



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0165943  
(43) 공개일자 2024년11월25일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09B 31/18 (2006.01) C09B 31/043 (2006.01)  
C09B 67/20 (2006.01) C09K 19/60 (2006.01)  
G02B 5/30 (2022.01) G02F 1/1335 (2019.01)
- (52) CPC특허분류  
C09B 31/18 (2013.01)  
C09B 31/043 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2024-7030866
- (22) 출원일자(국제) 2023년03월07일  
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2024년09월12일
- (86) 국제출원번호 PCT/JP2023/008490
- (87) 국제공개번호 WO 2023/181907  
국제공개일자 2023년09월28일
- (30) 우선권주장  
JP-P-2022-044888 2022년03월22일 일본(JP)

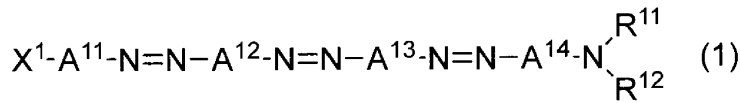
- (71) 출원인  
미쯔비시 케미컬 주식회사  
일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1초메 1방 1고
- (72) 발명자  
아사토 료우스케  
일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1초메 1방 1고  
미쯔비시 케미컬 주식회사 나이  
시가 야스시  
일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1초메 1방 1고  
미쯔비시 케미컬 주식회사 나이  
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인  
특허법인코리어나

전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 화합물, 이방성 색소막 형성용 조성물, 이방성 색소막 및 광학 소자

(57) 요약

하기 식 (1) 로 나타내는 화합물.



(식 (1) 중,  $-X^1$  은 1 개의 유기기를 나타낸다.  $-R^{11}$  은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.  $-R^{12}$  는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.  $-R^{11}$  및  $-R^{12}$  는, 일체가 되어 고리를 형성해도 된다.  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  는, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기를 나타낸다.)

(52) CPC특허분류

*C09B 67/006* (2013.01)

*C09K 19/601* (2013.01)

*G02B 5/30* (2022.01)

*G02F 1/1335* (2019.01)

(72) 발명자

**다카미 요시에**

일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1쵸메 1방 1고  
미쯔비시 케미컬 주식회사 나이

**아키야마 세이지**

일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1쵸메 1방 1고  
미쯔비시 케미컬 주식회사 나이

**오사와 테루츠네**

일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1쵸메 1방 1고  
미쯔비시 케미컬 주식회사 나이

**교지마 소우야**

일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1쵸메 1방 1고  
미쯔비시 케미컬 주식회사 나이

**오이즈미 준이치**

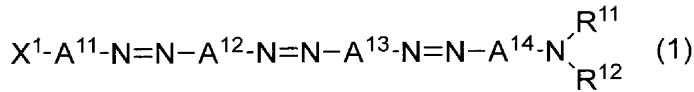
일본 도쿄도 치요다쿠 마루노우치 1쵸메 1방 1고  
미쯔비시 케미컬 주식회사 나이

**명세서**

**청구범위**

**청구항 1**

하기 식 (1) 로 나타내는 화합물.



(식 (1) 중,

$-X^1$  은 1 개의 유기기를 나타낸다.

$-R^{11}$  은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

$-R^{12}$  는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

$-R^{11}$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기는, 추가로 치환기를 갖고 있어도 된다.

또,  $-R^{11}$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.

$-R^{11}$  및  $-R^{12}$  는, 일체가 되어 고리를 형성해도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.

$-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  는, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기를 나타낸다.)

**청구항 2**

제 1 항에 있어서,

상기 식 (1) 에 있어서의  $-R^{11}$  이, 1 개 이상 5 개 이하의 불소 원자로 치환된 알킬기인, 화합물.

**청구항 3**

제 1 항에 있어서,

상기 식 (1) 에 있어서의  $-R^{11}$  이, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된, 탄소수가 1 이상 10 이하의 알킬기인, 화합물.

**청구항 4**

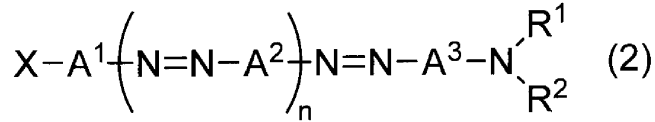
제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (1) 에 있어서의  $-X^1$  이, 수소 원자,  $-R^a$ ,  $-O-R^a$ ,  $-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-R^a$ ,  $-C(=O)-O-R^a$ ,  $-C(=O)-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-N(-R^b)-R^a$ ,  $-O-C(=O)-R^a$ ,  $-NH-C(=O)-R^a$ ,  $-N(-R^b)-C(=O)-R^a$ , 또는  $-S-R^a$  ( $-R^a$  및  $-R^b$  는, 각각 독립적으로 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기, 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기, 또는 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기를 나타낸다. 상기 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴기는, 각각 치환기를 갖고 있어도 된다. 또,  $-R^a$  및  $-R^b$  는, 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15 의 고리를 형성하고 있어도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다. 또한, 상기 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 및  $R^a$  와  $R^b$  가 일체가 되어 형성되는 고리에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$

, -C(=O)-O-, -C(=O)-NH-, -CHF-, -CF<sub>2</sub>-, -CHCl-, 또는 -CCl<sub>2</sub>- 에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.) 인, 화합물.

**청구항 5**

하기 식 (2) 로 나타내는 화합물과 중합성 액정 화합물을 포함하는 이방성 색소막 형성용 조성물.



(식 (2) 중,

-X 는 1 개의 유기기를 나타낸다.

-R<sup>1</sup> 은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

-R<sup>2</sup> 는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

-R<sup>1</sup> 의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기, -R<sup>2</sup> 의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기는, 추가로 치환기를 갖고 있어도 된다.

또, -R<sup>1</sup> 의 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기, -R<sup>2</sup> 의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는, -O-, -S-, -NH-, -C(=O)-, -C(=O)-O-, -C(=O)-NH-, -CHCl-, 또는 -CCl<sub>2</sub>- 에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.

-R<sup>1</sup> 및 -R<sup>2</sup> 는, 일체가 되어 고리를 형성해도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.

-A<sup>1</sup>-, -A<sup>2</sup>- 및 -A<sup>3</sup>- 은 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화수소 고리의 2 가기를 나타낸다.

n 은 1, 2 또는 3 을 나타낸다.

n 이 2 또는 3 인 경우, 복수의 -A<sup>2</sup>- 는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.)

**청구항 6**

제 5 항에 있어서,

상기 식 (2) 에 있어서의 -A<sup>3</sup>- 이, 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 7**

제 5 항 또는 제 6 항에 있어서,

상기 식 (2) 에 있어서의 -A<sup>2</sup>- 가, 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 8**

제 5 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (2) 에 있어서의 -A<sup>1</sup>- 이, 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 9**

제 5 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (2) 에 있어서의 n 이 2 인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 10**

제 5 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (2) 에 있어서의  $-R^1$  이, 1 개 이상 5 개 이하의 불소 원자로 치환된 알킬기인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 11**

제 5 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (2) 에 있어서의  $-R^1$  이, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된, 탄소수가 1 이상 10 이하의 알킬기인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 12**

제 5 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (2) 에 있어서의 X 가, 수소 원자,  $-R^a$ ,  $-O-R^a$ ,  $-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-R^a$ ,  $-C(=O)-O-R^a$ ,  $-C(=O)-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-N(-R^b)-R^a$ ,  $-O-C(=O)-R^a$ ,  $-NH-C(=O)-R^a$ ,  $-N(-R^b)-C(=O)-R^a$ , 또는  $-S-R^a$  ( $-R^a$  및  $-R^b$  는, 각각 독립적으로 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기, 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기, 또는 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기를 나타낸다. 상기 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴기는, 각각 치환기를 갖고 있어도 된다. 또,  $-R^a$  및  $-R^b$  는, 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15 의 고리를 형성하고 있어도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다. 또한, 상기 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 및  $R^a$  와  $R^b$  가 일체가 되어 형성되는 고리에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHF-$ ,  $-CF_2-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.) 인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 13**

제 5 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 중합성 액정 화합물이, 반복 단위 구조를 갖지 않는 저분자 중합성 액정 화합물인, 이방성 색소막 형성용 조성물.

**청구항 14**

제 5 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용하여 형성된 이방성 색소막.

**청구항 15**

제 14 항에 기재된 이방성 색소막을 포함하는 광학 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은, 조광 소자, 액정 소자 (LCD) 및 유기 일렉트로 루미네선스 소자 (OLED) 의 표시 소자에 구비되는 편광막 등에 유용한 화합물에 관한 것이다. 본 발명은 또한, 이방성 색소막 형성용 조성물, 이방성 색소막 및 광학 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] LCD 에서는, 표시에 있어서의 선광성이나 복굴절성을 제어하기 위해서, 직선 편광막 및 원 편광막이 사용되고

있다. OLED 에 있어서도, 밝은 곳에서의 외광의 반사 방지를 위해서 원 편광막이 사용되고 있다.

[0003] 종래에, 이와 같은 편광막으로서, 예를 들어 폴리비닐알코올 (PVA) 을 저농도의 요오드로 염색한 편광막 (요오드-PVA 편광막) 을 포함하는 것이 알려져 있다 (특허문헌 1). 그러나, 저농도로 한 요오드-PVA 편광판은, 사용 환경에 따라서는, 요오드가 승화되거나 변질되거나 하여, 색조가 변해 버린다는 등의 문제나, PVA 의 연신 이 완화되는 것에 따른 힘이 발생한다와 같은 문제가 있다.

[0004] 이에 대해, 색소를 함유한 액정 조성물을 도포하여 형성되는 이방성 색소막이 편광막으로서 기능하는 것도 알려져 있다 (특허문헌 2).

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0005] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 평1-105204호  
(특허문헌 0002) 일본 공개특허공보 2013-210624호

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0006] 색소를 함유한 액정 조성물을 도포하여 형성되는 편광막에 있어서는, 박막에서도 높은 광 흡수 선택 성능을 갖고, 350 nm ~ 800 nm 의 파장 영역에 있어서 광 누출이 없는 것이 소망되고 있다. 그래서, 이색비 (二色比) 가 양호한 색소가 복수 사용되고 있지만, 이 경우에 있어서, 350 nm ~ 800 nm 의 파장 영역을 망라적으로 흡수하도록, 사용하는 색소의 흡수 파장을 조절할 필요가 있다.

[0007] 본 발명은, 흡수 파장에 적합하며, 흡수 극대 파장의 단파장화가 가능하고, 얻어지는 이방성 색소막이 단파장 영역에서도 높은 이색성을 발현하는 화합물, 그것을 포함하는 이방성 색소막 형성용 조성물, 이방성 색소막 및 광학 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

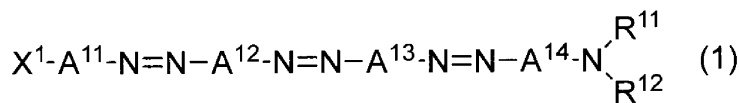
**과제의 해결 수단**

[0008] 본 발명자들은, 특정 구조를 갖는 화합물이 상기 과제를 해결할 수 있음을 알아내었다.

[0009] 본 발명은, 이하의 양태를 갖는다.

[0010] [1] 하기 식 (1) 로 나타내는 화합물.

[0011] [화학식 1]



[0012]

[0013] (식 (1) 중,

[0014]  $-X^1$  은 1 개의 유기기를 나타낸다.

[0015]  $-R^{11}$  은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

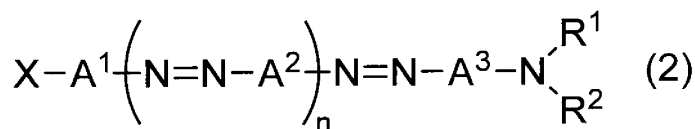
[0016]  $-R^{12}$  는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

[0017]  $-R^{11}$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기는, 추가로 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0018] 또,  $-R^{11}$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기 에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHCl-$ , 또

는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.

- [0019]  $-R^{11}$  및  $-R^{12}$  는, 일체가 되어 고리를 형성해도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0020]  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  는, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기를 나타낸다.)
- [0021] [2] 상기 식 (1) 에 있어서의  $-R^{11}$  이, 1 개 이상 5 개 이하의 불소 원자로 치환된 알킬기인, [1] 에 기재된 화합물.
- [0022] [3] 상기 식 (1) 에 있어서의  $-R^{11}$  이, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된, 탄소수가 1 이상 10 이하의 알킬기인, [1] 에 기재된 화합물.
- [0023] [4] 상기 식 (1) 에 있어서의  $-X^1$  이, 수소 원자,  $-R^a$ ,  $-O-R^a$ ,  $-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-R^a$ ,  $-C(=O)-O-R^a$ ,  $-C(=O)-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-N(-R^b)-R^a$ ,  $-O-C(=O)-R^a$ ,  $-NH-C(=O)-R^a$ ,  $-N(-R^b)-C(=O)-R^a$ , 또는  $-S-R^a$  ( $-R^a$  및  $-R^b$  는, 각각 독립적으로 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기, 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기, 또는 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기를 나타낸다. 상기 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴기는, 각각 치환기를 갖고 있어도 된다. 또,  $-R^a$  및  $-R^b$  는, 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15 의 고리를 형성하고 있어도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다. 또한, 상기 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 및  $R^a$  와  $R^b$  가 일체가 되어 형성되는 고리에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHF-$ ,  $-CF_2-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.) 인, [1] ~ [3] 중 어느 하나에 기재된 화합물.
- [0024] [5] 하기 식 (2) 로 나타내는 화합물과 중합성 액정 화합물을 포함하는 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0025] [화학식 2]



- [0026] (식 (2) 중,
- [0027]  $-X$  는 1 개의 유기기를 나타낸다.
- [0028]  $-R^1$  은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.
- [0029]  $-R^2$  는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.
- [0030]  $-R^1$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^2$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기는, 추가로 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0031] 또,  $-R^1$  의 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^2$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.
- [0032]  $-R^1$  및  $-R^2$  는, 일체가 되어 고리를 형성해도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0033]  $-A^1-$ ,  $-A^2-$  및  $-A^3-$  은 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화수소 고리의 2 가기를 나타낸다.
- [0034]  $n$  은 1, 2 또는 3 을 나타낸다.

- [0036]  $n$  이 2 또는 3 인 경우, 복수의  $-A^2-$  는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.)
- [0037] [6] 상기 식 (2) 에 있어서의  $-A^3-$  이, 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기인, [5] 에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0038] [7] 상기 식 (2) 에 있어서의  $-A^2-$  가, 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기인, [5] 또는 [6] 에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0039] [8] 상기 식 (2) 에 있어서의  $-A^1-$  이, 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기인, [5] ~ [7] 중 어느 하나에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0040] [9] 상기 식 (2) 에 있어서의  $n$  이 2 인, [5] ~ [8] 중 어느 하나에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0041] [10] 상기 식 (2) 에 있어서의  $-R^1$  이, 1 개 이상 5 개 이하의 불소 원자로 치환된 알킬기인, [5] ~ [9] 중 어느 하나에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0042] [11] 상기 식 (2) 에 있어서의  $-R^1$  이, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된, 탄소수가 1 이상 10 이하의 알킬기인, [5] ~ [9] 중 어느 하나에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0043] [12] 상기 식 (2) 에 있어서의  $X$  가, 수소 원자,  $-R^a$ ,  $-O-R^a$ ,  $-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-R^a$ ,  $-C(=O)-O-R^a$ ,  $-C(=O)-NH-R^a$ ,  $-C(=O)-N(-R^b)-R^a$ ,  $-O-C(=O)-R^a$ ,  $-NH-C(=O)-R^a$ ,  $-N(-R^b)-C(=O)-R^a$ , 또는  $-S-R^a$  ( $-R^a$  및  $-R^b$  는, 각각 독립적으로 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기, 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기, 또는 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기를 나타낸다. 상기 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴기는, 각각 치환기를 갖고 있어도 된다. 또,  $-R^a$  및  $-R^b$  는, 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15 의 고리를 형성하고 있어도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다. 또한, 상기 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 및  $R^a$  와  $R^b$  가 일체가 되어 형성되는 고리에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHF-$ ,  $-CF_2-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시, 메타크릴로일옥시, 글리시딜옥시의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.) 인, [5] ~ [11] 중 어느 하나에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0044] [13] 상기 중합성 액정 화합물이, 반복 단위 구조를 갖지 않는 저분자 중합성 액정 화합물인, [5] ~ [12] 중 어느 하나에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물.
- [0045] [14] [5] ~ [13] 중 어느 하나에 기재된 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용하여 형성된 이방성 색소막.
- [0046] [15] [14] 에 기재된 이방성 색소막을 포함하는 광학 소자.

### 발명의 효과

- [0047] 본 발명의 화합물은, 흡수 파장의 조절로서 흡수 극대 파장의 단파장화가 가능하고, 또한 높은 이색성을 발현하는 것이다.
- [0048] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 상기 화합물을 포함하며, 높은 이색비를 실현할 수 있다.
- [0049] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용한 이방성 색소막 및 광학 소자에 따르면, 우수한 광학 성능, 특히 충분한 이색비를 실현할 수 있다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0050] 이하, 본 발명의 실시 형태를 구체적으로 설명한다. 본 발명은, 이하의 실시 형태에 한정되는 것이 아니라, 그 요지의 범위 내에서 다양하게 변경하여 실시할 수 있다.
- [0051] 본 발명에서 말하는 이방성 색소막이란, 이방성 색소막의 두께 방향 및 임의의 직교하는 면내 2 방향의 입체 좌표계에 있어서의 합계 3 방향에서 선택되는, 임의의 2 방향에 있어서의 전자기적 성질에 이방성을 갖는 색소막이다. 전자기학적 성질로서는, 예를 들어 흡수, 굴절 등의 광학적 성질, 저항, 용량 등의 전기적 성질을 들 수 있다.

[0052] 흡수, 굴절 등의 광학적 이방성을 갖는 막으로는, 예를 들어, 직선 편광막, 원 편광막 등의 편광막, 위상차막, 도전 이방성 색소막을 들 수 있다. 본 발명의 이방성 색소막은, 편광막, 또는 도전 이방성 색소막으로서 사용되는 것이 바람직하고, 편광막에 사용되는 것이 보다 바람직하다.

[0053] 본 발명에서 말하는 이방성 색소막 형성용 조성물은, 색소 및 중합성 액정 화합물을 포함한다.

[0054] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 상분리를 일으키지 않는 상태이면, 용액이어도 되고, 액정이어도 되고, 분산 상태여도 된다. 이방성 색소막 형성용 조성물로서는, 기재에 대한 도포가 용이하다는 관점에서, 용액인 것이 바람직하다. 한편, 이방성 색소막 형성용 조성물로부터 용제를 제거한 고형분 성분은, 후술하는 바와 같이 기판 상에 배향시킨다는 관점에서, 임의의 온도에서 액정상의 상태인 것이 바람직하다.

[0055] 본 발명에 있어서 액정상의 상태라 함은, 구체적으로는 「액정의 기초와 응용」(마츠모토 쇼이치, 츠노다 이치로 저 ; 1991년)의 1 ~ 16 페이지에 기재되어 있는 바와 같이, 액체와 결정의 쌍방 또는 중간의 성질을 나타내는 액정 상태이며, 네마틱상, 스멕틱상, 콜레스테릭상, 또는 디스코틱상인 것을 말한다.

[0056] 본 발명에 있어서 색소란, 가시광 영역 (350 nm ~ 800 nm) 의 파장의 적어도 일부를 흡수하는 물질 또는 화합물이다. 본 발명에 사용할 수 있는 색소로서는, 이색성 색소를 들 수 있다.

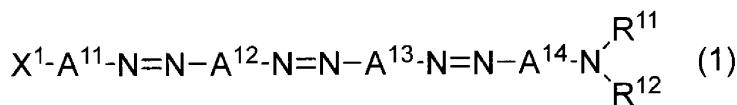
[0057] 이색성 색소란, 분자의 장축 방향에 있어서의 흡광도와, 단축 방향에 있어서의 흡광도가 상이한 성질을 갖는 색소를 말한다.

[0058] 색소는, 액정성을 갖는 색소여도 되고, 액정성을 갖지 않아도 된다. 액정성을 갖는다 함은, 임의의 온도에서 액정상을 발현하는 것을 말한다.

[0059] [화합물]

[0060] 본 발명의 화합물은, 하기 식 (1) 로 나타내는 화합물이다.

[0061] [화학식 3]



[0062]

[0063] 식 (1) 중,

[0064]  $-X^1$  은 1 개의 유기기를 나타낸다.

[0065]  $-R^{11}$  은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

[0066]  $-R^{12}$  는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

[0067]  $-R^{11}$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기는, 추가로 치환기를 갖고 있어도 된다.

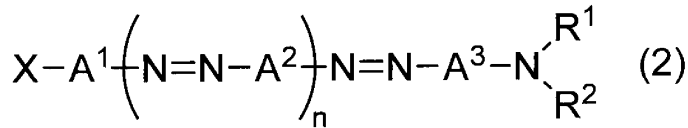
[0068] 또,  $-R^{11}$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.

[0069]  $-R^{11}$  및  $-R^{12}$  는, 일체가 되어 고리를 형성해도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0070]  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  는, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기를 나타낸다.

[0071] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 하기 식 (2) 로 나타내는 화합물과 중합성 액정 화합물을 포함한다.

[0072] [화학식 4]



[0073]

[0074] 식 (2) 중,

[0075] -X 는 1 개의 유기기를 나타낸다.

[0076] -R<sup>1</sup> 은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

[0077] -R<sup>2</sup> 는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

[0078] -R<sup>1</sup> 의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기, -R<sup>2</sup> 의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기는, 추가로 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0079] 또, -R<sup>1</sup> 의 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기, -R<sup>2</sup> 의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는, -O-, -S-, -NH-, -C(=O)-, -C(=O)-O-, -C(=O)-NH-, -CHCl-, 또는 -CCl<sub>2</sub>- 에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.

[0080] -R<sup>1</sup> 및 -R<sup>2</sup> 는, 일체가 되어 고리를 형성해도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0081] -A<sup>1</sup>-, -A<sup>2</sup>- 및 -A<sup>3</sup>- 은 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화수소 고리의 2 가기를 나타낸다.

[0082] n 은 1, 2 또는 3 을 나타낸다.

[0083] n 이 2 또는 3 인 경우, 복수의 -A<sup>2</sup>- 는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0084] 이하에 있어서, 식 (1) 로 나타내는 화합물을 「화합물 (1)」 이라고 칭하는 경우가 있다. 식 (2) 로 나타내는 화합물을 「화합물 (2)」 라고 칭하는 경우가 있다. 또한, 화합물 (1) 과 화합물 (2) 를 통틀어 「본 발명의 화합물」 이라고 칭하는 경우가 있다.

[0085] (-X<sup>1</sup>, -X)

[0086] 식 (1) 에 있어서 -X<sup>1</sup> 은 1 개의 유기기를 나타낸다.

[0087] 식 (2) 에 있어서 -X 는 1 개의 유기기를 나타낸다.

[0088] -X<sup>1</sup>, -X 에 있어서의 1 개의 유기기로서는, 예를 들어, 수소 원자, 하이드록시기, 아미노기, 시아노기, 카르바모일기, 니트로기, 할로젠 원자, -R<sup>a</sup>, -O-R<sup>a</sup>, -NH-R<sup>a</sup>, -C(=O)-R<sup>a</sup>, -C(=O)-O-R<sup>a</sup>, -C(=O)-NH-R<sup>a</sup>, -C(=O)-N(-R<sup>b</sup>)-R<sup>a</sup>, -O-C(=O)-R<sup>a</sup>, -NH-C(=O)-R<sup>a</sup>, -N(-R<sup>b</sup>)-C(=O)-R<sup>a</sup>, -S-R<sup>a</sup> 를 들 수 있다. 높은 이색비가 얻어지는 경향에서, 수소 원자, -R<sup>a</sup>, -O-R<sup>a</sup>, -NH-R<sup>a</sup>, -C(=O)-R<sup>a</sup>, -C(=O)-O-R<sup>a</sup>, -C(=O)-NH-R<sup>a</sup>, -C(=O)-N(-R<sup>b</sup>)-R<sup>a</sup>, -O-C(=O)-R<sup>a</sup>, -NH-C(=O)-R<sup>a</sup>, -N(-R<sup>b</sup>)-C(=O)-R<sup>a</sup>, -S-R<sup>a</sup> 가 바람직하고, -R<sup>a</sup>, -O-R<sup>a</sup>, -C(=O)-R<sup>a</sup>, -C(=O)-O-R<sup>a</sup>, -O-C(=O)-R<sup>a</sup> 가 보다 바람직하다.

[0089] 여기서, -R<sup>a</sup> 및 -R<sup>b</sup> 는, 각각 독립적으로 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15, 바람직하게는 1 ~ 10, 보다 바람직하게는 1 ~ 6 의 알킬기, 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14, 바람직하게는 5 ~ 10 인 시클로알킬기, 또는 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14, 바람직하게는 5 ~ 10 인 아릴기를 나타낸다.

[0090] 상기 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴기는, 각각 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0091] 또, -R<sup>a</sup> 및 -R<sup>b</sup> 는, 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15, 바람직하게는 2 ~ 10 의 고리를 형성하고 있어도 되고, 그

고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0092]  $-R^a$  및  $-R^b$  에 있어서의, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기로서는, 예를 들어, n-프로필기, n-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, 1-메틸에틸기, 1,1-디메틸에틸기, 1-메틸프로필기, 2-메틸프로필기, 1,2-디메틸프로필기, 2,2-디메틸프로필기, 1,2,2-트리메틸프로필기, 1-메틸부틸기, 2-메틸부틸기, 3-메틸부틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2,3-디메틸부틸기, 1,3-디메틸부틸기, 1,3,3-트리메틸부틸기, 2,3,3-트리메틸부틸기, 2,2,3-트리메틸부틸기, 1,2,2-트리메틸부틸기, 4-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 1-메틸펜틸기, 4,4-디메틸펜틸기, 3,3-디메틸펜틸기, 2,2-디메틸펜틸기, 3,4-디메틸펜틸기, 2,4-디메틸펜틸기, 1,4-디메틸펜틸기, 3,4,4-트리메틸펜틸기, 2,4,4-트리메틸펜틸기, 1,4,4-트리메틸펜틸기, 3,3,4-트리메틸펜틸기, 2,3,3-트리메틸펜틸기, 1,3,3-트리메틸펜틸기, 2,2,4-트리메틸펜틸기, 2,2,3-트리메틸펜틸기, 1,2,2-트리메틸펜틸기, 2,3,4-트리메틸펜틸기, 5-메틸헥실기, 4-메틸헥실기, 3-메틸헥실기, 2-메틸헥실기, 1-메틸헥실기, 5,5-디메틸헥실기, 4,4-디메틸헥실기, 3,3-디메틸헥실기, 2,2-디메틸헥실기, 4,5-디메틸헥실기, 3,5-디메틸헥실기, 2,5-디메틸헥실기, 1,5-디메틸헥실기, 1,4-디메틸헥실기, 4,5,5-트리메틸헥실기, 3,5,5-트리메틸헥실기, 2,5,5-트리메틸헥실기, 1,5,5-트리메틸헥실기, 6-메틸헵틸기, 5-메틸헵틸기, 6,6-디메틸헵틸기, 5,6-디메틸헵틸기, 4,6-디메틸헵틸기, 3,6-디메틸헵틸기, 2,6-디메틸헵틸기, 1,6-디메틸헵틸기, 6-메틸옥틸기, 3-메틸옥틸기, 1-메틸옥틸기, 1-메틸노닐기를 들 수 있다. 본 발명에서 사용하는 중합성 액정 화합물과의 분자 배향이 양호해지는 관점에서, n-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 2-메틸프로필기, 3-메틸부틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2,3,3-트리메틸부틸기, 4-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4,4-디메틸펜틸기, 3,3-디메틸펜틸기, 2,4-디메틸펜틸기, 3,4,4-트리메틸펜틸기, 2,4,4-트리메틸펜틸기, 3,3,4-트리메틸펜틸기, 2,3,3-트리메틸펜틸기, 5-메틸헥실기, 4-메틸헥실기, 3-메틸헥실기, 2-메틸헥실기, 5,5-디메틸헥실기, 4,4-디메틸헥실기, 3,3-디메틸헥실기, 3,5,5-트리메틸헥실기, 5-메틸헵틸기, 6-메틸옥틸기, 3-메틸옥틸기, 1-메틸옥틸기, 1-메틸노닐기가 바람직하다.

[0093]  $-R^a$  및  $-R^b$  에 있어서의, 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기에 있어서의 시클로알칸 고리로서는, 예를 들어, 시클로프로판 고리, 시클로부탄 고리, 시클로펜탄 고리, 시클로헥산 고리, 시클로헵탄 고리, 시클로옥탄 고리, 시클로헥센 고리, 노르보르난 고리, 보르난 고리, 아다만탄 고리, 테트라하이드로나프탈렌 고리, 비시클로[2.2.2]옥탄 고리, 4-메틸시클로헥산 고리, 4-에틸시클로헥산 고리, 4-프로필시클로헥산 고리, 4-부틸시클로헥산 고리를 들 수 있다.

[0094]  $-R^a$  및  $-R^b$  에 있어서의, 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기로서는, 예를 들어 페닐기, 나프틸기를 들 수 있다.

[0095]  $-R^a$  및  $-R^b$  가 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15 의 고리를 형성하는 경우, 그 고리로서는, 예를 들어, 시클로프로판 고리, 시클로부탄 고리, 시클로펜탄 고리, 시클로헥산 고리, 시클로헵탄 고리, 시클로옥탄 고리, 시클로헥센 고리, 노르보르난 고리, 보르난 고리, 아다만탄 고리, 테트라하이드로나프탈렌 고리, 비시클로[2.2.2]옥탄 고리를 들 수 있다.

[0096] 상기 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기, 상기 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기, 상기 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기, 상기  $-R^a$  및  $-R^b$  가 일체가 되어 형성한 탄소수 2 ~ 15 의 고리에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHF-$ ,  $-CF_2-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.

[0097]  $-R^a$  및  $-R^b$  에 있어서의, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기에 허용되는 치환기로서는, 예를 들어,  $-OH$ ,  $-OR^f$ ,  $-O-C(=O)-R^f$ ,  $-NH_2$ ,  $-NH-R^f$ ,  $-N(-R^g)-R^f$ ,  $-C(=O)-R^f$ ,  $-C(=O)-O-R^f$ ,  $-C(=O)-NH_2$ ,  $-C(=O)-NH-R^f$ ,  $-C(=O)-N(-R^g)-R^f$ ,  $-SH$ ,  $-SR^f$ , 술폰모일기, 카르복시기, 시아노기, 니트로기, 할로젠, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기 등의 중합성기를 들 수 있다.

[0098]  $-R^f$  및  $-R^g$  는, 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 15, 바람직하게는 1 ~ 10 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.

- [0099] 상기  $-R^f$  및  $-R^g$  인 탄소수 1 ~ 15 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-N(-R^h)-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHF-$ ,  $-CF_2-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다. 여기서,  $-R^h$  는, 탄소수 1 ~ 6 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.
- [0100]  $-R^a$  및  $-R^b$  에 있어서의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기에 허용되는 치환기로서는,  $-O-R^f$  가 바람직하다.  $-O-R^f$  로서는, 예를 들어, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, n-부톡시기, n-펜톡시기, n-헥속시기, n-헵톡시기, n-옥톡시기, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기를 들 수 있다.
- [0101]  $-R^a$  및  $-R^b$  에 있어서의 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기, 그리고 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기에 허용되는 치환기로서는, 예를 들어,  $-R^i$ ,  $-OH$ ,  $-O-R^i$ ,  $-O-C(=O)-R^i$ ,  $-NH_2$ ,  $-NH-R^i$ ,  $-N(-R^j)-R^i$ ,  $-C(=O)-R^i$ ,  $-C(=O)-O-R^i$ ,  $-C(=O)-NH_2$ ,  $-C(=O)-NH-R^i$ ,  $-C(=O)-N(-R^j)-R^i$ ,  $-SH$ ,  $-S-R^i$ , 트리플루오로메틸기, 술폰모일기, 카르복시기, 시아노기, 니트로기, 할로젠을 들 수 있다. 여기서,  $-R^i$  및  $-R^j$  는, 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 10, 바람직하게는 1 ~ 5 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.
- [0102]  $-R^a$  및  $-R^b$  에 있어서의 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 시클로알킬기, 그리고 고리를 구성하는 원자의 수가 5 ~ 14 인 아릴기에 허용되는 치환기로서는,  $-R^i$ ,  $-O-R^i$  가 바람직하다.  $-R^i$ ,  $-O-R^i$  로서는, 예를 들어, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, n-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 2-에틸헥실기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, n-부톡시기, n-펜톡시기, n-헥속시기, n-헵톡시기, n-옥톡시기, 2-에틸헥실옥시기, 5,5-디메틸-3-메틸헥실옥시기를 들 수 있다.
- [0103]  $-R^a$  와  $-R^b$  가 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15 의 고리를 형성하는 경우, 그 고리에 허용되는 치환기로서는, 예를 들어,  $-R^i$ ,  $-OH$ ,  $-O-R^i$ ,  $-O-C(=O)-R^i$ ,  $-NH_2$ ,  $-NH-R^i$ ,  $-N(-R^j)-R^i$ ,  $-C(=O)-R^i$ ,  $-C(=O)-O-R^i$ ,  $-C(=O)-NH_2$ ,  $-C(=O)-NH-R^i$ ,  $-C(=O)-N(-R^j)-R^i$ ,  $-SH$ ,  $-S-R^i$ , 트리플루오로메틸기, 술폰모일기, 카르복시기, 시아노기, 니트로기, 할로젠을 들 수 있다. 여기서,  $-R^i$  및  $-R^j$  는, 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 10, 바람직하게는 1 ~ 5 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.
- [0104]  $-R^a$  와  $-R^b$  가 일체가 되어 탄소수 2 ~ 15 의 고리를 형성하는 경우, 그 고리에 허용되는 치환기로서는,  $-R^i$ ,  $-O-R^i$  가 바람직하다.  $-R^i$ ,  $-O-R^i$  로서는, 예를 들어, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, n-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 2-에틸헥실기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, n-부톡시기, n-펜톡시기, n-헥속시기, n-헵톡시기, n-옥톡시기, 2-에틸헥실옥시기, 5,5-디메틸-3-메틸헥실옥시기를 들 수 있다.
- [0105]  $-X^1$ ,  $-X$  에 있어서의 1 개의 유기기로서는, 중합성 액정 화합물과의 분자 배향을 양호하게 시킨다는 관점의 경우에는, 중합성기를 갖지 않는 것이 바람직하다. 한편,  $-X^1$ ,  $-X$  에 있어서의 1 개의 유기기로서는, 이방성 색소막의 기계 강도를 향상시킨다는 관점의 경우에는, 중합성기를 갖는 것이 바람직하다.
- [0106] ( $-R^{11}$ ,  $-R^{12}$ ,  $-R^1$ ,  $-R^2$ )
- [0107] 식 (1) 에 있어서,  $-R^{11}$  은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.
- [0108]  $-R^{12}$  는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.
- [0109]  $-R^{11}$  및  $-R^{12}$  는, 일체가 되어 고리를 형성해도 된다.
- [0110] 식 (2) 에 있어서,  $-R^1$  은 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.
- [0111]  $-R^2$  는 수소 원자, 알킬기, 또는 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 나타낸다.

- [0112]  $-R^1$  및  $-R^2$  는, 일체가 되어 고리를 형성해도 되고, 그 고리는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0113]  $-R^{11}$ ,  $-R^1$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기의 탄소수는, 본 발명에서 사용하는 중합성 액정 화합물과의 분자 배향성이 양호해지는 관점에서, 1 이상 10 이하가 바람직하고, 1 이상 6 이하가 보다 바람직하고, 2 이상 4 이하가 더욱 바람직하다. 그 알킬기는 분기를 갖고 있어도 되고, 직사슬이어도 되고, 고리형의 시클로알킬기여도 된다.
- [0114] 또, 용해성의 관점에서, 그 알킬기가 갖는 불소 원자수는 5 개 이하가 바람직하고, 3 이하가 보다 바람직하고, 2 이하가 더욱 바람직하다.
- [0115]  $-R^{11}$ ,  $-R^1$  로서는, 예를 들어, 1-플루오로메틸기, 1-플루오로에틸기, 2-플루오로에틸기, 1,2-디플루오로에틸기, 2,2-디플루오로에틸기, 2,2,2-트리플루오로에틸기, 1,2,2,2-테트라플루오로에틸기, 1,1,2,2,2-펜타플루오로에틸기, 1-플루오로프로필기, 2-플루오로프로필기, 3-플루오로프로필기, 2,2-디플루오로프로필기, 3,3-디플루오로프로필기, 3,3,3-트리플루오로프로필기, 2,3,3,3-테트라플루오로프로필기, 2,2,3,3,3-펜타플루오로프로필기, 1-플루오로부틸기, 2-플루오로부틸기, 3-플루오로부틸기, 4-플루오로부틸기, 1,1-디플루오로부틸기, 2,2-디플루오로부틸기, 3,3-디플루오로부틸기, 4,4-디플루오로부틸기, 4,4,4-트리플루오로부틸기, 3,4,4,4-테트라플루오로부틸기, 3,3,4,4,4-펜타플루오로부틸기, 1-플루오로펜틸기, 2-플루오로펜틸기, 3-플루오로펜틸기, 4-플루오로펜틸기, 5-플루오로펜틸기, 1,1-디플루오로펜틸기, 2,2-디플루오로펜틸기, 3,3-디플루오로펜틸기, 4,4-디플루오로펜틸기, 5,5-디플루오로펜틸기, 5,5,5-트리플루오로펜틸기, 4,5,5,5-테트라플루오로펜틸기, 4,4,5,5,5-펜타플루오로펜틸기, 1-플루오로헥실기, 2-플루오로헥실기, 3-플루오로헥실기, 4-플루오로헥실기, 5-플루오로헥실기, 6-플루오로헥실기, 6,6-디플루오로헥실기, 6,6,6-트리플루오로헥실기, 2-플루오로-1-메틸에틸기, 2,2-디플루오로-1-메틸에틸기, 2,2,2-트리플루오로-1-메틸에틸기, 2-플루오로-1,1-디메틸에틸기, 2,2-디플루오로-1,1-디메틸에틸기, 2,2,2-트리플루오로-1,1-디메틸에틸기, 3-플루오로-1-메틸프로필기, 3,3-디플루오로-1-메틸프로필기, 3,3,3-트리플루오로-1-메틸프로필기, 3-플루오로-2-메틸프로필기, 3,3-디플루오로-2-메틸프로필기, 3,3,3-트리플루오로-2-메틸프로필기, 3-플루오로-1,2-디메틸프로필기, 3,3-디플루오로-1,2-디메틸프로필기, 3,3,3-트리플루오로-1,2-디메틸프로필기, 3-플루오로-2,2-디메틸프로필기, 3,3-디플루오로-2,2-디메틸프로필기, 3,3,3-트리플루오로-2,2-디메틸프로필기, 3-플루오로-1,2,2-트리메틸프로필기, 3,3-디플루오로-1,2,2-트리메틸프로필기, 3,3,3-트리플루오로-1,2,2-트리메틸프로필기, 2-플루오로시클로헥실기, 3-플루오로시클로헥실기, 4-플루오로시클로헥실기, 2-플루오로-4-메틸시클로헥실기, 3-플루오로-4-메틸시클로헥실기, 2-플루오로-4-에틸시클로헥실기, 3-플루오로-4-에틸시클로헥실기, 2-플루오로-4-프로필시클로헥실기, 3-플루오로-4-프로필시클로헥실기, 2-플루오로-4-부틸시클로헥실기, 3-플루오로-4-부틸시클로헥실기를 들 수 있다. 그 중에서도, 중합성 액정 화합물과의 분자 배향성과 용해성의 밸런스를 취하는 관점에서, 2-플루오로에틸기, 2,2-디플루오로에틸기, 2,2,2-트리플루오로에틸기, 3-플루오로프로필기, 3,3-디플루오로프로필기, 3,3,3-트리플루오로프로필기, 4-플루오로부틸기, 4,4-디플루오로부틸기, 4,4,4-트리플루오로부틸기가 바람직하고, 2-플루오로에틸기, 2,2-디플루오로에틸기, 2,2,2-트리플루오로에틸기가 보다 바람직하다.
- [0116]  $-R^{12}$ ,  $-R^2$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기의 탄소수는, 본 발명에서 사용하는 중합성 액정 화합물과의 분자 배향성이 양호해지는 관점에서, 1 이상 10 이하가 바람직하고, 1 이상 6 이하가 보다 바람직하고, 2 이상 4 이하가 더욱 바람직하다. 그 알킬기는 분기를 갖고 있어도 되고, 직사슬이어도 되고, 고리형의 시클로알킬기여도 된다. 또, 용해성의 관점에서, 불소 원자로 치환된 알킬기가 갖는 불소 원자수는 5 개 이하가 바람직하고, 3 개 이하가 보다 바람직하고, 2 개 이하가 더욱 바람직하다.
- [0117]  $-R^{12}$ ,  $-R^2$  의 알킬기로서는, 예를 들어, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, n-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸에틸기, 1,1-디메틸에틸기, 1-메틸프로필기, 2-메틸프로필기, 1,2-디메틸프로필기, 2,2-디메틸프로필기, 1,2,2-트리메틸프로필기, 1-메틸부틸기, 2-메틸부틸기, 3-메틸부틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2,3-디메틸부틸기, 1,3-디메틸부틸기, 1,3,3-트리메틸부틸기, 2,3,3-트리메틸부틸기, 2,2,3-트리메틸부틸기, 1,2,2-트리메틸부틸기, 1,1,2-트리메틸부틸기, 1,1,3-트리메틸부틸기, 4-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 1-메틸펜틸기, 4,4-디메틸펜틸기, 3,3-디메틸펜틸기, 2,2-디메틸펜틸기, 3,4-디메틸펜틸기, 2,4-디메틸펜틸기, 1,4-디메틸펜틸기, 3,4,4-트리메틸펜틸기, 2,4,4-트리메틸펜틸기, 1,4,4-트리메틸펜틸기, 3,3,4-트리메틸펜틸기, 2,3,3-트리메틸펜틸기, 1,3,3-트리메틸펜틸기, 2,2,4-트리메틸펜틸기, 2,2,3-트리메틸펜틸기, 1,2,2-트리메틸펜틸기, 1,1,2-트리메틸펜틸기, 1,1,3-트리메틸펜틸기, 1,1,4-트리메틸펜틸기, 2,3,4-트리메틸펜틸기, 1,2,3-트리메틸펜틸기, 1,3,4-트리메틸펜틸기, 5-메틸헥실기, 4-메틸헥실기, 3-메틸헥실기, 2-메틸헥실기, 1-메틸헥실기, 5,5-디메틸헥실기, 4,4-

디메틸핵실기, 3,3-디메틸핵실기, 2,2-디메틸핵실기, 4,5-디메틸핵실기, 3,5-디메틸핵실기, 2,5-디메틸핵실기, 1,5-디메틸핵실기, 1,4-디메틸핵실기, 4,5,5-트리메틸핵실기, 3,5,5-트리메틸핵실기, 2,5,5-트리메틸핵실기, 1,5,5-트리메틸핵실기, 6-메틸헵틸기, 5-메틸헵틸기, 6,6-디메틸헵틸기, 5,6-디메틸헵틸기, 4,6-디메틸헵틸기, 3,6-디메틸헵틸기, 2,6-디메틸헵틸기, 1,6-디메틸헵틸기, 7-메틸옥틸기, 6-메틸옥틸기, 5-메틸옥틸기, 4-메틸옥틸기, 3-메틸옥틸기, 2-메틸옥틸기, 1-메틸옥틸기, 8-메틸노닐기, 7-메틸노닐기, 6-메틸노닐기, 5-메틸노닐기, 4-메틸노닐기, 3-메틸노닐기, 2-메틸노닐기, 1-메틸노닐기, 시클로핵실기, 4-메틸시클로핵실기, 4-에틸시클로핵실기, 4-프로필시클로핵실기, 4-부틸시클로핵실기를 들 수 있다.

[0118]  $-R^{12}$ ,  $-R^2$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기로서는,  $-R^{11}$ ,  $-R^1$  로서 예시된 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기를 들 수 있고, 바람직한 것도 동일하다.

[0119]  $-R^{12}$ ,  $-R^2$  로서는, 중합성 액정 화합물과의 분자 배향성이 양호해지는 관점에서, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, n-부틸기, 2-플루오로에틸기, 2,2-디플루오로에틸기, 2,2,2-트리플루오로에틸기, 3-플루오로프로필기, 3,3-디플루오로프로필기, 3,3,3-트리플루오로프로필기, 4-플루오로부틸기, 4,4-디플루오로부틸기, 4,4,4-트리플루오로부틸기가 바람직하다.

[0120]  $-R^{11}$  및  $-R^{12}$ , 혹은  $-R^1$  및  $-R^2$  가 일체가 되어 형성하는 고리로서는, 예를 들어, 2-플루오로아지리딘 고리, 2,2-디플루오로아지리딘 고리, 2-플루오로아제티딘 고리, 2,2-디플루오로아제티딘 고리, 3-플루오로아제티딘 고리, 3,3-디플루오로아제티딘 고리, 2-플루오로피롤리딘 고리, 2,2-디플루오로피롤리딘 고리, 3-플루오로피롤리딘 고리, 3,3-디플루오로피롤리딘 고리, 3,4-디플루오로피롤리딘 고리, 2,5-디플루오로피롤리딘 고리, 3,3,4,4-테트라플루오로피롤리딘 고리, 2-플루오로피페리딘 고리, 2,2-디플루오로피페리딘 고리, 3-플루오로피페리딘 고리, 3,3-디플루오로피페리딘 고리, 4,4-디플루오로피페리딘 고리, 2,6-디플루오로피페리딘 고리, 3,5-디플루오로피페리딘 고리, 3,3,5,5-테트라플루오로피롤리딘을 들 수 있다. 그 중에서도, 중합성 액정 화합물과의 분자 배향성이 양호해지는 관점에서, 2,2-디플루오로피롤리딘 고리, 3,3,4,4-테트라플루오로피롤리딘 고리, 3,3-디플루오로피페리딘 고리, 3,3,5,5-테트라플루오로피롤리딘 고리가 바람직하다. 한편, 용해성의 관점에서는,  $-R^{11}$  및  $-R^{12}$ ,  $-R^1$  및  $-R^2$  는 일체가 되어 고리를 형성하지 않는 것이 바람직하다.

[0121]  $-R^{11}$ ,  $-R^{12}$ ,  $-R^1$ ,  $-R^2$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기에 있어서, 불소 원자는 알킬기 말단 탄소 원자에 있어서 치환되어 있는 것이, 용해성의 관점에서 바람직하다. 또,  $-R^{11}$  과  $-R^{12}$  의 치환 불소 원자수의 합계 및  $-R^1$  과  $-R^2$  의 치환 불소 원자수의 합계는 각각 1 개 이상 6 개 이하가 바람직하고, 1 개 이상 4 개 이하가 보다 바람직하다. 상기 범위가 됨으로써, 용해성이 양호한 경향이 된다.

[0122]  $-R^{11}$ ,  $-R^1$  의 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$ ,  $-R^2$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)-O-$ ,  $-C(=O)-NH-$ ,  $-CHCl-$ , 또는  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조여도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기로 치환된 구조여도 된다.

[0123]  $-R^{11}$ ,  $-R^1$  의 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기,  $-R^{12}$ ,  $-R^2$  의 알킬기, 1 개 이상의 불소 원자로 치환된 알킬기는, 각각 치환기를 갖고 있어도 된다. 허용되는 치환기로서는, 예를 들어,  $-OH$ ,  $-O-R^p$ ,  $-O-C(=O)-R^p$ ,  $-NH_2$ ,  $-NH-R^p$ ,  $-N(-R^q)-R^p$ ,  $-C(=O)-R^p$ ,  $-C(=O)-O-R^p$ ,  $-C(=O)-NH_2$ ,  $-C(=O)-NH-R^p$ ,  $-C(=O)-N(-R^q)-R^p$ ,  $-SH$ ,  $-S-R^p$ , 술파모일기, 카르복시기, 시아노기, 니트로기, 불소 원자 이외의 할로젠, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기 등의 중합성기를 들 수 있다.

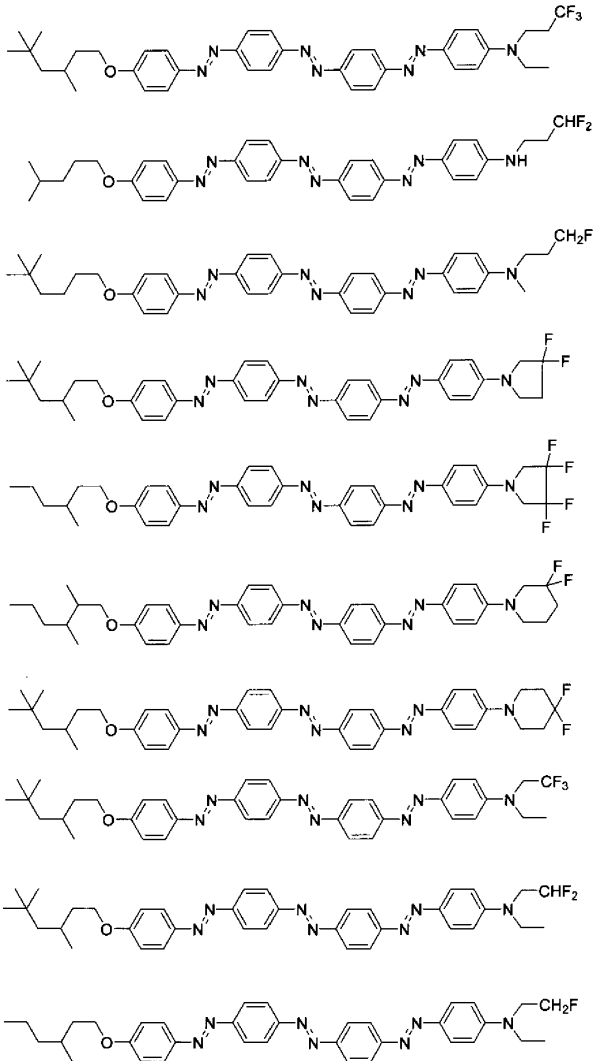
[0124]  $-R^p$  및  $-R^q$  는, 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 15, 바람직하게는 1 ~ 10 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.

[0125] ( $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$ ,  $-A^{14}-$ )

[0126] 식 (1) 에 있어서  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  는, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기를 나타낸다.

- [0127]  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  의 1,4-페닐렌기에 허용되는 치환기로서는, 예를 들어,  $-R^A$ ,  $-OH$ ,  $-O-R^A$ ,  $-O-C(=O)-R^A$ ,  $-NH_2$ ,  $-NH-R^A$ ,  $-N(-R^B)-R^A$ ,  $-C(=O)-R^A$ ,  $-C(=O)-O-R^A$ ,  $-C(=O)-NH_2$ ,  $-C(=O)-NH-R^A$ ,  $-C(=O)-N(-R^B)-R^A$ ,  $-SH$ ,  $-S-R^A$ , 트리플루오로메틸기, 술폰모일기, 카르복시기, 시아노기, 니트로기, 할로젠을 들 수 있다. 여기서,  $-R^A$  및  $-R^B$  는, 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 15 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.  $-R^A$  및  $-R^B$  의 탄소수로서는, 본 발명에서 사용하는 중합성 액정 화합물과의 분자 배향이 양호해지는 관점에서, 1 이상 12 이하가 바람직하고, 1 이상 9 이하가 더욱 바람직하다. 또한, 치환기를 갖고 있어도 되는 1,4-페닐렌기에는, 나프탈렌 고리의 2 가지 (나프틸렌기) 는 포함되지 않는다.
- [0128]  $-R^A$  및  $-R^B$  에 있어서의 직사슬형 혹은 분지형의 알킬기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는, 에테르성 산소 원자, 티오에테르성 황 원자, 아민성 질소 원자 ( $-NH-$ ,  $-N(R^Z)-$  : 여기서,  $R^Z$  는, 탄소수 1 ~ 6, 바람직하게는 탄소수 1 ~ 4 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.), 카르보닐기, 에스테르 결합, 아미드 결합,  $-CHF-$ ,  $-CF_2-$ ,  $-CHCl-$ ,  $-CCl_2-$  에 의해 치환된 구조로 되어 있어도 되고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기의 중합성기가 치환되어 있어도 된다.
- [0129]  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  의 1,4-페닐렌기에 허용되는 치환기로서는, 화합물 (1) 의 분자 배향이 양호해지는 관점에서,  $-R^A$ ,  $-O-R^A$ , 트리플루오로메틸기, 플루오로기가 바람직하다.  $-R^A$  로서는, 예를 들어, n-프로필기, n-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 5,5-디메틸-3-메틸헥실기를 들 수 있다.
- [0130]  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  로서는, 이색비의 관점에서는, 치환기를 갖지 않는 1,4-페닐렌기가 바람직하다.
- [0131] ( $-A^1-$ ,  $-A^2-$ ,  $-A^3-$ )
- [0132] 식 (2) 에 있어서  $-A^1-$ ,  $-A^2-$  및  $-A^3-$  은, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화수소 고리의 2 가지를 나타낸다.
- [0133]  $-A^1-$ ,  $-A^2-$ ,  $-A^3-$  의 방향족 탄화수소 고리로서는, 예를 들어, 벤젠 고리, 나프탈렌 고리, 안트라센 고리, 페난트렌 고리, 페릴렌 고리, 테트라센 고리, 피렌 고리, 벤즈피렌 고리, 크리센 고리, 트리페닐렌 고리, 아세나프텐 고리, 플루오란텐 고리, 플루오렌 고리를 들 수 있다.
- [0134]  $-A^1-$ ,  $-A^2-$ ,  $-A^3-$  의 방향족 탄화수소 고리의 2 가지로서는, 화합물 (2) 의 흡수 천이 모멘트가 색소의 장축 방향으로 일치하는 경향이 되어, 이색비를 높일 수 있다는 점에서, 치환기를 갖고 있어도 되는, 벤젠 고리의 2 가지 (페닐렌기), 나프탈렌 고리의 2 가지 (나프틸렌기) 가 바람직하고, 벤젠 고리의 2 가지 (페닐렌기) 가 보다 바람직하다. 특히, 1,4-페닐렌기, 1,4-나프틸렌기, 2,6-나프틸렌기가 보다 바람직하고, 1,4-페닐렌기가 더욱 바람직하고, 치환기를 갖지 않는 1,4-페닐렌기가 특히 바람직하다. 상기임으로써, 화합물 (2) 의 흡수의 천이 모멘트가 화합물 (2) 의 장축 방향으로 일치하는 경향이 되어, 이색비를 높일 수 있다. 또한, 치환기를 갖고 있어도 되는 벤젠 고리의 2 가지 (페닐렌기) 에는, 나프탈렌 고리의 2 가지 (나프틸렌기) 는 포함되지 않는다.
- [0135]  $-A^1-$ ,  $-A^2-$ ,  $-A^3-$  의 방향족 탄화수소 고리의 2 가기에 허용되는 치환기로서는, 상기 서술한  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  의 1,4-페닐렌기에 허용되는 치환기를 들 수 있고, 바람직한 치환기도  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  와 동일하다.
- [0136] (n)
- [0137] 식 (2) 에 있어서, n 은 1, 2 또는 3 을 나타낸다.
- [0138] n 이 2 또는 3 인 경우, 복수의  $-A^2-$  는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0139] 본 발명에 있어서의 중합성 액정 화합물과의 분자 배향성을 양호하게 하는 점, 또한 용해성의 관점에서, n 은 1 또는 2 인 것이 바람직하고, 2 인 것이 보다 바람직하다.
- [0140] ( $-N=N-$ )

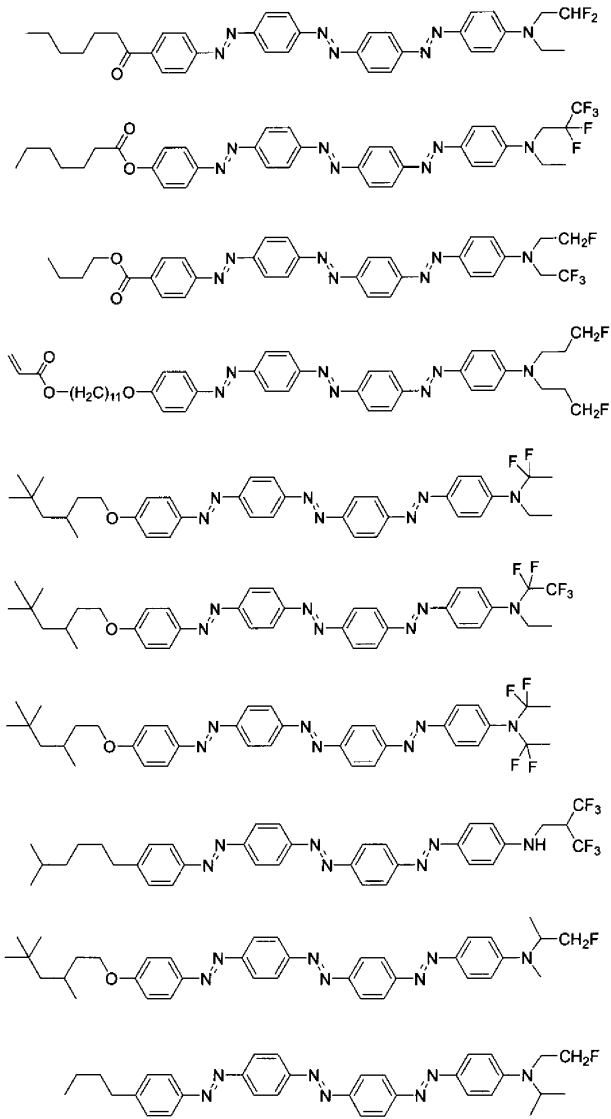
- [0141] 식 (1) 및 (2) 중의 -N=N- 는, 트랜스형인 것이 본 발명의 화합물의 직선성을 높인다는 관점에서 바람직하다.
- [0142] (본 발명의 화합물의 구체예)
- [0143] 본 발명의 화합물의 구체예로서는, 이하의 화합물을 들 수 있지만, 이것들에 한정되는 것은 아니다.
- [0144] [화학식 5]



[0145]

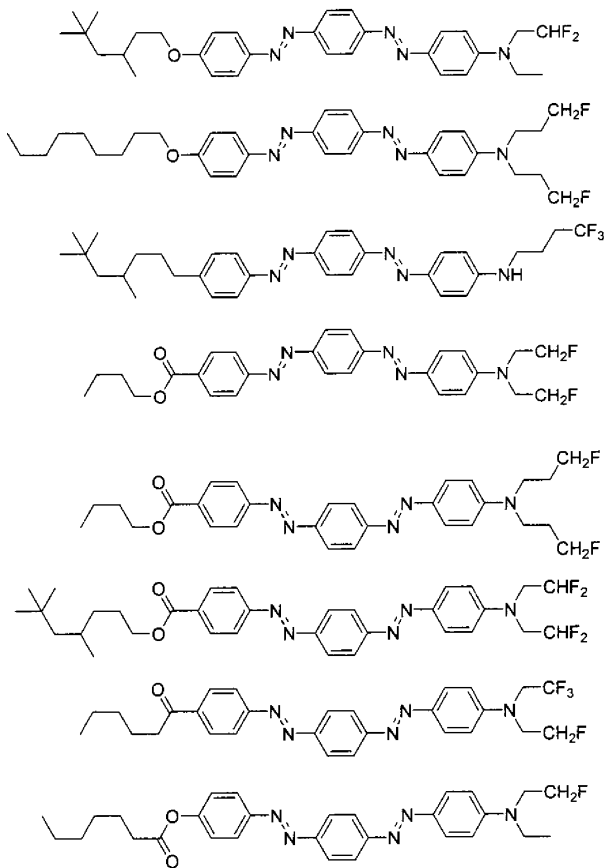


[0148] [화학식 7]



[0149]

[0150] [화학식 8]



[0151]

[0152] (흡수 특성)

[0153] 본 발명의 화합물은, 후술하는 방법으로 제작한 이방성 색소막 중에 있어서, 350 ~ 800 nm 의 파장 범위에 극대 흡수 ( $\lambda_{max1}$ ) 을 갖고 있어도 되고, 바람직하게는 380 ~ 600 nm 의 파장 범위에 극대 흡수를 갖고 있고, 보다 바람직하게는 400 ~ 560 nm 의 파장 범위에 갖고 있고, 더욱 바람직하게는 420 ~ 550 nm 의 파장 범위에 갖고 있다. 이 파장 범위에 극대 흡수 ( $\lambda_{max1}$ ) 을 가짐으로써, 더 장파장측에 극대 흡수를 갖는 색소와 조합한 경우, 350 ~ 800 nm 의 파장 범위를 망라적으로 흡수할 수 있게 되는 경향이 있다.

[0154] 본 발명의 화합물은, 용제에 용해하여 측정된 극대 흡수 ( $\lambda_{max2}$ ) 에 비해서, 이방성 색소막 중에 있어서의 극대 흡수 (상기 서술한  $\lambda_{max1}$ ) 가 장파장에 존재하고 있는 것이 바람직하다. 이 장파장 시프트는, 본 발명의 화합물이, 중합성 액정 화합물 및/또는 중합성 액정 화합물에 기초하는 단위를 갖는 중합물 중에 분산됨으로써 발현되는 현상이며, 본 발명의 화합물과 중합성 액정 화합물 및/또는 중합성 액정 화합물에 기초하는 단위를 갖는 중합물이 강하게 분자간 상호 작용 하고 있는 것을 나타내고 있다. 장파장 시프트란, 흡수 극대의 차이분 ( $\lambda_{max1} - \lambda_{max2}$ ) 이 양의 값이 되는 것을 의미하며, 그 차이는, 10 nm 이상인 것이 바람직하고, 20 nm 이상인 것이 보다 바람직하고, 30 nm 이상인 것이 더욱 바람직하다.

[0155] (용해도)

[0156] 본 발명의 화합물의 용해도는 특별히 한정되지 않지만, 시클로펜타논에 대한 용해도가 0.4 질량% 이상인 것이 바람직하고, 0.9 질량% 이상인 것이 보다 바람직하고, 1.5 질량% 이상인 것이 더욱 바람직하다. 용해도가 상기 하한 이상임으로써, 양호한 도막 성능이 얻어지는 경향이 있다. 용해도의 상한은 특별히 한정되지 않지만, 50 질량% 이하이다.

[0157] [이방성 색소막 형성용 조성물]

[0158] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 색소와 중합성 액정 화합물을 포함하는 것으로, 상기 색소로서 적어도 화합물 (2) 를 포함한다.

[0159] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 화합물 (2) 의 1 종만을 포함하는 것이어도 되고, 2 종 이상을 포함

하는 것이어도 된다.

- [0160] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 조성물 중에서의 석출을 억제하는 관점에서, 색소로서 식 (2) 중의  $-A^1-$ ,  $-A^2-$ ,  $-A^3-$  이 동일한 본 발명의 화합물을 1 종만 포함하는 것이 바람직하고, 본 발명의 화합물을 1 종만 포함하는 것이 보다 바람직하다.
- [0161] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 색소로서 화합물 (2) 를 포함하되, 화합물 (2) 이외의 색소를 포함하고 있어도 된다.
- [0162] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 화합물 (2) 이외의 색소로서는, 예를 들어, 아조계 색소, 퀴논계 색소 (나프토퀴논계 색소, 안트라퀴논계 색소 등을 포함한다.), 스틸벤계 색소, 시아닌계 색소, 프탈로시아닌계 색소, 인디고계 색소, 축합 다고리계 색소 (페릴렌계 색소, 옥사진계 색소, 아크리딘계 색소 등을 포함한다.) 를 들 수 있다.
- [0163] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에는, 화합물 (2) 이외의 색소의 1 종만이 단독으로 포함되어 있어도 되고, 2 종 이상이 임의의 조합 및 비율로 포함되어 있어도 된다.
- [0164] 상기에 예시된 화합물 (2) 이외의 색소 중에서도, 이방성 색소막 중에서 높은 분자 배열을 취할 수 있기 때문에, 아조계 색소가 바람직하다.
- [0165] 이하, 화합물 (2) 이외의 아조계 색소를 「기타 아조계 색소」 라고도 칭한다.
- [0166] 아조계 색소란, 아조기 ( $-N=N-$ ) 를 적어도 1 개 이상 갖는 색소를 말하며, 그 1 분자 중의 아조기의 수는, 용제에 대한 용해성, 액정 화합물과의 상용성, 색조 및 제조 용이성의 관점에서, 1 이상이 바람직하고, 2 이상이 보다 바람직하고, 또한, 6 이하가 바람직하고, 4 이하가 보다 바람직하고, 3 이하가 더욱 바람직하다.
- [0167] 기타 아조계 색소로서는, 예를 들어, 하기 식 (3) 으로 나타내는 화합물을 들 수 있다.
- [0168]  $R^{31}-E^1-N=N-(E^2-N=N)_p-E^3-R^{32} \dots (3)$
- [0169] (식 (3) 중,
- [0170]  $-E^1-$ ,  $-E^2-$  및  $-E^3-$  은, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 페닐렌기, 치환기를 갖고 있어도 되는 나프틸렌기, 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 2 개의 복소 고리기를 나타낸다.
- [0171] p 는 0 ~ 4 의 정수를 나타낸다.
- [0172] p 가 2 이상의 정수인 경우, 복수의  $-E^2-$  는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0173]  $-R^{31}$  및  $-R^{32}$  는, 각각 독립적으로 1 개의 유기기를 나타낸다.)
- [0174]  $-E^1-$ ,  $-E^2-$  및  $-E^3-$  은, 각각 독립적으로 치환기를 갖고 있어도 되는 페닐렌기, 치환기를 갖고 있어도 되는 나프틸렌기, 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 2 개의 복소 고리기를 나타낸다.
- [0175] 페닐렌기의 치환 위치로서는, 분자의 직선성이 높기 때문에, 1,4-페닐렌기가 바람직하다.
- [0176] 나프틸렌기의 치환 위치로서는, 분자의 직선성이 높기 때문에, 1,4-나프틸렌기 또는 2,6-나프틸렌기가 바람직하다.
- [0177] 2 개의 복소 고리기로서는, 고리를 형성하는 탄소수가 바람직하게는 3 이상 14 이하이고, 더욱 바람직하게는 3 이상 10 이하인 복소 고리기이다. 특히 단고리 또는 2 고리형의 복소 고리기가 바람직하다.
- [0178] 2 개의 복소 고리기를 구성하는 탄소 이외의 원자로서는, 질소 원자, 황 원자 및 산소 원자에서 선택되는 적어도 1 개를 들 수 있다. 복소 고리기가 탄소 이외의 고리를 구성하는 원자를 복수 갖는 경우, 이들것은 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0179] 2 개의 복소 고리기로서는, 예를 들어, 피리딘디일기, 퀴놀린디일기, 이소퀴놀린디일기, 티아졸디일기, 벤조티아졸디일기, 티에노티아졸디일기, 티에노티오펜디일기, 벤즈이미다졸리논디일기, 벤조푸란디일기, 프탈이미드디일기, 옥사졸디일기, 벤조옥사졸디일기 등을 들 수 있다.

- [0180]  $-E^1-$ ,  $-E^2-$  및  $-E^3-$  에 있어서의 페닐렌기, 나프틸렌기, 및 2 개의 복소 고리기가 임의로 갖는 치환기로서는, 예를 들어, 탄소수 1 ~ 4 의 알킬기 ; 메톡시기, 에톡시기 및 부톡시기 등의 탄소수 1 ~ 4 의 알콕시기 ; 트리플루오로메틸기 등의 탄소수 1 ~ 4 의 불화알킬기 ; 시아노기 ; 니트로기 ; 수산기 ; 할로젠 원자 ; 아미노기, 디에틸아미노기, 및 피롤리디노기 등의 치환 또는 무치환 아미노기를 들 수 있다. 상기 치환 아미노기란, 탄소수 1 ~ 4 의 알킬기를 1 개 또는 2 개 갖는 아미노기, 혹은 2 개의 치환 알킬기가 서로 결합하여 탄소수 2 ~ 8 의 알칸디일기를 형성하고 있는 아미노기를 의미한다. 무치환 아미노기는,  $-NH_2$  이다. 상기 탄소수 1 ~ 4 의 알킬기로서는, 메틸기, 에틸기 및 부틸기 등을 들 수 있다. 상기 탄소수 2 ~ 8 의 알칸디일기로서는, 에틸렌기, 프로판-1,3-디일기, 부탄-1,3-디일기, 부탄-1,4-디일기, 펜탄-1,5-디일기, 헥산-1,6-디일기, 헵탄-1,7-디일기, 옥탄-1,8-디일기 등을 들 수 있다.
- [0181] 분자 직선성이 높다는 점에서,  $-E^1-$ ,  $-E^2-$  및  $-E^3-$  에 있어서의 페닐렌기, 나프틸렌기, 및 2 개의 복소 고리기는, 무치환이거나, 또는 치환되어 있는 경우에는, 메틸기, 메톡시기, 수산기, 불소 원자, 염소 원자, 디메틸아미노기, 피롤리디닐기, 피페리디닐기로 치환되어 있는 것이 바람직하다.
- [0182] p 는 0 ~ 4 의 정수를 나타낸다. 용제에 대한 용해성, 중합성 액정 화합물과의 상용성, 색조 및 제조 용이성의 관점에서, p 는 1 이상이 바람직하고, 또한, 4 이하가 바람직하고, 3 이하가 보다 바람직하다.
- [0183]  $-R^{31}$  및  $-R^{32}$  는, 동일하거나 또는 각각 상이한 1 개의 유기기를 나타낸다.
- [0184]  $-R^{31}$  및  $-R^{32}$  에 있어서의 1 개의 유기기로서는, 예를 들어, 수소 원자, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기 ; 치환식의 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기 ; 메톡시기, 에톡시기 및 부톡시기 등의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알콕시기 ; 트리플루오로메틸기 등의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 불화알킬기 ; 시아노기 ; 니트로기 ; 수산기 ; 할로젠 원자 ; 아미노기, 디에틸아미노기, 및 피롤리디노기 등의 치환 또는 무치환 아미노기 ; 카르복시기 ; 부톡시카르보닐기 등의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬옥시카르보닐기 ; 2-(4-부틸페닐)에테닐기 등의 알킬페닐알케닐기 ; 카르바모일기 ; 부틸카르바모일기 등의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬카르바모일기 ; 술폰모일기 ; 부틸술폰모일기 등의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬술폰모일기 ; 부틸카르보닐아미노기 등의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 아실아미노기 ; 부틸카르보닐옥시기 등의 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 아실옥시기 ; 술폰닐기 ; 부틸술폰닐기 등의 탄소수 1 ~ 15 의 알킬술폰닐기 ; 후술하는 액정 화합물에 있어서의  $-R^{41}$  및  $-R^{42}$  를 들 수 있다. 상기 치환 아미노기란, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기를 1 개 또는 2 개 갖는 아미노기, 혹은 2 개의 치환 알킬기가 서로 결합하여 탄소수 2 ~ 15 의 알칸디일기를 형성하고 있는 아미노기를 의미한다. 무치환 아미노기는,  $-NH_2$  이다. 상기 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기로서는, 메틸기, 에틸기 및 부틸기 등을 들 수 있다. 상기 탄소수 2 ~ 15 의 알칸디일기로서는, 에틸렌기, 프로판-1,3-디일기, 부탄-1,3-디일기, 부탄-1,4-디일기, 펜탄-1,5-디일기, 헥산-1,6-디일기, 헵탄-1,7-디일기, 옥탄-1,8-디일기 등을 들 수 있다.
- [0185]  $-R^{31}$  및  $-R^{32}$  로서는, 수소 원자, 사슬형기, 지방족 유기기 (「지방족 유기기」는, 사슬형인 것 및 고리형인 것을 포함한다.), 탄소 원자의 일부가 질소 원자 및/또는 산소 원자로 치환된 지방족 유기기 (「탄소 원자의 일부가 질소 원자 및/또는 산소 원자로 치환된 지방족 유기기」는, 사슬형인 것 및 고리형인 것을 포함하고, 지방족 유기기의 일부의 메틸기가 수산기, 옥소기 (=O), 아미노기, 이미노기 등으로 각각 치환된 것을 포함한다.) 등을 들 수 있고, 어느 양태로서는, 수소 원자, 사슬형기가 바람직하고, 다른 양태로서는, 수소 원자, 지방족 유기기가 바람직하고, 또 다른 양태로서는, 수소 원자, 탄소 원자의 일부가 질소 원자 및/또는 산소 원자로 치환된 지방족 유기기가 바람직하다.
- [0186] 사슬형기로서는, 예를 들어, 상기의, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알콕시기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 불화알킬기 ; 치환 또는 무치환 아미노기 (치환 아미노기란, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기를 1 개 또는 2 개 갖는 아미노기를 의미한다. 무치환 아미노기는,  $-NH_2$  이다.) ; 카르복시기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬옥시카르보닐기 ; 카르바모일기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬카르바모일기 ; 술폰모일기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬술폰모일기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 아실아미노기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 아실옥시기 ; 술폰닐기 ; 탄소수 1 ~ 15

의 알킬술파닐기를 들 수 있다. 또한, 사슬형기와 지방족 유기기는 일부 중복된다.

[0187] 지방족 유기기로서는, 예를 들어, 상기의, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기, 지환식의 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기를 들 수 있다.

[0188] 탄소 원자의 일부가 질소 원자 및/또는 산소 원자로 치환된 지방족 유기기로서는, 예를 들어, 상기의, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알콕시기 ; 치환 또는 무치환 아미노기 ; 카르복시기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬옥시카르보닐기 ; 카르바모일기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬카르바모일기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 아실아미노기 ; 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 아실옥시기를 들 수 있다. 상기 치환 아미노기란, 분기를 갖고 있어도 되는 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기를 1 개 또는 2 개 갖는 아미노기, 혹은 2 개의 치환 알킬기가 서로 결합하여 탄소수 2 ~ 15 의 알칸디일기를 형성하고 있는 아미노기를 의미한다. 무치환 아미노기는, -NH<sub>2</sub> 이다. 상기 탄소수 1 ~ 15 의 알킬기로서는, 메틸기, 에틸기 및 부틸기 등을 들 수 있다. 상기 탄소수 2 ~ 15 의 알칸디일기로서는, 에틸렌기, 프로판-1,3-디일기, 부탄-1,3-디일기, 부탄-1,4-디일기, 펜탄-1,5-디일기, 헥산-1,6-디일기, 헵탄-1,7-디일기, 옥탄-1,8-디일기 등을 들 수 있다.

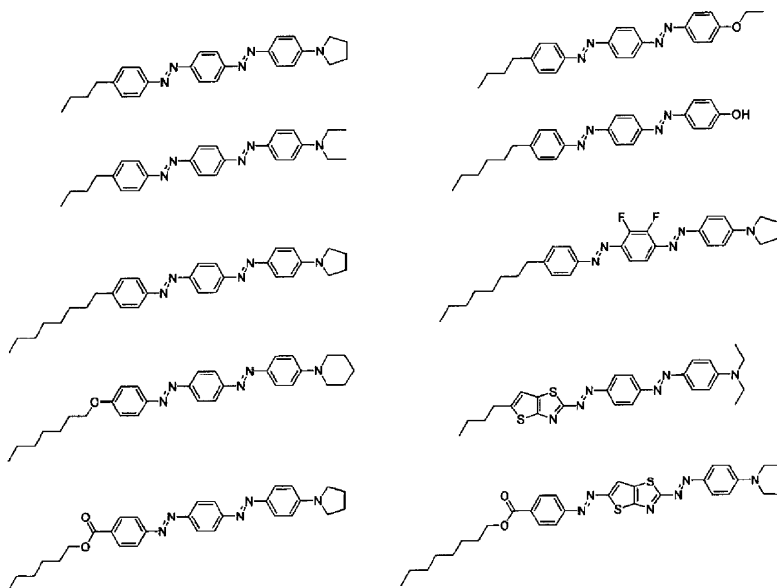
[0189] 분자 직선성이 높다는 점에서, -R<sup>31</sup> 및 -R<sup>32</sup> 로서는, 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기 등의 탄소수 1 ~ 10 의 알킬기 ; 부톡시기, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 헵틸옥시기, 옥틸옥시기 등의 탄소수 1 ~ 10 의 알콕시기, 디에틸아미노기, 피롤리디노기, 피페리디닐기가 바람직하다. 또한, 후술하는 액정 화합물에 있어서의 -R<sup>41</sup> 및 -R<sup>42</sup> 도 바람직하다.

[0190] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되어 있어도 되는, 기타 아조계 색소로서는, 특별히 한정되지 않고, 공지된 아조계 색소를 사용할 수도 있다.

[0191] 공지된 아조계 색소로서는, 예를 들어, 상기 서술한 특허문헌 1, 일본 특허공보 제5982762호, 일본 공개특허공보 2017-025317호, 일본 공개특허공보 2014-095899호에 기재된 색소 (이색성 색소, 이색성 염료) 를 들 수 있다.

[0192] 기타 아조계 색소로서, 구체적으로는, 이하에 기재된 아조계 색소를 들 수 있지만, 이것들에 한정되는 것은 아니다.

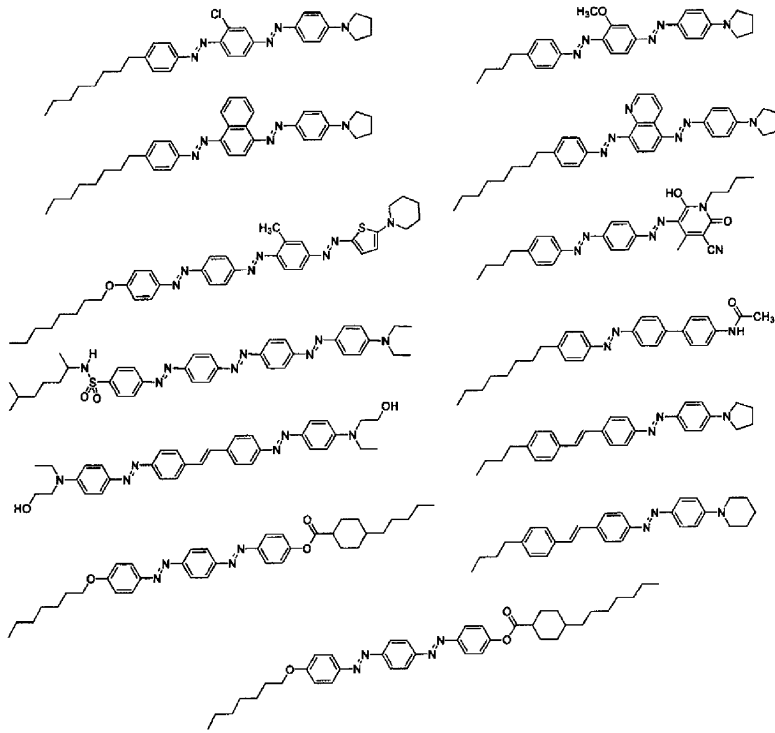
[0193] [화학적식 9]



[0194]

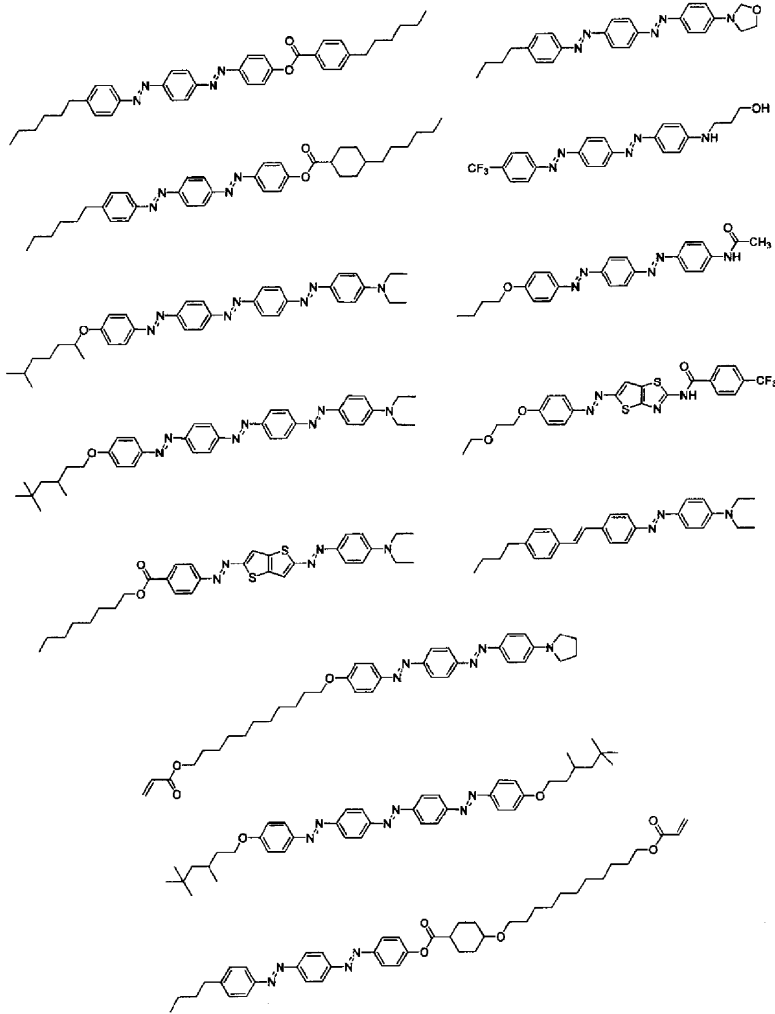
[0195]

[화학식 10]



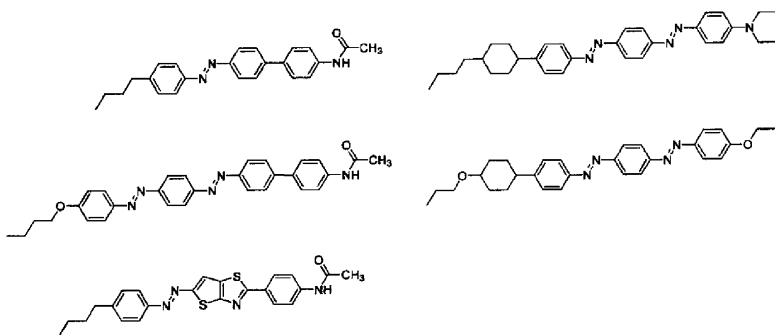
[0196]

[0197] [화학식 11]



[0198]

[0199] [화학식 12]



[0200]

[0201] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는, 화합물 (2) 이외의 색소로서는, 350 ~ 800 nm 의 파장역의 흡수 곡선에 있어서의 극대값을 나타내는 파장이, 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는, 화합물 (2) 의 350 ~ 800 nm 의 파장역의 흡수 곡선에 있어서의 최대값을 나타내는 파장보다 긴 색소인 것이 바람직하고, 아조계 색소가 바람직하다. 또, 그 파장의 차이가, 5 nm 이상인 것이 바람직하고, 10 nm 이상인 것이 바람직하다. 상기임으로써, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용하여 형성한 이방성 색소막을 디스플레이 등의 편광 소자에 적용하는 경우에, 가시 영역의 넓은 범위에서 편광 특성을 발현할 수 있다.

[0202] (본 발명의 화합물 및 색소의 분자량)

[0203] 본 발명의 화합물의 분자량 (2 종 이상의 본 발명의 화합물을 병용하는 경우에는, 각각의 분자량) 은, 300 이상

이 바람직하고, 350 이상이 보다 바람직하고, 380 이상이 더욱 바람직하고, 1500 이하가 바람직하고, 또한, 1200 이하가 보다 바람직하고, 1000 이하가 더욱 바람직하다. 구체적으로는, 본 발명의 화합물의 분자량은, 300 ~ 1500 이 바람직하고, 350 ~ 1200 이 보다 바람직하고, 380 ~ 1000 이 더욱 바람직하다. 상기 범위임으로써 적절한 분자 길이, 부피가 커지기 때문에, 본 발명의 화합물의 분자 배향이 양호해지는 경향이 있다.

[0204] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 화합물 (2) 이외의 색소의 분자량 (2 종 이상의 색소를 병용하는 경우에는, 각각의 분자량) 은, 300 이상이 바람직하고, 350 이상이 보다 바람직하고, 380 이상이 더욱 바람직하고, 1500 이하가 바람직하고, 또한, 1200 이하가 보다 바람직하고, 1000 이하가 더욱 바람직하다. 구체적으로는, 화합물 (2) 이외의 색소의 분자량은, 300 ~ 1500 이 바람직하고, 350 ~ 1200 이 보다 바람직하고, 380 ~ 1000 이 더욱 바람직하다. 상기 범위임으로써 적절한 분자 길이, 부피가 커지기 때문에, 화합물 (2) 이외의 색소의 분자 배향이 양호해지는 경향이 있다.

[0205] 본 발명의 화합물, 및 화합물 (2) 이외의 색소의 분자량은, 색소에 포함되는 원자량의 총합이다.

[0206] (색소의 함유량)

[0207] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서의 이색성 색소 등의 색소가 차지하는 함유량 (2 종 이상의 색소를 병용하는 경우에는, 각각의 함유량의 총합) 으로는, 예를 들어, 이방성 색소막 형성용 조성물의 고형분에 대하여 0.01 질량% 이상이 바람직하고, 0.05 질량% 이상이 보다 바람직하고, 또한, 30 질량% 미만인 바람직하고, 25 질량% 미만인 보다 바람직하고, 20 질량% 미만인 더욱 바람직하고, 10 질량% 미만인 특히 바람직하다. 구체적으로는, 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서의 색소 (이색성 색소) 가 차지하는 함유량으로는, 예를 들어, 이방성 색소막 형성용 조성물의 고형분 (100 질량%) 에 대하여 0.01 질량% 이상 30 질량% 미만이고, 바람직하게는 0.05 질량% 이상 20 질량% 미만이고, 보다 바람직하게는 0.05 질량% 이상 10 질량% 미만이다.

[0208] 색소가 차지하는 함유량이 상기 범위 내이면, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물의 배향을 흐트러뜨리지 않고, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물을 중합시킬 수 있는 경향이 있다. 또, 색소가 차지하는 함유량이 상기 하한값 이상이면, 충분한 광 흡수가 얻어지고, 충분한 편광 성능이 얻어지는 경향이 있다. 또, 색소가 차지하는 함유량이 상기 상한값 이하이면, 액정 분자의 배향의 저해가 억제되기 쉬운 경향이 있다.

[0209] 또한, 여기서, 이방성 색소막 형성용 조성물의 고형분이란 이방성 색소막 형성용 조성물 중의 용제 이외의 모든 성분의 합계에 상당한다.

[0210] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 색소로서 본 발명의 화합물을 필수 성분으로서 함유하고 있으면 되고, 진술한 화합물 (2) 이외의 색소를 화합물 (2) 와 함께 함유하는 것이어도 되지만, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물이 화합물 (2) 이외의 색소를 함유하는 경우, 화합물 (2) 를 사용하는 것에 따른 본 발명의 효과를 더 유효하게 얻는다는 관점에서, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물 중의 색소의 총량 100 질량% 중의 화합물 (2) 는, 5 질량% 이상인 것이 바람직하고, 10 질량% 이상인 것이 보다 바람직하다. 한편, 15 질량% 이상인 것이 더욱 바람직하고, 20 질량% 이상인 것이 특히 바람직하다. 한편, 가시 영역의 넓은 범위에서 편광 특성을 발현시킨다는 관점에서는, 이 비율은, 80 질량% 이하인 것이 바람직하고, 60 질량% 이하인 것이 보다 바람직하고, 50 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하고, 40 질량% 이하인 것이 특히 바람직하다.

[0211] (색소의 제조 방법)

[0212] 본 발명의 화합물이나 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 화합물 (2) 이외의 색소는, 알킬화 반응, 에스테르화 반응, 아미드화 반응, 에테르화 반응, 입소 치환 반응, 디아조 커플링 반응, 금속 촉매를 사용한 커플링 반응 등의 공지된 화학 반응을 조합함으로써 제조할 수 있다.

[0213] 예를 들어, 본 발명의 화합물은, 후기하는 실시예에 기재된 방법이나, 「신염료 화학」(호소다 유타카 저, 1973년 12월 21일, 기보당), 「총설 합성 염료」(호리구치 히로시 저, 1968년, 산쿄 출판), 「이론 제조 염료 화학」(호소다 유타카 저, 1957년, 기보당) 에 기재된 방법에 따라서 합성할 수 있다.

[0214] <중합성 액정 화합물>

[0215] 본 발명에 있어서, 액정 화합물이란, 액정 상태를 나타내는 물질을 가리키고, 구체적으로는, 「액정 편람」(마루젠 주식회사, 2000년 10월 30일 발행) 의 1 ~ 28 페이지에 기재되어 있는 바와 같이, 결정에서 액체로 변

접 전이되지 않고, 결정과 액체의 양방의 성질을 나타내는 중간의 상태를 거쳐 액체가 되는 화합물을 말한다.

[0216] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물은, 후술하는 중합성기를 갖는 액정 화합물이다.

[0217] 중합성 액정 화합물에 있어서, 중합성기는 액정 화합물 분자 내의 임의의 위치에 배치할 수 있지만, 중합성기는 액정 화합물 분자의 말단에 치환되어 있는 것이 중합하기 쉽다는 관점에서 바람직하다.

[0218] 중합성 액정 화합물에 있어서, 중합성기는 액정 화합물 분자 내에 1 개 이상 존재할 수 있지만, 2 개 이상 존재하는 경우에는, 액정 화합물 분자의 양 말단에 각각 존재하고 있는 것이 중합하기 쉽다는 관점에서 바람직하다.

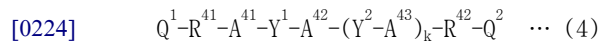
[0219] 또, 중합성 액정 화합물은, 액정 화합물 분자 내에 탄소-탄소 삼중 결합을 갖는 화합물인 것이 바람직하다. 탄소-탄소 삼중 결합을 갖는 화합물이면, 그 탄소-탄소 삼중 결합이, 회전 운동이 가능하면서, 액정 분자의 코어가 되는 것이 가능하고, 분자의 운동성이 높고, 또한 액정 분자끼리나 색소 분자 등의 π 공액계를 갖는 화합물과 분자간 상호 작용이 강하여, 분자 배향이 높아지는 경향이 있다.

[0220] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물로서는, 특별히 한정되지 않고 중합성기를 갖는 액정 화합물을 사용할 수 있다. 높은 이색비를 얻기 쉬운 경향이 있으므로, 반복 단위 구조를 갖지 않는 저분자 중합성 액정 화합물이 바람직하다.

[0221] 반복 단위 구조를 갖지 않는 저분자 중합성 화합물의 분자량은, 2000 이하가 바람직하고, 1500 이하가 보다 바람직하고, 1000 이하가 더욱 바람직하다. 중합성 액정 화합물의 분자량의 하한값은 특별히 한정되지 않지만, 400 이상이 바람직하고, 500 이상이 보다 바람직하다. 분자량이 상기 상한값 이하이면, 제막 시의 액정 화합물이 배향되기 위한 운동성을 가짐으로써 분자 배향성이 양호해지는 경향이 있고, 상기 하한값 이상이면, 액정 화합물의 분자 직선성이 높아짐으로써 분자 배향성이 양호해지는 경향이 있다.

[0222] 상기 상한 및 하한은 임의로 조합할 수 있다. 중합성 액정 화합물의 분자량은, 예를 들어, 400 이상 2000 이하여도 되고, 400 이상 1500 이하여도 되고, 500 이상 1000 이하여도 된다.

[0223] 예를 들어, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물로서는, 하기 식 (4) 로 나타내는 화합물 (이하, 「중합성 액정 화합물 (4)」 라고 칭하는 경우가 있다.) 을 들 수 있다.



[0225] (식 (4) 중,

[0226]  $-Q^1$  은, 수소 원자 또는 중합성기를 나타낸다.

[0227]  $-Q^2$  는, 중합성기를 나타낸다.

[0228]  $-R^{41}$  및  $-R^{42}$  는, 각각 독립적으로 사슬형 유기기를 나타낸다.

[0229]  $-A^{41}$  및  $-A^{43}$  은, 각각 독립적으로 하기 식 (5) 로 나타내는 부분 구조, 2 가 유기기, 또는 단결합을 나타낸다.

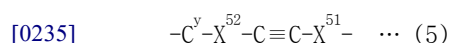
[0230]  $-A^{42}$  는, 하기 식 (5) 로 나타내는 부분 구조 또는 2 가 유기기를 나타낸다.

[0231]  $-Y^1$  및  $-Y^2$  는, 각각 독립적으로 단결합,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C\equiv C-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$ , 또는  $-SCH_2-$  를 나타낸다.

[0232]  $-A^{41}$  및  $-A^{43}$  의 일방은, 하기 식 (5) 로 나타내는 부분 구조 또는 2 가 유기기이다.

[0233] k 는 1 또는 2 이다.

[0234] k 가 2 인 경우, 2 개의  $-Y^2-A^{43}$  은 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.)



- [0236] (식 (5) 중,
- [0237]  $-C^y-$  는, 탄화수소 고리기 또는 복소 고리기를 나타낸다.
- [0238]  $-X^{51}-$  은,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$ , 또는  $-SCH_2-$  를 나타낸다.
- [0239]  $-X^{52}-$  는, 단결합,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$ , 또는  $-SCH_2-$  를 나타낸다.)
- [0240] 또한,  $-A^{41}-$  이, 식 (5) 로 나타내는 부분 구조인 경우, 식 (4) 는, 하기 식 (4A) 여도 되고, 하기 식 (4B) 여도 된다.
- [0241]  $Q^1-R^{41}-C^y-X^{52}-C\equiv C-X^{51}-Y^1-A^{42}-(Y^2-A^{43})_k-R^{42}-Q^2 \cdots$  (4A)
- [0242]  $Q^1-R^{41}-X^{51}-C\equiv C-X^{52}-C^y-Y^1-A^{42}-(Y^2-A^{43})_k-R^{42}-Q^2 \cdots$  (4B)
- [0243] 또,  $-A^{42}-$  가, 식 (5) 로 나타내는 부분 구조인 경우, 식 (4) 는, 하기 식 (4C) 여도 되고, 하기 식 (4D) 여도 된다.
- [0244]  $Q^1-R^{41}-A^{41}-Y^1-C^y-X^{52}-C\equiv C-X^{51}-(Y^2-A^{43})_k-R^{42}-Q^2 \cdots$  (4C)
- [0245]  $Q^1-R^{41}-A^{41}-Y^1-X^{51}-C\equiv C-X^{52}-C^y-(Y^2-A^{43})_k-R^{42}-Q^2 \cdots$  (4D)
- [0246] 또,  $-A^{43}-$  이, 식 (5) 로 나타내는 부분 구조인 경우, 식 (4) 는, 하기 식 (4E) 여도 되고, 하기 식 (4F) 여도 된다.
- [0247]  $Q^1-R^{41}-A^{41}-Y^1-A^{42}-(Y^2-C^y-X^{52}-C\equiv C-X^{51})_k-R^{42}-Q^2 \cdots$  (4E)
- [0248]  $Q^1-R^{41}-A^{41}-Y^1-A^{42}-(Y^2-X^{51}-C\equiv C-X^{52}-C^y)_k-R^{42}-Q^2 \cdots$  (4F)
- [0249] 마찬가지로,  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$ , 및  $-A^{43}-$  중, 두 개 이상이 식 (5) 로 나타내는 부분 구조인 경우, 각각 독립적으로 식 (5) 로 나타내는 부분 구조의 방향이 반전되어 있어도 된다.
- [0250] 또한, 상기와 같이  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$ , 및  $-A^{43}-$  은, 각각 독립적으로 식 (5) 로 나타내는 부분 구조 또는 2 가 유기기 이고, 게다가  $-A^{41}-$  및  $-A^{43}-$  은, 단결합이어도 되지만,  $-A^{41}-$  및  $-A^{43}-$  이, 모두 단결합인 경우는 없다.
- [0251]  $(-C^y-)$
- [0252]  $-C^y-$  에 있어서의 탄화수소 고리기는, 방향족 탄화수소 고리기와 비방향족 탄화수소 고리기를 포함한다.
- [0253] 방향족 탄화수소 고리기는, 비연결 방향족 탄화수소 고리기와 연결 방향족 탄화수소 고리기를 포함한다.
- [0254] 비연결 방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 2 가기이며, 그 탄소수는 6 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 방향족 탄화수소 고리기의 탄소수는 6 ~ 15 가 보다 바람직하다. 방향족 탄화수소 고리로서는, 예를 들어, 벤젠 고리, 나프탈렌 고리, 안트라센 고리, 페난트렌 고리, 페릴렌 고리, 테트라센 고리, 피렌 고리, 벤즈피렌 고리, 크리센 고리, 트리페닐렌 고리, 아세나프텐 고리, 플루오란텐 고리, 플루오렌 고리 등을 들 수 있다.
- [0255] 연결 방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가기이다. 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 6 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 6 ~ 15 가 보다 바람직하다. 연결 방향족 탄화수소 고리로서는, 예를 들어, 제 1 탄소수 6 ~ 20

의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리와 제 2 탄소수 6 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 6 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 6 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가기를 들 수 있다. 연결 방향족 탄화수소 고리로서는, 구체적으로는 비페닐-4,4'-디일기를 들 수 있다.

- [0256] 방향족 탄화수소 고리로서는, 비연결 방향족 탄화수소 고리가 액정 화합물의 사이에 작용하는 분자간 상호작용을 최적으로 함으로써 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다.
- [0257] 이것들 중, 방향족 탄화수소 고리로서는, 벤젠 고리의 2 가기, 나프탈렌 고리의 2 가기가 바람직하고, 벤젠 고리의 2 가기 (페닐렌기) 가 보다 바람직하다. 페닐렌기로서는, 1,4-페닐렌기가 바람직하다.  $-C^y-$  가 이들 기임으로써 액정 분자의 직선성이 높아져, 분자 배향성 향상의 효과가 얻어지는 경향이 있다.
- [0258] 비방향족 탄화수소 고리기는, 비연결 비방향족 탄화수소 고리와 연결 비방향족 탄화수소 고리를 포함한다.
- [0259] 비연결 비방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 2 가기이며, 그 탄소수는 3 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 비방향족 탄화수소 고리기의 탄소수는 3 ~ 15 가 보다 바람직하다. 비방향족 탄화수소 고리로서는, 예를 들어, 시클로프로판 고리, 시클로부탄 고리, 시클로펜탄 고리, 시클로헥산 고리, 시클로헥탄 고리, 시클로옥탄 고리, 시클로헥센 고리, 노르보르난 고리, 보르난 고리, 아다만탄 고리, 테트라하이드로나프탈렌 고리, 비시클로 [2.2.2]옥탄 고리 등을 들 수 있다.
- [0260] 비연결 비방향족 탄화수소 고리기는, 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자간 결합으로서 불포화 결합을 갖지 않는 지환식 탄화수소 고리와, 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자간 결합으로서 불포화 결합을 갖는 불포화 비방향족 탄화수소 고리를 포함한다. 비연결 비방향족 탄화수소 고리로서는, 생산성의 관점에서 지환식 탄화수소 고리기가 바람직하다.
- [0261] 연결 비방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가기 ; 혹은, 단고리의 방향족 탄화수소 고리, 축합된 방향족 탄화수소 고리, 단고리의 비방향족 탄화수소 고리, 및 축합된 비방향족 탄화수소 고리로 이루어지는 군에서 선택되는 1 개 이상의 고리와, 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가기이다.
- [0262] 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 3 ~ 20 인 것이 바람직하다.
- [0263] 연결 비방향족 탄화수소 고리로서는 예를 들어, 제 1 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리와 제 2 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가기를 들 수 있다. 또한, 예를 들어, 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리와 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가기를 들 수 있다.
- [0264] 연결 비방향족 탄화수소 고리로서는, 구체적으로는, 예를 들어 비스(시클로헥산)-4,4'-디일기, 1-시클로헥실 벤젠-4,4'-디일기를 들 수 있다.
- [0265] 비방향족 탄화수소 고리로서는, 액정 화합물의 사이에 작용하는 분자간 상호작용을 최적으로 함으로써 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 비연결 비방향족 탄화수소 고리기가 바람직하다.
- [0266] 비연결 비방향족 탄화수소 고리로서는, 시클로헥산의 2 가기 (시클로헥산디일기) 가 바람직하고, 시클로헥산 디일기로서는, 시클로헥산-1,4-디일기가 바람직하다.  $-C^y-$  가 이들 기임으로써 액정 분자의 직선성이 높아져, 분자 배향성 향상의 효과가 얻어지는 경향이 있다.

- [0267]  $-C^y-$  에 있어서의 복소 고리기는, 방향족 복소 고리기와 비방향족 복소 고리기를 포함한다.
- [0268] 방향족 복소 고리기는, 비연결 방향족 복소 고리기와 연결 방향족 복소 고리기를 포함한다.
- [0269] 비연결 방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 2 가지이며, 그 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 방향족 복소 고리의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0270] 방향족 복소 고리로서는, 예를 들어, 푸란 고리, 벤조푸란 고리, 티오펜 고리, 벤조티오펜 고리, 피롤 고리, 피라졸 고리, 이미다졸 고리, 티아졸 고리, 이소티아졸 고리, 옥사디아졸 고리, 티아디아졸 고리, 트리아졸 고리, 인돌 고리, 카르바졸 고리, 피롤로이미다졸 고리, 피롤로피라졸 고리, 피롤로피롤 고리, 티에노피롤 고리, 티에노티오펜 고리, 푸로피롤 고리, 푸로푸란 고리, 티에노푸란 고리, 티에노티아졸 고리, 벤조이소옥사졸 고리, 벤조이소티아졸 고리, 벤조이미다졸 고리, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리다진 고리, 피리미딘 고리, 트리아진 고리, 퀴놀린 고리, 이소퀴놀린 고리, 시놀린 고리, 퀴놀살린 고리, 페난트리딘 고리, 퀴나졸린 고리, 퀴나졸리논 고리, 아졸렌 고리를 들 수 있다.
- [0271] 연결 방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가지이다. 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 연결 방향족 복소 고리의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0272] 연결 방향족 복소 고리로서는, 예를 들어, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리와 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가기를 들 수 있다.
- [0273] 비방향족 복소 고리기는, 비연결 비방향족 복소 고리기와 연결 비방향족 복소 고리기를 포함한다.
- [0274] 비연결 비방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 2 가지이며, 그 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 비방향족 복소 고리의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0275] 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 2 가기의 비방향족 복소 고리로서는, 테트라하이드로푸란 고리, 테트라하이드로피란 고리, 디옥산 고리, 테트라하이드로티오펜 고리, 테트라하이드로티오피란 고리, 피롤리딘 고리, 피페리딘 고리, 디하이드로피리딘 고리, 피페라진 고리, 테트라하이드로티아졸 고리, 테트라하이드로옥사졸 고리, 옥타하이드로퀴놀린 고리, 테트라하이드로퀴놀린 고리, 옥타하이드로퀴나졸린 고리, 테트라하이드로퀴나졸린 고리, 테트라하이드로이미다졸 고리, 테트라하이드로벤조이미다졸 고리, 퀴누클리딘 고리 등을 들 수 있다.
- [0276] 연결 비방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가지이다. 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 연결 비방향족 복소 고리의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0277] 연결 방향족 복소 고리로서는, 예를 들어, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리와 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가기를 들 수 있다.
- [0278]  $-C^y-$  에 있어서의 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리기는, 각각  $-R^k$ ,  $-OH$ ,  $-O-R^k$ ,  $-O-C(=O)-R^k$ ,  $-NH_2$ ,  $-NH-R^k$ ,  $-N(R^{k'})-R^k$ ,  $-C(=O)-R^k$ ,  $-C(=O)-O-R^k$ ,  $-C(=O)-NH_2$ ,  $-C(=O)-NH-R^k$ ,  $-C(=O)-N(R^{k'})-R^k$ ,  $-SH$ ,  $-S-R^k$ , 트리플루오로메틸기, 술파모일기, 카르복시기, 술포기, 시아노기, 니트로기, 및 할로젠으로 이루어지는 군에서 선택되는 1 이상의 기로 치환되어 있어도 된다.  $-R^k$  및

$-R^{k'}$  는, 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 6 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.

- [0279]  $-C^y-$  에 있어서의 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리기는, 분자 구조의 직선성이 높고, 중합성 액정 화합물 (4) 끼리가 회합하기 쉬운 액정 상태를 발현하기 쉽다는 점에서, 각각 독립적으로 무치환이거나, 메틸기, 메톡시기, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자가 치환되어 있는 것이 바람직하고, 무치환인 것이 보다 바람직하다.
- [0280]  $-C^y-$  에 있어서의 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리가 갖는 치환기는, 동일해도 되고 상이해도 되고, 또한, 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리기의 전부가 치환되어 있어도 되고, 전부가 무치환이어도 되고, 일부가 치환되어 있으며 일부가 무치환이어도 된다.
- [0281]  $-C^y-$  로서는, 중합성 액정 화합물 (4) 의 분자 배향성이 양호해지는 점에서 탄화수소 고리기가 바람직하고, 페닐렌기, 시클로헥산디일기가 보다 바람직하다. 중합성 액정 화합물 (4) 의 분자 구조의 직선성을 높일 수 있다는 점에서,  $-C^y-$  로서는, 1,4-페닐렌기, 시클로헥산-1,4-디일기가 더욱 바람직하고, 1,4-페닐렌기가 특히 바람직하다.
- [0282]  $(-X^{51}-)$
- [0283]  $-X^{51}-$  은,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$  또는  $-SCH_2-$  를 나타내지만, 이 중, 중합성 액정 화합물 (4) 의 직선성이나 분자 단축 둘레의 회전 운동이 하기 쉬운 경향이 있다는 점에서,  $-X^{51}-$  로서는,  $\pi$  결합성이 작은,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$ ,  $-SCH_2-$  가 바람직한 것으로 들 수 있다. 이것들 중에서도 보다 바람직하게는  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$  이며, 더욱 바람직하게는  $-X^{51}-$  은,  $-C(=O)O-$  또는  $-OC(=O)-$  이다. 다른 양태로서,  $-X^{51}-$  은,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH_2O-$  또는  $-OCH_2-$  인 것이 바람직하다.
- [0284]  $(-X^{52}-)$
- [0285]  $-X^{52}-$  는, 단결합,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$ , 또는  $-SCH_2-$  를 나타낸다.
- [0286] 중합성 액정 화합물 (4) 의 코어를 크게 하고, 이방성 색소막 형성용 조성물로 형성되는 이방성 색소막의 이색성을 크게 한다는 관점에서 직선성이 높은 기로  $-C^y-$  와  $-C\equiv C-$  를 연결하는 것이 바람직하다. 구체적으로는,  $-X^{52}-$  로서는, 단결합, 또는  $\pi$  결합성을 갖는  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$  인 것이 바람직하고, 보다 직선성이 높다는 점에서 단결합인 것이 더욱 바람직하다.
- [0287]  $(-Q^1$  및  $-Q^2)$
- [0288]  $-Q^1$  및  $-Q^2$  에 있어서의 중합성기는, 광, 열, 및/또는 방사선에 의해 중합하는 것이 가능한 부분 구조를 갖는 것이며, 중합의 기능을 담보하기 위해서 필요한 관능기 내지 원자단이다. 그 중합성기는, 광 중합성기인 것이 이방성 색소막의 제조의 관점에서 바람직하다.
- [0289] 중합성기로서는, 예를 들어, 아크릴로일기, 메타크릴로일기, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 아크릴로일아미노기, 메타크릴로일아미노기, 비닐기, 비닐옥시기, 에틸닐기, 에틸닐옥시기, 1,3-부타디에닐기, 1,3-부타디에닐옥시기, 옥시라닐기, 옥세타닐기, 글리시딜기, 글리시딜옥시기, 스티릴기, 스티릴옥시기 등을 들 수 있다. 아크릴로일기, 메타크릴로일기, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 아크릴로일아미노기, 메타크릴로일아미노기, 옥시라닐기, 글리시딜기, 글리시딜옥시기가 바람직하고, 아크릴로일기, 메타크릴로일기, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 아크릴로일아미노기, 메타크릴로일아미노기, 글리시딜기, 글리시딜옥시기가

보다 바람직하고, 아크릴로일옥시기, 메타크릴로일옥시기, 글리시딜옥시기가 더욱 바람직하다.

- [0290]  $(-R^{41}-$  및  $-R^{42}-)$
- [0291]  $-R^{41}-$  및  $-R^{42}-$  에 있어서의 사슬형 유기기는, 전술한 방향족 탄화수소 고리, 비방향족 탄화수소 고리, 방향족 복소 고리, 비방향족 복소 고리 등의 고리형 구조를 포함하지 않는 2 개의 유기기이다.
- [0292] 이와 같은 사슬형 유기기로서는,  $-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-O-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-S-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-\text{NH}-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-N(\text{알킬기})-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-\text{OC}(=\text{O})-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-(\text{알킬렌기})-$  를 들 수 있다.
- [0293] 이들 사슬형 유기기에 있어서의 알킬렌기로서는, 탄소수 1 ~ 25 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬렌기를 들 수 있다. 알킬렌기의 탄소-탄소 결합은, 일부가 불포화 결합으로 되어 있어도 된다. 알킬렌기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기는,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-\text{NH}-$ ,  $-N(\text{R}^m)-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-\text{NH}-$ ,  $-\text{CHF}-$ ,  $-\text{CF}_2-$ ,  $-\text{CHCl}-$ ,  $-\text{CCl}_2-$  에 의해 치환된 (displace) 구조로 되어 있어도 된다.  $\text{R}^m$  은, 탄소수 1 ~ 6 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.
- [0294] 이들 사슬형 유기기에 있어서의 알킬렌기로서는, 분자 직선성이 높다는 점에서, 알킬렌기의 탄소의 일부가 불포화 결합으로 되어 있어도 되고, 또한, 알킬렌기에 포함되는 1 개 또는 그 이상의 메틸렌기가 상기 서술한 기에 의해 치환된 (displace) 구조로 되어 있어도 되는, 탄소수 1 ~ 25 의 직사슬형의 알킬렌기인 것이 바람직하다.
- [0295] 사슬형 유기기에 있어서의 주사슬 (사슬형 유기기에 있어서의 가장 긴 사슬형 부분을 의미한다.) 의 원자의 수는, 3 ~ 25 가 바람직하고, 5 ~ 20 이 보다 바람직하고, 6 ~ 20 이 더욱 바람직하다.
- [0296] 사슬형 유기기로서는,  $-(\text{CH}_2)_r-\text{CH}_2-$ ,  $-O-(\text{CH}_2)_r-\text{CH}_2-$ ,  $-(\text{O})_{r1}-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_{r2}-(\text{CH}_2)_{r3}-$ ,  $-(\text{O})_{r1}-(\text{CH}_2)_{r2}-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_{r3}-$  이 바람직하다. 이들 식 중의  $r$  은, 1 ~ 24 의 정수이고, 2 ~ 24 의 정수가 바람직하고, 4 ~ 19 의 정수가 보다 바람직하고, 5 ~ 19 의 정수가 더욱 바람직하다. 이들 식 중의  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $r_3$  은, 각각 독립적으로 정수를 나타내며, 사슬형 유기기에 있어서의 주사슬 (사슬형 유기기에 있어서의 가장 긴 사슬형 부분을 의미한다.) 의 원자의 수가, 바람직하게는 3 ~ 25, 보다 바람직하게는 5 ~ 20, 더욱 바람직하게는 6 ~ 20 이 되도록 적절히 조정된다.
- [0297]  $-R^{41}-$  및  $-R^{42}-$  는,
- [0298] 각각 독립적으로  $-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-O-(\text{알킬렌기})-$  인 것이 바람직하고,  $-(\text{알킬렌기})-$ ,  $-O-(\text{알킬렌기})-$  인 것이 보다 바람직하다. 어느 양태로서  $-R^{41}-$  및  $-R^{42}-$  에 있어서의 사슬형 유기기로서는  $-(\text{알킬렌기})-$  이고, 다른 양태로서  $-O-(\text{알킬렌기})-$  이다.
- [0299] 상기 식 (4B), 식 (4E) 와 같이,  $-X^{51}-$  과  $-R^{41}-$  또는  $-X^{51}-$  과  $-R^{42}-$  가 결합되어 있는 경우 ; 상기 식 (4B) 에 있어서  $-A^{43}-$  이 단결합이거나, 혹은 상기 식 (4E) 에 있어서  $-A^{41}-$  이 단결합이고,  $-R^{41}-$  또는  $-R^{42}-$  가,  $-Y^1-$  또는  $-Y^2-$  와 결합되어 있는 경우 ; 예는,  $-X^{51}-$ ,  $-Y^1-$  또는  $-Y^2-$  과 직접 결합되는  $-R^{41}-$  또는  $-R^{42}-$  는,  $-(\text{알킬렌기})-$  인 것이 바람직하다.
- [0300] 상기 이외에,  $-X^{51}-$ ,  $-Y^1-$  또는  $-Y^2-$  와 직접 결합되지 않은  $-R^{41}-$  또는  $-R^{42}-$  는,  $-O-(\text{알킬렌기})-$  인 것이 바람직하다.
- [0301]  $(-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$ , 및  $-A^{43}-$  에 있어서의 2 가 유기기)
- [0302]  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$ , 및  $-A^{43}-$  에 있어서의 2 가 유기기는, 하기 식 (6) 으로 나타내는 기인 것이 바람직하다.
- [0303]  $-Q^3-$  ... (6)
- [0304] (식 (6) 중,  $Q^3$  은, 탄화수소 고리기 또는 복소 고리기를 나타낸다.)
- [0305]  $-Q^3-$  에 있어서의 탄화수소 고리기는, 방향족 탄화수소 고리기와 비방향족 탄화수소 고리기를 포함한다.

- [0306] 방향족 탄화수소 고리기는, 비연결 방향족 탄화수소 고리기와 연결 방향족 탄화수소 고리기를 포함한다.
- [0307] 비연결 방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 2 가지이며, 그 탄소수는 6 ~ 20 인 것이 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 방향족 탄화수소 고리기의 탄소수는 6 ~ 15 가 보다 바람직하다. 방향족 탄화수소 고리로서는, 벤젠 고리, 나프탈렌 고리, 안트라센 고리, 페난트렌 고리, 페릴렌 고리, 테트라센 고리, 피렌 고리, 벤즈피렌 고리, 크리센 고리, 트리페닐렌 고리, 아세나프렌 고리, 플루오란텐 고리, 플루오렌 고리 등을 들 수 있다.
- [0308] 연결 방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가지이다. 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 6 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 연결 방향족 탄화수소 고리기의 탄소수는 6 ~ 15 가 보다 바람직하다. 연결 방향족 탄화수소 고리로서는, 예를 들어, 제 1 탄소수 6 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리와 제 2 탄소수 6 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 6 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 6 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가지를 들 수 있다. 연결 방향족 탄화수소 고리로서는, 구체적으로는 비페닐-4,4'-디일기를 들 수 있다.
- [0309] 방향족 탄화수소 고리로서는, 비연결 방향족 탄화수소 고리기가 액정 화합물의 사이에 작용하는 분자간 상호작용을 최적으로 함으로써 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다.
- [0310] 이것들 중, 방향족 탄화수소 고리로서는, 벤젠 고리의 2 가지, 나프탈렌 고리의 2 가지가 바람직하고, 벤젠 고리의 2 가지 (페닐렌기) 가 보다 바람직하다. 페닐렌기로서는, 1,4-페닐렌기가 바람직하다.  $-Q^3-$  이 이들 기임으로써 액정 분자의 직선성이 높아져, 분자 배향성 향상의 효과가 얻어지는 경향이 있다.
- [0311] 비방향족 탄화수소 고리기는, 비연결 비방향족 탄화수소 고리기와 연결 비방향족 탄화수소 고리기를 포함한다.
- [0312] 비연결 비방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 2 가지이며, 그 탄소수는 3 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 비방향족 탄화수소 고리기의 탄소수는 3 ~ 15 가 보다 바람직하다. 비방향족 탄화수소 고리로서는, 시클로프로판 고리, 시클로부탄 고리, 시클로펜탄 고리, 시클로헥산 고리, 시클로헥탄 고리, 시클로옥탄 고리, 시클로헥센 고리, 노르보르난 고리, 보르난 고리, 아다만탄 고리, 테트라하이드로나프탈렌 고리, 비시클로[2.2.2]옥탄 고리 등을 들 수 있다.
- [0313] 비연결 비방향족 탄화수소 고리기는, 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자간 결합으로서 불포화 결합을 갖지 않는 지환식 탄화수소 고리기와, 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자간 결합으로서 불포화 결합을 갖는 불포화 비방향족 탄화수소 고리기를 포함한다. 비연결 비방향족 탄화수소 고리로서는, 생산성의 관점에서 지환식 탄화수소 고리기가 바람직하다.
- [0314] 연결 비방향족 탄화수소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가지 ; 혹은, 단고리의 방향족 탄화수소 고리, 축합된 방향족 탄화수소 고리, 단고리의 비방향족 탄화수소 고리, 및 축합된 비방향족 탄화수소 고리로 이루어지는 군에서 선택되는 1 개 이상의 고리와, 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가지이다.
- [0315] 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 3 ~ 20 인 것이 바람직하다.
- [0316] 연결 비방향족 탄화수소 고리로서는 예를 들어, 제 1 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리와 제 2 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가지를 들 수 있다. 또한, 예를 들어, 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리와 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리가 단결합으로 결합되고, 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 탄소수 3 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 탄화수소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2

가기를 들 수 있다.

- [0317] 연결 비방향족 탄화수소 고리기로서는, 구체적으로는 비스(시클로hex산)-4,4'-디일기, 1-시클로hex실벤젠-4,4'-디일기를 들 수 있다.
- [0318] 비방향족 탄화수소 고리기로서는, 액정 화합물의 사이에 작용하는 분자간 상호 작용을 최적으로 함으로써 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 비연결 비방향족 탄화수소 고리기가 바람직하다.
- [0319] 비연결 비방향족 탄화수소 고리기로서는, 시클로hex산의 2 가지 (시클로hex산디일기) 가 바람직하고, 시클로hex산디일기로서는, 시클로hex산-1,4-디일기가 바람직하다.
- [0320]  $-Q^3-$  에 있어서의 복소 고리기는, 방향족 복소 고리기와 비방향족 복소 고리기를 포함한다.
- [0321] 방향족 복소 고리기는, 비연결 방향족 복소 고리기와 연결 방향족 복소 고리기를 포함한다.
- [0322] 비연결 방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 2 가지이며, 그 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 방향족 복소 고리기의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0323] 방향족 복소 고리로서는, 예를 들어, 푸란 고리, 벤조푸란 고리, 티오펜 고리, 벤조티오펜 고리, 피롤 고리, 피라졸 고리, 이미다졸 고리, 티아졸 고리, 옥사디아졸 고리, 인돌 고리, 카르바졸 고리, 피롤로이미다졸 고리, 피롤로피라졸 고리, 피롤로피롤 고리, 티에노피롤 고리, 티에노티오펜 고리, 푸로피롤 고리, 푸로푸란 고리, 티에노푸란 고리, 티에노티아졸 고리, 벤조이소옥사졸 고리, 벤조이소티아졸 고리, 벤조이미다졸 고리, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리다진 고리, 피리미딘 고리, 트리아진 고리, 퀴놀린 고리, 이소퀴놀린 고리, 시놀린 고리, 퀴녹살린 고리, 페난트리딘 고리, 퀴나졸린 고리, 퀴나졸리논 고리, 아줄렌 고리를 들 수 있다.
- [0324] 연결 방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가지이다. 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 연결 방향족 복소 고리기의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0325] 연결 방향족 복소 고리기로서는, 예를 들어, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리와 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가기를 들 수 있다.
- [0326] 비방향족 복소 고리기는, 비연결 비방향족 복소 고리기와 연결 비방향족 복소 고리기를 포함한다.
- [0327] 비연결 비방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 2 가지이며, 그 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 비연결 비방향족 복소 고리기의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0328] 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 2 가지의 비방향족 복소 고리로서는, 예를 들어, 테트라하이드로푸란 고리, 테트라하이드로피란 고리, 디옥산 고리, 테트라하이드로티오펜 고리, 테트라하이드로티오피란 고리, 피롤리딘 고리, 피페리딘 고리, 디하이드로피리딘 고리, 피페라진 고리, 테트라하이드로티아졸 고리, 테트라하이드로옥사졸 고리, 옥타하이드로퀴놀린 고리, 테트라하이드로퀴놀린 고리, 옥타하이드로퀴나졸린 고리, 테트라하이드로퀴나졸린 고리, 테트라하이드로이미다졸 고리, 테트라하이드로벤조이미다졸 고리, 퀴놀리딘 고리를 들 수 있다.
- [0329] 연결 비방향족 복소 고리기는, 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 복수가 단결합으로 결합되고, 고리를 구성하는 원자 상에 결합손을 갖는 2 가지이다. 단고리 또는 축합 고리의 탄소수는 4 ~ 20 인 것이, 적절한 코어의 크기에 의해 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다. 연결 비방향족 복소 고리기의 탄소수는 4 ~ 15 가 보다 바람직하다.
- [0330] 연결 방향족 복소 고리기로서는, 예를 들어, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리와 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리가 단결합으로 결합되고, 제 1 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 1 결합손을 가지며, 제 2 탄소수 4 ~ 20 의 단고리 또는 축합된 비방향족 복소 고리의 고리를 구성하는 원자 상에 제 2 결합손을 갖는 2 가기를

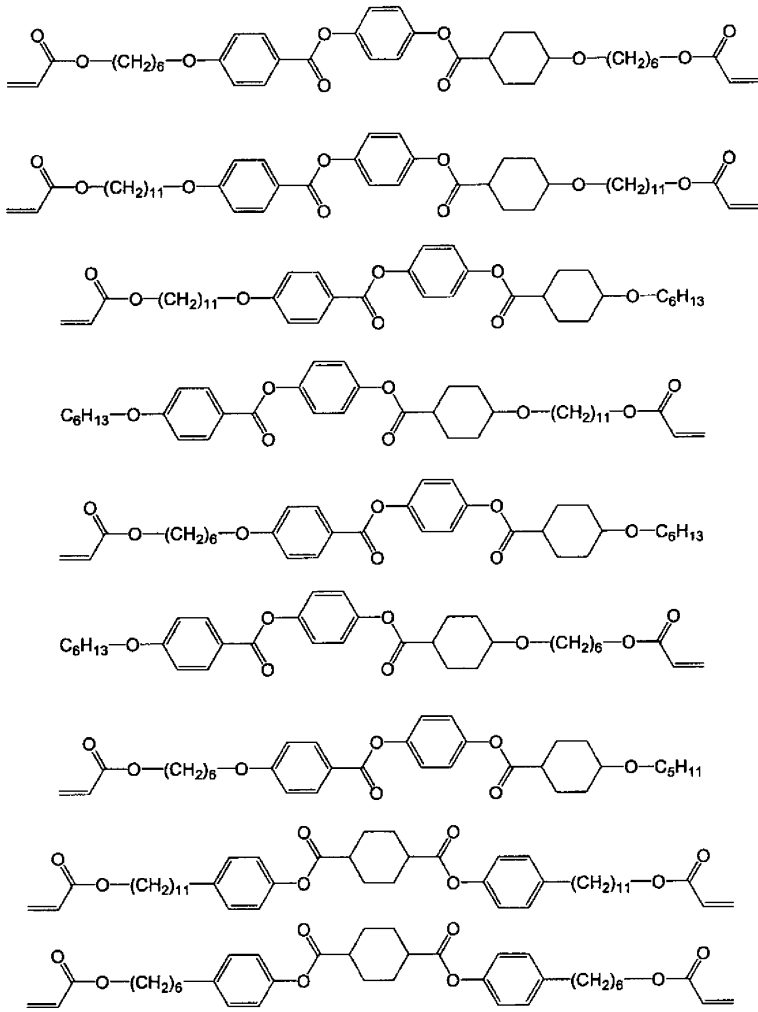
들 수 있다.

- [0331]  $-Q^3-$  에 있어서의 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리기는, 각각  $-R^n$ ,  $-OH$ ,  $-OR^n$ ,  $-O-C(=O)-R^n$ ,  $-NH_2$ ,  $-NH-R^n$ ,  $-N(R^{n'})-R^n$ ,  $-C(=O)-R^n$ ,  $-C(=O)-OR^n$ ,  $-C(=O)-NH_2$ ,  $-C(=O)-NH-R^n$ ,  $-C(=O)-N(R^{n'})-R^n$ ,  $-SH$ ,  $-SR^n$ , 트리플루오로메틸기, 술포모일기, 카르복시기, 술포기, 시아노기, 니트로기, 및 할로겐으로 이루어지는 군에서 선택되는 1 이상의 기로 치환되어 있어도 된다.  $-R^n$  및  $-R^{n'}$  는, 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 6 의 직사슬형 또는 분지형의 알킬기를 나타낸다.
- [0332]  $-Q^3-$  에 있어서의 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리기는, 분자 구조의 직선성이 높고, 중합성 액정 화합물 (4) 끼리가 회합하기 쉬워 액정 상태를 발현하기 쉽다는 점에서, 각각 독립적으로 무치환이거나, 메틸기, 메톡시기, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자가 치환되어 있는 것이 바람직하고, 무치환인 것이 보다 바람직하다.
- [0333]  $-Q^3-$  에 있어서의 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리가 갖는 치환기는, 동일해도 되고 상이해도 되고, 또한, 방향족 탄화수소 고리기, 비방향족 탄화수소 고리기, 방향족 복소 고리기, 비방향족 복소 고리기의 전부가 치환되어 있어도 되고, 전부가 무치환이어도 되고, 일부가 치환되어 있으며 일부가 무치환이어도 된다.
- [0334]  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$  및  $-A^{43}-$  에 있어서의 2 가 유기기가 갖는 치환기는, 동일해도 되고 상이해도 되고,  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$  및  $-A^{43}-$  에 있어서의 2 가 유기기의 전부가 치환되어 있어도 되고, 전부가 무치환이어도 되고, 일부가 치환되어 있으며 일부가 무치환이어도 된다.
- [0335]  $-Q^3-$  으로는, 탄화수소 고리기가 바람직하고, 페닐렌기, 시클로hex산디일기가 보다 바람직하다. 중합성 액정 화합물 (4) 의 분자 구조의 직선성을 높일 수 있다는 점에서,  $-Q^3-$  으로는, 1,4-페닐렌기, 시클로hex산-1,4-디일기가 더욱 바람직하다.
- [0336]  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$  및  $-A^{43}-$  의 2 가 유기기로서는,  $-Q^3-$  이 탄화수소 고리기인 것, 즉, 2 가 유기기로서 탄화수소 고리기인 것이 바람직하다. 2 가 유기기로서는, 페닐렌기, 시클로hex산디일기가 보다 바람직하고, 중합성 액정 화합물 (4) 의 분자 구조의 직선성을 높일 수 있다는 점에서, 1,4-페닐렌기, 시클로hex산-1,4-디일기가 더욱 바람직하다.
- [0337] 중합성 액정 화합물 (4) 로서는,  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$  및  $-A^{43}-$  중, 1 개가, 식 (5) 로 나타내는 부분 구조이고, 그 이외의 2 개가, 각각 독립적으로 2 가 유기기인 것이 바람직하고,  $-A^{41}-$ ,  $-A^{42}-$  및  $-A^{43}-$  중, 식 (5) 로 나타내는 부분 구조의  $-C^y-$  가 탄화수소 고리기인 것이 보다 바람직하고, 2 가 유기기가 탄화수소 고리기인 것이 특히 바람직하다. 또한, 그 탄화수소 고리기가, 1,4-페닐렌기 또는 시클로hex산-1,4-디일기인 것이 바람직하다. 또한,  $-A^{41}-$  및  $-A^{43}-$  의 일방이, 시클로hex산-1,4-디일기인 것이 바람직하다.
- [0338] 또,  $-A^{41}-$  및  $-A^{43}-$  중, 1 개가, 식 (5) 로 나타내는 부분 구조이고, 그 이외의 1 개 및  $-A^{42}-$  가 2 가 유기기인 것이 보다 바람직하다. 이 경우,  $-A^{41}-$  및  $-A^{43}-$  중, 2 가 유기기인 일방은, 시클로hex산-1,4-디일기인 것이 바람직하고,  $-A^{42}-$  가 1,4-페닐렌기인 것이 특히 바람직하다.
- [0339] ( $-Y^1-$  및  $-Y^2-$ )
- [0340]  $-Y^1-$  및  $-Y^2-$  는, 각각 독립적으로 단결합,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C\equiv C-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$  또는  $-SCH_2-$  를 나타낸다. 중합성 액정 화합물 (4) 의 직선성이나 분자 단축 둘레의 회전 운동을 하기 쉬운 경향이 있다는 점에서,  $-Y^1-$  및  $-Y^2-$  로서는, 각각 독립적으로  $\pi$  결합성이 작은, 단결합,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-C(=S)O-$ ,  $-OC(=S)-$ ,  $-C(=O)S-$ ,  $-SC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH=CH-$ ,  $-C(=O)NH-$ ,  $-NHC(=O)-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$ ,  $-CH_2S-$  또는  $-SCH_2-$  가 바람직하고, 단

결합,  $-C(=O)O-$ ,  $-OC(=O)-$ ,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH_2O-$ ,  $-OCH_2-$  가 보다 바람직하다.

- [0341] 상기 식 (4A), 식 (4C), 식 (4D), 식 (4F) 와 같이,  $-X^{51}-$  과  $-Y^1-$  또는  $-X^{51}-$  과  $-Y^2-$  가 결합되어 있는 경우에는,  $-X^{51}-$  과 결합되는  $-Y^1-$  또는  $-X^{51}-$  과 결합되는  $-Y^2-$  는 단결합인 것이 바람직하다.  $-X^{51}-$  과  $-Y^1-$  및  $-Y^2-$  의 타방은,  $-C(=O)O-$  또는  $-OC(=O)-$  인 것이 바람직하다.
- [0342] 상기 식 (4B), 식 (4E) 과 같이,  $-X^{51}-$  이  $-Y^1-$  및  $-Y^2-$  중 어느 것보다도 결합되지 않은 경우에는,  $-X^{51}-$  은,  $-CH_2CH_2-$ ,  $-CH_2O-$  또는  $-OCH_2-$  인 것이 바람직하고,  $-Y^1-$  및  $-Y^2-$  는 모두  $-C(=O)O-$  또는  $-OC(=O)-$  인 것이 바람직하다.
- [0343] (k)
- [0344] k 는 1 또는 2 이다. 어느 양태로서는, k 는 1 인 것이 바람직하다. 다른 양태로서는, k 는 2 인 것이 바람직하다.
- [0345] k 가 2 인 경우, 각각의  $-Y^2-$  는 서로 동일해도 되고 상이해도 되고, 각각의  $-A^{43}-$  은 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0346] (바람직한 구조)
- [0347] 중합성 액정 화합물 (4) 로서는, 상기 식 (4A), (4B), (4E) 또는 (4F) 로 나타내는 화합물인 것이 액정 화합물의 사이에 작용하는 분자간 상호 작용을 최적으로 하고, 또한 적절한 코어의 크기가 되어 분자 배향성이 양호해지는 이유에서 바람직하다.
- [0348] (중합성 액정 화합물의 구체예)
- [0349] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물로서, 구체적으로는 이하에 기재된 중합성 액정 화합물을 들 수 있지만, 이것들에 한정되는 것은 아니다. 이하의 예시 식 중,  $-C_6H_{13}$  은 n-헥실기,  $-C_5H_{11}$  은 n-펜틸기를 의미한다.

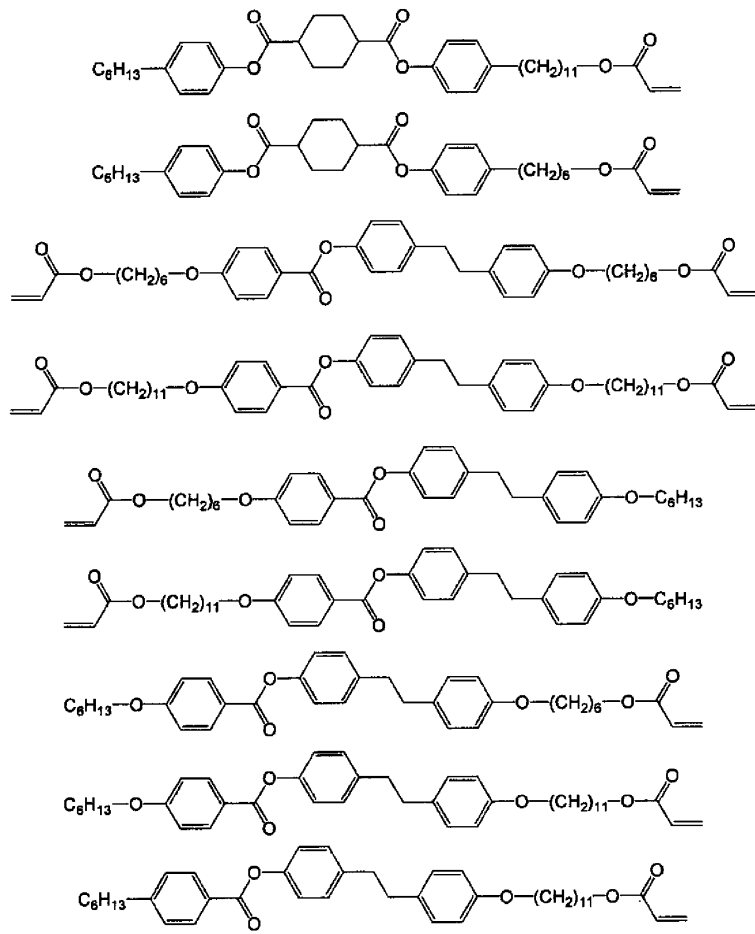
[0350] [화학식 13]



[0351]

[0352]

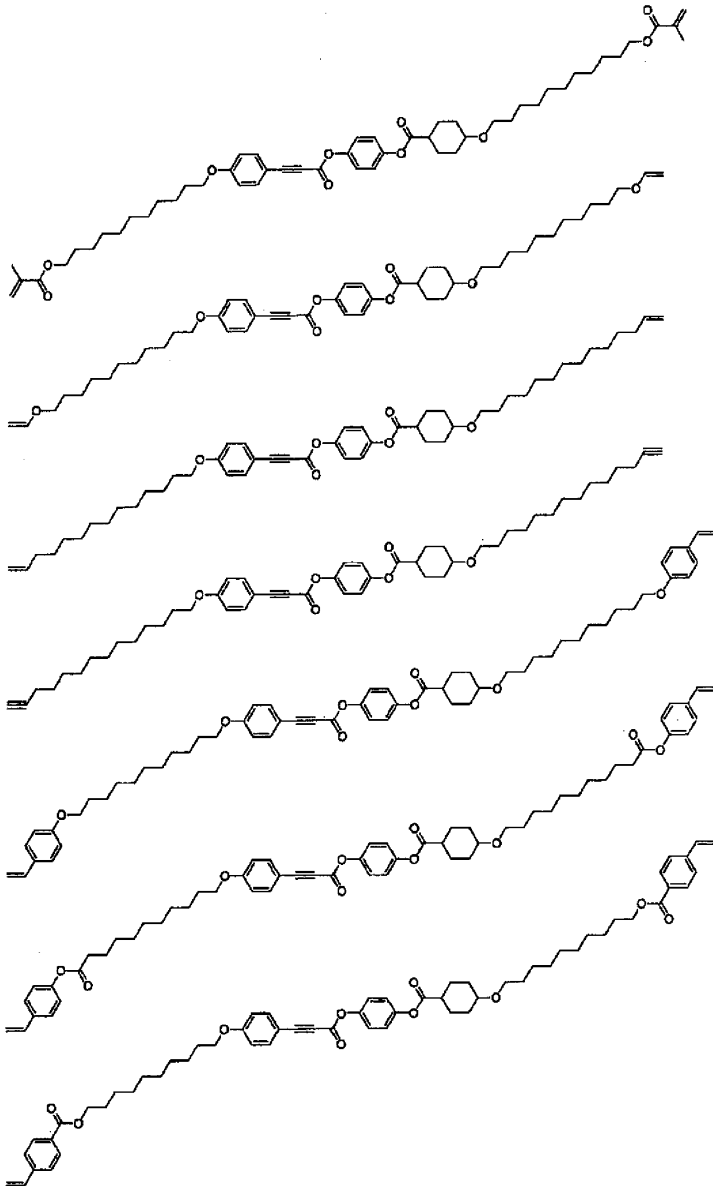
[화학식 14]



[0353]

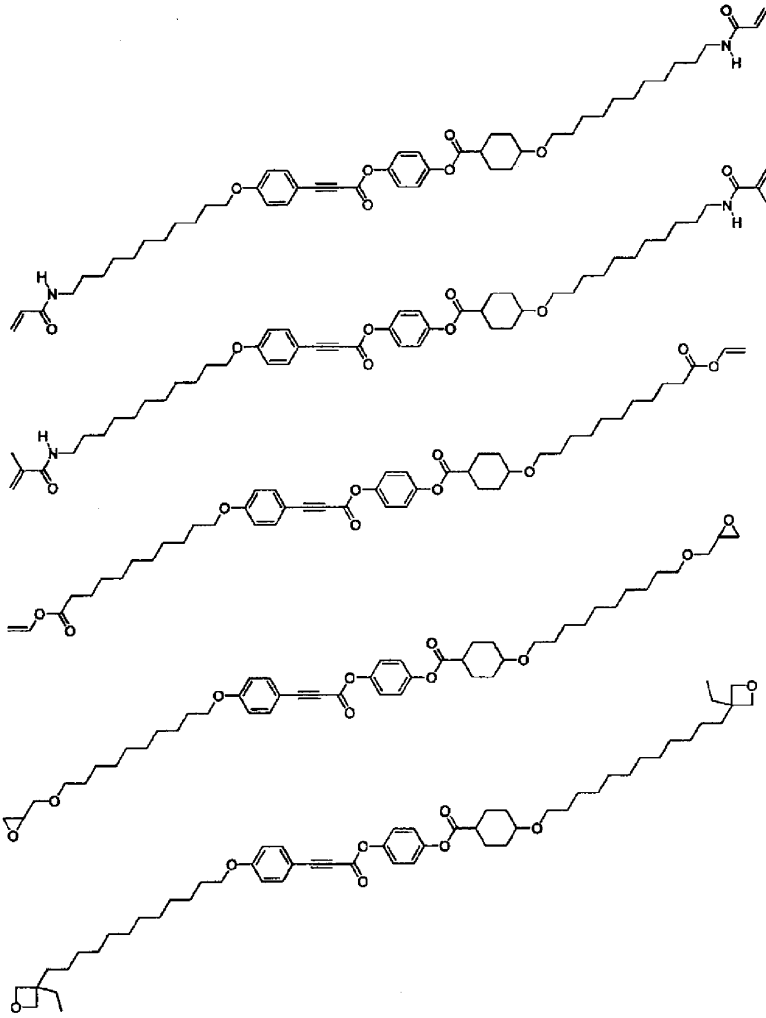
[0354]

[화학식 15]



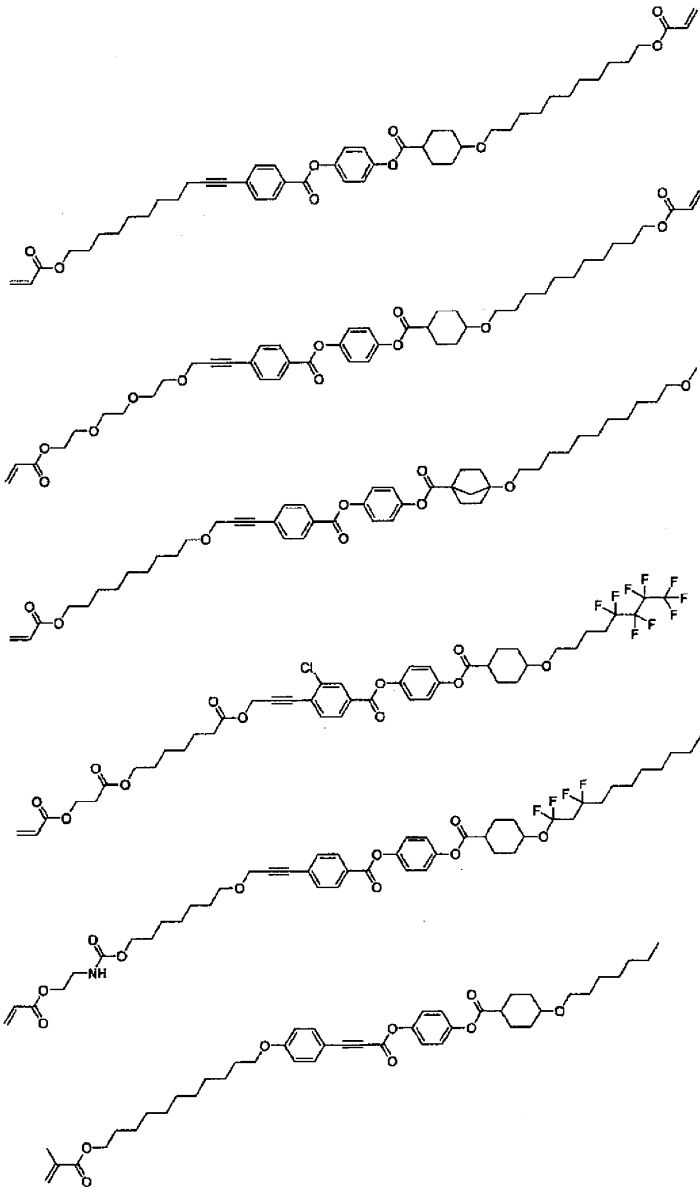
[0355]

[0356] [화학식 16]



[0357]

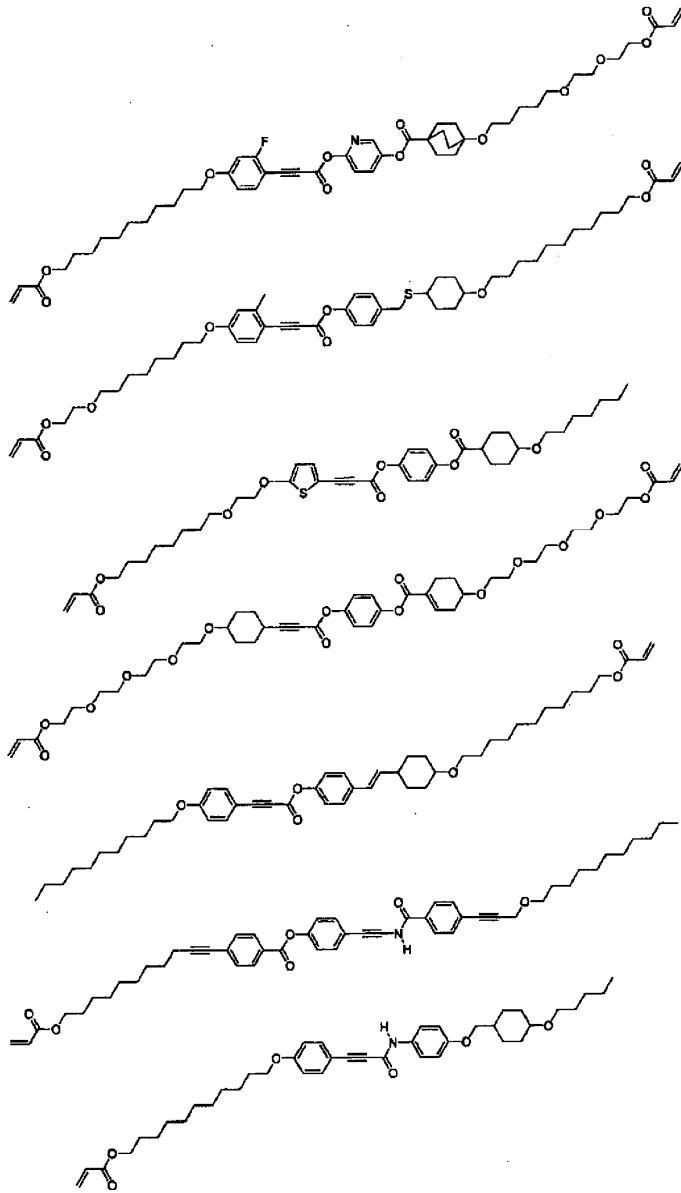
[0358] [화학식 17]



[0359]

[0360]

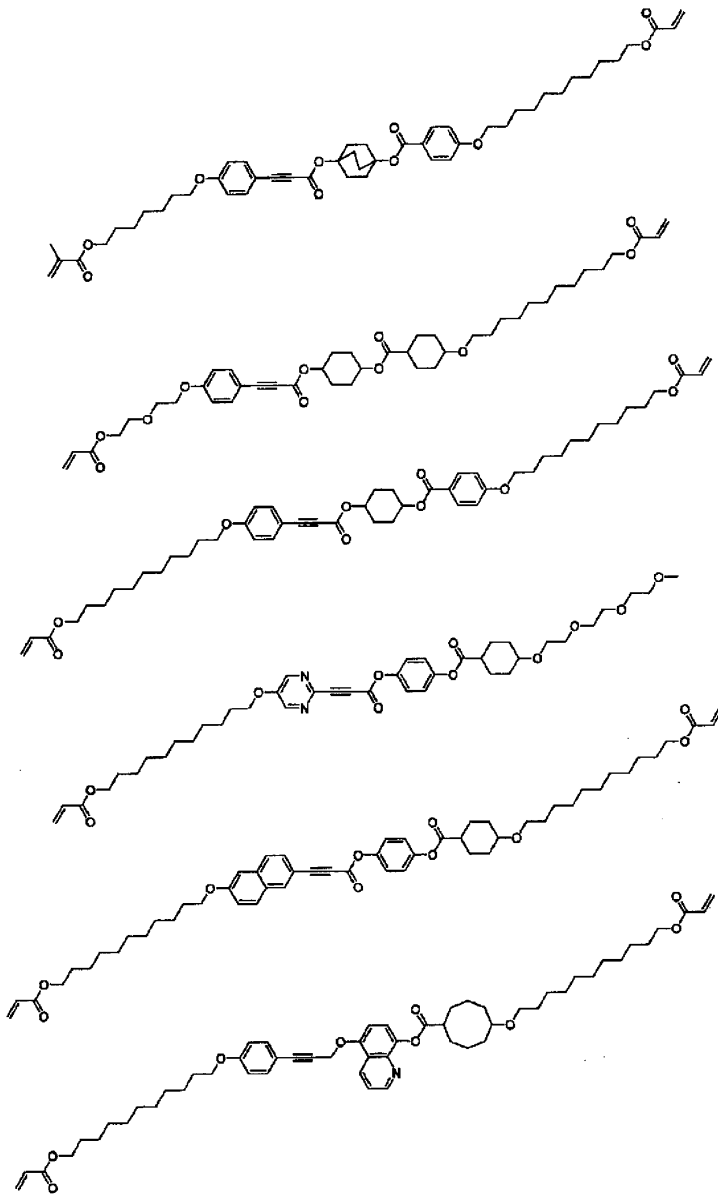
[화학식 18]



[0361]

[0362]

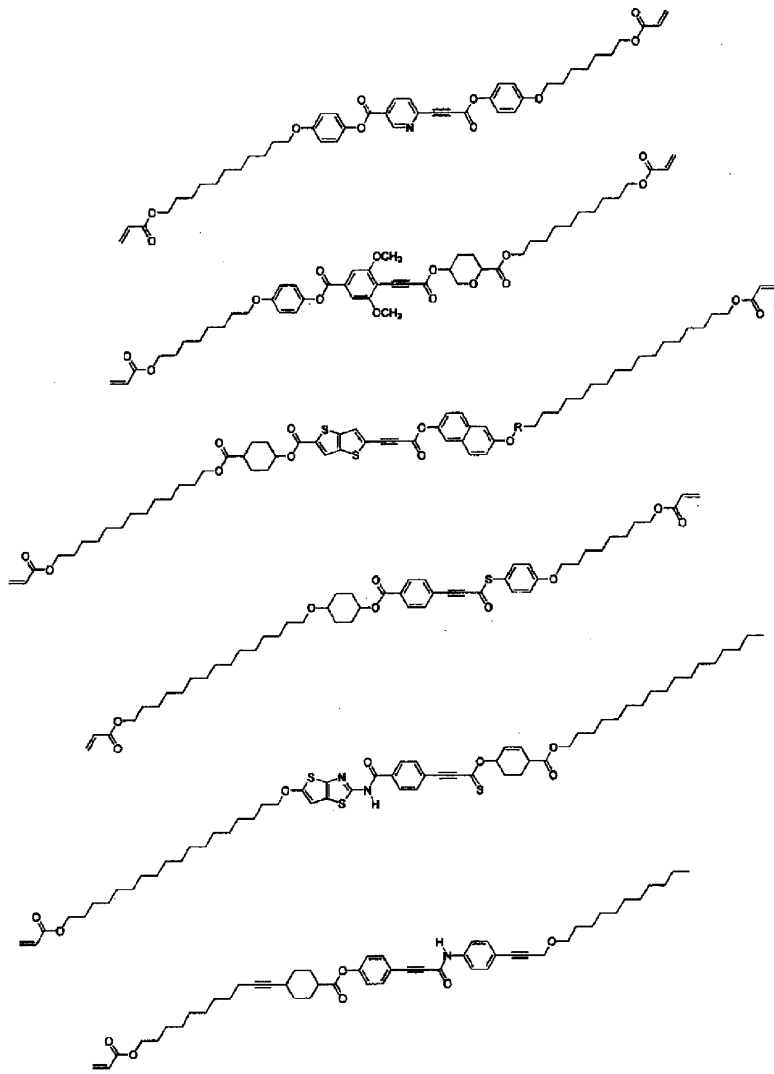
[화학식 19]



[0363]

[0364]

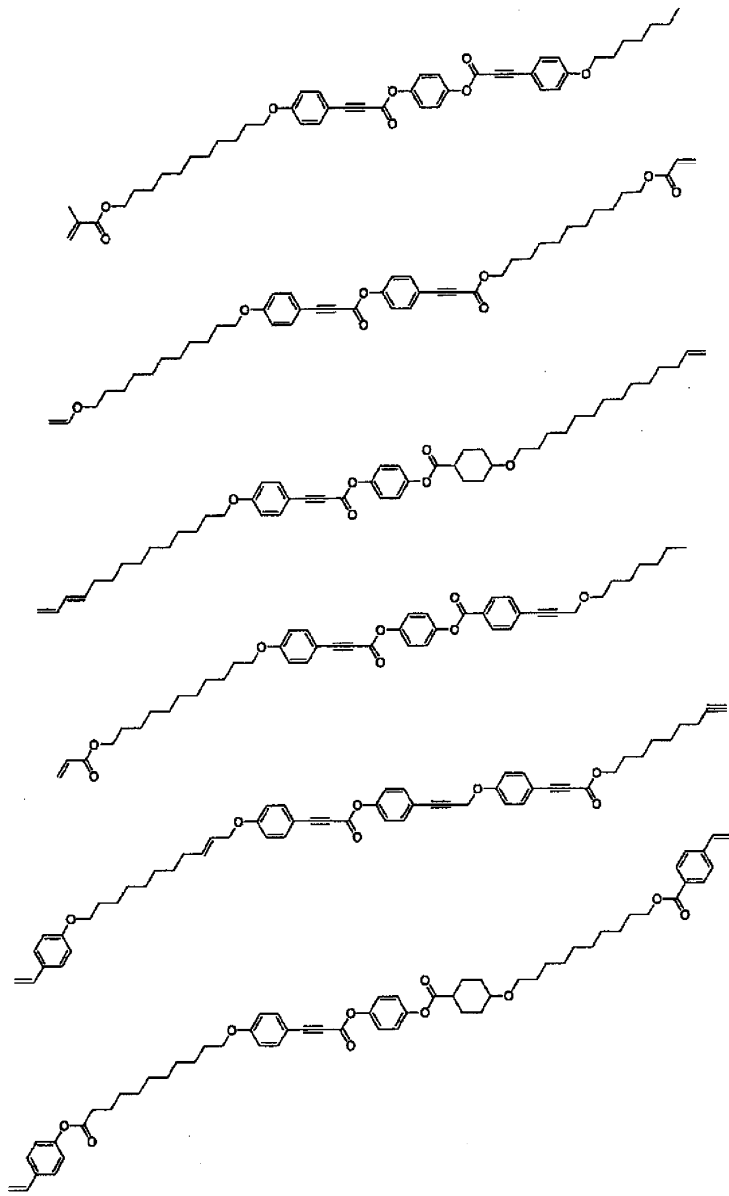
[화학식 20]



[0365]

[0366]

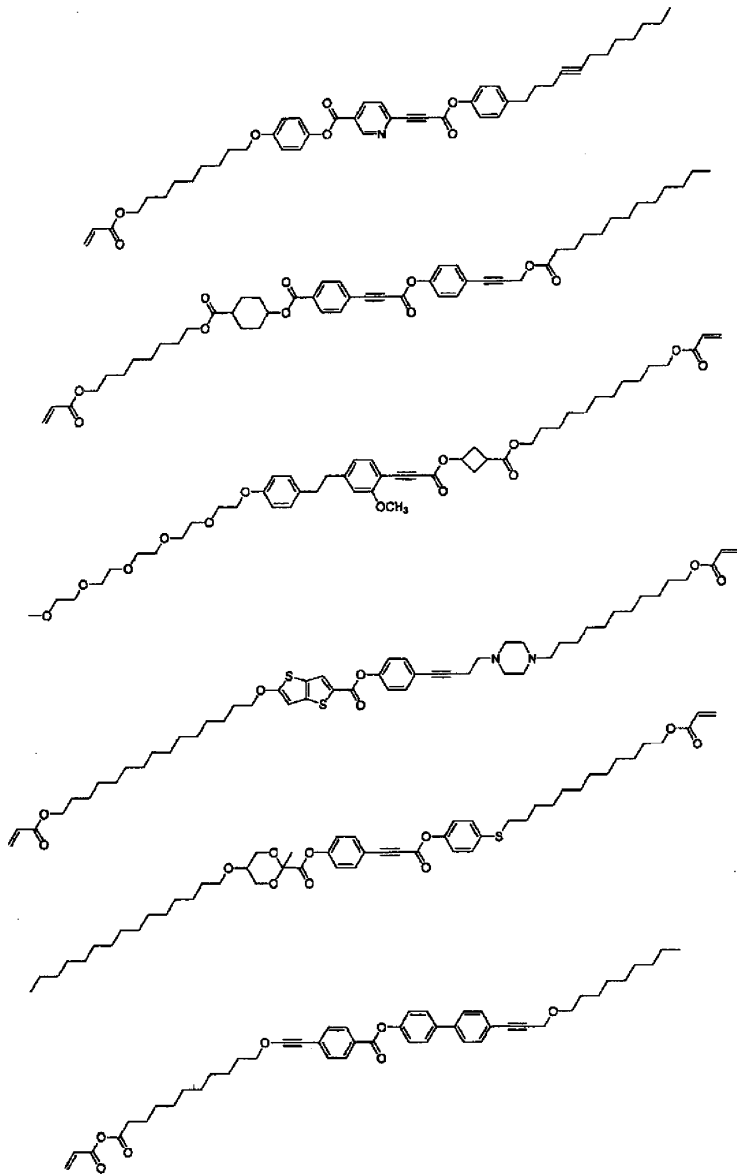
[화학식 21]



[0367]

[0368]

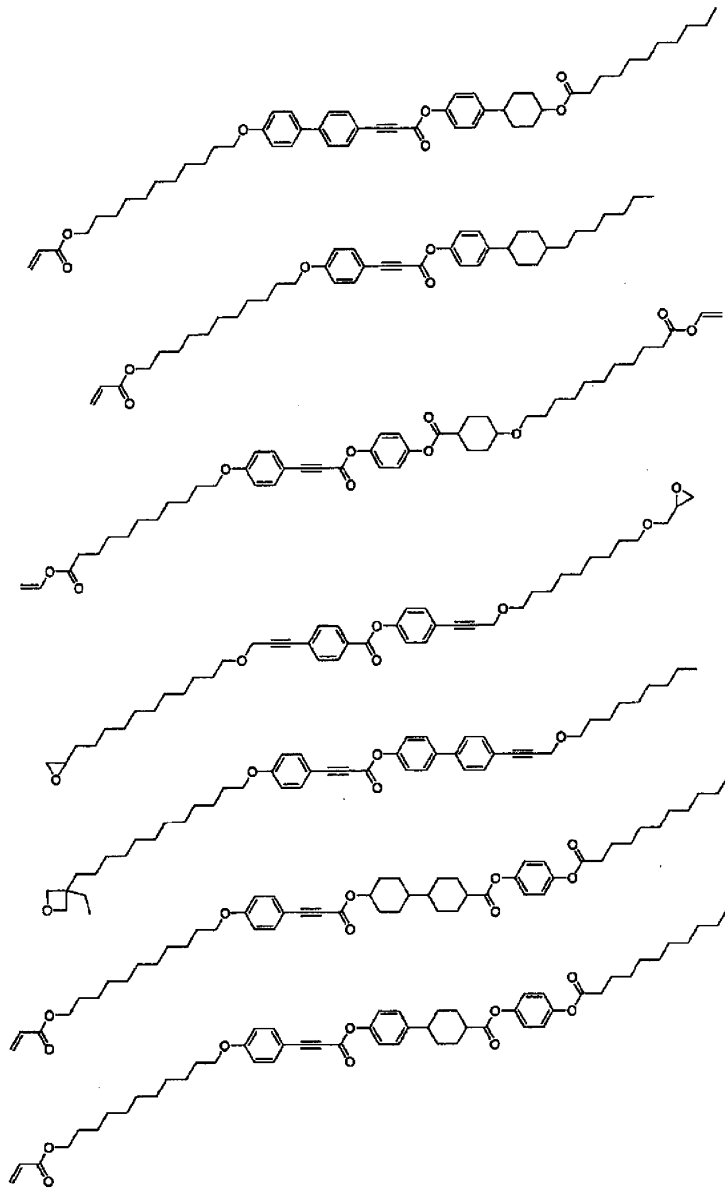
[화학식 22]



[0369]

[0370]

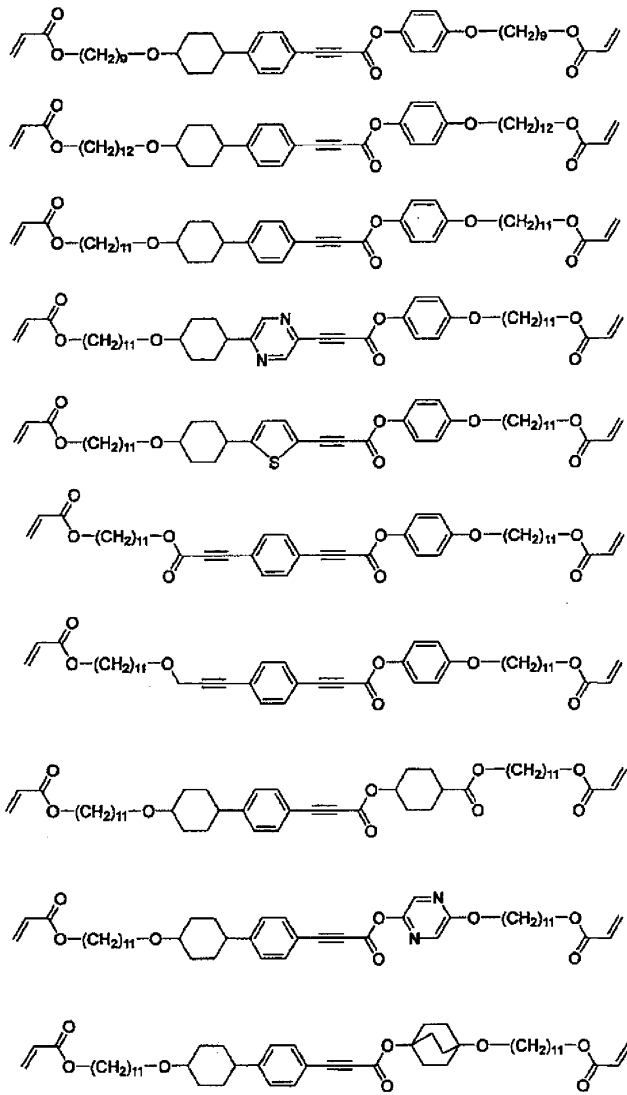
[화학식 23]



[0371]

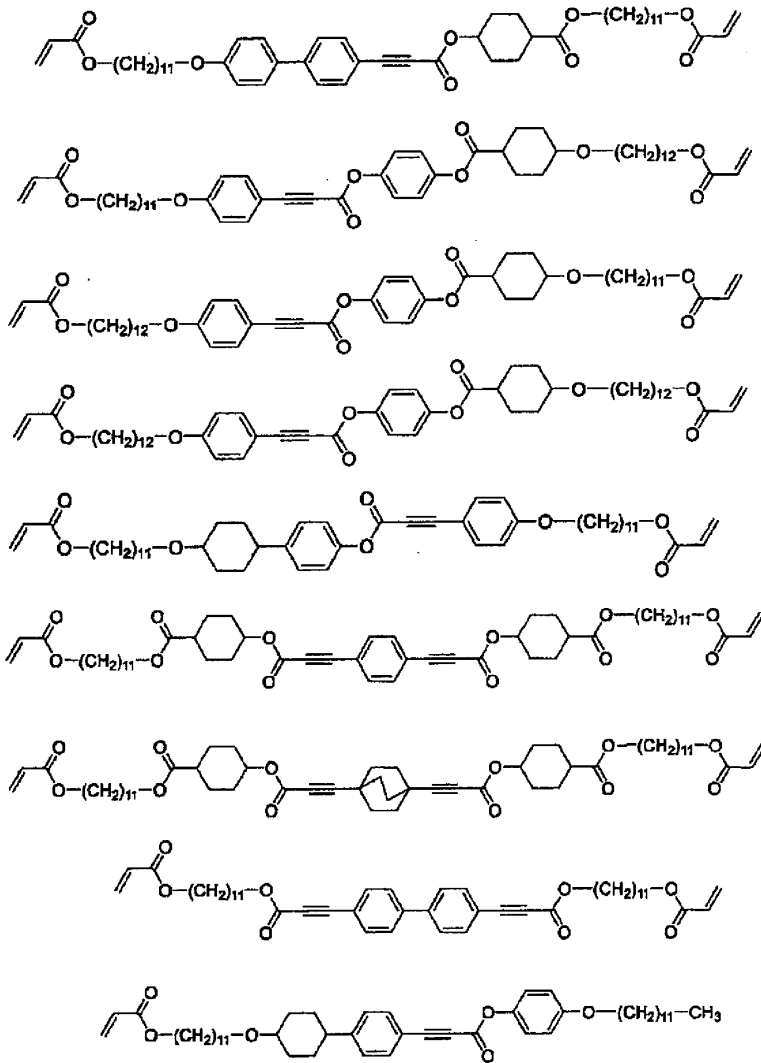
[0372]

[화학식 24]



[0373]

[0374] [화학식 25]



[0375]

[0376] (액정 화합물의 함유량)

[0377] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 함유되는 액정 화합물은, 중합성 액정 화합물 (4) 로 이루어지는 것이 바람직하다. 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에는, 중합성 액정 화합물의 1 종만이 단독으로 포함되어 있어도 되고, 2 종 이상이 임의의 조합 및 비율로 포함되어 있어도 된다.

[0378] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서의 액정 화합물의 함유량 (2 종 이상의 액정 화합물을 병용하는 경우에는, 각각의 함유량의 총합) 은, 이방성 색소막 형성용 조성물의 고형분 (100 질량부) 에 대하여 35 질량부 이상이 바람직하고, 50 질량부 이상이 보다 바람직하고, 55 질량부 이상이 더욱 바람직하고, 99 질량부 이하가 바람직하고, 98 질량부 이하가 보다 바람직하다. 이방성 색소막 형성용 조성물의 액정 화합물의 함유량이 상기 하한 이상 상한 이하이면 액정 분자의 배향성이 높아지는 경향이 있다.

[0379] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 중합성 액정 화합물 (4) 이외의 다른 중합성 또는 비중합성의 액정 화합물의 1 종 또는 2 종 이상을 포함하는 것 이어도 되지만, 중합성 액정 화합물 (4) 를 사용하는 것에 따른 본 발명의 효과를 한층 더 유효하게 얻는다는 관점에서, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 액정 화합물의 총량 100 질량% 중의 중합성 액정 화합물 (4) 의 비율은, 5 질량% 이상인 것이 바람직하고, 10 질량% 이상인 것이 보다 바람직하고, 특히 15 ~ 100 질량% 인 것이 바람직하다.

[0380] 또, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 중합성 액정 화합물을, 그 이방성 색소막 형성용 조성물 중의 질량 농도가, 본 발명의 화합물의 농도에 대하여 후술하는 질량 농도가 되도록 함유하는 것이 바람직하다.

[0381] (등방상 출현 온도)

- [0382] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 함유되는 중합성 액정 화합물은, 프로세스의 관점에서, 그 등방상 출현 온도가, 160 °C 이하인 것이 바람직하고, 140 °C 이하가 보다 바람직하고, 115 °C 이하가 더욱 바람직하고, 110 °C 이하가 더욱더 바람직하고, 105 °C 이하가 특히 바람직하다.
- [0383] 여기서 등방상 출현 온도란, 액정으로부터 액체로의 상전이 온도 및 액체로부터 액정으로의 상전이 온도를 의미한다. 본 발명에 있어서는, 이들 상전이 온도 중 적어도 일방이 상기 상한 이하인 것이 바람직하고, 이들 상전이 온도의 양방이 상기 상한 이하인 것이 보다 바람직하다.
- [0384] (중합성 액정 화합물의 제조 방법)
- [0385] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 함유되는 중합성 액정 화합물은, 알킬화 반응, 에스테르화 반응, 아미드화 반응, 에테르화 반응, 입소 치환 반응, 금속 촉매를 사용한 커플링 반응 등의 공지된 화학 반응을 조합함으로써 제조할 수 있다.
- [0386] 예를 들어, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 함유되는 중합성 액정 화합물은, 후기하는 실시예에 기재된 방법이나, 「액정 편람」(마루젠 주식회사, 2000년 10월 30일 발행)의 449 ~ 468 페이지에 기재된 방법에 따라서 합성할 수 있다.
- [0387] (중합성 액정 화합물과 본 발명의 화합물의 관계)
- [0388] 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용하여 형성되는 이방성 색소막의 배향성을 향상시키기 쉽다는 관점에서, 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서는, 중합성 액정 화합물의 분자 길이와 색소의 분자 길이의 차이가 작은 쪽이 액정 분자와 색소 분자의 분자간 상호 작용이 강하여, 색소 분자가 액정 분자끼리의 회합을 저해하기 어렵기 때문에 바람직하다.
- [0389] 따라서, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서는, 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n1}$ ) 과, 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 본 발명의 화합물이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n2}$ ) 의 비 ( $r_{n1}/r_{n2}$ ) 가 0.7 ~ 1.5 인 것이 바람직하다.
- [0390] 또한, 2 개 이상의 고리가 축합되는 축합 고리는, 고리 구조로서는 1 개로 센다.
- [0391] 여기서, 본 발명의 화합물, 예를 들어 화합물 (1) 이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n2}$ ) 란, 식 (1) 에 있어서  $-A^{11}-$ ,  $-A^{12}-$ ,  $-A^{13}-$  및  $-A^{14}-$  의 총합이며,  $r_{n2}$  는 4 이다.
- [0392] 식 (1) 의  $-X^1$  이 피롤리디닐기나 피페리디닐기와 같은 고리형의 관능기여도,  $-X^1$  에 포함되는 고리 구조는 본 발명의 화합물이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n2}$ ) 에는 포함시키지 않는다.
- [0393] 또, 본 발명의 화합물, 예를 들어 화합물 (2) 가 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n2}$ ) 란, 식 (2) 에 있어서는,  $-A^1-$ ,  $-A^2-$ , 및  $-A^3-$  의 총합이며, 구체적으로는, n 이 1 인 경우,  $r_{n2}$  는 3 ; n 이 2 인 경우,  $r_{n2}$  는 4 ; n 이 3 인 경우,  $r_{n2}$  는 5 이다.
- [0394] 식 (2) 의  $-X$  가 피롤리디닐기나 피페리디닐기와 같은 고리형의 관능기여도,  $-X$  에 포함되는 고리 구조는 본 발명의 화합물이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n2}$ ) 에는 포함시키지 않는다.
- [0395] 보다 구체적으로는,  $r_{n2}$  가 3 인 경우,  $r_{n1}$  은 3 또는 4 이고 ;  $r_{n2}$  가 4 인 경우,  $r_{n1}$  은 3, 4, 5 또는 6 이고 ;  $r_{n2}$  가 5 인 경우,  $r_{n1}$  은 4, 5, 6, 또는 7 이면, 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n1}$ ) 과, 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 본 발명의 화합물이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n2}$ ) 의 비 ( $r_{n1}/r_{n2}$ ) 가 0.7 ~ 1.5 가 되기 때문에 바람직하다.
- [0396] 이방성 색소막 형성용 조성물에 포함되는 중합성 액정 화합물이 갖는 고리 구조의 수 ( $r_{n1}$ ) 에는, 중합성 액정 화합물에 있어서의 중합성기에 포함되는 고리 구조 (예를 들어, 옥시란 고리나 옥세탄 고리 등.) 는 포함시키지 않는다.
- [0397] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 중합성 액정 화합물의 질량 농도가 본 발명의 화합물의 질량 농도의

1 배 이상이 되도록 포함하는 것이 바람직하다. 중합성 액정 화합물의 질량 농도가 본 발명의 화합물의 질량 농도의 1 배 이상이면 높은 이색비가 얻어지는 경향이 있고, 이방성 색소막의 기계 강도를 향상시킬 수 있는 관점에서 바람직하다. 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물의 중합성 액정 화합물의 질량 농도는, 본 발명의 화합물의 질량 농도의 1.5 배 이상인 것이 보다 바람직하고, 2 배 이상인 것이 더욱 바람직하고, 3 배 이상인 것이 특히 바람직하고, 7 배 이상인 것이 특히 더 바람직하다. 한편, 중합성 액정 화합물이 본 발명의 화합물에 대해 지나치게 많으면 이방성 색소막으로서의 흡광도가 작아지는 경향이므로, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물 중의 중합성 액정 화합물의 질량 농도는, 본 발명의 화합물의 질량 농도의 1000 배 이하인 것이 바람직하고, 700 배 이하인 것이 보다 바람직하고, 500 배 이하인 것이 더욱 바람직하다.

- [0398] <중합 개시제>
- [0399] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 필요에 따라 중합 개시제를 함유해도 된다.
- [0400] 중합 개시제는, 중합성 액정 화합물의 중합 반응을 개시할 수 있는 화합물이다. 중합 개시제로서는, 광의 작용에 의해 활성 라디칼을 발생시키는 광 중합 개시제가 바람직하다.
- [0401] 사용할 수 있는 중합 개시제로서는, 예를 들어, 티타노센 유도체류 ; 비이미다졸 유도체류 ; 할로메틸화옥사디아졸 유도체류 ; 할로메틸-s-트리아진 유도체류 ; 알킬페논 유도체류 ; 옥심에스테르계 유도체류 ; 벤조인류 ; 벤조페논 유도체류 ; 아실포스핀옥사이드 유도체류 ; 요오도늄염류 ; 술폰늄염류 ; 안트라퀴논 유도체류 ; 아세토페논 유도체류 ; 티오크산톤 유도체류 ; 벤조산에스테르 유도체류 ; 아크리딘 유도체류 ; 페나진 유도체류 ; 안트론 유도체류를 들 수 있다.
- [0402] 이들 광중합 개시제 중에서는, 알킬페논 유도체류, 옥심에스테르계 유도체류, 비이미다졸 유도체류, 아세토페논 유도체류, 및 티오크산톤 유도체류가 보다 바람직하다.
- [0403] 구체적으로는, 티타노센 유도체류로서는, 예를 들어, 디시클로펜타디에닐티타늄디클로라이드, 디시클로펜타디에닐티타늄비스페닐, 디시클로펜타디에닐티타늄비스(2,3,4,5,6-펜타플루오로페니-1-일), 디시클로펜타디에닐티타늄비스(2,3,5,6-테트라플루오로페니-1-일), 디시클로펜타디에닐티타늄비스(2,4,6-트리플루오로페니-1-일), 디시클로펜타디에닐티타늄디(2,6-디플루오로페니-1-일), 디시클로펜타디에닐티타늄디(2,4-디플루오로페니-1-일), 디(메틸시클로펜타디에닐)티타늄비스(2,3,4,5,6-펜타플루오로페니-1-일), 디(메틸시클로펜타디에닐)티타늄비스(2,6-디플루오로페니-1-일), 디시클로펜타디에닐티타늄 [2,6-디-플루오로-3-(피로-1-일)-페니-1-일] 을 들 수 있다.
- [0404] 비이미다졸 유도체류로서는, 예를 들어, 2-(2'-클로로페닐)-4,5-디페닐이미다졸 이량체, 2-(2'-클로로페닐)-4,5-비스(3'-메톡시페닐)이미다졸 이량체, 2-(2'-플루오로페닐)-4,5-디페닐이미다졸 이량체, 2-(2'-메톡시페닐)-4,5-디페닐이미다졸 이량체, (4'-메톡시페닐)-4,5-디페닐이미다졸 이량체를 들 수 있다.
- [0405] 할로메틸화 옥사디아졸 유도체류로서는, 예를 들어, 2-트리클로로메틸-5-(2'-벤조푸릴)-1,3,4-옥사디아졸, 2-트리클로로메틸-5- [β-(2'-벤조푸릴)비닐] -1,3,4-옥사디아졸, 2-트리클로로메틸-5- [β-(2'-(6''-벤조푸릴)비닐)] -1,3,4-옥사디아졸, 2-트리클로로메틸-5-푸릴-1,3,4-옥사디아졸을 들 수 있다.
- [0406] 할로메틸-s-트리아진 유도체류로서는, 예를 들어, 2-(4-메톡시페닐)-4,6-비스(트리클로로메틸)-s-트리아진, 2-(4-메톡시나프틸)-4,6-비스(트리클로로메틸)-s-트리아진, 2-(4-에톡시나프틸)-4,6-비스(트리클로로메틸)-s-트리아진, 2-(4-에톡시카르보닐나프틸)-4,6-비스(트리클로로메틸)-s-트리아진을 들 수 있다.
- [0407] 알킬페논 유도체류로서는, 예를 들어, 디에톡시아세토페논, 2-메틸-1- [4-(메틸티오)페닐] -2-모르폴리노프로판-1-온, 2-벤질-2-디메틸아미노-1-(4-모르폴리노페닐)-부탄-1,2-벤질-2-디메틸아미노-1-(4-모르폴리노페닐)부탄-1-온, 4-디메틸아미노에틸벤조에이트, 4-디메틸아미노이소아밀벤조에이트, 4-디메틸아미노아세토페논, 4-디메틸아미노프로피오페논, 2-에틸헥실-1,4-디메틸아미노벤조에이트, 2,5-비스(4-디메틸아미노벤잘)시클로헥산, 7-디메틸아미노-3-(4-디메틸아미노벤조일)쿠마린, 4-(디메틸아미노)칼콘을 들 수 있다.
- [0408] 옥심에스테르계 유도체류로서는, 예를 들어, 2-(벤조일옥시이미노)-1-[4-(페닐티오)페닐]-1-옥타논, 0-아세틸-1-[6-(2-메틸벤조일)-9-에틸-9H-카바졸-3-일]에타논옥심, 일본 공개특허공보 2000-80068호, 일본 공개특허공보 2006-36750호, 국제 공개 제2009/131189호 등에 기재되어 있는 옥심에스테르 유도체를 들 수 있다.
- [0409] 벤조인류로서는, 예를 들어, 벤조인, 벤조인메틸에테르, 벤조인페닐에테르, 벤조인이소부틸에테르, 벤조인이소

프로필에테르를 들 수 있다.

- [0410] 벤조페논 유도체류로서는, 예를 들어, 벤조페논, 미힐라케톤, 2-메틸벤조페논, 3-메틸벤조페논, 4-메틸벤조페논, 2-클로로벤조페논, 4-브로모벤조페논, 2-카르복시벤조페논, o-벤조일벤조산메틸, 4-페닐벤조페논, 4-벤조일-4'-메틸디페닐술폰아이드, 3,3',4,4'-테트라(tert-부틸퍼옥시카르보닐)벤조페논, 및 2,4,6-트리메틸벤조페논을 들 수 있다.
- [0411] 아실포스핀옥사이드 유도체류로서는, 예를 들어, 2,4,6-트리메틸벤조일디페닐포스핀옥사이드, 비스-(2,6-디메톡시벤조일)-2,4,4-트리메틸펜틸포스핀옥사이드 및 비스 (2,4,6-트리메틸벤조일)페닐포스핀옥사이드 등을 들 수 있다.
- [0412] 요오도늄염류로서는, 예를 들어, 디페닐요오도늄·테트라키스(펜타플루오로페닐)보레이트, 디페닐요오도늄·헥사플루오로포스페이트, 디페닐요오도늄·헥사플루오로안티모네이트, 디(4-노닐페닐)요오도늄·헥사플루오로포스페이트를 들 수 있다.
- [0413] 술포늄염류로서는, 예를 들어, 트리페닐술포늄·헥사플루오로포스페이트, 트리페닐술포늄·헥사플루오로안티모네이트, 트리페닐술포늄·테트라키스(펜타플루오로페닐)보레이트, 디페닐 [4-(페닐티오)페닐] 술포늄·헥사플루오로포스페이트, 4,4'-비스 [디페닐술폰이오] 디페닐술폰아이드·비스헥사플루오로포스페이트, 4,4'-비스 [디(β-하이드록시에톡시)페닐술폰이오] 디페닐술폰아이드·비스헥사플루오로안티모네이트, 4,4'-비스 [디(β-하이드록시에톡시)페닐술폰이오] 디페닐술폰아이드·비스헥사플루오로포스페이트, 7- [디(p-톨루일)술폰이오] -2-이소프로필티오크산톤·헥사플루오로안티모네이트, 7- [디(p-톨루일)술폰이오] -2-이소프로필티오크산톤·테트라키스(펜타플루오로페닐)보레이트, 4-페닐카르보닐-4'-디페닐술폰이오-디페닐술폰아이드·헥사플루오로포스페이트, 4-(p-tert-부틸페닐카르보닐)-4'-디페닐술폰이오-디페닐술폰아이드·헥사플루오로안티모네이트, 4-(p-tert-부틸페닐카르보닐)-4'-디(p-톨루일)술폰이오-디페닐술폰아이드·테트라키스(펜타플루오로페닐)보레이트를 들 수 있다.
- [0414] 안트라퀴논 유도체류로서는, 예를 들어, 2-메틸안트라퀴논, 2-에틸안트라퀴논, 2-t-부틸안트라퀴논, 1-클로로안트라퀴논을 들 수 있다.
- [0415] 아세토페논 유도체류로서는, 예를 들어, 2,2-디메톡시-2-페닐아세토페논, 2,2-디에톡시아세토페논, 1-하이드록시시클로헥실페닐케톤, α-하이드록시-2-메틸페닐프로파논, 1-하이드록시-1-메틸에틸-(p-이소프로필페닐)케톤, 1-하이드록시-1-(p-도데실페닐)케톤, 2-메틸-(4'-메틸티오페닐)-2-모르폴리노-1-프로파논, 1,1,1-트리클로로메틸-(p-부틸페닐)케톤 등을 들 수 있다.
- [0416] 티오크산톤 유도체류로서는, 예를 들어, 티오크산톤, 2-에틸티오크산톤, 2-이소프로필티오크산톤, 2-클로로티오크산톤, 2,4-디메틸티오크산톤, 2,4-디에틸티오크산톤, 2,4-디이소프로필티오크산톤을 들 수 있다.
- [0417] 벤조산에스테르 유도체류로서는, 예를 들어, p-디메틸아미노벤조산에틸, p-디에틸아미노벤조산에틸을 들 수 있다.
- [0418] 아크리딘 유도체류로서는, 예를 들어, 9-페닐아크리딘, 9-(p-메톡시페닐)아크리딘을 들 수 있다.
- [0419] 페나진 유도체류로서는, 예를 들어, 9,10-디메틸벤즈페나진을 들 수 있다.
- [0420] 안트론 유도체류로서는, 예를 들어, 벤즈안트론 등을 들 수 있다.
- [0421] 중합 개시제는, 1 종을 단독으로 사용해도 되고, 2 종 이상을 병용해도 된다.
- [0422] 중합 개시제로서, 시판품을 사용할 수도 있다.
- [0423] 시판품으로는, 예를 들어, IRGACURE (등록 상표. 이하 동일.) 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 (모두, BASF 사 제조); 셰이크울 (등록 상표) BZ, Z, 및 BEE (세이코 화학 주식회사 제조); 카야큐어 (kayacure) (등록 상표) BP100, 및 UVI-6992 (다우·케미컬 주식회사 제조); 아데카옵토머 SP-152, 및 SP-170 (주식회사 ADEKA 제조); TAZ-A, 및 TAZ-PP (닛폰 시이베르헤그너 주식회사 제조); 그리고, TAZ-104 (주식회사 산와 케미컬 제조); TRONLYTR-PBG-304, TRONLYTR-PBG-309, TRONLYTR-PBG-305, TRONLYTR-PBG-314 (창저우 강력 전자 신재료 유한 공사사 (CHANGZHOU TRONLY NEW ELECTRONIC MATERIALS CO., LTD) 제조) 를 들 수 있다.

- [0424] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물이 중합 개시제를 함유하는 경우, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서의 중합 개시제의 함유량은, 중합성 액정 화합물의 배향을 흐트러뜨리기 어렵다는 관점에서, 중합성 액정 화합물 100 질량부에 대하여 바람직하게는 0.1 ~ 30 질량부이고, 보다 바람직하게는 0.5 ~ 10 질량부이고, 더욱 바람직하게는 0.5 ~ 8 질량부이다.
- [0425] 또, 필요에 따라 중합 개시제에 중합 가속제를 병용해도 된다. 사용되는 중합 가속제로서는, 예를 들어, N,N-디메틸아미노벤조산에틸에스테르 등의 N,N-디알킬아미노벤조산알킬에스테르류 ; 2-메르캅토벤조티아졸, 2-메르캅토벤조옥사졸, 2-메르캅토벤조이미다졸 등의 복소 고리를 갖는 메르캅도 화합물 ; 지방족 다관능 메르캅도 화합물 등의 메르캅도 화합물류를 들 수 있다.
- [0426] 중합 가속제는, 1 종을 단독으로 사용해도 되고, 2 종 이상을 병용해도 된다.
- [0427] 또한, 필요에 따라 감응 감도를 높이는 목적으로, 증감 색소를 병용해도 된다. 증감 색소는, 노광 광원의 파장에 따라 적절한 것이 사용되는데, 예를 들어, 일본 공개특허공보 평4-221958호, 일본 공개특허공보 평4-219756호 등에 기재된 크산텐계 색소 ; 일본 공개특허공보 평3-239703호, 일본 공개특허공보 평5-289335호 등에 기재된 복소 고리를 갖는 쿠마린계 색소 ; 일본 공개특허공보 평3-239703호, 일본 공개특허공보 평5-289335호 등에 기재된 3-케토쿠마린계 색소 ; 일본 공개특허공보 평6-19240호 등에 기재된 피로메텐계 색소 ; 일본 공개특허공보 소47-2528호, 일본 공개특허공보 소54-155292호, 일본 특허공보 소45-37377호, 일본 공개특허공보 소48-84183호, 일본 공개특허공보 소52-112681호, 일본 공개특허공보 소58-15503호, 일본 공개특허공보 소60-88005호, 일본 공개특허공보 소59-56403호, 일본 공개특허공보 평2-69호, 일본 공개특허공보 소57-168088호, 일본 공개특허공보 평5-107761호, 일본 공개특허공보 평5-210240호, 일본 공개특허공보 평4-288818호 등에 기재된 디알킬아미노벤젠 골격을 갖는 색소를 들 수 있다.
- [0428] 증감 색소는, 1 종을 단독으로 사용해도 되고, 2 종 이상을 병용해도 된다.
- [0429] <용제>
- [0430] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 필요에 따라 용제를 함유해도 된다.
- [0431] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 사용할 수 있는 용제로서는, 중합성 액정 화합물 중에 색소 또는 기타 첨가제를 충분히 분산 또는 용해시킬 수 있는 것이면 특별히 한정되지 않는다.
- [0432] 용제로서는, 예를 들어, 메탄올, 에탄올, 에틸렌글리콜, 이소프로필알코올, 프로필렌글리콜, 에틸렌글리콜메틸에테르, 에틸렌글리콜부틸에테르, 프로필렌글리콜모노메틸에테르 등의 알코올 용제 ; 아세트산에틸, 아세트산부틸, 에틸렌글리콜메틸에테르아세테이트,  $\gamma$ -부티로락톤, 프로필렌글리콜메틸에테르아세테이트, 락트산에틸 등의 에스테르 용제 ; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로펜타논, 시클로헥사논, 2-헥사논, 메틸이소부틸케톤 등의 케톤 용제 ; 펜탄, 헥산, 헵탄 등의 지방족 탄화수소 용제 ; 톨루엔, 자일렌 등의 방향족 탄화수소 용제 ; 아세토니트릴 등의 니트릴 용제 ; 테트라하이드로푸란, 디메톡시에탄, 에틸렌글리콜디메틸에테르, 에틸렌글리콜디에틸에테르 등의 에테르 용제 ; 퍼플루오로벤젠, 퍼플루오로톨루엔, 퍼플루오로데칼린, 퍼플루오로메틸시클로헥산, 헥사플루오로-2-프로판올 등의 불소 함유 용제 ; 및, 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠, 디클로로벤젠 등의 염소 함유 용제 ; 를 들 수 있다.
- [0433] 이들 용제는, 1 종류만을 사용해도 되고, 2 종류 이상을 조합하여 사용해도 된다.
- [0434] 용제는, 중합성 액정 화합물 및 색소를 용해시킬 수 있는 용제인 것이 바람직하고, 중합성 액정 화합물 및 색소가 완전히 용해되는 용제인 것이 더욱 바람직하다. 용제는, 중합성 액정 화합물의 중합 반응에 불활성인 용제인 것이 바람직하다. 용제는, 후술하는 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 도포한다는 관점에서, 비점이 50 ~ 200 ℃ 의 범위인 용제가 바람직하다.
- [0435] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물이 용제를 함유하는 경우에 있어서, 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서 용제가 차지하는 함유 비율은, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물의 총량 (100 질량%) 에 대하여 50 질량% 이상 98 질량% 이하가 바람직하다. 바꿔 말하면, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서의 고형분은, 2 질량% 이상 50 질량% 이하가 바람직하다.
- [0436] 이방성 색소막 형성용 조성물에 있어서의 고형분 함유량이 상기 상한값 이하이면, 이방성 색소막 형성용 조성물의 점도가 지나치게 높아지지 않고, 얻어지는 편광막의 두께가 균일해져, 편광막에 불균일이 발생하기 어려워지는 경향이 있다. 또, 상기 하한값 이상이면, 적절한 두께의 편광막을 얻는 것이 용이해지는 경향이 있다.

- [0437] 이러한 고형분 함유량은, 제조하고자 하는 편광막의 두께를 고려하여 정할 수 있다.
- [0438] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물의 점도는, 후술하는 도포 방법에 의해 두께 불균일이 없는 균일한 막을 제작할 수 있으면, 특별히 한정되지 않는다. 대면적에서의 두께 균일성, 도포 속도 등의 생산성, 광학 특성의 면내 균일성을 얻는다는 관점에서는, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물의 점도는, 0.1 mPa·s 이상이 바람직하고, 500 mPa·s 이하가 바람직하고, 100 mPa·s 이하가 보다 바람직하고, 50 mPa·s 이하가 더욱 바람직하다.
- [0439] <기타 첨가제>
- [0440] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 추가로 필요에 따라, 색소 및 중합성 액정 화합물 이외의 성분으로서, 진술한 중합 개시제 등 이외에, 중합 금지제, 중합 보조제, 중합성 비액정 화합물, 계면 활성제, 레벨링제, 커플링제, pH 조정제, 분산제, 산화 방지제, 유기·무기 필러, 유기·무기 나노 시트, 유기·무기 나노 파이버, 금속 산화물 등의 기타 첨가제를 함유해도 된다. 이들 첨가제를 함유함으로써, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물의 도포성이나 안정성 등을 향상시키거나, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물로 형성되는 이방성 색소막의 안정성을 향상시키거나 할 수 있는 경우가 있다.
- [0441] <이방성 색소막 형성용 조성물의 제조 방법>
- [0442] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 제조하는 방법은 특별히 한정되지 않는다. 예를 들어, 색소, 중합성 액정 화합물, 필요에 따라 용제, 기타 첨가제 등을 혼합하고, 0 ~ 80 °C 에서 교반, 진탕하여 색소를 용해시킨다. 난용성인 경우에는, 호모게나이저, 비드 밀 분산기 등을 사용해도 된다.
- [0443] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 제조하는 방법으로서, 조성물 중의 이물질 등을 제거하는 목적으로, 여과 공정을 갖고 있어도 된다.
- [0444] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물은, 이방성 색소막 형성용 조성물로부터 용제가 제거된 조성물이, 임의의 온도에서 액정이어도 되고 아니어도 되지만, 임의의 온도에서 액정성을 나타내는 것이 바람직하다. 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물로부터 용제를 제거한 조성물은, 하기에 기재된 도공 프로세스의 관점에서 그 등방상 출현 온도가, 160 °C 미만인 것이 바람직하고, 140 °C 미만이 보다 바람직하고, 115 °C 미만이 더욱 바람직하고, 110 °C 미만이 더욱더 바람직하고, 105 °C 미만이 특히 바람직하다.
- [0445] [이방성 색소막]
- [0446] 본 발명의 이방성 색소막은, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용하여 형성된다. 따라서, 본 발명의 이방성 색소막은, 색소와 중합성 액정 화합물 및 중합성 액정 화합물에 기초하는 구성 단위를 갖는 중합물의 일방 또는 양방을 포함하고, 색소는 본 발명의 화합물을 포함한다.
- [0447] 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용하여 형성되는 본 발명의 이방성 색소막은, 바람직하게는 중합성 액정 화합물 및 중합성 액정 화합물에 기초하는 구성 단위를 갖는 중합물의 합계 질량 농도가, 본 발명의 화합물의 질량 농도의 1 배 이상, 보다 바람직하게는 1.5 배 이상, 더욱 바람직하게는 2 배 이상, 특히 바람직하게는 3 배 이상, 또한, 바람직하게는 1000 배 이하, 보다 바람직하게는 700 배 이하, 더욱 바람직하게는 500 배 이하가 되도록 포함하는 것이다.
- [0448] 본 발명의 이방성 색소막은, 기타 성분으로서 필요에 따라 비중합성 액정 화합물, 중합 개시제, 중합 금지제, 중합 보조제, 중합성 비액정 화합물, 비중합성 비액정 화합물, 계면 활성제, 레벨링제, 커플링제, pH 조정제, 분산제, 산화 방지제, 유기·무기 필러, 유기·무기 나노 시트, 유기·무기 나노 파이버, 금속 산화물 등을 포함해도 된다.
- [0449] 본 발명의 이방성 색소막은, 광 흡수의 이방성을 이용하여, 직선 편광, 원 편광, 타원 편광 등을 얻는 편광막으로서 기능할 수 있는 것 외에, 막 형성 프로세스와 기관이나 유기 화합물(색소나 투명 재료)을 함유하는 조성물의 선택에 의해, 굴절 이방성이나 전도 이방성 등의 각종 이방성 색소막으로서 기능화가 가능하다.
- [0450] 본 발명의 이방성 색소막을 액정 디스플레이용이나, OLED 용 반사 방지막의 편광 소자로서 사용하는 경우에는, 이방성 색소막의 배향 특성은 이색비를 사용하여 표시할 수 있다. 이방성 색소막의 이색비는 8 이상이면 편광 소자로서 기능하지만, 15 이상이 바람직하고, 20 이상이 보다 바람직하고, 25 이상이 더욱 바람직하고, 30 이상이 특히 바람직하고, 40 이상이 특히 바람직하다. 이색비는 높을수록 바람직하다. 이색비가 상기 하한값 이상임으로써, 후술하는 광학 소자, 특히 편광 소자로서 유용하다. 또한, 파장 350 nm ~ 800 nm 의

넓은 영역에서 편광 성능을 발현시킨다는 관점에서는, 파장 450 nm 에 있어서의 이색비도 8 이상이면 편광 소자로서 기능하지만, 이 이색비도 12 이상이 바람직하고, 15 이상이 보다 바람직하고, 20 이상이 더욱 바람직하다.

[0451] OLED 용 반사 방지막의 편광 소자로서 사용하는 경우, 위상차막 등의 주변 재료의 성능이 낮아도, 편광 소자의 성능이 높으면, 반사 방지막으로서의 특성은 향상된다. 그래서, 편광 소자의 성능이 높으면, 층 구성을 간소화시키기 쉽고, 박막 구성으로도 충분한 기능을 발현하기 쉬워져, 접거나, 구부리는 것을 포함하는 변형시켜 사용하는 용도에도 적합하게 사용할 수 있다. 또한, 비용도 낮게 억제하는 것이 가능해진다.

[0452] 본 발명에서 말하는 이색비 (D) 는, 색소가 균일하게 배향되어 있는 경우, 이하의 식으로 나타낸다.

[0453]  $D = A_z / A_y$

[0454] 여기서,  $A_z$  는 이방성 색소막에 입사된 광의 편광 방향이 이방성 색소의 배향 방향에 평행한 경우에 관측되는 흡광도이다.  $A_y$  는 이방성 색소막에 입사된 광의 편광 방향이 수직인 경우에 관측되는 흡광도이다.

[0455] 각각의 흡광도 ( $A_z$ ,  $A_y$ ) 는 동일한 파장의 것을 사용하면 특별히 제한은 없고, 목적에 따라 어느 파장을 선택해도 된다. 이방성 색소막의 배향 정도를 표시하는 경우에는, 이방성 색소막의 350 nm ~ 800 nm 의 특정 파장역에 시감도로 보정한 값이나, 가시역의 극대 흡수 파장에 있어서의 값을 사용하는 것이 바람직하다.

[0456] 또, 본 발명의 이방성 색소막의 투과율은, 사용하는 목적의 파장에 있어서 바람직하게는 25 % 이상이고, 35 % 이상이 더욱 바람직하고, 40 % 이상이 특히 바람직하다. 본 발명의 이방성 색소막을 가시광 파장역 전체에 있어서 이방성을 갖는 색소막으로서 사용하는 경우에는, 이방성 색소막의 가시광 파장역에 있어서의 투과율은, 바람직하게는 25 % 이상이고, 35 % 이상이 더욱 바람직하고, 40 % 이상이 특히 바람직하다. 본 발명의 이방성 색소막의 투과율은 용도에 따른 상한이면 된다. 예를 들어, 편광도를 높이는 경우에는, 투과율은 50 % 이하인 것이 바람직하다. 투과율이 상기 범위임으로써, 후술하는 광학 소자로서 유용하고, 특히 컬러 표시에 사용하는 액정 디스플레이용이나, 이방성 색소막과 위상차막을 조합한 반사 방지막용의 광학 소자로서 유용하다.

[0457] 이방성 색소막의 막두께는, 건조 막두께로서 바람직하게는 10 nm 이상, 보다 바람직하게는 100 nm 이상, 더욱 바람직하게는 500 nm 이상이고, 바람직하게는 30  $\mu\text{m}$  이하, 보다 바람직하게는 10  $\mu\text{m}$  이하, 더욱 바람직하게는 5  $\mu\text{m}$  이하, 특히 바람직하게는 3  $\mu\text{m}$  이하이다. 이방성 색소막의 막두께가 상기 범위에 있음으로써, 막 내에서 색소의 균일한 배향 및 균일한 막두께가 얻어지는 경향이 있다.

[0458] [이방성 색소막의 제조 방법]

[0459] 본 발명의 이방성 색소막은, 본 발명의 이방성 색소막 형성용 조성물을 사용하여, 습식 성막법에 의해 제작하는 것이 바람직하다.

[0460] 본 발명에서 말하는 습식 성막법이란, 이방성 색소막 형성용 조성물을 기판 상에 어떠한 수법에 의해 도포, 배향시키는 방법이다. 그래서, 이방성 색소막 형성용 조성물은 유동성을 가지면 되고, 용제를 함유하고 있어도 되고, 함유하지 않아도 된다. 도포할 때의 점도나 막 균일성의 관점에서, 용제를 함유하고 있는 것이 보다 바람직하다.

[0461] 이방성 색소막 중의 액정이나 색소의 배향은, 도포 과정에서 전단 등에 의해 배향해도 되고, 용제가 건조시키는 과정에서 배향해도 된다. 또한, 도포, 건조 후에 가열하고, 액정이나 색소 등을 재배향시키는 프로세스를 거쳐, 액정이나 색소 등을 기판 상에서 배향, 적층시켜도 된다. 습식 성막법에서는, 이방성 색소막 형성용 조성물을 기판 상에 부여하면, 이미 이방성 색소막 형성용 조성물 중에서, 또는 용제가 건조되는 과정에서, 또는 용제가 완전히 제거된 후에, 색소나 액정 화합물이 자기 회합 (액정 상태 등의 분자 회합 상태) 을 취함으로써 미소 면적에서의 배향이 일어난다. 이 상태에 외장 (外場) 을 부여함으로써, 매크로한 영역에서 일정 방향으로 배향시켜, 원하는 성능을 갖는 이방성 색소막을 얻을 수 있다. 이런 점에서, 폴리비닐알코올 (PVA) 필름 등을, 색소를 함유하는 용액으로 염색하여 연신하고, 연신 공정으로만 색소를 배향시키는 것을 원리로 하는 방법과는 상이하다. 여기서 외장이란, 미리 기판 상에 실시된 배향 처리층의 영향, 전단력, 자기장, 전기장, 열 등을 들 수 있고, 이것들을 단독으로 사용해도 되고, 복수 조합하여 사용해도 된다. 필요하다면, 가열 공정을 거쳐도 된다.

[0462] 이방성 색소막 형성용 조성물을 기판 상에 부여하여 성막하는 과정, 외장을 부여하여 배향시키는 과정, 용제를 건조시키는 과정은, 축차적으로 실시해도 되고, 동시에 실시해도 된다.

- [0463] 습식 성막법에 있어서의 이방성 색소막 형성용 조성물의 기관 상에 부여하는 방법으로는, 예를 들어, 도포법, 딥 코트법, LB 막 형성법, 공지된 인쇄법 등을 들 수 있다. 또한, 이와 같이 하여 얻은 이방성 색소막을 다른 기관에 전사하는 방법도 있다.
- [0464] 이것들 중에서도, 도포법을 사용하여 이방성 색소막 형성용 조성물을 기관 상에 부여하는 것이 바람직하다.
- [0465] 이방성 색소막의 배향 방향은 도포 방향과 상이해도 된다. 본 발명에 있어서 이방성 색소막의 배향 방향이란, 예를 들어, 편광막이면, 편광의 투과축(편광축) 또는 흡수축을 말하며, 위상차막이면, 진상축 또는 지상축을 말한다.
- [0466] 이방성 색소막 형성용 조성물을 도포하고, 이방성 색소막을 얻는 방법으로는, 특별히 한정되지 않지만, 예를 들어, 하라사키 유지 저「코팅 공학」(주식회사 아사쿠라 서점, 1971년 3월 20일 발행)의 253 ~ 277 페이지에 기재된 방법, 이치무라 쿠니히로 감수「분자 협조 재료의 창제와 응용」(주식회사 시엠시 출판, 1998년 3월 3일 발행)의 118 ~ 149 페이지에 기재된 방법, 단차 구조를 갖는 기관(미리 배향 처리를 실시해도 된다) 상에 슬롯 다이 코트법, 스핀 코트법, 스프레이 코트법, 바 코트법, 롤 코트법, 블레이드 코트법, 커튼 코트법, 파운틴법, 딥법 등으로 도포하는 방법을 들 수 있다. 그 중에서도, 슬롯 다이 코트법이나 바 코트법을 채용하면, 균일성이 높은 이방성 색소막이 얻어지기 때문에 바람직하다.
- [0467] 슬롯 다이 코트법에 사용하는 다이 코터는, 일반적으로 도포액을 토출하는 도포기, 이른바 슬릿 다이를 구비하고 있다. 슬릿 다이는, 예를 들어, 일본 공개특허공보 평2-164480호, 일본 공개특허공보 평6-154687호, 일본 공개특허공보 평9-131559호, 「분산·도포·건조의 기초와 응용」(2014년, 주식회사 테크노시스, ISBN9784924728707 C 305), 「디스플레이·광학 부재에 있어서의 습식 코팅 기술」(2007년, 정보 기구, ISBN9784901677752), 「일렉트로닉스 분야에 있어서의 정밀 도포·건조 기술」(2007년, 기술 정보 협회, ISBN9784861041389) 등에 개시되어 있다. 이들 공지된 슬릿 다이는, 필름이나 테이프 등의 가요성을 가진 부재나 유리 기관과 같은 단단한 부재에도 도포를 실시할 수 있다.
- [0468] 본 발명의 이방성 색소막 형성에 사용되는 기관으로서, 예를 들어, 유리나, 트리아세테이트, 아크릴, 폴리에스테르, 폴리이미드, 폴리에테르이미드, 폴리에테르에테르케톤, 폴리카보네이트, 시클로올레핀 폴리머, 폴리올레핀, 폴리염화비닐, 트리아세틸셀룰로오스 또는 우레탄계의 필름을 들 수 있다.
- [0469] 기관 표면에는, 색소의 배향 방향을 제어하기 위해서, 「액정 편람」(마루젠 주식회사, 2000년 10월 30일 발행)의 226 ~ 239 페이지 등에 기재된 공지된 방법(러빙법, 배향막 표면 상에 그루브(미세한 홈 구조)를 형성하는 방법, 편광 자외광·편광 레이저를 사용하는 방법(광 배향법), LB 막 형성에 의한 배향 방법, 무기물의 기울기 증착에 의한 배향 방법 등)에 의해, 배향 처리(배향막)를 실시하고 있어도 된다. 특히, 러빙법, 광 배향법에 의한 배향 처리를 바람직하게 들 수 있다. 러빙법에 사용하는 재료로서는, 예를 들어, 폴리비닐알코올(PVA), 폴리이미드(PI), 에폭시 수지, 아크릴 수지를 들 수 있다. 광 배향법에 사용하는 재료로서는, 예를 들어, 폴리신나메이트계, 폴리아믹산·폴리이미드계, 아조벤젠계를 들 수 있다. 배향 처리층을 형성한 경우, 배향 처리층의 배향 처리의 영향과, 도포 시에 이방성 색소막 형성용 조성물에 가해지는 전단력에 의해 액정 화합물이나 색소가 배향되는 것으로 생각된다.
- [0470] 이방성 색소막 형성용 조성물을 도포할 때의, 이방성 색소막 형성용 조성물의 공급 방법, 공급 간격은 특별히 한정되지 않는다. 도포액의 공급 조작이 번잡해지거나, 도포액의 개시 시와 정지 시에 도포 막두께의 변동을 발생시키거나 하는 경우가 있기 때문에, 이방성 색소막의 막두께가 얇을 때에는, 연속적으로 이방성 색소막 형성용 조성물을 공급하면서 도포하는 것이 바람직하다.
- [0471] 이방성 색소막 형성용 조성물을 도포하는 속도는, 바람직하게는 0.001 m/분 이상이고, 보다 바람직하게는 0.01 m/분 이상이고, 더욱 바람직하게는 0.1 m/분 이상이고, 더욱더 바람직하게는 1.0 m/분 이상이고, 특히 바람직하게는 5.0 m/분 이상이다. 또한, 바람직하게는 400 m/분 이하이고, 보다 바람직하게는 200 m/분 이하이고, 더욱 바람직하게는 100 m/분 이하이고, 더욱더 바람직하게는 50 m/분 이하이다. 도포 속도가 상기 범위임으로써, 이방성 색소막의 이방성이 얻어지고, 균일하게 도포할 수 있는 경향이 있다.
- [0472] 이방성 색소막 형성용 조성물의 도포 온도는, 바람직하게는 0 °C 이상 100 °C 이하, 보다 바람직하게는 80 °C 이하, 더욱 바람직하게는 60 °C 이하이다.
- [0473] 이방성 색소막 형성용 조성물의 도포 시의 습도는, 바람직하게는 10 % RH 이상이고, 바람직하게는 80 % RH 이하이다.

- [0474] 이방성 색소막에는, 불용화 처리를 실시해도 된다. 불용화란, 이방성 색소막 중의 화합물의 용해성을 저하시킴으로써, 화합물의 이방성 색소막으로부터의 용출을 제어하여, 막의 안정성을 높이는 처리를 의미한다.
- [0475] 구체적으로는, 막의 중합이나 오버 코트 등이, 후공정의 용이함, 이방성 색소막의 내구성 등의 면에서 바람직하다.
- [0476] 막의 중합을 실시하는 경우, 액정 화합물과 색소가 배향된 막에 대하여 광, 열, 및/또는 방사선을 사용하여 중합을 실시한다.
- [0477] 광 또는 방사선을 사용하여 중합을 실시하는 경우, 파장이 190 ~ 450 nm 의 범위에 있는 활성 에너지선을 조사하는 것이 바람직하다.
- [0478] 파장 190 ~ 450 nm 의 활성 에너지선의 광원은, 특별히 한정되는 것은 아니지만, 예를 들어, 크세논 램프, 할로겐 램프, 텅스텐 램프, 고압 수은등, 초고압 수은등, 메탈 할라이드 램프, 중압 수은등, 저압 수은등, 카본 아크, 형광 램프 등의 램프 광원 ; 아르곤 이온 레이저, YAG 레이저, 엑시머 레이저, 질소 레이저, 헬륨카드뮴 레이저, 반도체 레이저 등의 레이저 광원을 들 수 있다. 특정한 파장의 광을 조사하여 사용하는 경우에는, 광학 필터를 이용할 수도 있다. 활성 에너지선의 노광량은, 10 ~ 10,000 J/m<sup>2</sup> 가 바람직하다.
- [0479] 열을 사용하여 중합을 실시하는 경우에는, 50 ~ 200 ℃ 의 범위에서 실시하는 것이 바람직하고, 60 ~ 150 ℃ 의 범위에서 실시하는 것이 더욱 바람직하다.
- [0480] 광, 열, 및/또는 방사선을 사용하여 중합을 실시해도 되지만, 광 중합을 사용하거나, 또는 광 중합과 열 중합을 병용하는 것이 막형성 프로세스의 시간이 짧고, 장치도 간이하다는 점에서 바람직하다.
- [0481] [광학 소자]
- [0482] 본 발명의 광학 소자는, 본 발명의 이방성 색소막을 포함한다.
- [0483] 본 발명에 있어서의 광학 소자는, 광 흡수의 이방성을 이용하여, 직선 편광, 원 편광, 타원 편광 등을 얻는 편광 소자, 위상차 소자, 굴절 이방성이나 진도 이방성 등의 기능을 갖는 소자를 표시한다. 이들 기능은, 이방성 색소막 형성 프로세스와, 기관이나 유기 화합물 (색소나 투명 재료) 을 함유하는 조성물의 선택에 따라 적절히 조정할 수 있다.
- [0484] 본 발명의 광학 소자는, 편광 소자로서 사용하는 것이 바람직하다.
- [0485] 본 발명의 광학 소자는, 기관 상에 도포 등에 의해 이방성 색소막을 형성함으로써 편광 소자를 얻을 수 있다는 점에서, 플렉시블 디스플레이 등의 용도에도 바람직하게 사용할 수 있다.
- [0486] 광학 소자는, 이방성 색소막의 기능을 유지, 향상시키기 위해서, 다른 층이 형성되어 있어도 된다. 다른 층으로는, 예를 들어, 내광성, 내열성, 내수성 등의 내구성을 향상시키기 위해서 사용하는, 특정한 파장을 차단하는 기능을 갖는 층이나 특정한 물질을 차단하는 기능을 갖는 층 (산소 차단 필름, 수증기 차단 필름 등의 배리어 필름 등) ; 색 영역을 변경하거나, 광학 특성을 향상시키거나 하기 위해서 사용하는, 파장 컷 필터나 특정한 파장을 흡수하는 재료를 함유하는 층 ; 을 들 수 있다.
- [0487] [편광 소자]
- [0488] 본 발명의 이방성 색소막을 사용하여 편광 소자 (이하, 「본 발명의 편광 소자」라고 칭하는 경우가 있다.) 를 제조할 수 있다.
- [0489] 본 발명의 편광 소자는, 본 발명의 이방성 색소막을 갖는 것이면 다른 어떠한 막 (층) 을 갖는 것이어도 된다. 예를 들어, 기관 상에 배향막을 형성하고, 배향막의 표면에 본 발명의 이방성 색소막을 형성함으로써 제조할 수 있다.
- [0490] 편광 소자는 이방성 색소막에만 한정되지 않고, 편광 성능을 향상시키는, 기계적 강도를 향상시키는 등의 기능을 갖는 오버 코트층 ; 점착층 또는 반사 방지층 ; 배향막 ; 위상차 필름으로서의 기능, 휘도 향상 필름으로서의 기능, 반사 또는 반사 방지 필름으로서의 기능, 반투과 반사 필름으로서의 기능, 확산 필름으로서의 기능 등의 광학 기능을 갖는 층 ; 등과 조합하여 사용해도 된다. 구체적으로는, 전술한 다양한 기능을 갖는 층을 도포나 첩합 등에 의해 적층 형성하고, 적층체로서 사용해도 된다.
- [0491] 이들 층은, 제조 프로세스, 특성 및 기능에 맞춰 적절히 형성할 수 있고, 그 적층의 위치, 순번 등은 특별히 한

정되지 않는다. 예를 들어, 각 층을 형성하는 위치는, 이방성 색소막의 위여도 되고, 이방성 색소막을 형성한 기관의 반대면이어도 된다. 또한, 각 층을 형성하는 순번은, 이방성 색소막을 형성하기 전이어도 되고 형성한 후여도 된다.

- [0492] 이들 광학 기능을 갖는 층은, 이하와 같은 방법에 의해 형성할 수 있다.
- [0493] 위상차 필름으로서의 기능을 갖는 층은, 위상차 필름을, 편광 소자를 구성하는 다른 층에 도포나 첩합 등을 실시함으로써 형성할 수 있다. 위상차 필름은, 예를 들어, 일본 공개특허공보 평2-59703호, 일본 공개특허공보 평4-230704호 등에 기재된 연신 처리를 실시하거나, 일본 공개특허공보 평7-230007호 등에 기재된 처리를 실시하거나 함으로써 형성할 수 있다.
- [0494] 휘도 향상 필름으로서의 기능을 갖는 층은, 휘도 향상 필름을, 편광 소자를 구성하는 다른 층에 도포나 첩합 등을 실시함으로써 형성할 수 있다. 휘도 향상 필름은, 예를 들어, 일본 공개특허공보 2002-169025호 및 일본 공개특허공보 2003-29030호에 기재된 바와 같은 방법으로 미세 구멍을 형성함으로써, 또는 선택 반사의 중심 파장이 상이한 2 층 이상의 콜레스테릭 액정층을 중첩함으로써 형성할 수 있다.
- [0495] 반사 필름 또는 반투과 반사 필름으로서의 기능을 갖는 층은, 예를 들어, 증착이나 스퍼터링 등으로 얻어진 금속 박막을, 편광 소자를 구성하는 다른 층에 도포나 첩합 등을 실시함으로써 형성할 수 있다.
- [0496] 확산 필름으로서의 기능을 갖는 층은, 예를 들어, 편광 소자를 구성하는 다른 층에 미립자를 함유하는 수지 용액을 코팅함으로써 형성할 수 있다.
- [0497] 위상차 필름이나 광학 보상 필름으로서의 기능을 갖는 층은, 디스코틱 액정성 화합물, 네마틱 액정성 화합물, 스멕틱 액정성 화합물, 콜레스테릭 액정성 화합물 등의 액정성 화합물을, 편광 소자를 구성하는 다른 층에 도포하여 배향시킴으로써 형성할 수 있다. 그 때에, 기관 상에 배향막을 형성하고, 배향막의 표면에 위상차 필름이나 광학 보상 필름을 형성해도 된다.
- [0498] 본 발명의 이방성 색소막을, 액정 소자 (LCD) 나 유기 일렉트로루미네선스 소자 (OLED) 등의 각종 표시 소자에 이방성 색소막 등으로서 사용하는 경우에는, 이들 표시 소자를 구성하는 전극 기관 등의 표면에 직접, 본 발명의 이방성 색소막을 형성해도 되고, 본 발명의 이방성 색소막을 형성한 기관을, 이들 표시 소자의 구성 부재로서 사용해도 된다.
- [0499] 실시예
- [0500] 이하에 실시예에 의해 본 발명을 더욱 구체적으로 설명한다. 본 발명은 그 요지를 벗어나지 않는 한, 이하의 실시예에 한정되는 것은 아니다.
- [0501] 이하의 기재에 있어서, 「부」는 「질량부」를 의미한다.
- [0502] [액정상의 동정 방법]
- [0503] 얻어진 이방성 색소막 형성용 조성물의 액정성은, 시차 주사 열량 측정 (세이코 인스트루먼트사 「DSC220CU」), X 선 구조 해석 (주식회사 리가쿠 「NANO-Viewer」), 핫 스테이지 (주식회사 토요 테크니카 「HCS302-LN190」) 가 부착된 편광 현미경 (주식회사 니콘 인스텍 「ECLIPSE LV100N POL」) 으로 관찰하고, 「액정 편람」(마루젠 주식회사, 2000년 10월 30일 발행) 의 9 ~ 50 페이지, 117 ~ 176 페이지 등에 기재된 방법에 따라서 액정인 것의 동정을 실시하였다.
- [0504] [이방성 색소막의 흡수축/편광축 방향의 편광에 대한 투과율의 측정 및 이색비]
- [0505] 얻어진 이방성 색소막의 흡수축/편광축 방향의 편광에 대한 투과율은, 글렌 톰슨 편광자를 구비하는 분광 광도계 (오오즈카 전자 (주) 제조, 제품명 「RETS-100」) 를 사용하여 측정하였다.
- [0506] 이방성 색소막에 직선 편광의 측정광을 입사시키고, 이방성 색소막의 흡수축 방향의 편광에 대한 투과율 및 이방성 색소막의 편광축 방향의 편광에 대한 투과율을 측정하고, 다음 식에 의해 이색비 (D) 를 산출하였다.
- [0507] 또한, 흡수축 방향의 편광에 대한 흡수가 극대가 되는 파장을, 이방성 색소막의 극대 흡수 파장으로 하였다.
- [0508]  $D = A_z / A_y$
- [0509] (식 중,
- [0510]  $A_y = -\log (T_y)$  이며 ;

- [0511]  $A_z = -\log(T_z)$  이며 ;
- [0512]  $T_z$  는, 이방성 색소막의 흡수축 방향의 편광에 대한 투과율이며 ;
- [0513]  $T_y$  는, 이방성 색소막의 편광축 방향의 편광에 대한 투과율이다.)

[0514] 구체적으로는, 기재로서 유리 상에 폴리이미드의 배향막 (LX1400, 히타치 카세이 듀폰 마이크로 시스템즈사 제조) 이 형성된 샌드위치 셀 (셀 갭 : 8.0  $\mu\text{m}$  또는 10.0  $\mu\text{m}$ , 성막이 완료된 폴리이미드에 미리 천으로 러빙 처리를 실시한 것) 에, 이방성 색소막 형성용 조성물을 등방상으로 주입하고, 10  $^{\circ}\text{C}/\text{min}$  로 80  $^{\circ}\text{C}$  까지 냉각시킴으로써 이방성 색소막을 얻고, 또한 10  $^{\circ}\text{C}/\text{min}$  로 40  $^{\circ}\text{C}$  까지 냉각시키면서, 각 온도에서 이색비를 측정하였다. 그 중에서, 최대의 이색비를 나타낸 온도에서의 파장 450 nm 에 있어서의 이색비를, 그 이방성 색소막의 파장 450 nm 에 있어서의 이색비로 결정하였다.

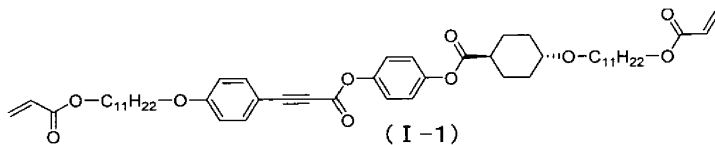
[0515] 상기 측정된 이방성 색소막의 이색비로서는, 파장 450 nm 에서의 값이 12 이상이면, 실용상 충분하여 바람직하고, 15 이상이 보다 바람직하고, 20 이상이 더욱 바람직하다.

[0516] [중합성 액정 화합물의 합성]

[0517] <중합성 액정 화합물 (I-1)>

[0518] 하기 구조식으로 나타내는 중합성 액정 화합물 (I-1) 을 일본 공개특허공보 2020-042305호의 기재에 따라 합성하였다. 하기 식 중,  $\text{C}_{11}\text{H}_{22}$  는 메틸렌 사슬이 직사슬형으로 11 개 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0519] [화학식 26]



[0520]

[0521] 중합성 액정 화합물 (I-1) 에 대해서, 등방상 출현 온도 (액정으로부터 액체의 상전이 온도 및 액체로부터 액정으로의 상전이 온도) 를 시차 주사 열량 측정에 의해 구하였다. 시차 주사 열량 측정에는, 중합성 액정 화합물 (I-1) 100 질량부에 대하여, 중합 금지제로서 4-메톡시페놀을 0.2 질량부 첨가한 것을 사용하였다.

[0522] 중합성 액정 화합물 (I-1) 의 액정으로부터 액체의 상전이 온도는 111.0  $^{\circ}\text{C}$ , 액체로부터 액정으로의 상전이 온도는 109.4  $^{\circ}\text{C}$  였다.

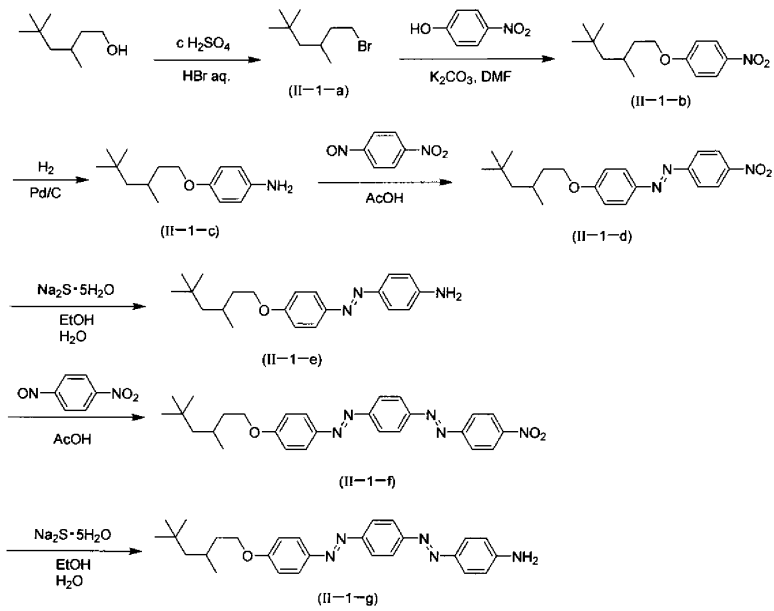
[0523] 이 온도가 등방상 출현 온도인 것은, 편광 현미경 관찰 및 X 선 구조 해석에 의해 확인하였다.

[0524] [색소의 합성]

[0525] <색소 (II-1)>

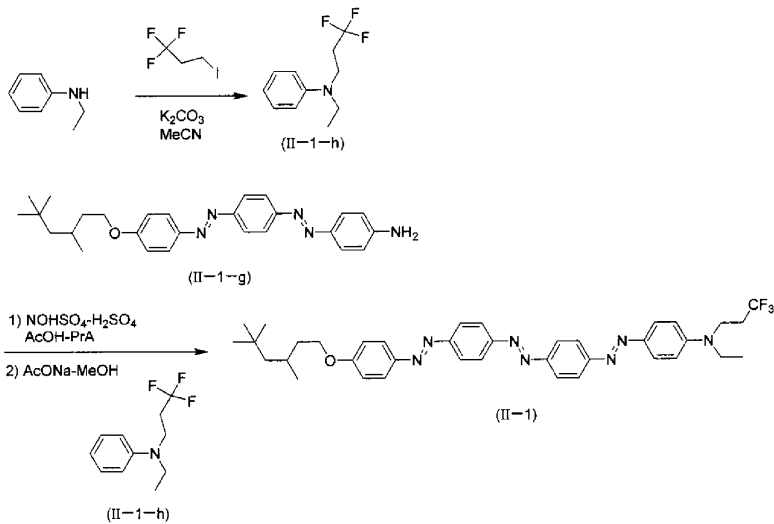
[0526] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (II-1) 을 합성하였다.

[0527] [화학식 27]



[0528]

[0529] [화학식 28]



[0530]

[0531] (II-1-a) 의 합성 :

[0532] 3,5,5-트리에틸-1-헥산올 (76.8 g, 532 mmol), 47 % 브롬화수소 (HBr) 수용액 (100.8 g, 586 mmol), 진한 황산 (16.6 g, 185 mmol) 을 혼합하고, 120 °C 에서 5 시간 교반하였다. 25 °C 까지 냉각시킨 후, 헥산 (1200 mL) 에 첨가하고, 정제수 (2400 mL × 3 회) 로 세정하였다. 유기층을 농축한 후, 실리카 겔 크로마토그래피 (헥산) 로 정제하여, (II-1-a) 를 71.0 g 얻었다.

[0533] (II-1-b) 의 합성 :

[0534] 질소 기류하, 4-니트로페놀 (65.0 g, 467 mmol), (II-1-a) (116.2 g, 560 mmol), 디메틸포름아미드 (520 mL), 탄산칼륨 (129.1 g, 934 mmol) 을 혼합하고, 90 °C 에서 6 시간 교반하였다. 여기에 정제수 (1000 mL) 를 첨가하고, 아세트산에틸/헥산=1/4 혼합액으로 추출하고, 오일층을 농축하였다. 실리카 겔 크로마토그래피 (아세트산에틸/헥산) 로 정제하여, (II-1-b) 를 113.5 g 얻었다.

[0535] (II-1-c) 의 합성 :

[0536] 아르곤 기류하, (II-1-b) (113.5 g, 427.7 mmol), 아세트산에틸 (1100 mL) 을 혼합한 후, 팔라듐 탄소 (5 % Pd/C, 함수량 55 질량%, 11.4 g) 를 첨가하고, 수소 분위기하 25 °C 에서 60 시간 교반하였다. 용기 내를

아르곤 치환한 후, 촉매를 여과 분리하였다. 촉매를 디클로로메탄으로 추출하고, 유기층을 합쳐서 농축한 후, 실리카 겔 크로마토그래피 (디클로로메탄) 로 정제하여, (II-1-c) 를 99.5 g 얻었다.

[0537] (II-1-d) 의 합성 :

[0538] 질소 기류하 실온에서, (II-1-c) (43.3 g, 0.184 mol), 아세트산 (1.3 L) 를 첨가하고, 교반 용해하고, 1-니트로소-4-니트로벤젠 (28.0 g, 1.0 eq.) 을 분할 투입하였다. 4 시간 교반 후, 1-니트로소-4-니트로벤젠 (8.4 g, 0.3 eq.) 을 추가 첨가하고, 실온에서 하룻밤 교반 계속하였다. 디클로로메탄 (3.9 L), 정제수 (1.3 L) 를 붓고, 잠시 교반 후 기름과 물을 분리하였다. 수층을 디클로로메탄 (1.3 L) 으로 추출한 후, 원래의 유기층과 합치고, 정제수 (1.3 L), 포화 탄산수소나트륨수 (1.3 L), 포화 식염수 (500 mL) 로 순차적으로 세정 후, 무수 황산마그네슘 건조, 여과, 여과액을 농축하여 적갈색 고체를 얻었다. 이 조체 (粗體) 를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (헥산/디클로로메탄=3/1) 로 정제하여, (II-1-d) 를 52.08 g 얻었다.

[0539] (II-1-e) 의 합성 :

[0540] (II-1-d) (52.0 g, 0.141 mol) 와 에탄올 (520 mL), 정제수 (52 mL) 와 황화 나트륨오수화물 ( $\text{Na}_2\text{S} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ) (47.4 g, 2.0 equiv.) 을 첨가하고 외부 온도 80 °C 에서 6 시간 교반하였다. 실온까지 방랭 후, 반응액을 정제수 (500 mL) 에 붓고 잠시 교반 후, 흡인 여과 채취하고, 정제수 (250 mL) 로 린스하였다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄) 로 정제하여, (II-1-e) 를 34.40 g 얻었다.

[0541] (II-1-f) 의 합성 :

[0542] 질소 기류하 실온에서, (II-1-e) (34.4 g, 0.101 mol), 아세트산 (1.0 L) 를 첨가하고, 교반 용해하고, 1-니트로소-4-니트로벤젠 (20.0 g, 1.3 eq.) 을 분할 투입하고, 실온에서 하룻밤 교반 계속하였다. 반응액을 정제수에 붓고, 잠시 실온 교반한 후, 흡인 여과 채취하고, 정제수로 린스하였다. 이 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (클로로포름) 로 정제하여, (II-1-f) 를 38.6 g 얻었다.

[0543] (II-1-g) 의 합성 :

[0544] 질소 분위기하 실온에서, (II-1-f) (38.6 g, 81.5 mmol) 와 에탄올 (386 mL), 정제수 (39 mL) 와  $\text{Na}_2\text{S} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (27.4 g, 2.0 equiv.) 을 첨가하고 외부 온도 80 °C 에서 6 시간 교반하였다. 실온까지 방랭 후, 반응액을 정제수 (400 mL) 에 붓고 잠시 교반 후, 흡인 여과 채취하고, 정제수 (200 mL) 로 린스하였다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (헥산/디클로로메탄=1/1) 로 정제하여, (II-1-g) 를 30.20 g 얻었다.

[0545] (II-1-h) 의 합성 :

[0546] N-에틸아닐린 (2.71 g, 22.3 mmol), 1,1,1-트리플루오로-3-요오드프로판 (9.98 g, 2.0 eq.), 아세트니트릴 (15 mL), 탄산칼륨 (6.45 g, 2.3 eq.) 을 주입하고, 질소 분위기하 90 °C 에서 24 시간 가열 교반하였다. 실온으로 냉각 후, 정제수 (50 mL) 를 첨가하고, 아세트산에틸/헥산 (=10/40 mL) 으로 추출하였다. 유기층을 농축한 후, 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=1/9) 로 정제하여, (II-1-h) 를 865 mg 얻었다.

[0547] 색소 (II-1) 의 합성 :

[0548] 반응기에, 질소 분위기하 실온에서 (II-1-g) (750 mg, 1.69 mmol) 을 아세트산 (20 mL) 과 프로피온산 (10 mL) 에 용해시킨 후, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 니트로실황산/황산 용액 (40 질량%, 698 mg, 1.3 eq.) 을 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다.

[0549] 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, (II-1-h) (515 mg, 1.5 eq.) 을 메탄올 (6 mL), 테트로하이드로푸란 (THF) (6 mL) 에 용해시킨 후, 아세트산나트륨 (361 mg, 2.6 eq.) 을 첨가하고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다.

[0550] 여기에 앞의 (II-1-g) 용액을 내부 온도 0 ~ 3 °C 이내에서 20 분간 걸쳐서 첨가하고, 내부 온도 0 °C 에서 2 시간, 실온으로 되돌리면서 5 시간 교반 계속하였다. 정제수 (20 mL) 를 적하하여 침전을 흡인 여과 채취하고, 정제수 (30 mL) 로 씻어내어, 적색 습윤 고체 (1.02 g) 를 얻었다. 이 조체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=1/3) 로 분리 정제하여, 색소 (II-1) 을 404 mg 얻었다.

[0551] 색소 (II-1) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 ( $\lambda_{\text{max}2}$ ) 은 482 nm 였다.

[0552] 또, 핵자기 공명 (NMR) 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400MHz)  $\delta$  0.92 (s, 9H),  $\delta$  1.02 (d, 3H,  $J=6.8\text{ Hz}$ ),  $\delta$  1.14-1.33 (m, 5H),  $\delta$  1.65-1.87 (m, 3H),  $\delta$  2.48 (m, 2H),  $\delta$  3.51 (q, 2H,  $J=6.8\text{ Hz}$ ),  $\delta$  3.69 (t, 2H,  $J=8.0\text{ Hz}$ ),  $\delta$  4.08 (t, 2H,  $J=6.8\text{ Hz}$ ),  $\delta$  6.76 (d, 2H,  $J=9.2\text{ Hz}$ ),  $\delta$  7.03 (d, 2H,  $J=9.2\text{ Hz}$ ),  $\delta$  7.92-8.10 (m, 12H)

[0553]

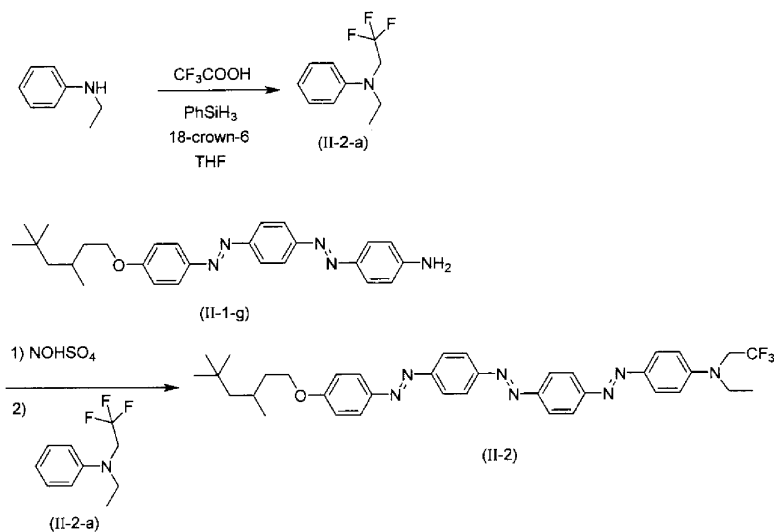
[0554] 색소 (II-1) 의 시클로펜타논에 대한 용해도를 측정하였다.

[0555] 시클로펜타논 103 mg 에 색소 (II-1) 3 mg 을 첨가하고, 80 °C 에서 5 분간 교반하였다. 그 후, 1 시간 실온에서 정지 (靜置) 시키고, 얻어진 혼합액을 시린지 필터 (ADVANTEC 사 제조, DISMIC 03JP050AN 39102251, 구경 (口徑) 0.5  $\mu\text{m}$ ) 를 구비한 시린지를 사용하여 여과함으로써 색소 (II-1) 의 시클로펜타논 포화 용액을 얻었다. 이 용액을 테트라하이드로푸란 746 mg 으로 희석하고, 농도를 액체 크로마토그래프 (HPLC) (히타치 하이트크놀로지즈 제조의 L-2300 시리즈) 를 사용하여 결정하였다. 색소 (II-1) 을 테트라하이드로푸란에 0.1 질량% 용해시킨 용액을 제작하고, 흡수 파장 254 nm 에서 검량선을 작성하였다. 이 검량선을 사용하여, 시클로펜타논 포화 용액의 농도를 측정하였다. 결과를 표 1 에 나타낸다.

[0556] < 색소 (II-2) >

[0557] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (II-2) 를 합성하였다.

[0558] [화학식 29]



[0559]

[0560] (II-2-a) 의 합성 :

[0561] 질소 기류하 실온에서, 몰레큘러시브 4A (2.0 g), 트리포타시움포스파이트 (1.17 g, 0.1 equiv.), 18-크라운6-에테르 (2.90 g, 0.2 equiv.), THF (330 mL) 를 첨가하고, N-에틸아닐린 (6.65 g, 50.8 mmol), 트리플루오로아세트산 (28.8 g, 4.6 equiv.), 페닐실란 (23.7 g, 4.0 equiv.) 을 첨가하고, 외부 온도 80 °C, 가열 환류 하 6 시간 교반하였다. 방랭 후, 정제수 (200 mL) 를 첨가하고 고체를 여과 분리하였다. 여과액을 디클로로메탄 (100 mLx2) 으로 추출하고, 감압 농축함으로써, 담황색 오일상 조체 (44.0 g) 를 얻었다. 이것을 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=20/1) 로 정제하여, (II-2-a) 를 5.85 g 얻었다.

[0562] 색소 (II-2) 의 합성 :

[0563] 질소 분위기하 실온에서, (II-1-g) (750 mg, 1.69 mmol) 을 아세트산 (20 mL) 과 프로피온산 (10 mL) 에 용해

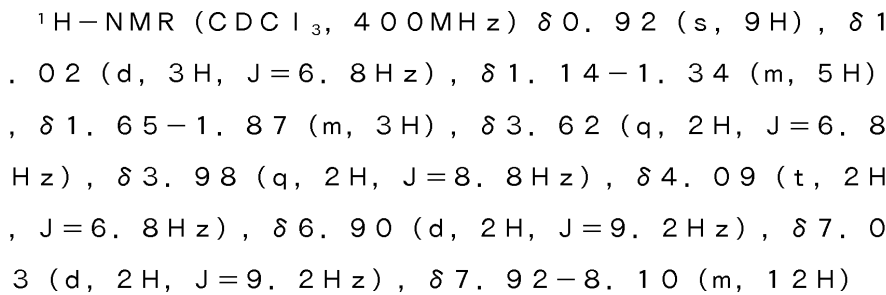
시킨 후, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 니트로실황산/황산 용액 (40 질량%, 698 mg, 1.3 eq.) 을 내부 온도 0 ~ 3 °C 이내에서 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다.

[0564] 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, (II-2-a) (482 mg, 1.5 eq.) 를 메탄올 (6 mL), THF (6 mL) 에 용해시킨 후, 아세트산나트륨 (361 mg, 2.6 eq.) 을 첨가하고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다.

[0565] 여기에 앞의 (II-1-g) 용액을 내부 온도 0 ~ 5 °C 이내에서 20 분간 걸쳐서 첨가하고, 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 2 시간, 실온으로 되돌리면서 6 시간 교반하였다. 정제수 (20 mL) 를 적하하여 침전을 흡인 여과 채취하고, 얻은 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=1/3) 로 분리 정제하여, 색소 (II-2) 를 249 mg 얻었다.

[0566] 색소 (II-2) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 ( $\lambda_{max2}$ ) 은 446 nm 였다.

[0567] 또한, NMR 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.



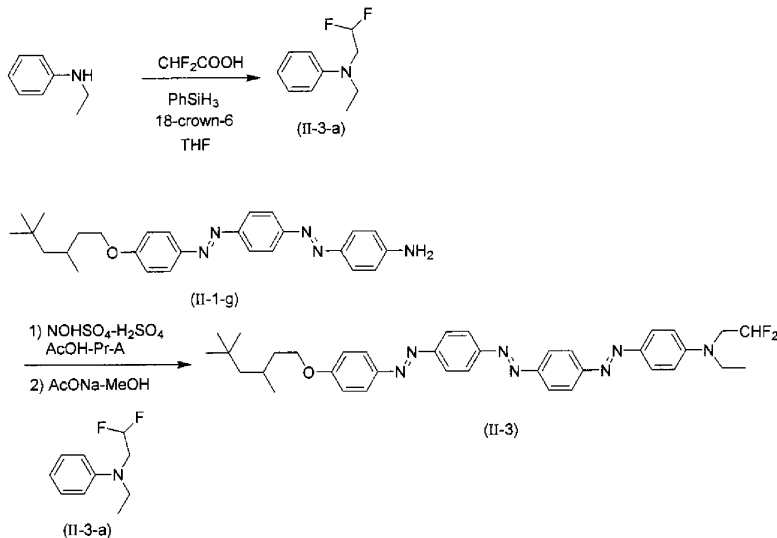
[0568]

[0569] 색소 (II-2) 에 대해서도 색소 (II-1) 과 동일하게 시클로펜타논 포화 용액의 농도를 측정하였다. 결과를 표 1 에 나타낸다.

[0570] <색소 (II-3)>

[0571] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (II-3) 을 합성하였다.

[0572] [화학식 30]



[0573]

[0574] (II-3-a) 의 합성 :

[0575] 질소 기류하 실온에서, 분자칼리시브 4A (2.0 g), 트리포타시움포스파이트 (1.08 g, 0.1 equiv.), 18-크라운6-에테르 (2.68 g, 0.2 equiv.), THF (300 mL) 를 첨가하고, N-에틸아닐린 (6.16 g, 50.8 mmol), 디플루오로아세트산 (11.2 g, 2.3 equiv.), 페닐실란 (22.0 g, 4.0 equiv.) 을 첨가하고, 외부 온도 80 °C, 가열 환류 하 6 시간 교반하였다. 방랭 후, 정제수 (200 mL) 를 첨가하고, 고체를 여과 분리하였다. 여과액을 디클로로메탄 (100 mLx2) 으로 추출하고, 감압 농축함으로써, 담황색 오일상 조체 (40.0 g) 를 얻었다. 이것을 실리

카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=20/1) 로 정제하여, (II-3-a) 를 5.73 g 얻었다.

[0576] 색소 (II-3) 의 합성 :

[0577] 질소 분위기하 실온에서, (II-1-g) (750 mg, 1.69 mmol) 을 아세트산 (20 mL) 과 프로피온산 (10 mL) 에 용해시킨 후, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 니트로실황산/황산 용액 (40 질량%, 698 mg, 1.3 eq.) 을 내부 온도 0 ~ 3 °C 이내에서 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다.

[0578] 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, (II-3-a) (470 mg, 1.5 eq.) 을 메탄올 (6 mL), THF (6 mL) 에 용해시킨 후, 아세트산나트륨 (361 mg, 2.6 eq.) 을 첨가하고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다.

[0579] 여기에 앞의 (II-1-g) 용액을 내부 온도 0 ~ 5 °C 이내에서 22 분간 걸쳐서 첨가하고, 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 1 시간 40 분간, 실온으로 되돌리면서 6 시간 교반 계속하였다. 정제수 (20 mL) 를 적하하여 침전을 흡인 여과 채취하고, 적색 습윤 고체 (1.04 g) 를 얻었다. 이 조체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=1/3) 로 정제하여, 색소 (II-3) 을 299 mg 얻었다.

[0580] 색소 (II-3) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 ( $\lambda_{max2}$ ) 은 465 nm 였다.

[0581] 또한, NMR 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400MHz)  $\delta$  0.92 (s, 9H),  $\delta$  1.02 (d, 3H,  $J=6.8$  Hz),  $\delta$  1.16-1.34 (m, 5H),  $\delta$  1.65-1.87 (m, 3H),  $\delta$  3.62 (q, 2H,  $J=6.8$  Hz),  $\delta$  3.98 (q, 2H,  $J=8.8$  Hz),  $\delta$  4.09 (t, 2H,  $J=6.8$  Hz),  $\delta$  6.90 (d, 2H,  $J=9.2$  Hz),  $\delta$  7.03 (d, 2H,  $J=9.2$  Hz),  $\delta$  7.92-8.10 (m, 12H)

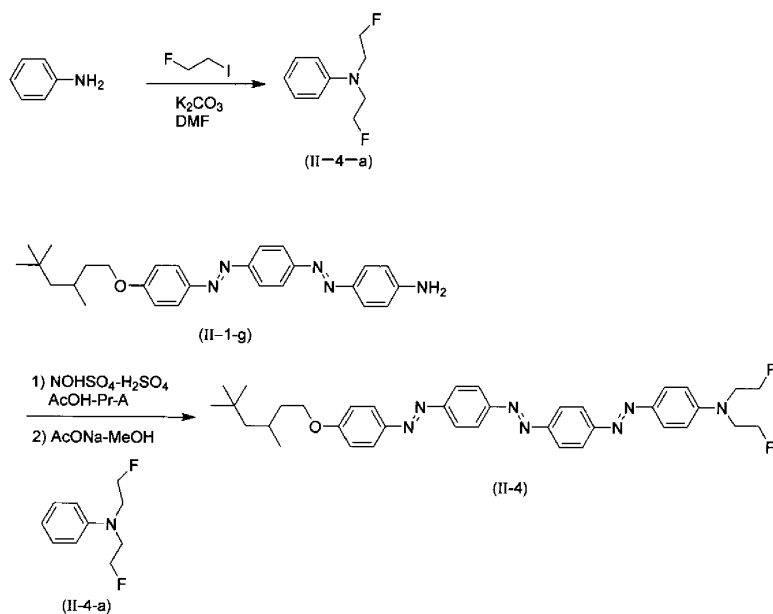
[0582]

[0583] 색소 (II-3) 에 대해서도 색소 (II-1) 과 동일하게 시클로펜타논 포화 용액의 농도를 측정하였다. 결과를 표 1 에 나타낸다.

[0584] <색소 (II-4)>

[0585] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (II-4) 를 합성하였다.

[0586] [화학식 31]

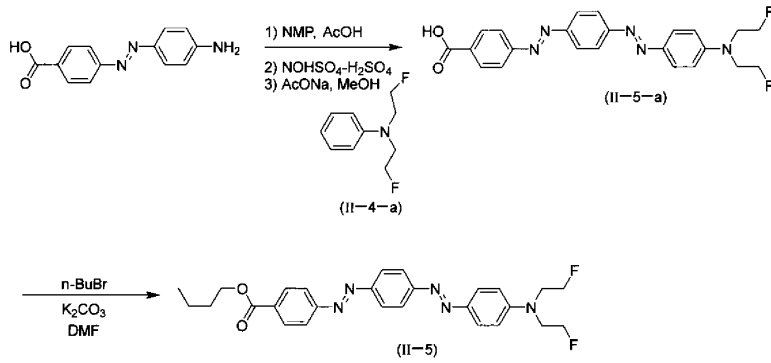


[0587]

[0588] (II-4-a) 의 합성 :

- [0589] 반응 용기에, 아닐린 (670 mg, 7.19 mmol), 1-플루오로-2-요오드에탄 (2.50 g, 2.0 eq.), 디메틸포름아미드 (DMF) (25 mL), 탄산칼륨 (3.98 g, 4.0 eq.) 을 주입하고, 질소 분위기하 85 °C 에서 17 시간 가열 교반하였다. 실온으로 냉각 후, 정제수 (50 mL) 로 켄칭하고, 아세트산에틸/헥산 (=10/40 mL) 으로 추출하였다. 유기층을 정제수 (25 mL × 3 회), 포화 식염수 (10 mL) 로 순차적으로 세정 후, 여과, 여과액을 농축하여, 황색 오일상 조체 (1.31 g) 를 얻었다. 이 조체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=1/9) 로 분리 정제하여, (II-4-a) 를 202 mg 얻었다.
- [0590] 색소 (II-4) 의 합성 :
- [0591] 질소 분위기하 실온에서, (II-1-g) (3.0 g, 6.76 mmol) 을 아세트산 (80 mL) 과 프로피온산 (40 mL) 에 용해시킨 후, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 니트로실황산/황산 용액 (40 질량%, 2.8 g, 1.3 eq.) 을 내부 온도 0 ~ 3 °C 이내에서 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다.
- [0592] 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, (II-4-a) (1.87 g, 1.5 eq.) 를 메탄올 (24 mL), THF (24 mL) 에 용해시킨 후, 아세트산나트륨 (1.44 g, 2.6 eq.) 을 첨가하고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다.
- [0593] 여기에 앞의 (II-1-g) 용액을 내부 온도 0 ~ 5 °C 이내에서 30 분간 걸쳐서 첨가하고, 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 2 시간, 실온으로 되돌리면서 6 시간 교반하였다. 정제수 (80 mL) 를 적하하여 침전을 흡인 여과 채취하고, 적색 습윤 고체 (2.74 g) 를 얻었다. 이 조체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/헥산=1/3 및 톨루엔) 로 칼럼 정제하여, 색소 (II-4) (856 mg) 를 얻었다.
- [0594] 색소 (II-4) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 ( $\lambda_{max2}$ ) 은 465 nm 였다.
- [0595] 또한, NMR 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.
- $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400MHz)  $\delta$  1.00 (t, 3H, J=7.8 Hz),  $\delta$  1.47-1.56 (m, 4H),  $\delta$  1.76-1.83 (m, 2H),  $\delta$  2.67 (s, 1H, J=13.6 Hz, 6.0 Hz),  $\delta$  1.29-1.30 (m, 1H),  $\delta$  1.65-1.87 (m, 3H),  $\delta$  3.83 (t, 2H, J=5.6 Hz),  $\delta$  3.89 (t, 2H, J=5.6 Hz),  $\delta$  4.37 (t, 2H, J=5.2 Hz),  $\delta$  4.62 (t, 2H, J=6.2 Hz),  $\delta$  4.74 (t, 2H, J=6.2 Hz),  $\delta$  6.79 (d, 2H, J=9.2 Hz),  $\delta$  7.02 (d, 2H, J=9.2 Hz),  $\delta$  7.92-8.09 (m, 8H),  $\delta$  8.20 (d, 2H, J=8.5 Hz)
- [0596]
- [0597] 색소 (II-4) 에 대해서도 색소 (II-1) 과 동일하게 시클로펜타논 포화 용액의 농도를 측정하였다. 결과를 표 1 에 나타낸다.
- [0598] <색소 (II-5)>
- [0599] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (II-5) 를 합성하였다.

[0600] [화학식 32]



[0601]

[0602] (II-5-a) 의 합성 :

[0603] 질소 분위기하 실온에서, 4-[(4-아미노페닐)디아제닐]벤조산 (500 mg, 2.07 mmol) 을 아세트산 (15 mL) 과 N-메틸-2-피롤리돈 (NMP) (5 mL) 에 용해시킨 후, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 니트로실황산/황산 용액 (40 질량%, 850 mg, 1.3 eq.) 을 내부 온도 0 ~ 3 °C 이내에서 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다. 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, (II-4-a) (572 mg, 1.5 eq.) 를 메탄올 (6 mL), THF (6 mL) 에 용해시킨 후, 아세트산나트륨 (440 mg, 2.6 eq.) 을 첨가하고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다.

[0604] 여기에 앞의 4-[(4-아미노페닐)디아제닐]벤조산 용액을 첨가하고, 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 1 시간 50 분간, 실온으로 되돌리면서 14 시간 교반 계속하였다. 정제수 (20 mL) 를 첨가하고, 침전을 흡인 여과 채취하고, (II-5-a) 를 425 mg 얻었다.

[0605] 색소 (II-5) 의 합성 :

[0606] (II-5-a) (425 mg, 0.960 mmol), n-BuBr (198 mg, 1.5 eq.), DMF (4 mL), 탄산칼륨 (200 mg, 1.5 eq.) 을 주입하고, 질소 분위기하 90 °C 에서 4.5 시간 가열 교반하였다. 실온으로 냉각 후, 정제수 (30 mL) 를 첨가하고, 석출된 개체를 여과 분리하여, 적갈색 고체 380 mg 을 얻었다. 이 조체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄/아세트산에틸/헥산=5/3/50) 로 정제하여, 색소 (II-5) 를 149 mg 얻었다.

[0607] 색소 (II-5) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 (λ<sub>max2</sub>) 은 456 nm 였다.

[0608] 또한, NMR 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ 1.00 (t, 3H, J=7.8 Hz), δ 1.47-1.56 (m, 4H), δ 1.76-1.83 (m, 2H), δ 2.67 (s, 1H, J=13.6 Hz, 6.0 Hz), δ 1.29-1.30 (m, 1H), δ 1.65-1.87 (m, 3H), δ 3.83 (t, 2H, J=5.6 Hz), δ 3.89 (t, 2H, J=5.6 Hz), δ 4.37 (t, 2H, J=5.2 Hz), δ 4.62 (t, 2H, J=6.2 Hz), δ 4.74 (t, 2H, J=6.2 Hz), δ 6.79 (d, 2H, J=9.2 Hz), δ 7.02 (d, 2H, J=9.2 Hz), δ 7.92-8.09 (m, 8H), δ 8.20 (d, 2H, J=8.5 Hz)

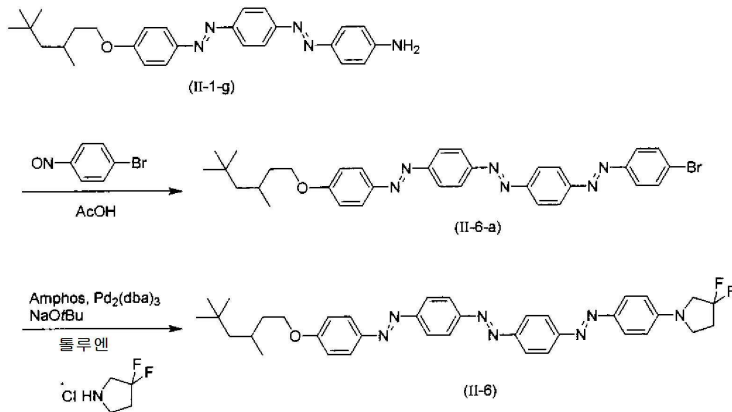
[0609]

[0610] 색소 (II-5) 에 대해서도 색소 (II-1) 과 동일하게 시클로펜타논 포화 용액의 농도를 측정하였다. 결과를 표 1 에 나타낸다.

[0611] <색소 (II-6)>

[0612] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (II-6) 을 합성하였다.

[0613] [화학식 33]



[0614]

[0615] (II-6-a) 의 합성 :

[0616] (II-1-g) (500 mg, 1.13 mmol) 및 1-니트로소-4-브로모벤젠 (273 mg, 1.47 mmol) 을 아세트산 (30 mL) 에 용해시키고, 실온에서 6 시간 교반하였다. 정제수를 첨가하고, 침전을 아세토니트릴로 세정, 여과함으로써, 적색 고체 (II-6-a) 를 469 mg 얻었다.

[0617] 색소 (II-6) 의 합성 :

[0618] 질소 분위기하 실온에서, Amphos (3.90 mg, 3 mol%), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (2.24 mg, 0.5 mol%) 를 톨루엔 (10 mL) 에 용해시키고, 60 °C 에서 15 분 교반하였다.

[0619] 다른 반응기에서, 질소 분위기하 실온에서, (II-6-a) (0.40 g, 0.49 mmol), 3,3-디플루오로피롤리딘염산염 (0.212 mg, 1.96 mmol) 을 톨루엔 (20 mL) 에 용해시킨 후, 100 °C 까지 가열하고, 앞의 팔라듐 용액을 여기에 적하하였다. 8 시간 교반한 후, 정제수 (80 mL) 를 적하하여 침전을 흡인 여과 채취하였다. 이 조체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (톨루엔/디클로로메탄=1/1) 로 칼럼 정제하여, 색소 (II-6) 을 207 mg 얻었다.

[0620] 색소 (II-6) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 (λ<sub>max2</sub>) 은 466 nm 였다.

[0621] 또한, NMR 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.

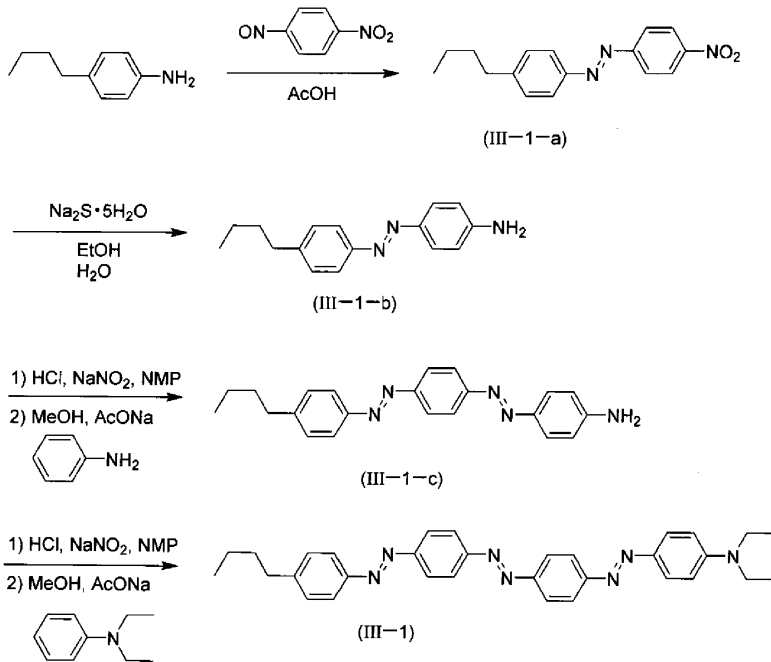
<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ 0.92 (s, 9H), δ 1.02 (d, 3H, J=6.8 Hz), δ 1.12-1.33 (m, 5H), δ 1.65-1.89 (m, 3H), δ 2.50-2.59 (m, 2H), δ 3.69 (t, 2H, J=6.8 Hz), δ 3.81 (q, 2H, J=12.9 Hz), δ 4.09 (t, 2H, J=6.8 Hz), δ 6.65 (d, 2H, J=9.2 Hz), δ 7.03 (d, 2H, J=9.0 Hz), δ 7.95-8.10 (m, 12H)

[0622]

[0623] <색소 (III-1)>

[0624] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (III-1) 을 합성하였다.

[0625] [화학식 34]



[0626]

[0627] (III-1-a)의 합성 :

[0628] 질소 기류하 실온에서, 4-부틸아닐린 (43.3 g, 0.290 mol), 아세트산 (2 L) 을 첨가하고, 교반 용해하고, 1-니트로소-4-니트로벤젠 (43.7 g, 1.0 eq.) 을 분할 투입하고, 실온에서 하룻밤 교반 계속하였다. 디클로로메탄 (5 L), 정제수 (1.5 L) 를 붓고, 잠시 교반 후, 유기상을 포화 탄산수소나트륨수 (1.3 L), 포화 식염수 (500 mL) 로 순차적으로 세정 후, 여과, 여과액을 농축하여 적갈색 고체를 얻었다. 이 조체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (헥산/디클로로메탄=3/1) 로 정제하여, (III-1-a) 를 52.08 g 얻었다.

[0629] (III-1-b)의 합성 :

[0630] (III-1-a) (52.0 g, 0.184 mol) 와 에탄올 (520 mL), 정제수 (52 mL) 와  $\text{Na}_2\text{S} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (62.13 g, 2.0 equiv.) 를 첨가하고 외부 온도 80 °C 에서 6 시간 교반하였다. 실온까지 방랭 후, 반응액을 정제수 (500 mL) 에 붓고 잠시 교반 후, 흡인 여과 채취하고, 정제수 (250 mL) 로 린스하였다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (디클로로메탄) 로 정제하여, (III-1-b) 를 34.40 g 얻었다.

[0631] (III-1-c)의 합성 :

[0632] (III-1-b) (2.00 g, 5.60 mmol), 염산 (HCl) (2.63 mL) 를 NMP (50 mL) 에 용해시키고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 질산나트륨 (0.538 g, 7.76 mmol) 을 5 mL 의 정제수에 용해시키고, 앞의 용액에 내부 온도 0 ~ 3 °C 이내에서 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다.

[0633] 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, 아닐린 (2.54 g, 1.5 eq.) 을 메탄올 (24 mL) 에 용해시킨 후, 아세트산나트륨 (1.96 g) 를 첨가하고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 여기에 앞의 (III-1-b) 용액을 내부 온도 0 ~ 5 °C 이내에서 30 분간 걸쳐서 첨가하고, 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 2 시간, 실온으로 되돌리면서 3 시간 교반 계속하였다. 정제수를 첨가하고, 메탄올로 여과, 세정을 실시하고, 얻은 조체에 대해서, 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (톨루엔/디클로로메탄=1/1) 로 칼럼 정제하여, (III-1-c) 를 2.50 g 얻었다.

[0634] 색소 (III-1)의 합성 :

[0635] (III-1-c) (2.00 g, 5.44 mmol), HCl (1.93 mL) 을 NMP (50 mL) 에 용해시키고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 질산나트륨 (0.395 g, 5.712 mmol) 을 5 mL 의 정제수에 용해시키고, 앞의 용액에 내부 온도 0 ~ 3 °C 이내에서 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다.

[0636] 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, 아닐린 (1.22 g, 1.5 eq.) 을 메탄올 (40 mL) 에 용해시킨 후, 아세트산나트륨 (1.44 g) 을 첨가하고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 여기에 앞의 (III-1-c) 용액을 내부 온도

0 ~ 5 °C 이내에서 30 분간 걸쳐서 첨가하고, 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 1 시간, 실온으로 되돌리면서 2 시간 교반하였다. 정제수를 첨가하고, 메탄올로 여과, 세정을 실시하고, 얻은 조체에 대해서, 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (톨루엔/디클로로메탄=1/3) 로 칼럼 정제하여, 색소 (III-1) 을 2.39 g 얻었다.

[0637] 색소 (III-1) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 ( $\lambda_{max}$ ) 은 509 nm 였다.

[0638] 또한, NMR 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400MHz)  $\delta$  0.96 (t, 3H),  $\delta$  1.25 (t, 6H,  $J=6.8\text{ Hz}$ ),  $\delta$  1.37-1.42 (m, 2H),  $\delta$  1.63-1.71 (m, 2H),  $\delta$  2.71 (t, 2H,  $J=7.8\text{ Hz}$ ),  $\delta$  3.48 (q, 4H,  $J=8.2\text{ Hz}$ ),  $\delta$  6.74 (d, 2H,  $J=9.2\text{ Hz}$ ),  $\delta$  7.34 (d, 2H,  $J=8.4\text{ Hz}$ ),  $\delta$  7.74-8.10 (m, 12H)

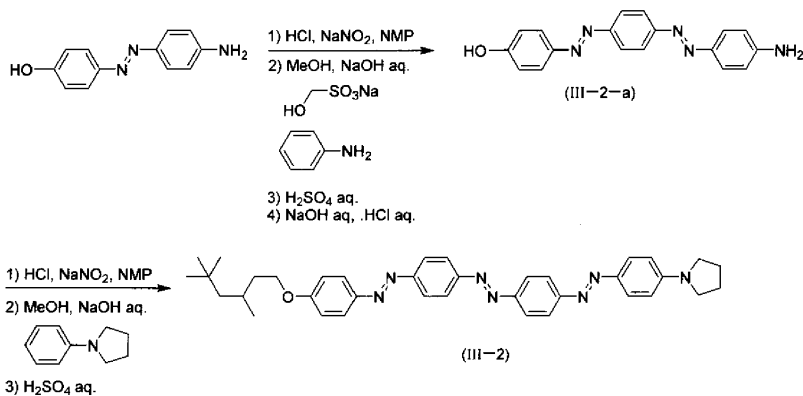
[0639]

[0640] 색소 (III-1) 에 대해서도 색소 (II-1) 과 동일하게 시클로헥타논 포화 용액의 농도를 측정하였다. 결과를 표 1 에 나타낸다.

[0641] <색소 (III-2)>

[0642] 하기에 기재된 합성법에 따라 색소 (III-2) 를 합성하였다.

[0643] [화학식 35]



[0644]

[0645] (III-2-a) 의 합성 :

[0646] 4-아미노-4'-하이드록시아조벤젠 (23.0 g, 108 mmol), HCl (19 mL, 230 mmol) 을 NMP (460 mL), 정제수 (330 mL) 에 용해시키고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 질산나트륨 (8.21 g, 119 mmol) 을 정제수 (33 mL) 의 용액에 용해시키고, 앞의 용액에 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다. 술폰산 (2.10 g, 21.6 mmol) 을 정제수 (19 mL) 에 용해시킨 수용액을 앞의 용액에 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 10 분간 교반하였다.

[0647] 다른 반응기에, 질소 분위기하 실온에서, 아닐린 (12.1 g, 130 mmol), 하이드록시메탄술폰산나트륨 (17.4 g, 130 mmol), 정제수 (340 mL) 를 넣고, 70 °C 에서 3 시간 교반하였다. 방랭 후, 메탄올 (340 mL) 에 용해시키며 방랭하고, 앞의 4-아미노-4'-하이드록시아조벤젠 용액을 내부 온도 0 ~ 5 °C 이내에서 40 분간 걸쳐서 첨가하였다. 이 때, 25 % NaOH 수용액으로 pH 4-5 로 조제하면서 적하를 실시하였다. 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 1 시간 교반하고, 70 % 황산을 첨가하여 pH 2.5 로 하였다. 5 % NaCl 수용액 (1 L) 에 반응 용액을 붓고, 석출된 고체를 여과하여 포화 식염수로 세정하였다.

[0648] 이 고체를 다른 반응 용기에 넣고, 1M NaOH 수용액 (1.1 L) 을 첨가하고 90 °C 에서 2.5 시간 교반하였다. 방랭 후, 진한 염산과 2M 염산으로 pH 6 으로 하고, 석출된 고체를 여과 채취하여 정제수, 헥산으로 세정하였다. 얻은 조체에 대해서, 디클로로메탄으로 현탁 세정을 실시하고, 아세트산에틸로 재결정을 실시

함으로써, (III-2-a) 를 13.0 g 얻었다.

[0649]

색소 (III-2) 의 합성 :

[0650]

(III-2-a) (1.00 g, 3.15 mmol), HCl (0.55 mL, 6.6 mmol) 을 NMP (20 mL) 에 용해시키고, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 질산나트륨 (0.239 g, 3.46 mmol) 을 1 mL 의 정제수에 용해시키고, (III-2-a) 용액에 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 1 시간 교반하였다. 술폰산 (61 mg, 0.63 mmol) 을 정제수 (0.55 mL) 에 용해시킨 수용액을 앞의 용액에 적하하고, 내부 온도 0 ~ 2 °C 에서 10 분간 교반하였다.

[0651]

다른 반응기에서, 질소 분위기하 실온에서, N-페닐피롤리딘 (0.464 mg, 3.15 mmol) 을 메탄올 (10 mL) 에 용해시킨 후, 2M 염산을 첨가하고, pH 5 로 한 후, 내부 온도 0 °C 로 냉각시켰다. 여기에 앞의 (III-2-a) 용액을 내부 온도 0 ~ 5 °C 이내에서 40 분간 걸쳐서 첨가하였다. 이 때, 25 % NaOH 수용액으로 pH 4-5 로 조제하면서 적하를 실시하였다. 내부 온도 0 ~ 5 °C 에서 30 분간 교반하고, 70 % 황산을 첨가하고 pH 2.5 로 하였다. 정제수를 첨가하고, 메탄올, 헥산으로 여과, 세정을 실시하여 조제를 얻었다. 조제에 대해서, 아세트니트릴, 디클로로메탄/메탄올=1/1 로 현탁 세정을 실시하여, 색소 (III-2) 를 0.86 g 얻었다.

[0652]

색소 (III-2) 의 10 ppm 클로로포름 용액에서의 극대 흡수 파장 ( $\lambda_{max2}$ ) 은 510 nm 였다.

[0653]

또한, NMR 스펙트럼 측정에 의한 구조 확인을 실시하였다. 결과를 이하에 나타낸다.

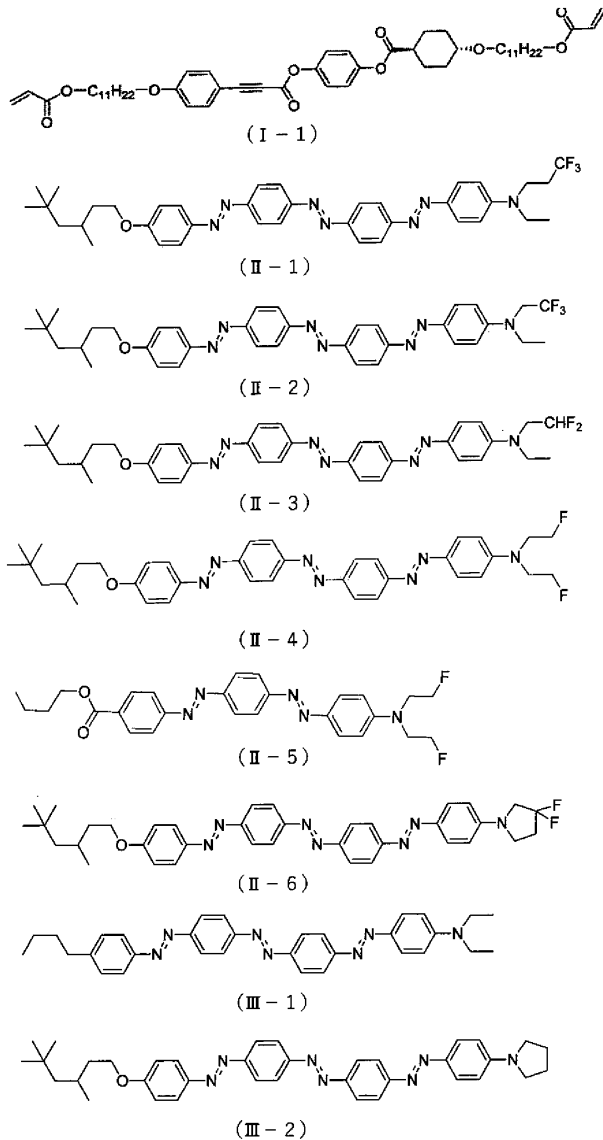
$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400MHz)  $\delta$  0.92 (s, 9H),  $\delta$  1.02 (d, 3H,  $J=6.8\text{ Hz}$ ),  $\delta$  1.12-1.33 (m, 4H),  $\delta$  1.65-1.89 (m, 3H),  $\delta$  2.50-2.59 (m, 4H),  $\delta$  3.78-3.80 (m, 4H),  $\delta$  4.09 (t, 2H,  $J=6.8\text{ Hz}$ ),  $\delta$  6.65 (d, 2H,  $J=9.2\text{ Hz}$ ),  $\delta$  7.03 (d, 2H,  $J=9.0\text{ Hz}$ ),  $\delta$  7.95-8.10 (m, 12H)

[0654]

[0655]

상기에서 합성한 중합성 액정 화합물 (I-1) 및 색소 (II-1) ~ (II-6), (III-1), (III-2) 의 화학 구조를 이하에 나타낸다.

[0656] [화학식 36]



[0657]

[0658] [실시예 1]

[0659] 클로로포름 : 8032.1 부에, 중합성 액정 화합물 (I-1) : 40.00 부, 색소 (II-1) : 0.80 부를 첨가하고, 교반하여 상용시킨 후, 용제를 제거함으로써, 이방성 색소막 형성용 조성물 1 을 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 1 의  $r_{n1}/r_{n2}$  는 0.75 이다.

[0660] 이방성 색소막 형성용 조성물 1 이 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서 복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.

[0661] 얻어진 이방성 색소막 형성용 조성물 1 을 사용하며, 상기 서술한 방법으로 이색비를 결정하기 위해, 셀 갭 8.0  $\mu\text{m}$  의 샌드위치 셀을 사용하여 이방성 색소막 1 을 제작하고, 이방성 색소막 1 의 이색비를 결정하였다.

[0662] 그 결과를 표 1 에 나타낸다.

[0663] [실시예 2]

[0664] 색소 (II-1) : 0.80 부 대신에, 색소 (II-2) : 0.83 부를 첨가한 것 이외에는 실시예 1 과 동일하게 하여, 이방성 색소막 형성용 조성물 2 및 이방성 색소막 2 를 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 2 의  $r_{n1}/r_{n2}$  는 0.75 이다.

[0665] 이방성 색소막 형성용 조성물 2 가 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서

복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.

- [0666] 또, 이방성 색소막 2 의 이색비를 결정하였다.
- [0667] 그 결과를 표 1 에 나타낸다.
- [0668] [실시예 3]
- [0669] 색소 (II-1) : 0.80 부 대신에, 색소 (II-3) : 0.75 부를 첨가한 것 이외에는 실시예 1 과 동일하게 하여, 이방성 색소막 형성용 조성물 3 및 이방성 색소막 3 을 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 3 의  $rn_1/rn_2$  는 0.75 이다.
- [0670] 이방성 색소막 형성용 조성물 3 이 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서 복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.
- [0671] 또, 이방성 색소막 3 의 이색비를 결정하였다.
- [0672] 그 결과를 표 1 에 나타낸다.
- [0673] [실시예 4]
- [0674] 색소 (II-1) : 0.80 부 대신에, 색소 (II-4) : 0.78 부를 첨가한 것 이외에는 실시예 1 과 동일하게 하여, 이방성 색소막 형성용 조성물 4 및 이방성 색소막 4 를 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 4 의  $rn_1/rn_2$  는 0.75 이다.
- [0675] 이방성 색소막 형성용 조성물 4 가 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서 복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.
- [0676] 또, 이방성 색소막 4 의 이색비를 결정하였다.
- [0677] 그 결과를 표 1 에 나타낸다.
- [0678] [실시예 5]
- [0679] 색소 (II-1) : 0.80 부 대신에, 색소 (II-5) : 0.84 부를 첨가한 것 이외에는 실시예 1 과 동일하게 하여, 이방성 색소막 형성용 조성물 5 및 이방성 색소막 5 를 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 5 의  $rn_1/rn_2$  는 1 이다.
- [0680] 이방성 색소막 형성용 조성물 5 가 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서 복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.
- [0681] 또, 이방성 색소막 5 의 이색비를 결정하였다.
- [0682] 그 결과를 표 1 에 나타낸다.
- [0683] [비교예 1]
- [0684] 색소 (II-1) : 0.80 부 대신에, 색소 (III-1) : 0.60 부를 사용한 것 이외에는 실시예 1 과 동일하게 하여, 이방성 색소막 형성용 조성물 6 및 이방성 색소막 6 을 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 6 의  $rn_1/rn_2$  는 0.75 이다.
- [0685] 이방성 색소막 형성용 조성물 6 이 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서 복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.
- [0686] 또, 이방성 색소막 6 의 이색비를 결정하였다.
- [0687] 그 결과를 표 1 에 나타낸다.

표 1

	실시예 1	실시예 2	실시예 3	실시예 4	실시예 5	비교예 1
중합성 액정 화합물	I-1	I-1	I-1	I-1	I-1	I-1
색소	II-1	II-2	II-3	II-4	II-5	III-1
극대 흡수 파장 (nm)	470	455	535	535	535	575
파장 450 nm 에 있어서의 이색비	15	17	18	18	17	11
사용한 색소의 시클로펜타논에 대한 용해도 (질량%)	≥3.0	≥3.0	≥3.0	1.3	≥3.0	0.8

[0688]

[0689]

표 1 로부터 실시예 1 에 사용한 색소 (II-1), 실시예 2 에 사용한 색소 (II-2), 실시예 3 에 사용한 색소 (II-3), 실시예 4 에 사용한 색소 (II-4), 실시예 5 에 사용한 색소 (II-5) 는 시클로펜타논에 대한 용해성이 높고, 또한 얻어진 이방성 색소막의 극대 흡수 파장은 비교예 1 에 비해서 단파장화되어 있고, 이색비는 단파장역인 파장 450 nm 에 있어서 양호한 값을 나타내었다. 한편, 비교예 1 에서는, 이색비 및 시클로펜타논에 대한 용해성이 실시예와 비교해서 낮은 것이 시사되었다.

[0690]

[실시예 6]

[0691]

색소 (II-1) : 0.80 부 대신에, 색소 (II-6) : 0.86 부를 첨가한 것 이외에는 실시예 1 과 동일하게 하여, 이방성 색소막 형성용 조성물 7 및 이방성 색소막 7 을 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 7 의  $r_{n1}/r_{n2}$  는 0.75 이다.

[0692]

이방성 색소막 형성용 조성물 7 이 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서 복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.

[0693]

또, 이방성 색소막 7 의 이색비를 결정하였다.

[0694]

그 결과를 표 2 에 나타낸다.

[0695]

[비교예 2]

[0696]

색소 (II-1) : 0.80 부 대신에, 색소 (III-2) : 0.76 부를 사용한 것 이외에는 실시예 1 과 동일하게 하여, 이방성 색소막 형성용 조성물 8 및 이방성 색소막 8 을 얻었다. 이방성 색소막 형성용 조성물 8 의  $r_{n1}/r_{n2}$  는 0.75 이다.

[0697]

이방성 색소막 형성용 조성물 8 이 액정성을 나타내는 것은, 핫 스테이지가 부착된 편광 현미경으로 40 °C 에서 복굴절이 관찰됨으로써 확인되었다.

[0698]

또, 이방성 색소막 8 의 이색비를 결정하였다.

[0699]

그 결과를 표 2 에 나타낸다.

표 2

	실시예 6	비교예 2
중합성 액정 화합물	I-1	I-1
색소	II-6	III-2
극대 흡수 파장 (nm)	525	570
파장 450 nm 에 있어서의 이색비	12	4

[0700]

- [0701] 표 2 로부터 실시예 6 에 사용한 색소 (II-6) 은 얻어진 이방성 색소막의 극대 흡수 파장은 비교예 2 에 비해서 단파장화되어 있고, 이색비는 단파장역인 파장 450 nm 에 있어서 양호한 값을 나타내었다. 한편, 비교예 2 에서는, 얻어진 이방성 색소막에 있어서 이색비가 낮은 것이 시사되었다.
- [0702] 본 발명을 특정한 양태를 사용하여 상세하게 설명했지만, 본 발명의 의도와 범위를 벗어나지 않고 다양한 변경이 가능한 것은 당업자에게 분명하다.
- [0703] 본 출원은, 2022년 3월 22일자로 출원된 일본 특허출원 제2022-044888호에 의거하고 있으며, 그 전체가 인용에 의해 원용된다.