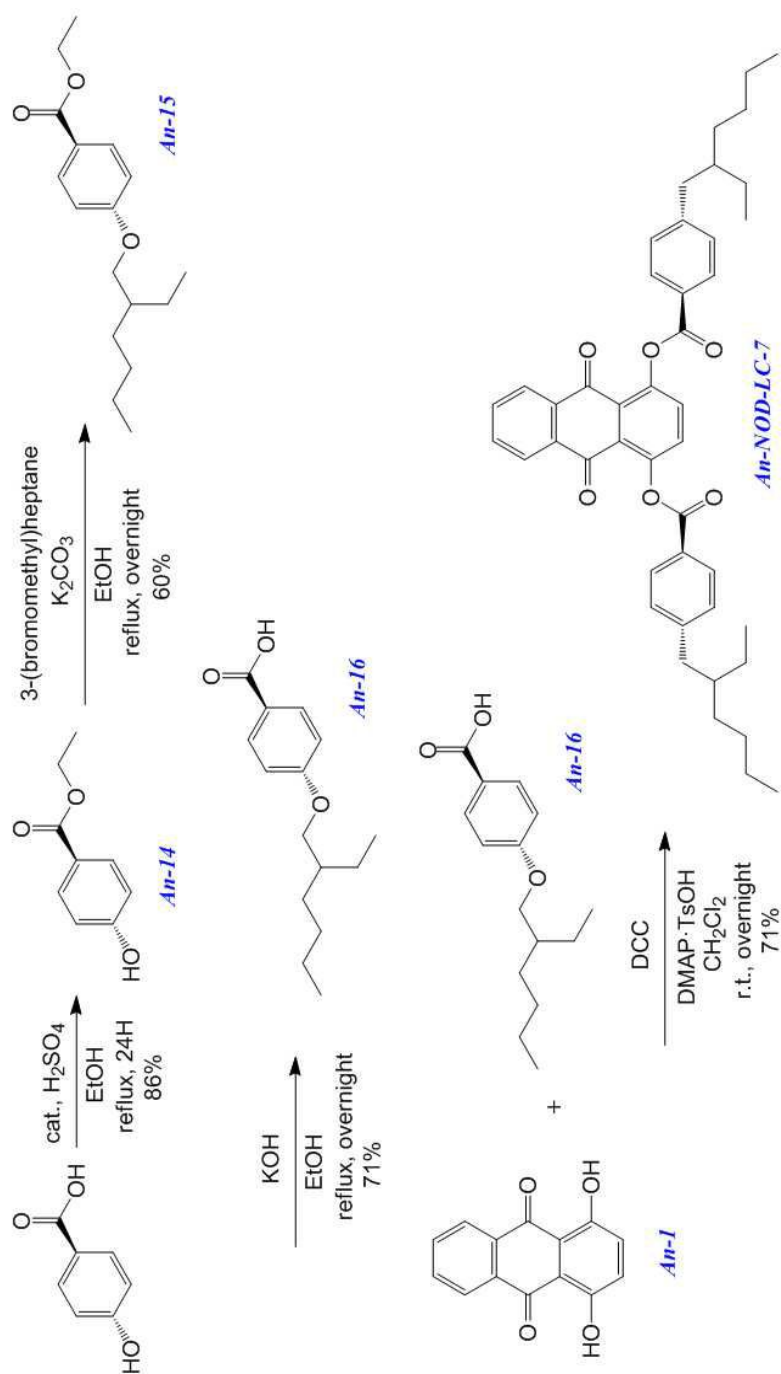
도면5



도면6



도면7



도면8

