



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2025년03월31일  
(11) 등록번호 10-2789343  
(24) 등록일자 2025년03월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07D 493/04 (2006.01) C07C 69/612 (2006.01)  
C07C 69/618 (2006.01) C09K 19/04 (2006.01)  
G02B 5/30 (2022.01) G02F 1/13 (2006.01)

(52) CPC특허분류  
C07D 493/04 (2013.01)  
C07C 69/612 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2022-7027042  
(22) 출원일자(국제) 2021년02월12일  
심사청구일자 2022년08월04일  
(85) 번역문제출일자 2022년08월04일  
(65) 공개번호 10-2022-0124229  
(43) 공개일자 2022년09월13일  
(86) 국제출원번호 PCT/JP2021/005259  
(87) 국제공개번호 WO 2021/166802  
국제공개일자 2021년08월26일

(30) 우선권주장  
JP-P-2020-024935 2020년02월18일 일본(JP)

(56) 선행기술조사문헌  
KR1020130044178 A  
(뒷면에 계속)

전체 청구항 수 : 총 7 항

(73) 특허권자  
후지필름 가부시킴가이샤  
일본 도쿄도 미나토쿠 니시 아자부 2초메 26방 30고

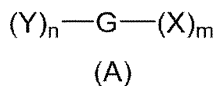
(72) 발명자  
후쿠시마 유키  
일본 가나가와켄 미나미아시가라시 나카누마 210반치 후지필름 가부시킴가이샤 나이  
고다마 게이스케  
일본 가나가와켄 미나미아시가라시 나카누마 210반치 후지필름 가부시킴가이샤 나이  
가토 슌야  
일본 가나가와켄 미나미아시가라시 나카누마 210반치 후지필름 가부시킴가이샤 나이

(74) 대리인  
특허법인코리아나

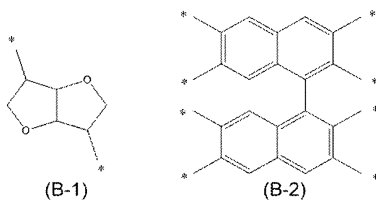
(54) 발명의 명칭 **화합물, 액정 조성물**

**(57) 요약**

본 발명은, 노광 시의 HTP 변화량이 우수하며, HTP 포화율이 우수한 화합물, 상기 화합물을 포함하는 액정 조성물을 제공한다. 본 발명의 화합물은, 일반식 (A)로 나타나는 화합물이다.



G는, 일반식 (B-1)로 나타나는 기, 또는, 일반식 (B-2)로 나타나는 기를 나타낸다. \*는 결합 위치를 나타낸다. X 및 Y는, 소정의 기를 나타낸다.



(52) CPC특허분류

*C07C 69/618* (2013.01)

*C09K 19/04* (2013.01)

*G02B 5/30* (2022.01)

*G02F 1/13* (2013.01)

*C09K 2019/0414* (2013.01)

(56) 선행기술조사문헌

KR1020150079876 A

JP2013087109 A

US20200071615 A1

W02018194157 A1

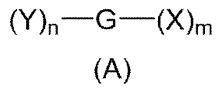
---

명세서

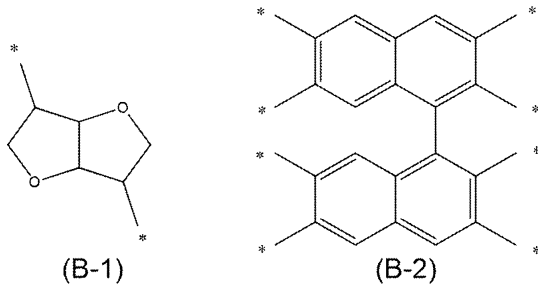
청구범위

청구항 1

일반식 (A)로 나타나는 화합물.

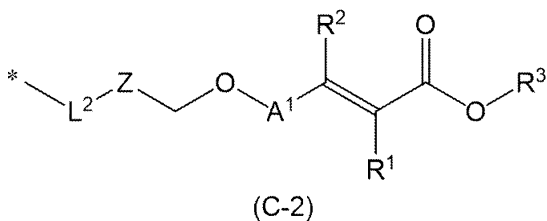
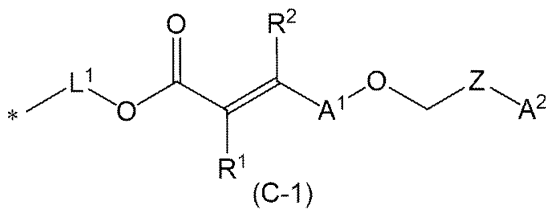


G는, 일반식 (B-1)로 나타나는 기, 또는, 일반식 (B-2)로 나타나는 기를 나타낸다. \*는 결합 위치를 나타낸다.



X는, 수소 원자를 나타낸다.

Y는, 각각 독립적으로, 일반식 (C-1)로 나타나는 기, 또는, 일반식 (C-2)로 나타나는 기를 나타낸다.



L<sup>1</sup>은, 단결합, 또는, -OCO-페닐렌기를 나타낸다.

R<sup>1</sup>은, -CN을 나타낸다.

R<sup>2</sup>는, 수소 원자를 나타낸다.

A<sup>1</sup>은, 치환기를 갖고 있어도 되는 페닐렌기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 나프틸렌기를 나타낸다.

Z는, Y가 상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내는 경우, -CH<sub>2</sub>-가 -CO- 혹은 -O-로 치환되어 있어도 되는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, 단결합, -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, -COO-, 또는, -CH<sub>2</sub>O-를 나타내고, Y가 상기 일반식 (C-2)로 나타나는 기를 나타내는 경우, -COO-를 나타낸다.

A<sup>2</sup>는, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 사이클로알킬기를 나타낸다.

L<sup>2</sup>는, 단결합을 나타낸다.

R<sup>3</sup>은, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 사이클로알킬기를 나타낸다.

G가 상기 일반식 (B-1)로 나타나는 기를 나타내는 경우, n은 2를, m은 0을 나타내고, G가 상기 일반식 (B-2)로 나타나는 기를 나타내는 경우, n은 2를, m은 6을 나타낸다.

\*는, 결합 위치를 나타낸다.

**청구항 2**

청구항 1에 있어서,

G가 상기 일반식 (B-1)로 나타나는 기를 나타내는, 화합물.

**청구항 3**

청구항 1 또는 청구항 2에 있어서,

Y가 상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내는, 화합물.

**청구항 4**

청구항 1 또는 청구항 2에 있어서,

Y가 상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내고,

상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중의 L<sup>1</sup>이 단결합을 나타내는, 화합물.

**청구항 5**

청구항 1 또는 청구항 2에 있어서,

Y가 상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내고,

상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중의 Z가 단결합 또는 -COO-를 나타내는, 화합물.

**청구항 6**

청구항 1 또는 청구항 2에 있어서,

Y가 상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내고,

상기 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중의 A<sup>2</sup>가 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기를 나타내는, 화합물.

**청구항 7**

청구항 1 또는 청구항 2에 기재된 화합물, 및, 액정성 화합물을 포함하는, 액정 조성물.

**청구항 8**

삭제

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은, 화합물, 및, 액정 조성물에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 액정성을 나타내는 화합물(이하, "액정성 화합물"이라고도 한다.)은, 다양한 용도에 적용할 수 있다. 예를 들면, 액정성 화합물은, 위상차 막으로 대표되는 광학 이방체의 제조, 또는, 콜레스테릭 액정상을 고정하여 이루어지는 반사막의 제조에 적용된다.

[0003] 일반적으로, 콜레스테릭 액정상은, 네마틱 액정에 카이랄 화합물을 첨가함으로써 형성된다.

[0004] 예를 들면, 특허문헌 1에는, 액정성 화합물에 대한 나선 비틀림력(HTP: Helical twisting power)을 갖는 카이랄 화합물이 개시되어 있다. 특허문헌 1에 기재된 카이랄 화합물은, 감광성을 갖고, 광조사에 의하여 HTP가 변화한다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0005] (특허문헌 0001) 특허문헌 1: 일본 특허공보 2002-338575호

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0006] 최근, 감광성의 카이랄 화합물에는, HTP의 변화량이 큰 것이 요구되고 있다. 구체적으로는, 카이랄 화합물에 대하여 자외선 등을 노광했을 때에, 노광 전후에서의 HTP의 변화량이 큰 것이 요구된다. 이하, 본 명세서에서는, 노광 전후에서의 카이랄 화합물의 HTP의 변화량이 큰 것을, HTP 변화량이 우수하다고 한다.

[0007] 또, 감광성의 카이랄 화합물에는, 노광 시에 HTP가 변화하기 쉬운 것도 요구되고 있다. 구체적으로는, 적은 노광량으로, 빠르게 HTP가 변화하여, HTP의 변화가 포화점에 도달하기 쉬운 것이 요구되고 있다. 이하, 본 명세서에서는, 적은 노광량으로, 카이랄 화합물의 HTP의 변화가 포화점에 도달하기 쉬운 것을, HTP 포화율이 우수하다고 한다.

[0008] 본 발명자들은, 특허문헌 1에 기재된 카이랄 화합물의 특성에 대하여 검토한 결과, 특허문헌 1에 기재된 카이랄 화합물은, 우수한 HTP 변화량, 및, 우수한 HTP 포화율이 양립할 수 없다는 것을 지견했다.

[0009] 따라서, 본 발명은, 노광 시의 HTP 변화량이 우수하며, HTP 포화율이 우수한 화합물을 제공하는 것을 과제로 한다.

[0010] 또, 본 발명은, 상기 화합물을 포함하는 액정 조성물을 제공하는 것을 과제로 한다.

**과제의 해결 수단**

[0011] 본 발명자들은, 종래 기술의 문제점에 대하여 예의 검토한 결과, 이하의 구성에 의하여 상기 과제를 해결할 수 있는 것을 발견했다.

[0012] (1) 후술하는 일반식 (A)로 나타나는 화합물.

[0013] (2) G가 후술하는 일반식 (B-1)로 나타나는 기를 나타내는, (1)에 기재된 화합물.

[0014] (3) Y가 후술하는 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내는, (1) 또는 (2)에 기재된 화합물.

[0015] (4) Y가 후술하는 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내고,

[0016] 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중의 L<sup>1</sup>이 단결합을 나타내는, (1) 내지 (3) 중 어느 하나에 기재된 화합물.

[0017] (5) Y가 후술하는 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내고,

[0018] 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중의 Z가 단결합 또는 -COO-를 나타내는, (1) 내지 (4) 중 어느 하나에 기재된 화합물.

[0019] (6) Y가 후술하는 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내고,

[0020] 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중의 A<sup>2</sup>가 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족기를 나타내는, (1) 내지 (5) 중 어느 하나에 기재된 화합물.

[0021] (7) Y가 후술하는 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내고,

[0022] 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중, R<sup>1</sup>은, 수소 원자, 할로젠 원자, -CN, -COR, -POR<sub>2</sub>, -SOR, -SO<sub>2</sub>R, 또는, -NO<sub>2</sub>를

나타내며, R은 각각 독립적으로 1가의 치환기를 나타내는, (1) 내지 (6) 중 어느 하나에 기재된 화합물.

[0023] (8) (1) 내지 (7) 중 어느 하나에 기재된 화합물, 및, 액정성 화합물을 포함하는, 액정 조성물.

**발명의 효과**

[0024] 본 발명에 의하면, 노광 시의 HTP의 변화량이 우수하며, HTP 포화율이 우수한 화합물을 제공할 수 있다.

[0025] 또, 본 발명에 의하면, 상기 화합물을 포함하는 액정 조성물을 제공할 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0026] 이하, 본 발명에 대하여 상세하게 설명한다.

[0027] 이하에 기재하는 구성 요건의 설명은, 본 발명의 대표적인 실시형태에 근거하여 이루어지는 경우가 있지만, 본 발명은 그와 같은 실시형태에 제한되는 것은 아니다.

[0028] 또한, 본 명세서에 있어서, "~"를 이용하여 나타나는 수치 범위는, "~"의 전후에 기재되는 수치를 하한값 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다.

[0029] 또, 본 명세서에 있어서, "(메트)아크릴레이트"란, 아크릴레이트 및 메타아크릴레이트의 양방을 나타내는 표기이다.

[0030] 본 명세서에 있어서, 간단히 치환기라고 하는 경우, 치환기로서는, 예를 들면, 하기 치환기 T를 들 수 있다.

[0031] (치환기 T)

[0032] 치환기 T로서는, 예를 들면, 할로젠 원자(불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자, 및, 아이오딘 원자 등), 알킬기, 사이클로알킬기, 알켄일기, 사이클로알켄일기, 알카인일기, 아릴기, 헤테로환기, 사이아노기, 수산기, 나이트로기, 카복실기, 알콕시기, 아릴옥시기, 시릴옥시기, 헤테로환 옥시기, 아실옥시기, 카바모일옥시기, 아미노기(알킬아미노기, 및, 아닐리노기를 포함한다), 아실아미노기, 아미노카보닐아미노기, 알콕시카보닐아미노기, 아릴옥시카보닐아미노기, 설펜모일아미노기, 알킬 또는 아릴설펜일아미노기, 머캅토기, 알킬싸이오기, 아릴싸이오기, 헤테로환 싸이오기, 설펜모일기, 설펜기, 알킬 또는 아릴설펜일기, 알킬 또는 아릴설펜일기, 아실기, 아릴옥시카보닐기, 알콕시카보닐기, 카바모일기, 아릴 또는 헤테로환 아조기, 이미드기, 포스피노기, 포스핀일기, 포스핀일옥시기, 포스핀일아미노기, 실릴기, 및, 중합성기를 포함하는 기(예를 들면, 적합한 구체예로서, 이하의 일반식 (T)로 나타나는 기 등)를 들 수 있다.

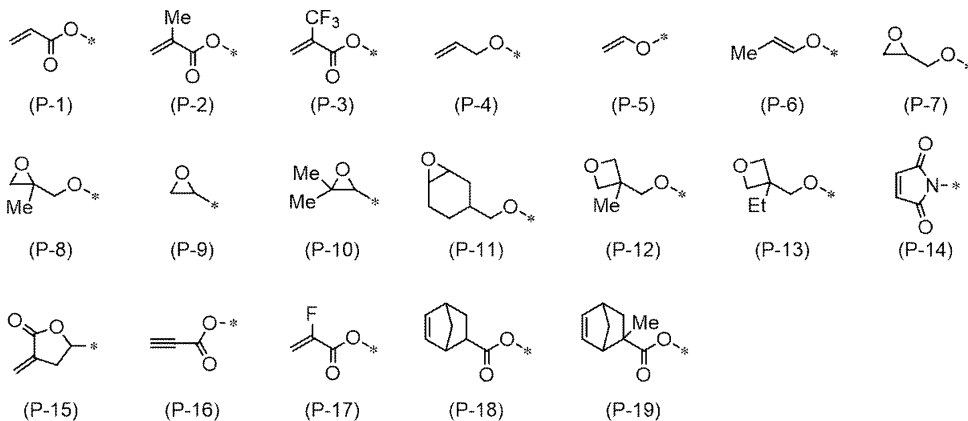
[0033] 일반식 (T):  $*-L_1-P_1$

[0034] 일반식 (T) 중,  $L_1$ 는, 단결합 또는 2가의 연결기를 나타낸다.  $P_1$ 는, 후술하는 일반식 (P-1)~(P-20)으로 나타나는 중합성기 중 어느 하나를 나타낸다.

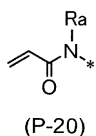
[0035]  $L_1$ 로 나타나는 2가의 연결기로서는, 특별히 제한되지 않지만, 헤테로 원자를 포함하고 있어도 되는 알킬렌기가 바람직하고, 산소 원자를 포함하고 있어도 되는 탄소수 1~10의 알킬렌기가 보다 바람직하며, 산소 원자를 포함하고 있어도 되는 탄소수 1~6의 알킬렌기가 더 바람직하다.

[0036] 또한, 이하에 나타내는 일반식 (P-1)~(P-20)에 있어서, \*는, 결합 위치를 나타낸다. Ra는, 수소 원자 또는 메틸기를 나타낸다. Me는 메틸기를 나타내고, Et는 에틸기를 나타낸다.

[0037] [화학식 1]



[0038]



[0039]

[0040] 상기 치환기 중에서, 수소 원자를 갖는 것은, 치환기 중의 수소 원자의 부분이, 상기 어느 하나의 치환기로 더 치환되어 있어도 된다.

[0041] 본 명세서에 있어서 표기되는 2가의 기의 결합 방향은, 특별히 설명하지 않는 한 제한되지 않는다. 예를 들면, "L-M-N"이 되는 일반식으로 나타나는 화합물 중의, M이 -OCO-C(CN)=CH-인 경우, L측에 결합되어 있는 위치를 \*1, N측에 결합되어 있는 위치를 \*2로 하면, M은, \*1-OCO-C(CN)=CH-\*2여도 되고, \*1-CH=C(CN)-COO-\*2여도 된다. 또, 예를 들면, M이 -COO-인 경우, L측에 결합되어 있는 위치를 \*1, N측에 결합되어 있는 위치를 \*2로 하면, M은, \*1-COO-\*2여도 되고, \*1-OCO-\*2여도 된다.

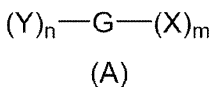
[0042] [일반식 (A)로 나타나는 화합물]

[0043] 일반식 (A)로 나타나는 화합물(이하, "특정 화합물"이라고도 한다.)의 특징점으로서, G로서 일반식 (B-1)로 나타나는 기 또는 일반식 (B-2)로 나타나는 기를 선택하고, Y로서 일반식 (C-1)로 나타나는 기 또는 일반식 (C-2)로 나타나는 기를 선택하는 것을 들 수 있다.

[0044] 일반적으로, 감광성의 카이랄 화합물은, 자외선 등의 에너지 조사를 받으면, 측쇄가 서로 상이한 측이 되도록 광이성화하여 구조 변화를 발생시킬 수 있다. 특정 화합물은, G 및 Y로 나타나는 기를 갖기 때문에, 광이성화에 의한 구조 변화가 크고, 우수한 HTP의 변화량이 달성되어 있다고 추측된다. 또, 특정 화합물은, 적은 노광량이어도, 빠르게 HTP가 변화하여, HTP의 변화가 포화점에 도달하기 쉽고, HTP 포화율이 우수하다.

[0045] 이하, 특정 화합물에 대하여 상세하게 설명한다.

[0046] [화학식 2]



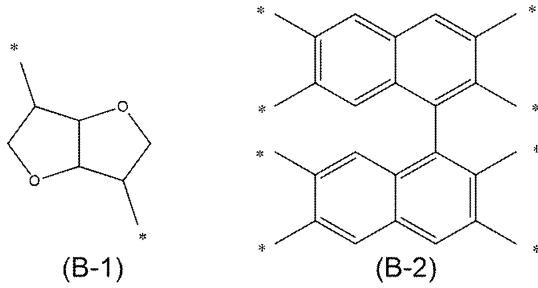
[0047]

[0048] G는, 일반식 (B-1)로 나타나는 기, 또는, 일반식 (B-2)로 나타나는 기를 나타낸다.

[0049] 그중에서도, HTP 변화량에 의하여 우수한 점, 및, HTP 포화율에 의하여 우수한 점의 적어도 일방의 효과가 얻어지는 점(이하, "본 발명의 효과가 보다 우수한 점"이라고도 한다.)에서, G로서는, 일반식 (B-1)로 나타나는 기가 바람직하다. G가 일반식 (B-2)로 나타나는 기인 경우, 2개의 X가 서로 결합하여 환을 형성해도 된다.

[0050] 식 중, \*는 결합 위치를 나타낸다.

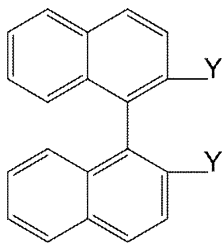
[0051] [화학식 3]



[0052]

[0053] 또한, G가 일반식 (B-2)로 나타나는 기의 경우, 특정 화합물은 이하 식으로 나타나는 화합물인 것이 바람직하다.

[0054] [화학식 4]



[0055]

[0056] X는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 1가의 치환기를 나타낸다.

[0057] X로 나타나는 1가의 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.

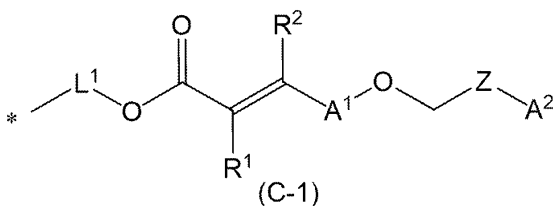
[0058] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, X로서는 수소 원자가 바람직하다.

[0059] Y는, 일반식 (C-1)로 나타나는 기, 또는, 일반식 (C-2)로 나타나는 기를 나타낸다.

[0060] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, Y로서는 일반식 (C-1)로 나타나는 기가 바람직하다.

[0061] 식 중, \*는 결합 위치를 나타낸다.

[0062] [화학식 5]



[0063]

[0064] L<sup>1</sup>은, 각각 독립적으로, 단결합 또는 2가의 연결기를 나타낸다. 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, L<sup>1</sup>로서는 단결합이 바람직하다.

[0065] L<sup>1</sup>로 나타나는 2가의 연결기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 2가의 방향족 탄화 수소기(탄소수 1~15가 바람직하고, 예를 들면, 페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라센일렌기, 및, 바이페닐렌기를 들 수 있다.), 2가의 지방족 탄화 수소기(직쇄상, 분기쇄상, 및, 환상 중 어느 하나여도 되고, 탄소수 1~10이 바람직하며, 예를 들면, 알킬렌기, 알켄일렌기, 및, 알카인일렌기를 들 수 있다.), -O-, -S-, -SO<sub>2</sub>-, -NR<sup>A</sup>-, -CO-, -N=N-, -CH=N-, 및, 이들을 2종 이상 조합한 기를 들 수 있다. 또한, R<sup>A</sup>는, 수소 원자 또는 알킬기(바람직하게는 탄소수 1~5)를 나타낸다.

[0066] 또한, 상기 2가의 연결기 중의 수소 원자는, 치환기로 더 치환되어 있어도 된다.

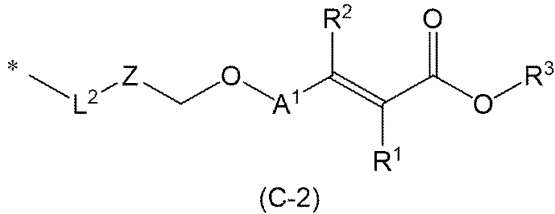
- [0067]  $R^1$  및  $R^2$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 1가의 치환기를 나타낸다.
- [0068]  $R^1$  및  $R^2$ 로 나타나는 1가의 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.
- [0069] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서,  $R^1$ 로서는, 수소 원자, 할로젠 원자,  $-CN$ ,  $-COR$ ,  $-POR_2$ ,  $-SOR$ ,  $-SO_2R$ , 또는,  $-NO_2$ 가 바람직하고, 수소 원자 또는  $-CN$ 이 보다 바람직하다.
- [0070] 또한, R은, 각각 독립적으로, 1가의 치환기를 나타낸다. R로 나타나는 1가의 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.
- [0071] 또, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서,  $R^2$ 로서는 수소 원자가 바람직하다.
- [0072]  $A^1$ 은, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족기를 나타낸다.  $A^1$ 로 나타나는 방향족기는, 2가의 방향족기에 해당한다.
- [0073]  $A^1$ 로 나타나는 방향족기로서는, 방향족 탄화 수소환기, 및, 방향족 복소환기를 들 수 있다.
- [0074]  $A^1$ 로 나타나는 방향족기를 구성하는 방향족환은, 단환 구조, 및, 다환 구조 중 어느 하나여도 된다.
- [0075]  $A^1$ 로 나타나는 방향족기가 갖고 있어도 되는 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.
- [0076]  $A^1$ 로 나타나는 방향족기로서는, 예를 들면, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오렌일렌기, 안트라센일렌기, 및, 바이페닐렌기를 들 수 있다.
- [0077] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서,  $A^1$ 로서, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴렌기가 바람직하고, 무치환의 아릴렌기가 보다 바람직하며, 페닐렌기, 또는, 나프틸렌기가 더 바람직하다.
- [0078] Z는,  $-CH_2-$ 가  $-CO-$  혹은  $-O-$ 로 치환되어 있어도 되는  $-(CH_2)_4-$ , 단결합,  $-(CH_2)_2-$ ,  $-COO-$ , 또는,  $-CH_2O-$ 를 나타낸다.
- [0079] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, Z로서는, 단결합, 또는,  $-COO-$ 가 바람직하고, 단결합이 보다 바람직하다.
- [0080]  $A^2$ 는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 지환기를 나타낸다.  $A^2$ 로 나타나는 방향족기는, 1가의 방향족기에 해당한다.  $A^2$ 로 나타나는 지환기는, 1가의 지환기에 해당한다.
- [0081]  $A^2$ 로 나타나는 방향족기로서는, 방향족 탄화 수소환기, 및, 방향족 복소환기를 들 수 있다.
- [0082]  $A^2$ 로 나타나는 방향족기를 구성하는 방향족환은, 단환 구조, 및, 다환 구조 중 어느 하나여도 된다.
- [0083]  $A^2$ 로 나타나는 방향족기가 갖고 있어도 되는 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.
- [0084] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서,  $A^2$ 로 나타나는 방향족기가 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 알콕시기, 알콕시카보닐기, 사이아노기, 수산기, 나이트로기, 또는, 카복실기가 바람직하고, 알콕시기, 또는, 알콕시카보닐기가 보다 바람직하다.
- [0085] 상기 지환기를 구성하는 지환은, 단환 구조, 및, 다환 구조 중 어느 하나여도 된다.
- [0086]  $A^2$ 로 나타나는 지환기의 탄소수는 특별히 제한되지 않지만, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, 3~10이 바람직하다.
- [0087]  $A^2$ 로 나타나는 지환기가 갖고 있어도 되는 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.

[0088] A<sup>2</sup>로 나타나는 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 사이클로헥실기 등의 사이클로알킬기, 노보닐기, 트라이사이클로데칸일기, 테트라사이클로데칸일기, 테트라사이클로도데칸일기, 및, 아다만틸기를 들 수 있다.

[0089] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, A<sup>2</sup>로서는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족기가 바람직하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기가 보다 바람직하며, 치환기를 갖고 있어도 되는 페닐기가 더 바람직하다.

[0090] 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중, \*는 결합 위치를 나타낸다.

[0091] [화학식 6]



[0092]

[0093] 일반식 (C-2)로 나타나는 기 중, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, A<sup>1</sup>, 및, Z는, 일반식 (C-1) 중의 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, A<sup>1</sup>, 및, Z와 동일한 의미이며, 적합 범위도 동일하다.

[0094] L<sup>2</sup>는, 단결합, 또는, -L<sup>3</sup>-A<sup>3</sup>-\*\*를 나타낸다. \*\*는, Z와의 결합 위치를 나타낸다.

[0095] L<sup>3</sup>은, 단결합 또는 2개의 연결기를 나타낸다. L<sup>3</sup>으로 나타나는 2개의 연결기로서는 특별히 제한되지 않지만, L<sup>1</sup>로 나타나는 2개의 연결기로 예시한 기를 들 수 있다.

[0096] A<sup>3</sup>은, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 지환기를 나타낸다. A<sup>3</sup>으로 나타나는 방향족기는, 2개의 방향족기에 해당한다. A<sup>3</sup>으로 나타나는 지환기는, 2개의 지환기에 해당한다.

[0097] A<sup>3</sup>으로 나타나는 방향족기를 구성하는 방향족환은, 단환 구조, 및, 다환 구조 중 어느 하나여도 된다.

[0098] A<sup>3</sup>으로 나타나는 방향족기가 갖고 있어도 되는 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.

[0099] A<sup>3</sup>으로 나타나는 지환기의 탄소수는 특별히 제한되지 않지만, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, 3~10이 바람직하다.

[0100] A<sup>3</sup>으로 나타나는 지환기가 갖고 있어도 되는 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.

[0101] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, L<sup>2</sup>로서는 단결합이 바람직하다.

[0102] R<sup>3</sup>은, 수소 원자 또는 1개의 치환기를 나타낸다.

[0103] R<sup>3</sup>으로 나타나는 1개의 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 치환기 T로 예시한 기를 들 수 있다.

[0104] 그중에서도, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, R<sup>3</sup>로서는, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 지환기가 바람직하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 지환기가 보다 바람직하며, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 사이클로알킬기가 더 바람직하다.

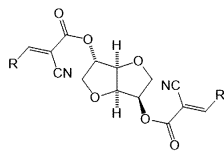
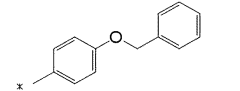
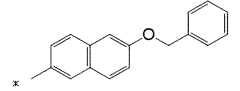
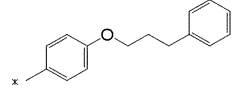
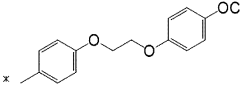
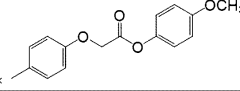
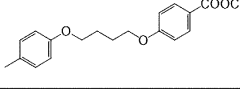
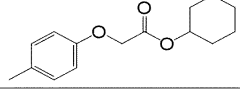
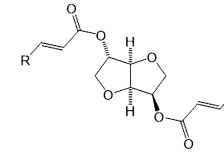
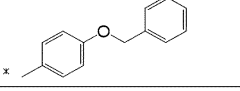
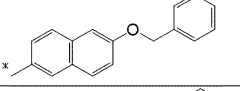
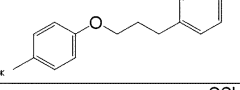
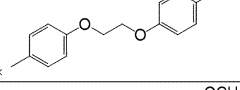
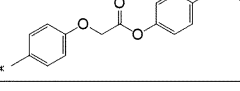
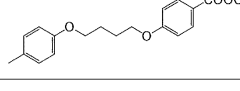
[0105] G가 일반식 (B-1)로 나타나는 기를 나타내는 경우, n은 2를, m은 0을 나타내고, G가 일반식 (B-2)로 나타나는 기를 나타내는 경우, n은 2를, m은 6을 나타낸다.

[0106] 특정 화합물은, 공지 방법으로 합성할 수 있다.

[0107] 또한, 특정 화합물은, R체여도 되고, S체여도 되며, R체와 S체의 혼합물이어도 된다.

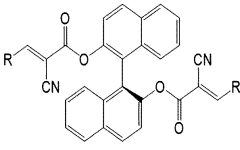
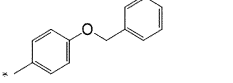
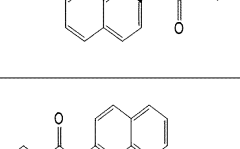
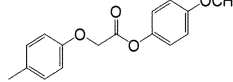
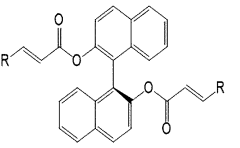
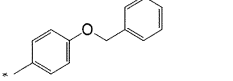
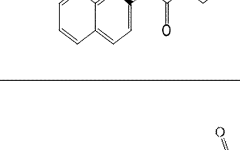
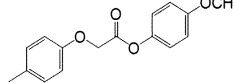
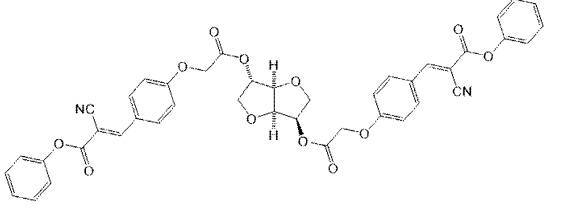
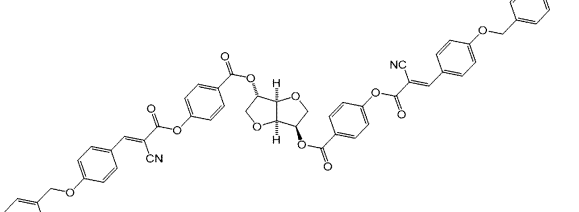
[0108] 이하에, 특정 화합물의 구체예를 나타내지만, 이것에 제한되는 것은 아니다.

[0109] [화학식 7]

CD-1		R =	
CD-2			
CD-3			
CD-4			
CD-5			
CD-6			
CD-7			
CD-8		R =	
CD-9			
CD-10			
CD-11			
CD-12			
CD-13			

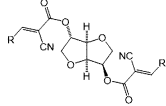
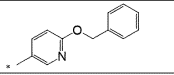
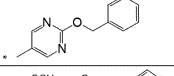
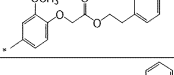
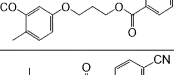
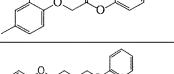
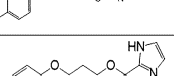
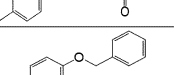
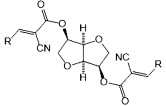
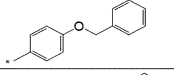
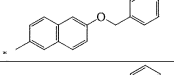
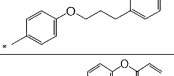
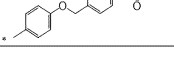
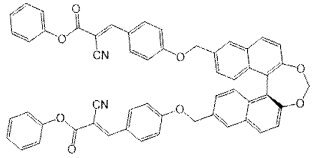
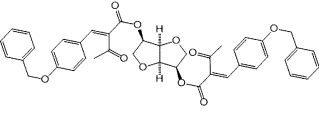
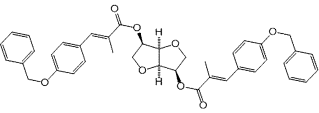
[0110]

[0111] [화학식 8]

CD-14		R =	
CD-15		R =	
CD-16		R =	
CD-17		R =	
CD-18			
CD-19			

[0112]

[0113] [화학식 9]

CD-20		R=	
CD-21			
CD-22			
CD-23			
CD-24			
CD-25			
CD-26			
CD-27		R=	
CD-28			
CD-29			
CD-30			
CD-30			
CD-31			
CD-32			

[0114]

[0115] 특정 화합물은, 다양한 용도에 적용할 수 있으며, 이른바 카이랄 화합물로서 적합하게 이용된다. 예를 들면, 특정 화합물과, 액정성 화합물을 혼합하여 얻어지는 액정 조성물을 사용함으로써, 콜레스테릭 액정상을 형성할 수 있다.

[0116] 이하에서는, 본 발명의 액정 조성물(이하, "특정 액정 조성물"이라고도 한다.)에 대하여 상세하게 설명한다.

[0117] [액정 조성물]

[0118] 특정 액정 조성물은, 특정 화합물, 및, 액정성 화합물을 포함한다.

[0119] 이하에, 특정 액정 조성물에 필수 또는 임의로 포함되는 각종 성분에 대하여 설명한다.

[0120] [특정 화합물]

[0121] 특정 액정 조성물은, 특정 화합물을 포함한다. 특정 화합물은, 상술한 바와 같다.

[0122] 특정 액정 조성물 중에서의 특정 화합물의 함유량은 특별히 제한되지 않지만, 특정 액정 조성물 중의 액정성 화합물의 전체 질량에 대하여, 0.1~20질량%가 바람직하고, 0.5~15질량%가 보다 바람직하며, 1.0~10질량%가 더 바

람직하다.

[0123] 특정 액정 조성물은, 특정 화합물을 1종 단독으로 사용해도 되고, 2종 이상 사용해도 된다. 2종 이상 사용하는 경우는, 그 합계 함유량이 상기 범위 내인 것이 바람직하다.

[0124] [액정성 화합물]

[0125] 특정 액정 조성물은, 액정성 화합물을 포함한다. 또한, 액정성 화합물은, 특정 화합물 이외의 화합물이며, 또한, 액정성을 나타내는 화합물을 의미한다.

[0126] 또, "액정성을 나타내는 화합물"이란, 온도를 변화시켰을 때에, 결정상(저온 측)과 등방상(고온 측)의 사이에 중간상을 발현하는 성질을 화합물이 갖는 것을 의도한다. 구체적인 관찰 방법으로서, 메틀러 톨레도사제 핫스테이지 시스템 FP90 등으로 화합물을 가열 또는 강온하면서, 편광 현미경하에서 관찰함으로써, 액정상에서 유래하는 광학 이방성과 유동성을 확인할 수 있다.

[0127] 액정성 화합물은 액정성을 갖고 있으면 특별히 제한되지 않으며, 예를 들면, 봉상 네마틱 액정성 화합물을 들 수 있다.

[0128] 봉상 네마틱 액정성 화합물로서는, 예를 들면, 아조메타인류, 아족시류, 사이아노바이페닐류, 사이아노페닐에스터류, 벤조산 에스터류, 사이클로헥세인카복실산 페닐에스터류, 사이아노페닐사이클로헥세인류, 사이아노 치환 페닐피리미딘류, 알콕시 치환 페닐피리미딘류, 페닐다이옥세인류, 톨란류, 및, 알켄일사이클로헥실벤조나이트릴류를 들 수 있다. 또한, 저분자 액정성 화합물뿐만 아니라, 고분자 액정성 화합물도 사용할 수 있다.

[0129] 액정성 화합물은, 중합성이어도 되고 비중합성이어도 되며, 중합성인 것이 바람직하다.

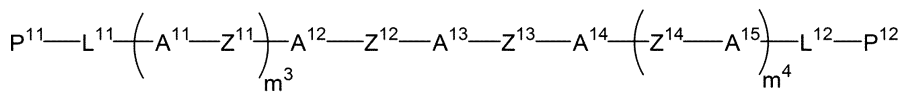
[0130] 액정성 화합물로서는, 콜레스테릭 액정상을 고정할 수 있는 점에서, 1개 이상의 중합성기를 갖는 액정성 화합물이 바람직하고, 2개 이상의 중합성기를 갖는 액정성 화합물이 보다 바람직하며, 2개의 중합성기를 갖는 액정성 화합물이 더 바람직하다.

[0131] 중합성기를 갖지 않는 봉상 액정성 화합물에 대해서는, 다양한 문헌(예를 들면, Y. Goto et. al., Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1995, Vol. 260, pp.23-28)에 기재되어 있다.

[0132] 한편, 중합성 봉상 액정성 화합물은, 중합성기를 봉상 액정성 화합물에 도입함으로써 얻어진다. 중합성기로서는, 불포화 중합성기, 에폭시기, 및, 아지리딘일기를 들 수 있으며, 불포화 중합성기가 바람직하고, 에틸렌성 불포화 중합성기가 보다 바람직하다. 중합성기는 다양한 방법으로, 봉상 액정성 화합물의 분자 중에 도입할 수 있다. 중합성 봉상 액정성 화합물이 갖는 중합성기의 개수는, 1~6이 바람직하고, 1~3이 보다 바람직하며, 2가 더 바람직하다. 2종류 이상의 중합성 봉상 액정성 화합물을 병용해도 된다. 2종류 이상의 중합성 봉상 액정성 화합물을 병용하면, 배향 온도를 저하시킬 수 있다.

[0133] 액정성 화합물은, 일반식 (LC)로 나타나는 화합물이 바람직하다.

[0134] [화학식 10]



(LC)

[0135]

[0136] 일반식 (LC) 중, P<sup>11</sup> 및 P<sup>12</sup>는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 중합성기를 나타낸다. 단, P<sup>11</sup> 및 P<sup>12</sup>의 적어도 일방이 중합성기를 나타낸다. L<sup>11</sup> 및 L<sup>12</sup>는, 각각 독립적으로, 단결합 또는 2가의 연결기를 나타낸다. A<sup>11</sup>~A<sup>15</sup>는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화 수소환기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 복소환기를 나타낸다. Z<sup>11</sup>~Z<sup>14</sup>는, 각각 독립적으로, 단결합 또는 2가의 연결기를 나타낸다. m<sup>3</sup> 및 m<sup>4</sup>는, 각각 독립적으로, 0 또는 1의 정수를 나타낸다.

[0137] 일반식 (LC) 중, P<sup>11</sup> 및 P<sup>12</sup>로 나타나는 중합성기로서는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 상술한 일반식 (P-1)~(P-20)으로 나타나는 중합성기를 들 수 있다. 또한, P<sup>11</sup> 및 P<sup>12</sup>로 나타나는 중합성기가 상술한 일반식 (P-1)~(P-20)을 나타내는 경우, 일반식 (P-1)~(P-20) 중의 \*는, L<sup>11</sup> 또는 L<sup>12</sup>와의 결합 위치를 나타낸다.

- [0138]  $P^{11}$  및  $P^{12}$ 는, 적어도 어느 하나가 중합성기를 나타내는 것이 바람직하고,  $P^{11}$  및  $P^{12}$ 가 모두 중합성기를 나타내는 것이 보다 바람직하다.
- [0139] 일반식 (LC) 중,  $L^{11}$  및  $L^{12}$ 로 나타나는 2가의 연결기로서는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 탄소수 1~20의 직쇄상 혹은 분기쇄상의 알킬렌기, 및, 탄소수 1~20의 직쇄상 혹은 분기쇄상의 알킬렌기에 있어서 1개 또는 2개 이상의  $-CH_2-$ 가  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$ ,  $-N(CH_3)-$ ,  $-CO-$ , 또는,  $-COO-$ 로 치환된 기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 연결기를 들 수 있다.  $L^{11}$  및  $L^{12}$ 로 나타나는 2가의 연결기로서는, 탄소수 1~20의 직쇄상 혹은 분기쇄상의 알킬렌기에 있어서 1개 또는 2개 이상의  $-CH_2-$ 가,  $-O-$ 로 치환된 기가 바람직하다.
- [0140] 일반식 (LC) 중,  $A^{11}$ ~ $A^{15}$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화 수소환기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 복소환기를 나타낸다.
- [0141] 상기 방향족 탄화 수소환기의 환원수는, 5~10이 바람직하다.
- [0142] 방향족 탄화 수소환기를 구성하는 방향족 탄화 수소환은, 단환 구조 및 다환 구조 중 어느 하나여도 된다.
- [0143] 상기 방향족 탄화 수소환의 탄소수는, 6~18이 바람직하고, 6~10이 보다 바람직하다. 방향족 탄화 수소환은 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 벤젠환, 바이페닐환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환, 및, 플루오렌환을 들 수 있다. 그중에서도, 방향족 탄화 수소환으로서, 벤젠환이 바람직하다. 또한, 방향족 탄화 수소환기는, 상기 방향족 탄화 수소환의 환상의 수소 원자가 2개 제거됨으로써 구성된다.
- [0144] 상기 방향족 복소환기의 환원수로서는, 5~10이 바람직하다.
- [0145] 방향족 복소환기를 구성하는 방향족 복소환은, 단환 구조 및 다환 구조 중 어느 하나여도 된다.
- [0146] 상기 방향족 복소환기가 포함하는 헤테로 원자는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 질소 원자, 산소 원자, 및, 황 원자를 들 수 있다. 방향족 복소환의 탄소수는, 5~18이 바람직하다.
- [0147] 상기 방향족 복소환은 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 피리딘환, 피리다진환, 피리미딘환, 피라진환, 트라이아진환, 싸이오펜환, 싸이아졸환, 및, 이미다졸환을 들 수 있다. 또한, 방향족 복소환기는, 상기 방향족 복소환의 환상의 수소 원자가 2개 제거됨으로써 구성된다.
- [0148] 방향족 탄화 수소환기, 및, 방향족 복소환기는, 치환기를 갖고 있어도 된다. 치환기의 종류는 특별히 제한되지 않고, 공지의 치환기를 들 수 있다. 상기 치환기는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 아릴기, 수산기, 아미노기, 카복실기, 설펜아마이드기, N-설펜아마이드기, 아실기, 아실옥시기, 사이아노기, 나이트로기, 및, 알콕시카보닐기를 들 수 있다. 상기 각 기는, 치환기로 더 치환되어 있어도 된다. 예를 들면, 알킬기 중의 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있어도 된다. 또, 치환기의 수는 특별히 제한되지 않으며, 방향족 탄화 수소환기, 및, 방향족 복소환기는 하나의 치환기를 갖고 있어도 되고, 복수의 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0149] 그중에서도, 일반식 (LC)로 나타나는 화합물의 용해성이 보다 향상되는 점에서, 치환기가, 불소 원자, 염소 원자, 플루오로알킬기, 알콕시기, 또는, 알킬기인 것이 바람직하고, 플루오로알킬기, 알콕시기, 또는, 알킬기인 것이 보다 바람직하다.
- [0150] 상기 플루오로알킬기 및 알킬기 중의 탄소수, 및, 알콕시기 중의 알킬기의 탄소수는 특별히 제한되지 않지만, 1~10이 바람직하고, 1~5가 보다 바람직하며, 1~3이 더 바람직하고, 1이 특히 바람직하다.
- [0151] 또한, 플루오로알킬기란, 알킬기 중 적어도 하나의 수소 원자가 불소 원자로 치환된 기이며, 모든 수소 원자가 불소 원자로 치환되어 있는 것이 바람직하다(이른바, 퍼플루오로알킬기가 바람직하다).
- [0152]  $A^{11}$ ~ $A^{15}$ 로서는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화 수소환기가 바람직하고, 1위와 4위로 결합하는 페닐렌기가 보다 바람직하다.
- [0153] 일반식 (LC) 중,  $Z^{11}$ ~ $Z^{14}$ 로 나타나는 2가의 연결기는 특별히 제한되지 않고, 예를 들면, 2가의 지방족 탄화 수소기(직쇄상, 분기쇄상, 및, 환상 중 어느 하나여도 되고, 탄소수 1~20인 것이 바람직하며, 예를 들면, 알킬렌기를 들 수 있다. 그 이외에도, 알켄일렌기, 또는, 알카인일렌기여도 된다.),  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-SO_2-$ ,  $-NR^C-$ ,  $-CO-$ ,

-N=N-, -CH=N-, 및, 이들을 2종 이상 조합한 기(2종 이상 조합한 기로서는, 예를 들면, -CO-NH-, -CO-S-, 및, -COO- 등을 들 수 있다.)를 들 수 있다. 여기에서, R<sup>c</sup>는, 수소 원자 또는 알킬기(바람직하게는 탄소수 1~10)를 나타낸다. 또한, 상기 2가의 연결기 중의 수소 원자는, 할로젠 원자 등의 다른 치환기로 치환되어 있어도 된다.

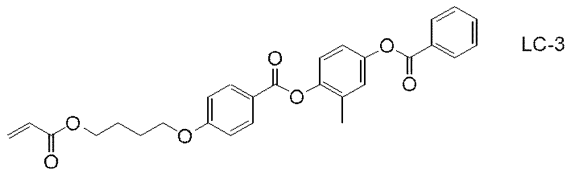
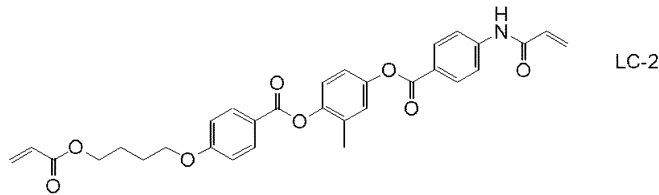
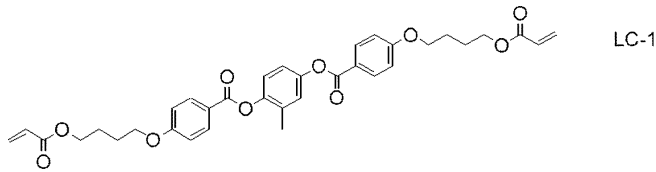
[0154] 그중에서도, Z<sup>11</sup>~Z<sup>14</sup>로서는, -COO-, 또는, -CH=CH-가 바람직하다.

[0155] 일반식 (LC) 중, m<sup>3</sup> 및 m<sup>4</sup>는, 각각 독립적으로, 0 또는 1의 정수를 나타내고, 0이 바람직하다.

[0156] 일반식 (LC)로 나타나는 화합물은, 공지의 방법으로 합성할 수 있다.

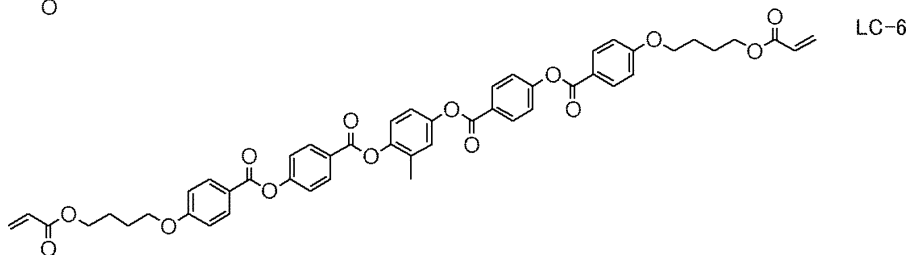
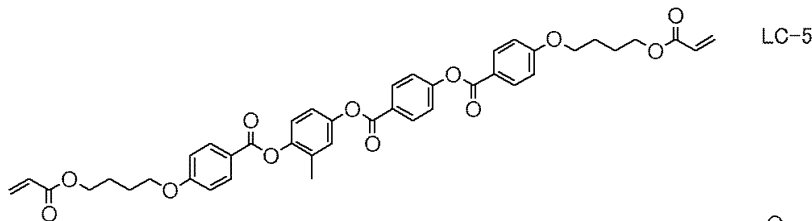
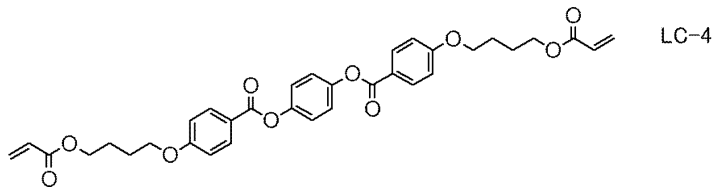
[0157] 이하에, 상기 일반식 (LC)로 나타나는 화합물의 구체예를 나타내지만, 이것에 제한되는 것은 아니다.

[0158] [화학식 11]



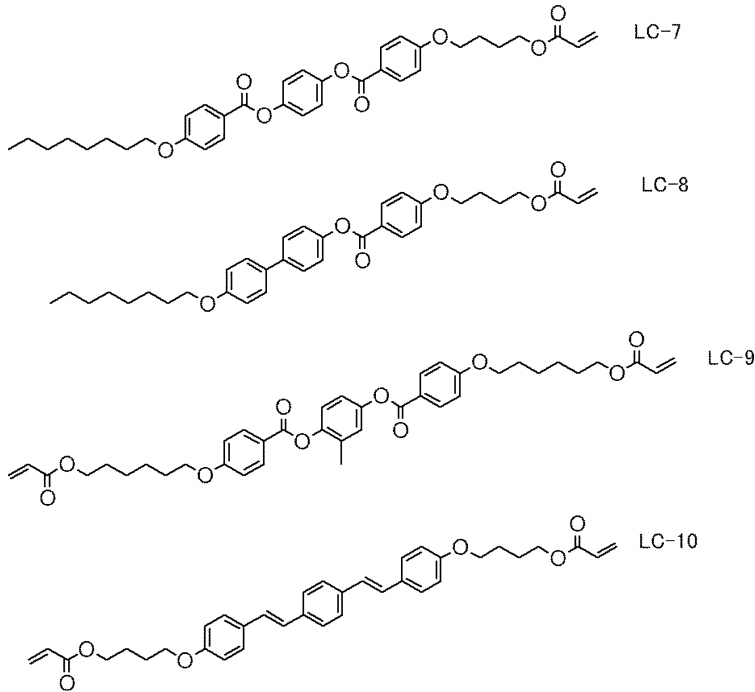
[0159]

[0160] [화학식 12]



[0161]

[0162] [화학식 13]



[0163]

[0164] 특정 액정 조성물 중의 액정성 화합물의 함유량은, 특정 액정 조성물의 전고형분에 대하여, 5~99질량%가 바람직하고, 25~99질량%가 보다 바람직하며, 75~99질량%가 더 바람직하다.

[0165] 또한, 고형분이란, 특정 액정 조성물 중의 용제 이외의 성분을 의도한다. 용제 이외이면, 그 성상이 액체상의 성분이어도 고형분으로 간주한다.

[0166] 특정 액정 조성물은, 액정성 화합물을 1종 단독으로 사용해도 되고, 2종 이상 사용해도 된다. 2종 이상 사용하는 경우는, 그 합계 함유량이 상기 범위 내인 것이 바람직하다.

[0167] [계면활성제]

[0168] 특정 액정 조성물은, 안정적 또는 신속한 액정상(예를 들면, 네마틱 액정상, 콜레스테릭 액정상)의 형성에 기여하는 계면활성제를 포함하고 있어도 된다.

[0169] 계면활성제로서는, 예를 들면, 일본 공개특허공보 2013-047204호(일본 특허공보 제5774518호)의 단락 0020~0031에 기재된 화합물, 함불소(메트)아크릴레이트계 폴리머, W02011/162291호에 기재된 일반식 (X1)~(X3)으로 나타나는 화합물, 및, 일본 공개특허공보 2014-119605호의 단락 0082-0090에 기재된 일반식 (I)로 나타나는 화합물을 들 수 있다. 이들 화합물은, 층의 공기 계면에 있어서, 액정성 화합물의 분자의 틸트각을 저감시키거나, 또는, 액정성 화합물을 실질적으로 수평 배향시킬 수 있다.

[0170] 또한, 본 명세서에서 "수평 배향"이란, 액정성 화합물의 분자축(액정성 화합물이 봉상 액정성 화합물인 경우, 액정성 화합물의 장축에 해당.)과 조성물의 층의 표면(막면)이 평행인 것을 말하지만, 엄밀하게 평행인 것을 요구하는 것은 아니고, 본 명세서에서는, 막면과 이루는 경사각이 20도 미만의 배향을 의미하는 것으로 한다. 액정성 화합물이 공기 계면 부근으로 수평 배향하는 경우, 배향 결함이 발생하기 어렵기 때문에, 가시광 영역에서의 투명성이 높아진다. 한편, 액정성 화합물의 분자가 막면에 대하여 큰 틸트각으로 배향하면, 예를 들면, 콜레스테릭 액정상으로 하는 경우는, 그 나선축이 막면 법선으로부터 어긋나기 때문에, 반사율이 저하되거나, 핑거프린트 패턴이 발생하여, 헤이즈의 증대 또는 회절성을 나타내기 때문에 바람직하지 않다.

[0171] 계면활성제로서 이용 가능한 함불소(메트)아크릴레이트계 폴리머로서는, 일본 공개특허공보 2007-272185호의 단락 0018~0043에 기재되는 폴리머도 들 수 있다.

[0172] 특정 액정 조성물이 계면활성제를 포함하는 경우, 계면활성제의 함유량은 특별히 제한되지 않지만, 액정성 화합물의 전체 질량에 대하여, 0.001~10질량%가 바람직하고, 0.05~3질량%가 보다 바람직하다.

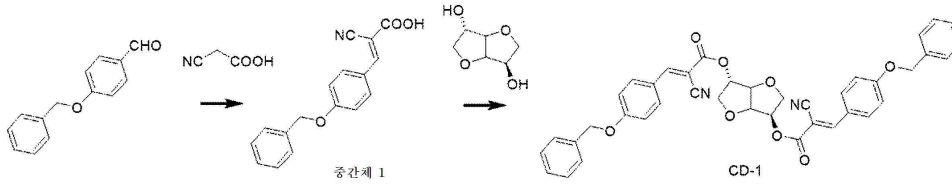
[0173] 특정 액정 조성물은, 계면활성제를 1종 단독으로 사용해도 되고, 2종 이상 사용해도 된다. 2종 이상 사용하는

경우는, 그 합계 함유량이 상기 범위 내인 것이 바람직하다.

- [0174] [용제]
- [0175] 특정 액정 조성물은, 용제를 포함하고 있어도 된다. 용제는, 조성물의 각 성분을 용해할 수 있는 것이 바람직하다. 용제로서는, 예를 들면, 메틸에틸케톤, 사이클로헥산온, 및, 이들의 혼합 용제를 들 수 있다. 그중에서도, 용제는, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, 메틸에틸케톤이 바람직하다.
- [0176] 특정 액정 조성물이 용제를 포함하는 경우, 특정 액정 조성물 중의 용제의 함유량은, 조성물의 고형분 농도를 5~50질량%로 하는 양이 바람직하고, 10~40질량%로 하는 양이 보다 바람직하다.
- [0177] 특정 액정 조성물은, 용제를 1종 단독으로 사용해도 되고, 2종 이상 사용해도 된다. 2종 이상 사용하는 경우는, 그 합계 함유량이 상기 범위 내인 것이 바람직하다.
- [0178] [그 외의 성분]
- [0179] 상기 이외에도, 특정 액정 조성물은, 중합 개시제, 산화 방지제, 자외선 흡수제, 증감제, 안정제, 가소제(可塑劑), 연쇄 이동제, 중합 금지제, 소포제, 레벨링제, 증점제, 난연제, 분산제, 중합성 모노머, 및, 염료 및 안료 등의 색재 등의 다른 첨가제를 포함하고 있어도 된다.
- [0180] <중합 개시제>
- [0181] 특정 액정 조성물은, 중합 개시제를 포함해도 된다.
- [0182] 중합 개시제로서는, 광중합 개시제, 및, 열중합 개시제를 들 수 있다.
- [0183] 그중에서도, 자외선 조사에 의하여 중합 반응을 개시 가능한 광중합 개시제가 바람직하다. 광중합 개시제는 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 알킬페논 화합물, α-카보닐 화합물, 아실로인에터, α-탄화 수소 치환 방향족 아실로인 화합물, 다핵 퀴논 화합물, 페나진 화합물, 및, 옥사디아아졸 화합물을 들 수 있다. 알킬페논 화합물로서는, 예를 들면, IRGACURE 907이 이용된다.
- [0184] 특정 액정 조성물이 중합 개시제를 포함하는 경우, 특정 액정 조성물 중에서의 중합 개시제의 함유량은 특별히 제한되지 않지만, 액정성 화합물의 전체 질량에 대하여, 0.1~20질량%가 바람직하고, 1~8질량%가 보다 바람직하다.
- [0185] 특정 액정 조성물은, 중합 개시제를 1종 단독으로 사용해도 되고, 2종 이상 사용해도 된다. 2종 이상 사용하는 경우는, 그 합계 함유량이 상기 범위 내인 것이 바람직하다.
- [0186] [경화물]
- [0187] 본 발명은, 특정 액정 조성물을 경화시켜도 된다.
- [0188] [경화 방법 및 경화물]
- [0189] 특정 액정 조성물을 경화(중합 경화)하는 방법은 특별히 제한되지 않고, 공지된 방법을 채용할 수 있다. 예를 들면, 소정의 기관과 특정 액정 조성물을 접촉시켜, 기관 상에 조성물층을 형성하는 공정 X와, 조성물층에 노광을 행하는 공정 Y와, 조성물층에 경화 처리를 실시하는 공정 Z를 갖는 양태를 들 수 있다.
- [0190] 본 양태에 의하면, 액정성 화합물을 배향시킨 상태로 고정화할 수 있으며, 이른바 광학 이방체, 또는, 콜레스테릭 액정상을 고정화하여 이루어지는 층을 형성할 수 있다.
- [0191] 이하, 공정 X~Z의 수순에 대하여 상세하게 설명한다.
- [0192] 공정 X는, 기관과 특정 액정 조성물을 접촉시켜, 기관 상에 조성물층을 형성하는 공정이다. 사용되는 기관은 특별히 제한되지 않고, 공지된 기관(예를 들면, 수지 기관, 유리 기관, 세라믹 기관, 반도체 기관, 및, 금속 기관)을 들 수 있다.
- [0193] 기관과 특정 액정 조성물을 접촉시키는 방법은 특별히 제한되지 않고, 예를 들면, 기관 상에 특정 액정 조성물을 도포하는 방법, 및, 특정 액정 조성물 중에 기관을 침지하는 방법을 들 수 있다.
- [0194] 또한, 기관과 특정 액정 조성물을 접촉시킨 후, 필요에 따라, 기관 상의 조성물층으로부터 용제를 제거하기 위하여, 건조 처리를 실시해도 된다. 또, 액정성 화합물의 배향을 촉진시켜 액정상 상태로 하기 위하여, 가열 처리를 실시해도 된다.

- [0195] 공정 Y는, 조성물층에 대하여, 파장 315nm, 또는, i선(파장 365nm) 등을 이용한 노광 처리를 행하는 공정이다.
- [0196] 특정 화합물은, 노광 처리에 의하여 광이성화를 발생시키고, 그 HTP에 변화가 발생하는 것이 바람직하다. 이 노광 처리에 있어서, 노광량 및/또는 노광 파장 등을 적절히 조정함으로써, HTP의 변화의 정도도 조절할 수 있다.
- [0197] 노광 후는, 액정성 화합물의 배향을 더 촉진시켜 액정상 상태로 하기 위하여, 가열 처리를 실시해도 된다.
- [0198] 여기에서 얻어지는 액정상의 나선 피치(나아가서는 선택 반사 파장 등)는, 상술한 노광 처리에 있어서 조정된 HTP가 반영된다.
- [0199] 공정 Z는, 공정 Y를 거친 조성물층에 경화 처리를 실시하는 공정이다.
- [0200] 경화 처리의 방법은 특별히 제한되지 않고, 예를 들면, 광경화 처리 및 열경화 처리를 들 수 있다. 그중에서도, 광경화 처리가 바람직하다.
- [0201] 경화 처리로서 광경화 처리를 행하는 경우, 특정 액정 조성물은, 광중합 개시제를 포함하는 것이 바람직하다. 광경화 처리에 있어서의 조사되는 광의 파장은, 상술한 노광 처리에 이용된 광의 파장과는 상이한 것이 바람직하고, 또, 광중합 개시제는, 노광 처리에 이용된 광의 파장에 감응성을 나타내지 않는 것이 바람직하다.
- [0202] 상기 경화 처리에 의하여, 콜레스테릭 액정상을 고정화하여 이루어지는 층이 형성된다. 또한, 콜레스테릭 액정상을 고정화하여 이루어지는 층은, 더 이상 액정성을 나타낼 필요는 없다. 보다 구체적으로는, 예를 들면, 콜레스테릭 액정상을 "고정화한" 상태는, 콜레스테릭 액정상이 되어 있는 액정성 화합물의 배향이 유지된 상태가 가장 전형적이며, 또한, 바람직한 양태이다. 보다 구체적으로는, 통상 0~50℃, 보다 가혹한 조건하에서는 -30~70℃의 온도 범위에 있어서, 층에 유동성이 없고, 또 외장(外場) 또는 외력에 의하여 배향 형태에 변화를 발생시키지 않으며, 고정화된 배향 형태를 안정적으로 계속 유지할 수 있는 상태인 것이 바람직하다.
- [0203] [광학 이방체, 반사막]
- [0204] 특정 액정 조성물은, 다양한 용도에 적용할 수 있다. 예를 들면, 특정 액정 조성물을 이용하여, 광학 소자의 구성 요소인, 편광 소자, 반사막(반사층), 반사 방지막, 시야각 보상막(補償膜), 홀로그래피, 시큐리티, 센서, 실상(實像) 투영용 미러(프런트 프로젝션, 리어 프로젝션), 허상 투영용 미러, 가식(加飾) 시트, 차열 시트, 차광 시트, 스크린, 광학 이방체, 및, 배향막 등을 형성할 수 있다. 또한, 예를 들면, 액정성 화합물이 중합성기를 갖는 경우, 경화 처리(광조사 처리 또는 가열 처리 등)를 특정 액정 조성물에 실시함으로써 경화물이 얻어지고, 경화물은, 광학 소자의 구성 요소인, 편광 소자, 반사막(반사층), 반사 방지막, 시야각 보상막, 홀로그래피, 시큐리티, 센서, 실상 투영용 미러(프런트 프로젝션, 리어 프로젝션), 허상 투영용 미러, 가식 시트, 차열 시트, 차광 시트, 스크린, 광학 이방체, 및, 배향막 등에 적합하게 적용할 수 있다.
- [0205] 또한, 광학 이방체란, 광학 이방성을 갖는 물질을 의도한다.
- [0206] 또, 반사막이란, 콜레스테릭 액정상을 고정하여 이루어지는 층에 상당하며, 소정의 반사 대역의 광을 반사할 수 있다.
- [0207] 실시예
- [0208] 이하에 실시예에 근거하여 본 발명을 더 상세하게 설명한다. 이하의 실시예에 나타내는 재료, 사용량, 비율, 처리 내용, 및, 처리 수순 등은, 본 발명의 취지를 벗어나지 않는 한 적절히 변경할 수 있다. 따라서, 본 발명의 범위는 이하에 나타내는 실시예에 의하여 한정적으로 해석되어서는 안 된다.
- [0209] [일반식 (A)로 나타나는 화합물]
- [0210] 이하에 있어서, 특정 화합물의 합성 방법의 일례를 나타낸다. 이하에서 예시되는 화합물 이외의 화합물은, 이하의 방법을 참조하여, 합성했다.
- [0211] [화합물 CD-1의 합성]
- [0212] 하기 스킴에 따라, 표 1에 나타내는 화합물 CD-1을 합성했다.

[0213] [화학식 14]



[0214]

[0215] 4-벤질옥시벤즈알데하이드(0.942몰, 200.0g), 사이아노아세트산(1.131몰, 96.18g), 피리딘(0.471몰, 37.95mL), 아닐린(0.038몰, 3.51g), 및, 아세트산 에틸(1000mL)을 포함하는 혼합액을 75℃에서 5시간 교반했다. 계속해서, 얻어진 혼합액에 메탄올(400mL)을 더 첨가한 후, 실온까지 냉각했다. 그 후, 냉각한 혼합액에, 물(1500mL) 및 12N염산 수용액(42mL)을 더 첨가하여, 석출한 고형물을 얻었다. 얻어진 고형물을 여과 채취한 후, 메탄올과 물의 혼합 용액(메탄올/물=1/1(체적%), 500mL)으로 세정시키고, 세정 후의 고형물을 40℃ 송풍 건조로 3일간 건조하여, 중간체 1을 얻었다(211.6g, 수율 80.4질량%).

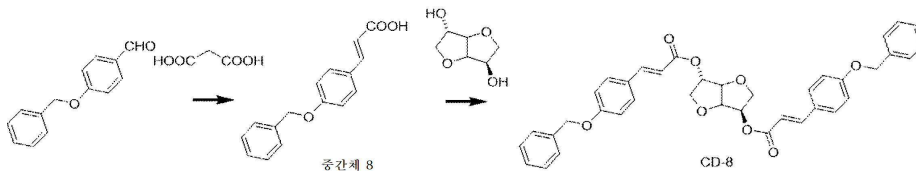
[0216] 다음으로, 중간체 1(0.662몰, 184.9g), 아세트나이트릴(887mL), N,N-다이메틸폼아마이드(2.62mL), 및, 염화 싸이오닐(0.87몰, 103.47g)을 포함하는 혼합액을, 60℃에서 1시간 교반했다. 계속해서, 얻어진 혼합액에, 실온하, 아이소소바이드(0.308몰, 45.0g), 피리딘(3.079몰, 248mL), 및, 메탄올(1000mL)을 순차적으로 더하고, 목적물을 포함하는 고형물을 석출시켰다. 석출한 목적물을 포함하는 고형물을 여과 채취한 후, 메탄올(300mL)로 세정했다. 세정 후의 고형물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 목적물인 화합물 CD-1을 얻었다(146.8g, 수율 71.3 질량%).

[0217] 화합물 CD-1의 <sup>1</sup>H NMR(중용매: CDCl<sub>3</sub>): δ 8.19(2H, d), 8.01(4H, dd), 7.47-7.32(10H, m), 7.07(4H, dd), 5.37(2H, m), 5.16(4H, d), 5.06(1H, t), 4.65(1H, d), 4.22-4.05(3H, m), 3.98(1H, dd)

[0218] [화합물 CD-8의 합성]

[0219] 하기 스킴에 따라, 표 1에 나타내는 화합물 CD-8을 합성했다.

[0220] [화학식 15]



[0221]

[0222] 사이아노아세트산 대신에, 말론산을 이용한 것 이외에는, [화합물 CD-1의 합성] 과 동일한 수순으로 화합물 CD-8을 합성했다.

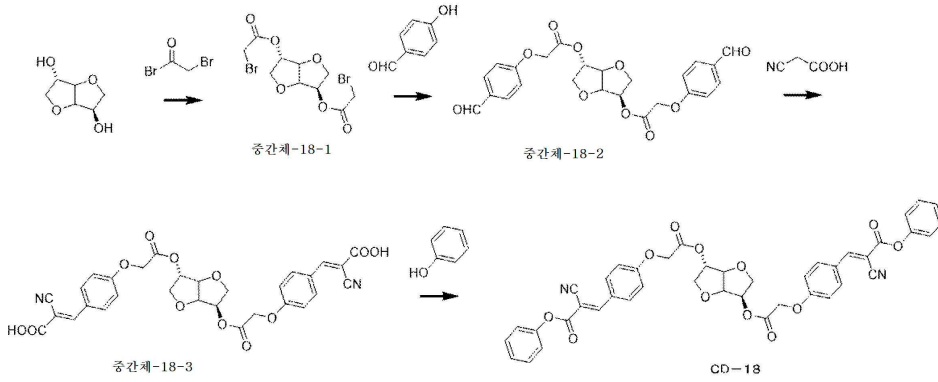
[0223] [화합물 CD-14의 합성]

[0224] 아이소소바이드 대신에, (R)-(+)-1,1'-바이-2-나프톨을 이용한 것 이외에는, [화합물 CD-1의 합성] 과 동일한 수순으로 화합물 CD-14를 합성했다.

[0225] [화합물 CD-18의 합성]

[0226] 에터화 반응, 및, [화합물 CD-1의 합성] 에 기재한 수법을 이용하여, 하기 스킴에 따라, 표 2에 나타내는 화합물 CD-18을 합성했다.

[0227] [화학식 16]

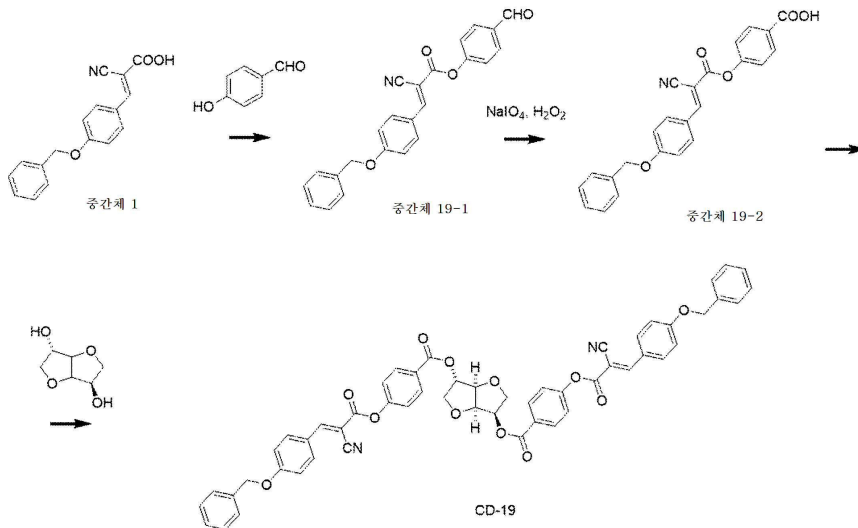


[0228]

[0229] [화합물 CD-19의 합성]

[0230] 알데하이드의 산화 반응, 및, [화합물 CD-1의 합성] 에 기재한 수법을 이용하여, 하기 스킴에 따라, 표 2에 나타내는 화합물 CD-19를 합성했다.

[0231] [화학식 17]



[0232]

[0233] [실시에 1]

[0234] [액정 조성물의 조제]

[0235] 하기에 나타내는 배합으로, 액정 조성물을 조제했다.

[0236] -----

[0237] · 하기에 나타내는 액정성 화합물 LC-1: 100질량부

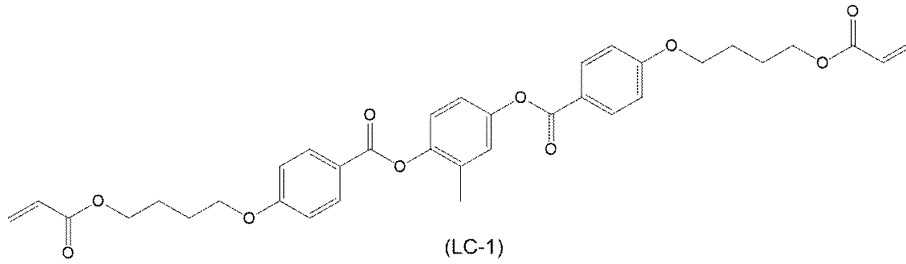
[0238] · 화합물 CD-1: 1.0질량부

[0239] · 하기에 나타내는 계면활성제 S-1: 0.1질량부

[0240] · 용제(MEK(메틸에틸케톤)): 조성물의 고형분 농도가 20질량%가 되는 양

[0241] -----

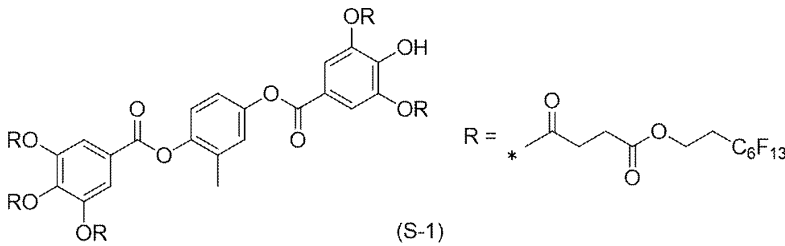
[0242] [화학식 18]



[0243]

[0244] 계면활성제 S-1은 일본 특허공보 제5774518호에 기재된 화합물이며, 하기 구조를 갖는다. \*는, 결합 위치를 나타낸다.

[0245] [화학식 19]



[0246]

[0247] [액정층의 제작]

[0248] 세정한 유리 기판 상에 폴리이미드 배향막재료 SE-130(닛산 가가쿠사제)을 도포하여 도막을 형성했다. 얻어진 도막을 소성한 후, 러빙 처리함으로써, 배향막 부착 기판을 제작했다.

[0249] 이 배향막의 러빙 처리면에, 상기 액정 조성물(30 μL)을, 1500rpm 및 10초간의 조건에서 스핀 코트하고, 얻어진 도막을 90℃에서 1분간 가열 건조하여, 실시예 1의 액정층 1(콜레스테릭 액정층)(막두께: 1.0 μm)을 얻었다.

[0250] [평가]

[0251] <노광 전의 HTP>

[0252] 상기 액정층 1에 대하여, 편광·위상차 해석 장치(AXO METRICS사제)를 이용하여, 액정층 1의 막두께 및 비틀림 각을 측정했다. 얻어진 값을 이용하여, 하기 식 (1)에 따라, 노광 전의 HTP를 산출했다.

[0253] 식 (1): 노광 전의 HTP(μm<sup>-1</sup>)=1/{(360/비틀림각(°))×막두께(μm)×(액정층 중에 있어서의 화합물 CD-1의 총 첨가 농도(질량%)/100)}

[0254] 얻어진 노광 전의 HTP를 하기의 평가 기준으로 평가했다.

[0255] A: 노광 전의 HTP가 40 μm<sup>-1</sup> 이상

[0256] B: 노광 전의 HTP가 30 μm<sup>-1</sup> 이상 40 μm<sup>-1</sup> 미만

[0257] C: 노광 전의 HTP가 30 μm<sup>-1</sup> 미만

[0258] <HTP 변화량>

[0259] 액정층 1에 대하여, 365nm의 파장의 광을 30mW/cm<sup>2</sup>의 조도로 1초간 더 노광 후, 식 (1)을 이용하여 노광 후의 HTP를 산출했다. 노광 전의 HTP와 얻어진 1초간 노광 후의 HTP로부터, 하기 식 (2)에 따라 HTP의 변화량을 산출했다.

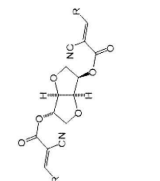
[0260] 식 (2): HTP 변화량(μm<sup>-1</sup>)=|(노광 전의 HTP(μm<sup>-1</sup>))-(1초간 노광 후의 HTP(μm<sup>-1</sup>))|

[0261] 얻어진 HTP 변화량을 하기의 평가 기준으로 평가했다.

- [0262] A: HTP 변화량이  $35 \mu\text{m}^{-1}$  이상
- [0263] B: HTP 변화량이  $25 \mu\text{m}^{-1}$  이상  $35 \mu\text{m}^{-1}$  미만
- [0264] C: HTP 변화량이  $25 \mu\text{m}^{-1}$  미만
- [0265] <HTP 포화율>
- [0266] 상기 <HTP 변화량>에서 1초간 노광한 후의 액정층 1에 대하여, 365nm의 파장의 광을  $30\text{mW}/\text{cm}^2$ 의 조도로 4초간 더 노광한 후(합계 5초간 노광), 식 (1)을 이용하여 5초간 노광 후의 HTP를 산출하여, 하기 식 (3)에 따라 HTP 포화율을 산출했다.
- [0267] 식 (3):  $\text{HTP 포화율}(\%) = \frac{\{ |(\text{노광 전의 HTP}(\mu\text{m}^{-1})) - (1\text{초간 노광 후의 HTP}(\mu\text{m}^{-1}))| \}}{\{ |(\text{노광 전의 HTP}(\mu\text{m}^{-1})) - (5\text{초간 노광 후의 HTP}(\mu\text{m}^{-1}))| \}} \times 100$
- [0268] 얻어진 HTP 포화율을 하기의 평가 기준으로 평가했다.
- [0269] A: HTP 포화율이 95% 이상
- [0270] B: HTP 포화율이 90% 이상 95% 미만
- [0271] C: HTP 포화율이 90% 미만
- [0272] [실시예 2~7 및 비교예 1~3]
- [0273] 화합물 CD-1 대신에, 표 1에 나타내는 카이랄 화합물을 이용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일한 수순으로, 액정층 2~10을 제작하여, 각종 평가했다.
- [0274] [실시예 8~13 및 비교예 4~5]
- [0275] 화합물 CD-1 대신에, 표 2에 나타내는 카이랄 화합물을 이용하고, 또한, 파장 360nm의 광 대신에 파장 315nm의 광을 노광한 것 이외에는, 실시예 1과 동일한 수순으로, 액정층 11~18을 제작하여, 각종 평가했다.
- [0276] [실시예 14~15 및 비교예 6~7]
- [0277] 화합물 CD-1 대신에, 표 3에 나타내는 카이랄 화합물을 이용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일한 수순으로, 액정층 19~22를 제작하여, 각종 평가했다.
- [0278] [실시예 16~17 및 비교예 8~9]
- [0279] 화합물 CD-1 대신에, 표 3에 나타내는 카이랄 화합물을 이용하고, 또한, 파장 360nm의 광 대신에 파장 315nm의 광으로 노광한 것 이외에는, 실시예 1과 동일한 수순으로, 액정층 23~26을 제작하여, 각종 평가했다.
- [0280] [실시예 18~19]
- [0281] 화합물 CD-1 대신에, 표 4에 나타내는 카이랄 화합물을 이용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일한 수순으로, 액정층 27~28을 제작하여, 각종 평가했다.
- [0282] 표 1~4 중의 R 중의 "\*"는, 결합 위치를 나타낸다.
- [0283] 표 1 중의 "Y"란은, Y가 일반식 (C-1)로 나타나는 기, 또는, 일반식 (C-2)로 나타나는 기 중 어느 쪽을 나타내는지 나타낸다.
- [0284] 표 1~3 중, "L<sup>1</sup>" "R<sup>1</sup>" "Z" "A<sup>2</sup>"란은, 일반식 (C-1) 중의 각 기에 해당하는 기를 나타낸다.
- [0285] 표 4 중, "L<sup>1</sup> 또는 L<sup>2</sup>" "R<sup>1</sup>" "Z" "A<sup>2</sup> 또는 R<sup>3</sup>"란은, 일반식 (C-1) 중 또는 일반식 (C-2) 중의 각 기에 해당하는 기를 나타낸다.

[0286]

[표 1]

실시예	약정중	특정 화합물	Y	L'	R'	Z	A <sup>2</sup>	노광 파장	평가 결과			
									노광 전 HTP	HTP 변화량	HTP 표준용	
실시예 1	1 CD-1	 <p>R =</p>	(C-1)	단결합	OH	단결합	방출주기	365nm	A	A	A	
실시예 2	2 CD-2		(C-1)	단결합	OH	단결합	방출주기		A	A	A	
실시예 3	3 CD-3		(C-1)	단결합	OH	(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	방출주기		B	B	A	
실시예 4	4 CD-4		(C-1)	단결합	OH	CH <sub>2</sub> O	방출주기		B	B	B	
실시예 5	5 CD-5		(C-1)	단결합	OH	COO	방출주기		A	A	A	
실시예 6	6 CD-6		(C-1)	단결합	OH	(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> O	방출주기		B	B	B	
실시예 7	7 CD-7		(C-1)	단결합	OH	COO	지환기		B	B	B	
비표예 1	8 C-1		-	-	-	-	-		-	A	C	C
비표예 2	9 C-2		-	-	-	-	-		-	C	C	C
비표예 3	10 C-3		-	-	-	-	-		-	C	C	B

[0287]

[0288]

[표 2]

비교예	약강중	특정 화합물	Y	L'	R'	Z	A <sup>2</sup>	노광-마장	평가 결과		
									노광 전 HTP	HTP 변화량	HTP 포화율
실시예 8	CD-8		(C-1)	단결합	H	단결합	방출속기		A	A	A
실시예 9	CD-9		(C-1)	단결합	H	단결합	방출속기		A	A	A
실시예 10	CD-10		(C-1)	단결합	H	(CH2)2	방출속기		A	A	A
실시예 11	CD-11		(C-1)	단결합	H	CH2O	방출속기	315nm	A	A	A
실시예 12	CD-12		(C-1)	단결합	H	COO	방출속기		A	A	A
실시예 13	CD-13		(C-1)	단결합	H	(CH2)3O	방출속기		A	A	A
비교예 4	C-4		-	-	-	-	-		A	C	C
비교예 5	C-5		-	-	-	-	-		B	B	C

[0289]

[0290]

[표 3]

시험예 번호	비교예 번호	핵심종	특정 화합물		Y	L'	R'	Z	A'	노광 파장	평가 결과		
			CD-14	CD-15							노광 전 HTP	HTP 변화량	HTP 포화율
14	15	19	CD-14	CD-15	(C-1)	단결합	OH	단결합	방출주기	365nm	B	B	B
		20			(C-1)	단결합	OH	COO	방출주기		B	B	B
	6	21	C-6		-	-	-	-	-		A	C	C
	7	22	C-7		-	-	-	-	-		C	C	C
16	17	23	CD-16	CD-17	(C-1)	단결합	OH	단결합	방출주기	315nm	B	B	B
		24			(C-1)	단결합	OH	COO	방출주기		B	B	B
	8	25	C-8		-	-	-	-	-		A	C	C
	9	26	C-9		-	-	-	-	-		C	C	C

[0291]

[0292] [표 4]

예시예	화학식	특정 화합물	Y	L <sup>1</sup> 또는 L <sup>2</sup>	R <sup>1</sup>	Z	A <sup>2</sup> 또는 R <sup>2</sup>	노광 파장	평가 결과		
									노광 전 HTP	HTP 변화량	HTP 포화율
실시예 18	27	CD-18	(C-2)	단결합	CN	COO	방향족기	365nm	B	B	B
실시예 19	28	CD-19	(C-1)	-CO-FH —	CN	단결합	방향족기	365nm	A	B	B

[0293]

[0294]

[0295]

[0296]

[0297]

[0298]

[0299]

표 1~4의 결과로부터, 본 발명의 화합물을 이용하면, 원하는 효과가 얻어지는 것이 확인되었다.

실시예 1~6의 비교로부터, 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중, Z가 단결합 또는 -COO-를 나타내는 경우, 보다 효과가 우수한 것이 확인되었다.

실시예 5와 실시예 7의 비교로부터, 일반식 (C-1)로 나타나는 기 중, A<sup>2</sup>가 방향족기를 나타내는 경우, 보다 효과가 우수한 것이 확인되었다.

실시예 1, 5, 8, 및, 12와 실시예 14~17의 비교로부터, G가 일반식 (B-1)로 나타나는 기를 나타내는 경우, 보다 효과가 우수한 것이 확인되었다.

실시예 1과 실시예 18의 비교로부터, Y가 일반식 (C-1)로 나타나는 기를 나타내는 경우, 보다 효과가 우수한 것이 확인되었다.

실시예 1과 실시예 19의 비교로부터, L<sup>1</sup>이 단결합을 나타내는 경우, 보다 효과가 우수한 것이 확인되었다.