(19)日本国特許庁(JP)　(12)公表特許公報(A)　(11)公表番号
特表2023-547341
(P2023-547341A)
(43)公表日　令和5年11月10日(2023.11.10)

(51)国際特許分類		FI			テーマコード（参考）
C08G 61/12 (2006.01)		C08G	61/12		2K102
G02F 1/061(2006.01)		G02F	1/061	501	4J032

審査請求　未請求　予備審査請求　未請求　（全33頁）

(21)出願番号　特願2023-521733(P2023-521733)
(86)(22)出願日　令和3年10月29日(2021.10.29)
(85)翻訳文提出日　令和5年4月10日(2023.4.10)
(86)国際出願番号　PCT/EP2021/080224
(87)国際公開番号　WO2022/090523
(87)国際公開日　令和4年5月5日(2022.5.5)
(31)優先権主張番号　2017227.6
(32)優先日　令和2年10月30日(2020.10.30)
(33)優先権主張国・地域又は機関
英国(GB)
(81)指定国・地域　AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,
最終頁に続く

(71)出願人　000002093
住友化学株式会社
東京都中央区日本橋二丁目７番１号
(74)代理人　100114188
弁理士　小野 誠
(74)代理人　100119253
弁理士　金山 賢教
(74)代理人　100124855
弁理士　坪倉 道明
(74)代理人　100129713
弁理士　重森 一輝
(74)代理人　100137213
弁理士　安藤 健司
(74)代理人　100143823
弁理士　市川 英彦
最終頁に続く

(54)【発明の名称】　ポリマー

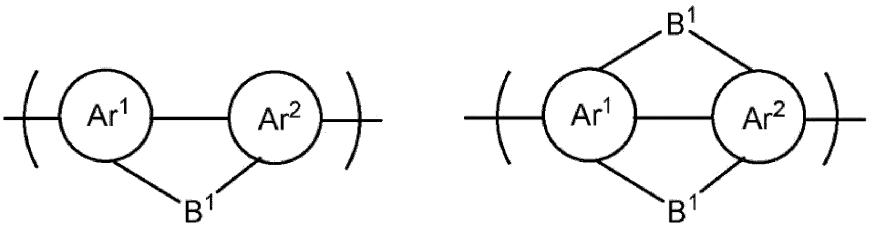
(57)【要約】
第１の平面に配置された第１の平面基を有する反復単位と、第１の平面とは異なる第２の平面に配置された第２の平面基と、第１の平面基と第２の平面基とを連結する結合又は基と、第１の平面基と第２の平面基とを連結する第１の二価結合基と、を含む、キラルポリマー。本ポリマーは、電気光学変調器の活性材料として使用され得る。
【選択図】なし

10

20

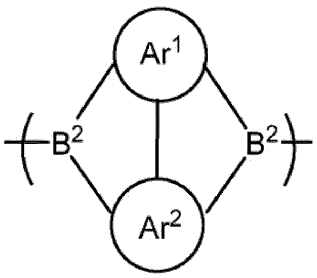
【特許請求の範囲】
【請求項１】
第１の平面に配置された第１の平面基を有する反復単位と、前記第１の平面とは異なる第２の平面に配置された第２の平面基と、前記第１の平面基と前記第２の平面基とを連結する結合又は基と、前記第１の平面基と前記第２の平面基とを連結する第１の二価結合基と、を含む、キラルポリマー。
【請求項２】
前記反復単位が、第１及び第２の結合によって隣接する反復単位に結合され、前記第１及び第２の結合の間の角度が、１８０°±１０°である、請求項１に記載のポリマー。
【請求項３】
前記第１及び第２の結合が、共線的である、請求項２に記載のポリマー。
【請求項４】
前記反復単位が、第２の二価結合基を含む、先行請求項のいずれか一項に記載のポリマー。
【請求項５】
前記第１の平面と前記第２の平面との間の角度が、１～８９°の範囲にある、先行請求項のいずれか一項に記載のポリマー。
【請求項６】
前記第１及び第２の平面基が、それぞれ第１のアリーレン又はヘテロアリーレン基、及び第２のアリーレン又はヘテロアリーレン基であり、前記第１及び第２のアリーレン又はヘテロアリーレン基の各々が、独立して、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されている、先行請求項のいずれか一項に記載のポリマー。
【請求項７】
前記第１及び第２のアリーレン又はヘテロアリーレン基が、直接結合によって連結されている、請求項６に記載のポリマー。
【請求項８】
前記直接結合が、前記ポリマーの軸に対して平行である、請求項７に記載のポリマー。
【請求項９】
前記直接結合が、前記ポリマーの軸に対して垂直である、請求項７に記載のポリマー。
【請求項１０】
前記反復単位が、式（Ｉ）～（ＩＩＩ）から選択され、

【化１】



(I)

(II)



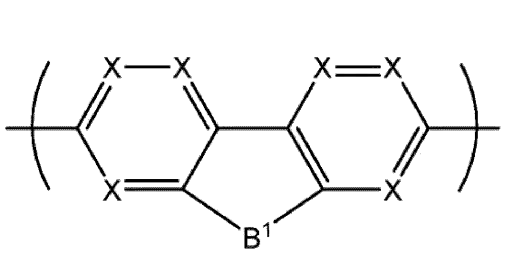
(III)

式中、Ａｒ^{1}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、Ａｒ^{2}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、各出現におけるＢ^{1}が、二価結合基であり、各出現におけるＢ^{2}が、独立して、二価結合基である、先行請求項のいずれか一項に記載のポリマー。

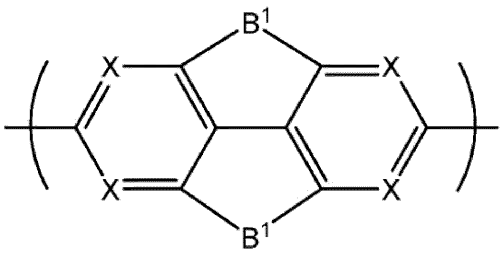
【請求項１１】

前記反復単位が、式（Ｉａ）～（ＩＩＩａ）から選択される、請求項１０に記載のポリマー。

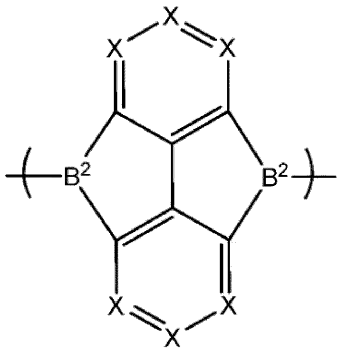
【化２】



(Ia)

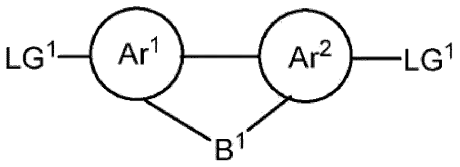


(IIa)

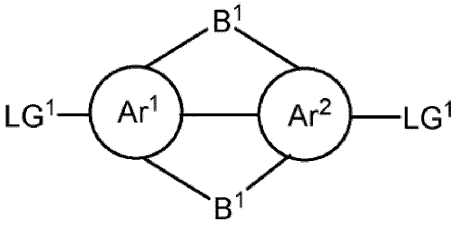


(IIIa)

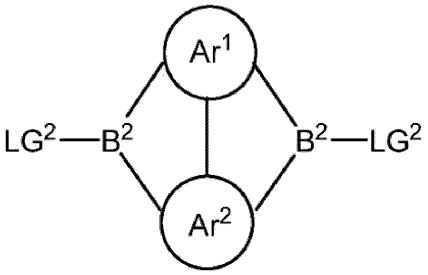
【請求項１２】
式（Ｉ’）又は（ＩＩ’）又は（ＩＩＩ）のキラルモノマーであって、
【化３】



(I’)



(II’)



(III’)

式中、Ａｒ^{1}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されており、第１の平

面に配置されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、Ａｒ^{2}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されており、前記第１の平面とは異なる第２の平面に配置されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、各出現におけるＢ^{1}が、独立して、二価結合基であり、各出現におけるＢ^{2}が、独立して、二価結合基であり、各出現におけるＬＧ^{1}が、独立して、脱離基であり、各出現におけるＬＧ^{2}が、独立して、脱離基である、キラルモノマー。

【請求項１３】

各出現におけるＬＧ^{1}が、Ａｒ^{1}又はＡｒ^{2}の芳香族炭素原子に結合した、ハロゲン化物、擬ハロゲン化物化物、又はボロン酸若しくはエステルであり、ＬＧ^{2}が、Ｂ^{2}のＮ原子に結合したＨである、請求項１２に記載のキラルモノマー。

【請求項１４】

請求項１２又は１３に記載のモノマーの重合を含む、ポリマーを形成する方法。

【請求項１５】

ポリマーフィルムと、前記ポリマーフィルムにわたって電界を印加するための電極と、を備え、前記ポリマーフィルムが、キラルポリマーを含む、電気光学変調器。

【請求項１６】

前記キラルポリマーが、請求項１～１１のいずれか一項に定義されるとおりである、請求項１６に記載の電気光学変調器。

【請求項１７】

データを送信するための光相互接続であって、

請求項１５又は１６に記載の前記電気光学変調器と、

前記電気光学変調器の入力に結合された光源と、を備え、

前記電気光学変調器が、前記光源によって放出された光を変調するように構成されている、光相互接続。

【請求項１８】

前記変調された光を受信するために、前記電気光学変調器の出力に第１の端部で結合された光ファイバーを更に備える、請求項１７に記載の光相互接続。

【請求項１９】

前記光ファイバーの第２の端部に結合された光検出器を更に備える、請求項１８に記載の光相互接続。

【請求項２０】

請求項１７～１９のいずれか一項に記載の光相互接続と、

第１のデバイスと、

第２のデバイスと、を備え、

前記光相互接続が、前記第１のデバイスから前記第２のデバイスにデータを送信するように構成されている、システム。

【請求項２１】

請求項１７～１９のいずれか一項に記載の第２の光相互接続を更に備え、前記第２の光相互接続が、前記第２のデバイスから前記第１のデバイスにデータを送信するように構成されている、請求項２０に記載のシステム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

本開示は、キラルポリマー及び電気光学変調器におけるその使用に関する。

【０００２】

近年、プロセッサ速度及び生成されるデータ量の両方の急速な増加は、データ伝送手段の帯域幅の対応する増加を必要とする。

【０００３】

電気信号を光信号に変換するための電気光学変調器（ＥＯＭ）は、ＥＯＭが固体状態で非ゼロ過分極性を有する材料、すなわち、材料の屈折率が印加された電界とともに変化す

る材料を含有することが知られている。電気光学スイッチングで使用するために知られている無機材料は、ニオブ酸リチウム（$LiNbO_3$）である。

【０００４】

強い基底状態の双極モーメントを有する双極（供与体－求引体）有機分子の光電子特性は、例えば、Ｄａｌｔｏｎ ａｎｄ Ｂｅｎｉｇｈｔ，「Ｔｈｅｏｒｙ ｇｕｉｄｅｄ ｄｅｓｉｇｎ ｏｆ ｏｒｇａｎｉｃ ｅｌｅｃｔｒｏ－ｏｐｔｉｃ ｍａｔｅｒｉａｌｓ ａｎｄ ｄｅｖｉｃｅｓ」，Ｐｏｌｙｍｅｒｓ，２０１１，３，１３２５－１３５１に記載されている。

【０００５】

Ｚｙｓｓ ａｎｄ Ｌｅｄｏｕｘ「Ｎｏｎｌｉｎｅａｒ Ｏｐｔｉｃｓ ｉｎ Ｍｕｌｔｉｐｏｌａｒ Ｍｅｄｉａ：Ｔｈｅｏｒｙ ａｎｄ Ｅｘｐｅｒｉｍｅｎｔｓ」，Ｃｈｅｍ．Ｒｅｖ．，１９９４，９４，７７－１０５は、八極有機非線形分子を開示している。

【０００６】

供与体－求引体モチーフのない共役ポリマー、例えば、Ｃｌｅｕｖｅｎｂｅｒｇｅｎ ｅｔ ａｌ，，Ｒｅｃｏｒｄ－ｈｉｇｈ ｈｙｐｅｒｐｏｌａｒｉｚａｂｉｌｉｔｉｅｓ ｉｎ ｃｏｎｊｕｇａｔｅｄ ｐｏｌｙｍｅｒｓ’Ｊ．Ｍａｔ．Ｃｈｅｍ Ｃ，２０１４，２，４５３３ ａｎｄ ｐｏｌｙｔｈｉｏｐｈｅｎｅ ａｓ ｄｉｓｃｌｏｓｅｄ ｉｎ Ｄｅｃｋｅｒｓ ｅｔ ａｌ，，Ｐｏｌｙ（３－ａｌｋｙｌｔｈｉｏｐｈｅｎｅ）ｓ ｓｈｏｗ ｕｎｅｘｐｅｃｔｅｄ ｓｅｃｏｎｄ－ｏｒｄｅｒ ｎｏｎｌｉｎｅａｒ ｏｐｔｉｃａｌ ｒｅｓｐｏｎｓｅ’Ｃｈｅｍ Ｃｏｍｍｕｎ，２０１４，５０，２７４１－４３に開示されているポリフェナントレンでも、溶液中で強い過分極性が観察されている。

【０００７】

Ｖｅｒｂｉｅｓｔ ｅｔ ａｌ ｒｅｆ：「Ｓｔｒｏｎｇ ｅｎｈａｎｃｅｍｅｎｔ ｏｆ ｎｏｎｌｉｎｅａｒ ｏｐｔｉｃａｌ ｐｒｏｐｅｒｔｉｅｓ ｔｈｒｏｕｇｈ ｓｕｐｒａｍｏｌｅｃｕｌａｒ ｃｈｉｒａｌｉｔｙ」，Ｓｃｉｅｎｃｅ，１９９８，ｖｏｌ．２８２，９１３は、分子の超分子アレイから構成されるキラルヘリセンのラングミュアーブロジェットフィルムを開示している。

【０００８】

Ｏｓｔｒｏｖｅｒｋｈｏｖ ｅｔ ａｌ，「Ｓｅｃｏｎｄ－ｈａｒｍｏｎｉｃ ｇｅｎｅｒａｔｉｏｎ ｉｎ ｎｏｎｐｏｌａｒ ｃｈｉｒａｌ ｍａｔｅｒｉａｌｓ：ｒｅｌａｔｉｏｎｓｈｉｐ ｂｅｔｗｅｅｎ ｍｏｌｅｃｕｌａｒ ａｎｄ ｍａｃｒｏｓｃｏｐｉｃ ｐｒｏｐｅｒｔｉｅｓ」Ｊ．Ｏｐｔ．Ｓｏｃ．Ａｍ．Ｂ，Ｖｏｌ．１８，Ｎｏ．１２，２００１，ｐ．１８５８－１８６５は、キラル培地中の軸方向に整列された非線形光学発色団における光学的第二高調波生成のための二次非線形光学応答のための配向ガスモデルを開示している。

【発明の概要】

【０００９】

いくつかの実施形態では、本開示は、第１の平面に配置された第１の平面基を有する反復単位と、第１の平面とは異なる第２の平面に配置された第２の平面基と、第１の平面基と第２の平面基とを連結する結合又は基と、第１の平面基と第２の平面基とを連結する第１の二価結合基とを含む、キラルポリマーを提供する。

【００１０】

いくつかの実施形態では、本開示は、ポリマーフィルムと、ポリマーフィルムにわたって電界を印加するための電極と、を備え、ポリマーフィルムがキラルポリマーを含む、電気光学変調器を提供する。

【００１１】

本明細書に記載されるキラルポリマーは、キラル反復単位のエナンチオマー過剰を含有するポリマーであることが理解されよう。同様に、本明細書に記載されるキラルモノマー

は、モノマーのエナンチオマーの過剰を含有するモノマーである。本明細書に記載されるキラルモノマー又はポリマーは、光学的に活性であり、例えば、非ゼロ環状二色性を有する。

【００１２】

任意選択的に、反復単位は、第１及び第２の結合によって隣接する反復単位に結合され、第１及び第２の結合の間の角度は、１８０°±１０°である。

【００１３】

任意選択的に、第１及び第２の結合は、共線的である。

【００１４】

任意選択的に、反復単位は、第２の二価結合基を含む。

【００１５】

任意選択的に、第１の平面と第２の平面との間の角度は、１～８９°の範囲にある。

【００１６】

任意選択的に、第１及び第２の平面基は、それぞれ第１のアリーレン又はヘテロアリーレン基、及び第２のアリーレン又はヘテロアリーレン基であり、第１及び第２のアリーレン又はヘテロアリーレン基の各々は、独立して、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されている。

【００１７】

任意選択的に、第１及び第２のアリーレン又はヘテロアリーレン基は、直接結合によって連結される。

【００１８】

任意選択的に、直接結合は、ポリマーの軸に対して平行である。

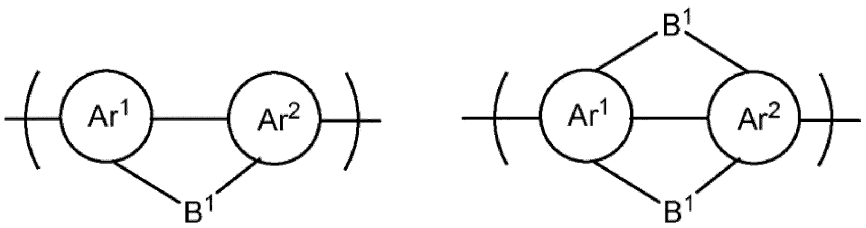
【００１９】

任意選択的に、直接結合は、ポリマーの軸に対して垂直である。

【００２０】

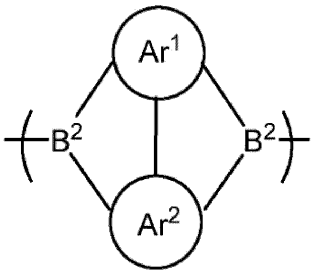
任意選択的に、反復単位は、式（Ｉ）～（ＩＩＩ）から選択され、

【化１】



(I)

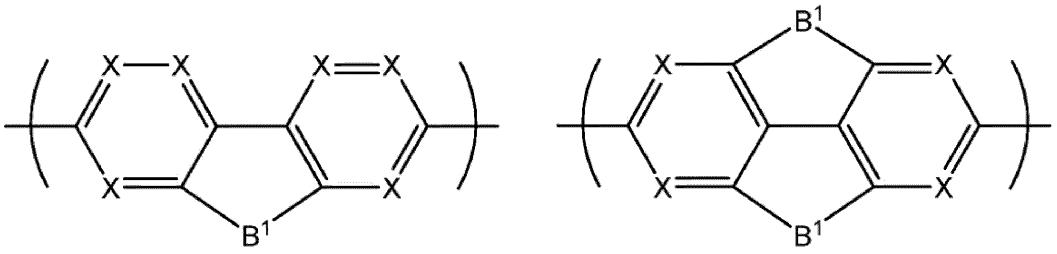
(II)



(III)

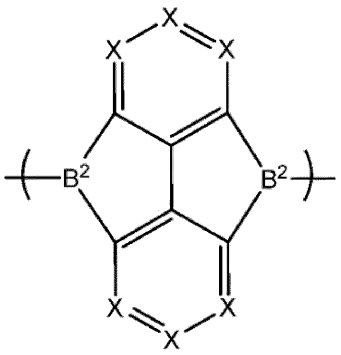
式中、Ａｒ^{1}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、Ａｒ^{2}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、Ｂ^{1}が、二価結合基であり、各出現におけるＢ^{2}が、独立して、二価結合基である。

【００２１】
任意選択的に、反復単位は、式（Ｉａ）～（ＩＩＩａ）から選択される：
【化２】



(Ia)

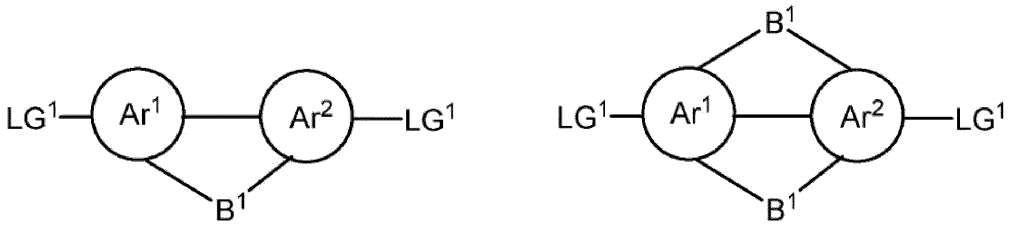
(IIa)



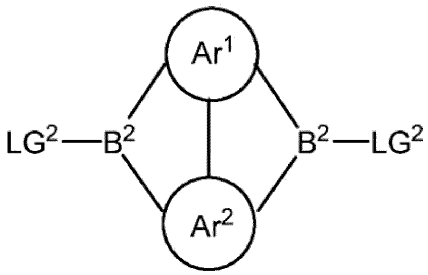
(IIIa)

【００２２】
いくつかの実施形態では、本開示は、式（Ｉ’）、（ＩＩ’）、又は（ＩＩＩ’）のモノマーを提供し、

【化３】



(I')　　(II')



(III')

式中、Ａｒ^{1}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されており、第１の平面に配置されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、Ａｒ^{2}が、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されており、第１の平面とは異なる第２の平面に配置されている、アリーレン又はヘテロアリーレン基であり、各出現におけるＢ^{1}が、独立して、二価結合基であり、各出現におけるＢ^{2}が、独立して、二価結合基であり、各出現におけるＬＧ^{1}が、独立して、脱離基であり、各出現におけるＬＧ^{2}が、独立して、脱離基である。

【００２３】

任意選択的に、各出現におけるＬＧ^{1}は、Ａｒ^{1}又はＡｒ^{2}の芳香族炭素原子に結合した、ハロゲン化物、擬ハロゲン化物化物、又はボロン酸若しくはエステルであり、ＬＧ^{2}は、Ｂ^{2}のＮ原子に結合したＨである。

【００２４】

いくつかの実施形態では、本開示は、本明細書に記載されるモノマーの重合を含むポリマーを形成する方法を提供する。

【００２５】

いくつかの実施形態では、本開示は、ポリマーフィルムを備え、ポリマーフィルムがキラルポリマーを含む、電気光学変調器を提供する。

【００２６】

任意選択的に、キラルポリマーは、第１の平面に配置された第１の平面基を有する反復単位と、第１の平面とは異なる第２の平面に配置された第２の平面基と、第１の平面基と第２の平面基とを連結する結合又は基と、第１の平面基と第２の平面基とを連結する第１の二価結合基とを含む。

【００２７】

いくつかの実施形態では、本開示は、

本明細書に記載される電気光学変調器と、

電気光学変調器の入力に結合された光源と、を備える、データを送信するための光相互接続を提供し、

電気光学変調器は、光源によって放出された光を変調するように構成されている。

【００２８】
任意選択的に、光相互接続は、変調された光を受信するために、電気光学変調器の出力に第１の端部で結合された光ファイバーを更に含む。
【００２９】
任意選択的に、光相互接続は、光ファイバーの第２の端部に結合された光検出器を更に含む。
【００３０】
いくつかの実施形態では、本開示は、
本明細書に記載される光相互接続と、
第１のデバイスと、
第２のデバイスと、を含むシステムを提供し、
光相互接続は、第１のデバイスから第２のデバイスにデータを送信するように構成されている。
【００３１】
任意選択的に、システムは、本明細書に記載されるような第２の光相互接続を含み、第２の光相互接続は、第２のデバイスから第１のデバイスにデータを送信するように構成される。
【図面の簡単な説明】
【００３２】
開示される技術及び添付の図は、開示される技術のいくつかの実施態様を記載する。
【００３３】
【図１】ポリチオフェン鎖の異なる可能な立体配座を示す。
【図２】いくつかの実施形態による反復単位を示す。
【図３】いくつかの実施形態による電気光学変調器を概略的に示す。
【図４Ａ】図３に示されるように、電気光学変調器への光入力を概略的に示す。
【図４Ｂ】図３に示されるように、電気光学変調器に印加された電気信号を概略的に示す。
【図４Ｃ】図３に示されるように、電気光学変調器からの光出力を概略的に示す。
【００３４】
図面は、縮尺どおりに描かれておらず、様々な視点及び見解を有する。図面は、いくつかの実施態様及び実施例である。加えて、いくつかの成分及び／又は操作は、開示の技術のいくつかの実施形態の考察を目的として、異なるブロックに分離され得るか、又は単一のブロックに組み合わされ得る。更に、技術は、様々な修正及び代替形式に変更可能であるが、特定の実施形態は、例として図面に示されており、以下に詳細に記載される。しかしながら、意図は、記載の特定の実施態様に技術を限定することではない。対照的に、技術は、添付の特許請求の範囲によって定義される技術の範囲内に入る全ての修正物、同等物、及び代替物を網羅することが意図される。
【発明を実施するための形態】
【００３５】
別段文脈が明らかに要求しない限り、記載及び特許請求の範囲を通して、「含む（ｃｏｍｐｒｉｓｅ）」、「含むこと（ｃｏｍｐｒｉｓｉｎｇ）」などの単語は、排他的又は網羅的な意味とは対照的に、包括的な意味、すなわち、「含むが、限定されない」という意味で解釈されるものである。加えて、「本明細書の」、「上の」、「以下の」という単語、及び類似の趣旨の単語は、本出願で使用される場合、本出願全体を指し、本出願の任意の特定の部分を指すものではない。文脈が許容する場合、単数又は複数を使用する発明を実施するための形態において、単語はまた、それぞれ複数又は単数を含み得る。「又は」という単語は、２つ以上の項目の列挙を参照して、列挙の項目のうちのいずれか、列挙の項目のすべて、及び列挙の項目の任意の組み合わせ、という単語の解釈のすべてを網羅する。本出願で使用される場合、別の層の「上方の」層への言及は、層が直接接触してもよく、又は１つ以上の介在層が存在してもよいことを意味する。別の層の「上の」層への言

及は、本出願で使用される場合、層が直接接触していることを意味する。特定原子への言及は、特に明記しない限り、その原子の任意の同位体を含む。

【００３６】

本明細書に提供される技術の教示は、必ずしも以下に記載のシステムではなく、他のシステムに適用され得る。以下に記載の様々な実施例の要素及び行為を組み合わせて、技術の更なる実施態様を提供することができる。技術のいくつかの代替的な実施態様は、以下に記述されるこれらの実施態様に対する追加の要素を含み得るだけでなく、より少ない要素も含み得る。

【００３７】

以下の詳細な記載に照らし合わせて、これら及び他の変更は、技術に対して行われ得る。記載は、技術のある特定の実施例を記載し、企図される最良のモードを記載しているが、記載がどれほど詳細に表示されていようとも、技術は、多くの方式で実践することができる。上に記述されるように、技術のある特定の特色又は態様を記載する場合に使用される特定の用語は、その用語に関連する技術の任意の特定の特徴、特色、又は態様に制限されるように、その用語が本明細書で再定義されることを意味するものと解釈されるべきではない。一般に、以下の特許請求の範囲で使用される用語は、発明を実施するための形態の項でそのような用語を別段明示的に定義しない限り、技術を本明細書に開示の特定の実施例に限定するものと解釈されるべきではない。したがって、技術の実際の範囲は、開示の実施例だけでなく、特許請求の範囲下の技術の全ての実践又は実施態様の同等の方式も包含する。

【００３８】

特許請求の範囲の数を低減するために、技術のある特定の態様は、ある特定の特許請求の範囲の形態で以下に提示されるが、出願人は、任意の数の特許請求の範囲の形態における技術の様々な態様を企図している。

【００３９】

以下の記載では、説明の目的として、開示の技術の実施態様の完全な理解を提供するために、多数の具体的な詳細が記載される。しかしながら、開示の技術の実施形態が、これらの具体的な詳細のいくつかを用いずとも実践することができることは、当業者には明らかであろう。

【００４０】

本発明者らは、キラルポリマー、すなわち、ポリマー鎖がキラル反復単位のエナンチオマー過剰を含有するポリマーが、電気光学変調器の活性材料として使用され得ることを見出した。

【００４１】

本発明者らは、熱力学的に安定なエナンチオマーを提供するために、反復単位のキラリティが「ロックイン」され得ることを更に見出した。

【００４２】

図１は、インターモノマーねじれ角度に対して取られる値に応じて、ポリマー鎖が採用することができる異なる構成を概略的に示す。図１は、ポリチオフェン鎖を示すが、これは、芳香族又はヘテロ芳香族環の任意の反復単位の鎖であり得ることが理解されるであろう。可能な構成には、右利きのヘリックス、左利きのヘリックス、及びらせん状立体配座（例えば、線形又は他のランダムならせん状立体配座）が含まれる。多数の制約のないインターモノマーねじれ角の可能性のために、ポリチオフェンなどのポリ（ヘテロ）アリーレンの個々の鎖は、環境に応じて多数のそのような立体配座を採用し得、それらの各々は、過分極性に寄与する。いかなる理論にも拘束されることを望むものではないが、固体状態のそのようなポリマー鎖の軸方向に順序付けられたフィルムは、正、負、又はゼロ正味の電気光学応答（ｒ３３）をもたらし得ると考えられる。

【００４３】

本発明者らは、モノマー構造にねじれを有する非平面キラル反復単位を提供することによって、得られたポリマー鎖が、非ゼロキラル過分極性成分を有する静的ならせん状立体

配座を採用することに拘束され得ることを見出した。ポリマー鎖のキラリティにおけるエナンチオマー過剰は、（＋）又は（－）エナンチオマーのうちの１つの過剰を有するかかるモノマーの重合によって達成され得る。

【００４４】

キラル反復単位のエナンチオマー過剰は、少なくとも２５％、より好ましくは少なくとも５０％、更により好ましくは７５％又は１００％であってもよい。キラル反復単位のエナンチオマー過剰は、ポリマーを形成するために使用される対応するモノマーのエナンチオマー過剰に直接対応し得る。

【００４５】

本明細書に記載されるようなポリマーのキラリティは、ポリマー鎖のトポロジー、例えば、右利きのらせん状ポリマー鎖の割合：１：１ではない左利きのらせん状ポリマー鎖から生じることが理解されよう。したがって、本明細書に記載の反復単位は、立体中心又はキラリティ軸を含んでいても、含んでいなくてもよい。

【００４６】

このようなキラル反復単位を形成するためのモノマーのエナンチオマー過剰は、エナンチオ選択的反応ステップ及び／又はキラル分解能ステップを含むモノマー合成によって達成され得る。

【００４７】

キラル分解工程は、出発物質、モノマー中間体、又はモノマーのいずれか１つのラセミ混合物のキラル分解を含む、モノマー合成の任意の時点で行われ得る。当業者に既知の任意の好適なキラル分解能は、鏡像異性体的に純粋なキラル試薬との結晶化又は反応、得られたジアステロマーの分離を含むが、これらに限定されない。

【００４８】

本明細書に記載されるキラルポリマーは、好適には静的であり、すなわち、キラル反復単位のその光学的に活性な鏡像への変換は、固体状態又は溶液中の２５℃で熱力学的に好ましくない。任意選択的に、本明細書に記載のキラルモノマーは、２９８Ｋで、少なくとも２ｋＴ、任意選択的に少なくとも１０ｋＴのラセミ化エネルギーを有する。

【００４９】

静的構成は、ポリマーの反復単位の第１の平面基と第２の平面基との間に、反復単位の最も熱力学的に好ましい立体配座が、第１の平面基と第２の平面基が異なる平面に存在する、すなわちねじれているものとなるように、少なくとも１つの結合基を提供することによって達成され得る。そのような結合基は、第１及び第２の平面基の互いに対する移動の自由を制限し、好ましくは、第１及び第２の平面基をねじれた構成に固定することを理解されたい。

【００５０】

いくつかの実施形態では、ポリマーは、共役され、すなわち、ポリマー骨格中の反復単位は、隣接する反復単位に直接ｐｉ共役される。好ましくは、共役ポリマーの反復単位の芳香族又はヘテロ芳香族反復単位の炭素環原子は、隣接する反復単位の芳香族又はヘテロ芳香族反復単位の炭素環原子に直接結合される。

【００５１】

いくつかの実施形態では、ポリマーは、非共役である。これらの実施形態では、ポリマーは、隣接する反復単位に共役していない共役基、例えば、芳香族基又はヘテロ芳香族基を含有する反復単位を含有し得る。

【００５２】

好ましくは、本明細書に記載されるポリマーのゲル浸透クロマトグラフィーによって測定されるポリスチレン等価数平均分子量（Ｍｎ）は、約1×10^{3}～1×10^{8}、好ましくは1×10^{4}～5×10^{6}の範囲にある。ポリマーのポリスチレン等価重量平均分子量（Ｍｗ）は、1×10^{3}～1×10^{8}、好ましくは1×10^{4}～1×10^{7}であり得る。

【００５３】

反復単位

いくつかの実施形態では、ポリマーのねじれた反復単位は、第１のアリーレン又はヘテロアリーレン基Ａｒ^{1}、及び第２のアリーレン又はヘテロアリーレン基Ａｒ^{2}を含み、式中、Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}は、単結合によって連結され、少なくとも１つの結合基によって更に連結される。

【００５４】

任意選択的に、Ａｒ^{1}の平面とＡｒ^{2}の平面との間の角度は、量子コンピューティング最適化モノマー構造を使用して測定されるように、１～８９°、好ましくは２０～６０°である。

【００５５】

量子化学計算は、Ｇａｕｓｓｉａｎ　０９，Ｒｅｖｉｓｉｏｎ　Ｄ．０１ソフトウェアを使用して実施した。構造を、理論のＢ３ＬＹＰ／６－３１ｇ（ｄ）レベルでＤＦＴモデルを使用して最適化した。地上状態最小値は、同じレベルで計算された分析周波数の分析に基づいて確認され、想像上の周波数は示されなかった。Ｂ３ＬＹＰ／６－３１ｇ（ｄ）レベルの理論及びＰｏｌａｒジョブタイプ並びにＧａｕｓｓｉａｎ　０９，Ｒｅｖｉｓｉｏｎ　Ｄ．０１に実装されているそのオプションでＤＦＴモデルを使用して、事前に最適化されたジオメトリで分子静的及び周波数依存的な超分極性を計算した。

【００５６】

Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}は各々、好ましくは、単環式又は多環式芳香族基又はヘテロ芳香族基からなる群から選択される。Ｃ$_{6-20}$アリーレン基、例えば、フェニレン又はナフチレン基が好ましい。

【００５７】

Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}は、同じであっても異なっていてもよく、好ましくは同じであってもよい。

【００５８】

結合基又は基は、Ａｒ^{1}とＡｒ^{2}との間のねじれを誘導するように選択され得る。これは、フェニレン基Ａｒ^{1}とＡｒ^{2}との間のプロピレン結合基が、これらの基間のねじれを引き起こす、図２に示されている。

【００５９】

図２に示されるように、反復単位の結合Ａ１及びＡ２と隣接する反復単位との間の角度は、好ましくは１８０°である。範囲は、１８０±３５°、好ましくは１８０±２０°、より好ましくは１８０°±１０°であり得る。

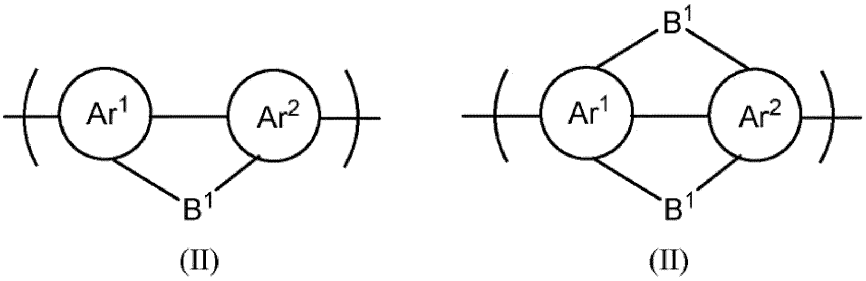
【００６０】

結合Ａ１及びＡ２は、平行であってもよい。好ましくは、結合Ａ１及びＡ２は、共線的であり、すなわち、それらは、共通の軸上に位置する。

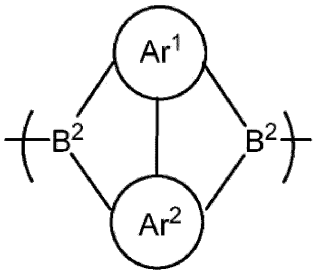
【００６１】

いくつかの実施形態では、ねじれた反復単位は、式（Ｉ）～（ＩＩＩ）から選択されてもよく、

【化４】



(II)　　(II)



(III)

式中、各出現におけるB^1は、独立して、二価結合基であり、各出現におけるB^2は、独立して、二価結合基である。

【００６２】

Ar^1及びAr^2は、各々独立して、非置換であるか、又は１つ以上の置換基で置換されている。置換基は、各出現において、独立して、Ｆ、Ｃｌ、NO_2、ＣＮ、NH_2、ＯＨ、非置換であってもよいか、又は１つ以上の置換基で置換されていてもよいアリール又はヘテロアリール基Ar^3、並びにC_{1-12}アルキル（１つ以上の隣接していないＣ原子が、Ｏ、Ｓ、NR^6で置き換えられていてもよく、R^6が、Ｈ、又は置換基、ＣＯ、又はＣＯＯであり、１つ以上のＨ原子は、Ｆで置き換えられていてもよい）から選択されてもよい。

【００６３】

Ar^1又はAr^2のアリール又はヘテロアリール置換基は、非置換であってもよく、又はＦ、Ｃｌ、ＣＮ、NO_2若しくはC_{1-12}アルキル（１つ以上の隣接していないＣ原子がＯ、Ｓ、NR^6、ＣＯ、又はＣＯＯで置き換えられていてもよく、１つ以上のＨ原子がＦで置き換えられていてもよい）から選択される１つ以上の置換基で置換されていてもよい。アリール又はヘテロアリール置換基は、Ｃ６－２０アリール、例えば、フェニル又はナフチル、単環式５員又は６員の複素芳香族環、又は縮合複素芳香族基であってもよい。

【００６４】

R^6が置換基である場合、C_{1-20}ヒドロカルビル基であることが好ましい。

【００６５】

好ましい基Ar^1及びAr^2は、フェニレン及びナフタレンである。

【００６６】

いくつかの実施形態では、式（Ｉ）又は（ＩＩ）のキラリティ軸、すなわち、Ar^1とAr^2との間の結合は、ポリマー骨格に対して平行である。

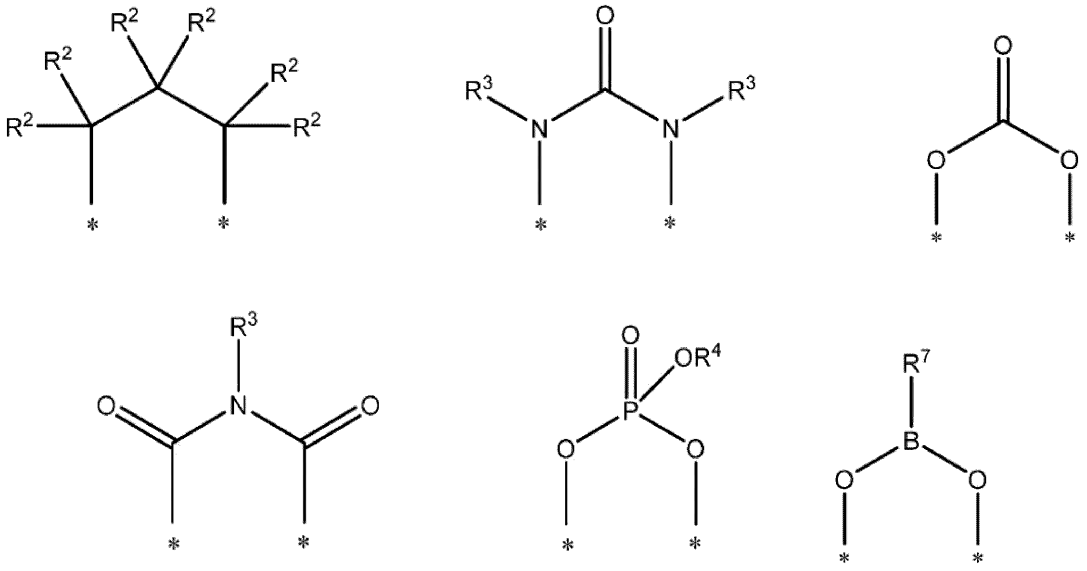
【００６７】

いくつかの実施形態では、式（ＩＩＩ）のキラリティ軸は、ポリマー骨格に対して垂直である。

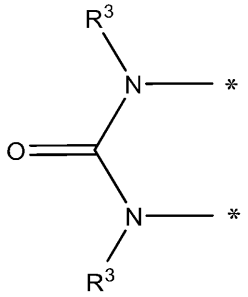
【００６８】

好ましくは、B^1は、Ar^1及びAr^2とともに、７員環を形成する。

【００６９】
例示的なＢ^{1}基としては、以下が挙げられるが、これらに限定されない：
【化５】



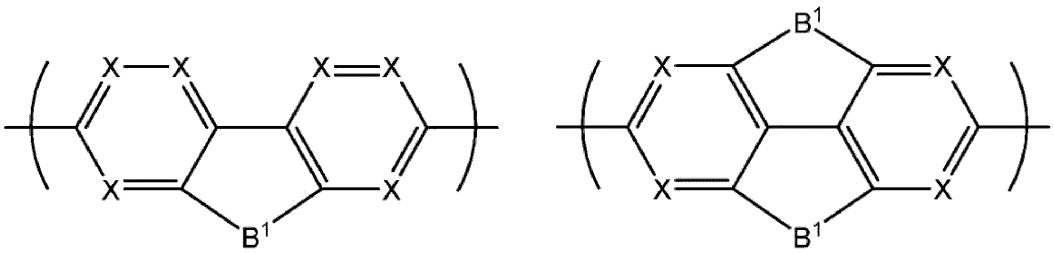
式中、各出現におけるＲ^{2}－Ｒ^{4}は、独立して、Ｈ又は置換基であり、Ｒ^{7}は、置換基、任意選択的に、Ｃ$_{1-20}$ヒドロカルビル基であり、＊は、Ａｒ^{1}又はＡｒ^{2}への結合を表す。
【００７０】
各出現におけるＲ^{2}は、好ましくは、Ｈ、Ｆ、Ｃ$_{1-12}$アルキル（１つ以上の隣接していないＣ原子が、Ｏ、Ｓ、ＮＲ^{5}、Ｃ＝Ｏ又はＣＯＯで置き換えられていてもよい）又はフェニル（非置換であるか、Ｃ$_{1-12}$アルキル（１つ以上の隣接していないＣ原子が、Ｏ、Ｓ、ＮＲ^{5}、Ｃ＝Ｏ又はＣＯＯで置き換えられていてもよい）から選択される１つ以上の置換基で置換される）である。
【００７１】
各出現におけるＲ^{3}及びＲ^{4}は、好ましくは、Ｈ又はＣ$_{1-20}$ヒドロカルビル基である。
【００７２】
本明細書の任意の場所に記載されるようなＣ$_{1-20}$ヒドロカルビル基は、好ましくは、Ｃ$_{1-12}$アルキル、非置換フェニル、及び１つ以上のＣ$_{1-12}$アルキル基で置換されたフェニルから選択される。
【００７３】
好ましくは、Ｂ^{2}は、Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}とともに、７員環を形成する。例示的な結合基Ｂ^{2}は、以下である：
【化６】



【００７４】

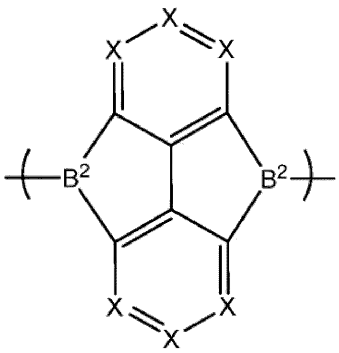
好ましくは、式（Ｉ）、（ＩＩ）、及び（ＩＩＩ）は、それぞれ、式（Ｉａ）～（ＩＩＩａ）から選択され、

【化７】



(Ia)

(IIa)



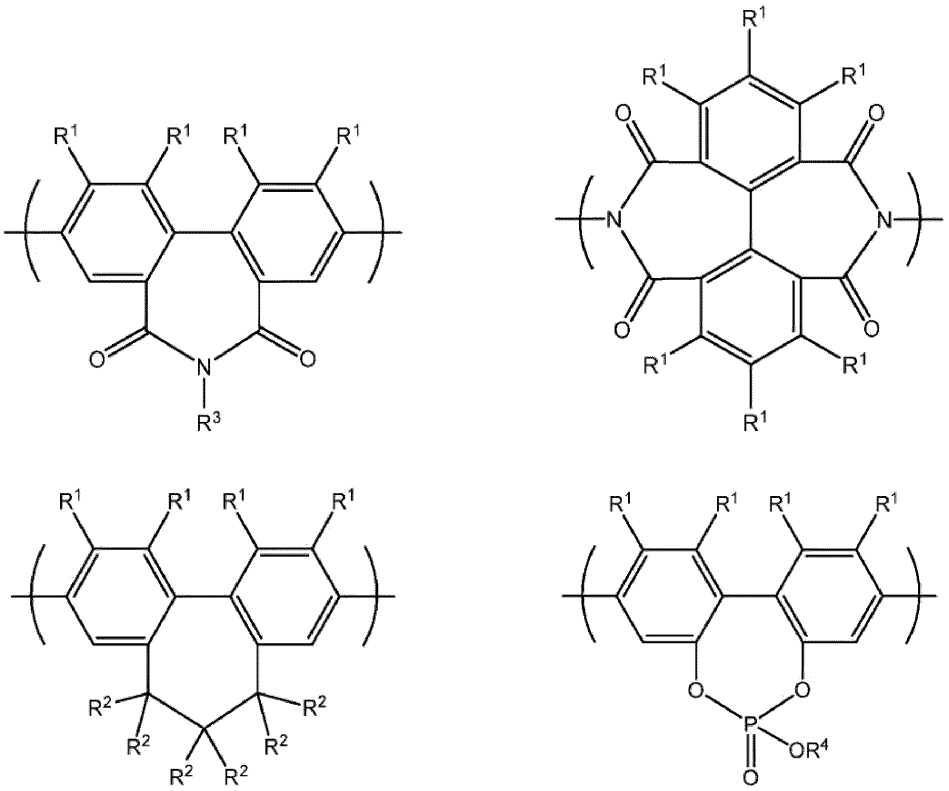
(IIIa)

式中、各出現におけるＸは、ＣＲ^{1}又はＮであり、各出現におけるＲ^{1}は、Ｈ又は置換基であり、隣接する炭素原子に結合した置換基Ｒ^{1}は、芳香族環又は非芳香族環を形成するために連結されてもよい。任意選択的に、非Ｈ基Ｒ^{1}、又は２つのＲ^{1}基の連結によって形成される環の置換基は、Ｆ、Ｃｌ、ＮＯ$_{2}$、ＣＮ、ＮＨ$_{2}$、ＯＨ、Ａｒ^{3}、及びＣ$_{1-12}$アルキル（１つ以上の隣接していないＣ原子が、Ｏ、Ｓ、ＮＲ^{6}、ＣＯ、又はＣＯＯで置き換えられていてもよく、１つ以上のＨ原子が、Ｆで置き換えられていてもよい）から選択される。Ａｒ^{3}は、上述のアリール又はヘテロアリール基である。

【００７５】

例示的なねじれた反復単位は、以下である：

【化８】



【００７６】

いくつかの実施形態では、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、ポリマー骨格中のキラル反復単位の唯一の２つのアリーレン又はヘテロアリーレン基であり、これらは同じ平面内にない。他の実施形態では、キラル反復単位は、同じ平面にない２つ以上のアリーレン又はヘテロアリーレン基を含み得る。

【００７７】

いくつかの実施形態では、ポリマーは、ホモポリマー、例えば、式（ＩＩａ）又は（ＩＩｂ）の反復単位を含むホモポリマーである。

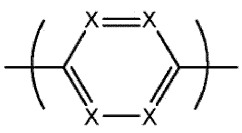
【００７８】

いくつかの実施形態では、ポリマーは、本明細書に記載されるねじれた反復単位と、１つ以上の共反復単位と、例えば、式（ＩＩａ）、（ＩＩｂ）、又は（ＩＩｃ）の反復単位と、共反復単位とを含むＡＢコポリマーと、を含むコポリマーである。好ましくは、共反復単位の結合と隣接する反復単位との間の角度は、１８０°である。好ましくは、隣接する反復単位への共反復単位の結合は、同じ軸上にある。

【００７９】

好ましい共反復単位は、式（ＩＶ）を有し、

【化９】



(IV)

式中、各出現におけるＸは、Ｎ又はＣＲ[1]であり、Ｒ[1]は、Ｈ又は上記の置換基である。特に好ましい共反復単位は、１，４－フェニレンである。

【００８０】
ポリマー形成
本明細書に記載のポリマーは、当業者に既知の任意の方法によって形成され得る。
【００８１】
例示的な方法は、それぞれ、ホモポリマー又はコポリマーを形成するための１つ以上のモノマーの重合であり、各モノマーは、例えば、Ｃｌ、Ｂｒ又はＩという２つのハロゲン化物離脱基を有し、例えば、その内容が参照により本明細書に組み込まれる、Ｔ．Ｙａｍａｍｏｔｏ，「Ｅｌｅｃｔｒｉｃａｌｌｙ Ｃｏｎｄｕｃｔｉｎｇ Ａｎｄ Ｔｈｅｒｍａｌｌｙ Ｓｔａｂｌｅ ｐｉ－Ｃｏｎｊｕｇａｔｅｄ Ｐｏｌｙ（ａｒｙｌｅｎｅ）ｓ Ｐｒｅｐａｒｅｄ ｂｙ Ｏｒｇａｎｏｍｅｔａｌｌｉｃ Ｐｒｏｃｅｓｓｅｓ」，Ｐｒｏｇｒｅｓｓ ｉｎ Ｐｏｌｙｍｅｒ Ｓｃｉｅｎｃｅ １９９３，１７，１１５３－１２０５に開示されるように、本明細書に記載されるような反復単位を形成するための少なくとも１つのモノマーを含む；
別の例示的な方法は、ハロゲン化物又は擬ハロゲン化物（例えば、スルホネート）脱離基と、ボロン酸又はボロン酸エステル脱離基とを有する１つ以上のモノマーの重合である。いくつかの実施形態では、モノマーは、２つのハロゲン化物又は擬ハロゲン化物基で置換された１つ以上のモノマーと、２つのボロン酸又はボロン酸エステル基で置換された１つ以上のモノマーとを含み、モノマーは、本明細書に記載されるように、反復単位を形成するための少なくとも１つのモノマーを含む。いくつかの実施形態では、モノマーは、１つのハロゲン化物又は擬ハロゲン化物化物基と、１つのボロン酸又はボロン酸エステル基で置換されたモノマーとを含むか、又はそれらからなり得る。本方法による重合は、例えば、ＷＯ００／５３６５６、ＷＯ２００３／０３５７９６、及びＵＳ５７７７０７０に記載されており、その内容は、参照により本明細書に組み込まれる。
【００８２】
別の例示的な方法は、ハロゲン化物又は擬ハロゲン化物（例えば、スルホネート）脱離基と、アミノ（ＮＨ又はNH_2）基とを有する１つ以上のモノマーの重合である。いくつかの実施形態では、モノマーは、２つのハロゲン化物又は擬ハロゲン化物基で置換された１つ以上のモノマーと、２つのアミノ基で置換された１つ以上のモノマーとを含み、モノマーは、本明細書に記載されるように、反復単位を形成するための少なくとも１つのモノマーを含む。いくつかの実施形態では、モノマーは、１つのハロゲン化物又は擬ハロゲン化物化物基と、１つのアミノ基で置換されたモノマーとを含むか、又はそれらからなり得る。本方法による重合は、例えば、ＵＳ９，５９８，５３９に記載されており、その内容は、参照により本明細書に組み込まれる。
【００８３】
ポリマーフィルム
本明細書に記載されるようなキラルらせん状ポリマーを含むか又はそれからなるフィルムは、ポリマーを含む溶液の堆積によって形成され得る。溶液は、ポリマー及び１つ以上の溶媒中に溶解されたフィルムの任意の他の材料を含む。
【００８４】
溶液を基材上に堆積させ、続いて溶媒を蒸発させてもよい。溶液は、当業者に既知の任意の方法、例えば、スピンコーティング、ディップコーティング、ロールコーティング、スプレーコーティング、ドクターブレードコーティング、ワイヤーバーコーティング、又はスリットコーティングによって堆積されてもよい。
【００８５】
ポリマー鎖のアライメントは、溶液の堆積中及び／又は堆積後に制御され得る。ポリマー鎖のアライメントを制御する方法は、ドクターブレードコーティングによる堆積のうちの１つ以上、そのガラス遷移温度を上回る温度で堆積したフィルムを摩擦すること、並びに特定の方向へのアライメントを引き起こすために、細孔及び／又はチャネル又は表面パターニングなどの表面特徴を有する表面上のアライメントを含む。
【００８６】

好ましくは、ポリマーフィルムのポリマー鎖の大部分、すなわち、ポリマーフィルムのポリマー鎖の＞５０モル％は、ポリマーフィルムのアライメント軸に対して平行±１０°に配置される。

【００８７】

ポリマーフィルムのアライメントの程度は、フィルムの二色性比から決定され得る。

【００８８】

ポリマーフィルムは、エナンチオマー過剰中のキラルらせん状ポリマーからなり得るか、又は１つ以上の更なる材料、例えば、１つ以上の絶縁ポリマーを含み得る。

【００８９】

用途

図３は、本開示のいくつかの実施形態による電気光学変調器（ＥＯＭ）１を示す。

【００９０】

ＥＯＭ１は、入力３、出力４、入力３と出力４との間に延在する第１の経路５、及び入力３と出力４との間に延在する第２の経路６を有する導波路２を備える。入力３及び出力４は、それぞれ、分岐接合部の形態をとることができるが、第１及び第２の経路５、６の間で入射光７を実質的に均等に分割するために役立つ他の構造が、分岐接合構造の代わりに使用され得る。

【００９１】

図４Ａも参照すると、入射光７は実質的に非変調であり、狭い帯域幅を有する。典型的には、入射光７は、導波路２に結合された、レーザ光源、例えば、レーザダイオードから供給される。入射光は、ポリマーフィルム８を通る良好な透過及びフィルムの安定性と互換性のある任意の波長であってもよい。典型的な通信波長は、例えば、６００ｎｍ、８５０ｎｍ、１３１０ｎｍ、１５５０ｎｍなどを含む波長などを使用してもよい。

【００９２】

第１の経路５は、本明細書に記載されるポリマーを使用して形成され、第１の経路５を通過する光が通過する導波路のセクションを提供するポリマーフィルム８を含む。第１及び第２の電極９、１０は、ポリマーフィルム８にわたって電界を印加するために、ポリマーフィルム８にわたって互いに対向するように配置される。いくつかの実施形態では、電極９、１０は、ポリマーフィルム８に直接印加されてもよい。いくつかの実施形態では、電極９、１０の一方又は両方は、絶縁層１１によってポリマーフィルム８から分離されてもよい。絶縁層１１は、有機又は無機絶縁材料から形成されてもよく、電極９、１０間の誘電破壊抵抗を改善するのに役立ち得、及び／又はポリマーフィルム８によって提供される導波管セグメントのためのより従来の光学クラッドとして機能し得る。任意選択的に、フィルムは、１００ｎｍ～１０ミクロンの範囲の厚さを有する。図３には、入力３と出力４との間に中間的に延在するものとして示されているが、いくつかの例では、ポリマーフィルム８は、入力３と出力４との間に延在してもよい。電極９、１０は、ポリマーフィルム８と共拡張である必要はない。

【００９３】

好ましくは、ポリマーフィルム８のポリマー鎖は、波導伝播軸に対して４５°±１０°の角度で整列される。

【００９４】

図４Ｂも参照すると、時間変化する電圧信号$V_{sig}(t)$が電極９、１０にわたって印加され、ポリマーフィルム８にわたって時間変化する電界$E_{sig}(t)$を生成する。典型的には、時間変化する電圧信号$V_{sig}(t)$は、オン状態１２とオフ状態１３との間で切り替わるバイナリ信号である。ポリマーフィルム８の電気光学係数r_{33}の結果として、ポリマーフィルム８の屈折率ｎはまた、信号$V_{sig}(t)$のオン状態１２に対応する第１の値n_1と、信号$V_{sig}(t)$のオフ状態１３に対応する第２の値n_2との間で切り替わる。

【００９５】

また、図４Ｃを参照すると、第１及び第２の経路５、６の長さは、ポリマーフィルム８

が第２の値n_2を有するとき、第１及び第２の経路５、６に沿って通過する光がｎ×λの光路差を有し、ｎは整数ｎ≧０であるように配置される。光は建設的に干渉し、出力光１４は、比較的高い輝度状態１５を有する。対照的に、ポリマーフィルム８が第１の値n_1を有する場合、第１及び第２の経路５、６に沿って通過する光は、（ｎ±$1/2$）×λの光路差を有する。光は破壊的に干渉し、出力光１４は、比較的低輝度状態１６を有する。

【００９６】

出力光１４信号が時間変化電圧信号Ｖｓｉｇ（ｔ）の逆である二値信号であるように、低輝度状態１６に対応する第１の値n_1及び高輝度状態１５に対応する第２の値n_2を伴う図４Ｃに示されるが、他の例では、第１の値ｎ１は、代わりに、高輝度状態１５に対応し得、一方、第２の値n_2は、低輝度状態１６に対応し得る。

【００９７】

他の例では、第２の経路６はまた、ポリマーフィルム８及び対応する電極９、１０を含み得る。第１及び第２の経路５、６は、第１の経路５がオン状態１２の間に（ｎ＋$1/4$）×λの光学経路差を提供し、第２の経路が、半波長$1/2$λを含む全光学経路差について（ｍ－$1/4$）×λ（ｍの整数ｍ≧０を有する）の光学経路差を提供するように配置され得る。

【００９８】

いくつかの例では、入力３、出力４、及び両方の経路５、６は、入射光７及び／又は出力光１４を提供する波導とのインデックスマッチングを支援するために、全てポリマーフィルム８から形成され得る。

【００９９】

データを送信するための光相互接続（図示せず）は、ＥＯＭ１を含み得る。光源（図示せず）は、入射光７を提供するためにＥＯＭの入力３に結合することができる。光源（図示せず）は、例えば、発光ダイオード（ＬＥＤ）、及び有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、レーザダイオード、有機レーザダイオードなどの任意の適切な光源であり得る。光源（図示せず）は、ＥＯＭ１の入力３に直接結合されてもよく、又はより多くの光ファイバー（図示せず）又は他の波導のうちの１つを介してＥＯＭ１に結合されてもよい。ＥＯＭ１は、本明細書で前述されるように、光源によって放出された光７を変調するために使用され得る。光相互接続（図示せず）はまた、変調された出力光１４を受信するために出力４に結合された光ファイバー（図示せず）、又は任意の他の適切な導波路構造を含み得る。光相互接続（図示せず）はまた、変調された出力光１４を受信するために光ファイバー（又は他の導波路構造）の反対側の端部に結合された光検出器（図示せず）を含み得る。光検出器（図示せず）は、任意の適切なタイプ、例えば、フォトダイオードであってもよいが、少なくともＥＯＭ１の意図された変調速度と同じ速さの帯域幅（応答時間）を有するべきである。

【０１００】

光相互接続（図示せず）のいくつかの例では、入力３につながる導波路２の第２の導波路は、中間の光ファイバー（図示せず）なしで光源（図示せず）に結合され得る。追加的又は代替的に、出力４から離れる導波路２のセクションは、介在する光ファイバー（図示せず）又は別個の導波路構造への移行なしに、光検出器（図示せず）まで延在してもよい。導波路２のセクションの延長は、短距離相互接続のために好ましくてもよく、長い相互接続は、光ファイバー（図示せず）を使用してより容易に提供されてもよい。

【０１０１】

ＥＯＭ１を含む光相互接続（図示せず）は、第１のデバイスから第２のデバイスに、又はその逆にデータを伝送するために、第１のデバイス（図示せず）と第２のデバイス（図示せず）との間で接続するように構成されてもよい。第２の光相互接続は、任意選択的に、逆方向にデータを送信し得る。

【０１０２】

第１及び第２のデバイス（図示せず）は、任意のタイプのデータ処理デバイスであり得、同じタイプである必要はない。ＥＯＭ１を含む光相互接続（図示せず）は、第１のデバ

イス（図示せず）と第２のデバイス（図示せず）との間で、例えば、２つの完全に別々のコンピュータとの間、単一のコンピュータの内部コンポーネントとの間（例えば、デジタル電子プロセッサをメモリ、ハードディスクなどに接続する）、同じ回路基板に取り付けられたコンポーネントとの間、又は単一の半導体ウェハから形成されたコンポーネントとの間でさえ、ある範囲で接続するように構成されてもよい。例えば、光相互接続（図示せず）は、一対のサーバ、サーバ内の一対のラック、デジタル電子プロセッサをメモリ又は他のコンピュータコンポーネントに、マルチコアデジタル電子プロセッサの一対のコア間などに接続し得る。

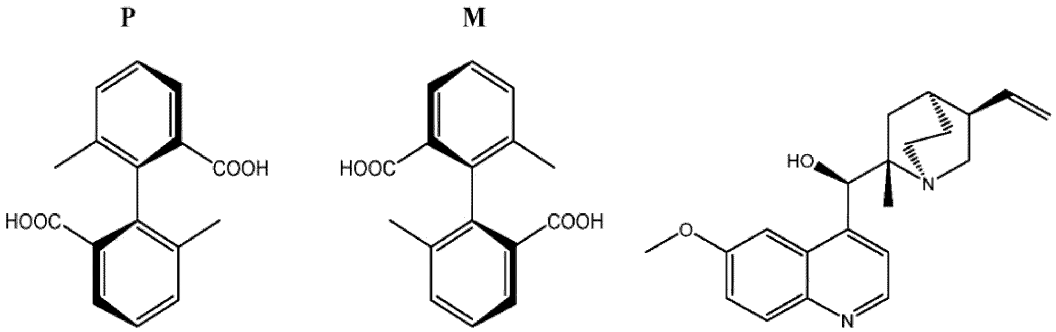
【実施例】

【０１０３】

キラル中間体形成

Ｐ及びＭのラセミ混合物を、内容が参照により本明細書に組み込まれるＪ．Ｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．２００２，６７，３４７９－３４８６に記載されるように、キニンなどのキラル補助剤で結晶化させて、ジアステロマー塩を形成してもよく、これを分離して、純粋なエナンチオマーを得てもよい。

【化１０】

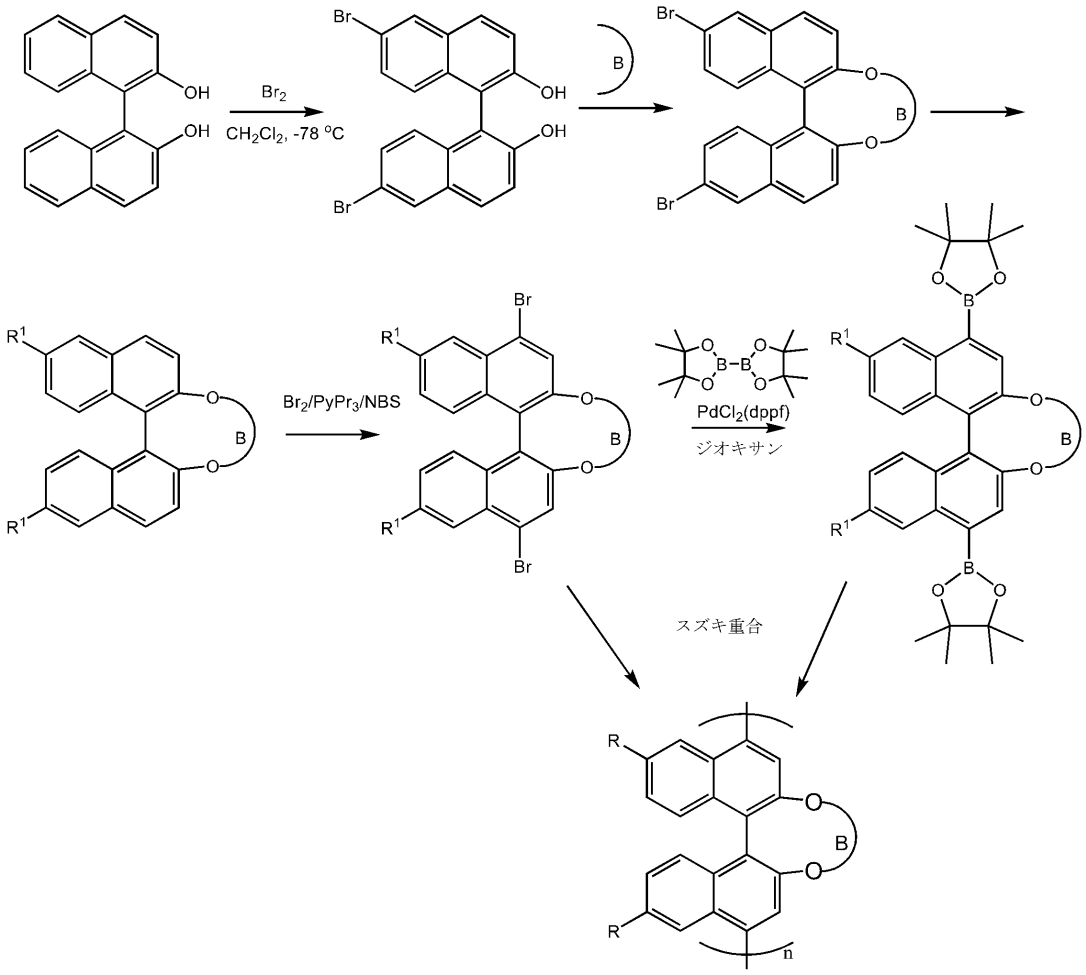


キラル補助基１

【０１０４】

ビナフチル基を含有する本明細書に記載のキラルモノマーは、一般スキーム１に例示されるように、ビノールから形成されてもよく、Ｂは、ビノール出発物質のヒドロキシル基とともに、結合基を形成する：

【化１１】

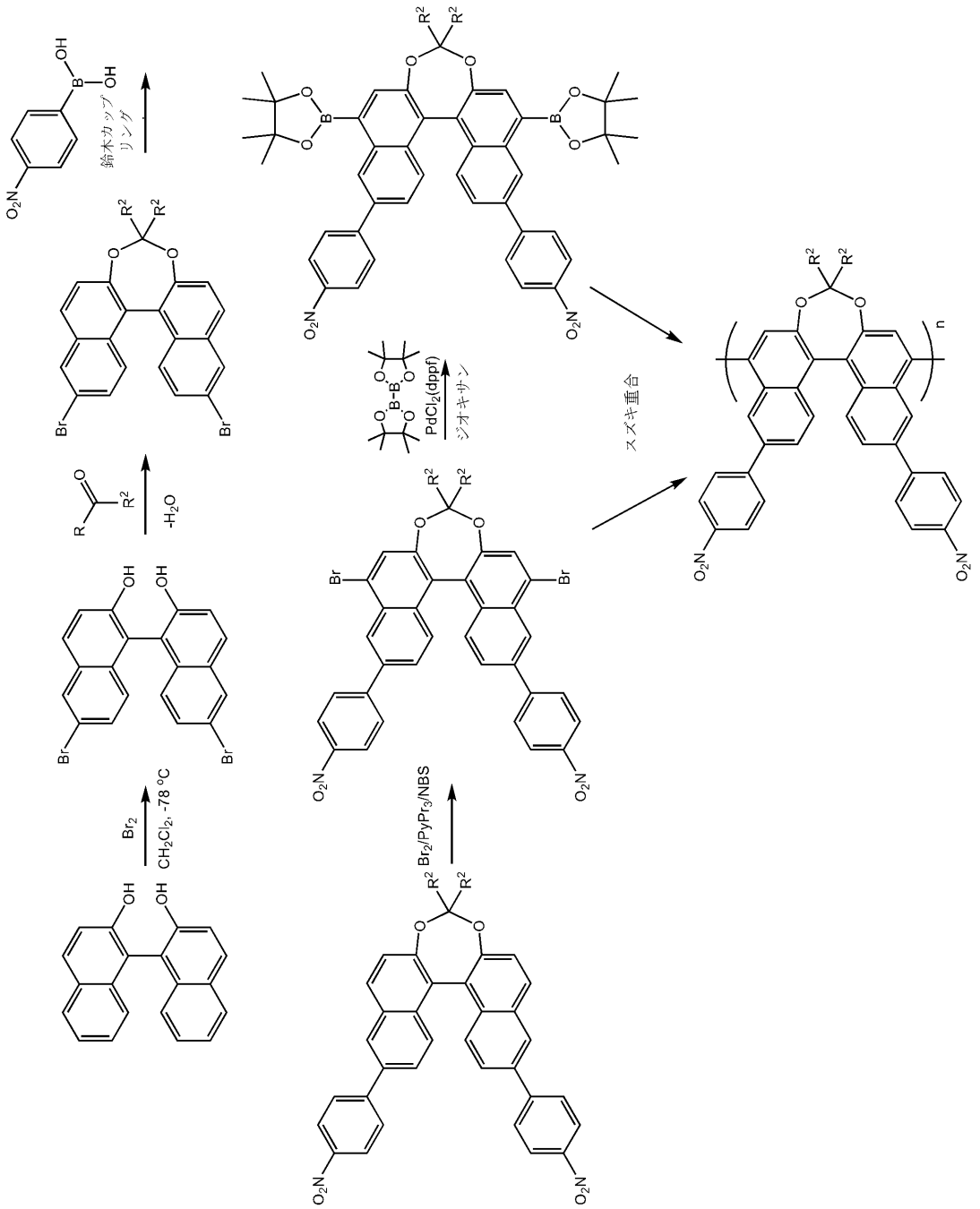


一般的スキーム１

【０１０５】

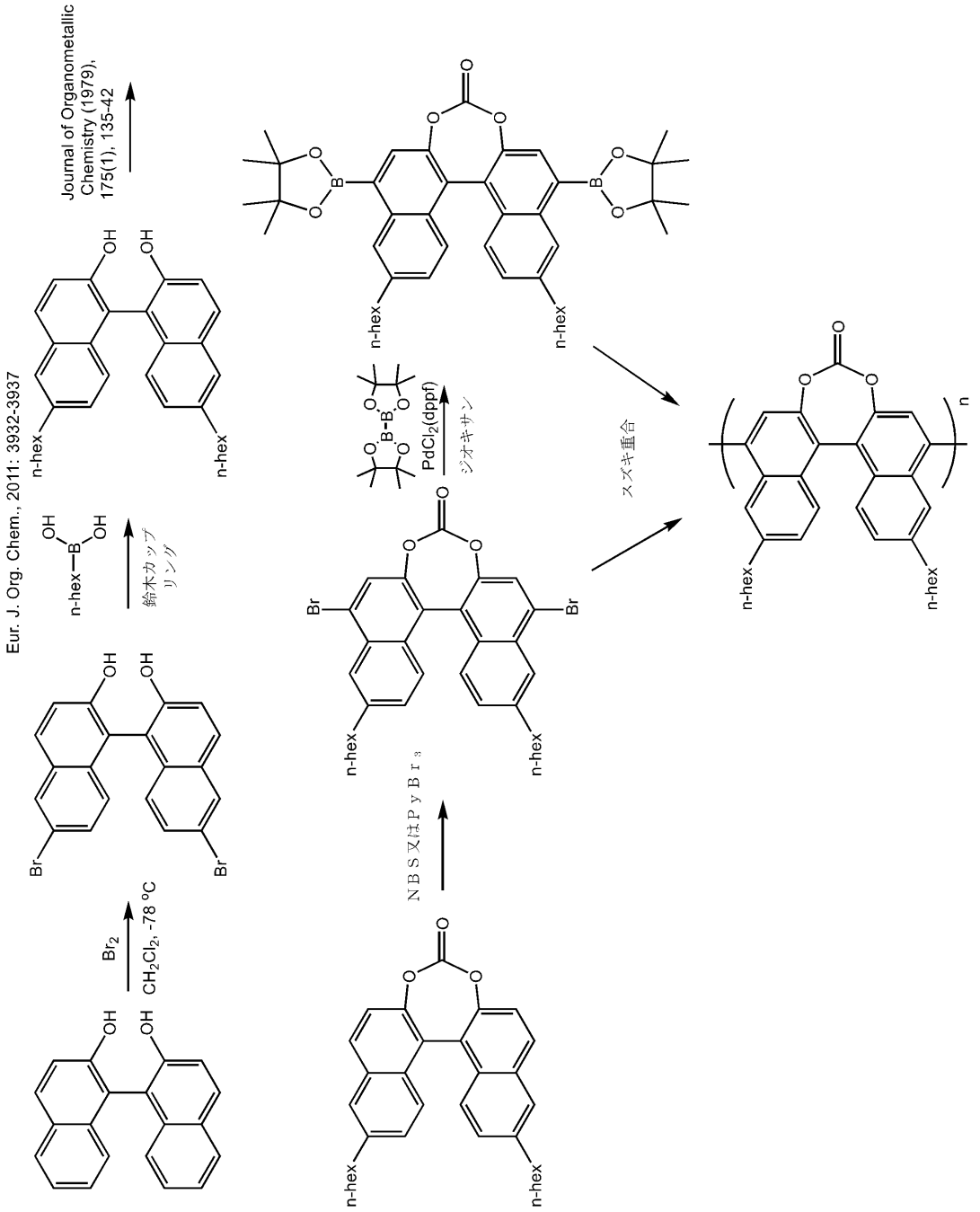
一般的スキーム１の具体例をスキーム１Ａ及びスキーム１Ｂに示す。

【化１２】


鈴木カップリング
-H2O
Br2
CH2Cl2, -78 °C
Br2/PyPr3/NBS
PdCl2(dppf)
ジオキサン
スズキ重合

スキーム１Ａ

【化１３】

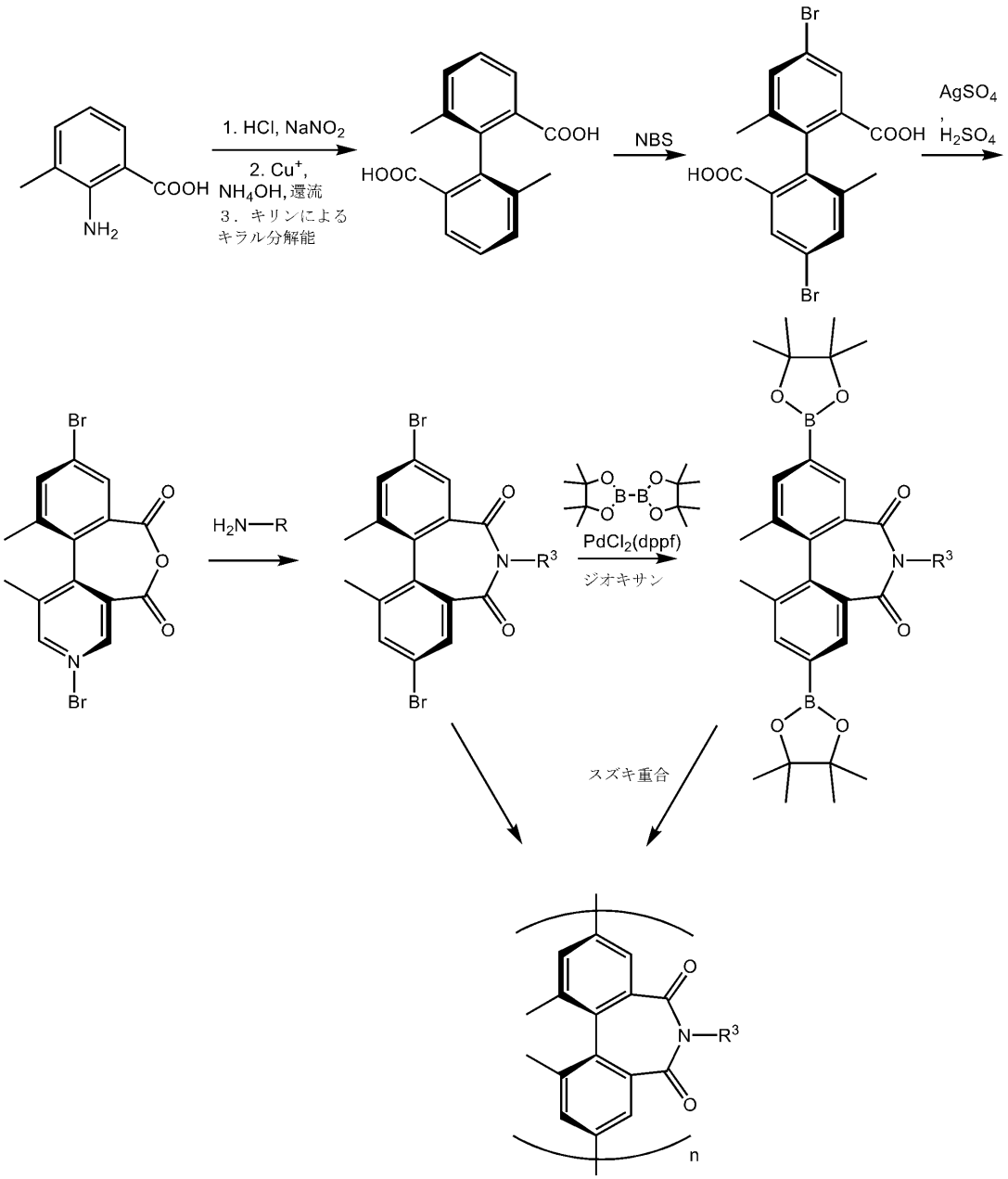


スキーム１Ｂ

【０１０６】

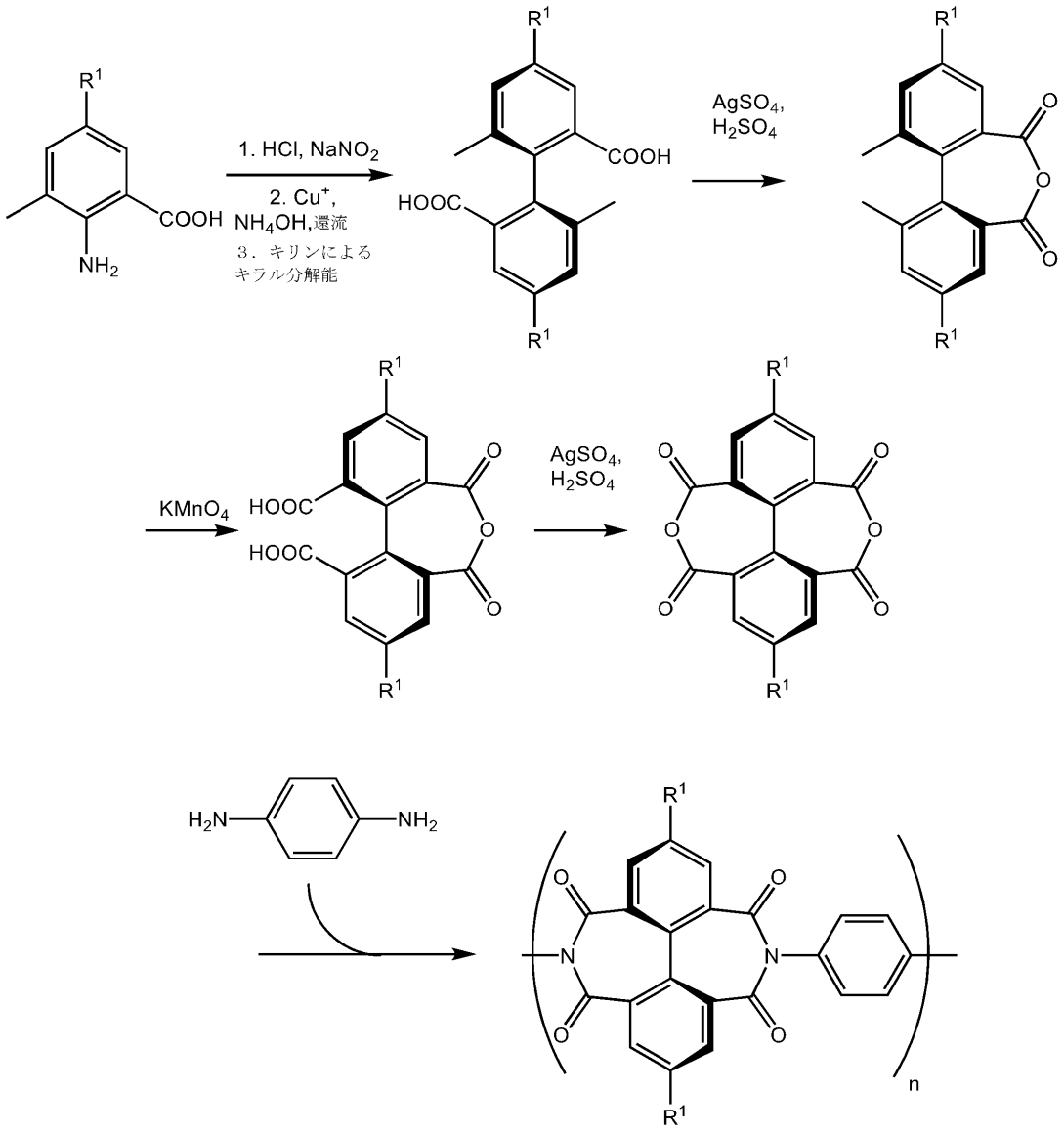
キラルビフェニル基を含有するモノマー及びポリマーの例示的な合成をスキーム２Ａ～２Ｃに示す。

【化１４】


1. HCl, NaNO2
2. Cu+, NH4OH, 還流
３．キリンによるキラル分解能
NBS
AgSO4, H2SO4
H2N—R
PdCl2(dppf)
ジオキサン
スズキ重合

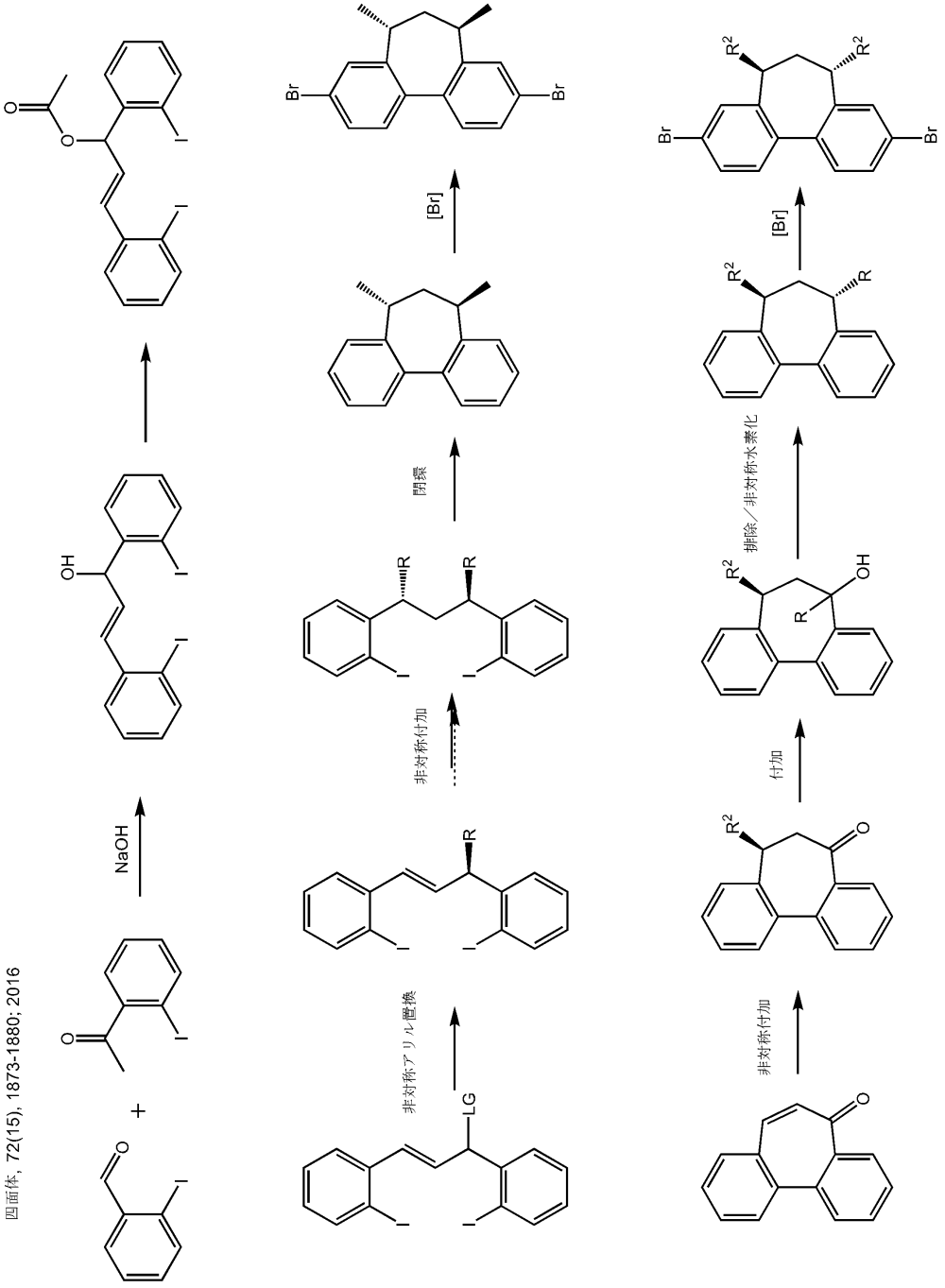
スキーム２Ａ

【化１５】


R1
COOH
NH2
1. HCl, NaNO2
2. Cu+,
NH4OH,還流
3．キリンによる
キラル分解能
HOOC
AgSO4,
H2SO4
O
KMnO4
H2N
NH2
N
n

スキーム２Ｂ

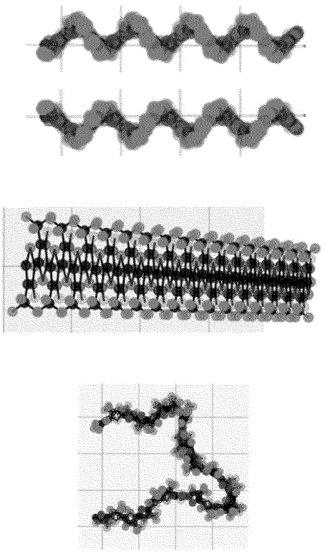
【化１６】


四面体, 72(15), 1873-1880; 2016
NaOH
非対称アリル置換
非対称付加
閉環
[Br]
付加
排除／非対称水素化
非対称付加
[Br]

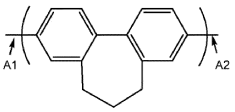
スキーム２Ｃ

【図面】

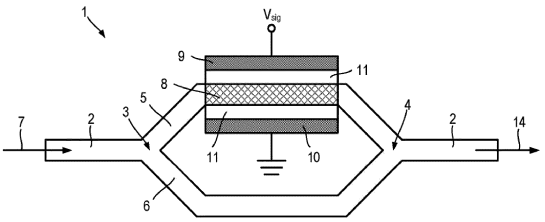
【図１】



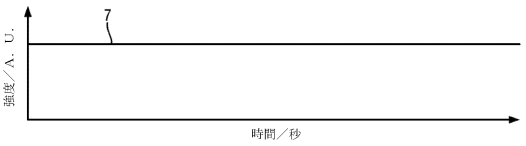
【図２】



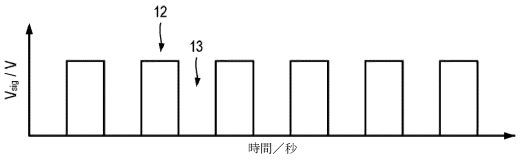
【図３】



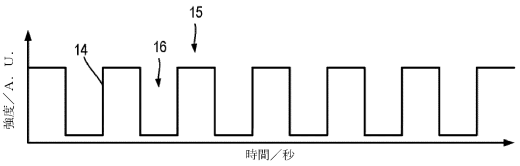
【図４Ａ】



【図４Ｂ】



【図４Ｃ】



【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2021/080224

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. C08G61/00 C08G73/10 G02F1/135 C08L79/08
ADD.

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)
C09J C08G

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

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
EPO-Internal, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2007/100129 A1 (SAKAYORI KATSUYA [JP]) 3 May 2007 (2007-05-03) claim 1 paragraph [0036] - paragraph [0037] paragraph [0074] Formula 3 claims 12, 13 -----	1-21
X	US 2010/019199 A1 (FARRAND LOUISE DIANE [GB] ET AL) 28 January 2010 (2010-01-28) claim 6 paragraph [0190] claim 9 ----- -/--	1-21

[x] Further documents are listed in the continuation of Box C. [x] 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
27 January 2022	07/02/2022

Name and mailing address of the ISA/	Authorized officer
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Laudi, Ines

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2021/080224

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2008/281108 A1 (FARRAND LOUISE DIANE [GB]) 13 November 2008 (2008-11-13) claim 6 claim 9 example 3; paragraph [0166] -----	1-21
X	US 2018/244999 A1 (CHEN KUAN-YU [TW] ET AL) 30 August 2018 (2018-08-30) table D working example 1.1; paragraph [0263] claim 6 paragraph [0227] - paragraph [0229] -----	1-11, 15-21

Form PCT/ISA/210 (continuation of second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/EP2021/080224

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 2007100129 A1	03-05-2007	JP 5103725 B2	19-12-2012
		JP 2007099951 A	19-04-2007
		US 2007100129 A1	03-05-2007
US 2010019199 A1	28-01-2010	AT 537165 T	15-12-2011
		EP 2004622 A1	24-12-2008
		JP 5295948 B2	18-09-2013
		JP 2009533360 A	17-09-2009
		KR 20090014158 A	06-02-2009
		TW 200808755 A	16-02-2008
		US 2010019199 A1	28-01-2010
		WO 2007115639 A1	18-10-2007
US 2008281108 A1	13-11-2008	AT 452127 T	15-01-2010
		CN 101277943 A	01-10-2008
		EP 1928854 A1	11-06-2008
		JP 2009514799 A	09-04-2009
		KR 20080059417 A	27-06-2008
		TW I410412 B	01-10-2013
		US 2008281108 A1	13-11-2008
		WO 2007039105 A1	12-04-2007
US 2018244999 A1	30-08-2018	CN 107949621 A	20-04-2018
		EP 3347435 A1	18-07-2018
		JP 2018538555 A	27-12-2018
		KR 20180051577 A	16-05-2018
		TW 201718835 A	01-06-2017
		US 2018244999 A1	30-08-2018
		WO 2017041872 A1	16-03-2017

Form PCT/ISA/210 (patent family annex) (April 2005)

フロントページの続き

MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IR,IS,IT,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,ME,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

(74)代理人 100183519
弁理士 櫻田 芳恵
(74)代理人 100196483
弁理士 川嵜 洋祐
(74)代理人 100160749
弁理士 飯野 陽一
(74)代理人 100160255
弁理士 市川 祐輔
(74)代理人 100172683
弁理士 綾 聡平
(74)代理人 100219265
弁理士 鈴木 崇大
(74)代理人 100203208
弁理士 小笠原 洋平
(74)代理人 100146318
弁理士 岩瀬 吉和
(74)代理人 100127812
弁理士 城山 康文
(72)発明者 ロバーツ，マシュー
イギリス国、ピーイー２９・２エックスジー、ケンブリッジシャー・ゴッドマンチェスター、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク・ユニット・１２、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド気付
(72)発明者 ガウェル，プルゼメック
イギリス国、ピーイー２９・２エックスジー、ケンブリッジシャー・ゴッドマンチェスター、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク・ユニット・１２、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド気付
(72)発明者 ベンジー，フィリップ
イギリス国、ゴッドマンチェスター・ケンブリッジシャー・ピーイー２９・２エックスジー、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク、ユニット・１２、ケンブリッジ・ディスプレイ・テクノロジー・リミテッド気付
(72)発明者 ピロー，ジョン
イギリス国、ピーイー２９・２エックスジー、ケンブリッジシャー、ゴッドマンチェスター、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク、ユニット・１２、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー 気付
(72)発明者 キャス，マイケル
イギリス国、ピーイー２９・２エックスジー、ゴッドマンチェスター、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク、ユニット・１２、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド気付
(72)発明者 キング，サイモン
イギリス国、ピーイー２９・２エックスジー、ゴッドマンチェスター、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク、ユニット・１２、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド気付
(72)発明者 ハンフリーズ，マーティン
イギリス国、ピーイー２９・２エックスジー・ゴッドマンチェスター、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク・ユニット・１２、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド気付

(72)発明者　フレッチャー，トーマス
イギリス国、ピーイー２９・２エックスジー・ケンブリッジシャー、ゴッドマンチェスター、カーディナル・ウェイ、カーディナル・パーク、ユニット・１２、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド気付

Ｆターム（参考）　2K102　AA21 BA02 BB01 BB04 BC04 DA04 DB04 DD01 EA02 EB16
EB20 EB22
4J032　CA12 CB01 CC01 CD02 CE03 CG01