



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0105928
(43) 공개일자 2015년09월18일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 19/42 (2006.01) C09K 19/08 (2006.01)
C09K 19/38 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 19/42 (2013.01)
C09K 19/08 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2015-0032438
(22) 출원일자 2015년03월09일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
14000831.9 2014년03월10일
유럽특허청(EPO)(EP)
14003943.9 2014년11월24일
유럽특허청(EPO)(EP)

(71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
아르체티 그라치아노
독일 64289 다름스타트 구텐베르그스트라췌 60
사이토 이즈미
독일 64285 다름스타트 헤르만스트라췌 35
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
제일특허법인

전체 청구항 수 : 총 29 항

(54) 발명의 명칭 **호메오토로픽 정렬을 갖는 액정 매질**

(57) 요약

본 발명은 저분자량의 성분 및 중합성 성분을 포함하는, 음 또는 양의 유전 이방성을 갖는 액정 매질(LC 매질)에 관한 것이다. 상기 중합성 성분은, 액정 디스플레이(LC 디스플레이)의 표면 또는 셀 벽에서 액정 매질의 호메오토로픽(수직) 정렬을 수행하는 자가-정렬 중합성 메소젠(중합성 자가-정렬 첨가제)을 포함한다. 따라서, 본 발명은 또한 정렬 층 없이 액정 매질의 호메오토로픽 정렬을 갖는 액정 디스플레이를 포괄한다. 본 발명은 특정 위치의 작용기를 갖는 중합성 자가-정렬 첨가제에 대한 신규한 구조를 개시한다.

(52) CPC특허분류

C09K 19/38 (2013.01)

(72) 발명자

포르테 로코

독일 65933 프랑크푸르트 암 마인 레르헨스트라쎄
5

코텍 토르스텐

독일 64546 뢰르펠덴-발도르프 하이델베르거 스트
라쎄 72

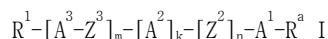
명세서

청구범위

청구항 1

저분자량의 비중합성 액정 성분, 및

하나 이상의 화학식 I의 화합물을 포함하는 중합성 또는 중합된 성분(이때, 상기 중합된 성분은 상기 중합성 성분을 중합하여 수득가능함)을 포함하는 액정(LC) 매질:



상기 식에서,

A^1 , A^2 , A^3 은, 각각 서로 독립적으로, 방향족, 헤테로방향족, 비환형 또는 헤테로환형 기를 나타내고, 이는 융합된 고리를 또한 포함할 수 있고 기 L 또는 -Sp-P로 또한 단일- 또는 다중치환될 수 있고,

L은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H, F, Cl, Br, I, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, 임의적으로 치환된 실릴, 3 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 임의적으로 치환된 아릴 또는 사이클로알킬, 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬, 알콕시, 알킬카본일, 알콕시카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시(이때, 하나 이상의 H 원자는 또한 F 또는 Cl로 대체될 수 있음)를 나타내고,

P는 중합성 기를 나타내고,

Sp는 스페이서 기 또는 단일 결합을 나타내고,

Z^2 는, 각각의 경우, 서로 독립적으로, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -(CH₂)_{n1}-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -(CF₂)_{n1}-, -CH=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, -(CR⁰R⁰⁰)_{n1}-, -CH(-Sp-P)-, -CH₂CH(-Sp-P)-, -CH(-Sp-P)CH(-Sp-P)-를 나타내고,

Z^3 는, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 단일 결합, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -(CH₂)_{n1}-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -(CF₂)_{n1}-, -CH=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, -(CR⁰R⁰⁰)_{n1}-, -CH(-Sp-P)-, -CH₂CH(-Sp-P)-, -CH(-Sp-P)CH(-Sp-P)-를 나타내고,

n1은 1, 2, 3 또는 4를 나타내고,

n은 0 또는 1을 나타내고,

m은 0, 1, 2, 3, 4, 5 또는 6을 나타내고,

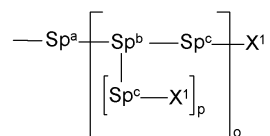
k는 0 또는 1을 나타내고,

R^0 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

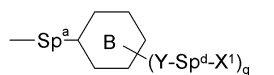
R^{00} 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

R^1 은, 서로 독립적으로, H, 할로젠, 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄, 분지쇄 또는 환형 알킬(이때, 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 또한, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F 또는 Cl로 대체될 수 있음), 또는 기 -Sp-P를 나타내고,

R^a는 하기 화학식의 앵커(anchor) 기를 나타내고:



또는



이때, p는 1 또는 2를 나타내고,

q는 2 또는 3을 나타내고,

B는 치환되거나 비치환된 고리 시스템 또는 축합 고리 시스템을 나타내고,

Y는, 서로 독립적으로, -O-, -S-, -C(O)-, -C(O)O-, -OC(O)-, -NR¹¹- 또는 단일 결합을 나타내고,

o는 0 또는 1을 나타내고,

X'¹은, 서로 독립적으로, H, 알킬, 플루오로알킬, OH, NH₂, NHR¹¹, NR¹¹₂, OR¹¹, C(O)OH, -CHO를 나타내고, 이때,

하나 이상의 기 X'¹은 -OH, -NH₂, NHR¹¹, C(O)OH 및 -CHO로부터 선택된 라디칼을 나타내고,

R¹¹은 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

Sp^a, Sp^c, Sp^d는, 각각 서로 독립적으로, 스페이서 기 또는 단일 결합을 나타내고,

Sp^b는 3가 또는 4가 기를 나타내고,

이때, 화학식 I의 화합물은, 존재하는 기 A¹, A², A³, Z² 및 Z³ 내에 하나 이상의 중합성 기 P를 포함한다.

청구항 2

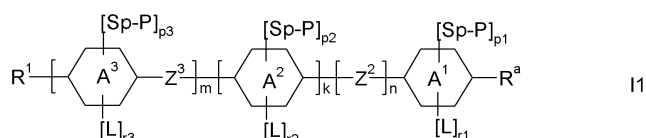
제 1 항에 있어서,

화학식 I에서, A¹, A², A³이, 각각 서로 독립적으로, 1,4-페닐렌, 나프탈렌-1,4-다이일 또는 나프탈렌-2,6-다이일(이때, 이들 기 내의 하나 이상의 CH 기는 또한, N으로 대체될 수 있음), 사이클로헥산-1,4-다이일(이때, 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 또한, O 및/또는 S로 대체될 수 있음), 3,3'-바이사이클로부틸리텐, 1,4-사이클로헥센일렌, 바이사이클로[1.1.1]펜탄-1,3-다이일, 바이사이클로[2.2.2]옥탄-1,4-다이일, 스피로[3.3]헵탄-2,6-다이일, 피페리딘-1,4-다이일, 데카하이드로-나프탈렌-2,6-다이일, 1,2,3,4-테트라하이드로-나프탈렌-2,6-다이일, 인단-2,5-다이일 또는 옥타하이드로-4,7-메타노-인단-2,5-다이일, 퍼하이드로사이클로펜타-[a]펜안트렌-3,17-다이일(특히, 고난-3,17-다이일)을 나타내고, 이때, 이들 모든 기는 비치환되거나 또는 기 L 또는 -Sp-P로 단일-또는 다중치환될 수 있는 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 I의 화합물이 하기 화학식 I1의 화합물인 것을 특징으로 하는, 액정 매질:



상기 식에서,

R^1 , R^a , A^1 , A^2 , A^3 , Z^2 , Z^3 , L, Sp, P, k, m 및 n은, 독립적으로, 제 1 항에 정의된 바와 같고,

p1, p2, p3은, 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

r1, r2, r3은, 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

이때, 화학식 I1의 화합물은, 존재하는 기 A^1 , A^2 , A^3 , Z^2 및 Z^3 내의 하나 이상의 중합성 기 P를 포함한다.

청구항 4

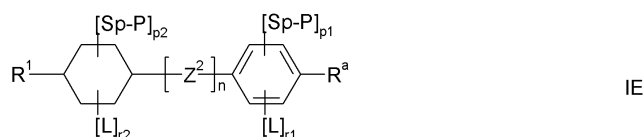
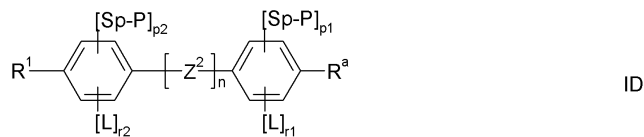
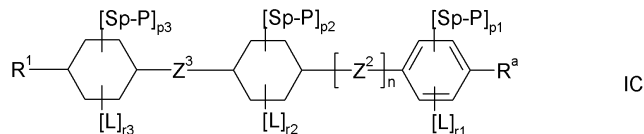
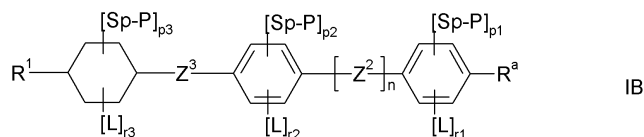
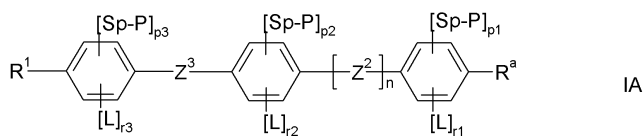
제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 I의 화합물이, 존재하는 기 A^1 , A^2 및 A^3 상에 총 하나 이상의 중합성 기 -Sp-P를 포함하는 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

청구항 5

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,

하나 이상의 화학식 I의 화합물이 하기 화학식 IA, IB, IC, ID 또는 IE의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는, 액정 매질:



상기 식에서,

R^1 , R^a , Z^2 , Z^3 , L, Sp, P 및 n은, 독립적으로, 제 1 항에 정의된 바와 같고,

p1, p2, p3은, 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

r1, r2, r3은, 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

이때, 화학식 IA, IB, IC, ID 또는 IE의 화합물 각각은 하나 이상의 중합성 기 P를 포함한다.

청구항 6

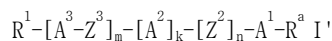
제 1 항 내지 제 5항 중 어느 한 항에 있어서,

하나 이상의 화학식 I의 화합물 외에, 상기 중합성 또는 중합된 성분이 하나 이상의 추가의 중합성 또는 중합된 화합물을 포함하고, 이때, 상기 중합된 성분은 상기 중합성 성분을 중합하여 수득가능한 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

청구항 7

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

하나 이상의 화학식 I의 화합물 외에, 하나 이상의 하기 화학식 I'의 비중합성 화합물을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는, 액정 매질:



상기 식에서, m, k, n 및 기 R^a는 제 1 항에 따른 화학식 I의 화합물에 대해 정의된 바와 같고,

A¹, A², A³은, 각각 서로 독립적으로, 방향족, 헤테로방향족, 비환형 또는 헤테로환형 기를 나타내고, 이는 또한 융합된 고리를 포함할 수 있고 또한 기 L로 단일- 또는 다중치환될 수 있고,

Z²는 각각의 경우, 서로 독립적으로, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -(CH₂)_{n1}-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -(CF₂)_{n1}-, -CH=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, -(CR⁰R⁰⁰)_{n1}-를 나타내고,

Z³는 각각의 경우, 서로 독립적으로, 단일 결합, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -(CH₂)_{n1}-, -CF₂CH₂-, -CH₂CF₂-, -(CF₂)_{n1}-, -CH=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, -CH=CH-COO-, -OCO-CH=CH-, -(CR⁰R⁰⁰)_{n1}-를 나타내고,

n1은 1, 2, 3 또는 4를 나타내고,

L은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H, F, Cl, Br, I, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, 임의적으로 치환된 실릴, 3 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 임의적으로 치환된 아릴 또는 사이클로알킬, 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬, 알콕시, 알킬카본일, 알콕시카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시(이때, 하나 이상의 H 원자는 또한, F 또는 Cl로 대체될 수 있음)를 나타내고,

R⁰은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

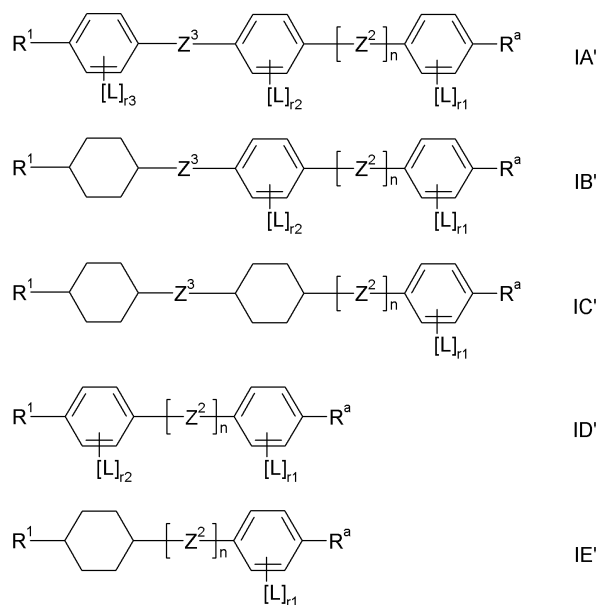
R⁰⁰은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

R¹은, 서로 독립적으로, H, 할로젠, 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄, 분지쇄 또는 환형 알킬을 나타내고, 이때, 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 또한, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F 또는 Cl로 대체될 수 있다.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

하기 화학식으로부터 선택되는 하나 이상의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 액정 매질:



상기 식에서,

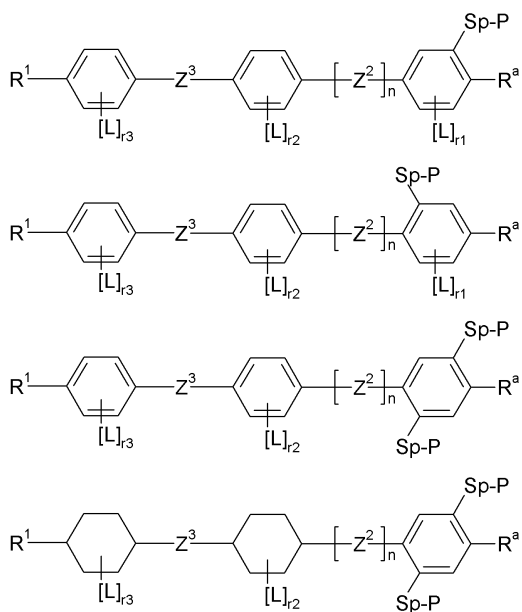
R^1 , R^a , Z^2 , Z^3 , L 및 n은 독립적으로, 제 7 항에서 정의된 바와 같고,

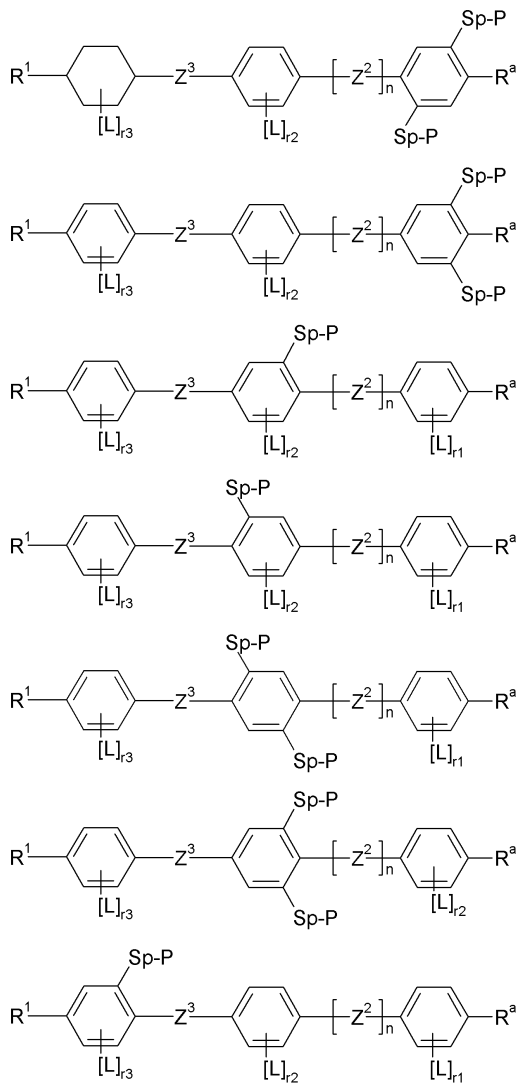
r_1 , r_2 , r_3 은 독립적으로, 0, 1, 2, 3 또는 4를 나타낸다.

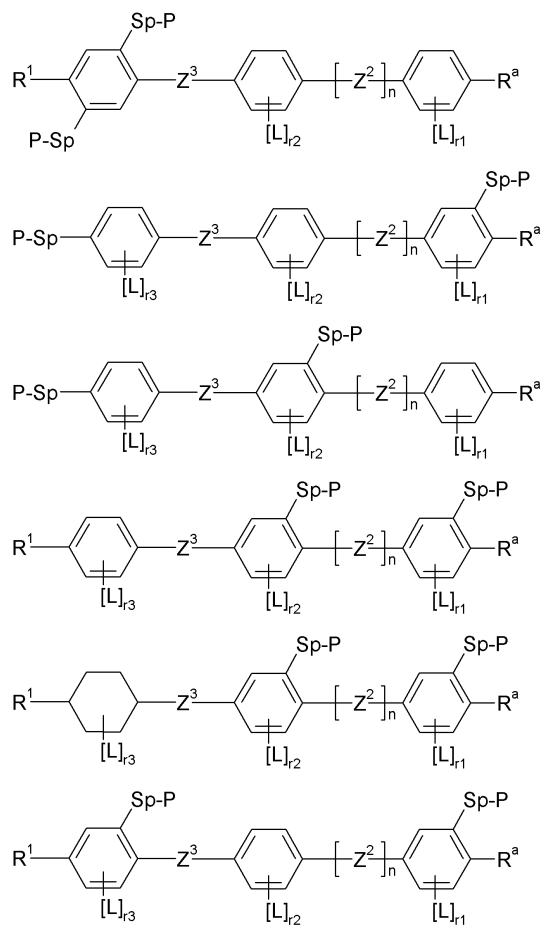
청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 I의 화합물이 하기 화학식으로부터 선택되는 하나 이상의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 액정 매질:







상기 식에서,

L , Sp , P , R^a 및 Z^2 는 독립적으로, 제 1 항에서 정의된 바와 같고,

Z^3 는 단일 결합 또는 $-CH_2CH_2-$ 을 나타내고,

n 은 0 또는 1을 나타내고,

$p1$, $p2$, $p3$ 은 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

$r1$, $r2$, $r3$ 은 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

R^1 은 H, 할로젠, 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄, 분지쇄 또는 환형 알킬(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, 0 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO-O-$, $-O-CO-$, $-O-CO-O-$ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F 또는 Cl로 대체될 수 있음)을 나타낸다.

청구항 10

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 I의 기 R^a 가 1개, 2개 또는 3개의 OH 기를 포함하는 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

청구항 11

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 있어서,

기 R^a 가 하기로부터 선택되는 기를 나타내는 것을 특징으로 하는, 액정 매질:

릴레이트, 옥세탄 및 에폭사이드로부터 선택되는 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

청구항 15

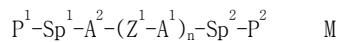
제 1 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 I의 화합물을 10 중량% 미만의 농도로 포함하는 것을 특징으로 하는 액정 매질.

청구항 16

제 1 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 있어서,

하나 이상의 하기 화학식 M의 중합성 화합물 또는 하기 화학식 M의 화합물들을 포함하는 (공)중합체를 포함하는 것을 특징으로 하는 액정 매질:



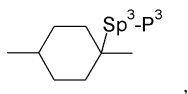
상기 식에서,

P^1 , P^2 는, 각각 독립적으로, 중합성 기를 나타내고,

Sp^1 , Sp^2 는, 각각 독립적으로, 스페이서 기를 나타내고,

A^1 , A^2 는, 각각 서로 독립적으로, 하기 군으로부터 선택되는 라디칼을 나타내고:

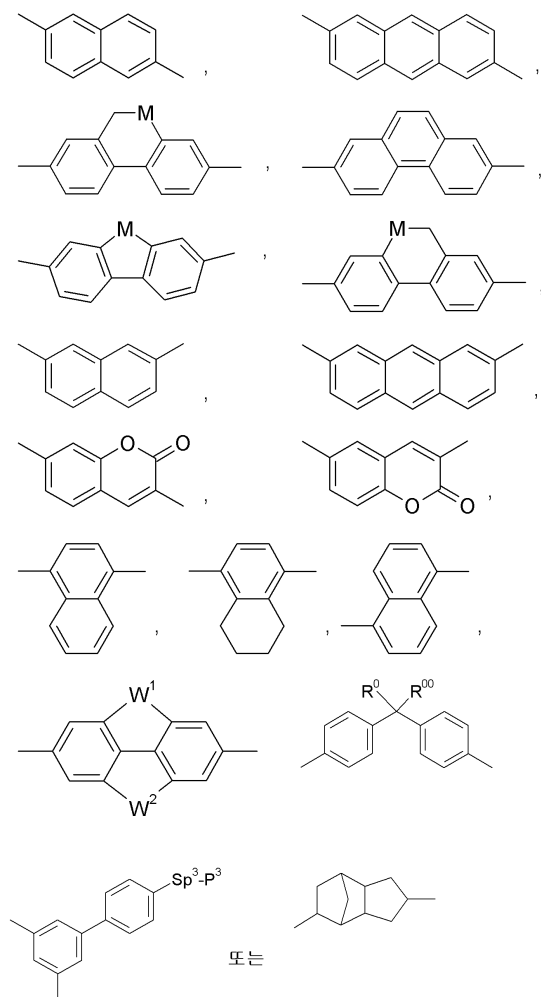
a) 트랜스-1,4-사이클로헥실렌, 1,4-사이클로헥센일렌 및 4,4'-바이사이클로헥실렌(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, -O- 및/또는 -S-로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, 기 L로 대체될 수 있음)으로 이루어진 군, 또는 하기 구조식으로부터 선택되는 라디칼:



b) 1,4-페닐렌 및 1,3-페닐렌(이때, 하나 또는 2개의 CH 기는 또한, N으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, 기 L 또는 $-Sp^3-P$ 로 대체될 수 있음)으로 이루어진 군,

c) 테트라하이드로피란-2,5-다이일, 1,3-다이옥산-2,5-다이일, 테트라하이드로퓨란-2,5-다이일, 사이클로부탄-1,3-다이일, 피페리딘-1,4-다이일, 티오펜-2,5-다이일 및 셀레노펜-2,5-다이일(이들 각각은 또한, 기 L로 단일-또는 다중치환될 수 있음)로 이루어진 군,

d) 5 내지 20개의 환형 탄소 원자(이들 중 하나 이상은, 또한, 헤테로원자로 대체될 수 있음)를 갖는, 포화, 부분 불포화 또는 완전 불포화되고 임의적으로 치환된, 다환형 라디칼로 이루어진 군, 바람직하게는 바이사이클로-[1.1.1]-헵탄-1,3-다이일, 바이사이클로[2.2.2]옥탄-1,4-다이일, 스피로-[3.3]-헵탄-2,6-다이일,



(이때, 이들 라디칼에서 하나 이상의 H 원자는 또한, 기 L 또는 $-Sp^3-P$ 로 대체될 수 있고/있거나 하나 이상의 이중 결합은 단일 결합으로 대체될 수 있고/있거나 하나 이상의 CH 기는 N으로 대체될 수 있음)로 이루어진 군,

P^3 은 중합성 기를 나타내고,

Sp^3 은 스페이서 기를 나타내고,

n은 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

Z^1 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, $-CO-O-$, $-O-CO-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, 또는 $-(CH_2)_n$ -(이때 n은 2, 3 또는 4임), $-O-$, $-CO-$, $-C(R^cR^d)-$, $-CH_2CF_2-$, $-CF_2CF_2-$ 또는 단일 결합을 나타내고,

L은, 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, F, Cl, CN, SCN, SF_5 , 또는 직쇄 또는 분지쇄의, 각각의 경우 임의적으로 플루오르화되는, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 알콕시, 알킬카본일, 알콕시-카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시를 나타내고,

R^0 , R^{00} 은, 각각 서로 독립적으로, H, F 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬(이때, 하나 이상의 H 원자는 또한, F로 대체될 수 있음)을 나타내고,

M은 $-O-$, $-S-$, $-CH_2-$, $-CHY^1-$ 또는 $-CY^1Y^2-$ 를 나타내고,

Y^1 및 Y^2 는, 각각 서로 독립적으로, R^0 에 대해 상기 기재된 의미 중 하나를 갖거나 Cl 또는 CN을 나타내고,

W^1 , W^2 는, 각각 서로 독립적으로, $-CH_2CH_2-$, $-CH=CH-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-C(R^cR^d)-$ 또는 $-O-$ 를 나타내고,

R^c 및 R^d 는, 각각 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 6개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 바람직하게는 H, 메틸 또는 에틸을 나타내고,

이때, 기 P^1-Sp^1- , $-Sp^2-P^2$ 및 $-Sp^3-P^3$ 중 하나 이상은 라디칼 R^{aa} 를 나타내되, 단 존재하는 P^1-Sp^1- , $-Sp^2-P^2$ 및 $-Sp^3-P^3$ 중 하나 이상은 R^{aa} 를 나타내지 않고,

R^{aa} 는 H, F, Cl, CN 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, 서로 독립적으로, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $C(R^0)=C(R^{00})-$, $-C\equiv C-$, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-O-CO-$, $-O-CO-O-$ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F, Cl, CN 또는 P^1-Sp^1- 로 대체될 수 있음)을 나타내고, 이때, R^{aa} 에 기 $-OH$, $-NH_2$, $-SH$, $-NHR$, $-C(O)OH$ 및 $-CHO$ 는 존재하지 않는다.

청구항 17

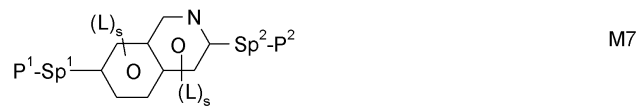
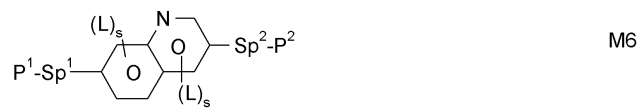
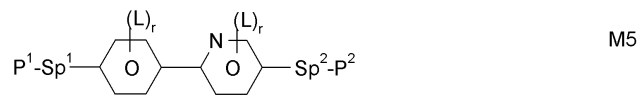
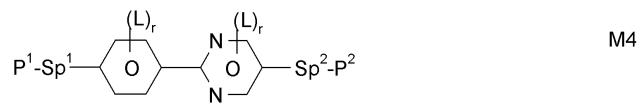
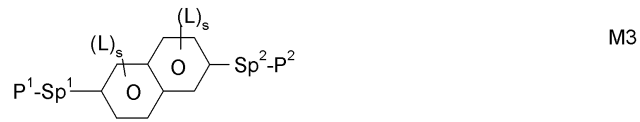
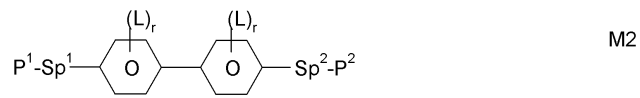
제 1 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 있어서,

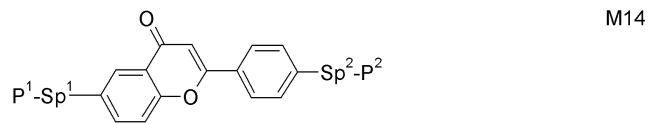
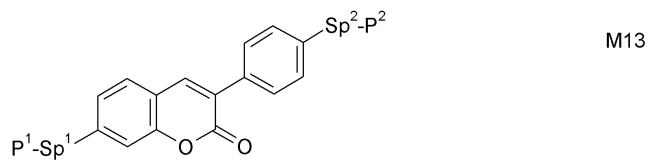
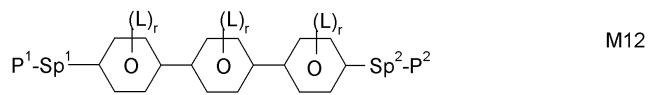
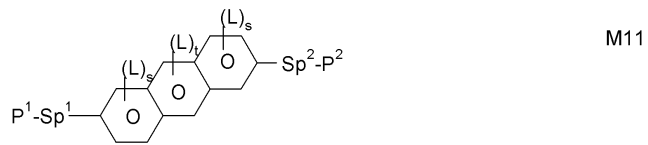
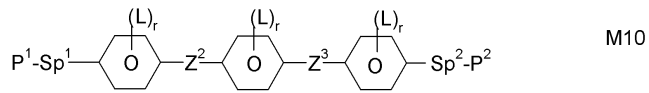
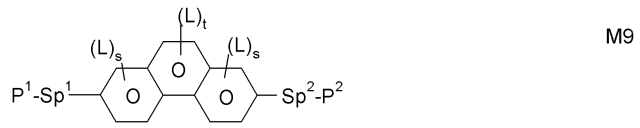
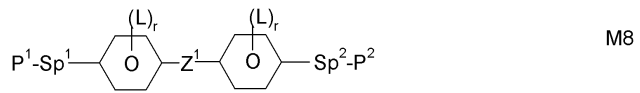
상기 중합성 또는 중합된 성분이, 제 16 항에 따른 하나 이상의 화학식 M의 화합물을 0.01 내지 5 중량% 포함하고/하거나, 하나 이상의 앵커 기를 포함하는 제 7 항에 따른 하나 이상의 화학식 I'의 비중합성 화합물을 0.01 내지 10 중량% 포함하는 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

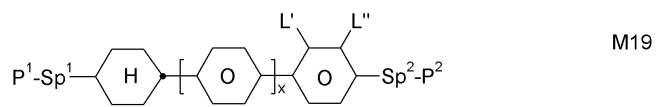
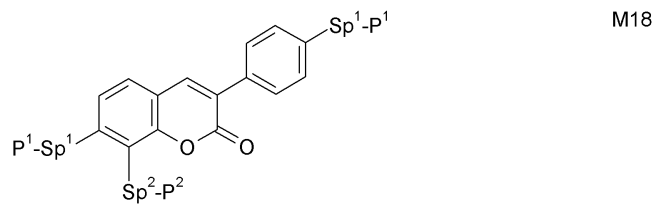
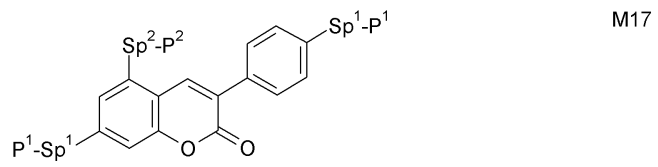
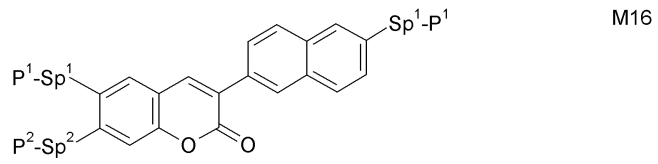
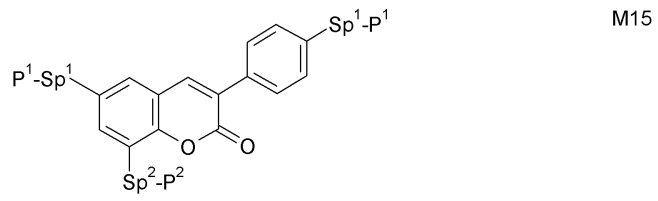
청구항 18

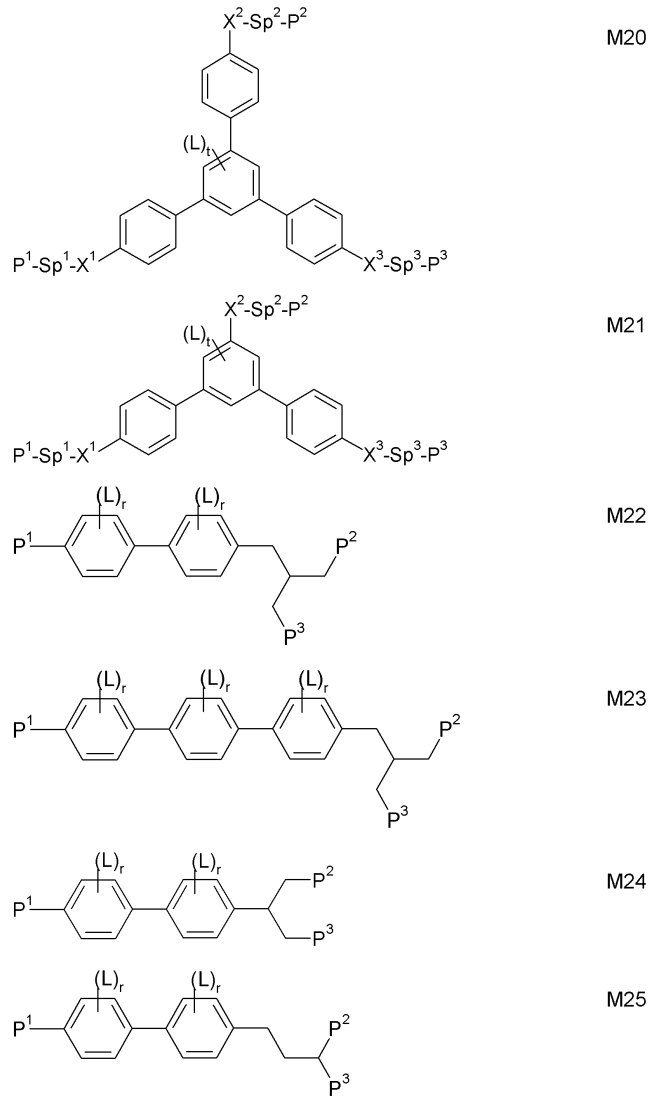
제 1 항 내지 제 17 항 중 어느 한 항에 있어서,

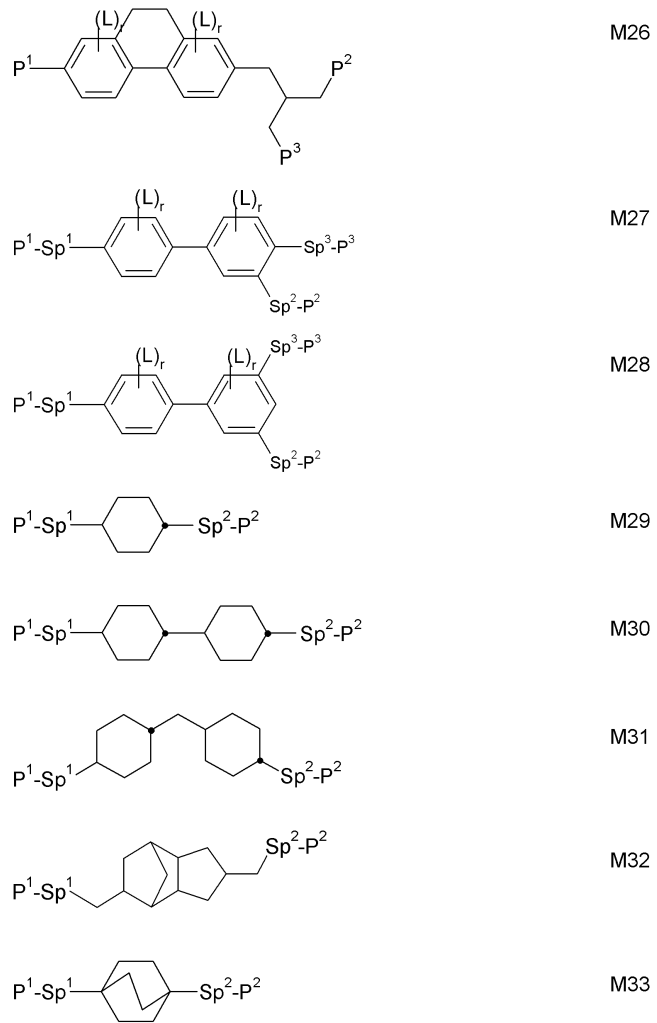
상기 중합성 또는 중합된 성분이 하기 화학식의 화합물로부터 선택되는 하나 이상의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 액정 매질:

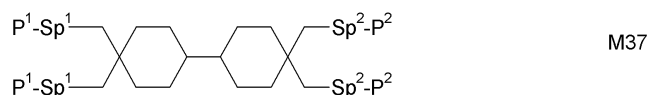
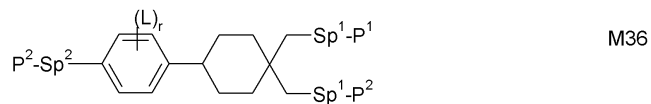
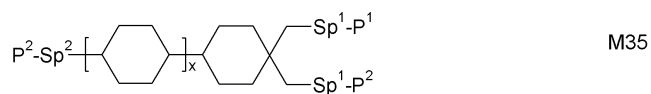
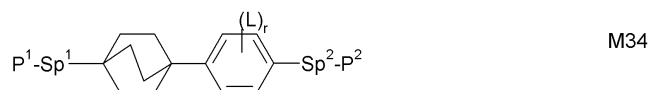












상기 식에서,

P^1 , P^2 및 P^3 는, 각각 서로 독립적으로, 바람직하게는 P에 대해 상기 및 하기에 기재된 의미 중 하나를 갖는 중합성 기, 바람직하게는 아크릴레이트, 메타크릴레이트, 플루오로아크릴레이트, 옥세탄, 비닐옥시 또는 에폭사이드 기를 나타내고,

Sp^1 , Sp^2 및 Sp^3 은, 각각 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 스페이서 기, 바람직하게는 M에 대해 상기 및 하기에 기재된 의미 중 하나를 갖는 것, 특히 바람직하게는 $-(CH_2)_{p1}-$, $-(CH_2)_{p1}-O-$, $-(CH_2)_{p1}-CO-O-$ 또는 $-(CH_2)_{p1}-O-CO-O-$ 를 나타내고, 이때, $p1$ 은 1 내지 12의 정수이고, 나중에 언급된 상기 기들에서의 인접 고리에 대한 결합은 O 원자를 통해 일어나고,

이때, 또한, 라디칼 P^1-Sp^1- , P^2-Sp^2- 및 P^3-Sp^3- 중 하나 이상은 라디칼 R^{aa} 를 나타낼 수 있되, 단, 존재하는 라디칼 P^1-Sp^1- , P^2-Sp^2- 및 P^3-Sp^3- 중 하나 이상은 R^{aa} 를 나타내지 않고,

R^{aa} 는 H, F, Cl, CN 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, 각각 서로 독립적으로, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $C(R^0)=C(R^{00})-$, $-C\equiv C-$, $-N(R^0)-$, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO-O-$, $-O-CO-$, $-O-CO-O-$ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F, Cl, CN 또는 P^1-Sp^1 -로 대체될 수 있음)을 나타내고, 이때, 기 R^{aa} 에 $-OH$, $-NH_2$, $-SH$, $-NHR$, $-C(O)OH$ 및 $-CHO$ 는 존재하지 않고,

R^0 , R^{00} 는, 각각 서로 독립적으로 및 각각의 경우 동일하게 또는 상이하게, H 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

R^y 및 R^z 는, 각각 서로 독립적으로, H, F, CH_3 또는 CF_3 을 나타내고,

X^1 , X^2 및 X^3 은, 각각 서로 독립적으로, $-CO-O-$, $O-CO-$ 또는 단일 결합을 나타내고,

Z^1 은 $-O-$, $-CO-$, $-C(R^yR^z)-$ 또는 $-CF_2CF_2-$ 를 나타내고,

Z^2 및 Z^3 은, 각각 서로 독립적으로, $-CO-O-$, $-O-CO-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$ 또는 $-(CH_2)_n$ -을 나타내고, 이때, n은 2, 3 또는 4이고,

L은, 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, F, Cl, CN, SCN, SF_5 , 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄의, 임의적으로 단일- 또는 다중플루오르화되는, 알킬, 알콕시, 알켄일, 알킨일, 알킬카본일, 알콕시카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시, 바람직하게는 F를 나타내고,

L' 및 L"는, 각각 서로 독립적으로, H, F 또는 Cl을 나타내고,

r은 0, 1, 2, 3 또는 4를 나타내고,

s는 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

t는 0, 1 또는 2를 나타내고,

x는 0 또는 1을 나타낸다.

청구항 19

적어도 하나의 기관은 광투과성이고 적어도 하나의 기관은 1 또는 2개의 전극을 갖는, 2개의 기관 및 2개 이상의 전극을 갖는 액정 셀, 및 상기 기관들 사이에 위치한 제 1 항 내지 제 18 항 중 어느 한 항에 따른 액정 매질의 층을 포함하는 액정 디스플레이로서, 이때 화학식 I의 화합물이 기관 표면에 대한 액정 매질의 호메오토픽 정렬을 수행하기에 적합한, 액정 디스플레이.

청구항 20

제 19 항에 있어서,

상기 기관이 호메오토픽 정렬을 위한 정렬층을 갖지 않는 것을 특징으로 하는, 액정 디스플레이.

청구항 21

제 19 항에 있어서,

상기 기관이 한쪽 또는 양쪽 면 상에 정렬층을 갖는 것을 특징으로 하는, 액정 디스플레이.

청구항 22

제 19 항 내지 제 21 항 중 어느 한 항에 있어서,

대향하는 기관 상에 정렬된 전극 및 음의 유전 이방성을 갖는 액정 매질을 함유한 VA 디스플레이인 것을 특징으로 하는 액정 디스플레이.

청구항 23

제 19 항 내지 제 21 항 중 어느 한 항에 있어서,

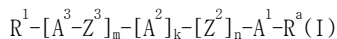
적어도 하나의 기관 상에 정렬된 인터디지털 전극 및 양의 유전 이방성을 갖는 액정 매질을 함유한 VA-IPS 디스플레이인 것을 특징으로 하는 액정 디스플레이.

청구항 24

하나 이상의 제 1 항에 따른 화학식 I의 화합물을 저분자량 액정 성분과 혼합하고, 임의적으로 하나 이상의 중합성 화합물 및/또는 임의의 바람직한 첨가제를 첨가하는 것을 특징으로 하는, 액정 매질의 제조 방법.

청구항 25

하기 화학식 (I)의 화합물:



상기 식에서, 기들은 제 1 항에 정의된 바와 같고, $k = 1$ 을 특징으로 한다.

청구항 26

제 25 항에 있어서,

$m = 1$ 이고 $k = 1$ 인 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

청구항 27

제 25 항 또는 제 26 항에 있어서,

A^1 및 A^2 가 독립적으로, 1,4-페닐렌 또는 사이클로헥산-1,4-다이일이고, 이들 각각은 기 L 또는 -Sp-P로 단일-또는 다중치환되는 것을 특징으로 하는, 액정 매질.

청구항 28

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물의, 액정 매질의 범위를 정하는 표면에 대해 호메오토로픽 정렬을 수행하기 위한 액정 매질용 첨가제로서의 용도.

청구항 29

적어도 하나의 기관은 광투과성이고 적어도 하나의 기관은 1 또는 2개의 전극을 갖는 2개의 기관 및 2개 이상의 전극을 갖는 액정 셀을 포함하는 액정 디스플레이의 제조 방법으로서,

(a) 제 1 항 내지 제 18 항 중 어느 한 항에 따른 액정 매질로 상기 셀을 충전하여, 기관 표면에 대한 액정 매질의 호메오토로픽 정렬을 구축하는 단계; 및

(b) 중합성 성분(들)을, 임의적으로 셀에 전압을 인가하거나 전기장의 작용 하에, 하나 이상의 공정 단계로 중합시키는 단계

를 포함하는 제조 방법.

발명의 설명

기술 분야

본 발명은 저분자량의 성분 및 중합성(polymerizable) 성분을 포함하는, 음 또는 양의 유전 이방성을 갖는 액정 매질(LC 매질)에 관한 것이다. 상기 중합성 성분은, 액정 디스플레이(LC 디스플레이)의 표면 또는 셀 벽에서 액정 매질의 호메오토로픽(수직) 정렬을 수행하는, 자가-정렬(self-aligning) 중합성 메소젠(중합성 자가-정렬 첨가제)을 포함한다. 따라서, 본 발명은 또한 정렬 층 없이 액정 매질의 호메오토로픽 정렬을 갖는 액정 디스플레이를 포괄한다. 본 발명은, 특정 위치의 작용기를 갖는 중합성 자가-정렬 첨가제에 대한 신규한 구조를 개시한다.

배경 기술

- [0002] 전기적으로 제어된 복굴절(ECB) 효과 또는 정렬된 상의 변형(DAP) 효과의 원리는, 1971년에 처음으로 기재되었다(문헌[M.F. Schieckel and K. Fahrenschon, "Deformation of nematic liquid crystals with vertical orientation in electrical fields", Appl. Phys. Lett. 19(1971), 3912])). 이후, 제이 에프 칸(J.F. Kahn)(문헌[Appl. Phys. Lett. 20(1972), 1193]), 및 지 라브루니(G. Labrunie) 및 제이 로버트(J. Robert)(문헌[J. Appl. Phys. 44(1973), 4869])의 논문이 뒤를 이었다.
- [0003] 제이 로버트 및 에프 클라크(F. Clerc)(문헌[SID 80 Digest Techn. Papers(1980), 30]), 제이 두첸(J. Duchene)(문헌[Displays 7(1986), 3]) 및 에이치 샬트(H. Schad)(문헌[SID 82 Digest Techn. Papers(1982), 244])에 의한 논문은, ECB 효과를 기준으로 고정된 디스플레이 소자에 사용하기에 적합하기 위하여 액정 상이 높은 탄성 계수 K_3/K_1 의 비율 값, 높은 광학 이방성 Δn 값 및 유전 이방성 $\Delta \epsilon \leq -0.5$ 의 값을 가져야 함을 나타내었다. ECB 효과를 기준으로 전자-광학 디스플레이 소자는 호메오토로픽 엣지(edge) 정렬(VA 기술 = 수직 정렬됨(vertically aligned))을 갖는다.
- [0004] 소위 VAN(수직 정렬된 네마틱(vertically aligned nematic)) 디스플레이라 불리는 ECB 효과를 사용한 디스플레이는, 예컨대 MVA(멀티-도메인 수직 정렬(multi-domain vertical alignment)), 예컨대: 문헌[Yoshida, H. et al., paper 3.1: "MVA LCD for Notebook or Mobile PCs ...", SID 2004 International Symposium, Digest of Technical Papers, XXXV, Book I, pp. 6 to 9], 및 [Liu, C.T. et al., paper 15.1: "A 46-inch TFT-LCD HDTV Technology ...", SID 2004 International Symposium, Digest of Technical Papers, XXXV, Book II, pp. 750 to 753]), PVA(패턴화된 수직 정렬(patterned vertical alignment)), 예컨대: 문헌[Kim, Sang Soo, paper 15.4: "Super PVA Sets New State-of-the-Art for LCD-TV", SID 2004 International Symposium, Digest of Technical Papers, XXXV, Book II, pp. 760 to 763]), ASV(진보된 슈퍼 뷰, 예컨대: 문헌[Shigeta, Mitzuhiro 및 Fukuoka, Hirofumi, paper 15.2: "Development of High Quality LCDTV", SID 2004 International Symposium, Digest of Technical Papers, XXXV, Book II, pp. 754 to 757]) 모드에서, 최근 가장 중요한, 특히 TV 용도를 위하여, IPS(평판 스위칭(in-plane switching)) 디스플레이(예컨대: 문헌[Yeo, S.D., paper 15.3: "An LC Display for the TV Application", SID 2004 International Symposium, Digest of Technical Papers, XXXV, Book II, pp. 758 & 759]) 및 오랫동안 알려진 TN(비틀린 네마틱) 디스플레이를 제외한 3개 초과의 액정 디스플레이의 최근 유형들 중 하나로서 형성되고 있다. 이러한 기술은 일반적 유형, 예컨대 문헌[Souk, Jun, SID Seminar 2004, seminar M-6: "Recent Advances in LCD Technology", Seminar Lecture Notes, M-6/1 to M-6/26], 및 [Miller, Ian, SID Seminar 2004, seminar M-7: "LCD-Television", Seminar Lecture Notes, M-7/1 to M-7/32]과 비교된다. 오버 드라이브(over-drive)를 포함한 어드레싱 방법, 예컨대 문헌[Kim, Hyeon Kyeong et al., paper 9.1: "A 57-in. Wide UXGA TFT-LCD for HDTV Application", SID 2004 International Symposium, Digest of Technical Papers, XXXV, Book I, pp. 106 to 109]에 의해 일반적 ECB 디스플레이의 응답 시간이 이미 상당히 개선되었지만, 특히 회색 음영의 스위칭에 대한 비디오-호환성 응답 시간의 달성이 여전히 만족스럽게 해결되지 않은 문제로 남아있다.
- [0005] 상이한 바람직한 방향의 2개 이상의 도메인을 갖는 VA 디스플레이의 생산에 상당한 노력을 기울이고 있다. 본 발명의 목적은, VA 기술의 이점, 예컨대 상대적으로 짧은 응답 시간 및 우수한 시야각 의존을 포기하지 않고 생산 공정 및 디스플레이 장치 그 자체를 단순화시키는 것이다.
- [0006] 양의 유전 이방성을 갖는 LC 매질을 포함한 VA 디스플레이는 문헌[S.H. Lee et al. Appl. Phys. Lett.(1997), 71, 2851-2853]에 기재되어 있다. 이러한 디스플레이는 그 중에서도, 상업적으로 입수가 가능한 IPS(평판 스위칭) 디스플레이(예컨대, DE 40 00 451 및 EP 0 588 568에 개시된 바와 같음)로서 기판 표면 상에 정렬된 인터 디지털 전극(빗형 구조를 갖는 평판 어드레싱 전극 배열)을 사용하고, 전기장을 인가하여 평판 배열을 변화시키는 액정 매질의 호메오토로픽 정렬을 갖는다.
- [0007] 상기 언급된 디스플레이의 추가의 발전은, 예컨대 문헌[K.S. Han et al. J. Appl. Phys.(2008), 104, 084515(DSIPS: 드라이버 전압 및 전달의 개선을 위한 '이중면 평판 스위칭')], [M. Jiao et al. App. Phys. Lett(2008), 92, 111101(DFFS: 개선된 응답 시간을 위한 '이중 프린지 필드 스위칭') 및 [Y.T. Kim et al. Jap. J. App. Phys.(2009), 48, 110205(VAS: '시야각 스위칭가능한' LCD)]에서 발견할 수 있다.

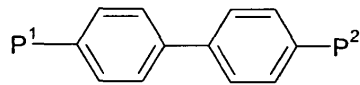
- [0008] 또한, VA-IPS 디스플레이는 소위 양의-VA 및 HT-VA로 공지되어 있다.
- [0009] 이러한 모든 디스플레이(일반적으로, 하기에 VA-IPS 디스플레이로서 지칭됨)에서, 액정 매질의 호메�트로픽 정렬을 위해 정렬층은 기판 표면 둘다에 적용되고, 이러한 층의 제조는 지금까지 상당한 노력을 필요로 했다.
- [0010] 본 발명의 목적은, VA-IPS 기술의 이점, 예컨대 상대적으로 짧은 응답 시간, 우수한 시야각 의존성 및 높은 콘트라스트를 포기하지 않고 생산 공정 그 자체를 단순화시키는 것이다.
- [0011] 전자-광학 디스플레이 소자에서 이러한 효과의 산업적 적용은 다양한 필요를 만족시켜야 하는 LC 상을 필요로 한다. 습기, 공기, 기판 표면에서의 물질 및 물리적 영향, 예컨대 열, 적외선, 가시광선 및 자외선에 대한 화학적 저항성, 및 직류 및 교류 전기장이 특히 중요하다.
- [0012] 추가로, 상업적으로 사용가능한 LC 상은 적합한 온도 범위 및 낮은 점도에서 액정 메소상을 갖는데 필요하다.
- [0013] VA 및 VA-IPS 디스플레이는 일반적으로, 큰 작동 온도 범위, 짧은 응답 시간 및 낮은 역치 전압과 동시에 매우 높은 비저항을 갖고 이에 의해 다양한 회색 음영을 생성시킬 수 있는 것으로 의도된다.
- [0014] 통상적인 VA 및 VA-IPS 디스플레이에서, 기판 표면 상의 폴리이미드 층은 액정의 호메�트로픽 정렬을 보장한다. 디스플레이에서 적합한 정렬층의 생산은 상당한 노력이 필요하다. 또한, 정렬층과 액정 매질 간의 상호작용은 디스플레이의 전기 저항을 손상시킬 수 있다. 이러한 유형의 가능한 상호작용으로 인해, 적합한 액정 성분의 수가 상당히 감소된다. 따라서, 폴리이미드 없이 액정 매질의 호메�트로픽 정렬을 달성하는 것이 바람직하다.
- [0015] 빈번히 사용되는 능동-매트릭스 TN 디스플레이의 단점은, 이들의 비교적 낮은 콘트라스트, 상대적으로 높은 시야각 의존 및 이러한 디스플레이에서 회색 음영을 생산하기 위한 어려움에 기인한다.
- [0016] VA 디스플레이는 상당히 나은 시야각 의존을 가지므로, 텔레비전 및 모니터에 주로 사용된다.
- [0017] 추가 진전은 소위 PS(중합체 지속된(polymer sustained)) 또는 PSA(중합체 지속된 정렬(polymer sustained alignment)) 디스플레이이며, 이때 또한, 용어 "중합체 안정화된"이 때때로 사용된다. PSA 디스플레이는 다른 파라미터, 예컨대 특히, 콘트라스트의 유리한 시야각 의존에 대한 큰 부작용 없이 응답 시간을 단축시켜 구별된다.
- [0018] 이러한 디스플레이에서, 소량(예컨대, 0.3 중량%, 전형적으로 < 1 중량%)의 하나 이상의 중합성 화합물을 액정 매질에 첨가하고, LC 셀에 도입한 후, 동일 반응계 내에서 보통 UV 광중합에 의해 인가된 전압 하에 또는 없이 전극들 간에 중합하거나 가교결합한다. 또한, 반응성 메소젠(RM)으로서 공지된 중합성 메소젠성 또는 액정 화합물을 LC 혼합물에 첨가하는 것이 특히 적합하다고 입증되었다. PSA 기술이 지금까지 음의 유전 이방성을 갖는 LC 매질을 위해 주로 사용되었다.
- [0019] 달리 지칭되지 않는 한, 용어 "PSA"는 PS 디스플레이 및 PSA 디스플레이의 대표로서 하기에 사용된다.
- [0020] 그동안, PSA 원리가 다양한 고전적인 LC 디스플레이에 사용되었다. 따라서, 예컨대 PSA-VA, PSA-OCB, PSA-IPS, PSA-FFS 및 PSA-TN 디스플레이가 공지되어 있다. 중합성 화합물의 중합은 바람직하게는, PSA-VA 및 PSA-OCB 디스플레이의 경우 인가된 전압으로, PSA-IPS 디스플레이의 경우 인가된 전압으로 또는 없이 발생한다. 시험 셀에 설명될 수 있듯이, PS(A) 방법은 셀 내에서 '선경사'를 발생시킨다. PSA-OCB 디스플레이의 경우, 예컨대 안정화시키기 위한 밴드 구조가 가능하여 오프-셋(off-set) 전압이 불필요하거나 감소될 수 있다. PSA-VA 디스플레이의 경우, 선경사는 응답 시간에 긍정적 효과를 갖는다. 표준 MVA 또는 PVA 픽셀 및 전극 레이아웃은 PSA-VA 디스플레이를 위해 사용될 수 있다. 또한, 그러나, 예컨대 생산을 상당히 단순화시킴과 동시에 매우 우수한 콘트라스트와 동시에 매우 우수한 광투과도를 나타내는 단지 하나의 구조화된 전극 측면과 돌출되지 않은 부분의 관리가 가능하다.
- [0021] PSA-VA 디스플레이는, 예컨대 문헌[JP 10-036847 A, EP 1 170 626 A2, US 6,861,107, US 7,169,449, US 2004/0191428 A1, US 2006/0066793 A1 및 US 2006/0103804 A1]에 기재되어 있다. PSA-OCB 디스플레이는, 예컨대 문헌[T.-J.-Chen et al., Jpn. J. Appl. Phys. 45, 2006, 2702-2704 및 S. H. Kim, L.-C- Chien, Jpn. J. Appl. Phys. 43, 2004, 7643-7647]에 기재되어 있다. PSA-IPS 디스플레이는, 예컨대 문헌[US 6,177,972 및 Appl. Phys. Lett. (1999), 75(21), 3264]에 기재되어 있다. PSA-TN 디스플레이는, 예컨대 문헌[Optics

Express (2004), 12(7), 1221]에 기재되어 있다. PSA-VA-IPS 디스플레이는, 예컨대 WO 2010/089092 A1에 개시되어 있다.

[0022] 전술된 통상적 액정 디스플레이와 같이, PSA 디스플레이는 능동-매트릭스 또는 수동-매트릭스(PM) 디스플레이로서 작동될 수 있다. 능동-매트릭스 디스플레이의 경우 개별적 픽셀은 집적된 비선형 활성 소자, 예컨대 트랜지스터(예컨대, 박막 트랜지스터 또는 "TFT")에 의해 보통 어드레싱되나, 수동-매트릭스 디스플레이의 경우 개별적 픽셀은 다중적 방법에 의해 보통 어드레싱되고, 상기 두 방법 모두 당 분야에 공지되어 있다.

[0023] 특히 모니터 및 특히 TV 용도에서, 액정 디스플레이의 응답 시간뿐 아니라, 콘트라스트 및 휘도(즉, 또한 투과)의 최적화가 여전히 추구된다. PSA 방법은 본원의 중요한 이점을 제공할 수 있다. 특히 PSA-VA 디스플레이의 경우, 시험 셀에서 측정될 수 있는 선경사와 관련한 응답 시간의 단축은 다른 파라미터에 대한 큰 부작용 없이 성취될 수 있다.

[0024] 종래 기술에서, 예컨대 하기 화학식의 중합성 화합물이 PSA-VA에 사용되었다:



[0025] 이때, P는, 예컨대 US 7,169,449에 기재된 바와 같이 중합성 기, 보통 아크릴레이트 또는 메타크릴레이트기를 지칭한다.

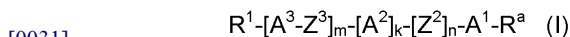
[0027] 폴리이미드 층의 생산, 층의 처리 및 범프 또는 중합체 층의 개선에 대한 노력이 상대적으로 크다. 따라서, 생산 비용을 감소시키는 한편, 이미지 품질(시야각 의존, 콘트라스트, 응답 시간)을 최적화시키는 데 도움되는 기술을 단순화시키는 것이 바람직하다.

[0028] 명세서 WO 2012/038026 A1은, 2개 이상의 고리를 포함하는 메소젠성 염기 구조 상에 위치한 하이드록실 기를 포함하는 자가-정렬 메소젠(비중합성, 통상의 자가-정렬 첨가제)을 기술한다. 상기 문헌에 기술된 구조는 본 발명에 따라 배열된 중합성 기를 포함하지 않는다.

[0029] 하지만, 폴리이미드 층 없는 VA 디스플레이를 수득하기 위한 존재하는 방법들은 여전히 완전하게 만족스럽지 않다.

발명의 내용

[0030] 본 발명은, 저분자량의 비중합성 액정 성분 및 하기 화학식 I의 화합물을 하나 이상 포함하는 중합성 또는 중합된 성분(이때, 상기 중합된 성분은 중합성 성분의 중합에 의해 수득가능하다)을 포함하는 액정 매질에 관한 것이다:



[0032] 상기 식에서,

[0033] A¹, A², A³은, 각각 서로 독립적으로, 방향족, 헤테로방향족, 비환형 또는 헤테로환형 기를 나타내고, 이는 융합된 고리를 또한 포함할 수 있고 기 L 또는 -Sp-P로 또한 단일- 또는 다중치환될 수 있고,

[0034] L은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H, F, Cl, Br, I, -CN, -NO₂, -NCO, -NCS, -OCN, -SCN, -C(=O)N(R⁰)₂, -C(=O)R⁰, 임의적으로 치환된 실릴, 3 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 임의적으로 치환된 아릴 또는 사이클로알킬, 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬, 알콕시, 알킬카본일, 알콕시카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시(이때, 하나 이상의 H 원자는 또한 F 또는 Cl로 대체될 수 있음)를 나타내고,

[0035] P는 중합성 기를 나타내고,

[0036] Sp는 스페이서 기 또는 단일 결합을 나타내고,

[0037] Z²는, 각각의 경우, 서로 독립적으로, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -OCO-, -O-CO-O-, -OCH₂-, -CH₂O-, -SCH₂-,

$-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{S}-$, $-\text{SCF}_2-$, $-(\text{CH}_2)_{n1}-$, $-\text{CF}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$, $-(\text{CF}_2)_{n1}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-(\text{CR}^0\text{R}^{00})_{n1}-$, $-\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})-$, $-\text{CH}_2\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})-$, $-\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})-$ 를 나타내고,

[0038] Z^3 는, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 단일 결합, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{S}-$, $-\text{SCF}_2-$, $-(\text{CH}_2)_{n1}-$, $-\text{CF}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$, $-(\text{CF}_2)_{n1}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-(\text{CR}^0\text{R}^{00})_{n1}-$, $-\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})-$, $-\text{CH}_2\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})-$, $-\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})\text{CH}(-\text{Sp}-\text{P})-$ 를 나타내고,

[0039] $n1$ 은 1, 2, 3 또는 4를 나타내고,

[0040] n 은 0 또는 1을 나타내고,

[0041] m 은 0, 1, 2, 3, 4, 5 또는 6, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

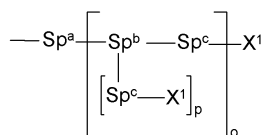
[0042] k 는 0 또는 1을 나타내고,

[0043] R^0 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

[0044] R^{00} 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

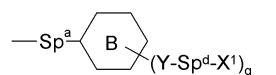
[0045] R^1 은, 서로 독립적으로, H, 할로젠, 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄, 분지쇄 또는 환형 알킬(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{O}-\text{CO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F 또는 Cl로 대체될 수 있음), 또는 기 $-\text{Sp}-\text{P}$ 를 나타내고,

[0046] R^a 는 하기 화학식의 앵커(anchor) 기를 나타내고:



[0047]

[0048] 또는



[0049]

[0050] 이때, p 는 1 또는 2를 나타내고,

[0051] q 는 2 또는 3를 나타내고,

[0052] B는 치환되거나 비치환된 고리 시스템 또는 축합 고리 시스템, 바람직하게는 벤젠, 피리딘, 사이클로헥산, 다이옥산 또는 테트라하이드로피란으로부터 선택되는 고리시스템을 나타내고,

[0053] Y는, 서로 독립적으로, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{C}(\text{O})-$, $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$, $-\text{OC}(\text{O})-$, $-\text{NR}^{11}-$ 또는 단일 결합을 나타내고,

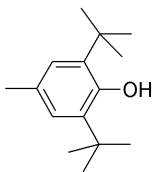
[0054] o 는 0 또는 1을 나타내고,

[0055] X^1 은, 서로 독립적으로, H, 알킬, 플루오로알킬, OH, NH_2 , NHR^{11} , NR^{11}_2 , OR^{11} , $\text{C}(\text{O})\text{OH}$, $-\text{CHO}$ 를 나타내고, 이때, 하나 이상의 기 X^1 은 $-\text{OH}$, $-\text{NH}_2$, NHR^{11} , $\text{C}(\text{O})\text{OH}$ 및 $-\text{CHO}$ 로부터 선택된 라디칼을 나타내고,

[0056] R^{11} 은 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

[0057] Sp^a , Sp^c , Sp^d 는, 각각 서로 독립적으로, 스페이서 기 또는 단일 결합을 나타내고,

- [0058] Sp^b 는 3가 또는 4가 기, 바람직하게는 CH, N 또는 C를 나타내고,
- [0059] 이때, 화학식 I의 화합물은, 존재하는 기 A^1 , A^2 , A^3 , Z^2 및 Z^3 내에 하나 이상의 중합성 기 P를 포함한다.
- [0060] 상기 액정 매질의 중합성 또는 중합된 성분은 임의적으로 추가의 중합성 화합물을 포함한다. 바람직하게는 PSA 원리에 적합한 것들이 사용된다.
- [0061] 본 발명은 또한, 2개의 기관 및 2개 이상의 전극을 갖는 액정 셀을 포함하는 액정 디스플레이에 관한 것이고, 이때, 하나 이상의 기관은 광투과성이고, 하나 이상의 기관은 하나 또는 2개의 전극을 갖고, 본 발명에 따른 액정 매질의 층은 기관 사이에 위치된다. 액정 디스플레이는 바람직하게는 PSA 유형 중 하나이다.
- [0062] 본 발명은 또한, 상기 및 하기에 기술된 화학식 I의 화합물이되, 2개 이상의 고리를 갖는 것을 특징으로 하는 신규의 화합물, 즉, 화학식 I에서 $k = 1$ 인 화합물에 관한 것이다.
- [0063] 본 발명은 또한, 액정 매질의 범위를 정하는 표면에 대해 호메오토픽 정렬을 수행하기 위한 액정 매질용 첨가제로서의 화학식 I의 화합물의 용도에 관한 것이다.
- [0064] 본 발명의 추가의 양태는, 하나 이상의 중합성 자가-정렬 첨가제(화학식 I의 화합물)를 저분자량의 액정 성분, 및 임의적으로 하나 이상의 중합성 화합물 및 임의적으로 추가의 비중합성 자가-정렬 첨가제(예컨대 화학식 I'의 화합물)와 혼합하고/하거나 임의의 바람직한 첨가제를 첨가하는 것을 특징으로 하는, 본 발명에 따른 액정 매질의 제조 방법이다.
- [0065] 본 발명은 또한, 적어도 하나의 기관은 광투과성이고 적어도 하나의 기관은 1 또는 2개의 전극을 갖는 2개의 기관 및 2개 이상의 전극을 갖는 액정 셀을 포함하는 액정 디스플레이의 제조 방법에 관한 것으로서, 하기 단계를 포함한다:
- [0066] - 본 발명에 따른 액정 매질로 상기 셀을 충전하여, 기관 표면에 대한 액정 매질의 호메오토픽(수직) 정렬을 구축하는 단계; 및
- [0067] - 중합성 성분(들)을, 임의적으로 셀에 전압을 인가하거나 전기장의 작용 하에, 하나 이상의 공정 단계로 중합시키는 단계.
- [0068] 액정 매질의 첨가제로서의 상기 자가-정렬 첨가제의 본 발명에 따른 용도는 특정 액정 매질로 제한되지 않는다. 이에 존재하는 액정 매질 또는 비중합성 성분은 양의 또는 음의 유전 이방성을 가질 수 있다. VA 원리 기반의 디스플레이 대부분이 네마틱 액정 매질을 포함하기 때문에 상기 액정 매질은 바람직하게는 네마틱이다.
- [0069] 상기 중합성 자가-정렬 첨가제는 첨가제로서 액정 매질로 도입된다. 이는 기관 표면(예컨대, 유리로부터 제조되거나 또는 ITO 또는 폴리이미드로 코팅된 표면)에 대한 액정의 호메오토픽 정렬을 수행한다. 본 발명과 관련된 조사를 고려하면, 극성 앵커 기가 기관 표면과 상호작용하는 것으로 보인다. 이는 기관 표면 상의 유기 화합물이 액정의 호메오토픽 정렬을 정렬시키고 유도하게 한다. 이 관점에서, 앵커 기는 입체적으로 접근가능하여야 한다. 즉, 페놀계(페닐-치환된) OH 기의 경우에서와 같이 오쏘 위치에서 3급-부틸 기로 둘러싸여있는 구조(예컨대, 2,6-다이-3급-부틸페놀)가 아니다. 즉, 화학식



- [0070] 의 헤드 기를 포함하는 화합물은 바람직하게는 화학식 I 및 하위화학식에 포괄되지 않는다.

- [0071] 본 발명에 따른 액정 디스플레이의 액정 셀은 바람직하게는 정렬 층, 특히 액정 매질의 호메오토픽 정렬에 대한 폴리이미드 층을 갖지 않는다. 이와 관련하여, 액정 매질의 중합된 성분은 정렬 층으로 간주되지 않는다. 그럼에도 액정 셀이 정렬 층 또는 필적할만한 층을 갖는 경우, 본 발명에 따르면 이 층은 호메오토픽 정렬의 원인이 아니다. 예컨대, 폴리이미드 층의 러빙(rubbing)은, 본 발명에 따르면, 기관 표면에 대한 액정 매질의 호메오토픽 정렬을 달성하기 위해 반드시 필요한 것은 아니다. 본 발명에 따른 액정 디스플레이는 바람직하게는 음의 유전 이방성을 갖는 액정 매질 및 대향 기관들 상에 배열된 전극들을 포함하는 VA 디스플레이이다. 달리, 이는, 음의 유전 이방성을 갖는 액정 매질 및 적어도 하나의 기관 상에 배열된 인터디지털 전극을 포함하는 VA-IPS 디스플레이이다.

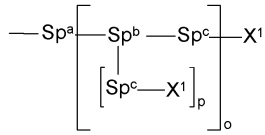
- [0072] 화학식 I의 중합성 자가-정렬 첨가제는 바람직하게는 10 중량% 미만, 특히 바람직하게는 5 중량% 이하 및 매우 특히 3 중량% 이하의 농도로 사용된다. 이는 바람직하게는 0.05 중량% 이상, 바람직하게는 0.2 중량% 이상의 농도로 사용된다. 통상적인 기관 물질을 사용하고 액정 디스플레이의 제조 과정의 통상적인 조건 하에서 통상적인 셀 두께(3 내지 4 μm)의 경우, 일반적으로, 0.1 내지 2.5 중량%의 자가-정렬 첨가제의 사용으로 이미 액정 층의 완전한 호메오트로픽 정렬을 유도한다. 중합가능한 성질로 인해, 중합성 성분이 중합에 의해 다시 부착되기 때문에, 장기간 동안 액정 매질에 영향을 미치지 않고도 더 높은 농도의 자가-정렬 첨가제가 또한 가능하다.
- [0073] 화학식 I의 중합성 자가-정렬 첨가제 외에, 본 발명에 따른 액정 매질은 또한, 중합성이지 않거나 상이한 구조를 갖는 추가의 자가-정렬 첨가제를 포함할 수 있다. 따라서 바람직한 실시양태에서, 상기 액정 매질은 중합성 기 없는 하나 이상의 자가-정렬 첨가제(통상의 자가-정렬 첨가제)를 포함한다. 중합성 및 통상의 자가-정렬 첨가제의 합친 농도는 바람직하게는 상기 기재된 값, 즉, 예컨대, 0.1 내지 2.5 중량%이다. 중합성 기를 가진 및 갖지 않은 자가-정렬 첨가제들의 조합으로써, 액정 매질의 자가정렬이 응력(stress)의 영향에 대해 더욱 안정적이게 된다는 추가의 장점(증대된 가공성)이 달성된다.
- [0074] 추가의 비중합성 자가-정렬 첨가제는 하기 화학식 I'의 구조를 가질 수 있다:
- [0075]
$$R^1-[A^3-Z^3]_m-[A^2]_k-[Z^2]_n-A^1-R^aI'$$
- [0076] 상기 식에서, m, k, n 및 기 R^a 는 상기 화학식 I에 대해 정의된 바와 같고,
- [0077] A^1 , A^2 , A^3 은, 각각 서로 독립적으로, 방향족, 헤테로방향족, 비환형 또는 헤테로환형 기를 나타내고, 이는 또한 융합된 고리를 포함할 수 있고 또한 기 L로 단일- 또는 다중치환될 수 있고,
- [0078] Z^2 는 각각의 경우, 서로 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO-O-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-(CH_2)_{n1}-$, $-CF_2CH_2-$, $-CH_2CF_2-$, $-(CF_2)_{n1}-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, $-CH=CH-COO-$, $-OCO-CH=CH-$, $-(CR^0R^{00})_{n1}-$ 를 나타내고,
- [0079] Z^3 는 각각의 경우, 서로 독립적으로, 단일 결합, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO-O-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-(CH_2)_{n1}-$, $-CF_2CH_2-$, $-CH_2CF_2-$, $-(CF_2)_{n1}-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, $-CH=CH-COO-$, $-OCO-CH=CH-$, $-(CR^0R^{00})_{n1}-$ 를 나타내고,
- [0080] $n1$ 은 1, 2, 3 또는 4를 나타내고,
- [0081] L은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H, F, Cl, Br, I, $-CN$, $-NO_2$, $-NCO$, $-NCS$, $-OCN$, $-SCN$, $-C(=O)N(R^0)_2$, $-C(=O)R^0$, 임의적으로 치환된 실릴, 3 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 임의적으로 치환된 아릴 또는 사이클로알킬, 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬, 알콕시, 알킬카본일, 알콕시카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시(이때, 하나 이상의 H 원자는 또한, F 또는 Cl로 대체될 수 있음)를 나타내고,
- [0082] R^0 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,
- [0083] R^{00} 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,
- [0084] R^1 은, 서로 독립적으로, H, 할로젠, 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄, 분지쇄 또는 환형 알킬을 나타내고, 이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO-O-$, $-O-CO-$, $-O-CO-O-$ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F 또는 Cl로 대체될 수 있다.
- [0085] 화학식 I과 대조적으로, 화학식 I'은 중합성 기 $-Sp-P$ 또는 P를 포함하지 않는다.
- [0086] 자가-정렬 첨가제, 특히 중합성 자가-정렬 첨가제의 바람직하고 예시적인 구조는 하기에 기술되어 있다:

[0087]

앵커 기 R^a 는 정의상, 표면에 대한 결합 원소로 작용하도록 의도되는 1개, 2개 또는 3개의 기 X^1 을 포함한다. 스페이서 기는, 고리를 갖는 메소젠성 기 및 기 X^1 사이에서 유연성있는(flexible) 결합을 형성하도록 의도된다. 따라서, 스페이서 기의 구조는 매우 다양하고, 화학식 I의 가장 일반적인 경우에는 명확히 한정되지 않는다. 당업계 기술자들은 여기서 다수의 가능한 쇠의 변화가 문제가 된다는 것을 인식할 것이다.

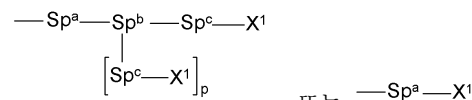
[0088]

상기 및 하기에 정의된 화학식



[0089]

의 앵커 기는, 바람직하게는, 화학식



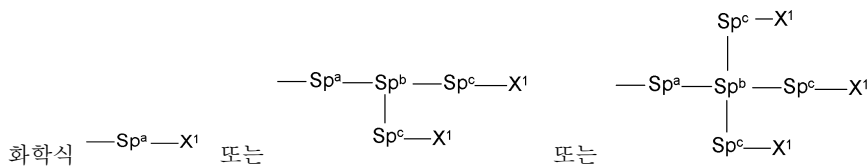
[0090]

[0091]

로부터 선택된 앵커 기를 나타내고(이때, 각각의 경우 독립적으로, 상기 기들은 상기 및 하기에 정의된 바와 같음),

[0092]

특히 바람직하게는



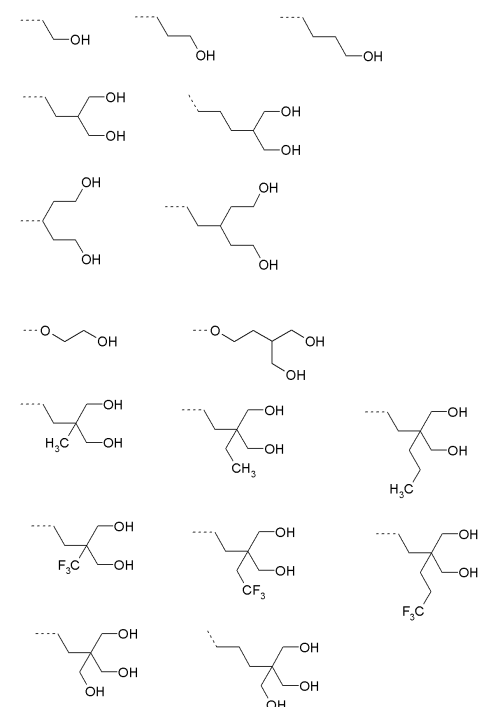
[0093]

[0094]

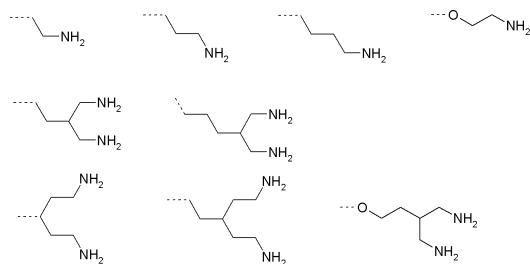
의 기로 정의된 바와 같다(이때, 각각의 경우 독립적으로, 상기 기들은 상기 및 하기에 정의된 바와 같음).

[0095]

화학식 R^a 의 특히 바람직한 앵커 기는 하기 부분화학식들로부터 선택되고, 이때, 기 R^a 는 대시(dashed) 결합을 통해 화학식 I 또는 I'의 기 A^1 에 결합된다:



[0096]



[0097]

[0098]

상기 화학식 및 하위화학식에서 앵커 기 R^a 는 특히 바람직하게는 1개, 2개 또는 3개의 OH 기를 포함한다.

[0099]

용어 "스페이서 기" 또는 "스페이서"(본원에서 일반적으로 " Sp "(또는 $Sp^{a/c/d/1/2}$)로 나타내어짐)는, 당업계 숙련자에게 공지되고 문헌[예컨대, Pure Appl. Chem. 73(5), 888 (2001) 및 C. Tschierske, G. Pelzl, S. Diele, Angew. Chem. (2004), 116, 6340-6368]에 기술되어 있다. 본원에서, 용어 "스페이서 기" 또는 "스페이서"는 결합 기, 예컨대 중합성 기에 메소젠성 기를 연결하는 알킬렌 기를 나타낸다. 반면에, 메소젠성 기는 일반적으로 고리를 포함하는데, 스페이서 기는 일반적으로 고리 시스템이 없고, 즉, 쇠 형태(쇠는 또한 분지형일 수 있음)이다. 용어 "쇠"는, 예컨대, 알킬렌 기에 적용된다. 예컨대 -O- 또는 -COO-에 의한 쇠 상의 쇠 내의 치환은 일반적으로 포함된다. 기능적인 용어, 스페이서(스페이서 기)는 서로의 특정 공간적 유연성을 용이하게 하는 연결된 기능적 구조 부분들 간의 가교이다.

[0100]

기 Sp^b 는 바람직하게는, CH, C(Me), C(CH₂CH₃) 또는 N, 또는 4가 기 C(4가 탄소 원자)로부터 선택되는 화학식의 3가 기를 나타낸다.

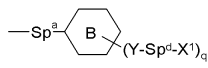
[0101]

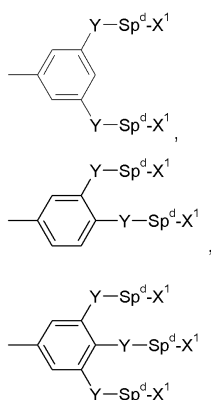
기 Sp^a 는 바람직하게는 화학식 -CH₂-, -CH₂CH₂-, -OCH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂-, -OCH₂CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂CH₂-, -OCH₂CH₂CH₂CH₂-, -CH₂CH₂OCH₂CH₂-, -OCH₂CH₂OCH₂CH₂-로부터 선택되는 기를 나타낸다.

[0102]

기 Sp^c 또는 Sp^d 는 바람직하게는 화학식 -CH₂-, -CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂CH₂-, -CH₂CH₂OCH₂CH₂-로부터 선택되는 기를 나타낸다.

[0103]

상기 정의된 화학식 의 앵커 기는, 바람직하게는 하기를 나타낸다:



[0104]

[0105]

[0106]

상기 식에서, Y, Sp^d 및 X^1 은 화학식 I에 대해 정의된 바와 같다.

[0107]

고리 기 A^1 , A^2 , A^3 은, 각각 독립적으로, 바람직하게는 1,4-페닐렌, 나프탈렌-1,4-다이일 또는 나프탈렌-2,6-다이일(이때, 이러한 기들 내의 하나 이상의 CH 기는 또한 N으로 대체될 수 있음), 사이클로헥산-1,4-다이일(이때, 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 또한, O 및/또는 S로 대체될 수 있음), 3,3'-바이사이클로부틸리렌, 1,4-사이클로헥센일렌, 바이사이클로-[1.1.1]-펜탄-1,3-다이일, 바이사이클로[2.2.2]옥탄-

1,4-다이일, 스피로[3.3]헵탄-2,6-다이일, 피페리딘-1,4-다이일, 데카하이드로나프탈렌-2,6-다이일, 1,2,3,4-테트라하이드로-나프탈렌-2,6-다이일, 인단-2,5-다이일 또는 옥타하이드로-4,7-메타노인단-2,5-다이일, 퍼하이드로사이클로펜타[a]펜안트렌-3,17-다이일(특히, 고난-3,17-다이일)을 나타내고, 이러한 모든 기는 비치환되거나 기 L 또는 -Sp-P로 일- 또는 다중치환될 수 있다.

[0108] 바람직하게는, 기 A^1 , A^2 및 A^3 중 하나 이상은, 존재하는 경우, 하나 이상의 기 -Sp-P로 치환된다.

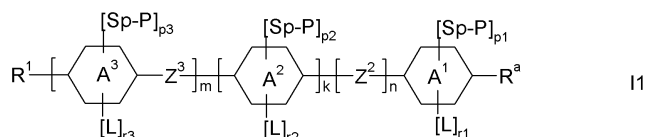
[0109] 특히 바람직하게는, 기 A^1 , A^2 , A^3 은, 각각 독립적으로, 하기로부터 선택되는 군을 나타낸다:

[0110] a) 1,4-페닐렌 및 1,3-페닐렌(이때, 하나 이상의 H 원자는 또한, L 또는 -Sp-P로 대체될 수 있음)으로 이루어진 군,

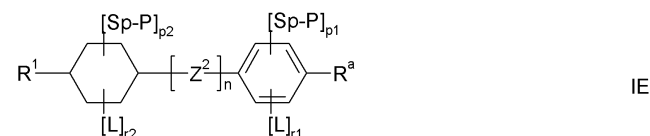
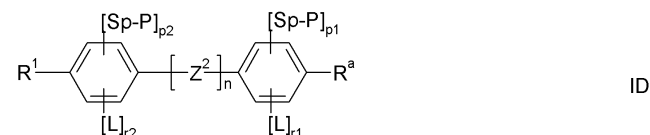
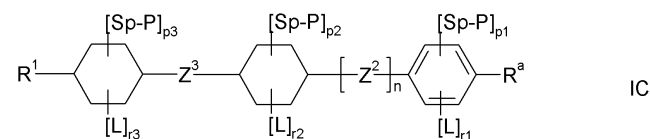
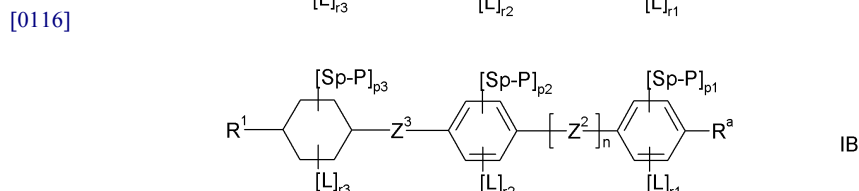
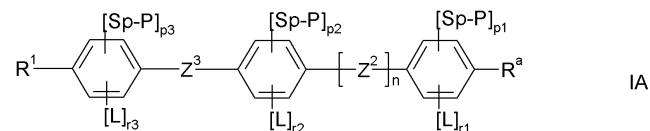
[0111] b) 트랜스-1,4-사이클로헥실렌, 1,4-사이클로헥센일렌 및 4,4'-바이사이클로헥실렌(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, -O- 및/또는 -S-로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F, L, -Sp-P로 대체될 수 있음)으로 이루어진 군.

[0112] 기 A^1 및 A^2 는 특히 바람직하게는 상기 하위-군 a)로부터의 기를 나타낸다. A^1 및 A^2 는, 독립적으로 매우 특히 바람직하게는, 1,4-페닐렌 또는 사이클로헥산-1,4-다이일을 나타내고, 이는 기 L 또는 -Sp-P로 일- 또는 다중치환될 수 있다.

[0113] 화학식 I의 화합물은 바람직하게는 하나 이상의 하기 화학식 I1의 화합물을 포괄하고:



[0114] ,
[0115] 더욱 바람직하게는 하기 화학식 IA, IB, IC 또는 ID를 포괄한다:



[0117]
[0118] 상기 식에서, 각각의 경우 독립적으로, R^1 , R^a , A^1 , A^2 , A^3 , Z^2 , Z^3 , L, Sp, P, m, k 및 n은 화학식 I에 대해 정

의된 바와 같고,

[0119] p1, p2, p3은 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

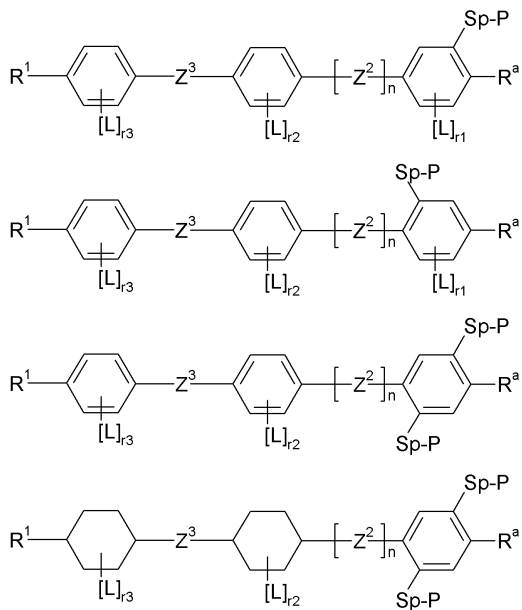
[0120] r1, r2, r3은 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

[0121] 이때, 화학식 I의 화합물은, 존재하는 기 A^1 , A^2 , A^3 , Z^2 및 Z^3 에 전체(즉, 총) 하나 이상의 중합성 기 P를 포함한다.

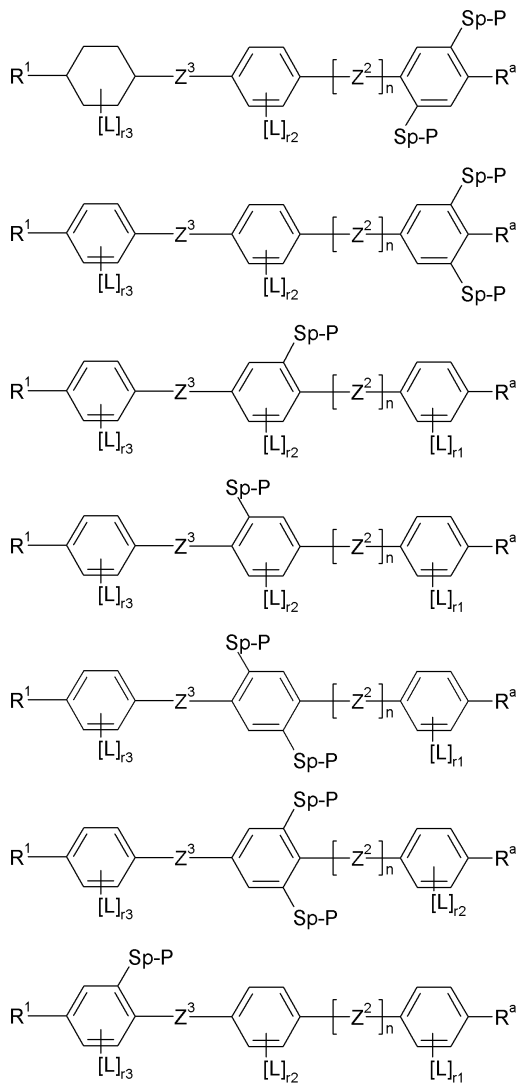
[0122] 바람직하게는, 화학식 I1 및 IA, IB 및 IC에서 $p1 + p2 + p3 > 0$ 이고, 상응하게 화학식 ID 및 IE에서 $p1 + p2 > 0$ 이다. 즉, 기 A^1 , A^2 , A^3 또는 A^1 , A^2 또는 IA 내지 IE 내의 상응하는 고리 내에 하나 이상의 중합성 기 P가 존재한다. 또한, 본 발명의 특정 실시양태에서, 화학식 I1 및 IA, IB 및 IC에서 $r1 + r2 + r3 > 0$ 이고 상응하게 화학식 ID 및 IE에서 $r1 + r2 > 0$ 이고 L은 H를 나타내지 않는 것, 즉, 하나 이상의 측면 치환체 L이 기 A^1 , A^2 , A^3 또는 A^1 , A^2 내에 존재하는 것이 바람직하다. 달리, $p1 + p2 + p3 > 1$ 또는 $p1 + p2 > 1$, 즉, 2개 이상의 측면 중합성 기가 존재하는 것이 바람직하다. 이러한 하나의 기 L 또는 2개의 측면 P 기를 포함하는 본 발명에 따른 화합물은, 특히, 개선된 용해도를 갖는다.

[0123] 상기 및 하기의 화학식 I 및 I' 및 바람직한 하위화학식에서, 지수 n은 바람직하게는, 각각의 경우 독립적으로, 0을 나타낸다.

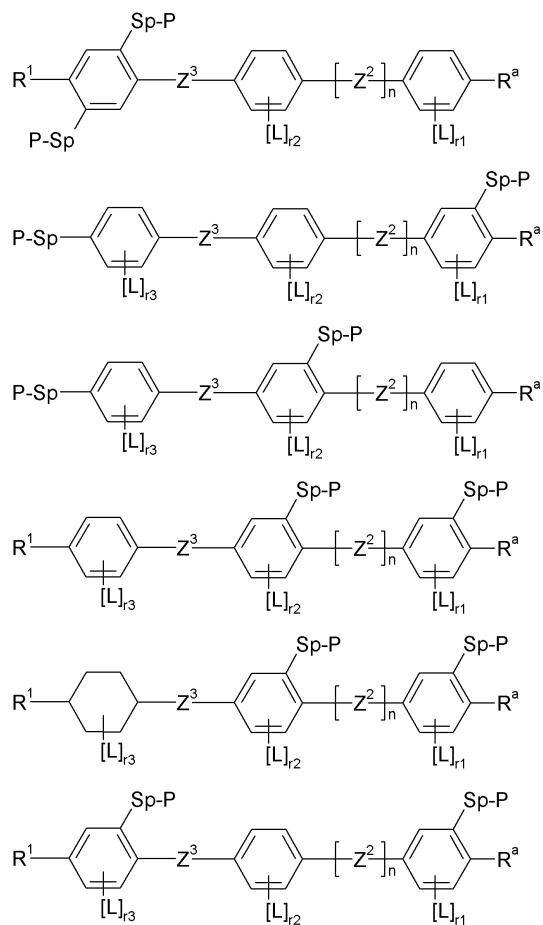
[0124] 화학식 I의 바람직한 화합물은 하기 화학식으로 표시되고 예시된다:



[0125]



[0126]



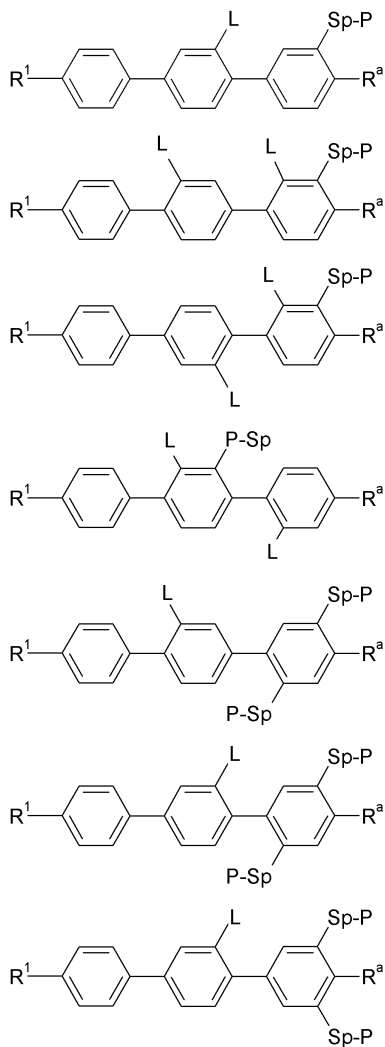
[0127]

[0128]

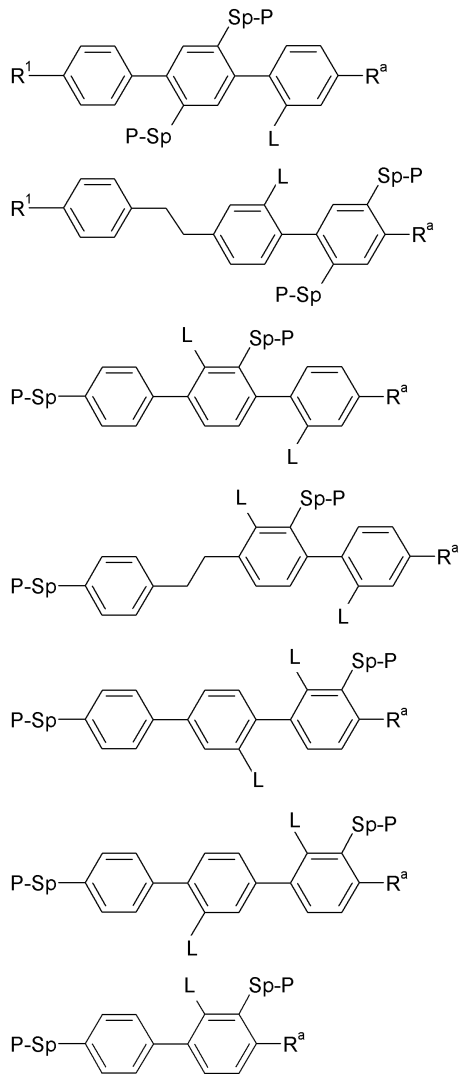
상기 식에서, L, Sp, P, n 및 R^a 는 독립적으로 화학식 I에 대해 정의된 바와 같고, r_1 , r_2 , r_3 은 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고, Z^2/Z^3 은 독립적으로 상기 정의된 바와 같고, 이때, Z^3 은 바람직하게는 단일 결합 또는 $-CH_2CH_2-$ 및 매우 특히 단일 결합을 나타낸다.

[0129]

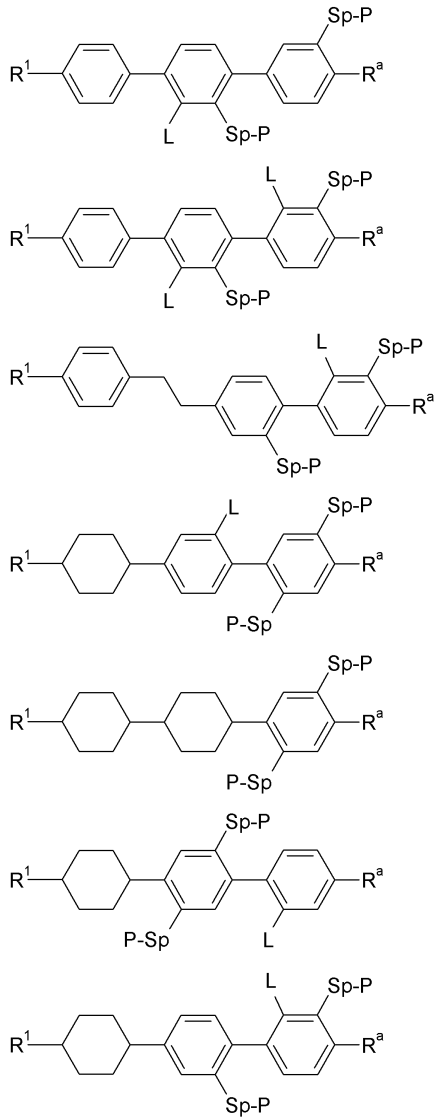
화학식 I의 매우 특히 바람직한 화합물은 하기 화학식으로부터 예시된다:



[0130]



[0131]



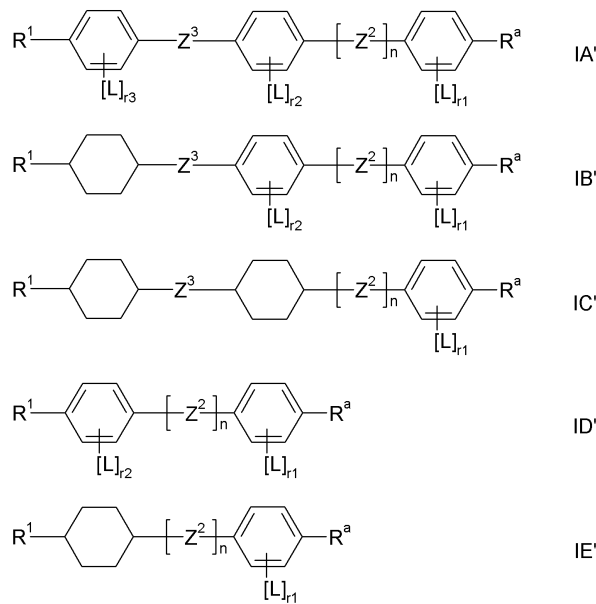
[0132]

[0133]

상기 식에서, R¹, Sp, P, L 및 R^a는 독립적으로 화학식 I에 대해 정의된 바와 같고, L은 바람직하게는 H가 아닌 기이다.

[0134]

화학식 I'의 화합물(통상적인 자가-정렬 첨가제)은 바람직하게는 화학식 IA', IB', IC', ID' 또는 IE'의 화합물을 포괄한다:



상기 식에서, R^1 , R^a , Z^2 , Z^3 , L 및 n은 독립적으로 상기 화학식 IA 내지 IE에 대해 정의된 바와 같고,

r_1 , r_2 , r_3 은 독립적으로, 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2를 나타낸다.

통상의 자가-정렬 첨가제의 제조는, 예컨대, 명세서 WO 2012/038026에 기술되어 있다.

용어 "아릴"은 방향족 탄소 기 또는 이로부터 유도된 기를 나타낸다. 용어 "헤테로아릴"은 하나 이상의 헤테로 원자를 갖는 상기 정의된 "아릴"을 나타낸다.

아릴 및 헤테로아릴 기는 일환형 또는 다환형일 수 있다. 즉, 이들은 하나의 고리(예컨대, 페닐) 또는 2개 이상의 융합된 고리를 포함할 수 있다. 여기서 상기 고리 중 하나 이상은 방향족 구조를 갖는다. 헤테로아릴 기는 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, N, S 및 Se로부터 선택되는 것을 포함한다.

특히 바람직한 것은 6 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 일-, 이- 또는 삼환형 아릴 기 및 2 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 일-, 이- 또는 삼환형 헤테로아릴 기이고, 이때, 이들은 임의적으로 융합된 고리를 포함한다. 바람직한 것은 또한, 5-, 6- 또는 7-원 아릴 및 헤테로아릴 기이고, 이때, 하나 이상의 CH 기는 또한, 0 원자 및/또는 S 원자가 직접 서로 연결되지 않는 방식으로, N, S 또는 O로 대체될 수 있다.

바람직한 아릴 기는, 예컨대, 페닐, 나프틸, 안트라센, 펜안트렌, 피렌, 다이하이드로피렌, 크리센, 페릴렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌, 플루오렌, 인덴, 인데노플루오렌, 스피로바이플루오렌 등이다.

바람직한 헤테로아릴 기는, 예컨대, 5-원 고리, 예컨대 피롤, 피라졸, 이미다졸, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 테트라졸, 퓨란, 티오펜, 셀레노펜, 옥사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 6-원 고리, 예컨대 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 또는 축합 기, 예컨대 인돌, 이소인돌, 인돌리진, 인다졸, 벤즈이미다졸, 벤조트리아졸, 퓨린, 나프티미다졸, 펜안트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진-이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 벤즈옥사졸, 나프톡사졸, 안트록사졸, 펜안트록사졸, 이속사졸, 벤조티아졸, 벤조퓨란, 이소벤조퓨란, 다이벤조퓨란, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 프테리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 벤조이소퀴놀린, 아크리딘, 페노티아진, 페녹사진, 벤조-피리다진, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 펜아진, 나프티리딘, 아자카바졸, 벤조카볼린, 펜안티리딘, 펜안트롤린, 티에노[2,3b]-티오펜, 티에노[3,2b]티오펜, 다이티에노 티오펜, 이소벤조티오펜, 다이벤조-티오펜, 벤조피아디아조 티오펜, 쿠마린 또는 이들 기의 조합이다.

상기 (비-방향족) 지환형 및 헤테로환형 기는, 포화된 고리(즉, 오로지 단일 결합만을 포함하는 것), 및 또한 부분 불포화된 고리(즉, 또한 다중 결합을 포함할 수 있는 것들) 둘 다를 포함한다. 헤테로환형 고리는, 바람직하게는 Si, O, N, S 및 Se로부터 선택되는, 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0145] 상기 (비-방향족) 지환형 및 헤테로 환형 기는 일환형, 즉, 단 하나의 고리를 포함하는 것(예컨대, 사이클로헥산), 또는 다환형, 즉, 다수의 고리를 포함하는 것(예컨대, 데카하이드로나프탈렌 또는 바이사이클로옥탄)일 수 있다. 특히 바람직한 것은 포화 기이다. 바람직한 것은 또한, 3 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 일-, 이- 또는 삼환형 기이다. 바람직한 것은 또한, 5-, 6-, 7- 또는 8-원 카보사이클릭 기이고, 이때, 하나 이상의 탄소 원자는 Si로 대체될 수 있고/있거나 하나 이상의 CH 기는 N으로 대체될 수 있고/있거나 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 -O- 및/또는 -S-로 대체될 수 있다.

[0146] 바람직한 지환형 및 헤테로환형 기는, 예컨대, 5-원 기, 예컨대 사이클로펜탄, 테트라하이드로퓨란, 테트라하이드로티오퍼란, 피롤리딘, 6-원 기, 예컨대 사이클로헥산, 사이클로헥센, 테트라하이드로-피란, 테트라하이드로티오피란, 1,3-다이옥산, 1,3-다이티안, 피페리딘, 7-원 기, 예컨대 사이클로헵탄, 및 융합된 기, 예컨대 테트라하이드로나프탈렌, 데카하이드로나프탈렌, 인단, 바이사이클로[1.1.1]-펜탄-1,3-다이일, 바이사이클로-[2.2.2]옥탄-1,4-다이일, 스피로[3.3]헵탄-2,6-다이일, 옥타하이드로-4,7-메타노-인단-2,5-다이일이다.

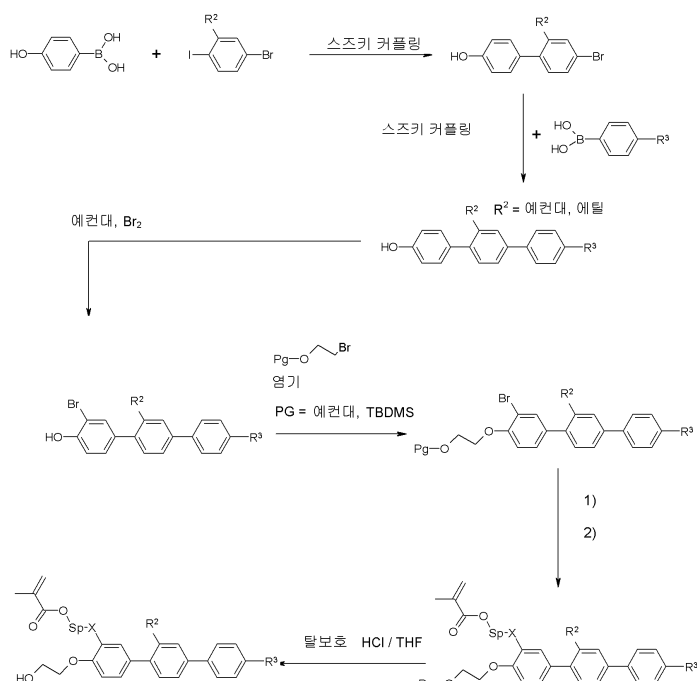
[0147] 본 발명과 관련하여, 용어 "알킬"은, 1 내지 15개(즉, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14 또는 15개)의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄, 포화 또는 불포화, 바람직하게는 포화, 지방족 탄화수소 라디칼을 나타낸다.

[0148] 용어 "환형 알킬"은 하나 이상의 카보사이클릭 부분을 포함하는 알킬 기, 즉, 예컨대, 또한, 사이클로알킬알킬, 알킬사이클로알킬 및 알킬사이클로알킬알킬을 포괄한다. 상기 카보사이클릭 기는, 예컨대, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸 등을 포함한다.

[0149] "할로겐"은, 본 발명과 관련하여, 불소, 염소, 브롬 또는 요오드, 바람직하게는 불소 또는 염소를 나타낸다.

[0150] 상기 화학식 I의 바람직한 화합물은 기본적으로 하기 예시적인 합성 경로로 제조될 수 있다(반응식 1 내지 4):

[0151] **반응식 1.** 일반적인 합성 반응식 I.



[0152] 반응 조건:

[0154] 1) 예컨대, 하기를 통한 작용성화:

[0155] - 또는 과 함께 개환을 위한 n-BuLi 및 BF₃^{*} OEt₂,

[0156] - 와의 소노가시라(Sonogashira) 반응 및 이어서 수소화, 또는

[0166]

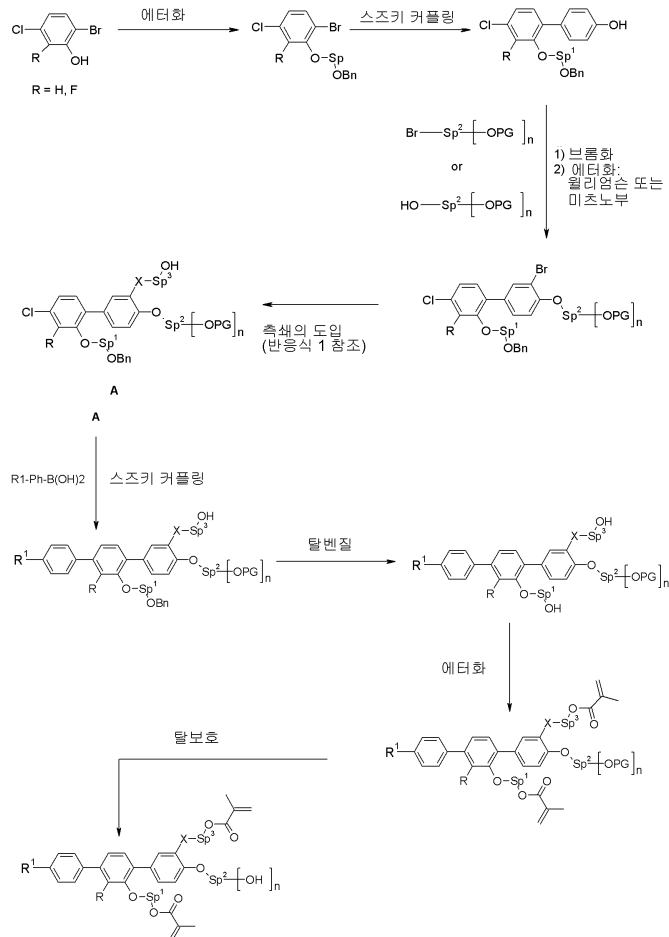
반응 조건: 반응식 1에서와 같은 1), 2).

[0167]

정의: $X = CH_2$, O 또는 단일 결합, $Pg^2 =$ 예컨대 벤질, $Sp =$ 예컨대: O 내지 3개의 탄소 원자를 갖는 스페이서.

[0168]

반응식 4. 일반적인 합성 반응식 IV



[0169]

[0170]

정의: $X = CH_2$, O 또는 단일 결합, $Sp^{1,2,3} =$ 예컨대 O 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 스페이서, $n =$ 예컨대 1 내지 3. PG: OH에 대한 보호기, 예컨대 TBDMS.

[0171]

화학식 I의 화합물 외에, 본 발명의 액정 매질의 중합성 성분은 바람직하게는 추가의 중합성 또는 (부분) 중합된 화합물을 포함한다. 이들은 바람직하게는 앵커 기가 없는 통상의 중합성 화합물, 바람직하게는 메소젠성 화합물, 특히 PSA 기술에 적합한 것들이다. 이러한 목적에 바람직한 중합성 화합물은 화학식 M 및 이의 하위화학식으로 하기 기재되는 구조이다. 이로부터 형성되는 중합체는 액정 매질의 정렬을 안정화하고, 임의적으로 부동태화 층(passivation layer)을 형성하고 임의적으로 선경사각(pre-tilt)을 발생시킬 수 있다.

[0172]

따라서 본 발명에 따른 액정 매질은 바람직하게는 0 초과 내지 5 중량% 미만, 특히 바람직하게는 0.05 내지 1 중량% 및 매우 특히 바람직하게는 0.2 내지 1 중량%의, 앵커 기 R^a 가 없는 중합성 화합물, 특히 하기 정의되는 화학식 M 및 이의 바람직한 하위화학식의 화합물을 포함한다.

[0173]

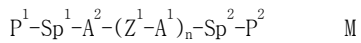
중합성 성분들의 중합은 상이한 중합 조건 하에서 함께 또는 부분-단계로 수행된다. 상기 중합은 바람직하게는 UV 광의 작용 하에서 수행된다. 일반적으로, 상기 중합은 중합 개시제 및 UV 광의 도움으로 개시된다. 바람직한 아크릴레이트의 경우, 사실상 완전한 중합이 이러한 방식으로 달성된다. 중합하는 동안, 임의적으로, 셀의 전극에 전압이 적용되거나, 액정 매질의 정렬에 추가로 영향을 줄 수 있도록, 다른 전기장이 적용될 수 있다.

[0174]

특히 바람직한 것은, 화학식 I의 화합물 외에 추가의 중합성 또는 (부분) 중합된 화합물(앵커 기 부재) 및 중합

성이 아닌 추가의 자가-정렬 첨가제를 포함하는 본 발명에 따른 액정 매질이다. 이들 추가의 비중합성 자가-정렬 첨가제는 바람직하게는 상기 기술된 바와 같다(화학식 I', IA', IB', IC', ID', IE' 참조).

임의적으로 존재하는, 액정 매질의 중합성 성분의 추가의 단량체는, 바람직하게는 하기 화학식 M으로 기술된다:



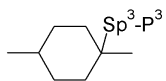
상기 식에서,

P^1 , P^2 는, 각각 서로 독립적으로, 중합성 기를 나타내고,

Sp^1 , Sp^2 는, 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, 스페이서 기 또는 단일 결합을 나타내고,

A^1 , A^2 는, 각각 서로 독립적으로, 하기 군으로부터 선택되는 라디칼을 나타내고:

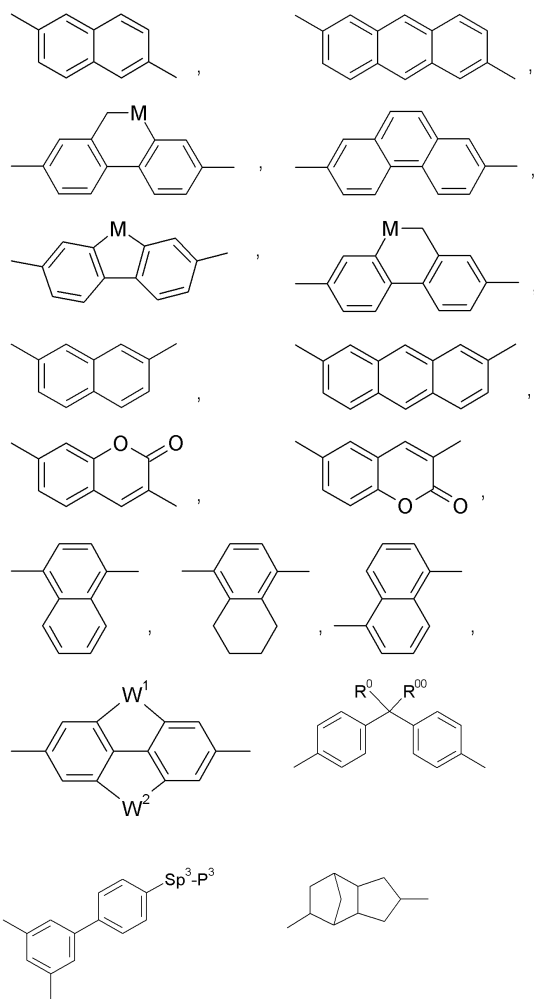
a) 트랜스-1,4-사이클로헥실렌, 1,4-사이클로헥센일렌 및 4,4'-바이사이클로헥실렌(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, -O- 및/또는 -S-로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, 기 L로 대체될 수 있음)으로 이루어진 군, 또는 하기 화학식의 라디칼:



b) 1,4-페닐렌 및 1,3-페닐렌(이때, 하나 또는 2개의 CH 기는 또한, N으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, 기 L 또는 $-Sp^3-P^3$ 로 대체될 수 있음)으로 이루어진 군,

c) 테트라하이드로피란-2,5-다이일, 1,3-다이옥산-2,5-다이일, 테트라하이드로퓨란-2,5-다이일, 사이클로부탄-1,3-다이일, 피페리딘-1,4-다이일, 티오펜-2,5-다이일 및 셀레노펜-2,5-다이일(이들 각각은 또한, 기 L로 단일-또는 다중치환될 수 있음)로 이루어진 군,

d) 5 내지 20개의 환형 탄소 원자(이들 중 하나 이상은, 또한, 헤테로원자로 대체될 수 있음)를 갖는, 포화, 부분 불포화 또는 완전 불포화되고 임의적으로 치환된, 다환형 라디칼로 이루어진 군, 바람직하게는 바이사이클로-[1.1.1]-펜탄-1,3-다이일, 바이사이클로[2.2.2]옥탄-1,4-다이일, 스피로-[3.3]-헵탄-2,6-다이일,



[0186]

[0187]

[0188] (이때, 이들 라디칼에서 하나 이상의 H 원자는 또한, 기 L 또는 $-Sp^3-P$ 로 대체될 수 있고/있거나 하나 이상의 이중 결합은 단일 결합으로 대체될 수 있고/있거나 하나 이상의 CH 기는 N으로 대체될 수 있음)로 이루어진 군,

[0189] P^3 는 중합성 기를 나타내고,

[0190] Sp^3 는 스페이서 기를 나타내고,

[0191] n은 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 1 또는 2를 나타내고,

[0192] Z^1 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, $-CO-O-$, $-O-CO-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, 또는 $-(CH_2)_n-$ (이때 n은 2, 3 또는 4임), $-O-$, $-CO-$, $-C(R^cR^d)-$, $-CH_2CF_2-$, $-CF_2CF_2-$ 또는 단일 결합을 나타내고,

[0193] L은, 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, F, Cl, CN, SCN, SF_5 , 또는 직쇄 또는 분지쇄의, 각각의 경우 임의적으로 플루오르화되는, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 알콕시, 알킬카본일, 알콕시-카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시를 나타내고,

[0194] R^0 , R^{00} 는, 각각 서로 독립적으로, H, F 또는 1 내지 12개의 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 나타내고, 이때, 하나 이상의 H 원자는 또한 F로 대체될 수 있고,

[0195] M은 $-O-$, $-S-$, $-CH_2-$, $-CHY^1-$ 또는 $-CY^1Y^2-$ 를 나타내고,

[0196] Y^1 및 Y^2 는, 각각 서로 독립적으로, 상기 R^0 에 대해 기재된 의미 중 하나를 갖거나 또는 Cl 또는 CN을 나타내고,

바람직하게는 H, F, Cl, CN, OCF₃ 또는 CF₃를 나타내고,

[0197] W¹ 및 W²는, 각각 서로 독립적으로, -CH₂CH₂-, -CH=CH-, -CH₂-O-, -O-CH₂-, -C(R^cR^d)- 또는 -O-를 나타내고,

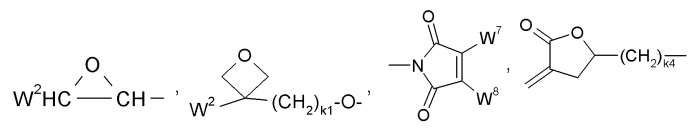
[0198] R^c 및 R^d는, 각각 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 6개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 바람직하게는 H, 메틸 또는 에틸을 나타내고,

[0199] 이때, 기 P¹-Sp¹-, -Sp²-P² 및 -Sp³-P³ 중 하나 이상은 라디칼 R^{aa}를 나타내되, 단 존재하는 P¹-Sp¹-, -Sp²-P² 및 -Sp³-P³ 중 하나 이상은 R^{aa}를 나타내지 않고,

[0200] R^{aa}는 H, F, Cl, CN 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬(이때, 하나 이상의 비인접 CH₂기는 또한, 각각 서로 독립적으로, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, C(R⁰)=C(R⁰⁰)-, -C≡C-, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F, Cl, CN 또는 P¹-Sp¹-로 대체될 수 있음), 특히 바람직하게는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄, 임의적으로 일- 또는 다중플루오르화된 알킬, 알콕시, 알케닐, 알킨일, 알킬카본일, 알콕시카본일 또는 알킬카본일옥시(이때, 상기 알켄일 및 알킨일 라디칼은 2개 이상의 탄소 원자를 포함하고, 분지형 라디칼은 3개 이상의 탄소 원자를 포함함)를 나타내고, 이때, 기 -OH, -NH₂, -SH, -NHR, -C(O)OH 및 -CHO는 R^{aa}에 존재하지 않는다.

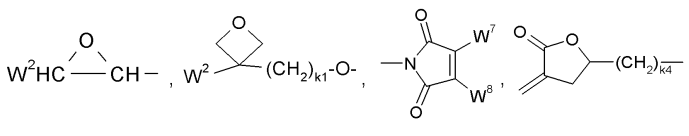
[0201] 상기 및 하기의 화학식에서 상기 중합성 기 P, P¹, P² 또는 P³는, 중합 반응, 예컨대, 자유 라디칼 또는 이온 쇄 중합, 다중부가 또는 중축합, 또는 중합체-유사 반응, 예컨대 주요 중합체 쇄 상으로의 부가 또는 축합 반응에 적합한 기이다. 특히 바람직한 것은 쇄 중합을 위한 기로, 특히 C=C 이중 결합 또는 -C≡C- 삼중 결합을 포함하는 것들, 및 개환과 함께 수행되는 중합에 적합한 기, 예컨대, 옥세탄 또는 에폭사이드 기이다.

[0202] 바람직한 기 P/P¹/P²/P³은 CH₂=CW¹-CO-O-, CH₂=CW¹-CO-,



, CH₂=CW²-(O)_{k3}-, CW¹=CH-CO-(O)_{k3}-, CH₃-CH=CH-O-, (CH₂=CH)₂CH-OCO-, (CH₂=CH-CH₂)₂CH-OCO-, (CH₂=CH)₂CH-O-, (CH₂=CH-CH₂)₂N-, (CH₂=CH-CH₂)₂N-CO-, CH₂=CH-(COO)_{k1}-Phe-(O)_{k2}-, CH₂=CH-(CO)_{k1}-Phe-(O)_{k2}-, Phe-CH=CH-, HOOC- 및 W⁴W⁵W⁶Si-로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때, W¹은 H, F, Cl, CN, CF₃, 페닐 또는 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 특히 H, F, Cl 또는 CH₃를 나타내고, W² 및 W³은, 각각 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 특히 H, 메틸, 에틸 또는 n-프로필을 나타내고, W⁴, W⁵ 및 W⁶은, 각각 서로 독립적으로, Cl, 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 옥사알킬 또는 옥사카본일알킬을 나타내고, W⁷ 및 W⁸은, 각각 서로 독립적으로, H, Cl 또는 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고, Phe는, 상기 정의된 라디칼 L(P-Sp- 제외) 하나 이상으로 임의적으로 치환된 1,4-페닐렌을 나타내고, k₁, k₂ 및 k₃은, 각각 서로 독립적으로, 0 또는 1을 나타내고, k₃은 바람직하게는 1을 나타내고, k₄는 1 내지 10의 정수를 나타낸다.

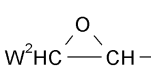
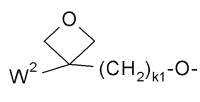
[0203] 특히 바람직한 기 P/P¹/P²/P³은 CH₂=CW¹-CO-O-, CH₂=CW¹-CO-,



, CH₂=CW²-O-, CW¹=CH-CO-(O)_{k3}-, (CH₂=CH)₂CH-OCO-, (CH₂=CH-CH₂)₂CH-OCO-, (CH₂=CH)₂CH-O-, (CH₂=CH-CH₂)₂N-, (CH₂=CH-CH₂)₂N-CO-, CH₂=CW¹-CO-NH-

, $\text{CH}_2=\text{CH}-(\text{COO})_{k1}-\text{Phe}-(\text{O})_{k2}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-(\text{CO})_{k1}-\text{Phe}-(\text{O})_{k2}-$, $\text{Phe}-\text{CH}=\text{CH}-$ 및 $\text{W}^4\text{W}^5\text{W}^6\text{Si}-$ 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때 W^1 은 H, F, Cl, CN, CF_3 , 페닐 또는 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 특히 H, F, Cl 또는 CH_3 을 나타내고, W^2 및 W^3 은, 각각 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 특히 H, 메틸, 에틸 또는 n-프로필을 나타내고, W^4 , W^5 및 W^6 은, 각각 서로 독립적으로, Cl, 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 옥사알킬 또는 옥사카본일-알킬을 나타내고, W^7 및 W^8 은, 각각 서로 독립적으로, H, Cl 또는 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고, Phe는 1,4-페닐렌을 나타내고, k_1 , k_2 및 k_3 은, 각각 서로 독립적으로, 0 또는 1을 나타내고, k_3 은 바람직하게는 1을 나타내고, k_4 는 1 내지 10의 정수를 나타낸다.

[0204] 매우 특히 바람직한 기 $\text{P}/\text{P}^1/\text{P}^2/\text{P}^3$ 은 $\text{CH}_2=\text{CW}^1-\text{CO}-\text{O}-$, 특히 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CO}-\text{O}-$, $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{CO}-\text{O}-$ 및 $\text{CH}_2=\text{CF}-\text{CO}-\text{O}-$, 또

한 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{O}-$, $(\text{CH}_2=\text{CH})_2\text{CH}-\text{O}-\text{CO}-$, $(\text{CH}_2=\text{CH})_2\text{CH}-\text{O}-$,  및 로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0205] 따라서 매우 특히 바람직한 기 $\text{P}/\text{P}^1/\text{P}^2/\text{P}^3$ 은 아크릴레이트, 메타크릴레이트, 플루오로아크릴레이트, 또한, 비닐옥시, 클로로아크릴레이트, 옥세탄 및 에폭사이드 기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이들 중 바람직하게는 아크릴레이트 또는 메타크릴레이트 기이다.

[0206] 바람직한 스페이서 기 Sp , Sp^1 또는 Sp^2 는 단일 결합이거나 화학식 $\text{Sp}''-\text{X}''$ 으로부터 선택되어, 라디칼 $\text{P}^{1/2}-\text{Sp}^{1/2}-$ 은 화학식 $\text{P}^{1/2}-\text{Sp}''-\text{X}''$ -를 따르고, 이때,

[0207] Sp'' 는 1 내지 20, 바람직하게는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌을 나타내고, 이는 F, Cl, Br, I 또는 CN으로 임의적으로 일- 또는 다중치환되고, 이때 하나 이상의 비인접 CH_2 기는, 각각 서로 독립적으로, 0 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{Si}(\text{R}^{00}\text{R}^{000})-$, $-\text{CO}-$, $-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{O}-\text{CO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{S}-\text{CO}-$, $-\text{CO}-\text{S}-$, $-\text{N}(\text{R}^{00})-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{N}(\text{R}^{00})-$, $-\text{N}(\text{R}^{00})-\text{CO}-\text{N}(\text{R}^{00})-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 대체될 수 있고,

[0208] X'' 는 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{O}-\text{CO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{CO}-\text{N}(\text{R}^{00})-$, $-\text{N}(\text{R}^{00})-\text{CO}-$, $-\text{N}(\text{R}^{00})-\text{CO}-\text{N}(\text{R}^{00})-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{S}-$, $-\text{SCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CH}=\text{N}-$, $-\text{N}=\text{CH}-$, $-\text{N}=\text{N}-$, $-\text{CH}=\text{CR}^0-$, $-\text{CY}^2=\text{CY}^3-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{CH}=\text{CH}-$ 또는 단일 결합을 나타내고,

[0209] R^{00} 는, 각각의 경우 독립적으로, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

[0210] R^{000} 는, 각각의 경우 독립적으로, H 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

[0211] Y^2 및 Y^3 은, 각각 서로 독립적으로, H, F, Cl 또는 CN을 나타낸다.

[0212] X'' 는 바람직하게는 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{O}-\text{COO}-$ 또는 단일 결합을 나타낸다.

[0213] 전형적인 스페이서 기 Sp'' 는 예컨대, 단일 결합, $-(\text{CH}_2)_{p1}-$, $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_{q1}-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{S}-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, 또는 $-(\text{SiR}^{00}\text{R}^{000}-\text{O})_{p1}-$ 을 나타내고, 이때, $p1$ 은 1 내지 12의 정수이고, $q1$ 은 1 내지 3의 정수이고, R^{00} 및 R^{000} 는 상기 기재된 의미를 갖는다.

[0214] 특히 바람직한 기 $-\text{Sp}''-\text{X}''$ 는 $-(\text{CH}_2)_{p1}-$, $-(\text{CH}_2)_{p1}-\text{O}-$, $-(\text{CH}_2)_{p1}-\text{O}-\text{CO}-$, $-(\text{CH}_2)_{p1}-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$ 를 나타내고, 이때, $p1$ 및 $q1$ 은 상기 기재된 의미를 갖는다.

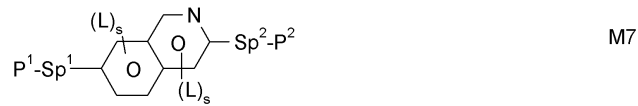
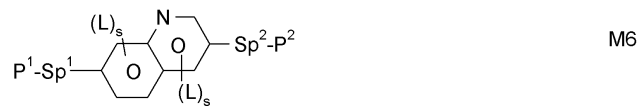
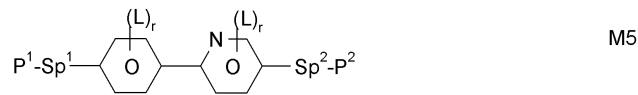
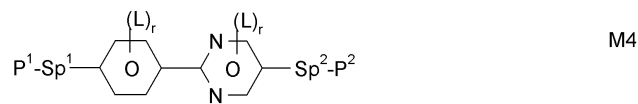
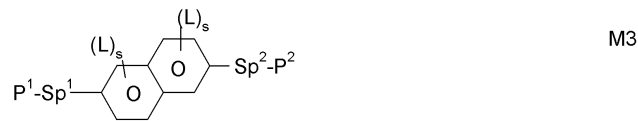
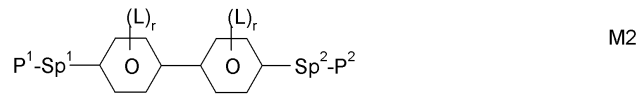
[0215] 특히 바람직한 기 Sp'' 는 예컨대, 각각의 경우 직쇄 에틸렌, 프로필렌, 부틸렌, 펜틸렌, 헥실렌, 헵틸렌, 옥틸렌, 노닐렌, 데실렌, 운데실렌, 도데실렌, 옥타데실렌, 에틸렌옥시에틸렌, 메틸렌옥시부틸렌, 에틸렌티오에틸렌, 에틸렌-N-메틸이미노에틸렌, 1-메틸알킬렌, 에텐일렌, 프로펜일렌 및 부텐일렌을 나타낸다.

[0216]

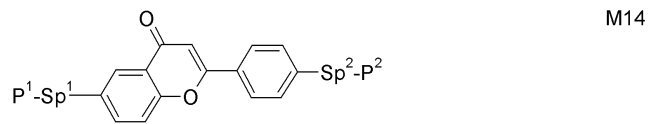
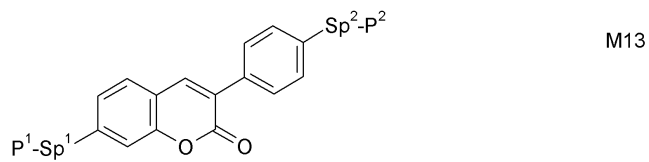
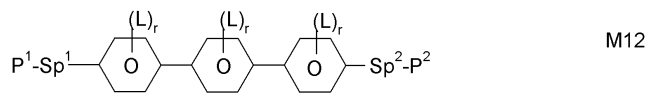
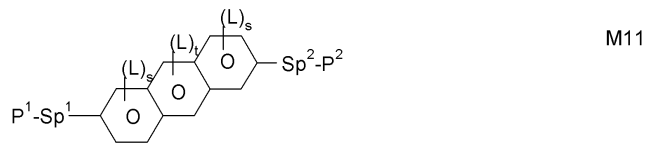
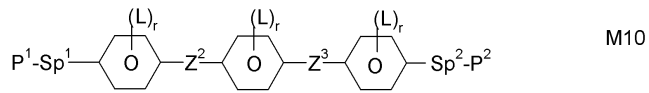
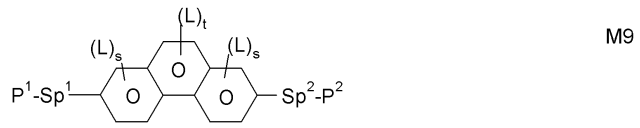
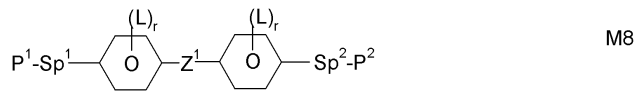
화학식 M의 성분은 -OH, -NH₂, -SH, -NHR¹¹, -C(O)OH 및 -CHO 라디칼을 포함하지 않는다.

[0217]

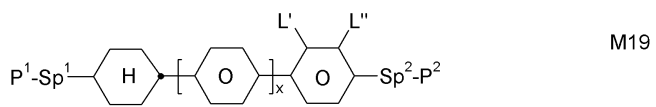
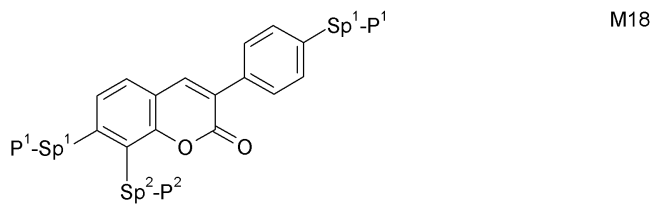
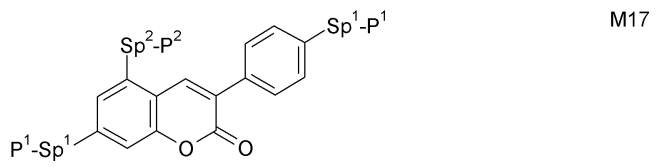
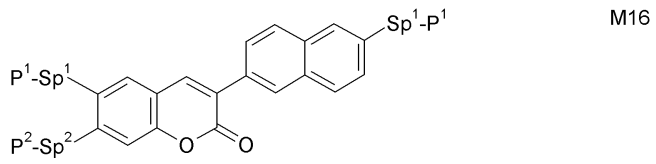
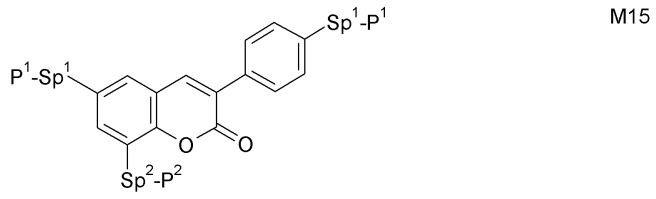
본 발명에 따른 디스플레이에 사용하는데 적합하고 바람직한 (공)단량체는 예컨대, 하기 화학식으로부터 선택된다:



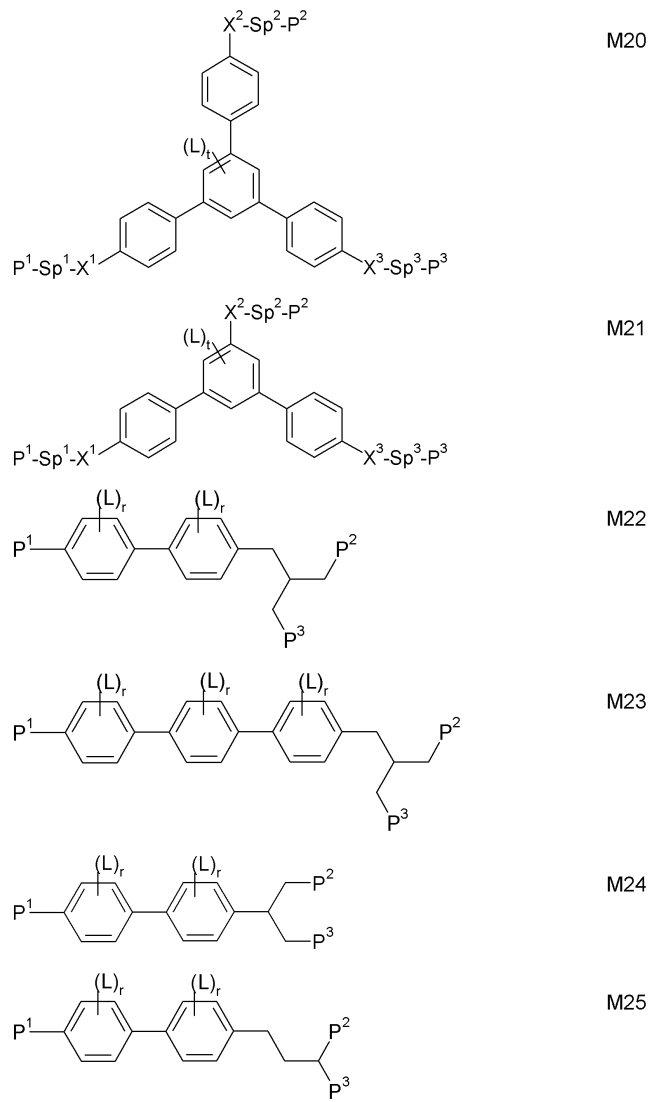
[0218]



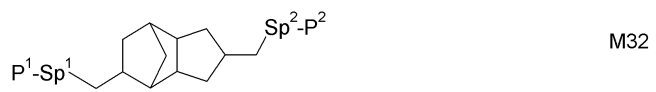
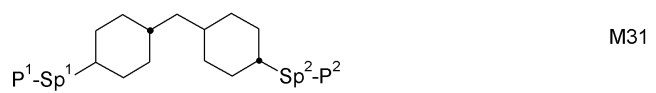
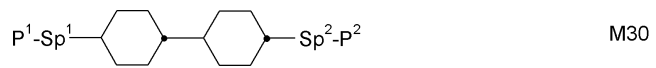
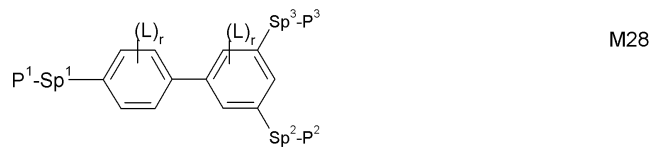
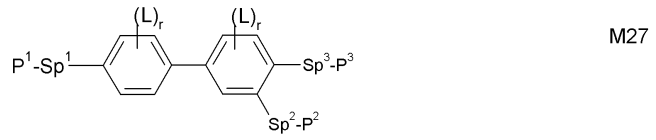
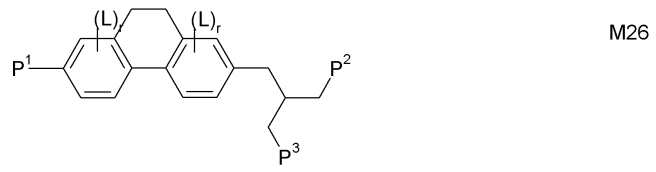
[0219]



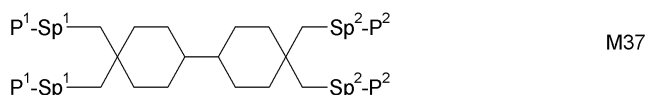
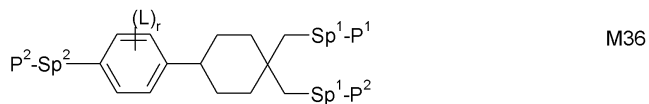
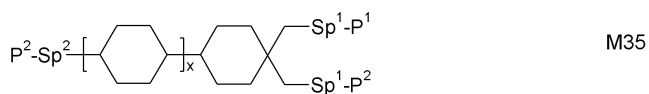
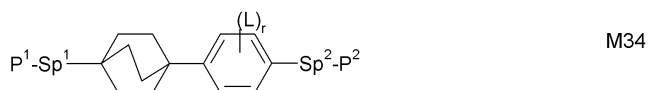
[0220]



[0221]



[0222]



[0223]

[0224]

[0225]

P^1 , P^2 및 P^3 는, 각각 서로 독립적으로, 바람직하게는 P에 대해 상기 및 하기에 기재된 의미 중 하나를 갖는 중합성 기, 바람직하게는 아크릴레이트, 메타크릴레이트, 플루오로아크릴레이트, 옥세탄, 비닐옥시 또는 에폭사이드 기를 나타내고,

[0226]

Sp^1 , Sp^2 및 Sp^3 은, 각각 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 스페이서 기, 바람직하게는 M에 대해 상기 및 하기에 기재된 의미 중 하나를 갖는 것, 특히 바람직하게는 $-(CH_2)_{p1}-$, $-(CH_2)_{p1}-O-$, $-(CH_2)_{p1}-CO-O-$ 또는 $-(CH_2)_{p1}-O-CO-O-$ 를 나타내고, 이때, $p1$ 은 1 내지 12의 정수이고, 나중에 언급된 상기 기들에서의 인접 고리에 대한 결합은 0 원자를 통해 일어나고,

[0227]

이때, 또한, 라디칼 P^1-Sp^1- , P^2-Sp^2- 및 P^3-Sp^3- 중 하나 이상은 라디칼 R^{aa} 를 나타낼 수 있되, 단, 존재하는 라디칼 P^1-Sp^1- , P^2-Sp^2- 및 P^3-Sp^3- 중 하나 이상은 R^{aa} 를 나타내지 않고,

[0228]

R^{aa} 는, H, F, Cl, CN 또는 1 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄 알킬(이때, 하나 이상의 비인접

CH₂ 기는 각각 서로 독립적으로, 0 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, C(R⁰)=C(R⁰⁰)-, -C≡C-, -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -O-CO-O-로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한, F, Cl, CN 또는 P¹-Sp¹-로 대체됨), 바람직하게는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄의, 임의적으로 일- 또는 다중플루오로화된 알킬, 알콕시, 알켄일, 알킨일, 알킬카본일, 알콕시-카본일 또는 알킬카본일-옥시(이때, 알켄일 및 알킨일 라디칼은 2개 이상의 탄소 원자를 갖고, 분지쇄 라디칼은 3개 이상의 탄소 원자를 가짐)를 나타내고, 이때, -OH, -NH₂, -SH, -NHR, -C(O)OH 및 -CHO는 기 R^{aa}에 존재하지 않고,

[0229] R⁰, R⁰⁰는, 각각 서로 독립적으로 및 각각의 경우 동일하게 또는 상이하게, H 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬을 나타내고,

[0230] R^y 및 R^z는, 각각 서로 독립적으로, H, F, CH₃ 또는 CF₃을 나타내고,

[0231] X¹, X² 및 X³은, 각각 서로 독립적으로, -CO-O-, O-CO- 또는 단일 결합을 나타내고,

[0232] Z¹은 -O-, -CO-, -C(R^yR^z)- 또는 -CF₂CF₂-를 나타내고,

[0233] Z² 및 Z³은, 각각 서로 독립적으로, -CO-O-, -O-CO-, -CH₂O-, -OCH₂-, -CF₂O-, -OCF₂- 또는 -(CH₂)_n-을 나타내고, 이때, n은 2, 3 또는 4이고,

[0234] L은, 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, F, Cl, CN, SCN, SF₅, 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지쇄의, 임의적으로 단일- 또는 다중플루오로화되는, 알킬, 알콕시, 알켄일, 알킨일, 알킬카본일, 알콕시카본일, 알킬카본일옥시 또는 알콕시카본일옥시, 바람직하게는 F를 나타내고,

[0235] L' 및 L"는, 각각 서로 독립적으로, H, F 또는 Cl을 나타내고,

[0236] r은 0, 1, 2, 3 또는 4를 나타내고,

[0237] s는 0, 1, 2 또는 3을 나타내고,

[0238] t는 0, 1 또는 2를 나타내고,

[0239] x는 0 또는 1을 나타낸다.

[0240] 화학식 M1 내지 M42의 화합물에서, 고리 기 는 바람직하게는 , , , , ,  또는 를 나타내고, 이때, L은, 각각의 경우 동일하게 또는 상이하게, 상기 의미 중 하나를 갖고 바람직하게는 F, Cl, CN, NO₂, CH₃, C₂H₅, C(CH₃)₃, CH(CH₃)₂, CH₂CH(CH₃)C₂H₅, OCH₃, OC₂H₅, COCH₃, COC₂H₅, COOCH₃, COOC₂H₅, CF₃, OCF₃, OCHF₂, OC₂F₅ 또는 P-Sp-, 특히 바람직하게는 F, Cl, CN, CH₃, C₂H₅, OCH₃, COCH₃, OCF₃ 또는 P-Sp-, 매우 특히 바람직하게는 F, Cl, CH₃, OCH₃, COCH₃ 또는 OCF₃, 특히 F 또는 CH₃을 나타낸다.

[0241] 액정 매질 또는 중합성 성분은 바람직하게는 화학식 M1 내지 M28로 이루어진 군, 특히 바람직하게는 화학식 M2 내지 M15의 군, 매우 특히 바람직하게는 M2, M3, M9, M14 및 M15의 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함한다. 상기 액정 매질 또는 중합성 성분은 바람직하게는 화학식 M10에서 Z² 및 Z³이 -(CO)O- 또는 -O(CO)-를 나타내는 화합물을 포함하지 않는다.

[0242] PSA 디스플레이의 제조를 위해, 상기 중합성 화합물은, 임의적으로 전압 인가에 의해, 액정 디스플레이의 기관 사이의 액정 매질 내에서 동일 반응계의 중합에 의해 중합되거나 교차결합된다(중합성 화합물이 2개 이상의 중합성 기를 포함하는 경우). 중합은 하나의 단계로 수행될 수 있다. 선경사 각을 생성하기 위해 첫번째 단계에서 먼저 전압 인가로 중합을 수행하고, 이어서, 두번째 중합 단계에서, 인가되는 전압 없이 첫번째 단계에서 중

분히 반응하지 않은 화합물을 중합하거나 가교시키는 것("최종 경화")도 가능하다.

[0243] 적합하고 바람직한 중합 방법은, 예컨대, 열 또는 광중합, 바람직하게는 광중합, 특히 UV 광중합이다. 임의적으로 여기에 하나 이상의 개시제가 또한 첨가될 수 있다. 중합에 적합한 조건 및 개시제의 적합한 유형과 양은 당업계에 공지되어 있고, 문헌에 기술되어 있다. 자유-라디칼 중합에 적합한 것은, 예컨대, 상업적으로 입수가 가능한 광개시제 이르가큐어(Irgacure)651®, 이르가큐어184®, 이르가큐어907®, 이르가큐어369® 또는 다로큐어 1173®(시바 아게(Ciba AG))이다. 개시제가 사용되는 경우, 이의 비율은 바람직하게는 0.001 내지 5 중량%, 특히 바람직하게는 0.001 내지 1 중량% 이다.

[0244] 상기 중합성 성분 또는 액정 매질은 또한, 예컨대 저장 또는 운송 중의 RM의 바람직하지 못한 자발적 중합을 방지하기 위해 하나 이상의 안정화제를 포함할 수 있다. 안정화제의 적합한 유형 및 양은 당업계 숙련자에게 공지되어 있고, 문헌에 기술되어 있다. 특히 적합한 것은, 예컨대, 이르가녹스(Irganox)® 시리즈(시바 아게)로 상업적으로 입수가능한 안정화제, 예컨대, 이르가녹스® 1076이다. 안정화제가 사용되는 경우, RM 또는 중합성 성분의 총량을 기준으로한 이의 비율은, 바람직하게는 10 내지 10,000 ppm, 특히 바람직하게는 50 내지 500 ppm이다.

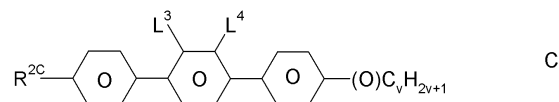
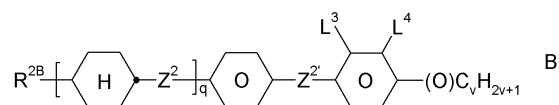
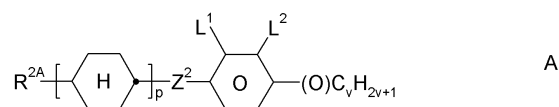
[0245] 상기 기술된 자가-정렬 첨가제 및 상기 기술된 임의적인 중합성 화합물(M) 이외에, 본 발명에 따른 액정 디스플레이에 사용하기 위한 액정 매질은, 하나 이상, 바람직하게는 2개 이상의 저분자량(즉, 단량체성 또는 비중합된) 화합물을 포함하는 액정 혼합물("호스트 혼합물")을 포함한다. 후자는 중합성 화합물의 중합에 사용되는 조건 하에서 중합 반응에 대해 안정적이거나 비반응성이다. 기본적으로, 통상적인 VA 및 VA-IPS 디스플레이에 사용하기 적합한 임의의 유전적으로 음 또는 양의 액정 혼합물이 호스트 혼합물로서 적합하다. 액정 디스플레이에 대한 호스트 혼합물의 비율은 일반적으로 95 중량% 이상, 바람직하게는 97 중량% 이상이다.

[0246] 적합한 액정 혼합물은 당업계 숙련자에게 공지되어 있고 문헌에 기술되어 있다. 음의 유전 이방성을 갖는 VA 디스플레이에 대한 액정 매질은 EP 1 378 557 A1 또는 WO 2013/004372에 기술되어 있다.

[0247] LCD 및 특히 IPS 디스플레이에 적합한, 양의 유전 이방성을 갖는 적합한 액정 혼합물은, 예컨대, JP 07-181 439 (A), EP 0 667 555, EP 0 673 986, DE 195 09 410, DE 195 28 106, DE 195 28 107, WO 96/23 851 및 WO 96/28 521로부터 공지되어 있다.

[0248] 본 발명에 따른 음의 유전 이방성을 갖는 액정 매질의 바람직한 실시양태는 하기에 기재된다:

[0249] 하기 화학식 A, B 및 C의 화합물로부터 선택되는 하나 이상의 화합물을 추가로 포함하는 액정 매질:



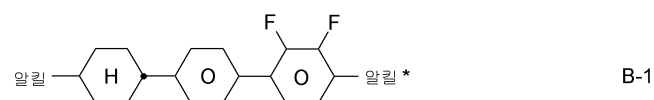
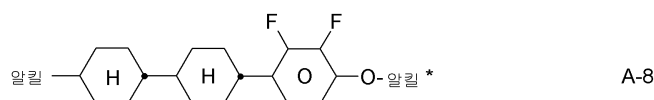
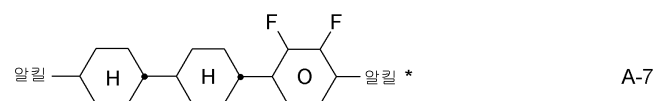
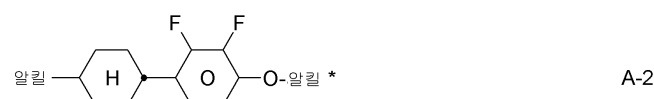
[0250]

[0251] 상기 식에서,

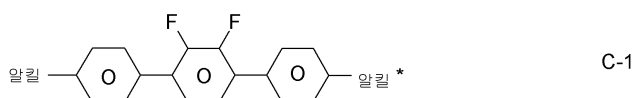
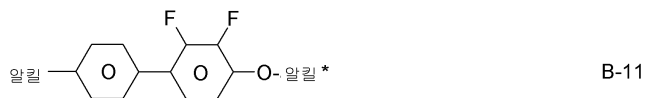
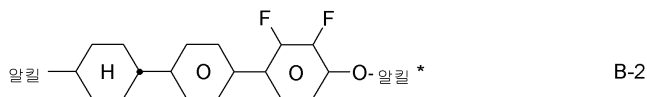
[0252] R^{2A} , R^{2B} 및 R^{2C} 는, 각각 서로 독립적으로, H, 15 개 이하의 탄소 원자를 갖고 비치환되거나 CN 또는 CF_3 로 단일 치환되거나 또는 할로젠으로 하나 이상의 단일치환되는 알킬 라디칼(이러한 라디칼 중의 하나 이상의 CH_2 기는

또한, O 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $-O-$, $-S-$, --- , $-C \equiv C-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-OC-O-$ 또는 $-O-CO-$ 로 대체될 수 있음)을 나타내고,

- [0253] L^{1-4} 는, 각각 서로 독립적으로, F, Cl, CF_3 또는 CHF_2 를 나타내고,
- [0254] Z^2 및 $Z^{2'}$ 는, 각각 서로 독립적으로, 단일 결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH=CH-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-C_2F_4-$, $-CF=CF-$, $-CH=CHCH_2O-$ 를 나타내고,
- [0255] p는 1 또는 2, 바람직하게는 1을 나타내고,
- [0256] q는 0 또는 1을 나타내고,
- [0257] v는 1 내지 6을 나타낸다.
- [0258] 화학식 A 및 B의 화합물에서, Z^2 는 동일하거나 상이한 의미를 가질 수 있다. 화학식 B의 화합물에서, Z^2 및 $Z^{2'}$ 는 동일하거나 상이한 의미를 가질 수 있다. 화학식 A, B 및 C의 화합물에서, R^{2A} , R^{2B} 및 R^{2C} 는, 각각 바람직하게는 1 내지 6개의 탄소 원자를 갖는 알킬, 특히 CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $n-C_5H_{11}$ 를 나타낸다.
- [0259] 화학식 A 및 B의 화합물에서, L^1 , L^2 , L^3 및 L^4 는 바람직하게는 $L^1 = L^2 = F$ 및 $L^3 = L^4 = F$, 또한 $L^1 = F$ 및 $L^2 = Cl$, $L^1 = Cl$ 및 $L^2 = F$, $L^3 = F$ 및 $L^4 = Cl$, $L^3 = Cl$ 및 $L^4 = F$ 를 나타낸다. 화학식 A 및 B에서의 Z^2 및 $Z^{2'}$ 는 바람직하게는 각각 서로 독립적으로, 단일 결합, 또한 $-C_2H_4-$ 가교를 나타낸다.
- [0260] 화학식 B에서 $Z^2 = -C_2H_4-$ 의 경우, $Z^{2'}$ 는 바람직하게는 단일 결합이거나, $Z^{2'} = -C_2H_4-$ 의 경우, Z^2 는 바람직하게는 단일 결합이다. 화학식 A 및 B의 화합물에서, $(O)C_vH_{2v+1}$ 은 바람직하게는 OC_vH_{2v+1} , 또한 C_vH_{2v+1} 을 나타낸다. 화학식 C의 화합물에서, $(O)C_vH_{2v+1}$ 은 바람직하게는 C_vH_{2v+1} 을 나타낸다. 화학식 C의 화합물에서, L^3 및 L^4 는 바람직하게는 각각 F를 나타낸다.
- [0261] 화학식 A, B 및 C의 바람직한 화합물은, 예컨대 하기를 나타낸다:



[0262]



[0263]

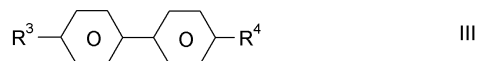
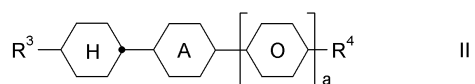
[0264] 상기 식에서, 알킬 및 알킬*은, 각각 서로 독립적으로, 1 내지 6개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 라디칼을 나타낸다.

[0265] 상기 액정 매질은 바람직하게는 -1.5 내지 -8.0, 특히 -2.5 내지 -6.0의 $\Delta\epsilon$ 를 갖는다.

[0266] 액정 혼합물에서의 복굴절률 Δn 의 값은 일반적으로 0.07 내지 0.16, 바람직하게는 0.08 내지 0.12이다. 중합 전 20°C에서의 회전 점도 η_1 은 바람직하게는 165 mPa·s 이하, 특히 140 mPa·s 이하이다.

[0267] 음 또는 양의 유전 이방성을 갖는 본 발명에 따른 매질의 바람직한 실시양태는 하기에 기재되어 있다:

[0268] 하기 화학식 II 및/또는 III의 화합물 중 하나 이상을 추가로 포함하는 액정 매질:



[0269]

[0270] 상기 식에서,

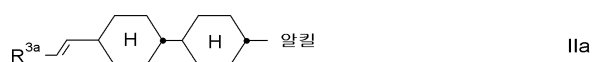
[0271] 고리 A는 1,4-페닐렌 또는 트랜스-1,4-사이클로헥실렌을 나타내고,

[0272] a는 0 또는 1을 나타내고,

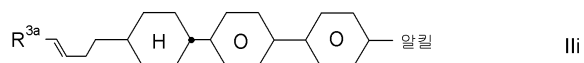
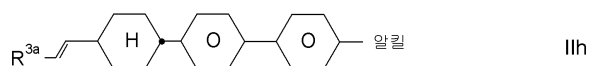
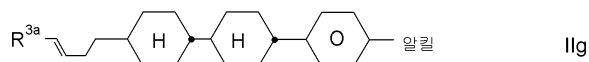
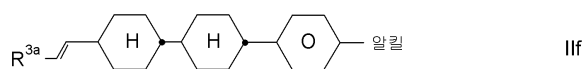
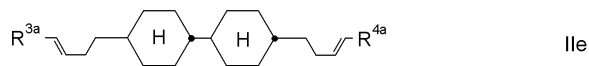
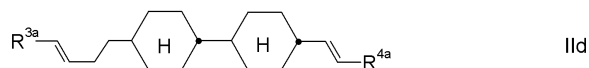
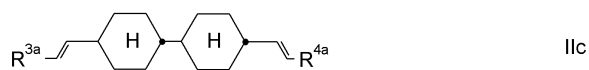
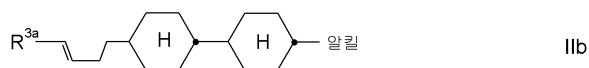
[0273] R^3 은, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 1 내지 9개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는 2 내지 9개의 탄소 원자를 갖는 알켄일, 바람직하게는 2 내지 9개의 탄소 원자를 갖는 알켄일을 나타내고,

[0274] R^4 는, 각각의 경우, 서로 독립적으로, 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 비치환되거나 또는 할로겐화된 알킬 라디칼(이때, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 또한, 0 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, -O-, -CH=CH-, -CH=CF-, -(CO)-, -O(CO)- 또는 -(CO)O-로 대체될 수 있음)을 나타내고, 바람직하게는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는 2 내지 9개의 탄소 원자를 갖는 알켄일을 나타낸다.

[0275] 화학식 II의 화합물은 바람직하게는 하기 화학식으로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0276]



[0277]

[0278]

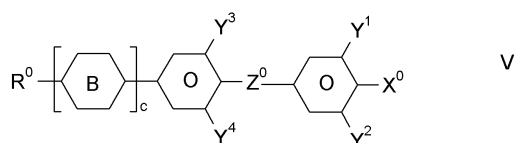
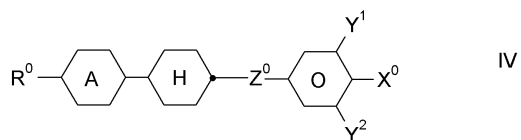
상기 식에서, R^{3a} 및 R^{4a} 는, 각각 서로 독립적으로, H, CH_3 , C_2H_5 또는 C_3H_7 을 나타내고, "알킬"은 1 내지 8개, 바람직하게는 1, 2, 3, 4 또는 5개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬을 나타낸다. 특히 바람직한 것은, 화학식 IIa 내지 IIIf의 화합물이고, 특히 여기서, R^{3a} 가 H 또는 CH_3 , 바람직하게는 H를 나타내는 것, 화학식 IIc의 화합물, 특히 R^{3a} 및 R^{4a} 가 H, CH_3 또는 C_2H_5 를 나타내는 것이다.

[0279]

양 의 유전 이방성을 갖는 본 발명에 따른 액정 매질의 바람직한 실시양태가 하기에 제공된다:

[0280]

바람직하게는 하나 이상의 하기 화학식 IV 및 V의 화합물을 포함하는 액정 매질:



[0281]

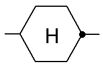
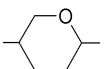
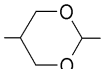
[0282]

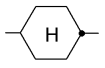
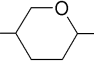
상기 식에서,

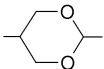
[0283]

R^0 는, 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는 알콕시 라디칼을 나타내고, 이때, 이들 라디칼 내의 하나 이상의 CH_2 기는 임의적으로, 서로 독립적으로, O 원자가 서로 직접 연결되지 않는 방식으로, $-C\equiv C-$, $-CF_2O-$,

$-\text{CH}=\text{CH}-$, , , $-\text{O}-$, $-(\text{CO})\text{O}-$ 또는 $-\text{O}(\text{CO})-$ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 또한 임의적으로 할로겐으로 대체될 수 있고,

[0284] 고리 A는 ,  또는  를 나타내고,

[0285] 고리 B는, 서로 독립적으로, 1,4-페닐렌(1개 또는 2개의 F 또는 Cl로 임의적으로 치환됨), , 

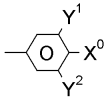
또는  를 나타내고,

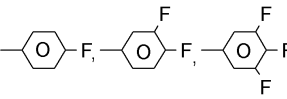
[0286] X^0 는 F, Cl, CN, SF_5 , SCN, NCS, 할로겐화된 알킬 기, 할로겐화된 알켄일 기, 할로겐화된 알콕시 기 또는 할로겐화된 알켄일옥시 기를 나타내고, 이들 각각 6 개 이하의 탄소 원자를 갖고,

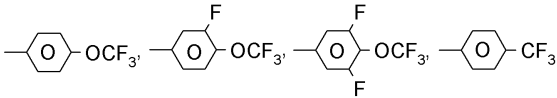
[0287] Y^{1-4} 는, 각각 서로 독립적으로, H 또는 F를 나타내고,

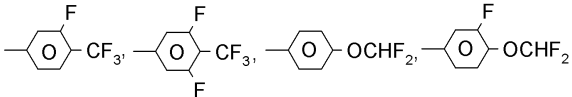
[0288] Z^0 은 $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-(\text{CO})\text{O}-$ 또는 단일 결합을 나타내고,

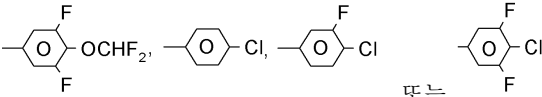
[0289] c는 0, 1 또는 2, 바람직하게는 1 또는 2를 나타내고,

[0290]  는 바람직하게는

[0291] 



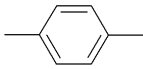
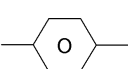
[0292] 

[0293]  또는  를 나타내고,

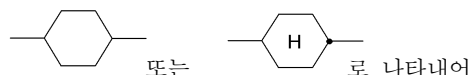
[0294] R^0 는 바람직하게는 2 내지 7개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알켄일을 나타내고,

[0295] X^0 은, 바람직하게는 F, OCF_3 , Cl 또는 CF_3 , 특히 F를 나타낸다.

[0296] 본 발명에 따른 유전적으로 음 또는 양의 액정 매질의 네마틱 상은 바람직하게는 10°C 또는 그 이하 내지 60°C 또는 그 이상, 특히 바람직하게는 0°C 또는 그 이하 내지 70°C 또는 그 이상의 온도 범위의 네마틱 상을 갖는다.

[0297] 본원의 목적을 위해, 치환된 벤젠 고리  및  에 대한 2개의 화학식은 균등물이다.

1,4-치환된 사이클로헥산은, 바람직하게는 1,4-트랜스-배열에서, 진다.

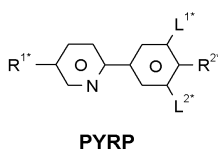
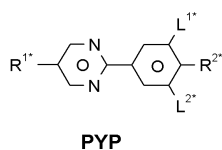


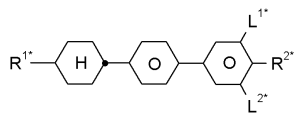
본원 및 하기 실시예에서, 액정 화합물의 구조는 두문자(acronym)로 기재되며, 하기 표 A 및 B에 따라서 화학식으로 전환된다. 모든 라디칼 C_nH_{2n+1} 및 C_mH_{2m+1} 은 각각 n 및 m 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 라디칼이고; n , m , z 및 k 는 정수이고, 바람직하게는 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 또는 12를 나타낸다. 표 B에서의 코딩은 자명하다. 표 A에는, 모구조에 대한 두문자만이 기재되어 있다. 개별적 경우, 대시(dash)로 분리된 모구조에 대한 두문자에 치환체 R^{1*} , R^{2*} , L^{1*} 및 L^{2*} 에 대한 코드가 뒤따른다:

R^{1*} , R^{2*} , L^{1*} , L^{2*} , L^{3*} 에 대한 코드		R^{2*}	L^{1*}	L^{2*}
nm	C_nH_{2n+1}	C_mH_{2m+1}	H	H
nOm	C_nH_{2n+1}	OC_mH_{2m+1}	H	H
nO.m	OC_nH_{2n+1}	C_mH_{2m+1}	H	H
n	C_nH_{2n+1}	CN	H	H
nN.F	C_nH_{2n+1}	CN	F	H
nN.F.F	C_nH_{2n+1}	CN	F	F
nF	C_nH_{2n+1}	F	H	H
nCl	C_nH_{2n+1}	Cl	H	H
nOF	OC_nH_{2n+1}	F	H	H
nF.F	C_nH_{2n+1}	F	F	H
nF.F.F	C_nH_{2n+1}	F	F	F
nOCF ₃	C_nH_{2n+1}	OCF ₃	H	H
nOCF ₃ .F	C_nH_{2n+1}	OCF ₃	F	H
n-Vm	C_nH_{2n+1}	$-CH=CH-C_mH_{2m+1}$	H	H
nV-Vm	$C_nH_{2n+1}-CH=CH-$	$-CH=CH-C_mH_{2m+1}$	H	H

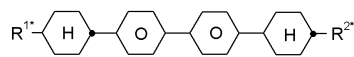
바람직한 혼합물 성분은 표 A 및 B에서 확인된다.

표 A

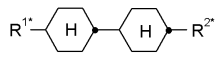




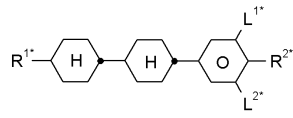
BCH



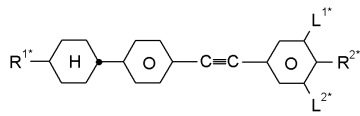
CBC



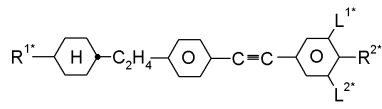
CCH



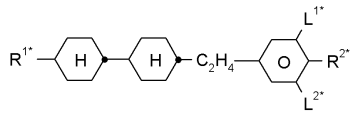
CCP



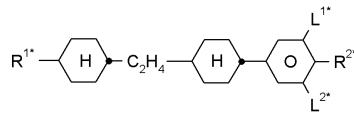
CPTP



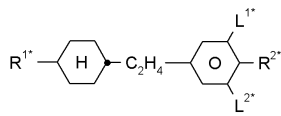
CEPTP



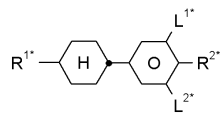
ECCP



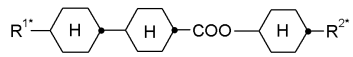
CECP



EPCH

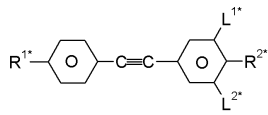


PCH

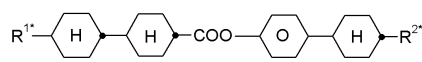


CH

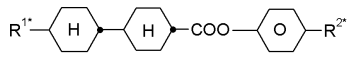
[0303]



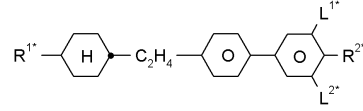
PTP



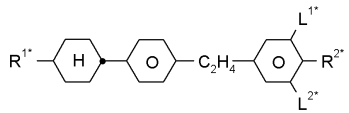
CCPC



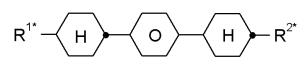
CP



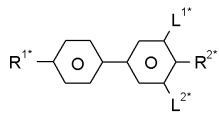
BECH



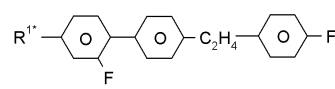
EBCH



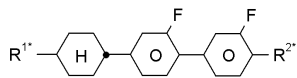
CPC



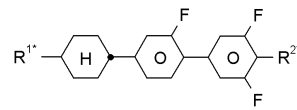
B



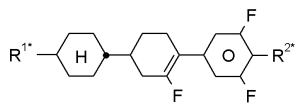
FET-nF



CGG



CGU



CFU

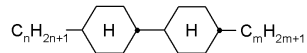
[0304]

[0305]

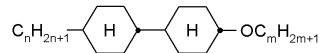
표 B

[0306]

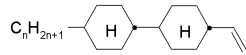
n, m, z는, 서로 독립적으로, 바람직하게는 1, 2, 3, 4, 5 또는 6을 나타낸다.



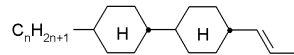
CCH-nm



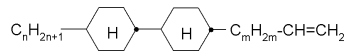
CCH-nOm



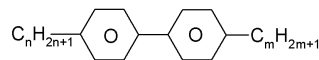
CC-n-V



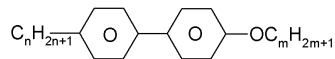
CC-n-V1



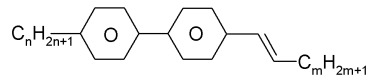
CC-n-mV



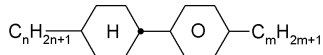
PP-n-m



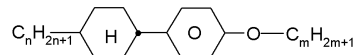
PP-n-Om



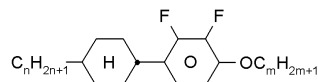
PP-n-Vm



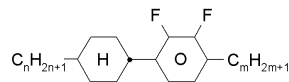
PCH-nm



PCH-nOm

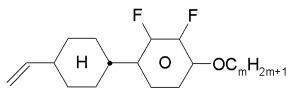


CY-n-Om

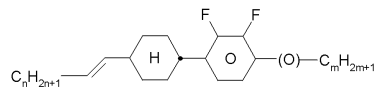


CY-n-m

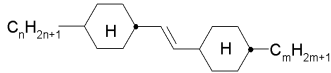
[0307]



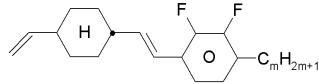
CY-V-Om



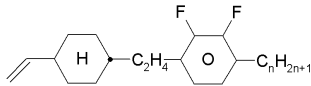
CY-nV-(O)m



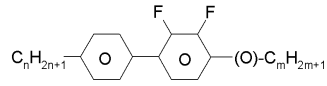
CVC-n-m



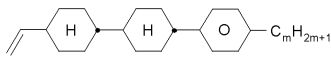
CVY-V-m



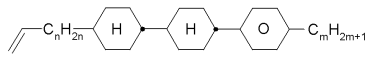
CEY-V-m



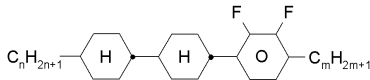
PY-n-(O)m



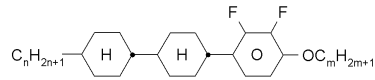
CCP-V-m



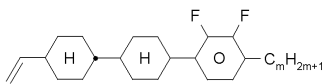
CCP-Vn-m



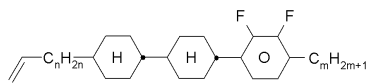
CCY-n-m



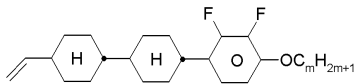
CCY-n-Om



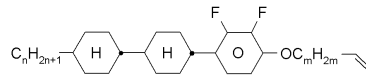
CCY-V-m



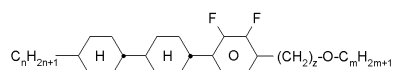
CCY-Vn-m



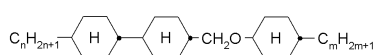
CCY-V-Om



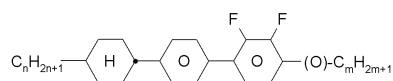
CCY-n-OmV



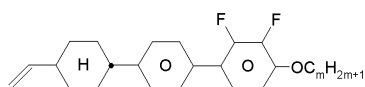
CCY-n-zOm



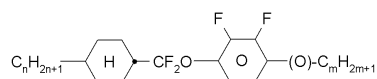
CCOC-n-m



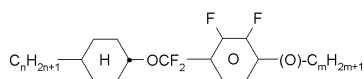
CPY-n-(O)m



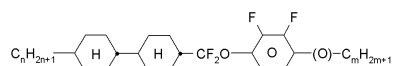
CPY-V-Om



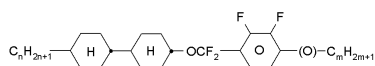
CQY-n-(O)m



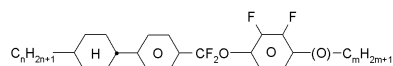
CQIY-n-(O)m



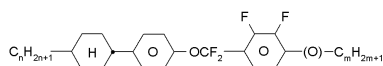
CCQY-n-(O)m



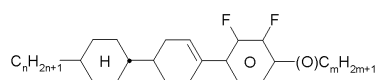
CCQIY-n-(O)m



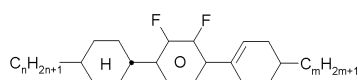
CPQY-n-(O)m



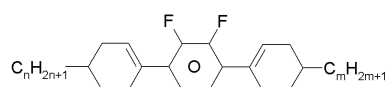
CPQIY-n-Om



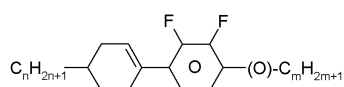
CLY-n-(O)m



CYLI-n-m

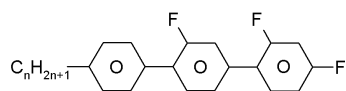


LYLI-n-m

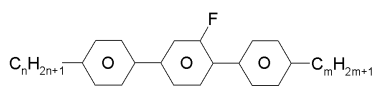


LY-n-(O)m

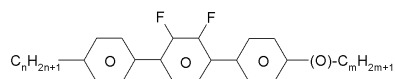
[0309]



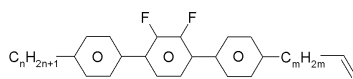
PGIGI-n-F



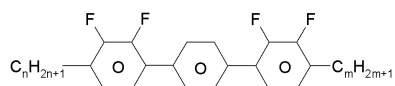
PGP-n-m



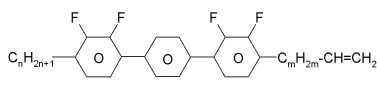
PYP-n(O)m



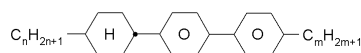
PYP-n-mV



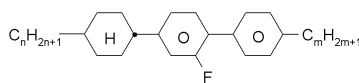
YPY-n-m



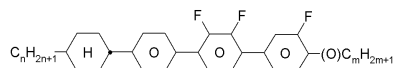
YPY-n-mV



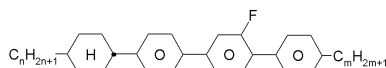
BCH-nm



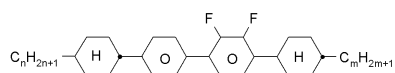
BCH-nmF



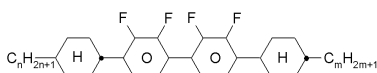
CPYP-n(O)m



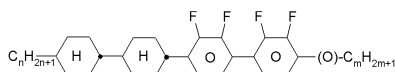
CPGP-n-m



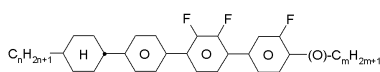
CPYC-n-m



CYYC-n-m

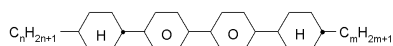


CCYY-n-m

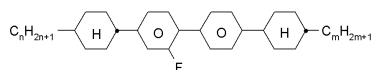


CPYG-n(O)m

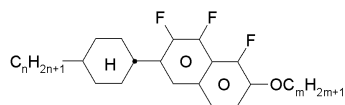
[0310]



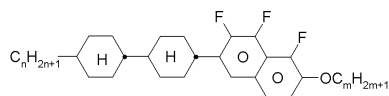
CBC-nm



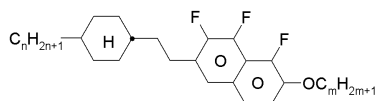
CBC-nmF



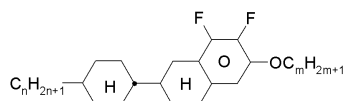
CNap-n-Om



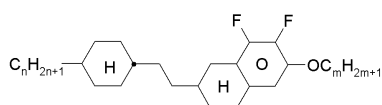
CCNap-n-Om



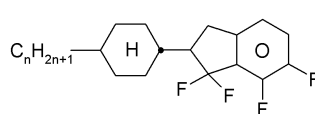
CENap-n-Om



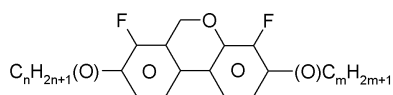
CTNap-n-Om



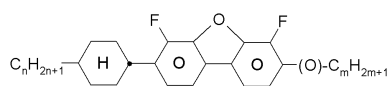
CETNap-n-Om



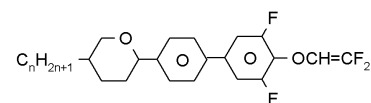
CK-n-F



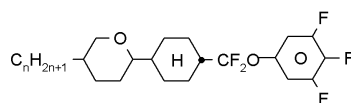
DFDBC-n(O)-(O)m



C-DFDBF-n-(O)m

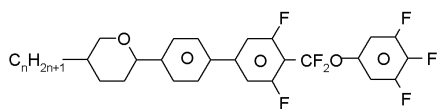


APU-n-OXF

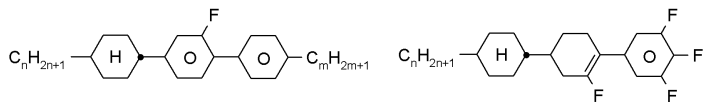


ACQU-n-F

[0311]

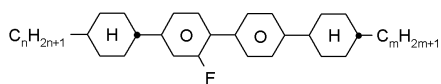


APUQU-n-F

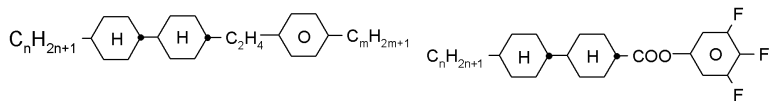


BCH-n.Fm

CFU-n-F

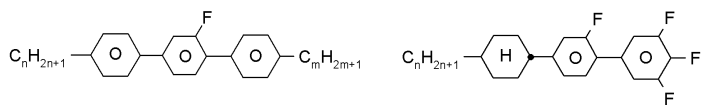


CBC-nmF



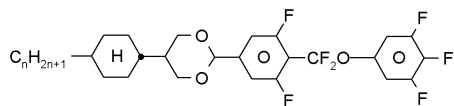
ECCP-nm

CCZU-n-F



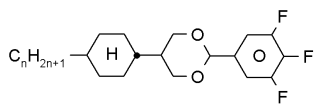
PGP-n-m

CGU-n-F

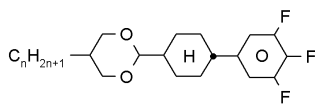


CDUQU-n-F

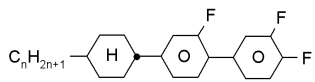
[0312]



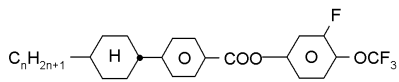
CDU-n-F



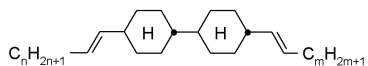
DCU-n-F



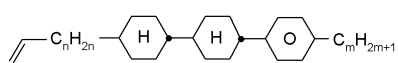
CGG-n-F



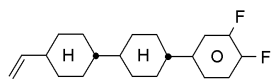
CPZG-n-OT



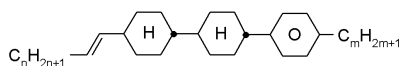
CC-nV-Vm



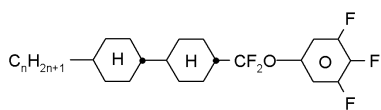
CCP-Vn-m



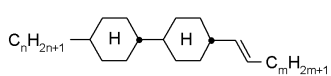
CCG-V-F



CCP-nV-m

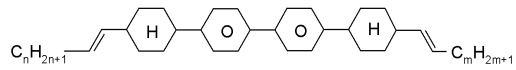


CCQU-n-F

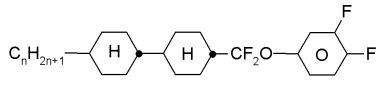


CC-n-Vm

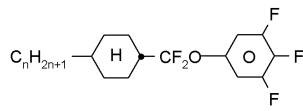
[0313]



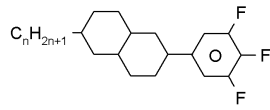
CPPC-nV-Vm



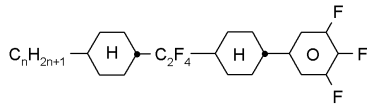
CCQG-n-F



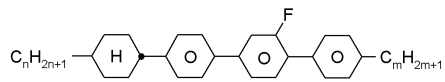
CQU-n-F



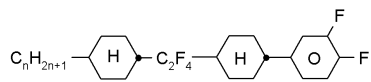
Dec-U-n-F



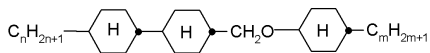
CWCU-n-F



CPGP-n-m

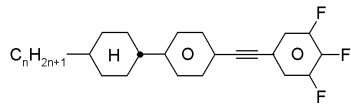


CWCG-n-F

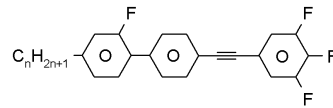


CCOC-n-m

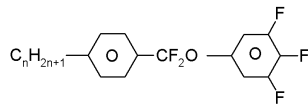
[0314]



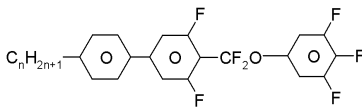
CPTU-n-F



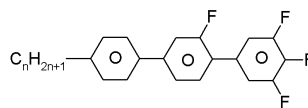
GPTU-n-F



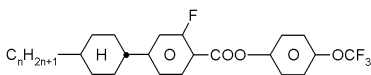
PQU-n-F



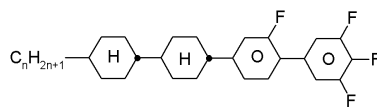
PUQU-n-F



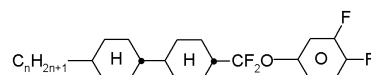
PGU-n-F



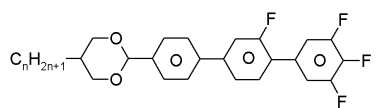
CGZP-n-OT



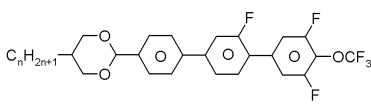
CCGU-n-F



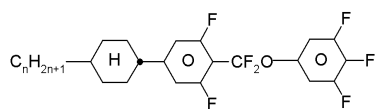
CCQG-n-F



DPGU-n-F

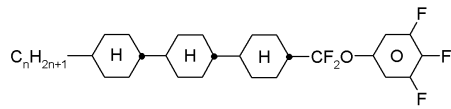


DPGU-n-OT

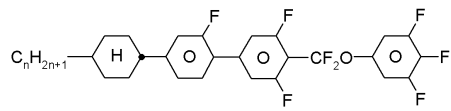


CUQU-n-F

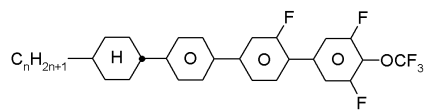
[0315]



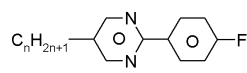
CCCQU-n-F



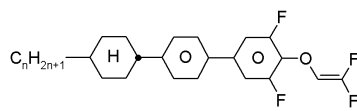
CGUQU-n-F



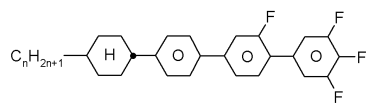
CPGU-n-OT



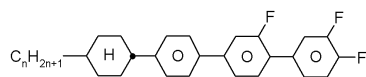
PYP-n-F



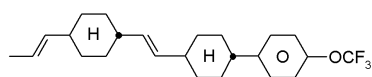
CPU-n-OXF



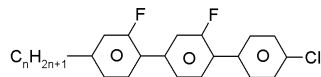
CPGU-n-F



CPGG-n-F

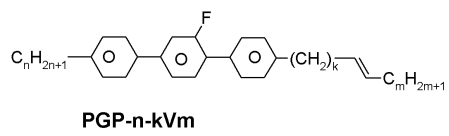
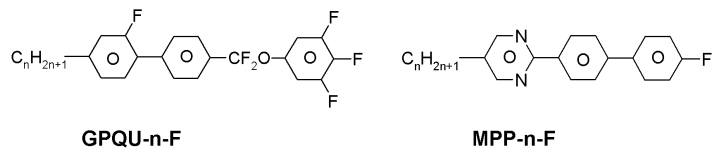
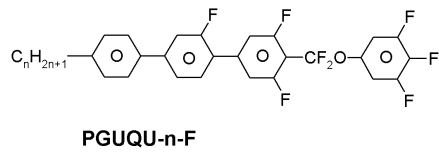
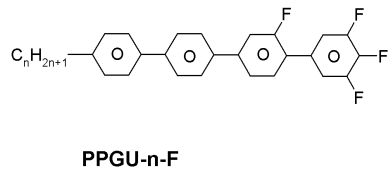
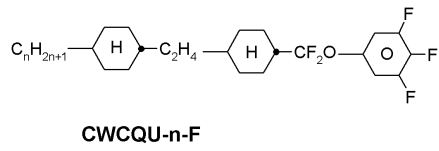
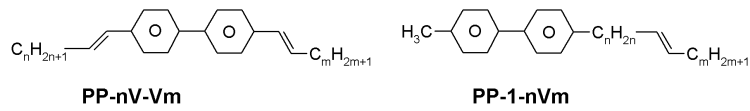


CVCP-1V-OT

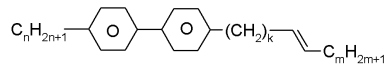


GGP-n-Cl

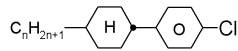
[0316]



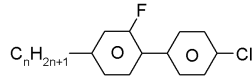
[0317]



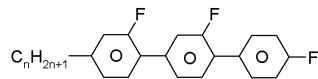
PP-n-kVm



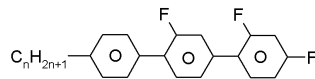
PCH-nCl



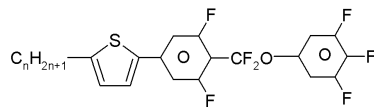
GP-n-Cl



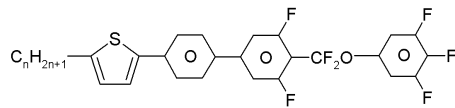
GGP-n-F



PGIGI-n-F



SUQU-n-F



SPUQU-n-F

[0318]

[0319]

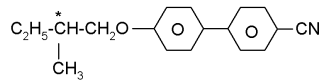
본 발명의 바람직한 실시양태에서, 본 발명에 따른 액정 매질은 표 A 및 B로부터의 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 화합물을 포함한다.

[0320]

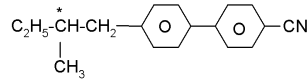
표 C

[0321]

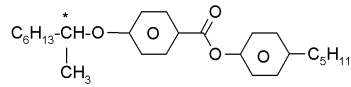
표 C는 본 발명에 따른 액정 매질에 첨가될 수 있는 가능한 키랄 도판트를 기재한다.



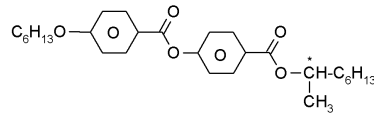
C 15



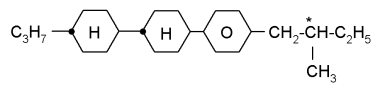
CB 15



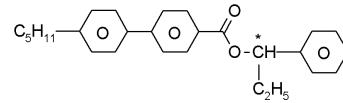
CM 21



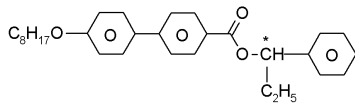
R/S-811



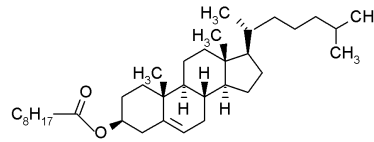
CM 44



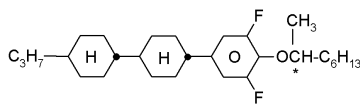
CM 45



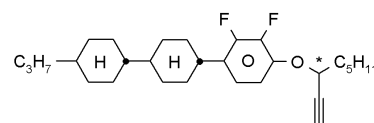
CM 47



CN

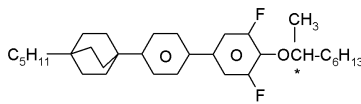


R/S-2011

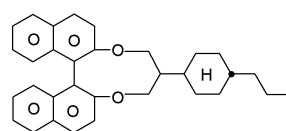


R/S-3011

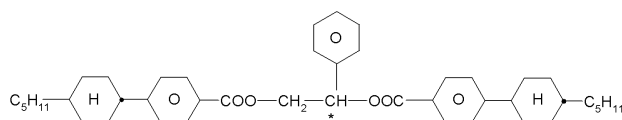
[0322]



R/S-4011



R/S-5011



R/S-1011

[0323]

[0324]

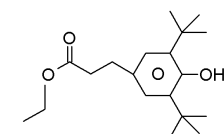
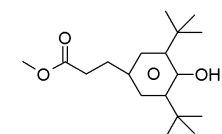
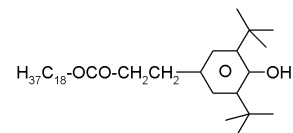
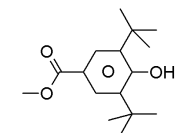
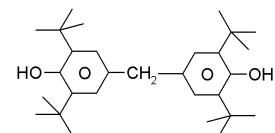
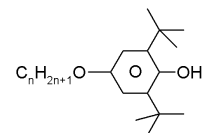
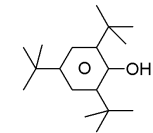
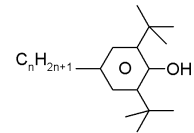
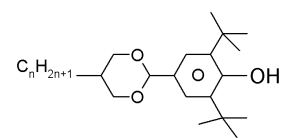
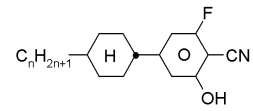
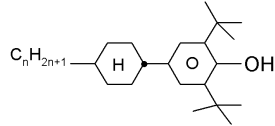
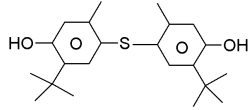
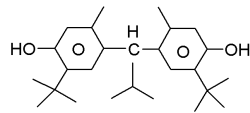
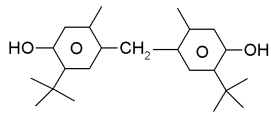
상기 액정 매질은, 바람직하게는 표 C로부터의 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 도판트를 임의적으로 0 내지 10 중량%, 특히 0.01 내지 5 중량%, 특히 바람직하게는 0.1 내지 3 중량%으로 포함한다.

[0325]

표 D

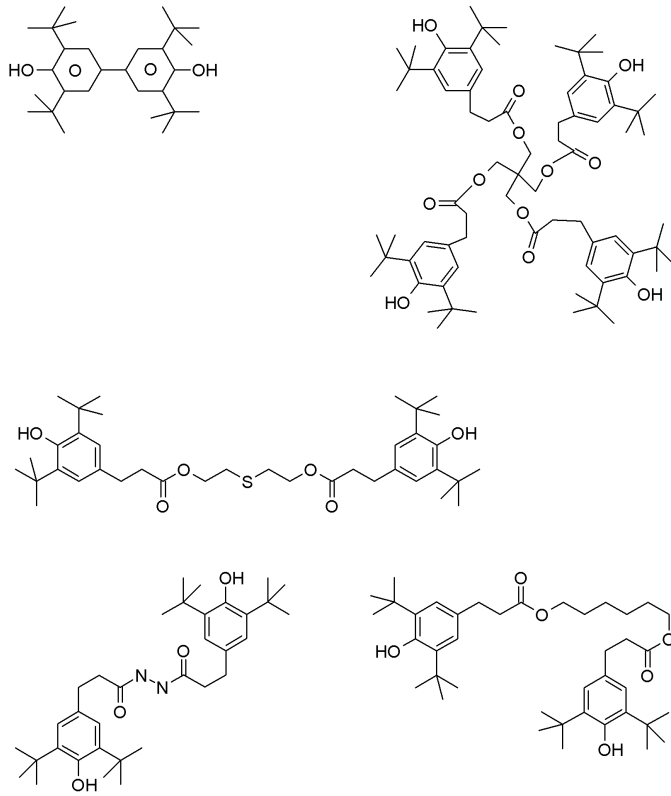
[0326]

표 D는 본 발명에 따른 액정 매질에 첨가될 수 있는 가능한 안정화제를 기재한다(여기서, n은 1 내지 12의 정수, 바람직하게는 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 또는 8을 나타내고, 말단 메틸 기는 도시되지 않음).

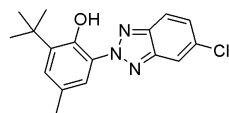
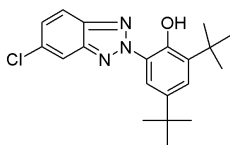
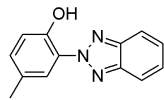
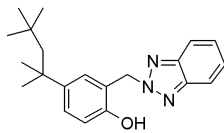
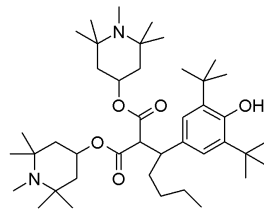
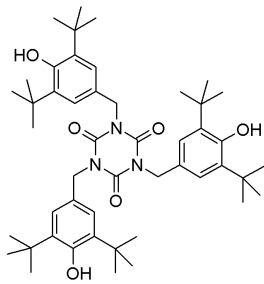
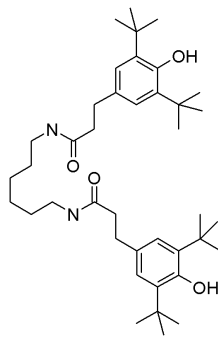
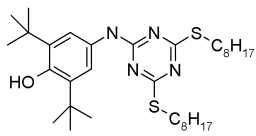


[0327]

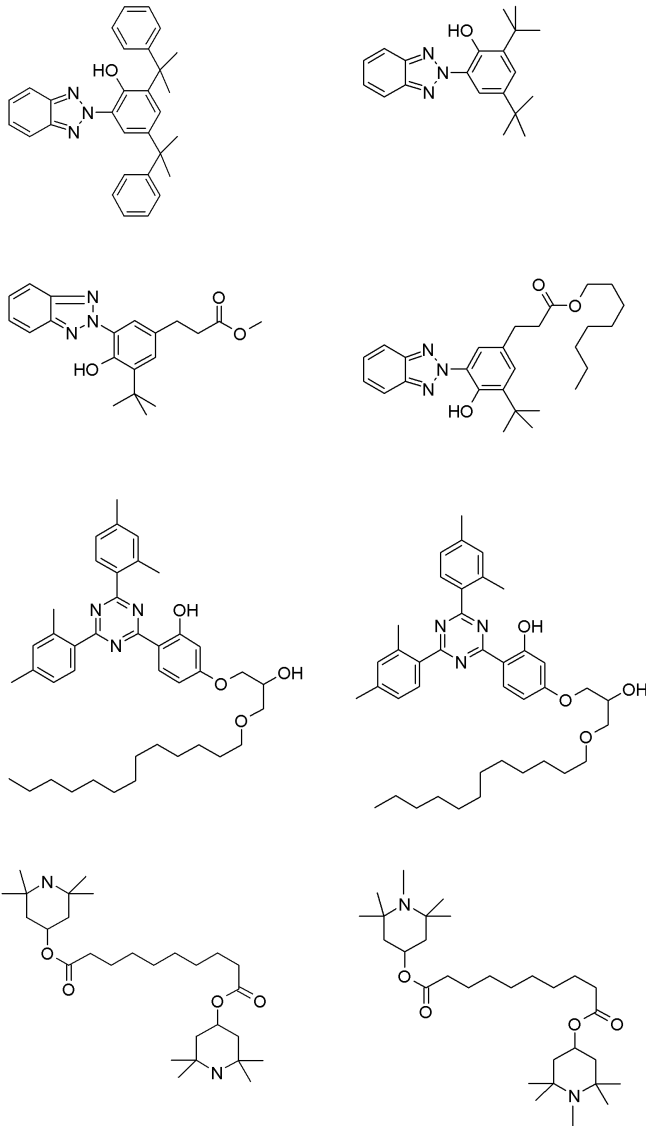
[0328]



[0329]



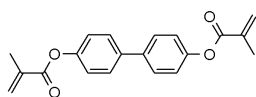
[0330]



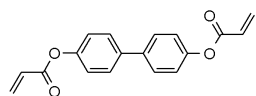
상기 액정 매질은 바람직하게는 0 내지 10 중량%, 특히 1 ppm 내지 5 중량%, 특히 바람직하게는 1 ppm 내지 1 중량%의 안정화제를 포함한다. 상기 액정 매질은 바람직하게는 표 D로부터의 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 안정화제를 포함한다.

표 E

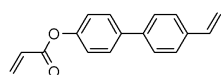
표 E는 바람직하게는 중합성 화합물로서 본 발명에 따른 액정 매질에서 사용될 수 있는 예시적인 화합물을 보여 준다.



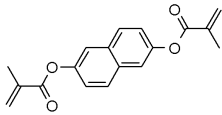
RM-1



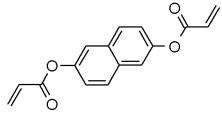
RM-2



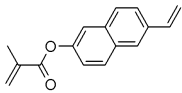
RM-3



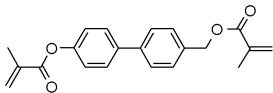
RM-4



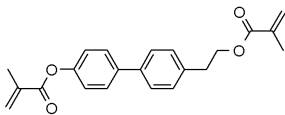
RM-5



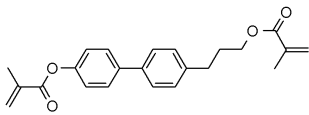
RM-6



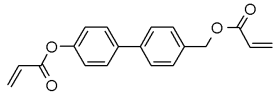
RM-7



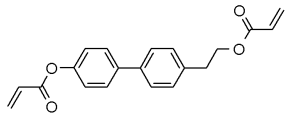
RM-8



RM-9

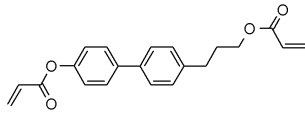


RM-10

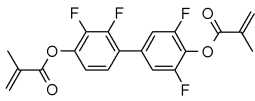


RM-11

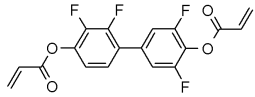
[0337]



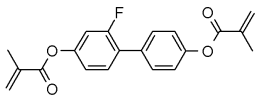
RM-12



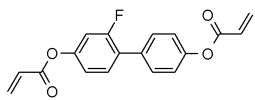
RM-13



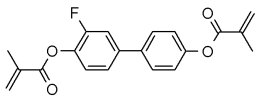
RM-14



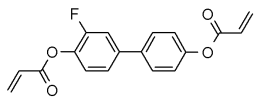
RM-15



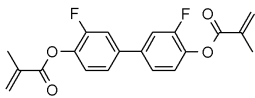
RM-16



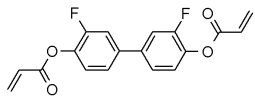
RM-17



RM-18

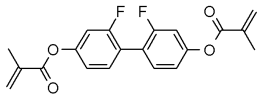


RM-19

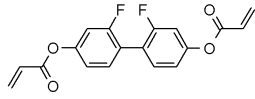


RM-20

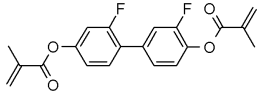
[0338]



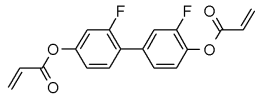
RM-21



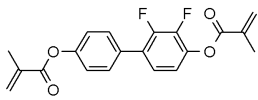
RM-22



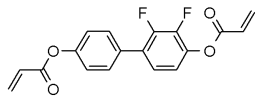
RM-23



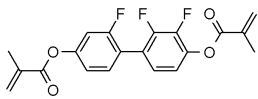
RM-24



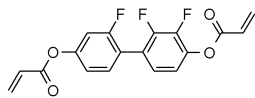
RM-25



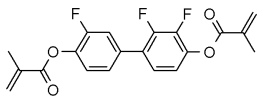
RM-26



RM-27

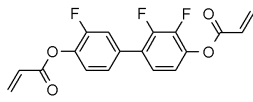


RM-28

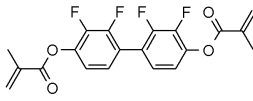


RM-29

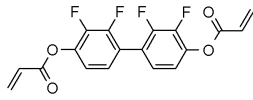
[0339]



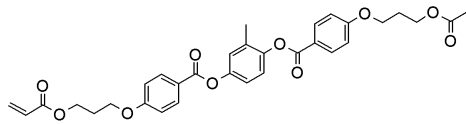
RM-30



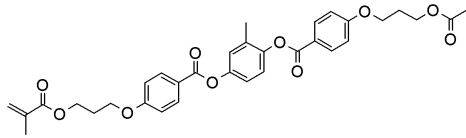
RM-31



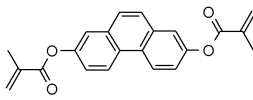
RM-32



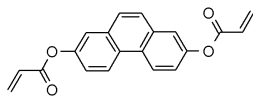
RM-33



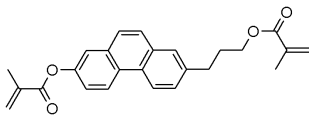
RM-34



RM-35

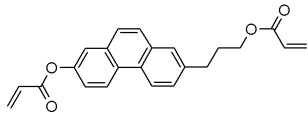


RM-36

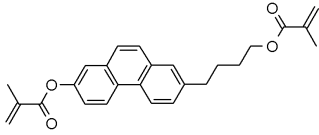


RM-37

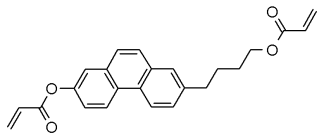
[0340]



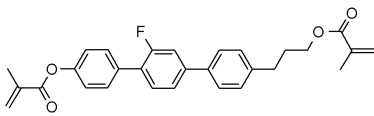
RM-38



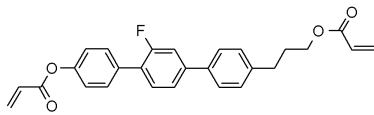
RM-39



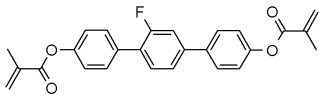
RM-40



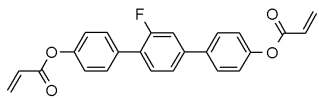
RM-41



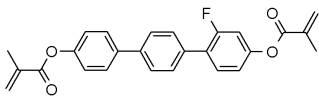
RM-42



RM-43

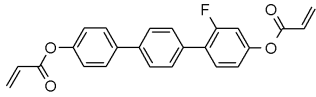


RM-44

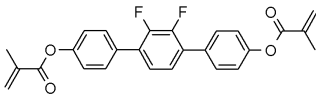


RM-45

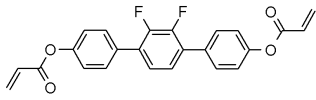
[0341]



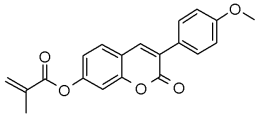
RM-46



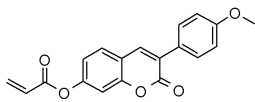
RM-47



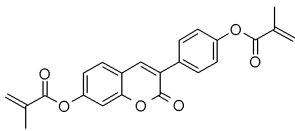
RM-48



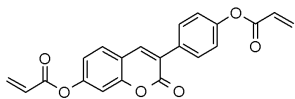
RM-49



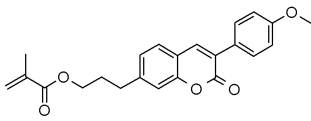
RM-50



RM-51

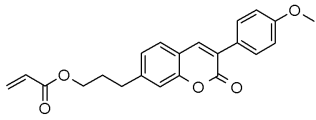


RM-52

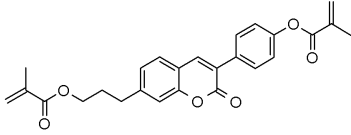


RM-53

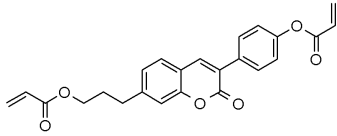
[0342]



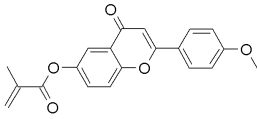
RM-54



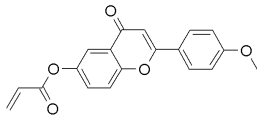
RM-55



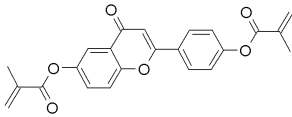
RM-56



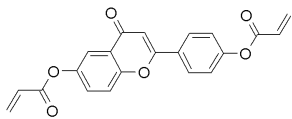
RM-57



RM-58

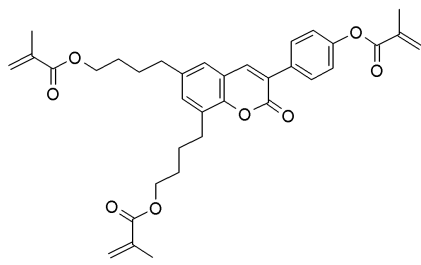


RM-59

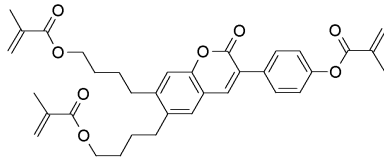


RM-60

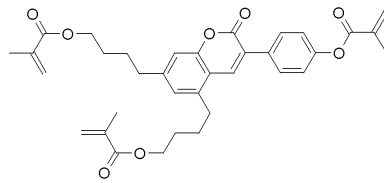
[0343]



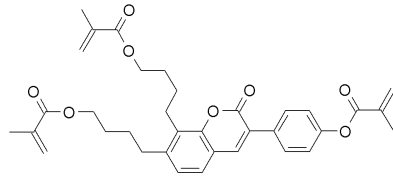
RM-61



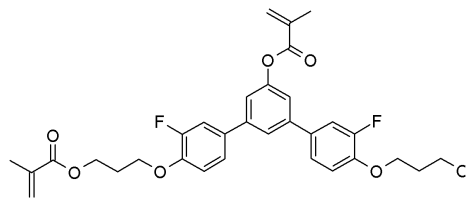
RM-62



RM-63

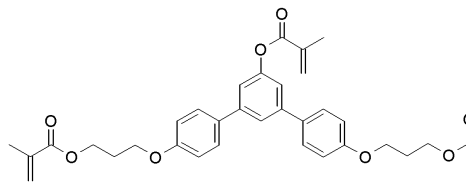


RM-64

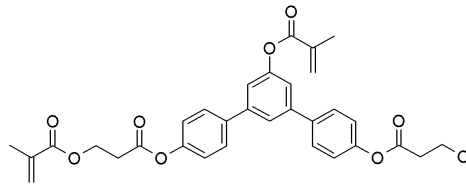


RM-65

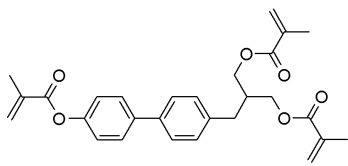
[0344]



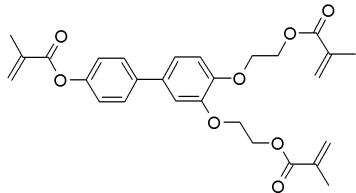
RM-66



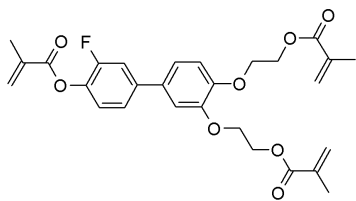
RM-67



RM-68

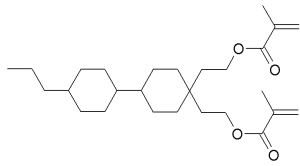


RM-69

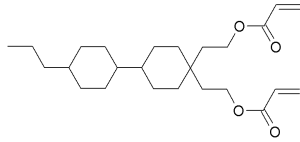


RM-70

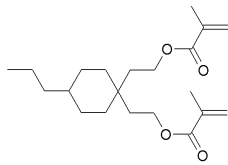
[0345]



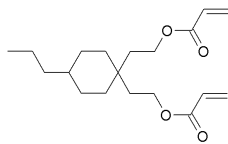
RM-71



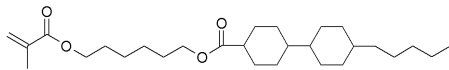
RM-72



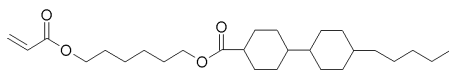
RM-73



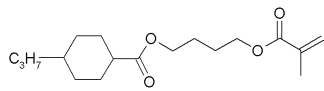
RM-74



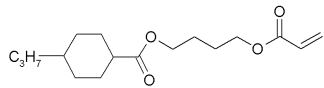
RM-75



RM-76

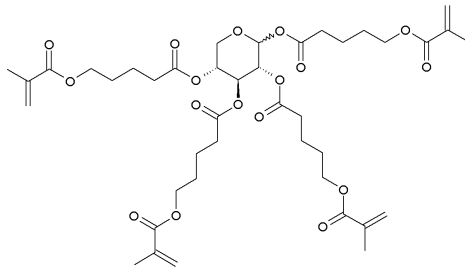


RM-77

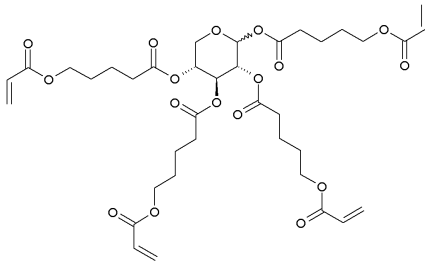


RM-78

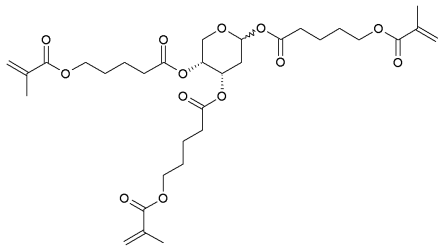
[0346]



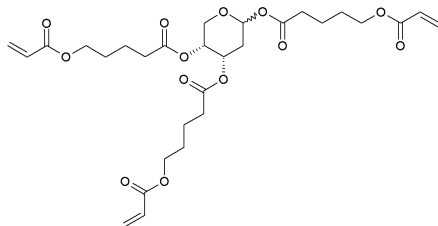
RM-79



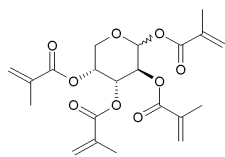
RM-80



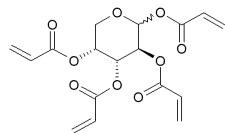
RM-81



RM-82



RM-83

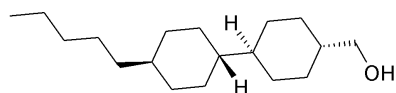


RM-84

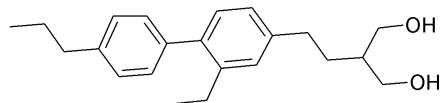
본 발명의 바람직한 실시양태에서, 상기 메소젠성 매질은 표 E로부터의 화합물의 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함한다.

표 F

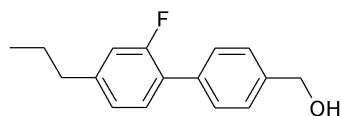
표 F는 바람직하게는 비중합성 자가-정렬 첨가제로서 본 발명에 따른 액정 매질에서 사용될 수 있는 예시적인 화합물을 보여준다.



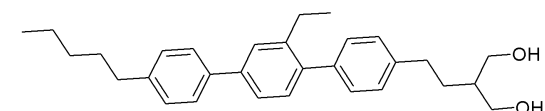
A-1



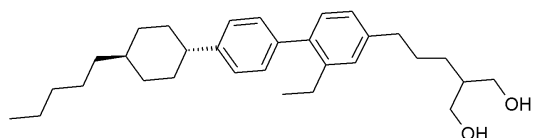
A-2



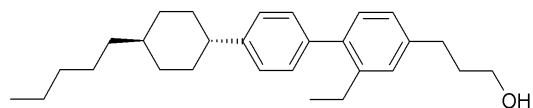
A-3



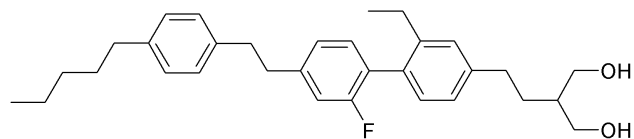
A-4



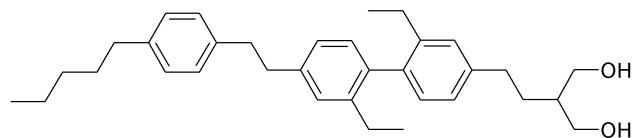
A-5



A-6



A-7



A-8

[0352]

[0353]

[0354]

본원에서, 또한 "화합물(들)"로도 쓰여진 용어 "화합물들"은, 달리 명백히 지칭되지 않는 한, 하나 또는 복수개의 화합물이다. 반대로, 용어 "화합물"은, 정의에 따라 가능한 경우, 및 달리 지칭되지 않는 한, 또한 일반적으로 복수개의 화합물을 포함한다. 이는 용어 액정 매질 및 액정 매질들에도 똑같이 적용된다. 용어 "성분"은 각각의 경우, 하나 이상의 물질, 화합물 및/또는 입자를 포함한다.

[0355]

또한, 하기 약어 및 기호가 사용된다:

[0356]

n_e 20℃ 및 589 nm에서의 이상 굴절률,

[0357]

n_o 20℃ 및 589 nm에서의 정상 굴절률,

[0358]

Δn 20℃ 및 589 nm에서의 광학 이방성,

[0359]

$\epsilon_{\perp}$ 20℃ 및 1 kHz에서 지시자에 대해 수직인 유전율,

[0360]

$\epsilon_{\parallel}$ 20℃ 및 1 kHz에서 지시자에 대해 수평인 유전율,

[0361]

$\Delta \epsilon$ 20℃ 및 1 kHz에서의 유전 이방성,

[0362]

c.l.p., T(N,I) 투명점 [℃],

[0363]

γ_1 20℃에서의 회전 점도[mPa · s],

- [0364] K₁20℃에서의 탄성 상수, "펼침(splay)" 변형률[pN],
- [0365] K₂20℃에서의 "꼬임" 변형률[pN],
- [0366] K₃20℃에서의 "굽힘" 변형률[pN],
- [0367] V₀20℃에서의 용량 역치(프레드릭스 역치)[V].
- [0368] 달리 명백히 지칭되지 않는 한, 본원에서 모든 농도는 중량%로 인용되며, 용매 없는 모든 고체 결정성 또는 액정 성분을 포함하는 완전체로서 상응하는 혼합물에 관한 것이다.
- [0369] 달리 명시적으로 기재되지 않는 한, 모든 물리적 성질은 문헌["Merck Liquid Crystals, Physical Properties of Liquid Crystals", status Nov. 1997, Merck KGaA, Germany]에 기재된 바와 같이 측정되며 20℃의 온도에서 적용되고, Δn은 589 nm에서, Δε는 1 kHz에서 측정된다.
- [0370] 상기 중합성 화합물은, 임의적으로 디스플레이에 전압(일반적으로, 10 V 내지 30 V 교류, 1 kHz)을 동시에 인가하면서, 사전결정된시간 동안 한정된 강도의 UVA 광(일반적으로 340 nm)으로 조사하는 것에 의해 디스플레이 또는 시험 셀 내에서 중합된다. 이러한 예에서, 달리 기재되지 않는 한, 100 mW/cm² 수는 증기 램프가 중합에 사용되고, 이러한 강도는 320 nm(임의적으로 340nm) 밴드-통과 필터가 장착된 표준 UV 미터(유시오 UNI 미터)를 사용하여 측정된다.
- [0371] 하기 실시예는 본 발명을 설명하는 것이지 임의의 방법으로 제한하려는 의도는 아니다. 그러나, 물리적 특성은, 당업자에게 성취될 수 있는 특성 및 개질될 수 있는 범위를 자명하게 해준다. 특히, 바람직하게 성취될 수 있는 다양한 특성들의 조합이 당업자에게 잘 정의된다.
- [0372] 또한, 본 명세서에 따른 본 발명의 실시양태 및 변수의 추가 조합이 특허청구범위로부터 발생한다.

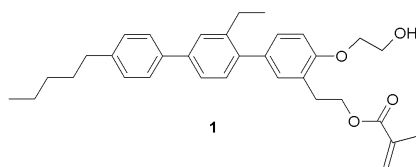
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0373] 실시예
- [0374] 사용된 상기 화합물은, 상업적으로 수득가능하지 않는 경우, 표준 실험 절차에 따라 합성된다. 액정 매질은 독일 메르크 카게아아(Merck KGaA, Germany)로부터 유래된다.

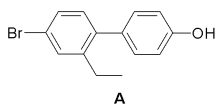
A) 합성 실시예

실시예 1

- [0377] 2-메틸아크릴산 2-[2'-에틸-4-(2-하이드록시에톡시)-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-3-일]-에틸 에스터 1의 합성



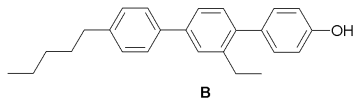
- [0378]
- [0379] 1) 4'-브로모-2'-에틸바이페닐-4-올 A의 합성



- [0380]
- [0381] 223 ml의 물을 110.3 g(1.04 mol)의 Na₂CO₃, 및 154 g(0.49 mol)의 4-브로모-2-에틸-1-요오드벤젠에 첨가하고, 75.1 g(0.54 mol)의 4-하이드록시-페닐붕산 및 850 ml의 1,4-다이옥산을 첨가하고, 혼합물을 탈기시켰다. 14.5 g(19.8 mmol)의 비스(1,1-다이페닐포스포노페로센)-팔라듐-(II) 클로라이드를 첨가하고, 혼합물을 80℃에서 18시간 동안 교반시켰다. 반응이 완료된 후(헵탄 / 에틸 아세테이트 1:1로 박막 크로마토그래피로 확인), 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 물 및 메틸 3급-부틸 에터로 희석시키고, 2 N HCl을 사용하여 pH 1

내지 2로 산성화시켰다. 상을 분리시키고, 수상을 메틸 3급-부틸 에터로 세척하고, 합친 유기 상을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 수득된 조질 생성물을 헵탄 / 에틸 아세테이트(8:2)로 실리카 겔을 통해 여과시켜서, 96 g의 생성물 **A**를 갈색 오일로서 수득하였다.

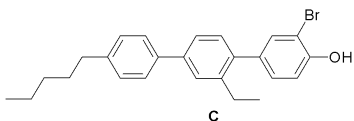
2) 2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-4-올 **B**의 합성



102 g(514 mmol)의 4-펜틸페닐붕산 및 135 g(467 mmol)의 브로마이드 **A**를 743 ml의 톨루엔, 270 ml의 에탄올 및 350 ml의 2 N Na_2CO_3 의 혼합물 중에 용해시키고, 탈기시켰다. 8.1 g(7.0 mmol)의 테트라키스-(트라이페닐 포스핀)팔라듐을 첨가하고, 혼합물을 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 완료된 후, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 수상을 분리해내고, 유기 상을 메틸 3급-부틸 에터(MTB 에터)로 세척하고, 합친 유기 상을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 조질 생성물을 다이클로로메탄으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 헵탄으로부터 재결정화하여, 76.9 g의 생성물을 무색의 결정으로서 수득하였다.

^1H NMR(500 MHz, DMSO-d_6) δ = 0.89 ppm(t, 6.88 Hz, 3H, CH_3), 1.08(t, 7.51 Hz, 3H, CH_3), 1.31(m_c , 4H, CH_2), 1.61(q, 7.58 Hz, 2H, CH_2), 2.62(q, 중첩, t, 4H, 벤질 CH_2), 6.83(d, 8.5 Hz, 2H, 방향족 H), 7.13(d, 8.5 Hz, 2H, 방향족 H), 7.17(d, 7.9 Hz, 1H, 방향족 H), 7.28(d, 8.2 Hz, 2H, 방향족 H), 7.46(dd, 7.93, 1.97 Hz, 1H, 방향족 H), 7.54 (d, 1.88 Hz, 1H, 방향족 H), 7.59(d, 8.17 Hz, 2H, 방향족 H), 9.44(s, 1H, 방향족 OH).

3) 3-브로모-2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-4-올 **C**의 합성

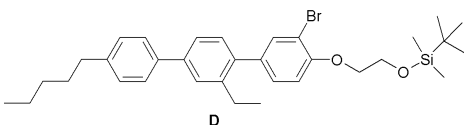


30.0 g(85.9 mmol)의 알코올 **B**를 1100 ml의 다이클로로메탄 중에 용해시키고, -48°C 로 냉각시키고, 1100 ml의 다이클로로메탄 중의 5.28 ml(103 mmol)의 브롬을 40분에 걸쳐 이 온도에서 천천히 첨가하였다. 혼합물을 추가의 1시간 동안 이 온도에서 교반시키고, 박막 크로마토그래피(톨루엔)로 확인하였다. 과량의 브롬을 포화 NaHSO_3 용액을 사용하여 환원시키고, 상을 분리시켰다. 수성 상을 다이클로로메탄으로 추출하고, 합친 유기 상을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 진공 하에 증발시켰다. 조질 생성물을 톨루엔으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 35.3 g의 생성물을 백색 고체로서 수득하였다.

^1H NMR(500 MHz, CDCl_3)

δ = 0.91 ppm(t, 6.99 Hz, 3H, CH_3), 1.15(t, 7.53 Hz, 3H, CH_3), 1.36(m_c , 4H, CH_2), 1.66(m_c , 2H, CH_2), 2.65(m_c , 4H, 벤질 CH_2), 5.5(s, 1H, 방향족 OH), 7.06(d, 8.3 Hz, 1H, 방향족 H), 7.20(dd, 8.28, 2.07 Hz, 중첩, d 7.85 Hz, 2H, 방향족 H), 7.26(d, 8.1 Hz, 2H, 방향족 H), 7.43(dd, 7.87, 1.87 Hz, 2H, 방향족 H), 7.46(d, 2.01 Hz, 1H, 방향족 H), 7.503 (d, 1.71 Hz, 1H, 방향족 H), 7.54(d, 8.1 Hz, 2H, 방향족 H).

4) [2-(3-브로모-2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-4-일옥시)-에톡시]-3급-부틸다이메틸실란 **D**의 합성



2.9 g(71.7 mmol)의 NaH (파라핀 오일 중 60% 현탁액)를 먼저 93 ml의 다이메틸포름아미드(DMF)에 도입하고, 교반시키면서 2°C 로 냉각시키고, DMF 중의 알코올 **C**의 용액을 온도가 12°C 를 초과하지 않는 속도로 천천히 첨가하였다. 첨가를 완료한 후, 혼합물을 실온(RT)으로 가온시키고, 추가로 2시간 동안 교반시켰다(노르스름한 용

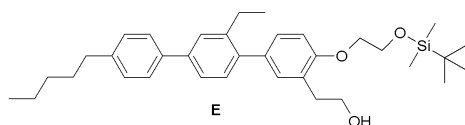
액). DMF 중의 17.2 g(71.7 mmol)의 (2-브로모에톡시)--3급-부틸다이메틸실란을 이어서 천천히 첨가하고, 혼합물을 50℃에서 18시간 동안 교반시켰다. 반응 용액을 얼음물에 조심스럽게 첨가하고, MTB 에터로 추출하였다. 합친 유기 상을 물로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 수득된 조질 생성물을 톨루엔으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 진공 중에 농축시키고, 27.9 g의 목적 생성물을 수득하였다.

[0394] MS(EI): 582.4 [M⁺]

[0395] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0396] δ = 0.00 ppm(s, 6H, Si-CH₃), 0.78(s, 12H, Si-C(CH₃)₃), 1.01(t, 7.52 Hz, CH₃), 1.23(m_c, 4H, CH₂), 1.52(m_c, 2H, CH₂), 2.51(m_c, 4H, 벤질 CH₂), 3.91(t, 5.24 Hz, 2H, CH₂O), 4.02(t, 5.24 Hz, 2H CH₂O), 6.84(d, 8.45 Hz, 1H, 방향족 H), 7.08(dd, 8.37, 2.33 Hz, 중첩, d 7.66 Hz, 2H, 방향족 H), 7.12(d, 8.2 Hz, 2H, 방향족 H), 7.29(dd, 7.86, 1.9 Hz, 2H, 방향족 H) 7.36(d, 1.79 Hz, 1H, 방향족 H), 7.41 (d, 8.12 Hz, 중첩, d, 2.15 Hz, 3H, 방향족 H).

[0397] 5) 2-{4-[2-(3급-부틸다이메틸실란일옥시)-에톡시]-2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-3-일}-에탄올 **E**의 합성



[0398]

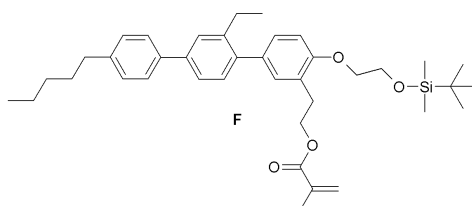
[0399] 8.5 g(14 mmol)의 브로마이드 **D**를 41 ml의 테트라하이드로퓨란(THF) 중에 용해시키고, -78℃로 냉각시키고, 10.6 ml(17 mmol)의 부틸리튬(THF 중의 1.6 몰 용액)을 천천히 첨가하였다. 6.23 ml(16 mmol)의 에틸렌 옥사이드(THF 중의 2.5 내지 3.3 몰)를 이어서 첨가하고, 혼합물을 추가로 30분 동안 교반시켰다. 10 ml의 냉각된 THF 중의 2.13 ml(17 mmol)의 보론 트라이플루오라이드/다이에틸 에터 착물을 이어서 -78℃에서 천천히 첨가하고(발열), 혼합물을 이 온도에서 2시간 동안 교반시켰다. 반응 용액을 이어서 실온으로 2시간 동안 가온시키고, 얼음물에 부었다. 혼합물을 MTB 에터로 추출하고, 유기 상을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 수득된 조질 생성물을 헵탄 / 에틸 아세테이트(H / EA) 9:1, 이어서 H / EA(4:1)로 실리카 겔 상에서 정제하고, 생성물 분획을 진공 중에 농축시키고, 3.61 g의 생성물을 오일로써 수득하였다.

[0400] MS(EI): 546.4 [M⁺]

[0401] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0402] δ = 0.00 ppm(s, 6H, Si-CH₃), 0.81(s, 12H, Si-C(CH₃)₃), 1.03(t, 7.53 Hz, CH₃), 1.24(m_c, 4H, CH₂), 1.54(m_c, 2H, CH₂), 1.73(t, 6.25 Hz, 1H, OH), 2.54(m_c, 4H, 벤질 CH₂), 2.85(t, 6.3 Hz, 2H, CH₂-O), 3.76(q, 6.15 Hz, 2H, CH₂-OH) 3.88(t, 5.18 Hz, 2H, CH₂O), 3.99(t, 5.18 Hz, 2H CH₂O), 6.81(d, 8.26 Hz, 1H, 방향족 H), 7.01-7.08(m 2H, 방향족 H), 7.10-7.16(d, 중첩, 단일항, 3H, 방향족 H), 7.30(dd, 7.86, 1.92 Hz, 2H, 방향족 H), 7.38(d, 1.8 Hz, 1H, 방향족 H), 7.42 (d, 8.14, 2H, 방향족 H).

[0403] 6) 2-메틸아크릴산 2-{4-[2-(3급-부틸다이메틸실란일옥시)-에톡시]-2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-3-일}-에틸 에스터 **F**의 합성



[0404]

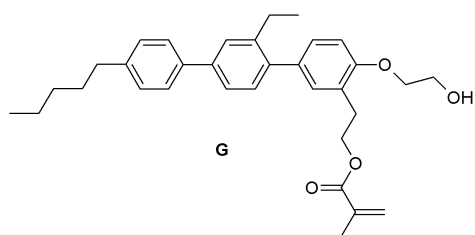
[0405] 8.50 g(15.5 mmol)의 알코올 **E**, 1.84 ml(21.8 mmol)의 메트아크릴산 및 0.19 g(1.55 mmol)의 4-(다이메틸아미노)-피리딘을 5℃로 냉각된 100 ml의 다이클로로메탄 중에 용해시켰다. 40 ml의 다이클로로메탄 중에 용해된 3.37 g(21.8 mmol)의 4-N-(3-다이메틸아미노프로필)-N'-에틸카보다이이미드 하이드로클로라이드를 천천히 첨가하고, 혼합물을 실온에서 72시간 동안 교반시켰다. 반응 혼합물을 다이클로로메탄으로 희석시키고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 최대 30℃에서 진공 중에 농축시키고, 7.5 g의 생성물을 투명한 오일로서 수득하였다.

[0406] MS(EI): 614.5 [M⁺]

[0407] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0408] δ = 0.00 ppm(s, 6H, Si-CH₃), 0.81(s, 12H, Si-C(CH₃)₃), 1.02(t, 7.49 Hz, CH₃), 1.24(m_c, 4H, CH₂), 1.55(m_c, 2H, CH₂), 1.79(s, 3H, CH₃), 2.53(m_c, 4H, 벤질 CH₂), 2.95(t, 6.89 Hz, 2H, CH₂-O), 3.89(t, 5.11 Hz, 2H, CH₂O), 3.99(t, 5.14 Hz, 2H CH₂O), 4.28(t, 6.94, 2H, CH₂-O), 5.39(s, 1H, 올레핀계 H), 5.95,(s, 1H, 올레핀계 H), 6.8(d, 8.24 Hz, 1H, 방향족 H), 7.03-7.06(m 2H, 방향족 H), 7.10(d, 7.86 Hz, 1H, 방향족 H), 7.14(d, 8.76 Hz, 2H, 방향족 H), 7.30(dd, 7.86, 1.82 Hz, 2H, 방향족 H), 7.38(d, 1.63 Hz, 1H, 방향족 H), 7.43 (d, 8.07, 2H, 방향족 H).

[0409] 7) 2-메틸아크릴산 2-[2'-에틸-4-(2-하이드록시에톡시)-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-3-일]-에틸 에스터 **G**의 합성



[0410]

[0411] 7.60 g(12.2 mmol)의 화합물 **F**를 150 ml의 THF 중에 용해시키고, 2℃로 냉각시켰다. 7.01 ml(14.0 mmol)의 HCl(2 N)을 이어서 첨가하고, 혼합물을 2 내지 4℃로 1시간 동안 교반시켰다. 반응 용액을 이어서 실온으로 3 시간 동안 가온시키고, NaHCO₃ 용액을 사용하여 조심스럽게 pH 7로 조정하였다. 혼합물을 MTB 에터로 추출하고, 유기 상을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 진공 하에 증발시켰다. 조질 생성물을 헵탄 / 에틸 아세테이트 (1:1)로 실리카 겔 상에서 정제하고, 생성물 분획을 합치고, -20℃에서 아세토나이트릴(1:4)로부터 재결정화하였다. 수득된 생성물을 진구-튜브 증류 장치(아세토나이트릴을 제거) 내에서 60℃에서 건조시키고, 3.2 g의 생성물을 백색 고체로서 수득하였다.

[0412] 상: Tg -16 C 58 I

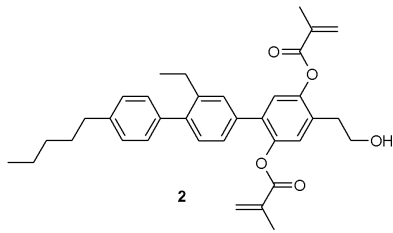
[0413] MS(EI) 500.3 [M⁺]

[0414] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

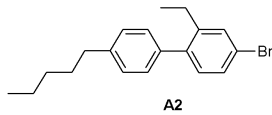
[0415] δ = 0.91 ppm(t, 6.88 Hz, CH₃), 1.14(t, 7.52Hz, 3H, CH₃), 1.37(m_c, 4H, CH₂), 1.67(m, 2H, CH₂), 1.04(s, 3H, CH₃), 2.65(m_c, 4H, 벤질 CH₂), 3.04(t, 7.74 Hz, 2H, CH₂-O), 3.19(t, 6.81 Hz, 1H, OH), 4.03(m_c, 2H, CH₂O), 4.15(t, 4.02 Hz, 2H CH₂O), 4.42(t, 7.5 Hz, 2H, CH₂-O), 5.56(s, 1H, 올레핀계 H), 6.12,(s, 1H, 올레핀계 H), 6.91(d, 8.32 Hz, 1H, 방향족 H), 7.30-7.13(m, 5H(CHCl₃과 중첩), 방향족 H), 7.42(dd, 7.87, 1.91 Hz, 1H, 방향족 H), 7.506(d, 1.76 Hz, 1H, 방향족 H), 7.54(d, 8.15 Hz, 2H, 방향족 H).

[0416] 실시예 2

[0417] 2-메틸아크릴산 2'-에틸-4''-(2-하이드록시에틸)-6''-(2-메틸-아크릴로일옥시)-4-펜틸-[1,1';4',1'']터페닐-3''-일 에스터 **2**의 합성



1) 4-브로모-2-에틸-4'-펜틸바이페닐 **A2**의 합성

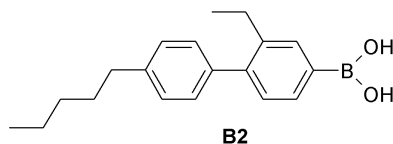


45.0 g(234 mmol)의 4-펜틸페닐붕산, 70.0 g(225 mmol)의 4-브로모-2-에틸-1-요오드벤젠을 300 ml의 톨루엔, 200 ml의 에탄올 및 200 ml의 Na_2CO_3 용액(2 몰)에 용해시키고, 아르곤으로 덮었다. 8.00 g(6.92 mmol)의 테트라키스(트라이페닐포스핀)-팔라듐(0)을 이어서 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 완료된 후, 혼합물을 실온으로 가온시키고, 물을 첨가하고, 상을 분리시키고, 유기 상을 물로 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 조질 생성물(오렌지색 오일)을 헵탄으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 56.2 g의 생성물을 무색의 오일로서 수득하였다.

^1H NMR(500 MHz, CDCl_3)

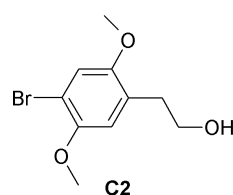
δ = 0.91 ppm(t, 6.97Hz, 3H, CH_3), 1.09(t, 7.58 Hz, 3H, CH_3), 1.36(m_c , 4H, CH_2), 1.66(m_c , 2H, CH_2), 2.56(q, 7.55Hz, 2H, 벤질 CH_2), 2.64(dd, 7.71Hz, 2H, 벤질 CH_2), 7.05(d, 8.15Hz, 1H, 방향족 H), 7.16(d, 8.21 Hz, 2H, 방향족 H), 7.21(d, 8.14 Hz, 2H, 방향족 H), 7.3(dd, 8.14, 2.12Hz, 1H, 방향족 H), 7.42(d, 1H, 2.08Hz, 1H, 벤질 H), 7.24(d, 8.2Hz, 2H, 방향족 H), 7.27(d, 8.2Hz, 2H, 방향족 H), 7.35(dd, 7.87, 1.71Hz, 1H, 방향족 H), 7.42(d, 1.53 Hz, 1H, 방향족 H).

2) 2-에틸-4'-펜틸바이페닐-4-붕산 **B2**의 합성



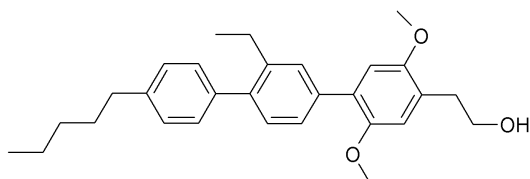
65.0 g(196 mmol)의 브로마이드 **A2**를 475 ml의 테트라하이드로퓨란(THF) 중에 용해시키고, -78°C 로 냉각시키고, 128.8 ml(206 mmol, n-헥산 중의 1.6 몰)의 n-부틸리튬을 적가하였다. 반응 혼합물을 -78°C 에서 추가로 60분 동안 교반시키고, 24.5 ml(216 mmol)의 트라이메틸보레이트를 이 온도에서 적가하였다. 혼합물을 이 온도에서 추가로 1시간 동안 교반시키고, 이어서 0°C 로 냉각시키고, 0°C 에서 2 N 염산을 사용하여 조심스럽게 산성화시키고, 짧게 교반시키고, 상을 분리시켰다. 수성 상을 MTB 에터로 추출하고, 합친 유기 상을 포화 나트륨 클로라이드 용액으로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 증발시켰다. 조질 생성물을 먼저 다이클로로메탄 이어서 MTB 에터로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 진공 하에 증발시켜서, 43.7 g의 생성물을 스메틱 고체로서 수득하였다.

3) 2-(4-브로모-2,5-다이메톡시페닐)-에탄올 **C2**의 합성



[0429] 10.0 g(33.8 mmol)의 1,4-다이브로모-2,5-다이메톡시벤젠을 300 ml의 THF 중에 용해시키고, -78℃로 냉각시키고, 23.0 ml(36.8 mmol, n-헥산 중의 1.6 몰)의 n-부틸리튬을 적가하고, 혼합물을 추가의 5분 동안 교반시켰다. 2℃로 냉각된 20 ml의 THF 중의 1.70 g(38.6 mmol)의 에틸렌 옥사이드를 이어서 반응 혼합물에 넣었다. 5.00 ml(39.8 mmol)의 보론 트라이플루오라이드/다이에틸 에터 착물을 이어서 -78℃에서 천천히 적가하고, 이 온도에서 추가로 15분 동안 교반을 지속하였다. 박막 크로마토그래피로 반응을 확인한 후, 차가운 상태로 반응물을 5.0 ml의 이소프로판올로 켄치하고, 0℃로 가온시키고, 물 및 MTB 에터를 천천히 첨가하고, 교반을 지속하였다. 상을 분리시키고, 수상을 MTB 에터로 추출하고, 유기 상을 합치고, 포화 나트륨 클로라이드 용액으로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 진공 하에 증발시켰다. 조질 생성물을 다이클로로메탄으로 / MTB 에터(9:1)로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 5.8 g의 생성물을 약간 황색인 오일로서 수득하였다.

[0430] 4) 2-(2'-에틸-2",5"-다이메톡시-4-펜틸[1,1';4',1"]터페닐-4")-에탄올 **D2**의 합성



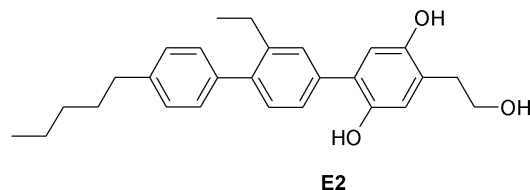
[0431]

[0432] 23.0 g(톨루엔 중의 25 중량%, 19.4 mmol)의 알코올 **C2** 및 5.70 g(18.7 mmol, 85%)의 **B2**를 200 ml의 톨루엔, 100 ml의 에탄올 및 40 ml(1 mol/l, 40 mmol)의 Na₂CO₃의 혼합물 중에 용해시키고, 아르곤을 통과시켜 탈기시켰다. 100 mg(0.87 mmol)의 테트라키스-(트라이페닐포스핀)-팔라듐(0)을 이어서 첨가하고, 혼합물을 60분 동안 환류시켰다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 물을 첨가하였다. 상을 분리시키고, 유기 상을 물로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 조질 생성물을 다이클로로메탄 MTB 에터(95:5)의 혼합물로 실리카 겔을 통해 여과시키고 진공 하에 증발시키고, 6.0 g의 생성물을 연한 갈색 오일로서 수득하였다.

[0433] ¹H NMR(500 MHz, DMSO-d₆)

[0434] δ = 0.89 ppm(t, 6.8 Hz, 3H, CH₃), 1.06(t, 7.54Hz, 3H, CH₃), 1.33(m_c, 4H, CH₂), 1.63(q, 7.51 Hz, 2H, CH₂), 2.67-2.54(m, 4H, 벤질 CH₂), 2.77(t, 7.25Hz, 2H, 벤질 CH₂), 3.60(dt, 7.21, 5.49 Hz, 2H, CH₂CH₂OH), 3.72(s, 3H, OCH₃), 3.79(s, 3H, OCH₃), 4.62(t, 5.36 Hz, 1H, OH), 6.90(s, 1H, 방향족 H), 6.95(s, 1H, 방향족 H), 7.15(d, 7.86 Hz, 1H, 방향족 H).

[0435] 1) 2'-에틸-4"-(2-하이드록시에틸)-4-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-2",5"-다이올 **E2**의 합성



[0436]

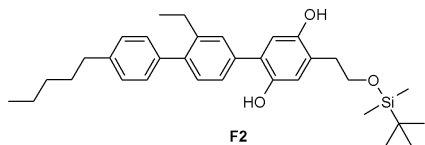
[0437] 4.70 g(10.9 mmol)의 알코올 **D2**를 -28℃로 냉각된 50 ml의 다이클로로메탄 중에 용해시켰다. 2.3 ml(24.2 mmol)의 보론 트라이브로마이드를 천천히 첨가하고, 혼합물을 -25℃에서 3시간 동안 교반시켰다. 반응이 완료된 후, 반응 혼합물을 얼음물에 교반시켜 첨가하고, 2 N 나트륨 하이드록사이드 용액을 사용하여 천천히 중화시켰다. 상을 분리시키고, 수상을 다이클로로메탄으로 추출하고, 합친 유기 상을 물로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 증발시켰다. 조질 생성물(옐로우 오일)을 먼저 다이클로로메탄 및 MTB 에터(9:1)로 이어서(3:1)로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 진공 중에 농축시켰다. 형성된 생성물을 톨루엔으로부터 5℃에서 재결정화시키고, 1.7 g의 생성물을 무색의 결정으로서 수득하였다.

[0438] ¹H NMR(500 MHz, DMSO-d₆)

[0439] δ = 0.89 ppm(t, 6.83 Hz, 3H, CH₃), 1.07(t, 7.55Hz, 3H, CH₃), 1.34(m_c, 4H, CH₂), 1.64(q, 7.3 Hz, 2H,

CH₂), 2.71-2.55(m, 6H, 벤질 CH₂), 3.58(dt, 7.0, 5.01 Hz, 2H, CH₂CH₂OH), 4.70,(t, 5.07 Hz, CH₂OH), 6.68(s, 1H, 방향족 H), 6.74(s, 1H, 방향족 H), 7.15(d, 7.89 Hz, 방향족 H), 7.25(d, 8.26 Hz, 2H, 방향족 H), 7.28(d, 8.26 Hz, 2H, 방향족 H), 7.37(dd, 7.9, 1.8 Hz, 1H, 방향족 H), 7.43(d, 1.60 Hz, 1H, 방향족 H), 8.67(s, 2H, 방향족 OH).

[0440] 2) 4"-[2-(3급-부틸다이메틸실란일옥시)-에틸]-2'-에틸-4-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-2",5"-다이올 **F2**의 합성



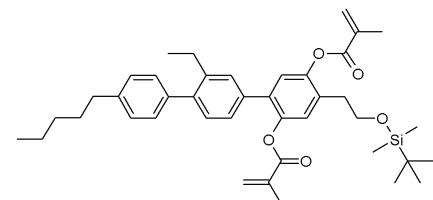
[0441]

[0442] 1.20 g(2.96 mmol)의 알코올 **E2** 및 0.214 ml(3.23 mmol)의 이미다졸을 9.0 ml의 THF 중에 용해시키고, 2℃로 냉각시키고, 4 ml의 THF 중에 용해된 490 mg(3.25 mmol)의 3급-부틸클로로다이메틸실란을 이어서 30분에 걸쳐 적가하고, 혼합물을 이 온도에서 60분 동안 교반시켰다. 암모늄 클로라이드 용액을 반응 혼합물에 첨가하고, 이를 이어서 MTB 에터로 추출하였다. 유기 상을 분리해내고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켜서, 오렌지색 오일을 제공하고, 이를 톨루엔 및 톨루엔 및 에틸 아세테이트(98:2)로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 1.0 g의 생성물을 황색 오일로서 수득하였다.

[0443] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0444] δ = 0.00 ppm(s, 6H, Si(CH₃)₂), 0.82(s, 12H, SiC(CH₃)₃), 1.02(t, 7.56Hz, 3H, CH₃), 1.26(m_c, 4H, CH₂), 1.57(m_c, 2H, CH₂), 2.55(m_c, 4H, 벤질 CH), 2.78(t, 4.98Hz, 2H, CH₂CH₂OSi), 3.85(t, 5.1Hz, 2H, CH₂OSi), 4.82(s, 1H, 방향족 OH), 6.59(s, 1H, 방향족 H), 6.79(s, 1H, 방향족 H) 7.13(2xd(중첩) 4H, 방향족 H), 7.18(d, 7.78Hz, 1H, 방향족 H), 7.21(dd, 7.78, 1.7Hz, 1H, 방향족 H), 7.29,(d, 1.4Hz, 1H, 방향족 H), 7.82(s, 1H, 방향족 OH).

[0445] 3) 2-메틸아크릴산 4"-[2-(3급-부틸다이메틸실란일옥시)-에틸]-2'-에틸-6''-(2-메틸아크릴로일옥시)-4-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-3"-일 에스터 **G2**의 합성



[0446]

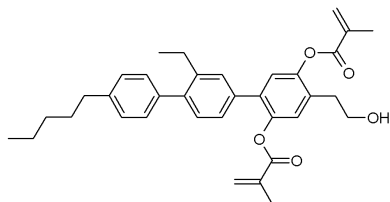
[0447] 2.30 g(4.43 mmol)의 페놀 **F2**, 1.0 ml(11.8 mmol)의 메트아크릴산 및 30.0 mg(0.25 mmol)의 4-(다이메틸아미노)-피리딘을 1℃로 냉각된 25 ml의 다이클로로메탄 중에 용해시켰다. 20 ml의 다이클로로메탄 중에 용해된 1.80 g(11.6 mmol)의 1-(3-다이메틸아미노-프로필)-3-에틸카보다이미드(EDC)를 이어서 1 내지 4℃에서 적가하고, 혼합물을 이어서 실온으로 18시간 동안 교반시켰다. 0.4 ml의 메트아크릴산 및 0.6 g의 EDC를 이어서 실온으로 다시 첨가하고, 혼합물을 실온에서 추가로 18시간 동안 교반시켰다. 반응 용액을 이어서 바로 100 ml 실리카-겔 프릿으로 여과시키고, 다이클로로메탄으로 진공 하에 증발시켜서, 3.3 g의 황색 조질 생성물을 부분 결정 고체로서 수득하고, 이를 10 ml의 헵탄/에틸 아세테이트(EA)(95:5) 중에 용해시키고, 비용해된 성분을 여과해냈다. 혼합물을 이어서 헵탄 / EA(95:5)를 사용하여 120 g의 실리카 겔을 통해 여과시키고, 2.4 g의 생성물을 황색 오일로서 수득하였다.

[0448] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0449] δ = 0.00 ppm(s, 6H, Si(CH₃)₂), 0.86(s, 12H, SiC(CH₃)₃), 1.06(t, 7.55Hz, 3H, CH₃), 1.35(m_c, 4H, CH₂), 1.65(m_c, 2H, CH₂), 1.93(s, 3H, CH₃), 2.07(s, 3H, CH₃), 2.58(q, 7.52, 2H, 벤질 CH₂), 2.63(t, 7.91, 2H, 벤질 CH₂), 2.78(t, 7.23 Hz, 2H, CH₂CH₂OSi), 3.79(t, 7.26 Hz, 2H, CH₂OSi), 5.62(s, 1H, 올레핀계 H), 5.77(s, 1H, 올레핀계 H), 6.18(s, 1H, 올레핀계 H), 6.37(s, 1H, 올레핀계 H), 7.12(s, 1H, 방향족 H), 7.16(d, 7.86

Hz, 1H, 방향족 H), 7.18(s, 1H, 방향족 H), 7.19,(s, 4H, 방향족 H), 7.24(dd,(CHCl₃과 중첩, 1H, 방향족 H), 7.32,(d, 1.39 Hz, 1H, 방향족 H).

[0450] 2-메틸아크릴산 2'-에틸-4''-(2-하이드록시에틸)-6''-(2-메틸-아크릴로일옥시)-4-펜틸-[1,1';4',1'']테페닐-3''-일 에스터 **2**의 합성



[0451]

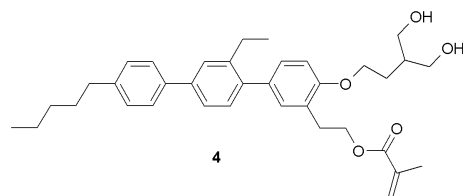
[0452] 2.20 g(3.36 mmol)의 화합물 **G2**를 50 ml의 THF 중에 용해시키고, 2℃로 냉각시켰다. 2.00 ml(4.00 mmol)의 염산(2N)을 이어서 적가하고, 혼합물을 실온까지 3시간 동안 교반시켰다. 혼합물을 이어서 나트륨 수소카보네이트 용액으로 냉각시키며 중화시키고, 물 및 MTB 에터를 첨가하였다. 상을 분리시키고, 수상을 이어서 MTB 에터로 추출하였다. 합친 유기 상을 물로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켜서, 조질 생성물을 황색 오일로서 수득하고, 이를 다이클로로메탄 / MTB 에터(98:2)로 200 g의 실리카 겔을 통해 여과시켰다. 수득된 생성물(무색의 오일)을 진공 중에 농축시키고, 이어서 용매가 더 이상 없어지지 않을 때까지 60℃ 및 0.09 mbar에서 건조시켜서, 생성물(700 mg)을 무색의 점성 수지로 수득하였다.

[0453] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0454] δ = 0.92(t, 6.63Hz, 3H, CH₃), 1.08(t, 7.54Hz, 3H, CH₃), 1.37(m, 4H, CH₂), 1.67(m, 3H, CH₂, OH), 1.94(s, 3H, CH₃), 2.09(s, 3H, CH₃), 2.60(q, 7.53 Hz, 2H, 벤질 CH₂), 2.70(t, 7.9 Hz, 2H, 벤질 H), 2.85,(t, 6.4 Hz, 2H, CH₂CH₂OH), 3.87(q, 6.24 Hz, 2H, CH₂OH), 5.66(s, 1H, 올레핀계 H), 5.79(s, 1H, 올레핀계 H), 6.21(s, 1H, 올레핀계 H), 6.39(s, 1H, 올레핀계 H), 7.17(s, 1H, 방향족 H), 7.19(d, 7.87 Hz, 1 H, 방향족 H), 7.21, 7.22(2 x S(중첩) 5H, 방향족 H), 7.26(dd(CHCl₃과 중첩), 1H, 방향족 H), 7.33(d, 1.59 Hz, 1H, 방향족 H).

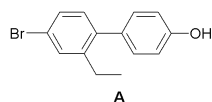
[0455] 실시예 3

[0456] 2-{5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-2-[4-하이드록시-3-(하이드록시-메틸)부톡시]페닐}에틸 2-메틸프로프-2-에노 에이트 **4**의 합성



[0457]

[0458] 1) 4'-브로모-2'-에틸바이페닐-4-올 **A**의 합성

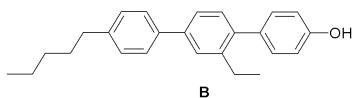


[0459]

[0460] 223 ml의 물을 110.3 g(1.04 mol)의 Na₂CO₃에 첨가하고, 154 g(0.49 mol)의 4-브로모-2-에틸-1-요오드벤젠, 75.1 g(0.54 mol)의 4-하이드록시-페놀-붕산 및 850 ml의 1,4-다이옥산을 첨가하고, 혼합물을 탈기시켰다. 14.5 g(19.8 mmol)의 비스(1,1-다이페닐포스포노페로센)-팔라듐(II) 클로라이드를 첨가하고, 혼합물을 80℃에서 18시간 동안 교반시켰다. 반응이 완료된 후(헵탄 / 에틸 아세테이트 1:1로 박막 크로마토그래피로 확인), 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 물 및 메틸 3급-부틸 에터로 희석시키고, 2 N HCl로 pH 1 내지 2로 산성화시켰다. 상을 분리시키고, 수상을 메틸 3급-부틸 에터로 추출하고, 합친 유기 상을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과

시키고, 진공 중에 증발시켰다. 수득된 조질 생성물을 헵탄 / 에틸 아세테이트(8:2)로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 96 g의 생성물 **A**를 갈색 오일로서 수득하였다.

[0461] 2) 2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-4-올 **B**의 합성



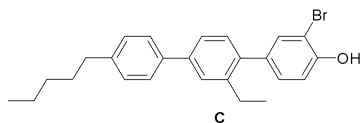
[0462]

[0463] 102 g(514 mmol)의 4-펜틸-1-벤젠붕산 및 135 g(467 mmol)의 브로마이드 **A**를 743 ml의 톨루엔, 270 ml의 에탄올 및 350 ml의 2 N Na₂CO₃의 혼합물 중에 용해시키고, 탈기시켰다. 8.1 g(7.0 mmol)의 테트라키스-(트라이페닐포스핀)팔라듐을 첨가하고, 혼합물을 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 완료된 후, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 수상을 분리해내고, 유기 상을 메틸 3급-부틸 에터(MTB 에터)로 세척하고, 합친 유기 상을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 조질 생성물을 다이클로로메탄으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 헵탄으로부터 재결정화하여, 76.9 g의 생성물을 무색의 결정으로서 수득하였다.

[0464] ¹H NMR(500 MHz, DMSO-d₆)

[0465] δ = 0.89 ppm(t, 6.88 Hz, 3H, CH₃), 1.08(t, 7.51 Hz, 3H, CH₃), 1.31(m_c, 4H, CH₂), 1.61(q, 7.58 Hz, 2H, CH₂), 2.62(q, 중첩, t, 4H, 벤질 CH₂), 6.83(d, 8.5 Hz, 2H, 방향족 H), 7.13(d, 8.5 Hz, 2H, 방향족 H), 7.17(d, 7.9 Hz, 1H, 방향족 H), 7.28(d, 8.2 Hz, 2H, 방향족 H), 7.46(dd, 7.93, 1.97 Hz, 1H, 방향족 H), 7.54 (d, 1.88 Hz, 1H, 방향족 H), 7.59(d, 8.17 Hz, 2H, 방향족 H), 9.44(s, 1H, 방향족 OH).

[0466] 3) 3-브로모-2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-4-올 **C**의 합성



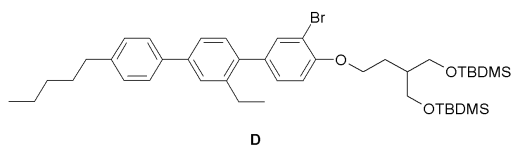
[0467]

[0468] 30.0 g(85.9 mmol)의 알코올 **B**를 -48℃로 냉각된 1100 ml의 다이클로로메탄 중에 용해시키고, 1100 ml의 다이클로로메탄 중의 5.28 ml(103 mmol)의 브롬을 이 온도에서 40분 동안 천천히 첨가하였다. 혼합물을 이 온도에서 추가로 1시간 동안 교반시키고, 박막 크로마토그래피(톨루엔)로 확인하였다. 과량의 브롬을 포화 NaHSO₃ 용액을 사용하여 환원시키고, 상을 분리시켰다. 수성 상을 다이클로로메탄으로 추출하고, 합친 유기 상을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 진공 하에 증발시켰다. 조질 생성물을 톨루엔으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 35.3 g의 생성물을 백색 고체로서 수득하였다.

[0469] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0470] δ = 0.91 ppm(t, 6.99 Hz, 3H, CH₃), 1.15(t, 7.53 Hz, 3H, CH₃), 1.36(m_c, 4H, CH₂), 1.66(m_c, 2H, CH₂), 2.65(m_c, 4H, 벤질 CH₂), 5.5(s, 1H, 방향족 OH), 7.06(d, 8.3 Hz, 1H, 방향족 H), 7.20(dd, 8.28, 2.07 Hz, 중첩, d 7.85 Hz, 2H, 방향족 H), 7.26(d, 8.1 Hz, 2H, 방향족 H), 7.43(dd, 7.87, 1.87 Hz, 2H, 방향족 H), 7.46(d, 2.01 Hz, 1H, 방향족 H), 7.503 (d, 1.71 Hz, 1H, 방향족 H), 7.54(d, 8.1 Hz, 2H, 방향족 H).

[0471] 4) 6-(2-(2-브로모-4-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-페녹시)-에틸)-2,2,3,3,9,9,10,10-옥타메틸-4,8-다이옥사-3,9-다이실라운데칸 **D**의 합성



[0472]

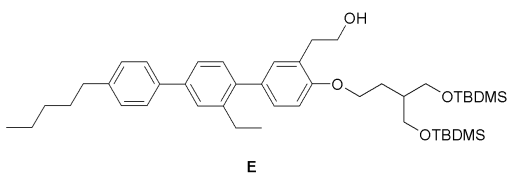
[0473] 10.0 g(24.0 mmol)의 브로마이드 **C**, 8.64 g(25.0 mmol)의 4-[(3급-부틸-다이메틸-실릴)옥시]-3-[[[(3급-부틸다이메틸실릴)옥시]-메틸]부탄-1-올 **K** 및 7.03 g(26.81 mmol)의 트라이페닐포스핀을 76.5 ml의 테트라하이드로-

퓨란(THF) 중에 용해시켰다. 5.46 ml(27.9 mmol)의 다이이소프로필 아조다이크복실레이트를 이어서 실온에서 반응 용액에 적가하였다. 투명하고 약간 황색인 형성된 반응 용액을 실온에서 20시간 동안 교반시켰다. 반응 혼합물을 진공 중에 농축시키고, 헵탄 / 다이클로로메탄으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 17.45 g의 목적 생성물을 수득하였다.

¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

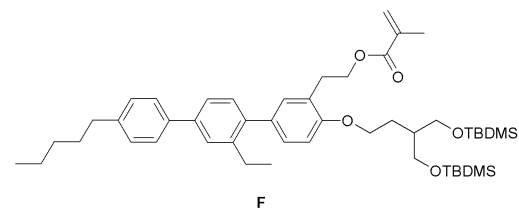
δ = 0.00 ppm(s, 12H Si(CH₃)₂), 0.854(m_c, 21H, 2 X Si(C(CH₃)₃), CH₃), 1.09(t, 7.5 Hz, 3H, CH₃), 1.31(m_c, 4H), 1.61(m_c, 2H, CH₂), 1.83(q, 6.58 Hz, 2H, 벤질 CH₂), 1.91(sept., 5.64 Hz, 1H, CH₂CH(CH₂OTBDMS)₂), 2.59(m_c, 4H, 2 x CH₂), 3.62(m_c, 4H, CH₂OTBDMS), 4.12(t, 6.49 Hz, OCH₂), 6.87(d, 8.43 Hz, 1H, 방향족 H), 7.15(dd(중첩), 7.83, 2.54 Hz, 1H, 방향족 H), 7.16(d, 7.83 Hz, 1H, 방향족 H), 7.21(d, 7.25 Hz, 2H, 방향족 H), 7.37(dd, 7.86, 1.84 Hz, 1H, 방향족 H), 7.44(d, 1.68 Hz, 1H, 방향족 H), 7.47(d(중첩), 1.90 Hz, 1H, 방향족 H), 7.49(d(중첩), 8.22 Hz, 2H, 방향족 H).

5) 2-(2-{4-[(3급-부틸다이메틸실릴)옥시]-3-[(3급-부틸-다이메틸-실릴)-옥시]메틸}부톡시)-5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]페닐)에탄올 **E**의 합성



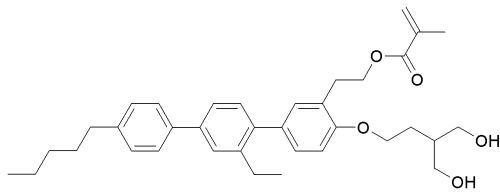
17.5 g(23.0 mmol)의 브로마이드 **D**를 65.0 ml의 테트라하이드로퓨란(THF) 중에 용해시키고, -70℃로 냉각시키고, 17.1 ml(27.0 mmol)의 부틸리튬(헥산 중의 1.6 M 용액)을 이 온도에서 적가하였다. 10.0 ml의 냉각된(-25℃) THF 중의 8.70 ml(25.0 mmol)의 에틸렌 옥사이드 용액을 이어서 재빨리 첨가하였다. 반응 혼합물을 -70℃에서 45분 동안 교반시키고, -25℃에서 THF 중의 3.45 ml(27.0 mmol)의 보론 트라이플루오라이드 용액을 이어서 조심스럽게 적가하였다. 반응 혼합물을 이어서 -70℃에서 3시간 동안 교반시키고, 20 ml의 MTB 에테르로 희석시키고, 실온으로 2시간 동안 가온시켰다. 이어서 조심스럽게 얼음물로 적가하고, MTB 에테르로 추출하였다. 합친 유기 상을 포화 나트륨 클로라이드 용액으로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 증발시켰다. 수득된 조질 생성물을 헵탄 / 에틸 아세테이트(9:1, 이어서 4:1)로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 진공 중에 농축시켜서, HPLC에 따라 99.4%의 순도를 갖는 7.5 g의 생성물을 수득하였다.

6) 2-(2-{4-[(3급-부틸다이메틸실릴)옥시]-3-[(3급-부틸다이메틸실릴)-옥시]메틸}부톡시)-5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]페닐)에틸 2-메틸-프로프-2-에노에이트 **F**의 합성



17.2 g(24.0 mmol)의 알코올 **E**, 4.50 ml(53.1 mmol)의 메타크릴산(안정화된) 및 0.33 g(2.71 mmol)의 4-(다이메틸아미노)-피리딘을 150 ml의 다이클로로메탄(DCM) 중에 실온에서 용해시키고, 2℃로 냉각시켰다. 50 ml의 다이클로로메탄 중의 9.20 ml(53.3 mmol)의 1-(3-다이메틸아미노프로필)-3-에틸-카보다이어미드를 용액으로서 2 내지 5℃에서 적가하고, 혼합물을 실온에서 20시간 동안 교반시켰다. 반응 용액을 이어서 DCM으로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 99.6%의 순도(HPLC)를 갖는 15.5 g의 생성물을 수득하였다.

7) 2-{5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-2-[4-하이드록시-3-(하이드록시-메틸)부톡시]페닐}에틸 2-메틸프로프-2-에노에이트 **G**의 합성



G

15.5 g(19.6 mmol)의 에스터 **F**를 225 ml의 테트라하이드로퓨란(THF) 중에 용해시키고, 2℃로 냉각시키고, 23.5 ml(47.0 mmol)의 HCl(2 mol/l)을 천천히 적가하였다. 반응 혼합물을 이어서 실온에서 추가의 3시간 동안 교반시키고, 포화 나트륨 수소카보네이트 용액을 사용하여 조심스럽게 중화시켰다. 반응 혼합물을 MTB 에터로 추출하고, 합친 유기 상을 물로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에서 30℃에서 증발시켰다. 조질 생성물을 헵탄 / 에틸 아세테이트(2:1, 1:1 및 최종 1:2로)로 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 30℃에서 진공 하에서 증발시키고, 10.9 g의 무색 고체를 제공하고, 이를 200 ml의 헵탄 및 105 ml의 MTB 에터 중에 환류 하에 용해시키고, 이어서 아세톤 / 드라이아이스를 사용하여 결정화시켰다. 진공 하에 실온에서 건조시켜서 9.0 g의 목적 생성물을 99.8%(HPLC)의 순도를 갖는 무색 고체로서 수득하였다.

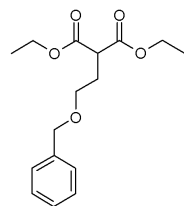
상 거동

Tg = -18℃ / C(녹는점) = 72℃ / I(등방성)

¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

δ = 0.95 ppm(t, 6.9 Hz, 3H, CH₃), 1.17(t, 7.56 Hz, 3H, CH₃), 1.39(m_c, 4H), 1.70(q 7.33 Hz, 2H, CH₂), 1.92(q, 6.35 Hz, 2H, 벤질 CH₂), 1.95(s, 3H, CH₃), 2.17(m_c, 1H,), 2.48(s_(broad), 2H, 2 X OH), 2.68(m_c, 4H), 3.08(t, 7.25 Hz, 2H), 3.82(dd, 10.69 ,6.84 Hz 2H CH₂ HOCH₂CH), 3.93(dd, 10.77, 3.99 Hz, 2H, HOCH₂CH), 4.15(t, 5.95 Hz, 2H, CH₂), 4.44(t, 7.26 Hz, 2H, CH₂), 5.57(s, 1H,), 6.11(s, 1H), 6.93(d, 8.27 Hz, 1H, 방향족 H), 7.19(d, 2.05 Hz, 1H, 방향족 H), 7.21(dd, 8.23, 2.28 Hz, 1H, 방향족 H), 7.29(d, 7.98 Hz, 2H, 방향족 H) 7.45,(dd, 8.07, 2.02 Hz, 1H, 방향족 H), 7.53(d, 1.68 Hz, 1H, 방향족 H), 7.58(8.09 Hz, 2H, 방향족 H).

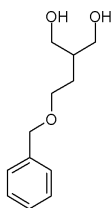
8) 1,3-다이에틸 2-[2-(벤질옥시)에틸]프로판다이오에이트 **H**의 합성



H

240.0 ml(0.628 mol)의 나트륨 메톡사이드(에탄올 중의 20% 용액)를 먼저 300 ml의 에탄올 중에 도입시키고, 81℃로 가열하였다. 180.0 ml(1.180 mol)의 다이에틸 말로네이트를 이어서 10분 동안 재빨리 첨가하고, 즉시 100.0 g(0.451 mol)의 2-브로모에톡시-메틸벤젠을 15분에 걸쳐 첨가하였다. 반응 혼합물을 4시간 동안 환류 하에서 교반시키고, 이어서 실온으로 냉각시키고, 얼음물 및 MTB 에터의 혼합물에 부었다. 혼합물을 25% 염산을 사용하여 조심스럽게 pH 4 내지 5로 조정하고, 유기 상을 분리해냈다. 수상을 MTB 에터로 다수 추출하였다. 합친 유기 상을 물로 세척하고 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 증발시켜서, 223.6 g의 오렌지색 액체를 제공하고, 이로부터 100 내지 150℃(상부 온도: 70내지 77℃)의 배쓰 온도에서 5 mbar의 진공에서 과량의 다이에틸 말로네이트를 증류시켜 분리해냈다. 수득된 조질 생성물(133.2 g의 오렌지색 액체)을 다이클로로메탄 / MTB 에터(8:2)로 2 l의 실리카 겔로 여과시키고, 생성물을 황색 액체로서 수득하였다.

[0492] 1) 2-[2-(벤질옥시)에틸]프로판-1,3-다이올 **I**의 합성



I

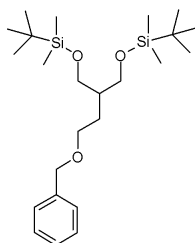
[0493]

[0494] 170.0 ml(340 mmol)의 리튬 알루미늄 하이드록사이드 용액(THF 중의 2 몰)을 먼저 도입하고, 350.0 ml의 테트라하이드로푸란(THF) 중의 66.5 g(225.9 mmol)의 에스터 **H** 용액을 냉각시켜 첨가하였다(50℃의 최대 반응 온도까지). 반응 혼합물을 이어서 66℃에서 5시간 동안 교반시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고(RT), 100 ml의 에틸 아세테이트를 조심스럽게 적가하였다. 20 ml의 물, 및 30 ml의 물 중의 27.8 ml(377.4 mmol)의 나트륨 카보네이트 데카하이드레이트(엠프루브(Emprove®)의 뜨거운 용액을 이어서 조심스럽게 첨가하고, 혼합물을 15분 동안 교반시켰다. 무색의 석출물을 석션으로 여과해내고, 많은 양의 THF로 세척하였다. 여액을 증발시켜서, 45.4 g의 생성물을 무색의 약간 탁한 오일로서 제공하고, 이를 에틸 아세테이트(EA) 및 EA / 메탄올(95:5 및 9:1)로 1.2 리터의 실리카 겔을 통해 여과시켰다. 생성물 분획을 증발시켜서, 23.8 g의 생성물을 무색의 오일로서 수득하였다.

[0495] ^1H NMR(500 MHz, CDCl_3)

[0496] δ = 1.74 ppm(q, 6.38 Hz, 2H $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$), 1.91(sept., 5.17 Hz, 1H, $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{OTBDMS})_2$), 2.46($\text{s}_{(\text{broad})}$, 1H, 2 X OH), 3.61(t, 5.77 Hz, 2H, $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$), 3.72(dd, 10.9, 5.86 Hz, 2H, 3.76 $\text{CH}_1\text{CH}_2\text{OTBDMS}$), (dd, 4.71, 10.9 Hz, 2H, $\text{CH}_1\text{CH}_2\text{OTBDMS}$), 4.55(s, 2H, CH_2 -벤질.), 7.41-7.30(m, 5H, 방향족 H).

[0497] 2) 6-[2-(벤질옥시)에틸]-2,2,3,3,9,9,10,10-옥타메틸-4,8-다이옥사-3,9-다이실라운데칸 **J**의 합성

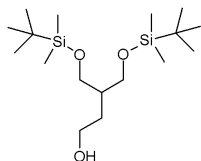


J

[0498]

[0499] 53.7 g(255.39 mmol)의 다이올 **I** 및 3.0 g(24.56 mmol)의 4-(다이메틸아미노)-피리딘을 5℃로 냉각된 600 ml의 다이클로로메탄 중에 용해시켰다. 110.0 ml(0.79 mmol)의 트라이에틸아민을 이어서 첨가하고, 400 ml의 다이클로로메탄(DCM) 중의 100.0 g(0.66 mol)의 3급-부틸다이메틸클로로실란의 용액을 이어서 2 내지 7℃에서 적가하고, 혼합물을 실온에서 20시간 동안 교반시켰다. 석출된 암모늄 염을 석션으로 여과해내고, DCM으로 세척하고, 유기 상을 포화 나트륨 클로라이드 용액 및 물로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 증발시켜서, 조질 생성물(130.1 g)을 오렌지색 오일로서 수득하고, 이를 톨루엔으로 2 l의 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 증발시킨 후, 113.2 g의 생성물을 약간의 황색 오일로서 수득하였다.

[0500] 3) 4-[(3급-부틸다이메틸실릴)옥시]-3-[[3급-부틸다이메틸-실릴]-옥시]-메틸}부탄-1-올의 합성



K

[0501]

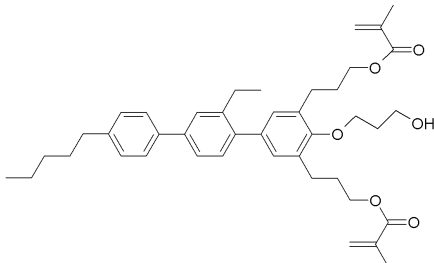
[0502] 60.0 g(110.8 mmol)의 **J**를 600 ml의 에틸 아세테이트 중에 용해시키고, 30.0 g의 Pd/C(염기, 50%의 물)를 첨가하고, 출발 물질을 24시간 동안 수소 기체 하에서(1 bar, 50℃) 탈벤질화시켰다. 반응 혼합물(50%의 생성물)을 석션으로 여과시키고, 추가로 40시간 동안 수소 기체 하에서(1 bar, 50℃) 15.0 g의 Pd/C(염기, 50%의 물)를 사용하여 다시 탈벤질화시켰다. 반응 혼합물을 실온에서 여과시키고, 증발시켜, 조질 생성물(50.0 g)을 무색의 오일로서 수득하고, 이를 펜탄 / MTB 에터(9:1 내지 7:3)로 1 l의 실리카 겔을 통해 여과시켜서, 41.6 g의 생성물을 무색의 오일로서 수득하였다.

[0503] ^1H NMR(500 MHz, CDCl_3)

[0504] δ = 0.00 ppm(2, 12H, 2 X $\text{Si}(\text{CH}_3)_2$), 0.83(s, 18H, 2 X $\text{Si}(\text{C}(\text{CH}_3)_3$), 1.53(q, 6.21 Hz, 2H, $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_1$), 1.74(sept. 6.08 Hz, 1H, $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{OTBDMS})_2$), 3.16(s(broad), 1H, OH), 3.47(dd, 10.02, 6.26 Hz, 2H, $\text{CH}_1\text{CH}_2\text{OTBDMS}$), 3.57(dd, 10.02, 5.72, 2H, $\text{CH}_1\text{CH}_2\text{OTBDMS}$), 3.62(q(broad), 5.37 Hz, 2H CH_2OH).

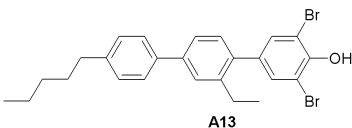
[0505] **실시예 4**

[0506] 3-{5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-2-(3-하이드록시프로폭시)-3-{3-[(2-메틸프로프-2-엔오일)옥시]프로필}페닐}프로필 2-메틸프로프-2-에노에이트 **13**의 합성



[0507]

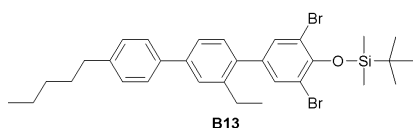
[0508] 1) 2,6-다이브로모-4-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]페놀 **A13**의 합성



[0509]

[0510] 20.6 g(59.80 mmol)의 2'-에틸-4"-펜틸-[1,1';4',1"]터페닐-4-올 **B**를 먼저 150 ml의 다이클로로메탄(DCM)에 도입시키고, 1.50 ml(10.67 mmol)의 다이이소프로필아민을 적가하였다. 반응 용액을 드라이아이스/아세톤 배스 내에서 -5℃로 냉각시키고, 300 ml의 DCM 중의 21.6 g(121.4 mmol)의 N-브로모석신이미드의 용액을 이어서 적가하였다. 반응 용액을 실온에서 18시간 동안 교반시키고, 2 M HCl을 사용하여 산성화시키고, 물을 첨가하고, 상을 분리시켰다. 수성 상을 DCM으로 추출하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 조질 생성물을 톨루엔/헵탄(1:1 + 1%의 트라이에틸아민)으로 600 g의 실리카 겔을 통해 여과시켰다. 생성물 분획을 합치고, 증발 후에, -30℃에서 헵탄으로부터 재결정화하여, 생성물을 점성 오일로서 15.1 g의 수율 및 99.1%의 순도(가스 크로마토그래피)로 수득하였다.

[0511] 2) 3급-부틸(2,6-다이브로모-4-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-페녹시)다이메틸실란 **B13**의 합성



[0512]

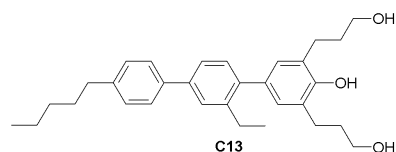
[0513] 10.6 g(20.32 mmol)의 브로마이드 **A13**을 150 ml의 다이클로로메탄(DCM) 중에 도입하고, 2.90 g(42.6 mmol)의 이미다졸을 첨가하고, 혼합물을 실온에서 30분 동안 교반시켰다. 20 ml의 DCM 중의 4.00 g(26.54 mmol)의 3급-부틸다이메틸클로로실란 용액을 이어서 적가하고, 혼합물을 실온에서 추가로 18시간 동안 교반시켰다. 반응 혼합물을 진공 중에 농축시키고, 에틸 아세테이트(EA) 중에 용해시키고, 물을 첨가하고, 교반시킨 후, 상을 분리시켰다. 수성 상을 EA로 추출하고, 합친 유기 상을 포화 나트륨 클로라이드 용액으로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고 진공 하에 증발시켰다. 수득된 조질 생성물을 헵탄으로 400 ml의 실리카 겔로 여과시키고, 생성물 분획을 합치고, 진공 하에 증발시켜서, 6.6 g의 생성물을 무색의 오일로서 수득하였다.

[0514] MS(EI): 616.3 [M⁺]

[0515] ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)

[0516] δ = 0.38 ppm(s, 6 H, Si(CH₃)₂), 0.88(t, 6.6 Hz, 3H, CH₃), 1.06(s, 9 H, Si(C(CH₃)₃)), 1.13(t, 8.06 Hz, 3H, CH₃), 1.38-1.27(m, 4H, CH₂), 1.63(q, 7.7 Hz, 2H, CH₂), 2.66 - 2.59(m, 4H, CH₂), 7.17(d, 7.15 Hz, 1H, 방향족 H), 7.23(d, 7.62 Hz, 2H, 방향족 H), 7.39(dd, 7.86, 1.89 Hz, 1H, 방향족 H), 7.44(s, 2H, 방향족 H), 7.462(d, 1.75 Hz, 1H, 방향족 H), 7.50(d, 8.13 Hz, 2H, 방향족 H).

[0517] 3) 4-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-2,6-비스(3-하이드록시프로필)-페놀 **C13**의 합성



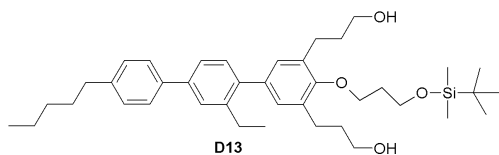
[0518]

[0519] 2.90 g(27.4 mmol)의 나트륨 카보네이트, 100.0 mg(0.56 mmol)의 팔라듐-(II) 클로라이드 및 180.0 mg(0.39 mmol)의 2-다이사이클로헥실포스포노 -2',6'-다이이소-프로폭시-1,1'-바이페닐을 먼저 30 ml의 물에 도입하고, 135 ml의 테트라하이드로퓨란(THF) 중의 15.6 g(25.9 mmol)의 브로마이드 **B13** 및 4.10 g(28.9 mmol)의 2-부톡시-1,2-옥사보롤란의 용액을 첨가하였다. 120 μl(0.87 mmol)의 트라이에틸아민을 첨가하고, 혼합물을 질소로 20분 동안 탈기시키고, 이어서 18시간 동안 환류 교반시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 물 및 MTB 에터를 첨가하고. 반응 용액을 교반시킨 후, 상을 분리시키고, 수성 상을 MTB 에터로 추출하고, 합친 유기 상을 포화 나트륨 클로라이드 용액으로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 조질 생성물을 톨루엔 / 에틸 아세테이트(1:1)로 350 ml의 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 합치고, 진공 하에 증발시켰다.

[0520] ¹H NMR(500 MHz, DMSO-d₆)

[0521] δ = 0.89 ppm(t, 7.08 Hz, 3H, CH₃), 1.05(t, 7.92 Hz, 3H, CH₃), 1.33(m_c, 4H, CH₂), 1.62(q, 7.29 Hz, 2H, CH₂), 1.73(q, 6.73 Hz, 2H, CH₂), 2.69 - 2.58(m, 8H, 벤질-CH₂), 3.45(q, 6.42 Hz, 4H, CH₂), 4.52(t, 5.04 Hz, 2H, OH), 6.89(s, 2H, 방향족 H), 7.2(d, 7.9 Hz, 1H, 방향족 H), 7.29(d, 8.98 Hz, 2H, 방향족 H), 7.46(dd, 7.92, 1.90 Hz, 1H, 방향족 H), 7.54(d, 1.78 Hz, 1H, 방향족 H), 7.59(d, 8.12 Hz, 2H, 방향족 H), 8.25(s, 1H, 방향족 OH).

[0522] 4) 3-(2-{3-[(3급-부틸다이메틸실릴)옥시]프로폭시}-5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-3-(3-하이드록시프로필)페닐)프로판-1-올 **D13**의 합성



[0523]

[0524]

2.9 g(6.0 mmol)의 트리스알코올 **C13**, 2.40 g(9.0 mmol)의 (3-브로모프로폭시)-(3급-부틸)다이메틸실란 및 1.70 g(12.3 mmol)의 칼륨 카보네이트를 20 ml의 N,N-다이메틸포름아미드에 첨가하고, 혼합물을 80℃에서 6시간 동안 교반시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 물 및 MTB 에터를 첨가하고, 교반시킨 후, 상을 분리시켰다. 수성 상을 MTB 에터로 추출하고, 합친 유기 상을 포화 나트륨 클로라이드 용액으로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 진공 중에 증발시켰다. 수득된 조질 생성물을 톨루엔 / 에틸 아세테이트(4:1)로 50 ml의 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 합치고, 진공 하에 증발시켰다.

[0525]

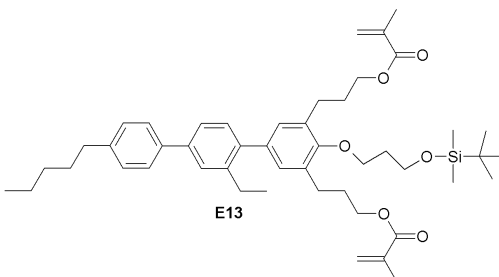
^1H NMR(500 MHz, CDCl_3)

[0526]

δ = 0.00 ppm(s, 6H, $\text{Si}(\text{CH}_3)_2$), 0.81(s, 9H, $\text{Si}(\text{C}(\text{CH}_3)_3)$), 1.03(t, 6.6 Hz, 3H, CH_3), 1.30 - 1.19(m, 4H, CH_2), 1.58 - 1.49(m, 2H, CH_2), 1.67(q, 5.5 Hz, 4H, CH_2), 1.88(q, 6.23 Hz, 2H, CH_2), 2.61 - 2.50(m, 8H, CH_2), 3.37(q, 6.41 Hz, 4H, CH_2), 3.76(t, 6.2 Hz, 2H, CH_2), 3.79(t, 5.69 Hz, 2H, CH_2), 4.33(t, 5.5 Hz, 2H, OH), 6.92(s, 2H, 방향족 H), 7.14(d, 7.89 Hz, 1H, 방향족 H), 7.21(d, 8.26 Hz, 2H, 방향족 H), 7.39(dd, 7.93, 1.76 Hz, 1H, 방향족 H), 7.48(d, 1.64 Hz, 1H, 방향족 H), 7.52(d, 8.08 Hz, 2H, 방향족 H).

[0527]

5) 3-(2-{3-[(3급-부틸다이메틸실릴)옥시]프로폭시}-5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-3-{3-[(2-메틸프로프-2-엔오일)옥시]프로필}페닐)-프로필 2-메틸프로프-2-에노에이트 **E13**의 합성



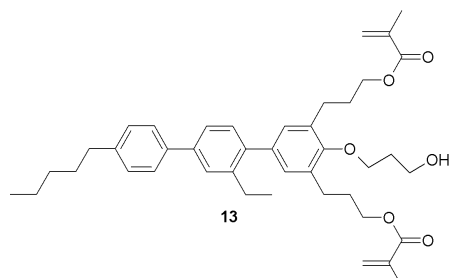
[0528]

[0529]

2.5 g(4.0 mmol)의 비스알코올 **D13**, 1.40 ml(16.5 mmol)의 메타크릴산(하이드로퀴논 모노메틸 에터를 사용하여 안정화됨) 및 55.0 mg(0.45 mmol)의 4-(다이메틸아미노)-피리딘을 25 ml의 다이클로로메탄(DCM) 중에 용해시키고, 2℃로 냉각시켰다. 25 ml의 DCM 중의 2.48 ml(16.52 mmol)의 1-(3-다이메틸아미노-프로필)-3-에틸카보다이이미드의 용액을 이어서 2 내지 5℃에서 적가하고, 혼합물을 추가로 18시간 동안 교반시켰다. 반응 혼합물을 DCM으로 100 ml의 실리카 겔을 통해 직접 여과하고, 생성물 분획을 합쳤다. 수득된 조질 생성물을 DCM / 헵탄(4:1)으로 200 ml의 실리카 겔 및 20 ml의 염기 알루미늄 옥사이드를 통해 여과시키고, 생성물 분획을 진공 중에 농축시켰다.

[0530]

6) 3-{5-[2-에틸-4-(4-펜틸페닐)페닐]-2-(3-하이드록시프로폭시)-3-{3-[(2-메틸프로프-2-엔오일)옥시]프로필}페닐}프로필 2-메틸프로프-2-에노에이트 **13**의 합성



[0531]

[0532]

3.1 g(4.0 mmol)의 에스터 **E13**을 먼저 40 ml의 테트라하이드로-퓨란(THF)에 도입시키고, 2℃로 냉각시켰다.

2.40 ml(4.80 mmol)의 염산(2 N)을 이어서 천천히 첨가하고, 혼합물을 이어서 실온에서 4시간 동안 교반시켰다. 반응이 완료된 후, 반응 혼합물을 나트륨 수소카보네이트를 사용하여 조심스럽게 중화시키고, MTB 에터를 첨가하고, 혼합물을 교반시켰다. 유기 상을 분리해내고, 수상을 MTB 에터로 추출하고, 유기 상을 합치고, 물로 세척하고, 나트륨 설페이트 상에서 건조시키고, 여과시키고, 최대 30℃에서 진공 중에서 증발시켰다. 수득된 조질 생성물(점성 오일)을 헵탄 / 에틸 아세테이트(2:1)로 150 ml의 실리카 겔을 통해 여과시키고, 생성물 분획을 최대 30℃에서 진공 하에 증발시켰다. 수득된 생성물(매우 점성인 오일)을 오일-펌프 진공(10^{-2} mbar)에서 72시간 동안 실온에서 건조시켰다.

[0533] 녹는점: 실온에서 매우 점성인 오일.

[0534] Tg(유리 전이 온도) -39℃

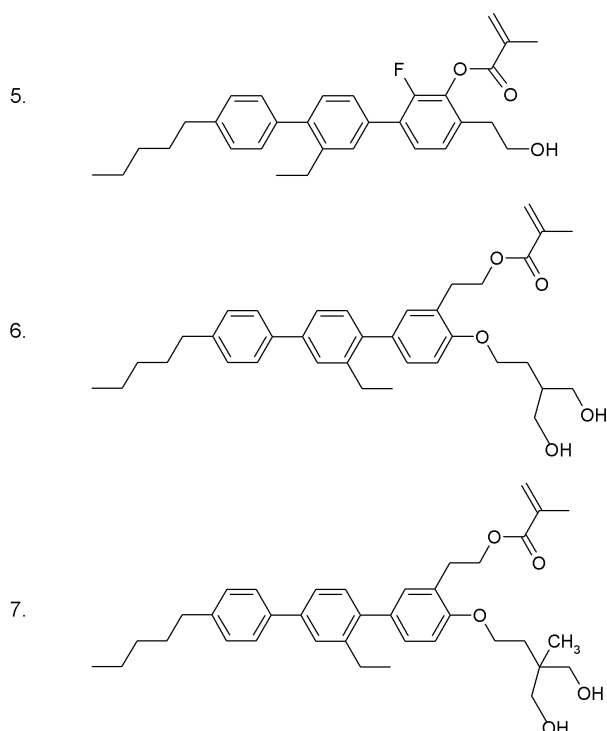
[0535] MS(EI): 654.5 [M^+]

[0536] ^1H NMR(500 MHz, CDCl_3)

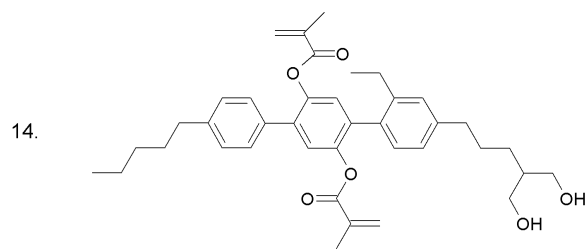
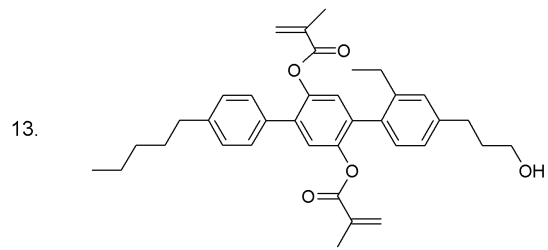
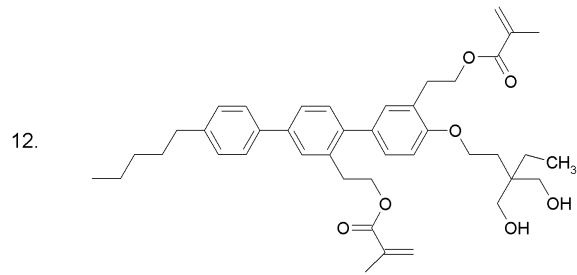
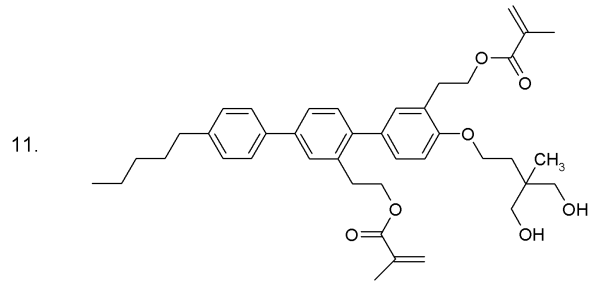
[0537] δ = 0.94 ppm(t, 7.02 Hz, 3H, CH_3), 1.18(t, 7.56 Hz, 3H, CH_3), 1.44 - 1.36(m, 4H, CH_2), 1.57(s(broad), 1H, OH), 1.69(q, 8.25 Hz, 2H, CH_2), 1.98(s, 6H, CH_3), 2.14-2.04(m, 6H, CH_2), 2.67(q, 7.49 Hz, 4H, CH_2), 2.81(t, 7.72 Hz, 4H, CH_2), 3.97(t(broad), 5.77 Hz, 2H, CH_2), 4.03(t, 5.94 Hz, 2H, CH_2), 4.26(t, 6.47 Hz, 4H, CH_2), 5.58(t, 1.58 Hz, 1H), 6.13(s, 1H), 7.06(s, 2H, 방향족 H), 7.26(d, 7.87 Hz, 1H, 방향족 H), 7.29(d, 2H, 방향족 H), 7.46(dd, 7.87, 1.9 Hz, 1H, 방향족 H), 7.53(d, 1.78 Hz, 1H, 방향족 H), 7.57(d, 8.12 Hz, 2H, 방향족 H).

[0538] 실시예 5 내지 165

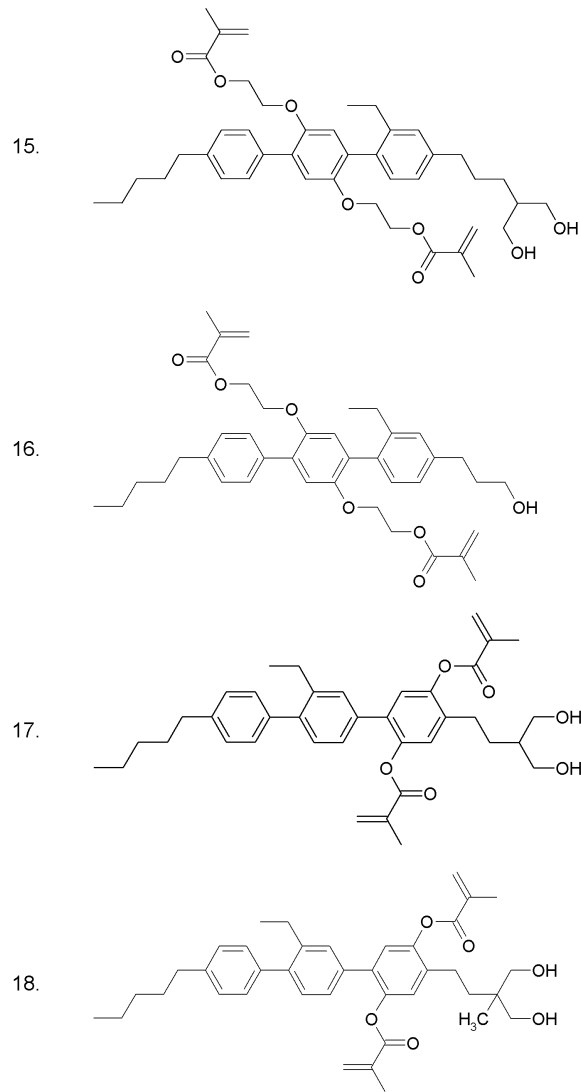
[0539] 하기 화합물을 실시예 1 내지 3 및 반응식 1 내지 3과 유사하게 제조하였다.



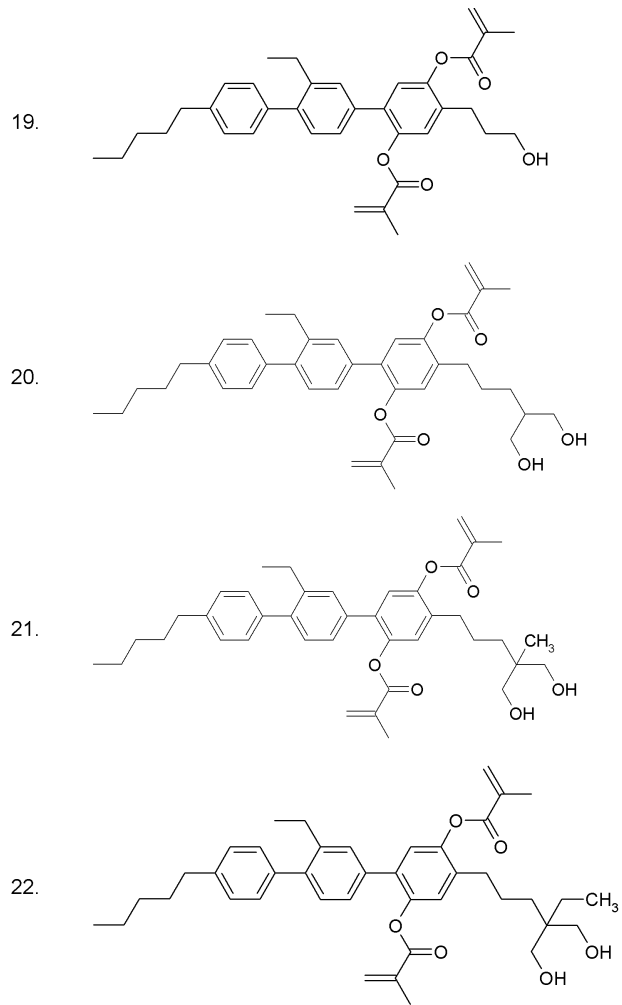
[0540]



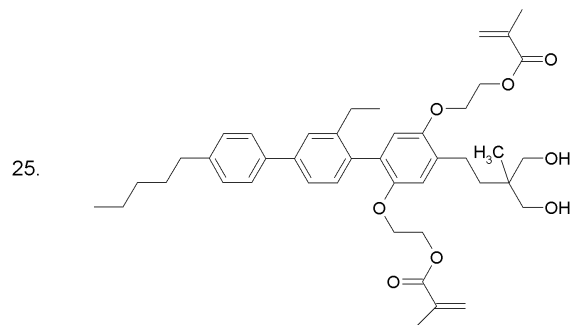
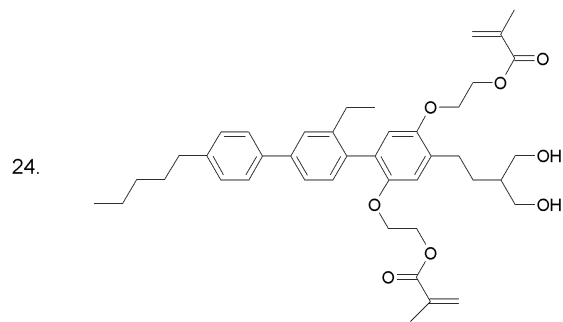
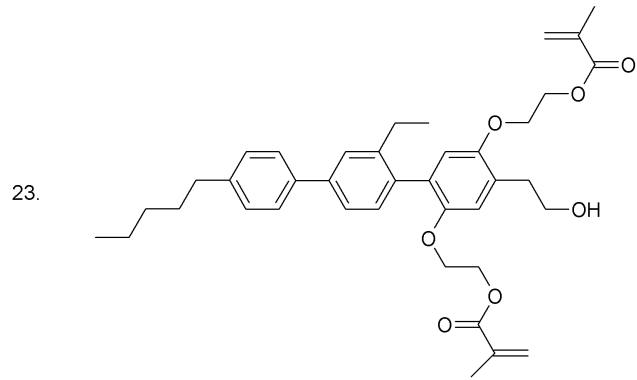
[0542]



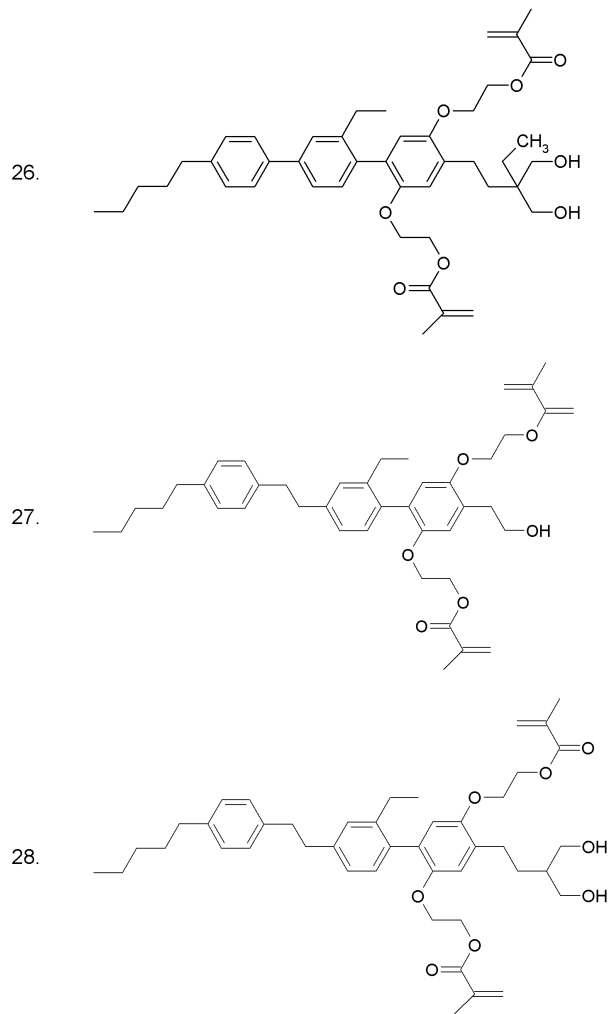
[0543]



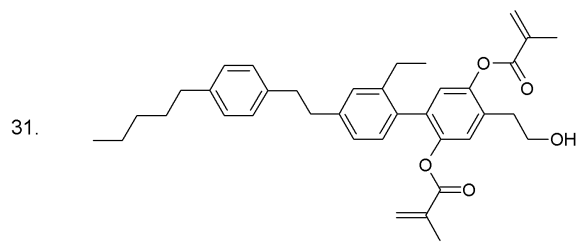
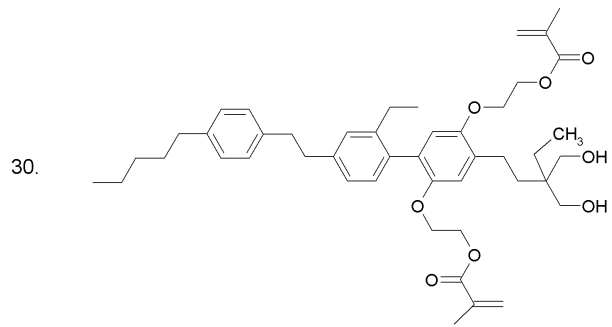
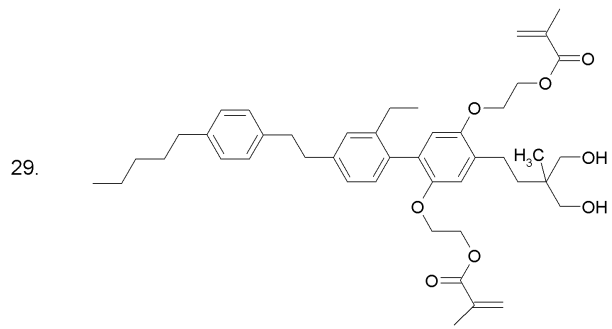
[0544]



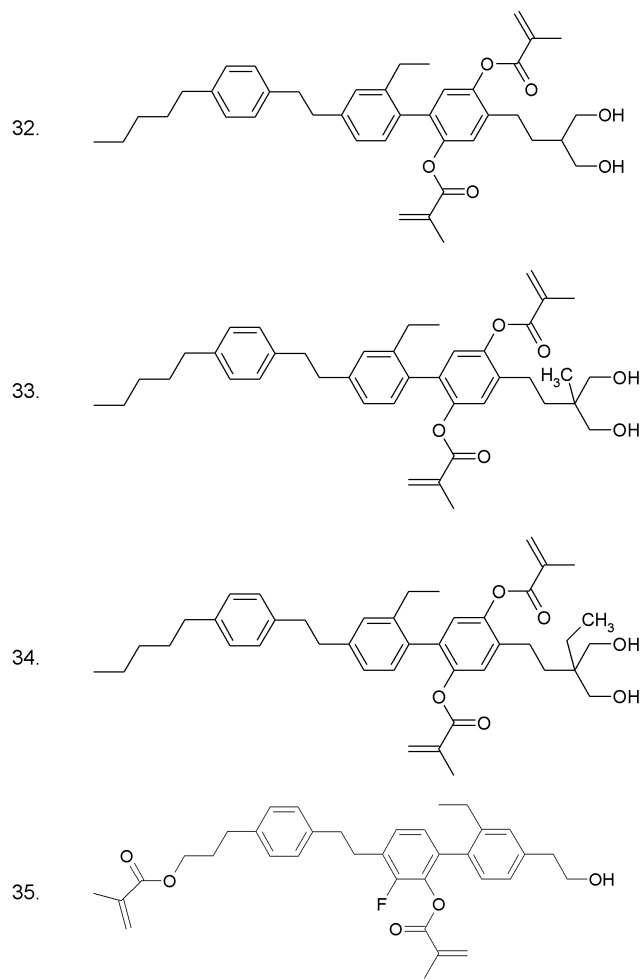
[0545]



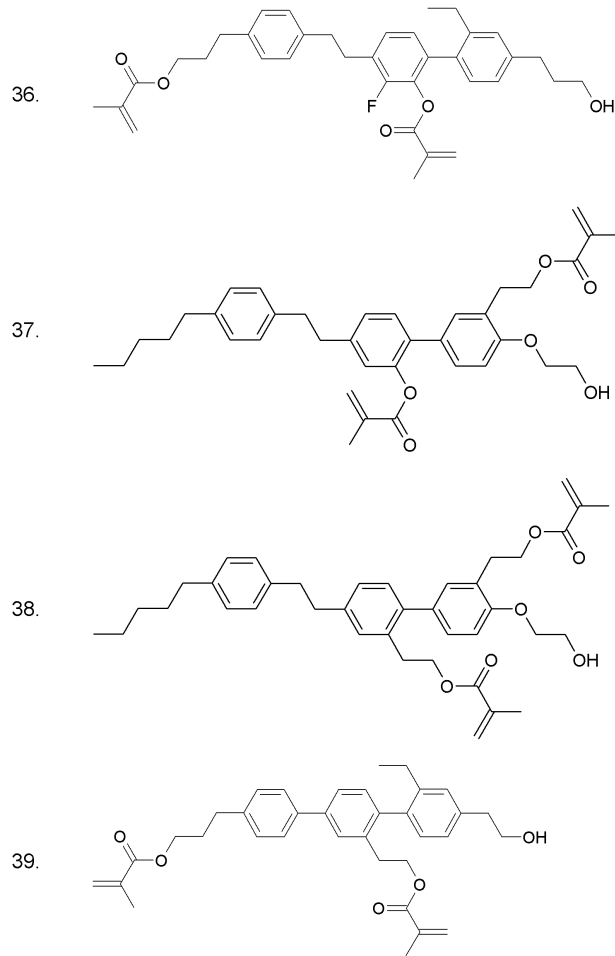
[0546]



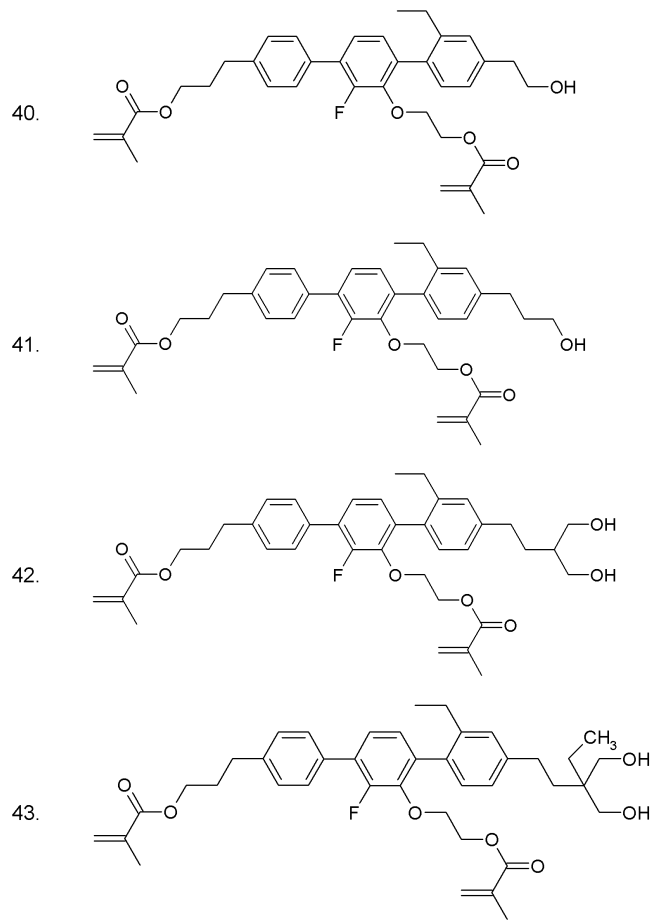
[0547]



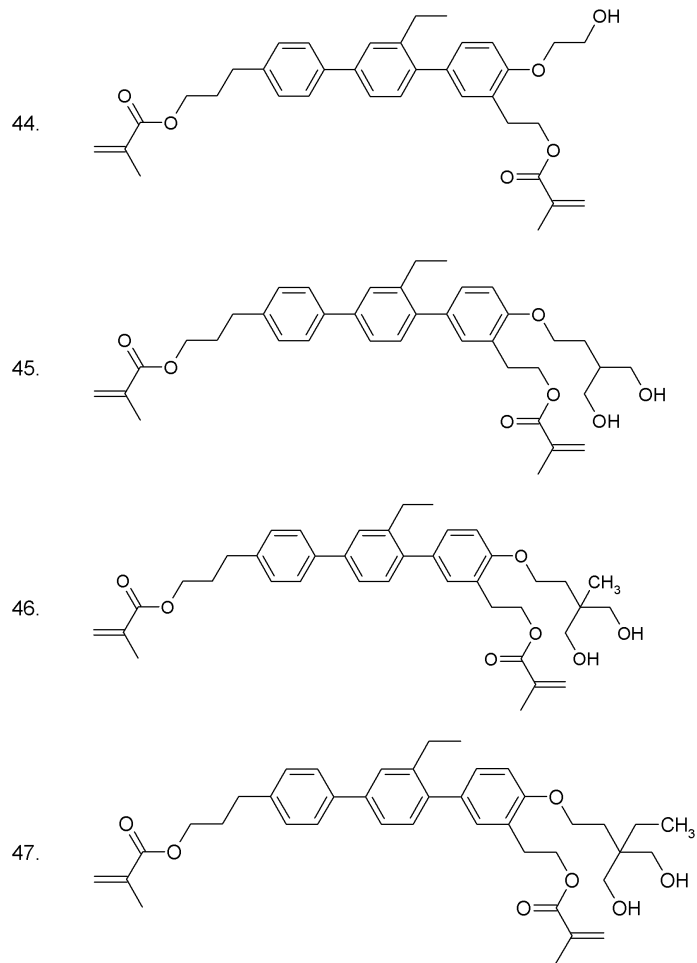
[0548]



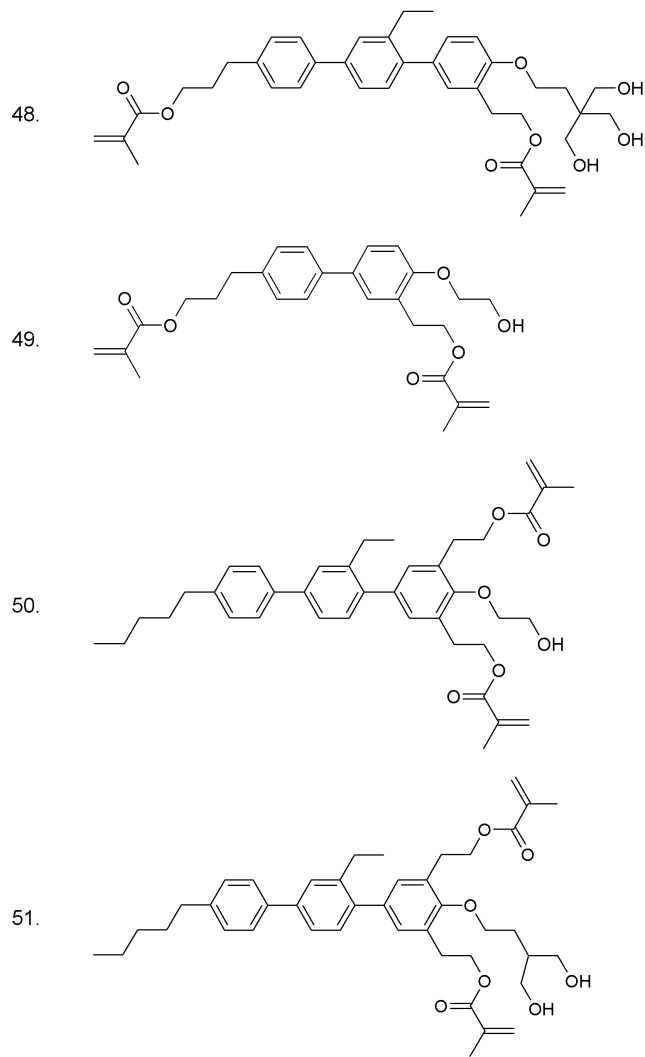
[0549]



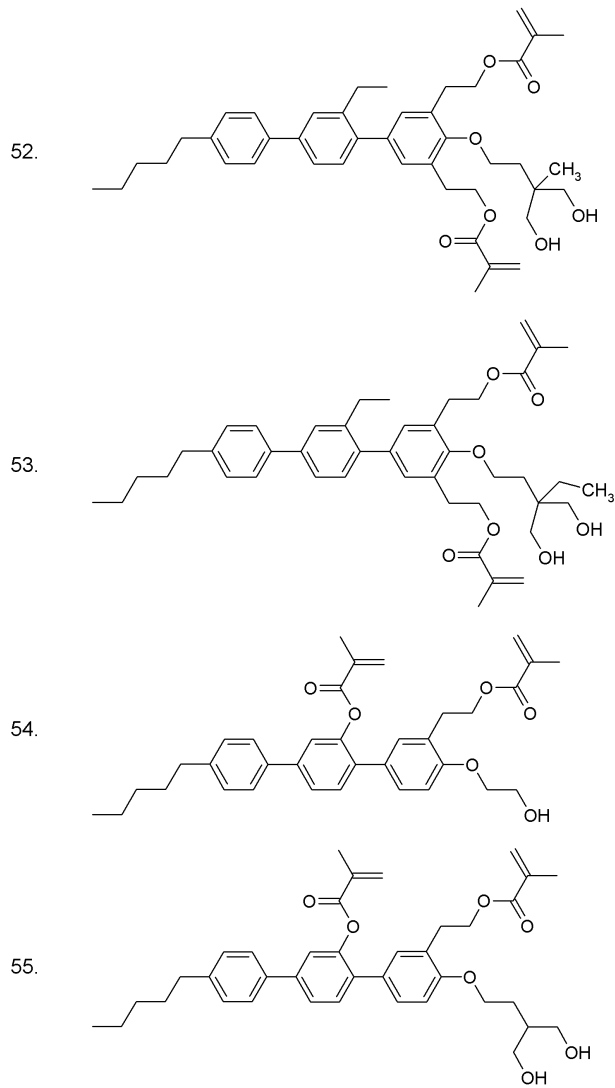
[0550]



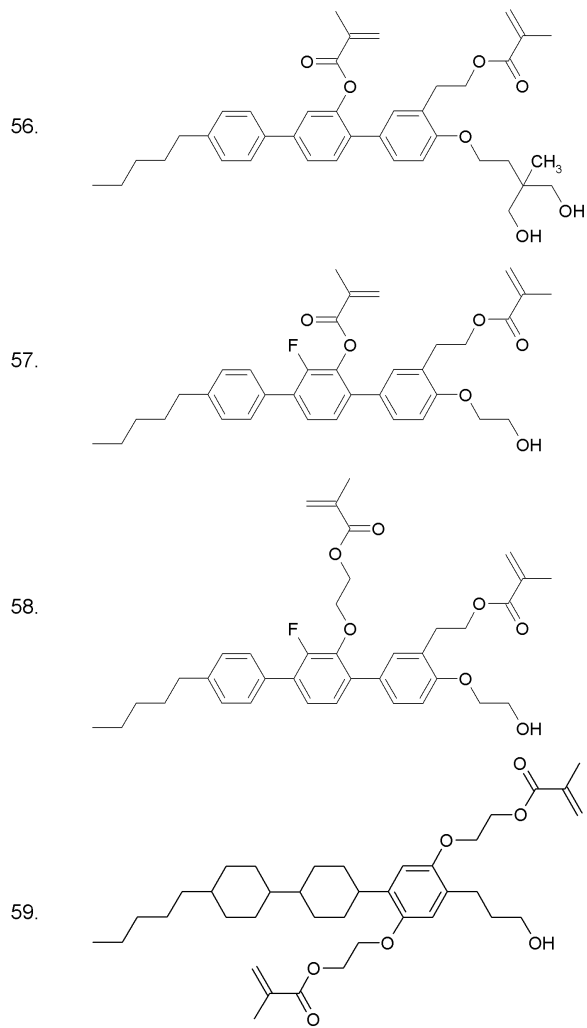
[0551]



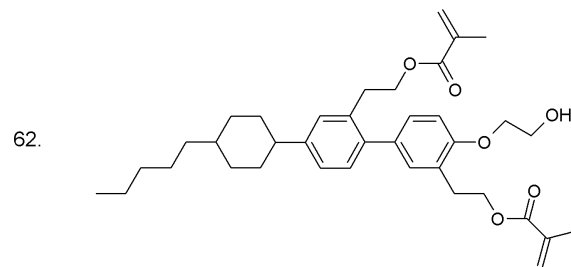
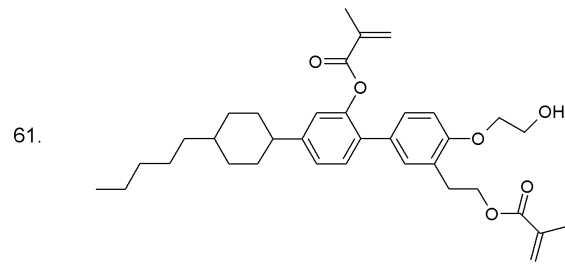
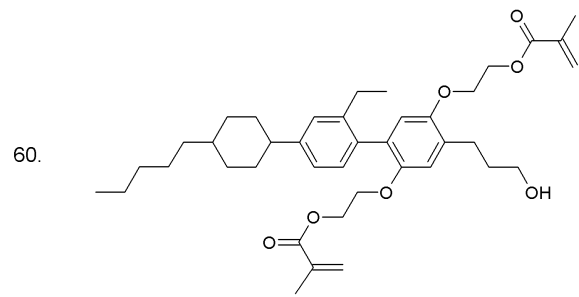
[0552]



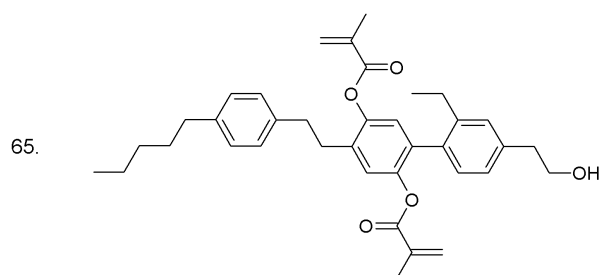
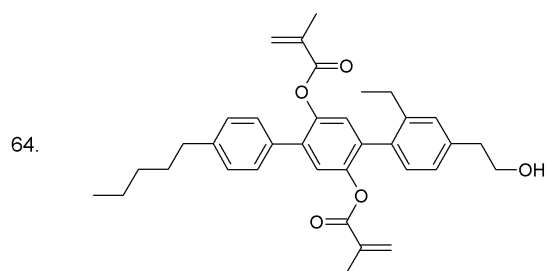
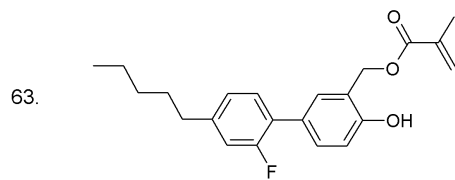
[0553]



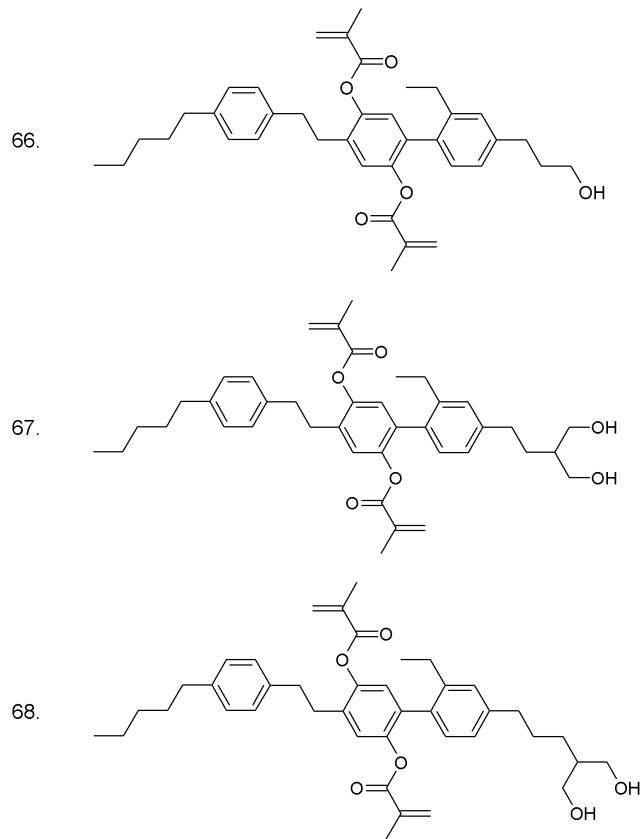
[0554]



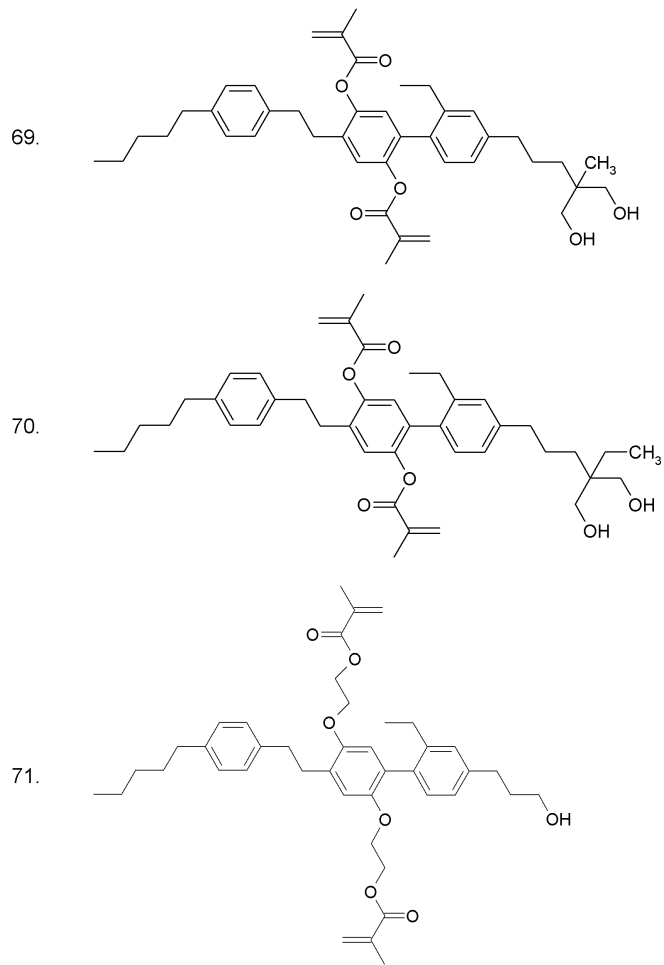
[0555]



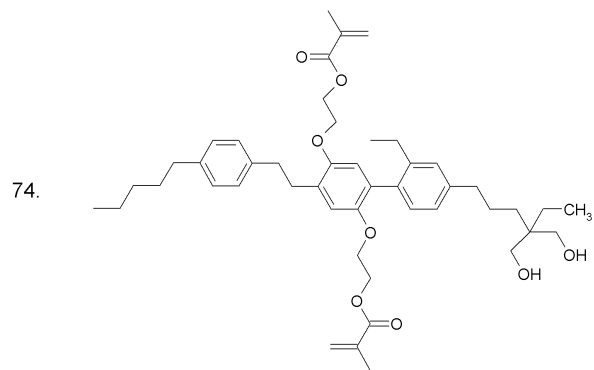
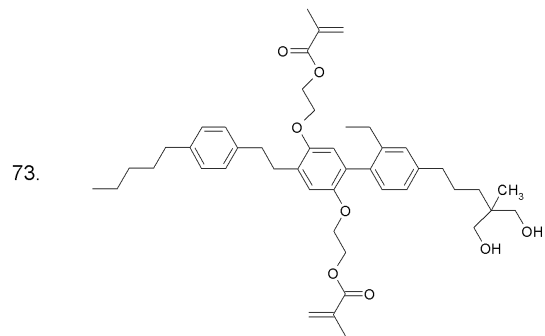
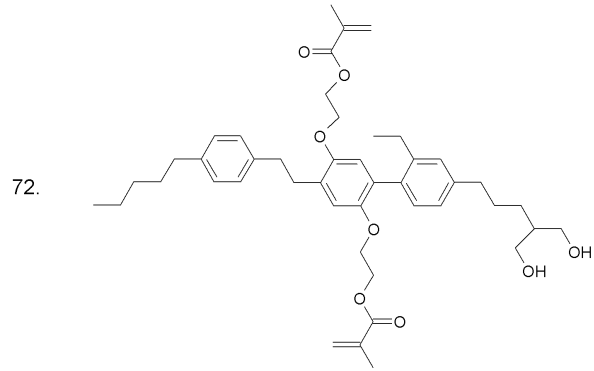
[0556]



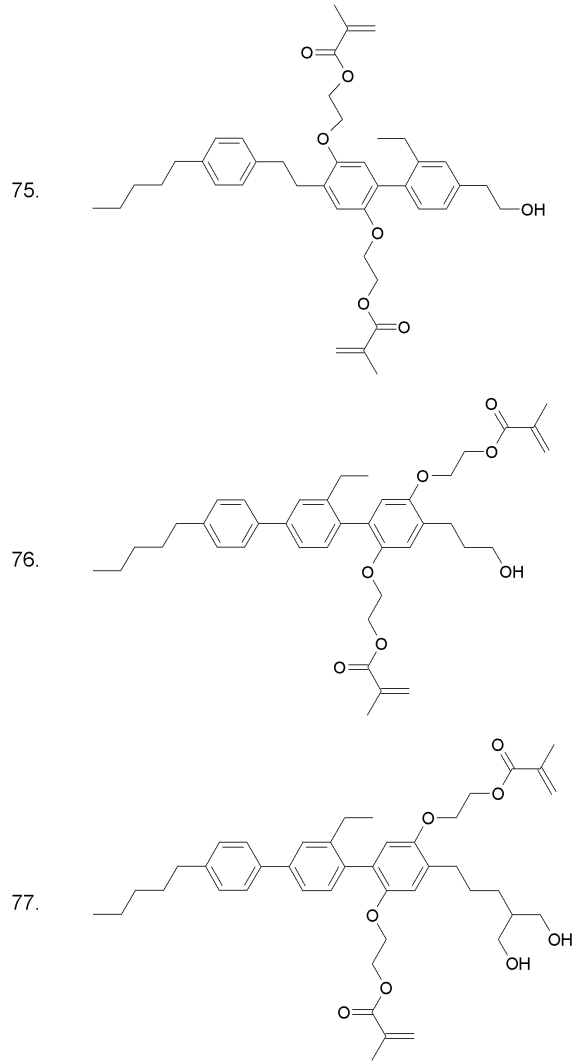
[0557]



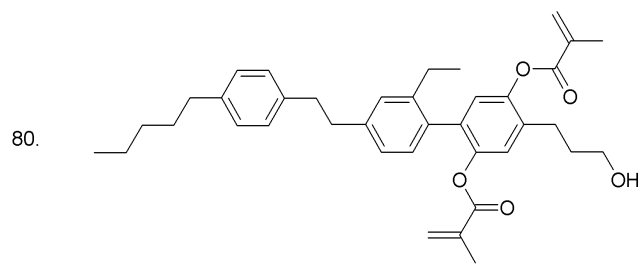
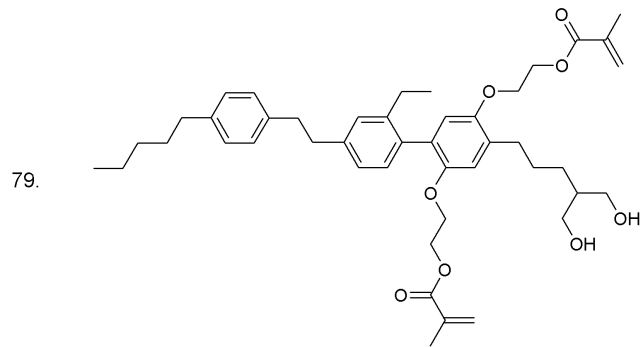
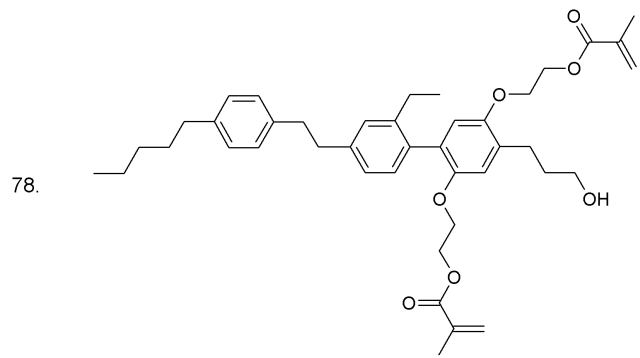
[0558]



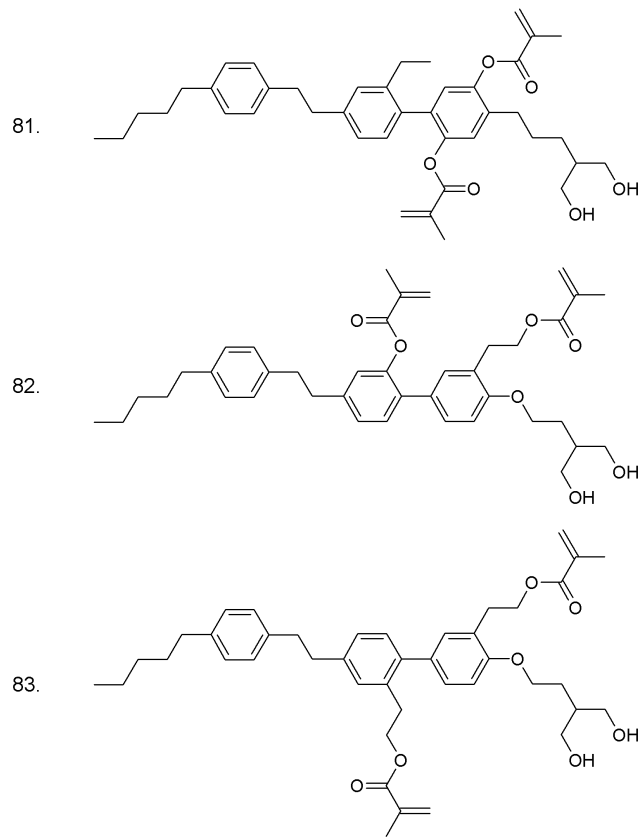
[0559]



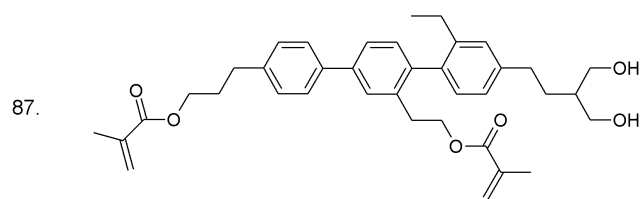
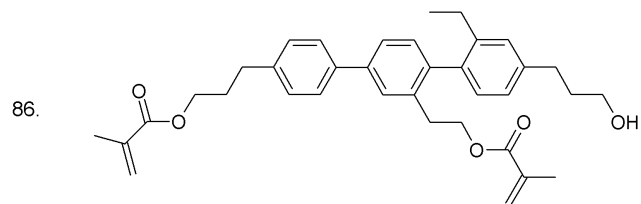
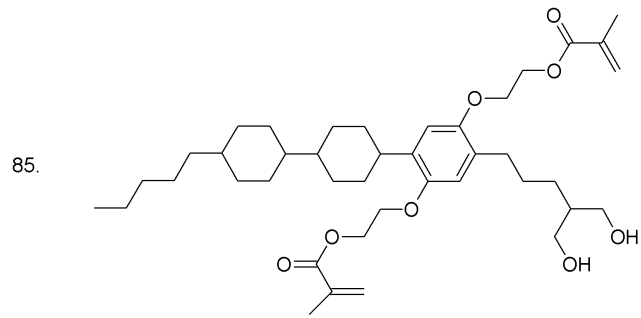
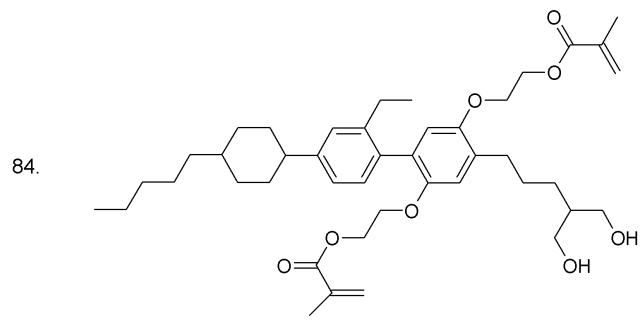
[0560]



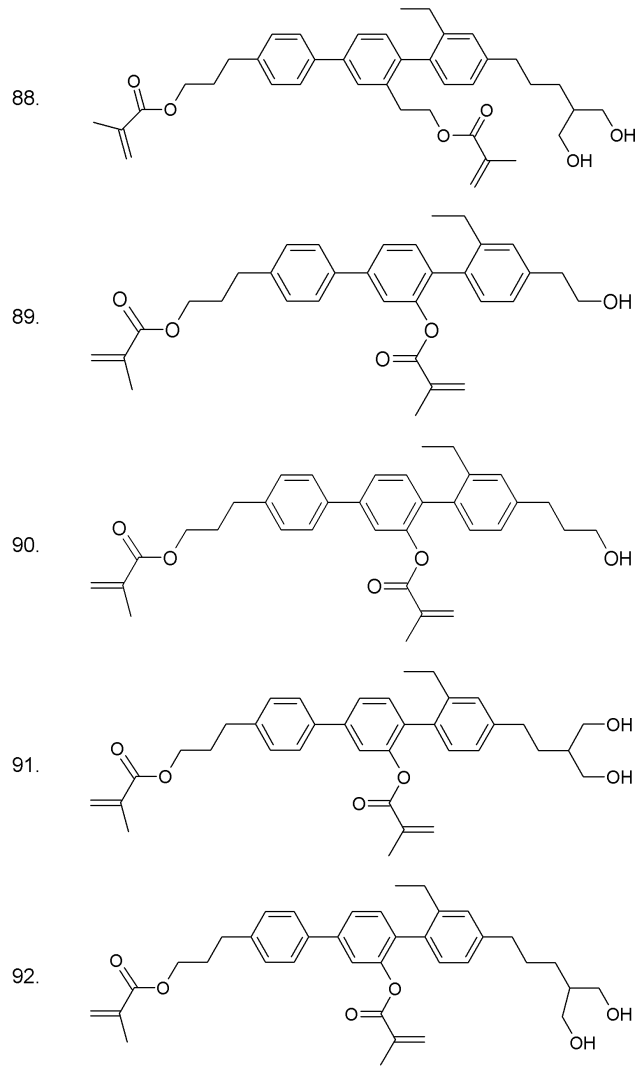
[0561]



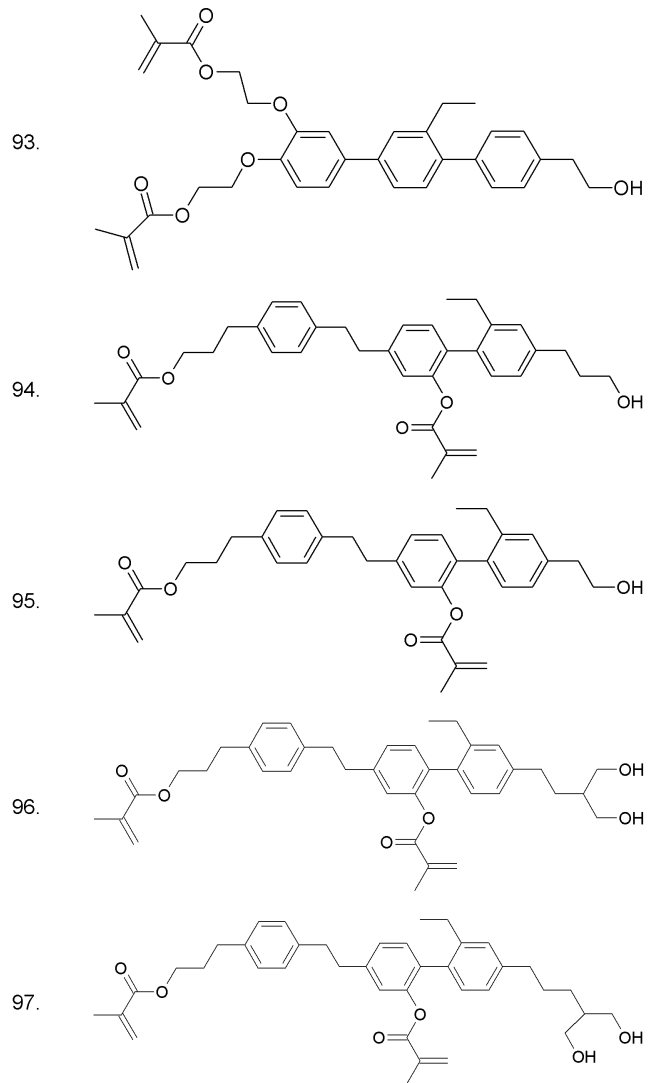
[0562]



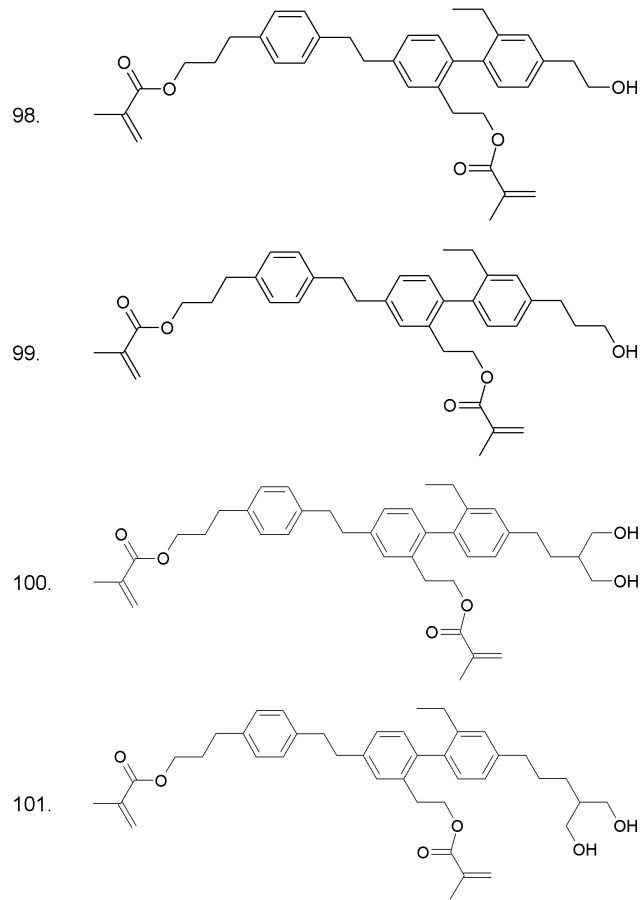
[0563]



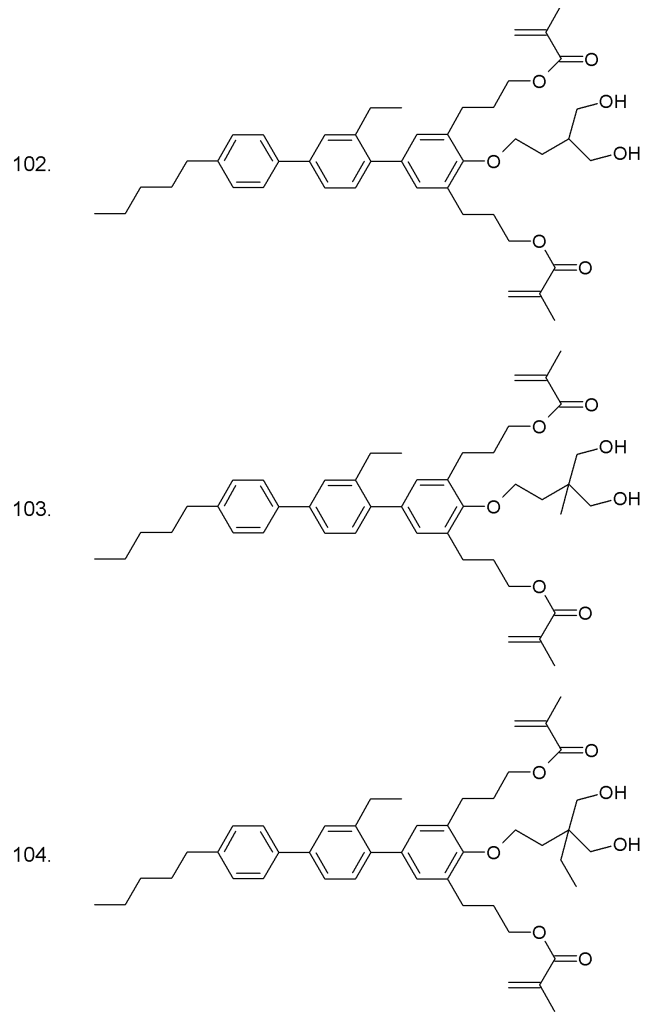
[0564]



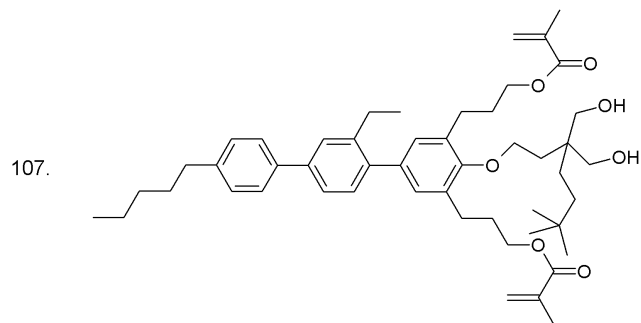
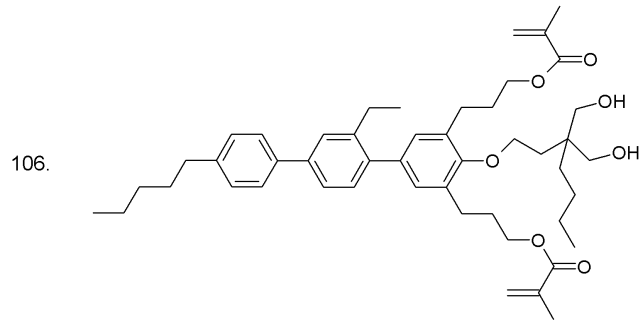
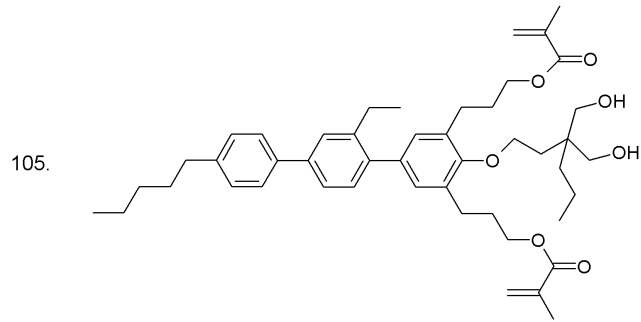
[0565]



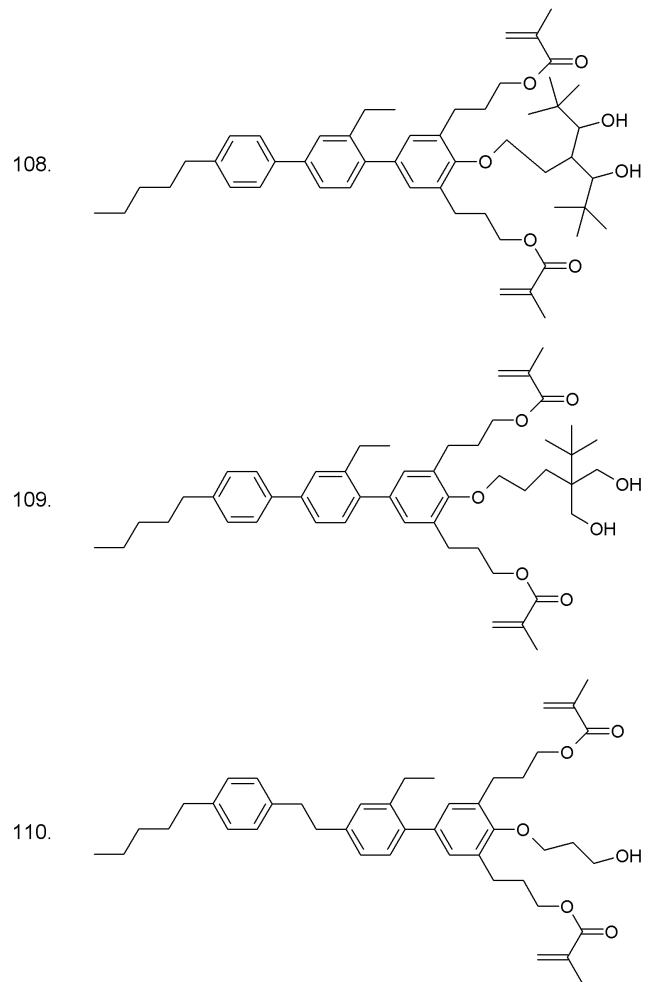
[0566]



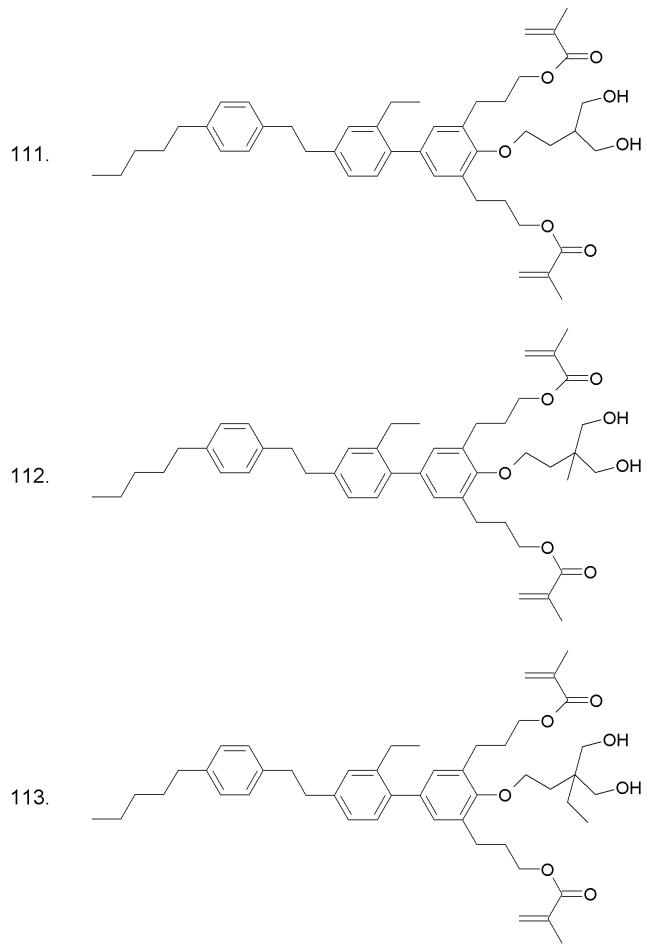
[0567]



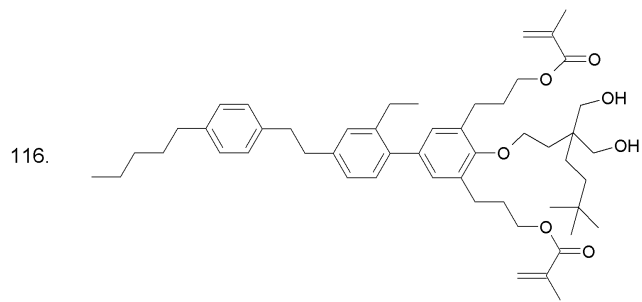
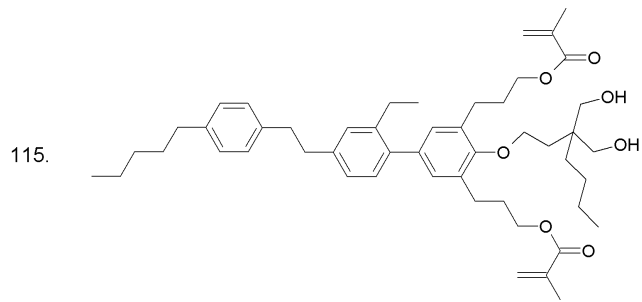
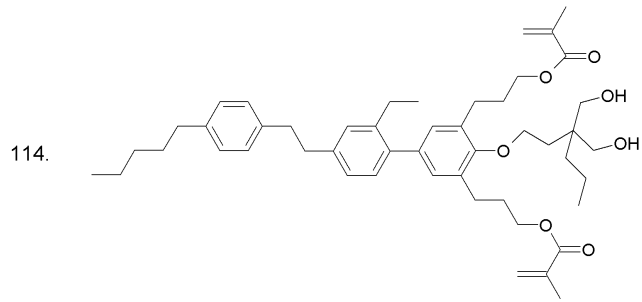
[0568]



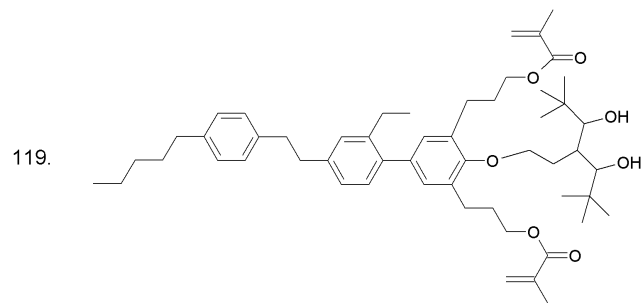
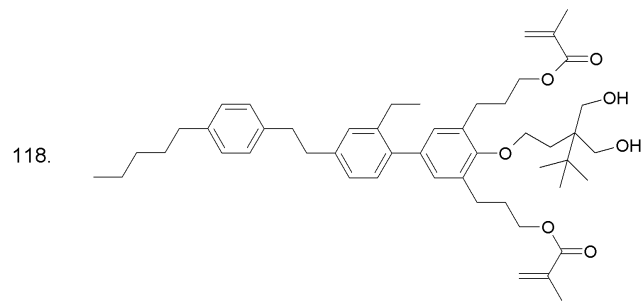
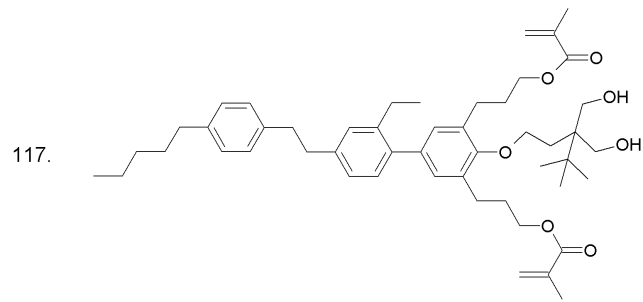
[0569]



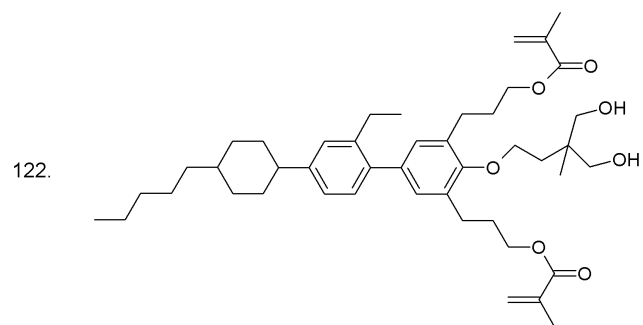
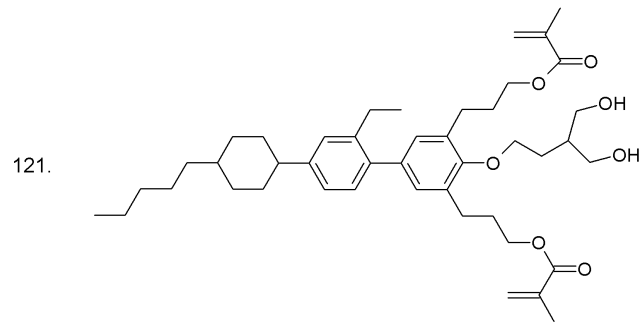
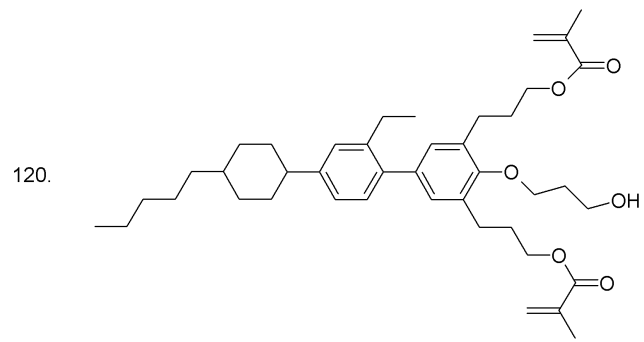
[0570]



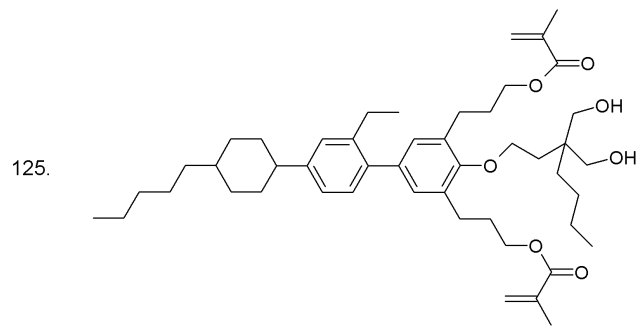
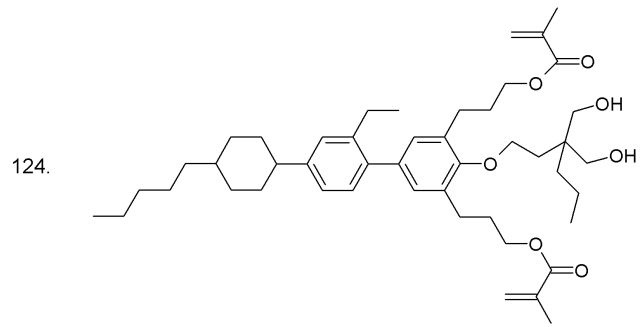
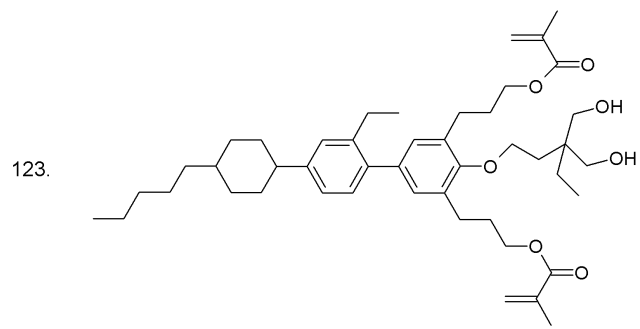
[0571]



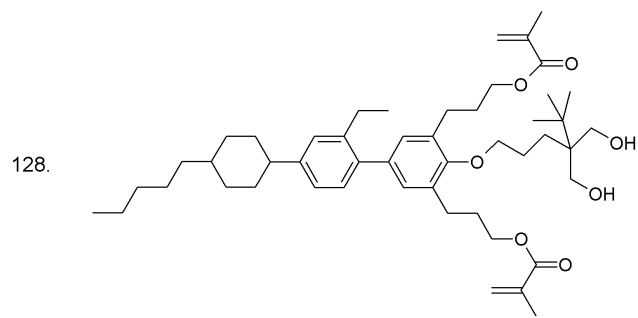
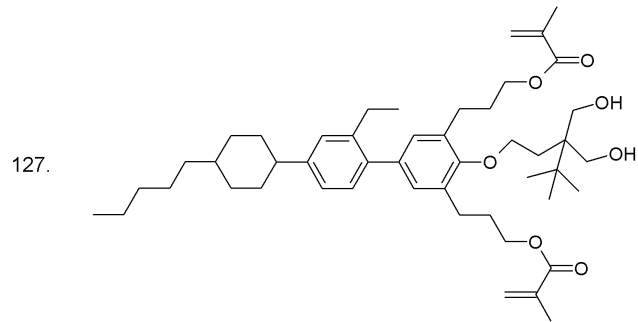
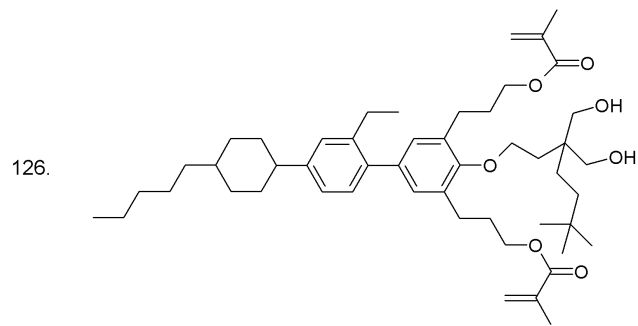
[0572]



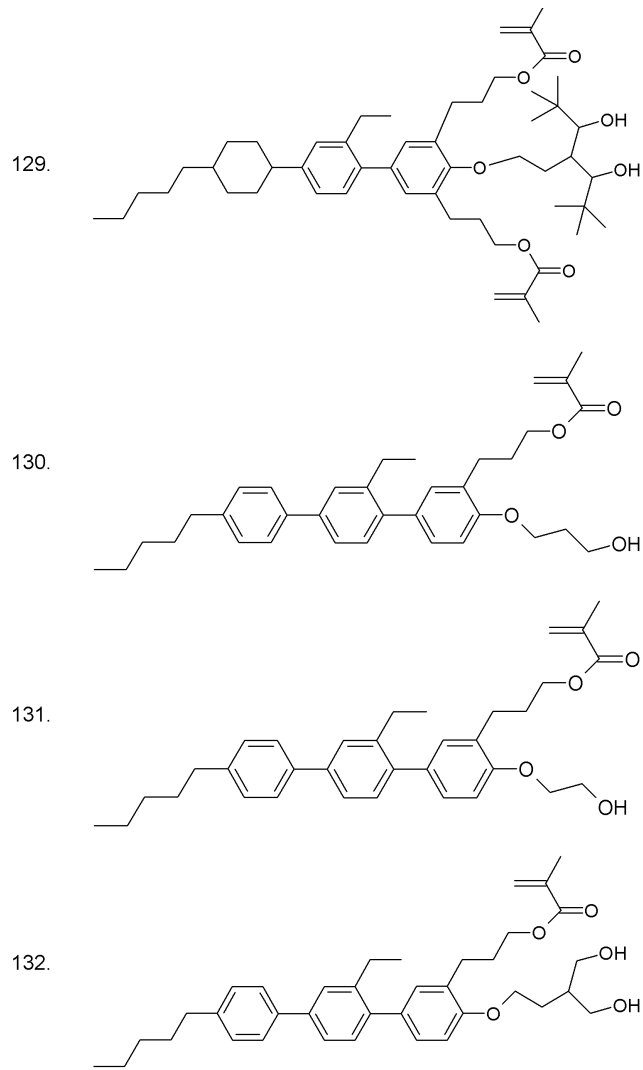
[0573]



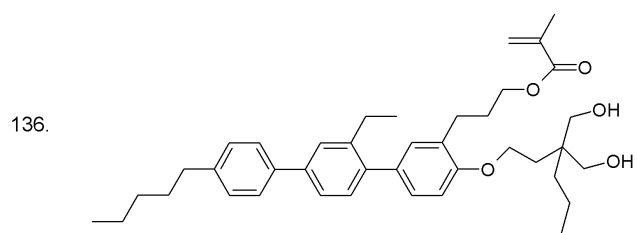
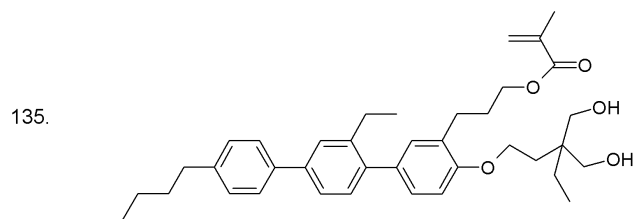
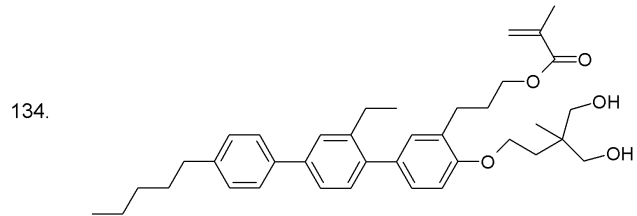
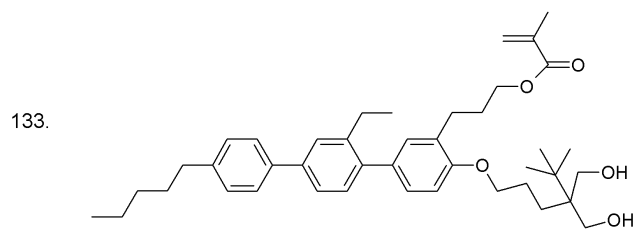
[0574]



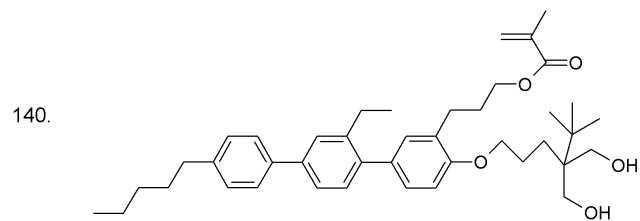
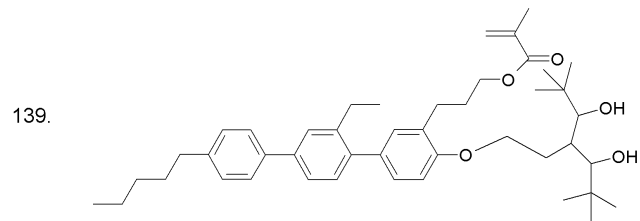
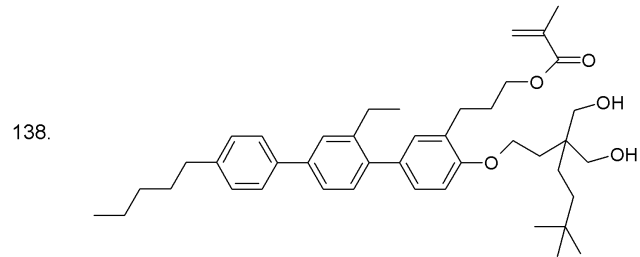
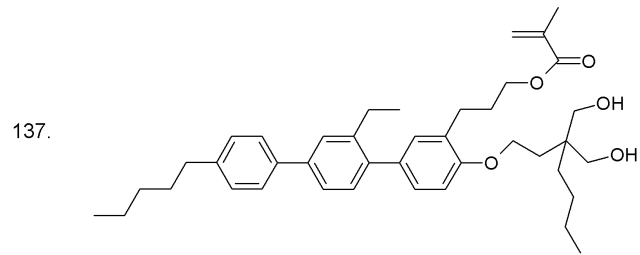
[0575]



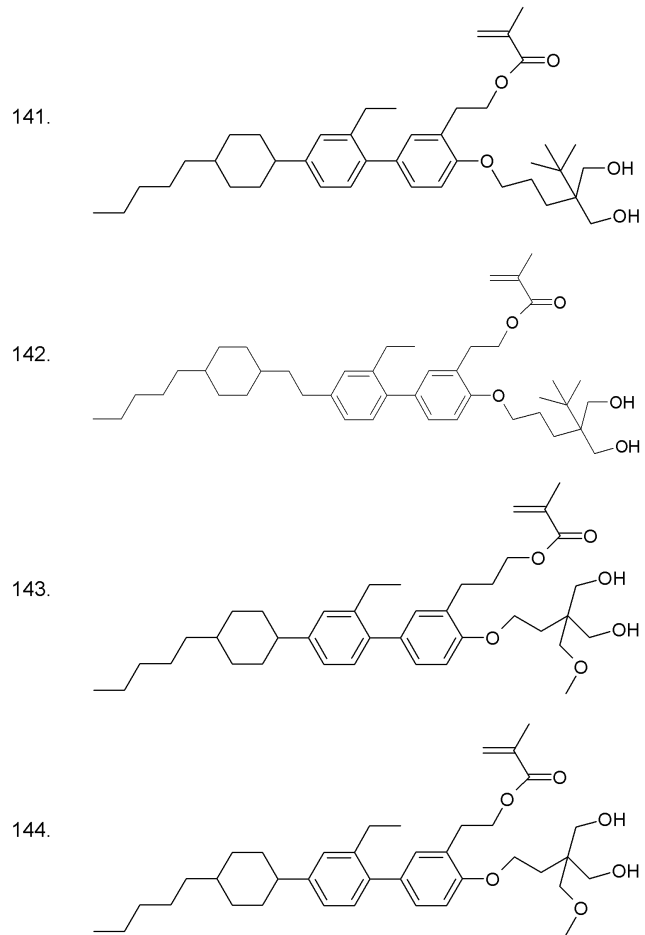
[0576]



[0577]

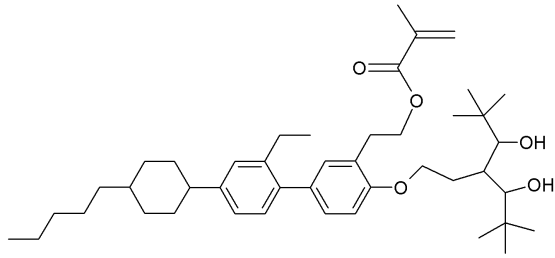


[0578]

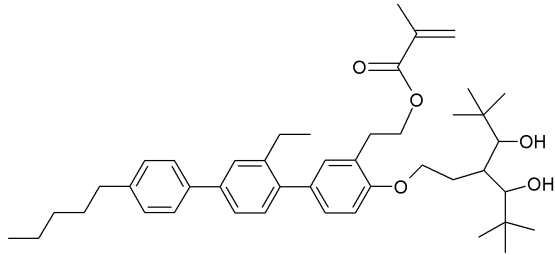


[0579]

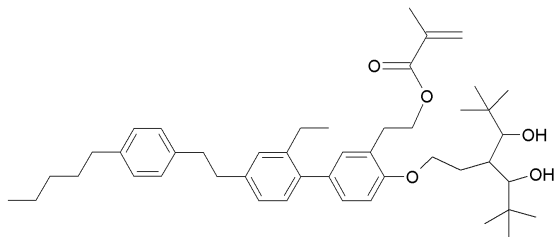
145.



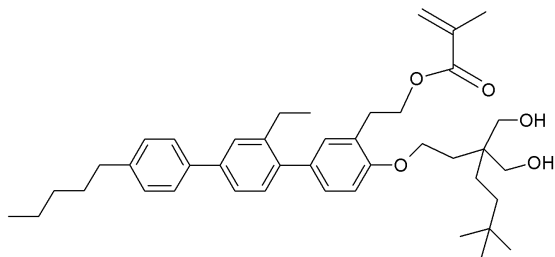
146.



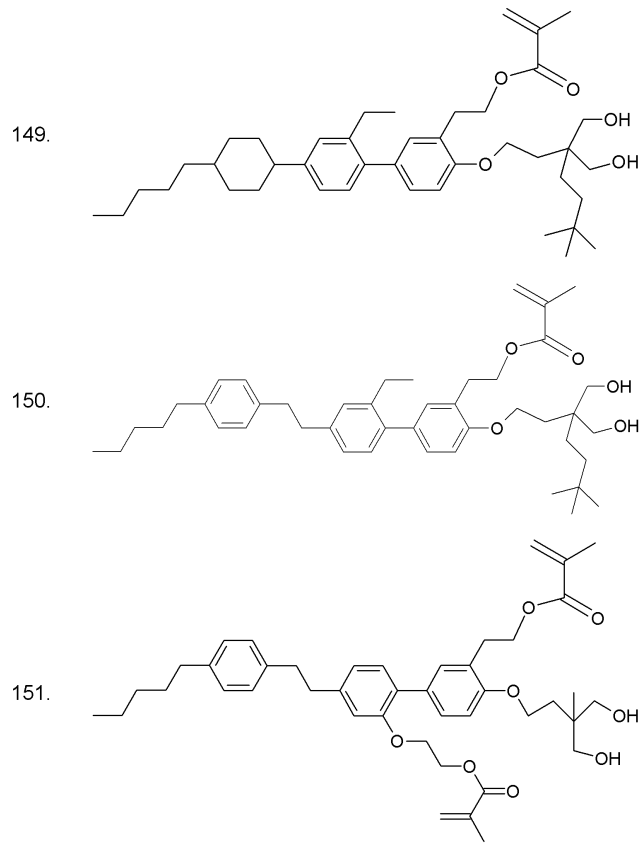
147.



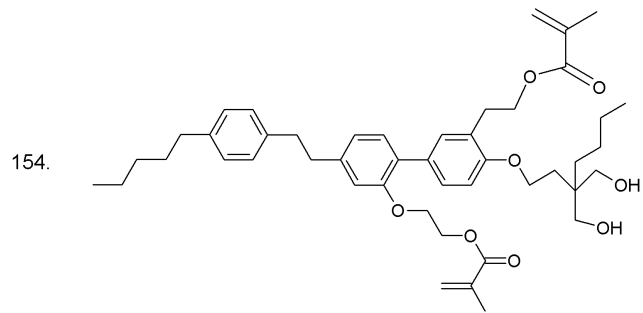
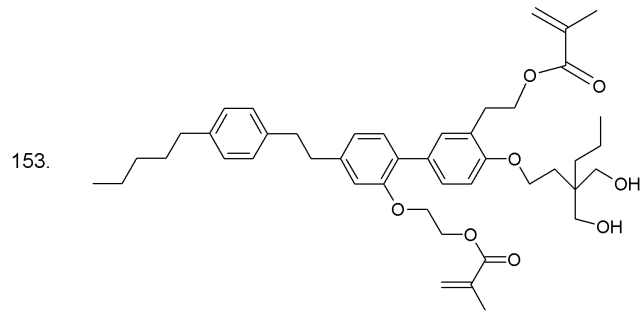
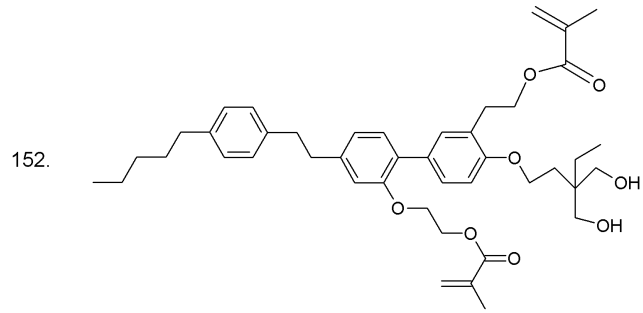
148.



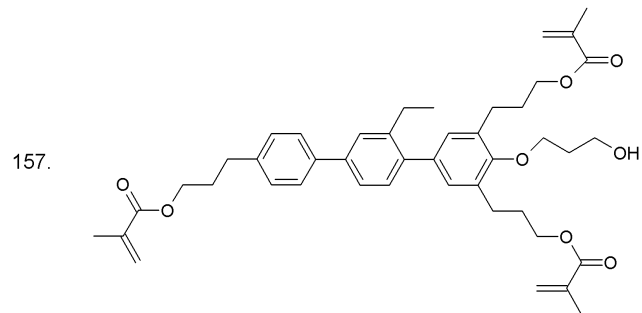
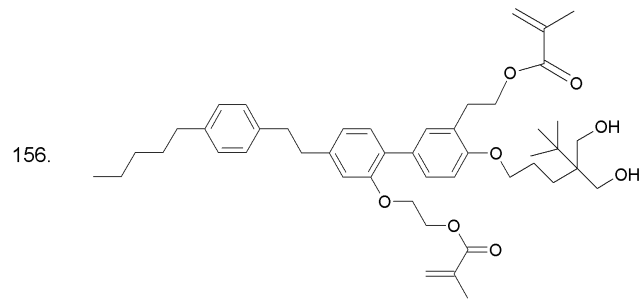
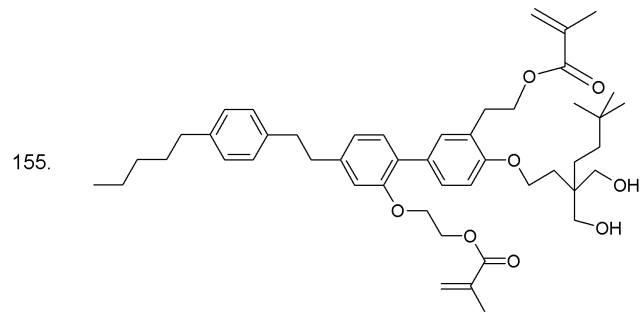
[0580]



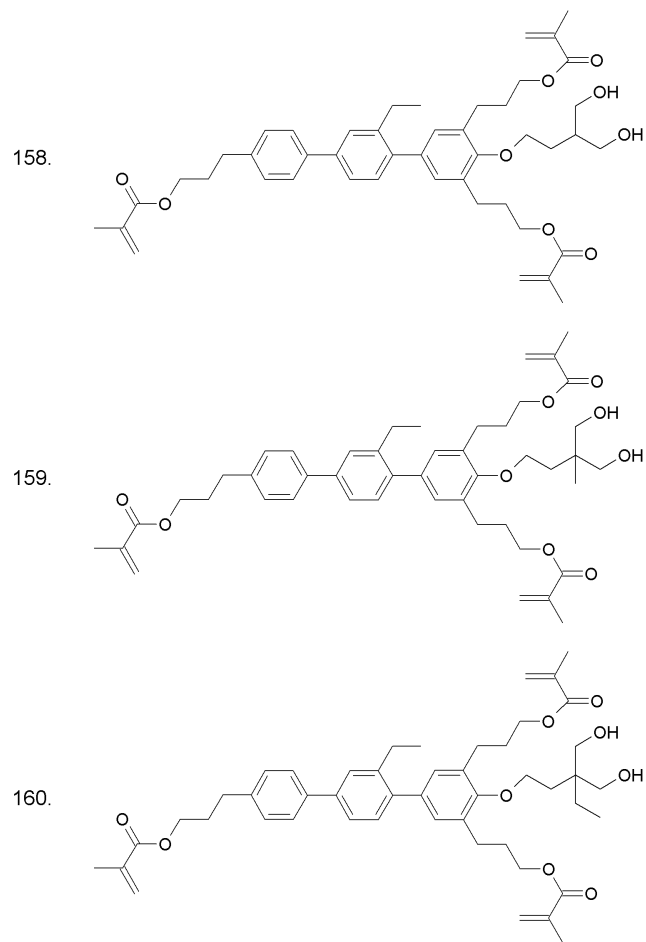
[0581]



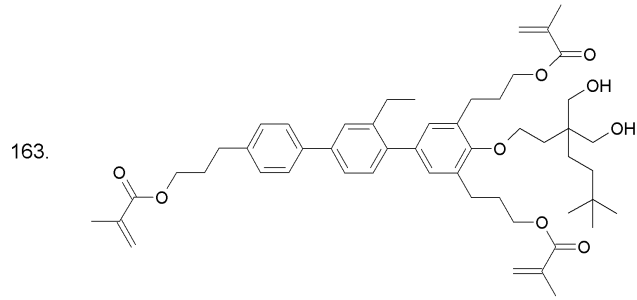
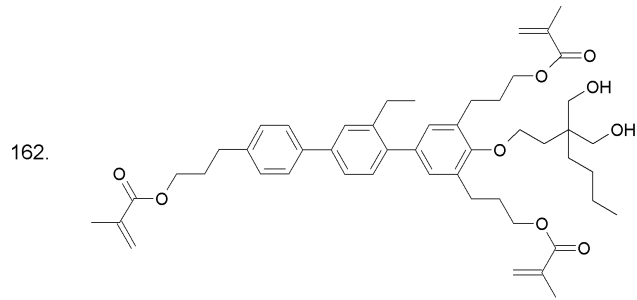
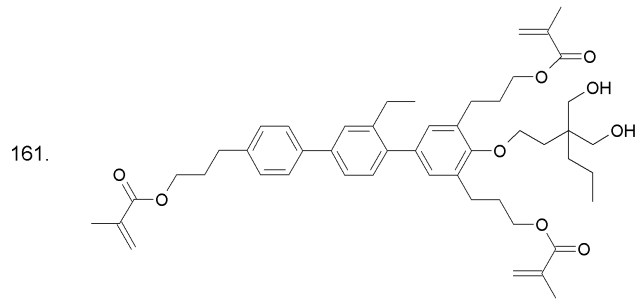
[0582]



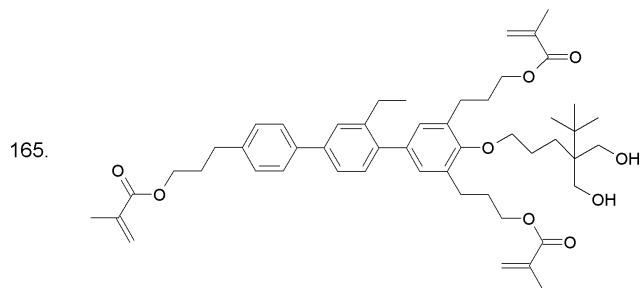
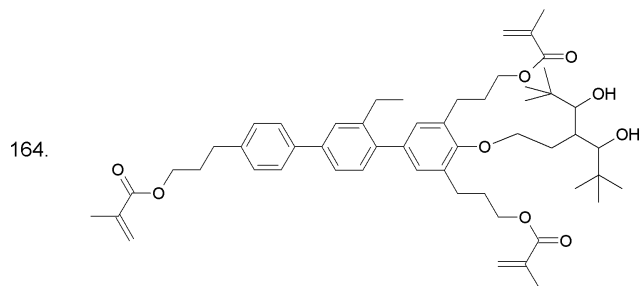
[0583]



[0584]



[0585]



[0586]

[0587]

[0588]

A) 혼합물 실시예

하기 기재된 중량 퍼센트 비율로 저분자량 성분으로 이루어진 하기 액정 화합물을 사용하여 본 발명에 따른 액정 매질을 제조하였다.

H1: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CY-3-O2	15.50%	등명점[°C]:	75.1
CCY-3-O3	8.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.098
CCY-4-O2	10.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.0
CPY-2-O2	5.50%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.4
CPY-3-O2	11.50%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.4
CCH-34	9.25%	K_1 [pN, 20°C]:	13.1
CCH-23	24.50%	K_3 [pN, 20°C]:	13.3
PYP-2-3	8.75%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	113
PCH-301	7.00%	V_0 [20°C, V]:	2.22

H2: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CY-3-O4	14.00%	등명점[°C]:	80.0
CCY-3-O2	9.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.090
CCY-3-O3	9.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.3
CPY-2-O2	10.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.4
CPY-3-O2	10.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.7
CCY-3-1	8.00%	K_1 [pN, 20°C]:	15.1
CCH-34	9.00%	K_3 [pN, 20°C]:	14.6
CCH-35	6.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	140
PCH-53	10.00%	V_0 [20°C, V]:	2.23
CCH-301	6.00%		
CCH-303	9.00%		

H3: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CC-3-V1	9.00%	등명점[°C]:	74.7
CCH-23	18.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.098
CCH-34	3.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.4
CCH-35	7.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.5
CCP-3-1	5.50%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.9
CCY-3-O2	11.50%	K_1 [pN, 20°C]:	14.9
CPY-2-O2	8.00%	K_3 [pN, 20°C]:	15.9
CPY-3-O2	11.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	108
CY-3-O2	15.50%	V_0 [20°C, V]:	2.28
PY-3-O2	11.50%		

H4: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CC-3-V	37.50%	등명점[°C]:	74.8
CC-3-V1	2.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.099
CCY-4-O2	14.50%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-2.9
CPY-2-O2	10.50%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.7
CPY-3-O2	9.50%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.6
CY-3-O2	15.00%	K_1 [pN, 20°C]:	12.2
CY-3-O4	4.50%	K_3 [pN, 20°C]:	13.4
PYP-2-4	5.50%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	92
PPGU-3-F	1.00%	V_0 [20°C, V]:	2.28

H5: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CCH-23	20.00%	등명점[°C]:	74.8
CCH-301	6.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.105
CCH-34	6.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.2
CCP-3-1	3.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.5
CCY-3-O2	11.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.8
CPY-2-O2	12.00%	K_1 [pN, 20°C]:	12.7
CPY-3-O2	11.00%	K_3 [pN, 20°C]:	13.6
CY-3-O2	14.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	120
CY-3-O4	4.00%	V_0 [20°C, V]:	2.16
PCH-301	4.00%		
PYP-2-3	9.00%		

H6: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CC-4-V	17.00%	등명점[°C]:	106.1
CCP-V-1	15.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.120
CCPC-33	2.50%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.6
CCY-3-O2	4.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.5

[0591]

CCY-3-O3	5.00%	$\varepsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	7.0
CCY-4-O2	5.00%	K_1 [pN, 20°C]:	16.8
CLY-3-O2	3.50%	K_3 [pN, 20°C]:	17.3
CLY-3-O3	2.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	207
CPY-2-O2	8.00%	V_0 [20°C, V]:	2.33
CPY-3-O2	10.00%		
CY-3-O4	17.00%		
PYP-2-3	11.00%		

H7: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\varepsilon < 0$)

CY-3-O2	15.00%	등명점[°C]:	75.5
CCY-4-O2	9.50%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.108
CCY-5-O2	5.00%	$\Delta\varepsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.0
CPY-2-O2	9.00%	$\varepsilon_{\parallel}$ [1 kHz, 20°C]:	3.5
CPY-3-O2	9.00%	$\varepsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.5
CCH-34	9.00%	K_1 [pN, 20°C]:	12.9
CCH-23	22.00%	K_3 [pN, 20°C]:	13.0
PYP-2-3	7.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	115
PYP-2-4	7.50%	V_0 [20°C, V]:	2.20
PCH-301	7.00%		

H8: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\varepsilon < 0$)

CY-3-O2	15.00%	등명점[°C]:	74.7
CY-5-O2	6.50%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.108
CCY-3-O2	11.00%	$\Delta\varepsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.0
CPY-2-O2	5.50%	$\varepsilon_{\parallel}$ [1 kHz, 20°C]:	3.6
CPY-3-O2	10.50%	$\varepsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.6
CC-3-V	28.50%	K_1 [pN, 20°C]:	12.9
CC-3-V1	10.00%	K_3 [pN, 20°C]:	15.7
PYP-2-3	12.50%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	97

[0592]

PPGU-3-F 0.50% V_0 [20°C, V]: 2.42

H9: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CCH-35	9.50%	등명점[°C]:	79.1
CCH-501	5.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.091
CCY-2-1	9.50%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.6
CCY-3-1	10.50%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.5
CCY-3-O2	10.50%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	7.1
CCY-5-O2	9.50%	K_1 [pN, 20°C]:	14.6
CPY-2-O2	12.00%	K_3 [pN, 20°C]:	14.5
CY-3-O4	9.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	178
CY-5-O4	11.00%	V_0 [20°C, V]:	2.12
PCH-53	13.50%		

H10: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

BCH-32	4.00%	등명점[°C]:	74.8
CC-3-V1	8.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.106
CCH-23	13.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.5
CCH-34	7.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.6
CCH-35	7.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	7.1
CCY-3-O2	13.00%	K_1 [pN, 20°C]:	14.8
CPY-2-O2	7.00%	K_3 [pN, 20°C]:	15.8
CPY-3-O2	12.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	115
CY-3-O2	12.00%	V_0 [20°C, V]:	2.23
PCH-301	2.00%		
PY-3-O2	15.00%		

H11: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CY-3-O4	22.00%	등명점[°C]:	86.9
CY-5-O4	12.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.111

[0593]

CCY-3-O2	6.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-4.9
CCY-3-O3	6.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.8
CCY-4-O2	6.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	8.7
CPY-2-O2	10.00%	K_1 [pN, 20°C]:	14.9
CPY-3-O2	10.00%	K_3 [pN, 20°C]:	15.9
PYP-2-3	7.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	222
CC-3-V1	7.00%	V_0 [20°C, V]:	1.91
CC-5-V	10.00%		
CCPC-33	2.00%		
CCPC-35	2.00%		

H12: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CY-3-O4	12.00%	등명점[°C]:	86.0
CY-5-O2	10.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.110
CY-5-O4	8.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-5.0
CCY-3-O2	8.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.8
CCY-4-O2	7.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	8.8
CCY-5-O2	6.00%	K_1 [pN, 20°C]:	14.7
CCY-2-1	8.00%	K_3 [pN, 20°C]:	16.0
CCY-3-1	7.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	250
CPY-3-O2	9.00%	V_0 [20°C, V]:	1.90
CPY-3-O2	9.00%		
BCH-32	6.00%		
PCH-53	10.00%		

H13: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon < 0$)

CC-3-V1	10.25%	등명점[°C]:	74.7
CCH-23	18.50%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.103
CCH-35	6.75%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.1
CCP-3-1	6.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	3.4

[0594]

CCY-3-1	2.50%	$\varepsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.4
CCY-3-O2	12.00%	K_1 [pN, 20°C]:	15.4
CPY-2-O2	6.00%	K_3 [pN, 20°C]:	16.8
CPY-3-O2	9.75%	γ_1 [mPa-s, 20°C]:	104
CY-3-O2	11.50%	V_0 [20°C, V]:	2.46
PP-1-2V1	3.75%		
PY-3-O2	13.00%		

H14: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\varepsilon < 0$)

CC-3-V	27.50%	등명점[°C]:	74.7
CC-3-V1	10.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.104
CCH-35	8.00%	$\Delta\varepsilon$ [1 kHz, 20°C]:	-3.0
CCY-3-O2	9.25%	$\varepsilon_{\parallel}$ [1 kHz, 20°C]:	3.4
CLY-3-O2	10.00%	$\varepsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	6.4
CPY-3-O2	11.75%	K_1 [pN, 20°C]:	15.3
PY-3-O2	14.00%	K_3 [pN, 20°C]:	16.2
PY-4-O2	9.00%	γ_1 [mPa-s, 20°C]:	88
PYP-2-4	0.50%	V_0 [20°C, V]:	2.44

H15: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\varepsilon > 0$)

CC-4-V	10.00%	등명점[°C]:	77.0
CC-5-V	13.50%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.113
PGU-3-F	6.50%	$\Delta\varepsilon$ [1 kHz, 20°C]:	19.2
ACQU-2-F	10.00%	$\varepsilon_{\parallel}$ [1 kHz, 20°C]:	23.8
ACQU-3-F	12.00%	$\varepsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	4.6
PUQU-3-F	11.00%	K_1 [pN, 20°C]:	11.5
CCP-V-1	12.00%	K_3 [pN, 20°C]:	11.1
APUQU-2-F	6.00%	γ_1 [mPa-s, 20°C]:	122
APUQU-3-F	7.00%	V_0 [20°C, V]:	0.81
PGUQU-3-F	8.00%		

[0595]

CPGU-3-OT 4.00%

H16: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon > 0$)

PGU-2-F	3.50%	등명점[°C]:	77.0
PGU-3-F	7.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.105
CC-3-V1	15.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	7.2
CC-4-V	18.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	10.3
CC-5-V	20.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	3.1
CCP-V-1	6.00%	K_1 [pN, 20°C]:	15.3
APUQU-3-F	15.00%	K_3 [pN, 20°C]:	13.5
PUQU-3-F	5.50%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	63
PGP-2-4	3.00%	V_0 [20°C, V]:	1.53
BCH-32	7.00%		

H17: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon > 0$)

APUQU-2-F	6.00%	등명점[°C]:	74.0
APUQU-3-F	12.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.120
PUQU-3-F	18.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	17.4
CPGU-3-OT	9.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	22.0
CCGU-3-F	3.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	4.5
BCH-3F.F.F	14.00%	K_1 [pN, 20°C]:	10.1
CCQU-3-F	10.00%	K_3 [pN, 20°C]:	10.8
CC-3-V	25.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	111
PGP-2-2V	3.00%	V_0 [20°C, V]:	0.80

H18: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon > 0$)

PUQU-3-F	15.00%	등명점[°C]:	74.3
APUQU-2-F	5.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.120
APUQU-3-F	12.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	14.9

[0596]

CCQU-3-F	11.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	19.1
CCQU-5-F	1.50%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	4.3
CPGU-3-OT	5.00%	K_1 [pN, 20°C]:	11.2
CCP-30CF3	4.50%	K_3 [pN, 20°C]:	10.8
CGU-3-F	10.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	98
PGP-2-3	1.50%	V_0 [20°C, V]:	0.91
PGP-2-2V	8.00%		
CC-3-V	26.50%		

H19: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon > 0$)

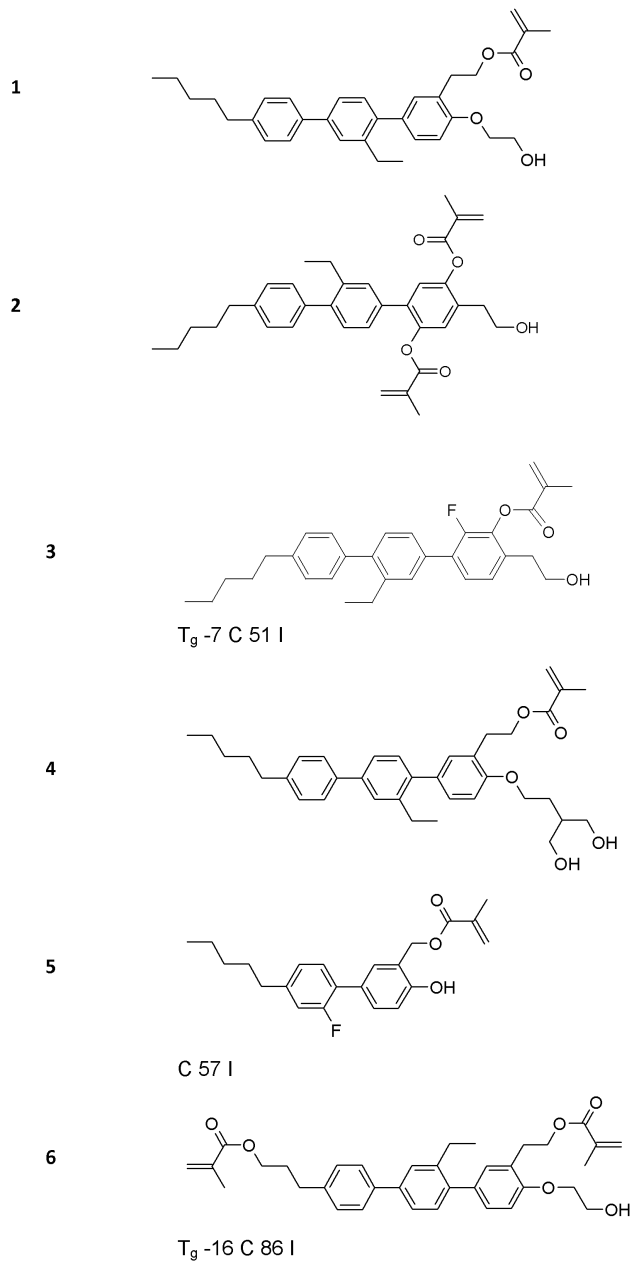
CCQU-3-F	9.00%	등명점[°C]:	94.5
CCQU-5-F	9.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.121
PUQU-3-F	16.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	20.4
APUQU-2-F	8.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	24.7
APUQU-3-F	9.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	4.3
PGUQU-3-F	8.00%	K_1 [pN, 20°C]:	12.1
CPGU-3-OT	7.00%	K_3 [pN, 20°C]:	13.9
CC-4-V	18.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	163
CC-5-V	5.00%	V_0 [20°C, V]:	0.81
CCP-V-1	6.00%		
CCPC-33	3.00%		
PPGU-3-F	2.00%		

H20: 네마틱 호스트 혼합물 ($\Delta\epsilon > 0$)

CC-3-V	28.50%	등명점[°C]:	85.6
CCP-V1	3.00%	Δn [589 nm, 20°C]:	0.121
CCPC-33	2.00%	$\Delta\epsilon$ [1 kHz, 20°C]:	19.5
PGU-2-F	4.00%	$\epsilon_{ }$ [1 kHz, 20°C]:	23.8
CCQU-3-F	8.00%	$\epsilon_{\perp}$ [1 kHz, 20°C]:	4.3
CCQU-5-F	6.00%	K_1 [pN, 20°C]:	11.6
CCGU-3-F	3.00%	K_3 [pN, 20°C]:	12.7
PUQU-2-F	2.00%	γ_1 [mPa·s, 20°C]:	126
PUQU-3-F	10.00%	V_0 [20°C, V]:	0.81
APUQU-2-F	6.00%		
APUQU-3-F	9.00%		
PGUQU-3-F	5.00%		
PGUQU-4-F	5.00%		
PGUQU-5-F	4.00%		
CPGU-3-OT	4.00%		
PPGU-3-F	0.50%		

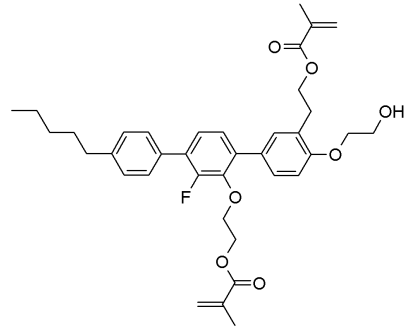
하기 중합성 자가-정렬 첨가제를 사용하였다:

중합성 자가-정렬 첨가제 번호	구조
	적합한 경우, 상 거동(T_g : 유리 전이 온도, C: 결정성, I: 등방성), 전이 온도(°C 단위)



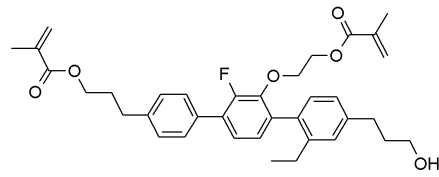
[0602]

7



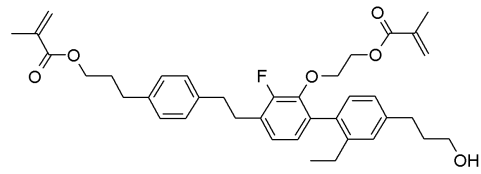
T_g -21 I

8



T_g -26 I

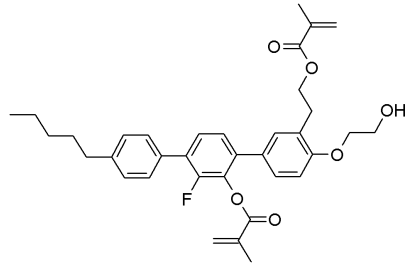
9



T_g -36 I

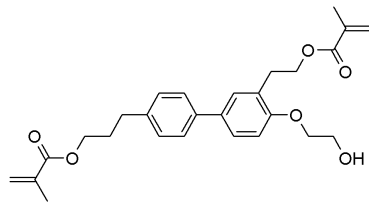
[0603]

10

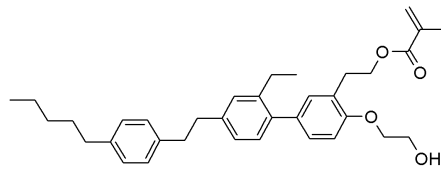


T_g -3 I

11

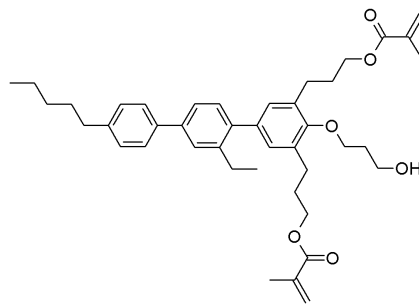


12



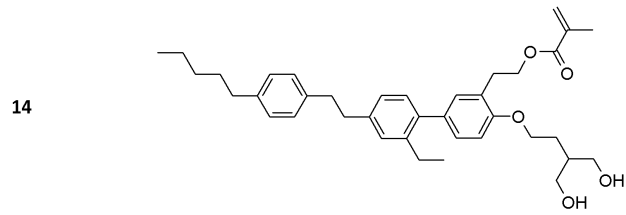
C 40 I

13

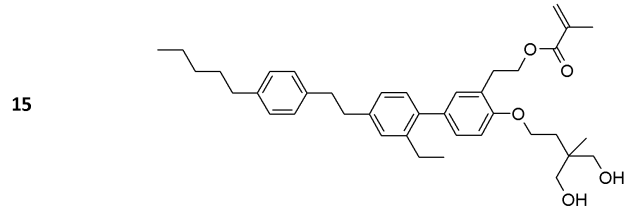


T_g -38 I

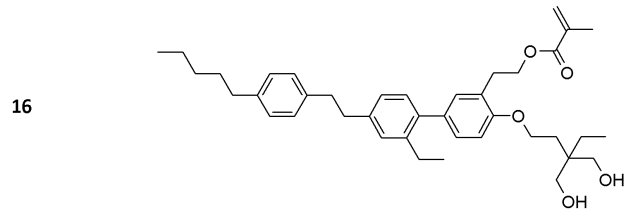
[0604]



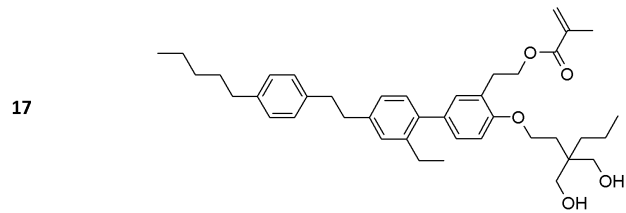
T_g -26 C 54 I



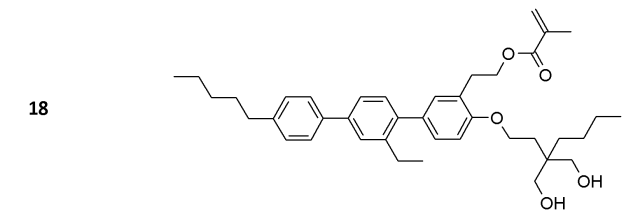
T_g -24 I



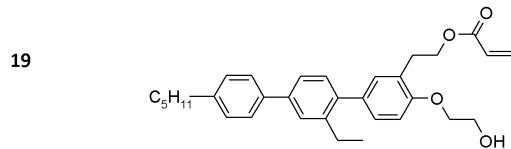
T_g -21 I



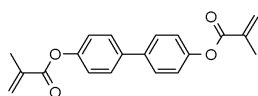
T_g -20 I



T_g -14 I



하기 중합성 화합물이 사용된다:



RM-1

혼합물 실시예 1

중합성 자가-정렬 첨가제 **1**(2.0중량%)을 VA 유형($\Delta \varepsilon < 0$)의 네마틱 액정 매질 **H1**에 첨가하고, 혼합물을 균질

화시켰다.

[0611] 선정렬(pre-alignment) 층 없는 시험 셀 내에서의 사용:

[0612] 형성된 혼합물을 시험 셀(폴리이미드 정렬 층 없음, 층 두께 d 대략 4.0 μm , 두 면 모두 ITO 코팅, 다중도메인 스위칭을 위해 구조화된 ITO, 부동태화 없음) 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기관 표면에 대해 자발적인 호메오토폭(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA 셀은 전압의 인가에 의해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0613] PM-VA, PVA, MVA 및 유사한 기술에 사용되는 VA 정렬 층은 중합성 자가-정렬 첨가제 1로서의 첨가제의 사용을 더 이상 필요로하지 않는다.

[0614] 혼합물 실시예 2

[0615] 중합성 자가-정렬 첨가제 1(2.0 중량%)을 VA-IPS 유형($\Delta\epsilon > 0$)의 네마틱 액정 매질 H15에 첨가하고, 혼합물을 균질화시켰다.

[0616] 선정렬 층 없는 시험 셀 내에서의 사용:

[0617] 형성된 혼합물을 시험 셀(폴리이미드 정렬 층 없음, 층 두께 d 대략 4.0 μm , 두 면 모두 ITO 코팅, 다중도메인 스위칭을 위해 구조화된 ITO, 부동태화 없음) 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기관 표면에 대해 자발적인 호메오토폭(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA-IPS 셀은 전압의 인가에 의해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0618] VA-IPS, HT-VA 및 유사한 기술에 사용되는 VA 정렬 층은 중합성 자가-정렬 첨가제 1로서의 첨가제 사용을 더 이상 필요로하지 않는다.

[0619] 혼합물 실시예 3 내지 20

[0620] 혼합물 실시예 1과 유사하게, 중합성 자가-정렬 첨가제 2 내지 19(표 5에 따른 중량%)를 네마틱 액정 매질 H1($\Delta\epsilon < 0$)에 첨가하고, 혼합물을 균질화시켰다. 형성된 혼합물을 선정렬 층 없는 시험 셀 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기관 표면에 대해 자발적인 호메오토폭(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA 셀은 전압의 인가로 인해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0621] 혼합물 실시예 21 내지 33

[0622] 혼합물 실시예 2와 유사하게, 중합성 자가-정렬 첨가제 2 내지 4, 7, 10, 12 내지 19(표 5에 따른 중량%)를 네마틱 액정 매질 H15($\Delta\epsilon > 0$)에 첨가하고, 혼합물을 균질화시켰다. 형성된 혼합물을 선정렬 층 없는 시험 셀 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기관 표면에 대해 자발적인 호메오토폭(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA-IPS 셀은 전압의 인가로 인해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0623] 혼합물 실시예 34 내지 98

[0624] 혼합물 실시예 1과 유사하게, 중합성 자가-정렬 첨가제 1, 4, 13, 18 및 19(표 5에 따른 중량%)를 네마틱 액정 매질 H2 내지 H14($\Delta\epsilon < 0$)에 첨가하고, 혼합물을 균질화시켰다. 형성된 혼합물을 선정렬 층 없는 시험 셀(혼합물 실시예 1 참조) 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기관 표면에 대해 자발적인 호메오토폭(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA 셀은 전압의 인가로 인해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0625] 혼합물 실시예 99 내지 123

[0626] 혼합물 실시예 2와 유사하게, 중합성 자가-정렬 첨가제 1, 4, 13, 18 및 19(표 5에 따른 중량%)를 네마틱 액정 매질 H16 내지 H20($\Delta\epsilon > 0$)에 첨가하고, 혼합물을 균질화시켰다. 형성된 혼합물을 선정렬 층 없는 시험 셀 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기관 표면에 대해 자발적인 호메오토폭(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA-IPS 셀은 전압의 인가로 인해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0627] 혼합물 실시예 1a, 3a 내지 5a, 8a, 11a, 13a 내지 19a(혼합물 실시예 1, 3 내지 5, 8, 11, 13 내지 19의 중합)

[0628] 각각의 경우, 중합성 자가-정렬 첨가제 1, 2 내지 4, 7, 10, 12 내지 18(표 5에 따른 중량%)을 네마틱 액정 매

질 **H1**($\Delta \epsilon < 0$)에 첨가하고, 혼합물을 균질화시켰다.

[0629] 선정렬 층 없는 시험 셀 내에서의 사용:

[0630] 형성된 혼합물을 시험 셀(폴리이미드 정렬 층 없음, 층 두께 d 대략 4.0 μm , 두 면 모두 ITO 코팅, 다중도메인 스위칭을 위해 구조화된 ITO, 부동태화 없음) 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기판 표면에 대해 자발적인 호메오토ropic(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA 셀은 전압의 인가로 인해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0631] 광학역치 전압(예를 들어, 14 Vpp) 초과 전압을 도입하는 동안, VA 셀을, 340 nm 대역-통과 필터에 의해 20℃에서 100 mW/cm^2 의 강도를 갖는 UV 광으로 12분 동안 조사하였다. 이는 중합성 화합물의 중합을 유발시켰다. 이에 따라 호메오토ropic 정렬이 추가로 안정화되고, '선경사'가 구축되고, 중합체 층이 형성된다(표 1). 수득된 PSA-VA 셀은 전압의 인가시 등명점 이하로 역으로 스위칭될 수 있다. 비중합된 셀과 비교하여 반응 시간은 짧아진다. 역치 전압(V_{10})은 변한다(표 2). 중합성 성분의 화학적 구조에 따라, VHR(전압 보유율)은 약간 개선될 수 있다(표 3).

[0632] 중합은 또한, 전압의 인가 없이 수행될 수 있다. 이렇게 하여 상기 호메오토ropic 정렬은 따라서 추가로 안정화되고, 중합체 층은 선경사각 구축 없이 형성된다. 중합체 층은 보호 층으로서 작용하고 PSA-VA 셀의 장기 안정성을 개선한다.

[0633] PSA, PS-VA 및 유사한 기술에 사용되는 VA 정렬 층은 예컨대, 중합성 자가-정렬 첨가제 1 내지 4의 첨가제의 사용이 더 이상 필요하지 않다.

[0634] 혼합물 실시예 1b, 3b-5b, 8b, 11b, 13b-19b(혼합물 실시예 1a, 3a-5a, 8a, 11a, 13a-19a의 중합체 안정화)

[0635] 중합성 화합물(RM-1, 0.3 중량%) 및 중합성 자가-정렬 첨가제 1, 2 내지 4, 7, 10, 12 내지 18(표 5에 따른 중량%)을 네마틱 액정 매질 **H1**($\Delta \epsilon < 0$)에 첨가하고, 혼합물을 균질화시켰다.

[0636] 선정렬 층 없는 시험 셀 내에서의 사용:

[0637] 형성된 혼합물을 시험 셀(폴리이미드 정렬 층 없음, 층 두께 d 대략 4.0 μm , 두 면 모두 ITO 코팅, 다중도메인 스위칭을 위해 구조화된 ITO, 부동태화 없음) 내로 도입하였다. 상기 액정 매질은 기판 표면에 대해 자발적인 호메오토ropic(수직) 정렬을 갖는다. 이러한 정렬은 등명점까지 안정하게 유지되고, 형성된 VA 셀은 전압의 인가로 인해 가역적으로 스위칭될 수 있다.

[0638] 광학역치 전압(예를 들어, 14 Vpp) 초과 전압을 도입하는 동안, VA 셀을, 340 nm 대역-통과 필터에 의해 20℃에서 100 mW/cm^2 의 강도를 갖는 UV 광으로 12분 동안 조사하였다. 이는 중합성 화합물의 중합을 유발시켰다. 이에 따라 호메오토ropic 정렬이 추가로 안정화되고, '선경사'가 구축되고, 중합체 층이 형성된다(표 1). 수득된 PSA-VA 셀은 전압의 인가시 등명점 이하로 역으로 스위칭될 수 있다. 비중합된 셀과 비교하여 반응 시간은 짧아진다. 역치 전압(V_{10})은 변한다(표 2). 중합성 성분의 화학적 구조에 따라, VHR(전압 보유율)은 약간 개선될 수 있다(표 4).

[0639] 중합은 또한, 전압의 인가 없이 수행될 수 있다. 이렇게 하여 상기 호메오토ropic 정렬은 따라서 추가로 안정화되고, 중합체 층은 선경사각 구축 없이 형성된다. 중합체 층은 보호 층으로서 작용하고 PSA-VA 셀의 장기 안정성을 개선한다.

[0640] PSA, PS-VA 및 유사한 기술에 사용되는 VA 정렬 층은 예컨대, 중합성 자가-정렬 첨가제 1 내지 4의 첨가제의 사용이 더 이상 필요하지 않다.

[0641] 표 1: UV 조사 후에 형성된 중합체 층의 층 두께 d 및 조도 R_a (호스트 **H1**과 중합성 자가-정렬 첨가제(PSAA)의 조합; PSA 유형의 시험 셀; 중합 조건: 0 Vpp, 15 분, 100 mW/cm^2 , 340 nm 대역-통과 필터, 40℃. AFM 측정을 위한 셀 제조: 조사(irradiation) 후 셀을 사이클로헥산으로 행구고, 셀 기판을 서로 분리시키고 측정(파크(Park) 또는 비코(veeco), 실온)에 사용).

혼합물 실시예	PSAA	추가 의 중합성 혼합물	R_a /nm	d / nm
1a	1		1.4	12
3a	2		3.6	20
5a	4		2.2	-
6a	5		2.5	46
1b	1	RM-1	2.2	33
6b	5	RM-1	1.4	52

[0642]

[0643]

표 2: 반응 시간 및 VA 및 PSA 셀의 역치 전압 V_{10} (호스트 H1과 중합성 자가-정렬 첨가제(PSAA)의 조합; 중합 조건: UV-1(340 nm 대역-통과 필터, 20℃, 14 Vpp, 2 분, 50 mW/cm²); UV-2(340 nm 대역-통과 필터, 20℃, 0 Vpp, 10 분, 100 mW/cm²)).

혼합물 실시예	PSAA	추가 의 중합성 혼합물	UV 조사 UV-1 + -2	셀 유형	V_{10} /V	반응 시간/ms 0 V→5 V
1	1		없음	VA	2.50	32
3	2		없음	VA	2.43	35
4	3		없음	VA	2.45	33
5	4		없음	VA	2.51	31
7	6		없음	VA	2.47	34
8	7		없음	VA	2.48	31
10	9		없음	VA	2.42	34
13	12		없음	VA	2.48	28
14	13		없음	VA	2.48	34
15	14		없음	VA	2.50	28
17	16		없음	VA	2.51	28
19	18		없음	VA	2.49	31
1a	1		있음	PSA	2.58	23
3a	2		있음	PSA	1.57	20
4a	3		있음	PSA	2.53	16
5a	4		있음	PSA	2.47	27
8a	7		있음	PSA	2.53	16
14a	13		있음	PSA	2.53	29
1b	1	RM-1	있음	PSA	2.64	19
3b	2	RM-1	있음	PSA	-	-
4b	3	RM-1	있음	PSA	2.60	17
5b	4	RM-1	있음	PSA	2.57	29
14b	13	RM-1	있음	PSA	2.58	26

[0644]

[0645]

표 3: 가열(2 h, 120℃) 전후의 VHR(전압 보유율, 60 Hz, 100℃, 5 분)(호스트 혼합물 H1과 중합성 자가-정렬 첨가제(PSAA)의 조합).

혼합물 실시예	PSAA	UV 조사	셀 유형	VHR /%	
				가열 전	가열 후
H1	-	없음		99.0	99.3
1	1	없음	VA	98.6	98.6
3	2	없음	VA	97.9	96.0
4	3	없음	VA	97.4	98.3
5	4	없음	VA	96.4	-
8	7	없음	VA	96.7	-
13	12	없음	VA	96.4	96.9
14	13	없음	VA	96.4	92.0
15	14	없음	VA	97.2	94.8
17	16	없음	VA	97.7	97.8
19	18	없음	VA	97.6	97.8

표 4: UV 조사 전후의 VHR(전압 보유율, 6 Hz, 100℃, 5 분)(호스트 혼합물 H1과 중합성 자가-정렬 첨가제(PSAA)의 조합; 중합 조건: UV-1(340 nm 대역-통과 필터, 20℃, 0 Vpp, 2 분, 50 mW/cm²); UV-2(340 nm 대역-통과 필터, 20℃, 0 Vpp, 10 분, 100 mW/cm²)).

혼합물 실시예	PSAA	추가적 중합성 화합물	UV 조사 UV-1 + -2	셀 유형	가열 전	가열 후
H1	-		있음		94.1	93.1
H1	-	RM-1	있음		93.1	94.7
1a	1		있음	PSA	92.5	85.9
3a	2		있음	PSA	89.6	92.8
1b	1	RM-1	있음	PSA	92.6	89.9
3b	2	RM-1	있음	PSA	90.6	97.4
5b	4	RM-1	있음	PSA	91.3	93.2

표 5: 혼합물 실시예 1 내지 123에 대한 중량%

PSAA	중량%	PSAA	중량%
1	2.0	11	3.0
2	2.0	12	2.0
3	2.0	13	1.5
4	0.3	14	0.3
5	4.0	15	0.3
6	3.0	16	0.3
7	2.5	17	0.5
8	3.0	18	0.5
9	3.0	19	3.0
10	2.5		