



등록특허 10-2600890



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년11월13일
(11) 등록번호 10-2600890
(24) 등록일자 2023년11월07일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 277/82 (2006.01) *C07D 409/04* (2006.01)
C07D 417/04 (2006.01) *C09K 19/54* (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 277/82 (2013.01)
C07D 409/04 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2018-7015106
- (22) 출원일자(국제) 2015년11월09일
심사청구일자 2020년10월07일
- (85) 번역문제출일자 2018년05월29일
- (65) 공개번호 10-2018-0081081
- (43) 공개일자 2018년07월13일
- (86) 국제출원번호 PCT/CN2015/094100
- (87) 국제공개번호 WO 2017/079867
국제공개일자 2017년05월18일
- (56) 선행기술조사문헌
KR1020090073006 A*
KR102098617 B1*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
디아이씨 가부시끼가이샤
일본국 도쿄 174-8520 이타바시쿠 사카시타 3쵸메
35-58

(72) 발명자
호리구치 마사히로
일본국 사이타마 362-8577 기타아다치군 이나마치
오아자 고무로 4472-1 디아이씨 가부시끼가이샤
사이타마 공장 내
가도모토 유타카
일본국 사이타마 362-8577 기타아다치군 이나마치
오아자 고무로 4472-1 디아이씨 가부시끼가이샤
사이타마 공장 내
(뒷면에 계속)

(74) 대리인
문두현

전체 청구항 수 : 총 7 항

심사관 : 이현준

(54) 발명의 명칭 **중합성 화합물 및 광학 이방체**

(57) 요 약

중합성 화합물을 중합성 조성물에 첨가하고 이 조성물을 중합시켜 얻어지는 필름상 중합체에 자외선을 조사할 경우에 변색 또는 배향 결합이 발생하기 어려운, 중합성 조성물이 제공된다. 또한, 중합성 조성물을 중합시켜 얻어지는 중합체, 및 이 중합체를 사용한 광학 이방체가 제공된다. 본 발명은, 식 (Z-0)으로 표시되는 부분 구조를 갖는 중합성 저파장 분산성 또는 중합성 역파장 분산성 화합물을 제공한다. 또한, 본 발명은 당해 화합물을 함유하는 조성물; 당해 조성물을 중합시켜 얻어지는 중합체; 및 당해 중합체를 사용하여 얻어지는 광학 이방체를 제공한다.

(52) CPC특허분류

C07D 417/04 (2013.01)

C09K 19/54 (2013.01)

(72) 발명자

고이소 아키히로

일본국 사이타마 362-8577 기타아다치군 이나마치
오아자 고무로 4472-1 디아이씨 가부시끼가이샤 사
이타마 공장 내

하야시 마사나오

일본국 사이타마 362-8577 기타아다치군 이나마치
오아자 고무로 4472-1 디아이씨 가부시끼가이샤 사
이타마 공장 내

사이토우 요시타카

일본국 사이타마 362-8577 기타아다치군 이나마치
오아자 고무로 4472-1 디아이씨 가부시끼가이샤 사
이타마 공장 내

ቴ ᅕ

중국 산동 266101 청다오 주저우 로드 177 히트 인
더스트리얼 시티 에이 에어리어 청다오 디아이씨
파인케미칼즈 컴퍼니리미티드 내

리 쯔민

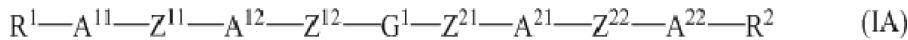
중국 산동 266101 청다오 주저우 로드 177 히트 인
더스트리얼 시티 에이 에어리어 청다오 디아이씨
파인케미칼즈 컴퍼니리미티드 내

명세서

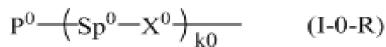
청구범위

청구항 1

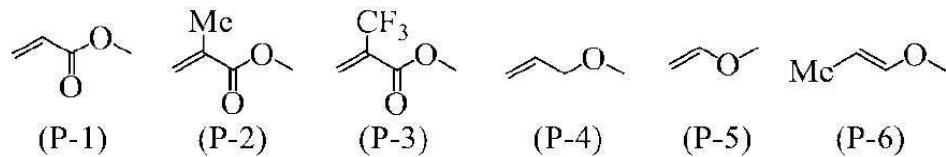
일반식 (IA)로 표시되는 중합성 화합물이며,



[식 중, R^1 및 R^2 는 하기 식 (I-0-R)으로 표시되는 기를 나타내고,



(식 중, P^0 는 하기의 식(P-1) 내지 식(P-6)으로부터 선택되는 기를 나타내고,



Sp^0 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 복수의 Sp^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고,

X^0 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고(단, $P^0-(Sp^0-X^0)_{k0}$ 는 $-O-O-$ 결합을 험유하지 않음),

$k0$ 는 0~10의 정수를 나타냄)

A^{12} 및 A^{21} 는 1,4-시클로헥실렌기를 나타내고,

A^{11} 및 A^{22} 는, 각각 독립적으로, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 피리딘-2,5-디일기, 피리미딘-2,5-디일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라하이드로나프탈렌-2,6-디일기, 데카하이드로나프탈렌-2,6-디일기, 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기를 나타내고, 이들 기는 비치환되어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L로 치환되어도 되고, L은 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 수산기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기(당해 알킬기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨)를 나타내거나, 또는 L은 $P^L-(Sp^L-X^L)_{kl}$ 로 표시되는 기를 나타내어도 되고(여기에서, P^L 은 중합성기를 나타내고, Sp^L 은 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 복수의 Sp^L 이 존재할 경우, 그들은 서로 동일하거나 상이해도 되고, X^L 은 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의

X^L 이 존재할 경우, 그들은 서로 동일하거나 상이해도 되고(단, $P^L-(Sp^L-X^L)_{kL}$ 는 $-O-O-$ 결합을 함유하지 않음), 그리고, kL 은 0~10의 정수를 나타내고, 복수의 L 이 화합물에 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 됨),

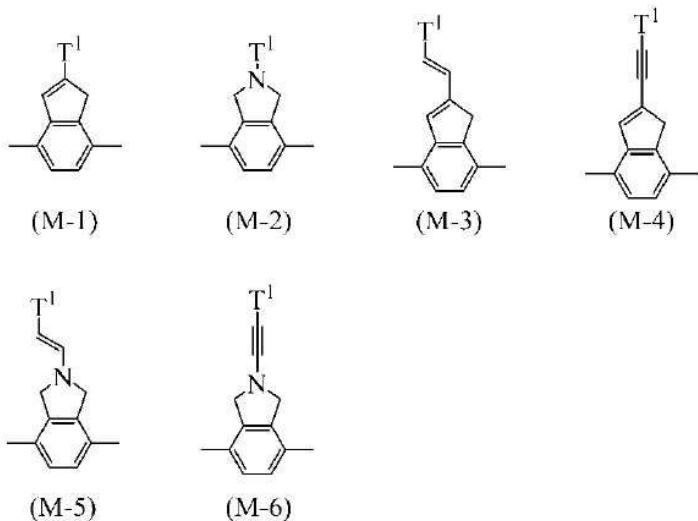
Z^{12} 는 $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 를 나타내고,

Z^{21} 는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}-$ 를 나타내고

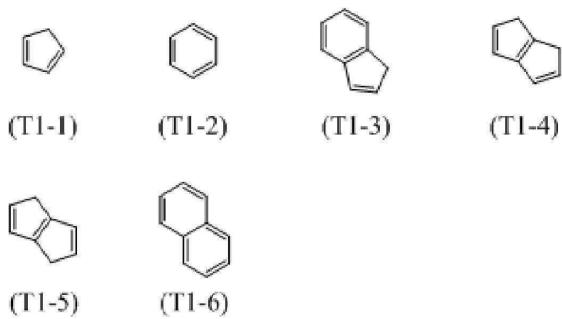
(식 중, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기(당해 알킬기에서 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-O-CO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자 또는 염소 원자로 치환되어도 됨)를 나타냄),

Z^{11} 및 Z^{22} 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CH_2CH_2-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-OCO-NH-$, $-NH-COO-$, $-NH-CO-NH-$, $-NH-O-$, $-O-NH-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-O-CO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-O-CO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-$, $-N=CH-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 단결합, 또는 $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}-$ 로 표시되는 기를 나타내고,

G^1 은, 방향족 탄화수소환 및 방향족 복소환으로 구성되는 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 방향족환을 갖는 2가의 기를 나타내고, G^1 로 표시되는 기의 방향족환에 함유되는 π 전자의 수는 12 이상이고, 또한 G^1 은 하기 식 (M-1)~(M-6)으로부터 선택되는 기를 나타내고



(식 중, 이들 기는 비치환되어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L^6 로 치환되어도 되고, 임의의 $-CH=$ 는, 각각 독립적으로, $-N=$ 로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-NR^T-$ (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-CS-$, 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 되고, 그리고, T^1 은 하기 식 (T1-1)~(T1-6)으로부터 선택되는 기를 나타내고:

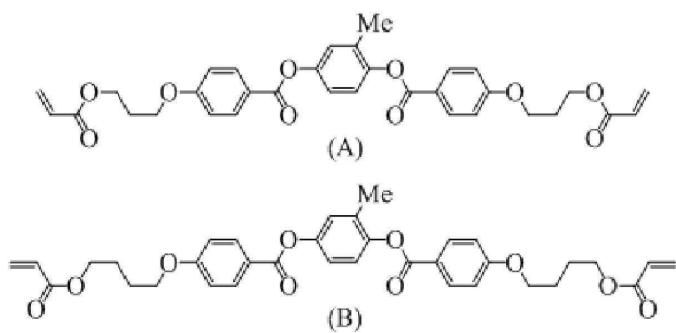


(식 중, 이들 기 각각은 임의의 위치에 결합수(結合手)를 가져도 되고, 임의의 $-\text{CH}=$ 는, 각각 독립적으로, $-\text{N}=$ 로 치환되어도 되고, $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{NR}^T-$ (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-\text{CS}-$, 또는 $-\text{CO}-$ 로 치환되어도 되고; 이들 기는 비치환되어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L 로 치환되어도 됨)

L 는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 수산기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기(당해 알킬기에서 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{CO}-\text{S}-$, $-\text{S}-\text{CO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{CO}-\text{NH}-$, $-\text{NH}-\text{CO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{OCO}-$, $-\text{COO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$, 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 치환되어도 되고, 당해 알킬기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨),

상기 Sp^0 , Sp^L 가 스페이서기를 나타내는 경우, 당해 스페이서기는 탄소 원자수 1~20의 알킬렌기(당해 알킬렌기에서, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{CO}-\text{S}-$, $-\text{S}-\text{CO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{CO}-\text{NH}-$, $-\text{NH}-\text{CO}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{S}-$, $-\text{SCF}_2-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{OCO}-$, $-\text{COO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{COO}-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{OCO}-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{COO}-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{OCO}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2-\text{COO}-$, $-\text{CH}_2-\text{OCO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{N}=\text{N}-$, $-\text{CH}=\text{N}=\text{N}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$, 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 치환되어도 됨)를 나타냄]

상기 중합성 화합물은, 상기 중합성 화합물을 하기의 식(A)으로 표시되는 화합물 50질량% 및 식(B)으로 표시되는 화합물 50질량%로 이루어지는 모체 액정에 대하여 첨가한 조성물을 사용해서 위상차 필름을 제작하고, 외삽에 의해 얻어진 파장 450nm에 있어서의 면내 위상차($\text{Re}(450)$)을 파장 550nm에 있어서의 면내 위상차 ($\text{Re}(550)$)로 나눈 값 $\text{Re}(450)/\text{Re}(550)$ 이 0.95 이하이거나, 0.95 초과 1.05 이하인, 중합성 화합물.



청구항 2

제1항에 있어서,

식 (I-0-R) 중, Sp^0 는, 각각 독립적으로, 탄소 원자수 1~20의 알킬렌기를 나타내며, 여기에서 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{O}-\text{CO}-\text{O}-$, $-\text{CO}-\text{NH}-$, $-\text{NH}-\text{CO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, 또는

$-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되는 화합물.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 기재된 화합물을 포함하는 조성물.

청구항 4

제1항 또는 제2항에 기재된 화합물을 포함하는 액정 조성물.

청구항 5

제3항에 기재된 조성물을 중합하여 얻어지는 중합체.

청구항 6

제5항에 기재된 중합체를 사용한 광학 이방체.

청구항 7

제1항 또는 제2항에 기재된 화합물을 사용한 디스플레이 소자.

청구항 8

삭제

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 중합성기를 갖는 화합물, 당해 화합물을 함유하는 중합성 조성물, 중합성 액정 조성물, 및 당해 중합성 액정 조성물을 사용한 광학 이방체에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 중합성기를 갖는 화합물(중합성 화합물)이 다양한 광학 재료에 사용되고 있다. 예를 들면, 중합성 화합물을 포함하는 중합성 조성물을 액정 상태로 제조하고, 이어서 중합성 조성물을 중합시킴으로써, 균일한 배향을 갖는 중합체를 제조할 수 있다. 이러한 중합체는 디스플레이에 필요한 편광판, 위상차판 등에 사용될 수 있다. 많은 경우, 요구되는 광학 특성, 중합 속도, 용해성, 용점, 유리 전이 온도, 중합체의 투명성, 기계적 강도, 표면

경도, 내열성, 및 내광성을 만족시키기 위해, 2종 이상의 중합성 화합물을 포함하는 중합성 조성물이 사용된다. 이 경우, 사용되는 중합성 화합물은, 다른 성질에 악영향을 주지 않고 중합성 조성물에 양호한 물성을 부여하는 것이 요구된다.

[0003] 액정표시장치의 시야각을 개선하기 위해서는, 위상차판의 복굴절의 과장 분산성을 낮게 하거나, 그 과장 분산성을 역으로 할 필요가 있다. 이 목적을 위한 재료로서, 역과장 분산성 또는 저과장 분산성을 갖는 다양한 중합성 액정 화합물이 개발되어 왔다. 그러나, 이들 중합성 화합물은, 당해 화합물을 중합성 조성물에 첨가하여 기재 상에 도포하고 중합시켜 얻어지는 필름상 중합체에 자외선 조사하면, 변색 또는 배향 결함이 발생하기 쉽다는 문제가 있었다(특허문현 1~3). 예를 들면, 변색 또는 배향 결함이 발생한 필름을 디스플레이에 사용하면, 화면의 휙도 불균일이 발생하고, 색조가 부자연스럽고, 원하는 광학 특성을 얻을 수 없고, 디스플레이 제품의 품질이 대폭 악화된다는 문제가 있다. 따라서, 이러한 문제를 해결할 수 있는, 역과장 분산성 또는 저과장 분산성을 갖는 중합성 액정 화합물의 개발이 요구되어 왔다.

선행기술문헌

특허문헌

[0004] (특허문헌 0001) 일본국 특개2011-162678호 공보

(특허문헌 0002) WO 2014-010325 A1

(특허문헌 0003) 일본국 특개2009-179563호 공보

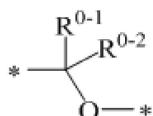
발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 상술한 과제를 해결하기 위해, 본 발명은, 화합물을 중합성 조성물에 첨가하고 이 조성물을 중합시켜 얻어지는 필름상 중합체에 자외선을 조사할 경우에 변색 또는 배향 결함이 발생하기 어려운, 역과장 분산성 또는 저과장 분산성을 갖는 중합성 액정 화합물을 제공하고자 한다. 또한, 본 발명은, 역과장 분산성 또는 저과장 분산성을 갖는 중합성 액정 화합물을 포함하는 중합성 조성물, 당해 중합성 조성물을 중합시켜 얻어지는 중합체, 및 당해 중합체를 사용한 광학 이방체를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0006] 본 발명자들은, 상기 과제를 해결하기 위해, 예의 검토하였다. 그 결과, 분자 중에 하기 식 (I-0-1)로 표시되는 부분 구조를 갖는 저과장 분산성 및/또는 역과장 분산성 화합물을 개발했다. 즉, 본 발명은, 분자 중에 하기 식 (Z-0)으로 표시되는 부분 구조를 갖는 중합성 저과장 분산성 또는 중합성 역과장 분산성 화합물을 제공한다



(Z-0)

[0008] (식 중, R⁰⁻¹ 및 R⁰⁻²는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고, 여기에서 1개의 -CH₂- 또는 2개 이상의 비인접 -CH₂-는, 각각 독립적으로, -O-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -OCO-CH=CH-, -CH=CH-, -CF=CF-, 또는 -C≡C-로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자 또는 염소 원자로 치환되어도 되고; *는 환 구조에 연결됨). 또한, 본 발명은, 화합물을 포함하는 중합성 조성물; 당해 화합물을 사용하여 각각 얻어지는 수지, 수지 첨가제, 오일, 필터, 접착제, 감압 접착제, 유지, 잉크, 의약품, 화장품, 세제, 건재(建材), 포장재, 액정재, 유기 EL 재료, 유기 반도체 재료, 전자 재료, 디스플레이 소자, 전자 디바이스, 통신 기기, 자동차 부품, 항공기 부품, 기계 부품,

농약, 및 식품과, 이들을 사용한 제품; 중합성 액정 조성물; 중합성 액정 조성물을 중합하여 얻어지는 중합체; 및 당해 중합체를 사용한 광학 이방체를 제공한다.

발명의 효과

[0009] 본 발명의 화합물은 중합성 조성물의 성분으로서 유용하다. 또한, 본 발명의 화합물을 포함하는 중합성 액정 조성물을 사용한 광학 이방체는, 이 광학 이방체에 조사하면 변색 또는 배향 결함이 생기기 어렵기 때문에, 위상차 필름 등의 광학 재료의 용도에 유용하다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0010] 본 발명은 문자 내에 특정 구조를 갖는 역분산성 화합물을 제공하고, 또한 당해 화합물을 포함하는 중합성 조성물; 당해 화합물을 사용하여 각각 얻어지는 수지, 수지 첨가제, 오일, 필터, 접착제, 감압 접착제, 유지, 잉크, 의약품, 화장품, 세제, 건재(建材), 포장재, 액정재, 유기 EL 재료, 유기 반도체 재료, 전자 재료, 디스플레이 소자, 전자 디바이스, 통신 기기, 자동차 부품, 항공기 부품, 기계 부품, 농약, 및 식품과, 이들을 사용한 제품; 중합성 액정 조성물; 중합성 액정 조성물을 중합하여 얻어지는 중합체; 및 당해 중합체를 사용한 광학 이방체를 제공한다.

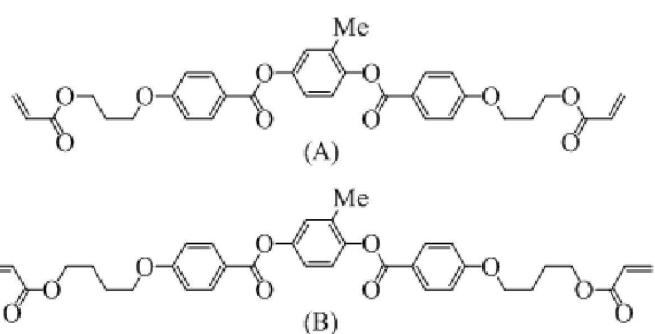
[0011] 횡축에 위상차 필름에의 입사광의 파장 λ 를 취하고, 종축에 복굴절률 Δn 를 플롯한 그래프에서는, 파장 λ 가 짧아짐에 따라 복굴절률 Δn 이 커지면, 통상의 기술자에게 있어서 당해 필름을 일반적으로 "정분산성"이라 하고, 파장 λ 가 짧아짐에 따라 복굴절률 Δn 이 작아지면, 통상의 기술자에게 있어서 당해 필름을 일반적으로 "역파장 분산성" 또는 "역분산성"이라 한다. 본 발명에 있어서, 파장 450nm에서의 면내 위상차(Re(450))를 파장 550nm에서의 면내 위상차(Re(550))로 나눠 얻어진 값인 $Re(450)/Re(550)$ 가 0.95 이하인 위상차 필름을 구성하는 화합물을 역분산성 화합물이라 한다. 또한, $Re(450)/Re(550)$ 가 0.95 초과 1.05 이하인 위상차 필름을 구성하는 화합물을 저파장 분산성 화합물이라 한다. 위상차의 측정 방법은 다음과 같다.

[0012] <위상차의 측정>

[0013] 배향막용 폴리이미드 용액을 스픬 코팅법을 이용하여 두께 0.7mm의 유리 기재 상에 도포하고, 100°C에서 10분간 건조하고, 이어서 200°C에서 60분간 소성해서, 도막을 얻는다. 얻어진 도막을 시판의 러빙 장치를 사용해서 러빙한다.

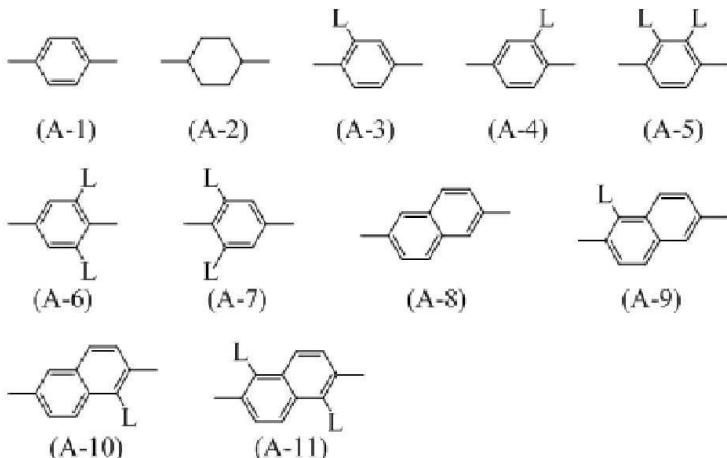
[0014] 평가 대상 화합물 20질량%를 포함하는 시클로펜탄온 용액을 스픬 코팅법에 의해 러빙된 기재에 도포하고, 100°C에서 2분간 건조했다. 얻어진 도막을 실온까지 냉각하고, 이어서 고압 수은 램프를 사용해서 자외선을 30mW/cm²의 강도로 30초간 조사해서 평가 대상 필름을 얻었다. 얻어진 필름의 위상차는, 위상차 필름·광학 재료 시험 장치 RETS-100(OTSUKA ELECTRONICS Co., LTD. 제)을 사용해서 측정했다.

[0015] 평가 대상 화합물이 시클로펜탄온에 용해되지 않을 경우는, 용매로서 클로로포름을 사용한다. 또한, 평가 대상 화합물이 단독으로 액정성을 나타내지 않을 경우에는, 평가 대상 화합물(10질량%, 20질량%, 또는 30질량%)을, 하기 식 (A)로 표시되는 화합물(50질량%) 및 하기 식 (B)로 표시되는 화합물(50질량%)로 구성되는 모(母)액정에 첨가하여 얻어지는 조성물을 이용하여 필름을 형성하고, 위상차를 외삽에 의해 측정한다.



[0016] 식 (Z-0) 중, 2개의 *는, 각각 독립적으로, 환 구조에 결합되고 있다. 환 구조는, 바람직하게는, 이하의 환 구조A 및/또는 환 구조G로부터 선택되는 것이다. 환 구조A는, 각각 독립적으로, 비치환의 환 구조 또는 1개 이상의 치환기 L로 치환되어도 되는 환 구조를 나타내고, 액정성, 합성의 용이함, 및 원료 입수의 용이함의 관점에서, 환 구조A는, 각각 독립적으로, 바람직하게는, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 피리딘-2,5-디일기, 피리

미딘-2,5-디일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라하이드로나프탈렌-2,6-디일기, 테카히드로나프탈렌-2,6-디일기, 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기(그 각각은 비치환이이어도 되고, 또는 1개 이상의 치환기 L로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 또는 나프탈렌-2,6-디일기(그 각각은 비치환이이어도 되고, 또는 1개 이상의 치환기 L로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, 하기 식 (A-1)~(A-11)로부터 선택되는 기, 보다 더욱더 바람직하게는, 하기 식 (A-1)~(A-8)로부터 선택되는 기, 및 특히 바람직하게는, 하기 식 (A-1)~(A-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다.



[0018]

환 구조G는, 방향족 탄화수소환 및 방향족 복소환으로 구성되는 군으로부터 선택되는 적어도 1개의 방향족환을 갖는 2가의 기를 나타내고, G로 표시되는 기에서의 방향족환에 함유되는 π 전자의 수는 12 이상이고, G로 표시되는 기는, 바람직하게는, 비치환이이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L^6 로 치환되어도 되는 기를 나타낸다. 더 바람직한 구조는, 하기 G^1 로 표시되는 기와 동일하다. L은 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 수산기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 치환상 또는 분기상 알킬기를 나타내거나(여기에서 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 또는 L은 $P^L-(Sp^L-X^L)_{kL}$ 로 표시되는 기를 나타내어도 되고(여기에서, P^L 은 중합성기를 나타내고, 바람직한 중합성기는 하기 P^0 와 동일한 기를 나타내고, Sp^L 은 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 바람직한 스페이서기는 하기 Sp^0 와 동일한 기를 나타내고, 복수의 Sp^L 이 존재할 경우, 그들은 서로 동일하거나 상이해도 되고, X^L 은 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^L 이 존재할 경우, 그들은 서로 동일하거나 상이해도 되고(단, $P^L-(Sp^L-X^L)_{kL}$ 는 $-O-O-$ 결합을 함유하지 않음), kL 은 0~10의 정수를 나타내고, 복수의 L이 화합물에 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 됨).

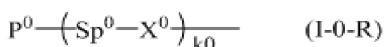
[0020]

액정성 및 합성의 용이함의 관점에서, 바람직하게는, L은 불소 원자, 염소 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 치환상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로부터 선택된 기로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, L은 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 치환상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 로부터 선택되는 기로 치

환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, L은 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 직쇄상 또는 분기상 알킬기 또는 알콕시기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 특히 바람직하게는, L은 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 직쇄상 알킬기 또는 직쇄상 알콕시기를 나타낸다.

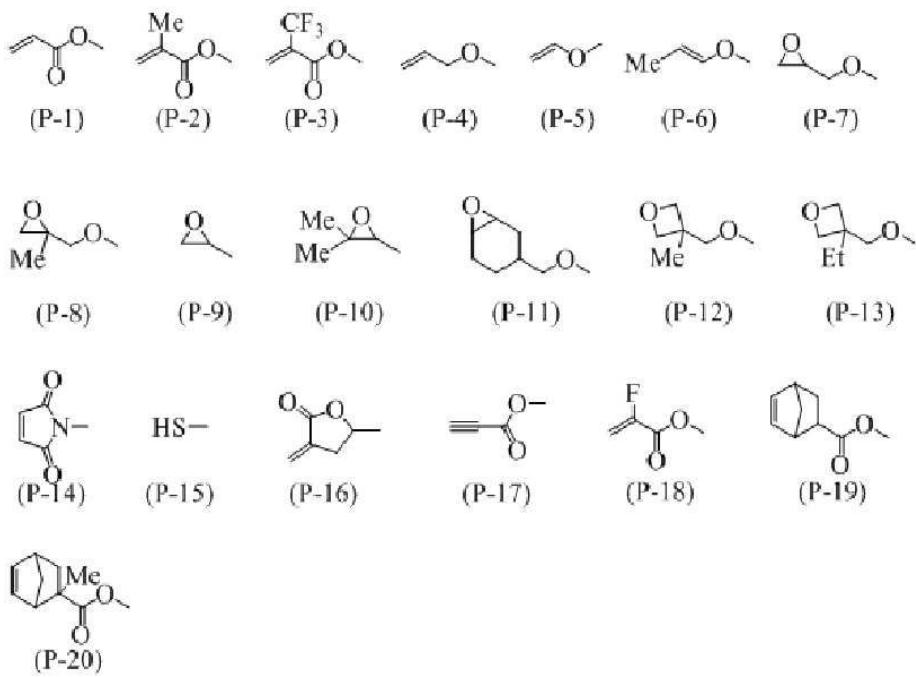
[0021] 식 (Z-0) 중, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고, 여기에서 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자 또는 염소 원자로 치환되어도 된다. 액정성, 합성의 용이함, 및 자외선 조사 시의 변색과 배향 결합의 관점에서, 바람직하게는, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$ 또는 $-S-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자 또는 염소 원자로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 불소 원자, 또는 탄소 원자수 1~6의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 불소 원자, 메틸기, 또는 트리플루오로메틸기를 나타내고, 보다 더욱더 바람직하게는, 바람직하게는, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 불소 원자를 나타내고, 특히 바람직하게는, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자를 나타낸다.

[0022] 화합물로부터 제조되는 필름의 기계적 강도 및 액정성의 관점에서, 화합물은, 더 바람직하게는, 분자 중에 하기 식 (I-0-R)로 표시되는 적어도 하나의 기를 갖는다.



[0023] [0024] (식 중, P^0 는 중합성기를 나타내고, Sp^0 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 복수의 Sp^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, X^0 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고(단, $P^0-(Sp^0-X^0)_{k0}-$ 는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않음), $k0$ 는 0~10의 정수를 나타낸다.

[0025] 식 (I-0-R) 중, P^0 는 중합성기를 나타내고, 바람직하게는, 하기 식 (P-1)~(P-20)으로부터 선택되는 기이고,



[0026]

[0027] 이들 중합성기는, 라디칼 중합, 라디칼 부가 중합, 양이온 중합, 또는 음이온 중합에 의해 중합된다. 특히, 중합 방법으로서 자외선 중합을 행할 경우, 식 (P-1), (P-2), (P-3), (P-4), (P-5), (P-7), (P-11), (P-13), (P-15), 또는 (P-18)이 바람직하고, 식 (P-1), (P-2), (P-7), (P-11), 또는 (P-13)이 더 바람직하고, 식 (P-1), (P-2), 또는 (P-3)이 보다 더 바람직하고, 식 (P-1) 또는 (P-2)가 특히 바람직하다.

[0028]

식 (I-0-R) 중, Sp^0 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 복수의 Sp^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 된다. 또한, 스페이서기는 비치환아이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L로 치환되어도 된다. 바람직하게는, 스페이서기는 탄소 원자수 1~20의 알킬렌기를 나타내고, 여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C=C-$ 로 치환되어도 된다. 원료 입수의 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, 복수의 Sp^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, 복수의 Sp^0 는, 각각 독립적으로, 바람직하게는, 탄소 원자수 1~20의 알킬렌기를 나타내고(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-COO-$, $-OCO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-$, 또는 $-C=C-$ 로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 탄소 원자수 1~10의 알킬렌기(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 로 치환되어도 됨) 또는 단결합을 나타내고, 보다 더 바람직하게는, 탄소 원자수 1~10의 알킬렌기 또는 단결합을 나타내고, 특히 바람직하게는, 탄소 원자수 1~8의 알킬렌기를 나타낸다(여기에서, 복수의 알킬렌기가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 됨).

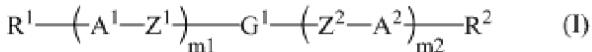
[0029]

식 (I-0-R) 중, X^0 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C=C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 된다. 원료 입수의 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, 복수의 X^0 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, 복수의 X^0 는, 각각 독립적으로, 바람직하게는, $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-$

COO^- , $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCO}^-$, 또는 단결합을 타나내고, 더 바람직하게는, $-\text{O}^-$, $-\text{OCH}_2^-$, $-\text{CH}_2\text{O}^-$, $-\text{COO}^-$, $-\text{OCO}^-$, $-\text{COOCH}_2^-$, $-\text{OCOCH}_2\text{CH}_2^-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COO}^-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCO}^-$, 또는 단결합을 타나내고, 특히 바람직하게는, $-\text{O}^-$, $-\text{COO}^-$, $-\text{OCO}^-$, 또는 단결합을 타나낸다(여기에서, 복수의 기가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 됨).

[0030] 식 $(I-0-R)$ 중, k_0 는 정수 $0\sim 10$ 이고, 바람직하게는, 정수 $0\sim 5$ 를, 더 바람직하게는, 정수 $0\sim 2$ 를, 특히 바람직하게는, 1을 나타낸다.

[0031] 액정성, 및 자외선 조사 시의 변색 및 배향 결합의 발생의 곤란함의 관점에서, 본 발명에 따른 저파장 분산성 및/또는 역파장 분산성 화합물은, 바람직하게는, 하기 식 (I)로 표시되는 화합물이고,



[0033] (식 중, R^1 및 R^2 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~80의 탄화수소기를 나타내고, 탄화수소기는 치환기를 가져도 되고, 어느 탄소 원자는 헤테로원자로 치환되어도 되고, R^1 및 R^2 중 적어도 하나는 식 (I-0-R)로 표시되는 기를 나타내고; A^1 및 A^2 는, 각각 독립적으로, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 피리딘-2,5-디일기, 피리미딘-2,5-디일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라히드로나프탈렌-2,6-디일기, 테카히드로나프탈렌-2,6-디일기, 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기를 나타내고, 이를 기는 비치환이여도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L로 치환되어도 되고;

[0034] Z^1 및 Z^2 는, 각각 독립적으로, $-0-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CH_2CH_2-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-$
 $CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-OCO-NH-$, $-NH-COO-$, $-NH-CO-NH-$, $-NH-O-$, $-O-NH-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$,
 $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$,
 $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-$, $-N=CH-$,
 $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 단결합, 또는 $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}-$ 로 표시되는 기를 나타내고(식 중,
 R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 식 (Z-0) 중의 R^{0-1} 및 R^{0-2} 와 동일한 의미를 가짐), 복수의 Z^1 이 존재할 경우,
그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, 복수의 Z^2 가 존재할 경우는, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고,
 Z^1 및 Z^2 중 적어도 하나는 $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}-$ 로 표시되는 기를 나타내고;

[0035] G^1 은, 방향족 탄화수소환 및 방향족 복소환으로 구성되는 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 방향족환을 갖는 2가의 기를 나타내고, G^1 로 표시되는 기의 방향족환에 함유되는 π 전자의 수는 12 이상이고, G^1 로 표시되는 기는 비치화이어도 되고 또는 하나 이상의 치화기 L^G 로 치화되어도 되고;

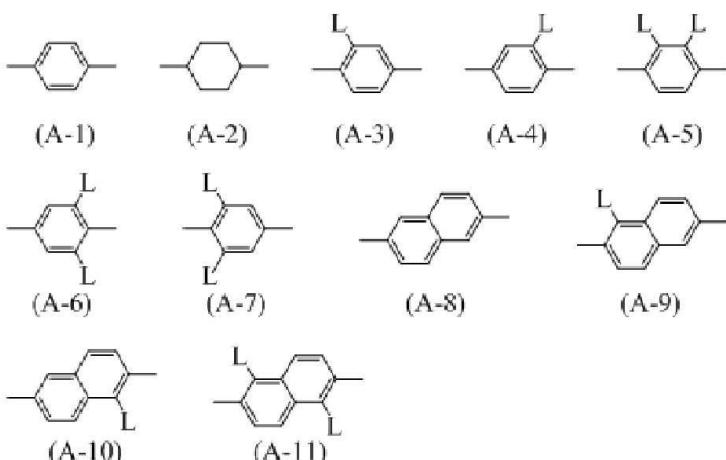
[0036] L^G 는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피아닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 수산기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내거나(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 또는 L^G 는 $P^{LG}-(Sp^{LG}-X^{LG})_{kLG}^-$ 로 표시되는 기를 나타내도 되고(여기에서, P^{LG} 는 중합성기를 나타내고, 바람직한 중합성기는 상기 P^0 에 대해 정의된 것과 동일한 기를 나타내고, Sp^{LG} 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 바람직한 스페이서기는 상기 Sp^0 에 대해 정의된 것과 동일한 기를 나타내고, 복수의 Sp^{LG} 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, X^{LG} 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-$

COO^- , $-\text{CH}_2\text{OCO}^-$, $-\text{CH}=\text{CH}^-$, $-\text{N}=\text{N}^-$, $-\text{CH}=\text{N}-\text{N}=\text{CH}^-$, $-\text{CF}=\text{CF}^-$, $-\text{C}\equiv\text{C}^-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^{LG} 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고(단, $\text{P}^{\text{LG}}-(\text{Sp}^{\text{LG}}-\text{X}^{\text{LG}})_{\text{kLG}}$ -는 $-0-0-$ 결합을 함유하지 않음), kLG 는 0~10의 정수를 나타내고, 복수의 L^6 가 화합물 중에 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 됨);

[0037] $\text{m}1$ 및 $\text{m}2$ 는, 각각 독립적으로, 0~6의 정수를 나타내고, $\text{m}1 + \text{m}2$ 는 0~6의 정수를 나타냄).

[0038] 식 (I) 중, R^1 및 R^2 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 치환기를 가져도 되는 탄소 원자수 1~80의 탄화수소기(어느 탄소 원자는 헤테로원자로 치환되어도 됨)를 나타내고, R^1 및 R^2 중 적어도 하나는 식 (I-0-R)로 표시되는 기를 나타낸다. R^1 또는 R^2 가 식 (I-0-R)로 표시되는 기 이외의 기를 나타낼 경우, 액정성 및 합성의 용이함의 관점에서, R^1 또는 R^2 는, 바람직하게는, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 시아노기, 니트로기, 이소시아노기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 치화상 또는 분기상 알킬기(여기에서 기 중의 임의의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-0-$, $-S-$, -0CH_2- , $-\text{CH}_20-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-0\text{COO}-$, $-\text{CO-S}-$, $-\text{S-CO}-$, $-0-\text{CO-O}-$, $-\text{CO-NH}-$, $-\text{NH-CO}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{S}-$, $-\text{SCF}_2-$, $-\text{CH}=\text{CH-COO}-$, $-\text{CH}=\text{CH-OCO}-$, $-\text{COO-CH}=\text{CH}-$, $-\text{OCO-CH}=\text{CH}-$, $-\text{COO-CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{OCO-CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{COO}-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{OCO}-$, $-\text{COO-CH}_2-$, $-\text{OCO-CH}_2-$, $-\text{CH}_2-\text{COO}-$, $-\text{CH}_2-\text{OCO}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{N}=\text{N}-$, $-\text{CH}=\text{N}-\text{N}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$, 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 치화상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-0-$, $-\text{COO}-$, $-0\text{COO}-$, 또는 $-0-\text{CO-O}-$ 로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 치화상 알킬기 또는 치화상 알콕시기, 특히 바람직하게는, 탄소 원자수 1~12의 치화상 알킬기 또는 치화상 알콕시기를 나타낸다. 당해 화합물로 제조되는 필름의 기계적 강도 및 액정성의 관점에서, 더 바람직하게는, R^1 및 R^2 는, 각각 독립적으로, 식 (I-0-R)로 표시되는 기를 나타낸다.

[0039] 식 (I) 중, A^1 및 A^2 는, 각각 독립적으로, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 피리딘-2,5-디일기, 피리미딘-2,5-디일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라히드로나프탈렌-2,6-디일기, 데카히드로나프탈렌-2,6-디일기, 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기를 나타내고, 이들 기는 비치환이어도 되고 또는 하나 이상의 상술한 치환기 L 로 치환되어도 된다. A^1 및 A^2 의 바람직한 실시형태로서, A^1 및 A^2 는, 각각 독립적으로, 더 바람직하게는, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 또는 나프탈렌-2,6-디일기(비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L 로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, 하기 식 (A-1)~(A-11)로부터 선택되는 기, 보다 더욱더 바람직하게는, 식 (A-1)~(A-8)로부터 선택되는 기, 특히 바람직하게는, 식 (A-1)~(A-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다.



[0040] 역분산성의 관점에서, 기 G^1 에 인접한 Z^1 로 표시되는 기에 연결되는 A^1 로 표시되는 기 및 기 G^1 에 인접한 기 Z^2 로 표

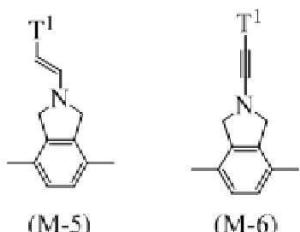
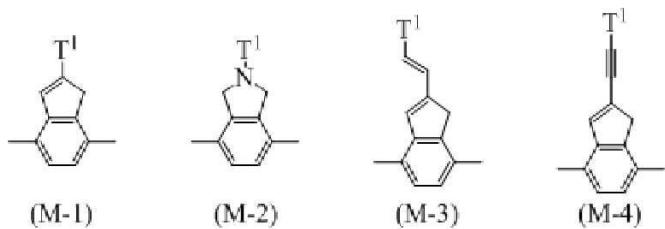
시되는 기에 연결되는 A^2 로 표시되는 기로서, A^1 및 A^2 는, 각각 독립적으로, 바람직하게는, 1,4-시클로헥실렌기(비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 식 (A-2)로 표시되는 기를 나타낸다. 또한, A^1 및 A^2 로 표시되는 복수의 기가 존재할 경우에, 굴절률 이방성, 합성의 용이함, 및 용매에의 용해성의 관점에서, A^1 및 A^2 로 표시되는 상기 기 이외의 A^1 및 A^2 로 표시되는 기로서, A^1 및 A^2 는, 각각 독립적으로, 바람직하게는, 1,4-페닐렌기 또는 나프탈렌-2,6-디일기(비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 식 (A-1) 및 (A-3)~(A-11)로부터 선택되는 기, 보다 더 바람직하고, 식 (A-1) 및 (A-3)~(A-8)로부터 선택되는 기, 특히 바람직하게는, 식 (A-1), (A-3), 및 (A-4)로부터 선택되는 기를 나타난다.

[0042] 식 (I) 중, Z^1 및 Z^2 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CH_2CH_2-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-OCO-NH-$, $-NH-COO-$, $-NH-CO-NH-$, $-NH-O-$, $-O-NH-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-$, $-N=CH-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 단결합, 또는 $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}$ 로 표시되는 기를 나타낸다(식 중, R^{0-1} 및 R^{0-2} 는, 각각 독립적으로, 식 (Z-0) 중 R^{0-1} 및 R^{0-2} 와 동일한 의미를 가짐). 여기에서, 복수의 Z^1 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, 복수의 Z^2 가 존재할 경우, 그들은 상이하거나 동일해도 되고, Z^1 및 Z^2 중 적어도 하나는, $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}$ 로 표시되는 기를 나타낸다. 복수의 Z^1 및 Z^2 가 존재할 경우, 합성 용이함 및 액정성의 관점에서, 바람직하게는, 식 (I)에 포함되는 G^1 기에 직접 연결되는 Z^1 및 Z^2 중 적어도 하나는, $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}$ 로 표시되는 기를 나타내고, 특히 바람직하게는, 식 (I)에 포함되는 G^1 기에 직접 연결되는 Z^1 및 Z^2 모두는, $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}$ 로 표시되는 기를 나타낸다.

[0043] 또한, 복수의 Z^1 및 Z^2 가 존재할 경우에, 액정성, 원료 입수의 용이함, 및 합성의 용이함의 관점에서, $-CR^{0-1}R^{0-2}O-$ 또는 $-OCR^{0-1}R^{0-2}$ 로 표시되는 기 이외의 바람직한 기는, 각각 독립적으로, 바람직하게는, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CF_2CF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합, 더 바람직하게는, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합, 보다 더 바람직하게는, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, 또는 단결합, 보다 더욱더 바람직하게는, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, 또는 단결합, 특히 바람직하게는, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 를 나타낸다.

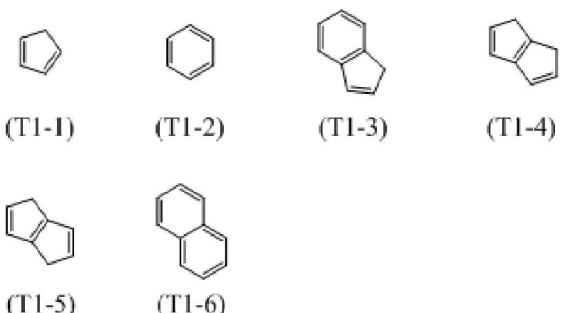
[0044] 식 (I) 중, $m1$ 및 $m2$ 는, 각각 독립적으로, 0~6의 정수를 나타낸다(단, $m1 + m2$ 는 0~6의 정수를 나타냄). 용매에의 용해성, 액정성, 및 자외선 조사 시의 배향 결합의 관점에서, $m1$ 및 $m2$ 는, 각각 독립적으로, 바람직하게는, 정수 1~3을, 특히 바람직하게는, 정수 1 또는 2를 나타낸다. 또한, 합성의 용이함의 관점에서, 더 바람직하게는, $m1$ 및 $m2$ 는 서로 동일하다.

[0045] 식 (I) 중, G^1 은, 방향족 탄화수소환 및 방향족 복소환으로 구성되는 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 방향족 환을 갖는 2가의 기를 나타내고, G^1 로 표시되는 기의 방향족환에 함유되는 π 전자의 수는 12 이상이고, G^1 로 표시되는 기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L^G 로 치환되어도 된다. 역파장 분산성의 관점에서, G^1 은, 바람직하게는, 파장 300nm~900nm에서 최대 흡광도를 갖는 기이고, 더 바람직하게는, 파장 310nm~500nm에서 최대 흡광도를 갖는 기이다. 화합물의 액정성, 원료 입수의 용이함, 및 합성의 용이함의 관점에서, G^1 은, 더 바람직하게는, 하기 식 (M-1)~(M-6)으로부터 선택되는 기



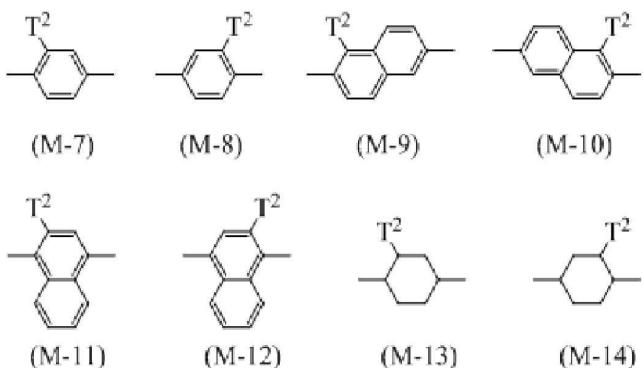
[0046]

[0047] (식 중, 이들 기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^6 로 치환되어도 되고, 어느 $-CH=$ 는 $-N=$ 로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-NR^T$ -(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-CS-$, 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 되고, T^1 은 하기 식 (T1-1)~(T1-6)으로부터 선택되는 기를 나타내고



[0048]

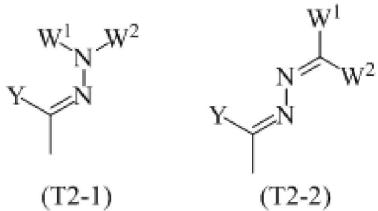
[0049] (식 중, 이들 기 각각은 어느 위치에 결합을 가져도 되고, 어느 $-CH=$ 는, 각각 독립적으로, $-N=$ 로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-NR^T$ -(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-CS-$, 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 된다. 여기에서, 이들 기 각각이 어느 위치에 결합을 가져도 된다는 의미는, 식 (T1-1)이 식 (M-1)~(M-6)의 T^1 에 결합될 경우에, 식 (T1-1)의 어느 위치에 하나의 결합을 갖는다는 것을 의도하고 있다(이하, 본 발명에서, 이들 기 각각이 어느 위치에 결합을 가져도 된다는 의미는 동일한 의미를 나타냄). 또한, 이들 기는, 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 상기 치환기 L^6 로 치환되어도 됨); 또는 하기 식 (M-7)~(M-14)로부터 선택되는 기를 나타내고



[0050]

[0051] (식 중, 이들 기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^6 로 치환되어도 되고, 어느 $-CH=$ 는, 각

각 독립적으로, $-N=$ 로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-NR^T-$ (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-CS-$, 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 되고, T^2 는 하기 식 (T2-1) 및 (T2-2)로부터 선택되는 기를 나타내고,



(식 중, W^1 은 탄소 원자수 1~40의 방향족기 및/또는 비방향족기를 함유하는 기를 나타내고(치환되어도 됨), 방향족기는 탄화수소환 또는 복소환이어도 되고, 비방향족기는 탄화수소기, 또는 탄화수소기 중의 어느 탄소 원자가 헤테로원자로 치환된 기여도 되고(단, 산소 원자는 서로 직접 연결되지 않음),

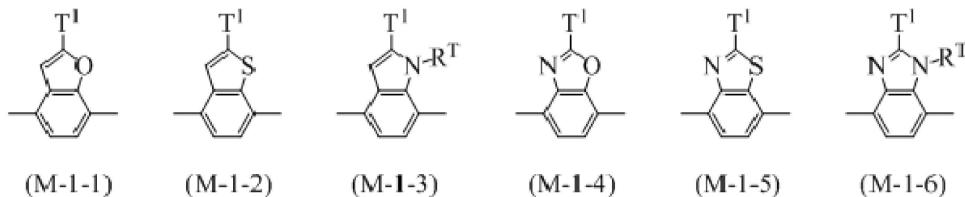
W^2 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내거나(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 또는 W^2 는 적어도 1개의 방향족기를 갖는 탄소 원자수 2~30의 기를 나타내도 되거나(기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L^1 로 치환되어도 됨), 또는 W^2 는 $P^1-(Sp^1-X^1)_{k^1}$ 로 표시되는 기를 나타내고, 여기에서 P^1 는 중합성기를 나타내고, 바람직한 중합성기는 상기 P^0 에 대해 정의된 것과 동일한 기를 나타내고, Sp^1 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 바람직한 스페이서기는 하기 Sp^0 에 대해 정의된 것과 동일한 기를 나타내고, 복수의 Sp^1 가 존재할 경우에, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, X^1 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^1 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고(단, $P^1-(Sp^1-X^1)_{k^1}$ 는 $-O-O-$ 결합을 함유하지 않음), k^1 은 0~10의 정수를 나타내고.

L^W 는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 수산기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내거나(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 또는 L 는 $P^{LW}-(Sp^{LW}-X^{LW})_{kLW}$ 로 표시되는 기를 나타내도 되고, 여기에서 P^{LW} 는 중합성기를 나타내고, Sp^{LW} 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 복수의 Sp^{LW} 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, X^{LW} 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^{LW} 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나

동일해도 되고(단, $P^{LW}-(Sp^{LW}-X^{LW})_{kLW}^-$ 는 -0-0- 결합을 함유하지 않음), kLW 는 정수 0~10를 나타내고, 복수의 L^W 가 화합물 중에 존재할 경우, 그들은 서로 동일하거나 상이해도 되고, Y 는 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 수산기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오아이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내거나(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, -0-, -S-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -OCO-CH=CH-, -CH=CH-, -CF=CF-, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 또는 Y 는 $P^Y-(Sp^Y-X^Y)_{kY}^-$ 로 표현되는 기를 나타내도 되고, 여기에서, P^Y 는 중합성기를 나타내고, 바람직한 중합성기는 상기 P^0 에 대해 정의한 것과 동일한 기를 나타내고, Sp^Y 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 바람직한 스페이서기는 상기 Sp^0 에 대해 정의한 것과 동일한 기를 나타내고, 복수의 Sp^Y 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, X^Y 는 -0-, -S-, -OCH₂-, -CH₂O-, -CO-, -COO-, -OCO-, -CO-S-, -S-CO-, -O-CO-O-, -CO-NH-, -NH-CO-, -SCH₂-, -CH₂S-, -CF₂O-, -OCF₂-, -CF₂S-, -SCF₂-, -CH=CH-COO-, -CH=CH-OCO-, -COO-CH=CH-, -OCO-CH=CH-, -COO-CH₂CH₂-, -OCO-CH₂CH₂-CH₂-, -CH₂CH₂-COO-, -CH₂CH₂-OCO-, -COO-CH₂-, -OCO-CH₂-, -CH₂-COO-, -CH=CH-, -N=N-, -CH=N-N=CH-, -CF=CF-, -C≡C-, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^Y 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고(단, $P^Y-(Sp^Y-X^Y)_{kY}^-$ 는 -0-0- 결합을 함유하지 않음), kY 는 0~10의 정수를 나타내고, W^1 및 W^2 는 함께 환 구조를 형성해도 됨).

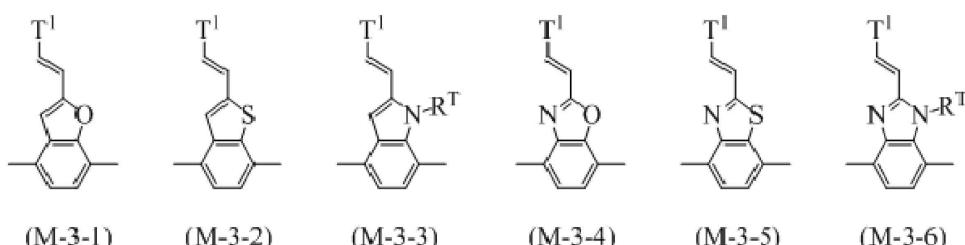
[0056]

용매에의 용해성 및 합성의 용이함의 관점에서, G^1 은, 더 바람직하게는, 식 (M-1), (M-3), (M-4), (M-7), 및 (M-8)로부터 선택되는 기, 보다 더 바람직하게는, 식 (M-1), (M-7), 및 (M-8)로부터 선택되는 기, 특히 바람직하게는, 식 (M-7) 및 (M-8)로부터 선택되는 기를 나타낸다. 더 구체적으로, 식 (M-1)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (M-1-1)~(M-1-6)으로부터 선택되는 기,



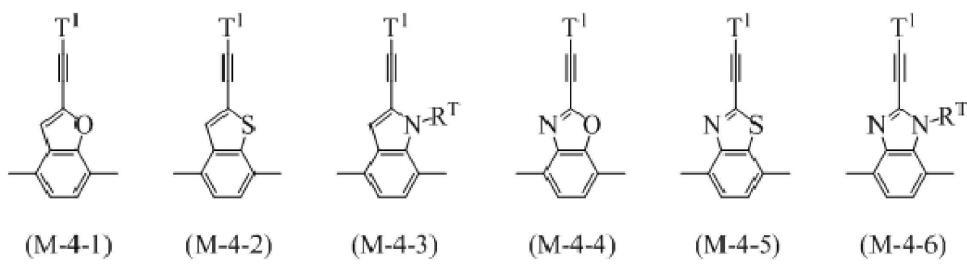
[0057]

(식 중, T^1 은 상기와 동일한 의미를 갖고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), 더 바람직하게는, 식 (M-1-4) 및 (M-1-5)로부터 선택되는 기, 및 특히 바람직하게는, 식 (M-1-5)로 표시되는 기를 나타낸다. 식 (M-3)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (M-3-1)~(M-3-6)으로부터 선택되는 기,



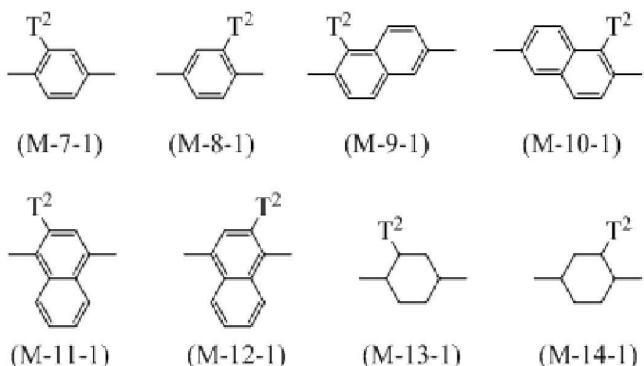
[0059]

(식 중, T^1 은 상기와 동일한 의미를 갖고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), 보다 바람직하게는, 식 (M-3-4) 및 (M-3-5)로부터 선택되는 기, 특히 바람직하게는, 식 (M-3-5)로 표시되는 기를 나타낸다. 식 (M-4)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (M-4-1)~(M-4-6)으로부터 선택되는 기,



[0061]

[0062] (식 중, T^1 은 상기와 동일한 의미를 갖고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), 더 바람직하게는, 식 (M-4-4) 및 (M-4-5)로부터 선택되는 기이고, 특히 바람직하게는, 식 (M-4-5)로 표시되는 기를 나타낸다. 식 (M-7)~(M-14)로 표시되는 기 각각은, 바람직하게는, 하기 식 (M-7-1)~(M-14-1)로부터 선택되는 기,

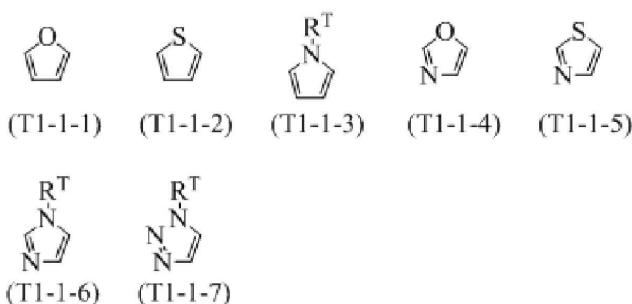


[0063]

[0064] (식 중, T^2 는 상기와 동일한 의미를 갖고), 더 바람직하게는, 식 (M-7-1)~(M-12-1)로부터 선택되는 기, 특히 바람직하게는, 식 (M-7-1) 또는 (M-8-1)로 표현되는 기를 나타낸다.

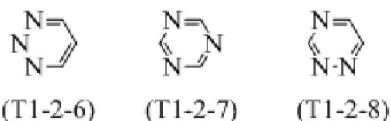
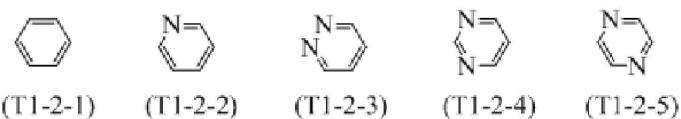
[0065]

또한, 식 (M-1)~(M-6) 중, 파장 분산성 및 합성의 용이함의 관점에서, T^1 은, 바람직하게는, 식 (T1-1), (T1-2), (T1-3), 및 (T1-6)으로부터 선택되는 기, 더 바람직하게는, 식 (T1-3) 및 (T1-6)으로부터 선택되는 기, 특히 바람직하게는, 식 (T1-3)으로 표시되는 기를 나타낸다. 더 구체적으로는, 식 (T1-1)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (T1-1-1)~(T1-1-7)로부터 선택되는 기,

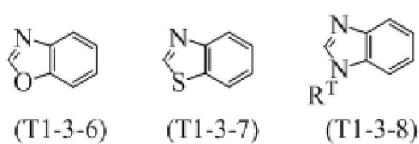
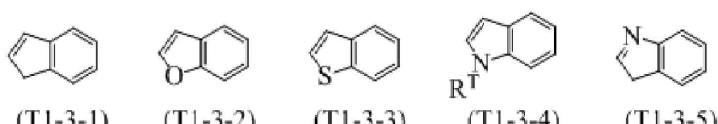


[0066]

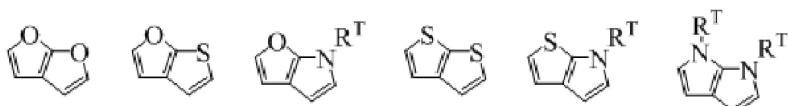
[0067] (식 중, 이들 기 각각은 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^6 로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 식 (T1-1-2), (T1-1-4), (T1-1-5), (T1-1-6), 및 (T1-1-7)로 선택되는 기를 나타낸다. 식 (T1-2)로 나타나는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (T1-2-1)~(T1-2-8)로부터 선택되는 기,



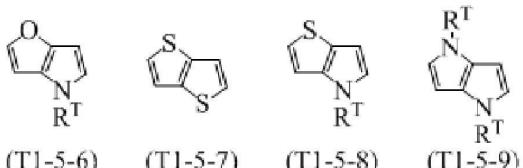
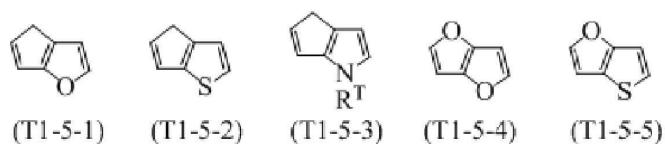
[0069] (식 중, 이들 기 각각은 어느 위치에 결합을 가져도 된다. 또한, 이들 기 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^G 로 치환되어도 됨), 보다 바람직하게는, 식 (T1-2-1)로 표시되는 기를 나타낸다. 식 (T1-3)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (T1-3-1)~(T1-3-8)로부터 선택되는 기,



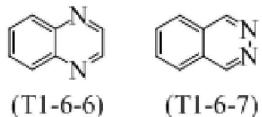
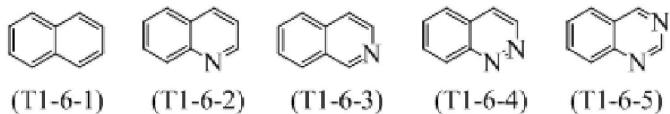
[0071] (식 중, 이들 기 각각은 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^G 로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 식 (T1-3-2), (T1-3-3), (T1-3-6), 또는 (T1-3-7)로 표시되는 기를 나타낸다. 식 (T1-4)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (T1-4-1)~(T1-4-6)로부터 선택되는 기를 나타낸다



[0073] (식 중, 이들 기 각각은 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^G 로 치환되어도 됨). 식 (T1-5)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (T1-5-1)~(T1-5-9)로부터 선택되는 기를 나타낸다



[0075] (식 중, 이들 기 각각은 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타낸다. 또한, 이들 기 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^G 로 치환되어도 됨). 식 (T1-6)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (T1-6-1)~(T1-6-7)로부터 선택되는 기를 나타낸다



[0076]

[0077] (식 중, 이들 기 각각은 어느 위치에 결합을 가져도 된다. 또한, 이들 기 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^G 로 치환되어도 됨).

[0078]

식 (I) 중, L^G 는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 시아노기, 이소시아노기, 아미노기, 히드록실기, 메르캅토기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 트리메틸실릴기, 디메틸실릴기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내거나(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비 인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 되고, 알킬기 중의 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 또는 L^G 는 $P^{LG}-(Sp^{LG}-X^{LG})_{kLG}$ 로 표시되는 기를 나타내도 되고, 여기에서 P^{LG} 는 중합성기를 나타내고, 바람직한 중합성기는 상기 P^0 에 대해 정의된 것과 동일한 기를 나타내고, Sp^{LG} 는 스페이서기 또는 단결합을 나타내고, 바람직한 스페이서기는 상기 Sp^0 에 대해 정의된 것과 동일한 기를 나타내고, 복수의 Sp^{LG} 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고, X^{LG} 는 $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-N=N-$, $-CH=N-N=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고, 복수의 X^{LG} 가 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고(단, $P^{LG}-(Sp^{LG}-X^{LG})_{kLG}$ 는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않음), kLG 는 0~10의 정수를 나타내고, 복수의 L^G 가 화합물 중에 존재할 경우, 그들은 서로 상이하거나 동일해도 되고,

[0079]

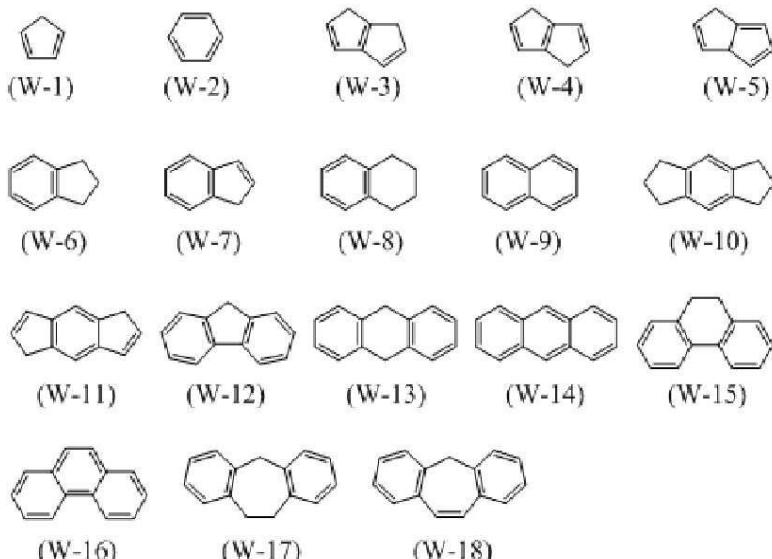
$m1$ 및 $m2$ 는, 각각 독립적으로, 0~6의 정수를 나타내고, $m1 + m2$ 는 0~6의 정수를 나타낸다. 액정성 및 합성의 용이함의 관점에서, L^G 는, 바람직하게는, 불소 원자, 염소 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 니트로기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 및 $-C\equiv C-$ 로부터 선택되는 기로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-COO-$, 및 $-OCO-$ 로부터 선택되는 기로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 직쇄상 또는 분기상 알킬기 또는 알콕시기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 특히 바람직하게는, 불소 원자, 염소 원자, 탄소 원자수 1~8의 직쇄상 알킬기 또는 직쇄상 알콕시기를 나타낸다.

[0080]

식 (T2-1) 또는 (T2-2) 중, 액정성 및 합성의 용이함의 관점에서, Y 는, 바람직하게는, 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 니트로기, 시아노기, 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기(여기에서, 당해 기 중 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 됨), 또는 $P^Y-(Sp^Y-X^Y)_{kY}$ 로 표시되는 기를

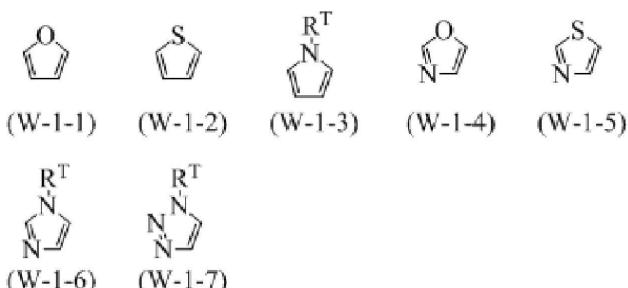
나타내고, 더 바람직하게는, Y는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고 (여기에서, 당해 기 중 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-\text{CH}_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-0-$, $-\text{COO}-$, 또는 $-\text{OCO}-$ 로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, Y는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 당해 기 중 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 특히 바람직하게는, Y는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 직쇄상 알킬기를 나타낸다.

[0081] 식 (T2-1) 또는 (T2-2) 중, 액정성 및 합성의 용이함의 관점에서, W^1 은, 탄소 원자수 1~12의 비방향족기 및/또는 방향족기의 탄소환 또는 복소환을 포함하는 기를 나타내고(치환되어도 됨), 탄소환 또는 복소환의 어느 탄소 원자는 헤테로원자로 치환되어도 된다. 원료 입수의 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, W^1 에 포함되는 방향족기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-1)~(W-18)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).



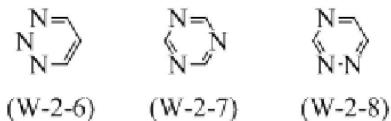
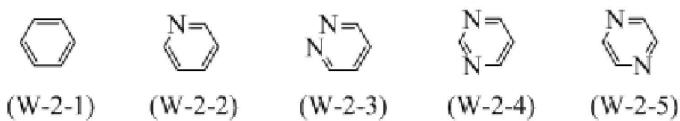
[0082]

[0083] (식 중, 환 구조는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, 이들 기로부터 선택되는 2개 이상의 방향족기가 단결합으로 연결되는 기가 형성되어도 되고, 어느 $-\text{CH}=$ 는, 각각 독립적으로, $-\text{N}=$ 로 치환되어도 되고, $-\text{CH}_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-0-$, $-\text{S}-$, $-\text{NR}^T-$ (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-\text{CS}-$, 또는 $-\text{CO}-$ 를 나타낸다(단, 이들 기는 $-0-\text{O}-$ 결합을 포함하지 않음). 또한, 이들 기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨). 식 (W-1)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-1-1)~(W-1-7)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)

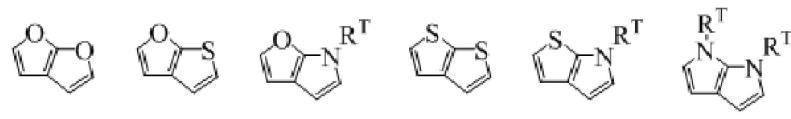


[0084]

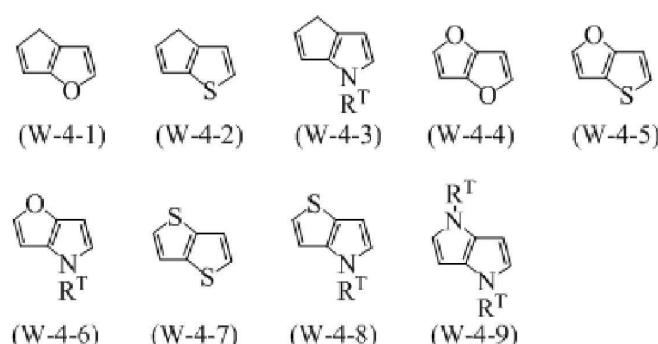
[0085] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-2)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-2-1)~(W-2-8)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



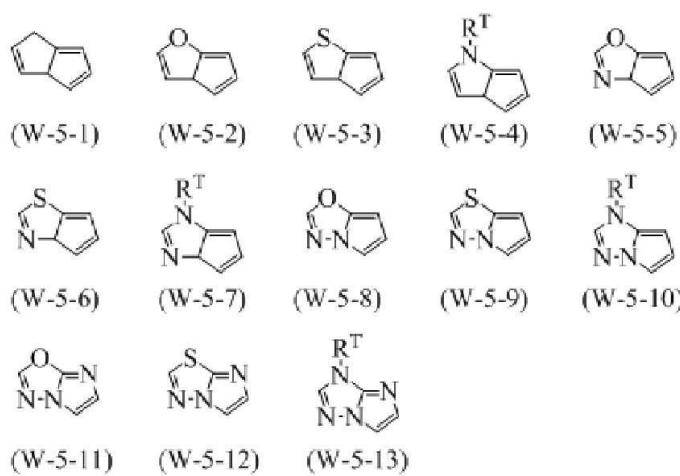
- [0086] [0087] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 됨). 식 (W-3)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-3-1)~(W-3-6)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



- [0088] [0089] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-4)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-4-1)~(W-4-9)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)

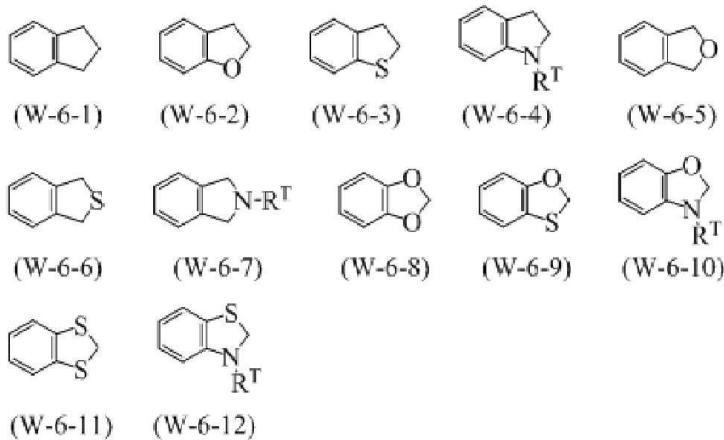


- [0090] [0091] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-5)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-5-1)~(W-5-13)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



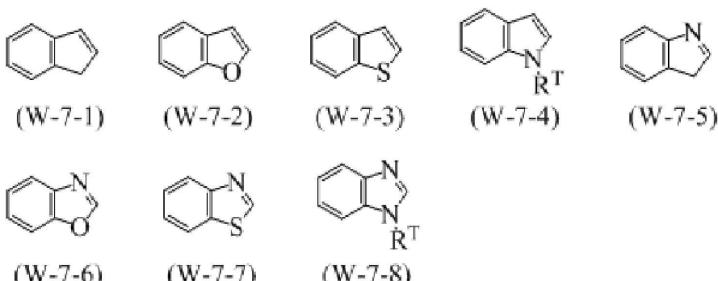
- [0092] [0093] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를

나타냄). 식 (W-6)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-6-1)~(W-6-12)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



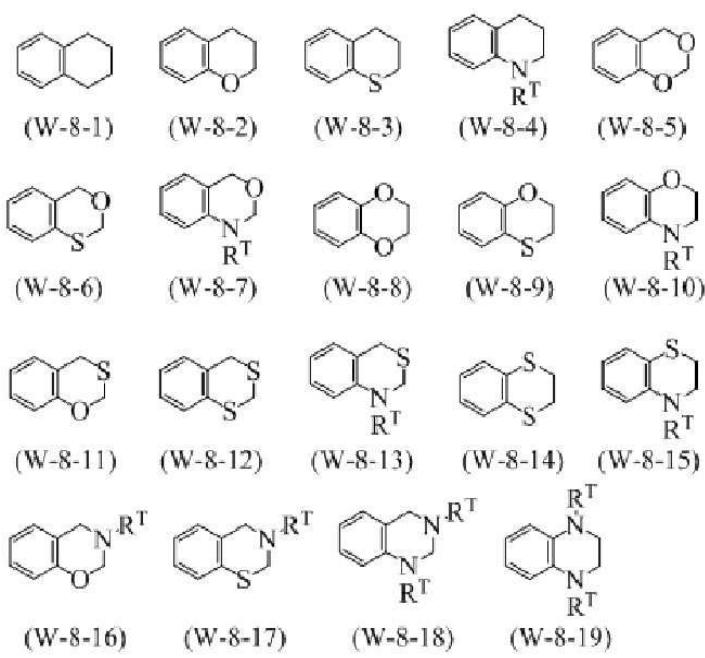
[0094]

[0095] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-7)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-7-1)~(W-7-8)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



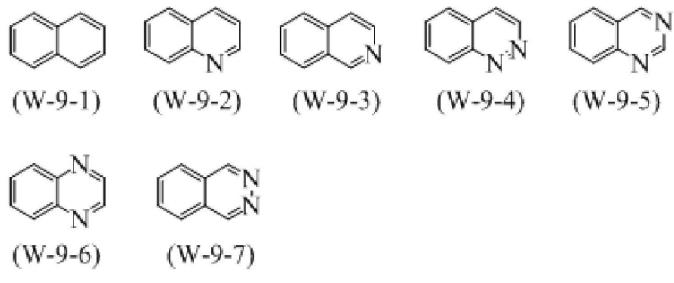
[0096]

[0097] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-8)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-8-1)~(W-8-19)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



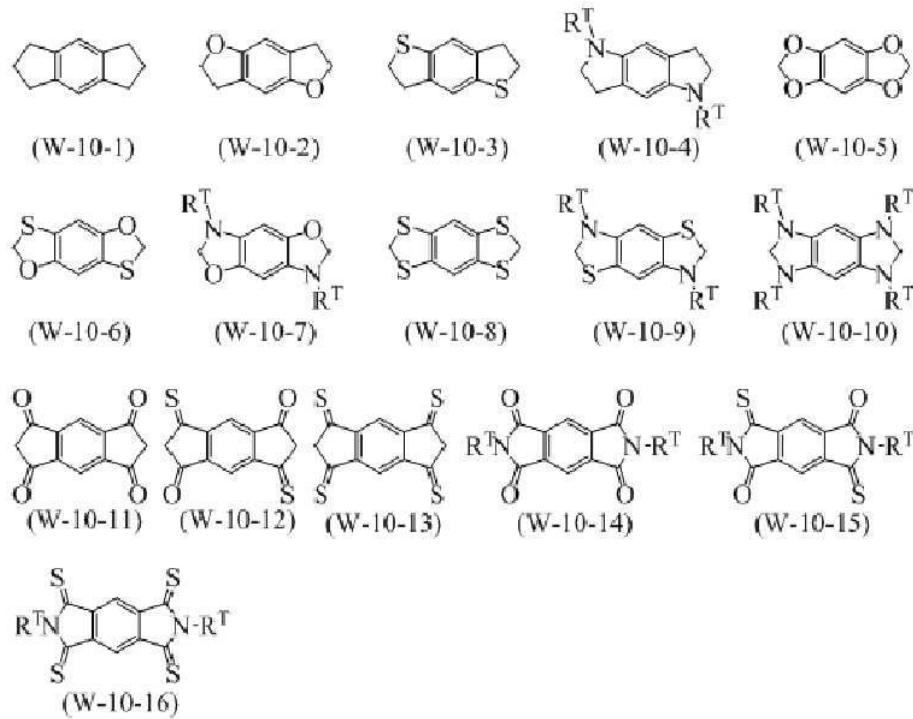
[0098]

[0099] (식 중, 이를 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-9)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-9-1)~(W-9-7)로부터 선택되는 기를 나타낸다 (그 각각은 비치환기이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



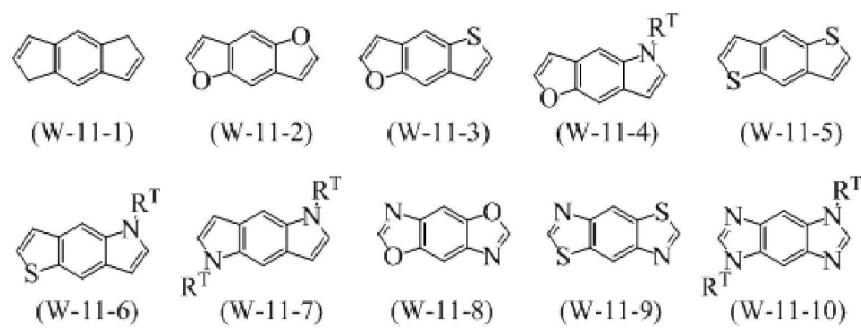
[0100]

[0101] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 됨). 식 (W-10)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-10-1)~(W-10-16)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^w로 치환되어도 됨)



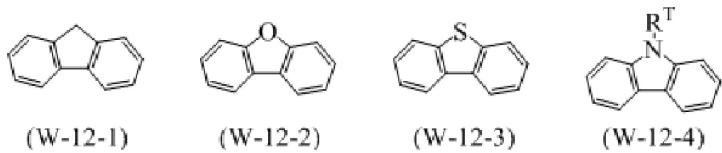
[0102]

[0103] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-11)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-11-1)~(W-11-10)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치화되어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치화기 L^W 로 치화되어도 됨)



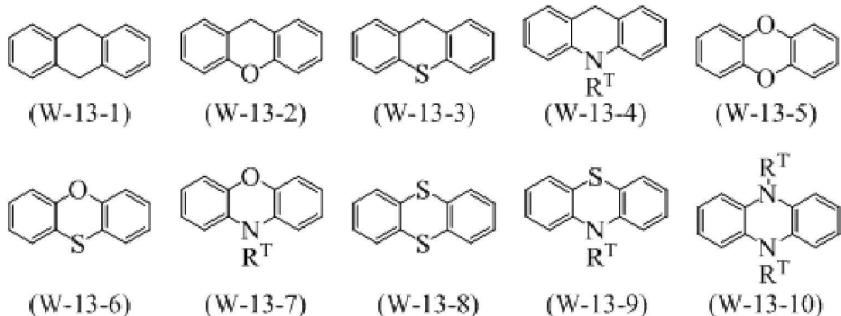
[0104]

[0105] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-12)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-12-1)~(W-12-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



[0106] (W-12-1) (W-12-2) (W-12-3) (W-12-4)

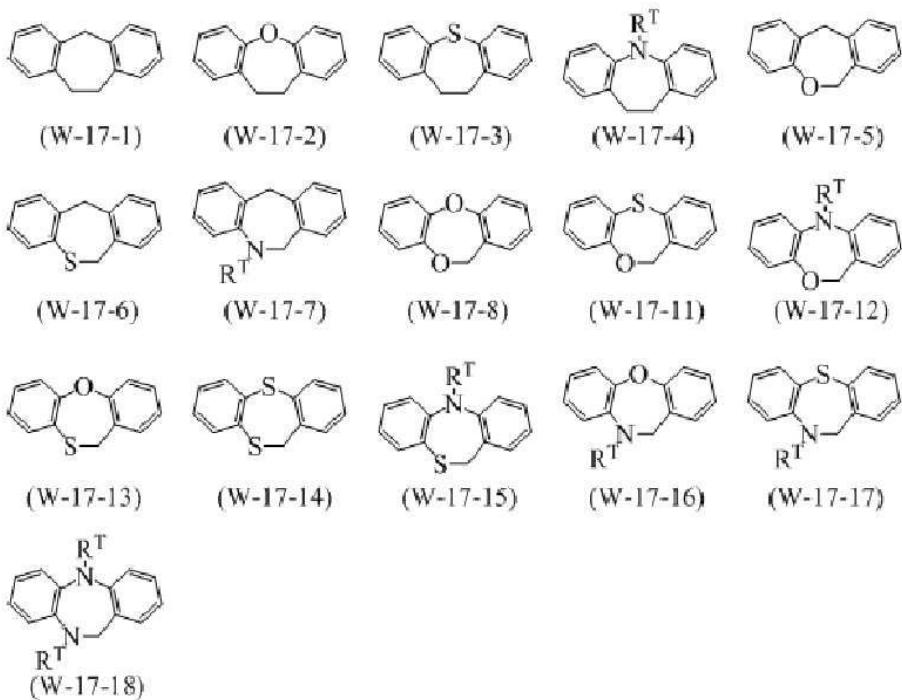
[0107] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-13)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-13-1)~(W-13-10)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



[0108] (W-13-1) (W-13-2) (W-13-3) (W-13-4) (W-13-5)

[0108] (W-13-6) (W-13-7) (W-13-8) (W-13-9) (W-13-10)

[0109] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-17)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-17-1)~(W-17-18)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



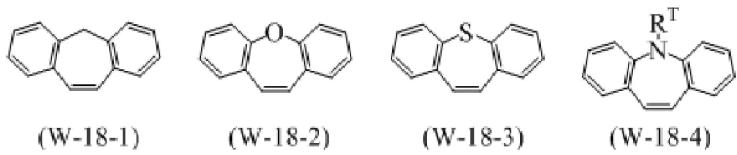
[0110] (W-17-1) (W-17-2) (W-17-3) (W-17-4) (W-17-5)

[0110] (W-17-6) (W-17-7) (W-17-8) (W-17-9) (W-17-10)

[0110] (W-17-11) (W-17-12) (W-17-13) (W-17-14) (W-17-15)

[0110] (W-17-16) (W-17-17) (W-17-18)

[0111] (식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-18)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-18-1)~(W-18-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



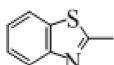
[0112]

[0113]

(식 중, 이들 기는 어느 위치에 결합을 가져도 되고, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄).

[0114]

W^1 에 포함되는 탄소환 또는 복소환을 포함하는 기는, 바람직하게는, 식 (W-1-1), (W-1-2), (W-1-3), (W-1-4), (W-1-5), (W-1-6), (W-2-1), (W-6-9), (W-6-11), (W-6-12), (W-7-2), (W-7-3), (W-7-4), (W-7-6), (W-7-7), (W-7-8), (W-9-1), (W-12-1), (W-12-2), (W-12-3), (W-12-4), (W-13-7), (W-13-9), (W-13-10), (W-14), (W-18-1), 및 (W-18-4)로부터 선택되는 기를 나타내고(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, 식 (W-2-1), (W-7-3), (W-7-7), 및 (W-14)로부터 선택되는 기를 나타내고(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, 식 (W-7-3), (W-7-7), 및 (W-14)로부터 선택되는 기를 나타내고(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨), 보다 더욱더 바람직하게는, 식 (W-7-7)로 표시되는 기를 나타내고(이는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨), 특히 바람직하게는, 식 (W-7-7-1)로 표시되는 기를 나타낸다(이는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).



[0115]

[0116]

식 (T-1) 또는 (T-2) 중, 원료 입수의 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, 더 바람직하게는, W^2 는 수소 원자, 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기(여기에서, 당해 기 중 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C$ 로 치환되어도 됨), 또는 $P^W-(Sp^W-X^W)_{kW^2}$ 로 표시되는 기를 나타내고, 보다 더 바람직하게는, W^2 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기(여기에서, 당해 기 중 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-CO-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 로 치환되어도 됨), 또는 $P^W-(Sp^W-X^W)_{kW^2}$ 로 표시되는 기를 나타내고, 보다 더욱더 바람직하게는, W^2 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 직쇄상 알킬기(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$ 로 치환되어도 됨), 또는 $P^W-(Sp^W-X^W)_{kW^2}$ 로 표시되는 기를 나타낸다.

[0117]

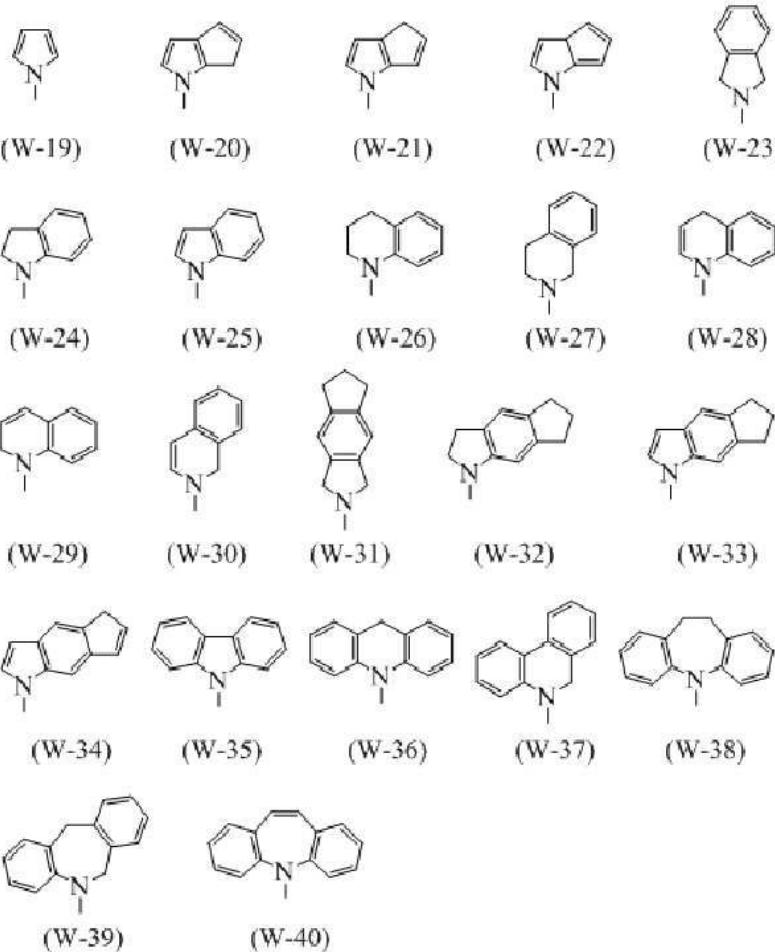
또한, W^2 가 탄소 원자수 2~30의 기를 나타낼 경우(이것은, 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 되는 적어도 하나의 방향족기를 가짐), W^2 는, 바람직하게는, 식 $(W-1) \sim (W-18)$ 로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨). 이 경우, 보다 바람직한 구조는 삼기와 마차가지이다.

[0118]

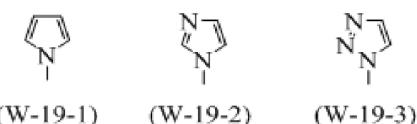
또한, \mathbb{W} 가 $P^{\mathbb{W}} - (Sp^{\mathbb{W}} X^{\mathbb{W}})_{k^{\mathbb{W}}}$ 로 표시되는 기를 나타낼 경우, $P^{\mathbb{W}}$, $Sp^{\mathbb{W}}$, $X^{\mathbb{W}}$, 및 $k^{\mathbb{W}}$ 로 표시되는 기의 바람직한 구조는, P^0 , Sp^0 , X^0 , 및 $k0$ 로 표시되는 기의 바람직한 구조와 동일하다.

[0119]

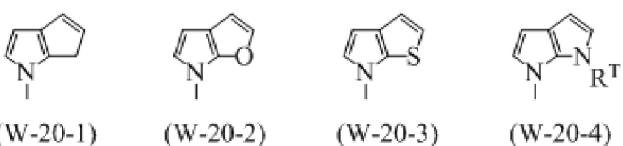
또한, W^1 및 W^2 는 함께 환 구조를 형성해도 된다. 단, 이 경우, $-NW^1W^2$ 로 표시되는 환상기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-19)~(W-40)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이여도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치

(식 중, 어느 $-CH=$ 는, 각각 독립적으로, $-N=$ 로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-NR^T-$ (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-CS-$, 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 된다(단, 이들 기는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않음). 또한, 이들 기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨). 식 (W-19)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-19-1)~(W-19-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).

[0120]

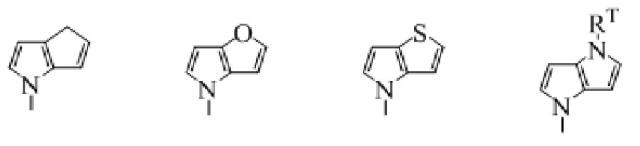
(식 중, 어느 $-CH=$ 는, 각각 독립적으로, $-N=$ 로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-NR^T-$ (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-CS-$, 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 된다(단, 이들 기는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않음). 또한, 이들 기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨). 식 (W-19)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-19-1)~(W-19-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).

[0122]

식 (W-20)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-20-1)~(W-20-4)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)

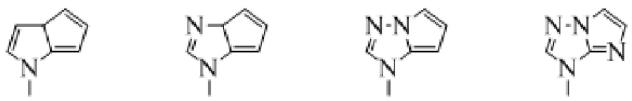
[0124]

(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-21)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-21-1)~(W-21-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



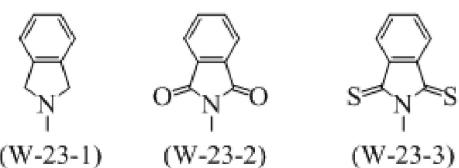
[0126] (W-21-1) (W-21-2) (W-21-3) (W-21-4)

[0127] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-22)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-22-1)~(W-22-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).



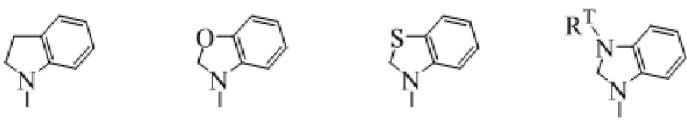
[0128] (W-22-1) (W-22-2) (W-22-3) (W-22-4)

[0129] 식 (W-23)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-23-1)~(W-23-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).



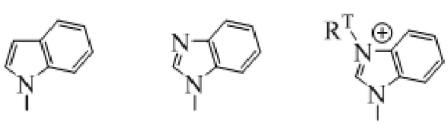
[0130] (W-23-1) (W-23-2) (W-23-3)

[0131] 식 (W-24)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-24-1)~(W-24-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



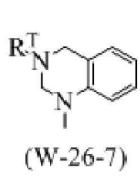
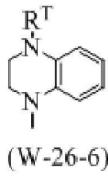
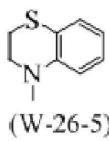
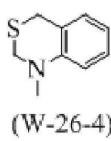
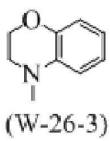
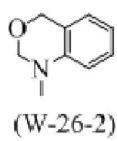
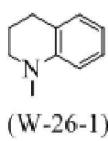
[0132] (W-24-1) (W-24-2) (W-24-3) (W-24-4)

[0133] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-25)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-25-1)~(W-25-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



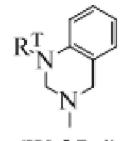
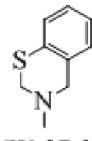
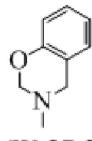
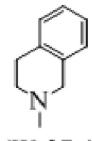
[0134] (W-25-1) (W-25-2) (W-25-3)

[0135] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-26)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-26-1)~(W-26-7)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



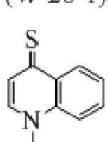
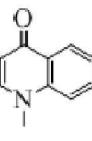
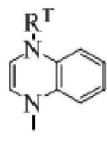
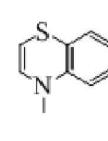
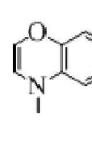
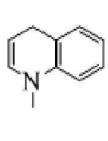
[0136]

[0137] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-27)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-27-1)~(W-27-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



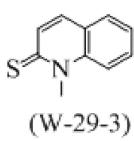
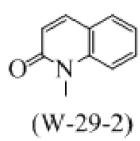
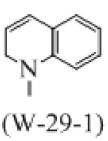
[0138]

[0139] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-28)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-28-1)~(W-28-6)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



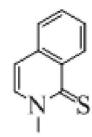
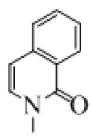
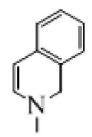
[0140]

[0141] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-29)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-29-1)~(W-29-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



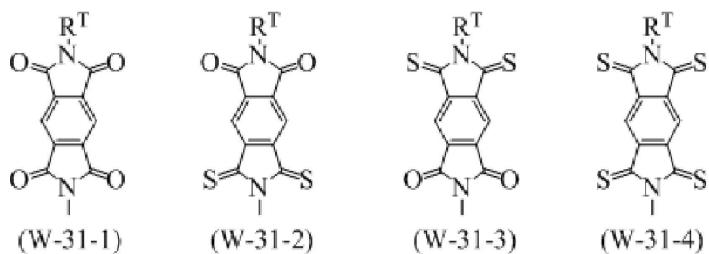
[0142]

[0143] 식 (W-30)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-30-1)~(W-30-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



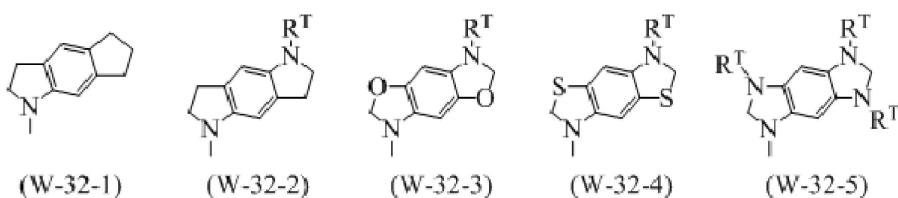
[0144]

[0145] 식 (W-31)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-31-1)~(W-31-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



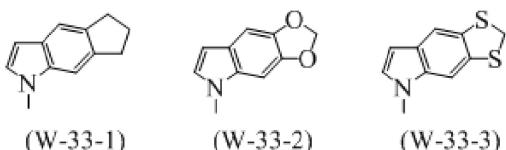
[0146] (W-31-1) (W-31-2) (W-31-3) (W-31-4)

(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-32)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-32-1)~(W-32-5)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



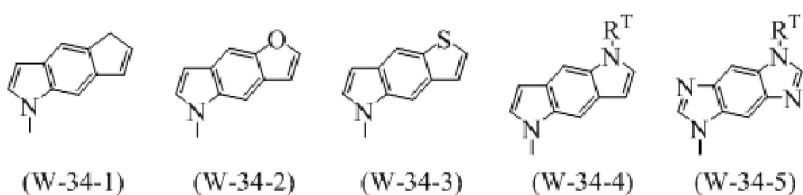
[0148] (W-32-1) (W-32-2) (W-32-3) (W-32-4)

(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-33)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-33-1)~(W-33-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



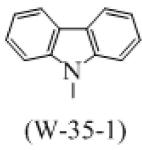
[0150] (W-33-1) (W-33-2) (W-33-3)

식 (W-34)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-34-1)~(W-34-5)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\parallel} 로 치환되어도 됨)



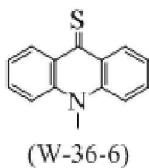
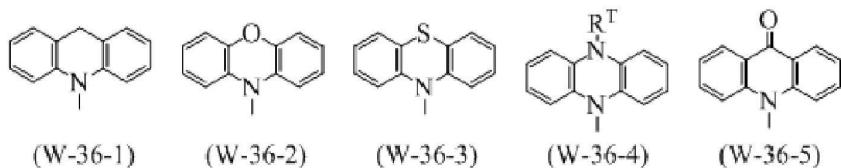
[0152] (W-34-1) (W-34-2) (W-34-3) (W-34-4) (W-34-5)

(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-35)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-35-1)로 표시되는 기를 나타낸다(그것은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).



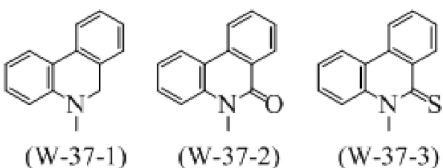
[0154] (W-35-1)

식 (W-36)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-36-1)~(W-36-6)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\dagger} 로 치환되어도 됨)



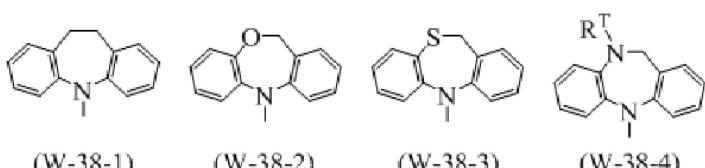
[0156]

[0157] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-37)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-37-1)~(W-37-3)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



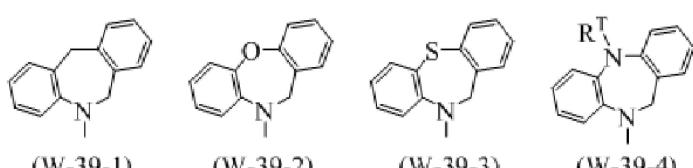
[0158]

[0159] 식 (W-38)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-38-1)~(W-38-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



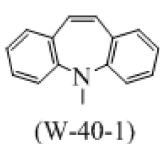
[0160]

[0161] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-39)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-39-1)~(W-39-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



[0162]

[0163] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-40)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-40-1)로 표시되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).

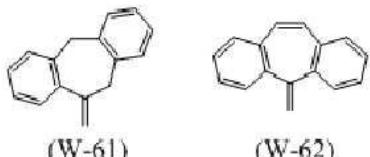
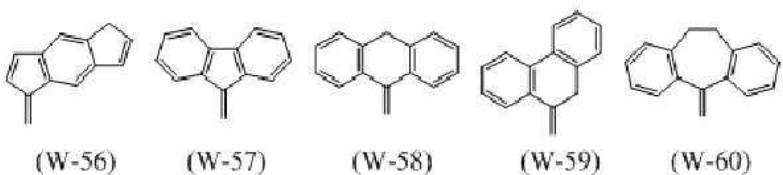
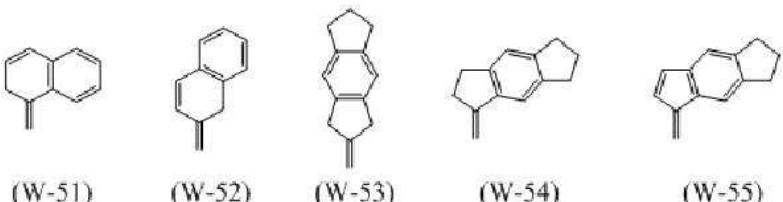
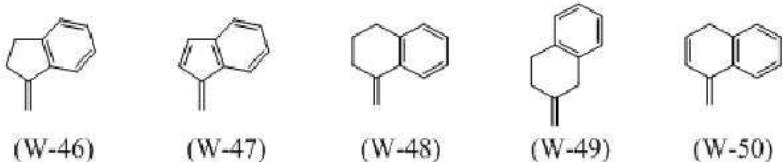
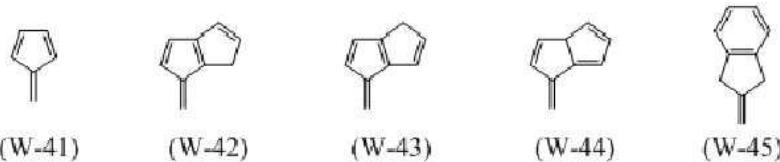


[0164]

[0165] 원료의 입수 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, 보다 바람직하게는, $-NW^1W^2$ 로 표시되는 환상기는, 식 (W-19-1), (W-21-2), (W-21-3), (W-21-4), (W-23-2), (W-23-3), (W-25-1), (W-25-2), (W-25-3), (W-30-2), (W-30-3), (W-35-1), (W-36-2), (W-36-3), (W-36-4), 및 (W-40-1)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이

어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\ddagger} 로 치환되어도 됨).

[0166] 또한, W^1 및 W^2 는 함께 환 구조를 형성해도 된다. 단, 이 경우, $=CW^1W^2$ 로 표시되는 환상기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-41)~(W-62)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\ddagger} 로 치환되어도 됨)



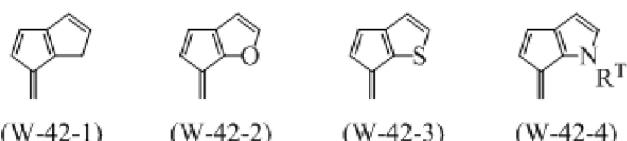
[0167]

[0168] (식 중, 어느 $-CH=$ 는, 각각 독립적으로, $-N=$ 로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 는 $-O-$, $-S-$, $-NR^T$ -(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬기를 나타냄), $-CS-$, 또는 $-CO-$ 로 치환되어도 된다(단, 이를 기는 $-O-O-$ 결합을 포함하지 않음). 또는, 이를 기는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\ddagger} 로 치환되어도 된다. 식 (W-41)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-41-1)~(W-41-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\ddagger} 로 치환되어도 됨).

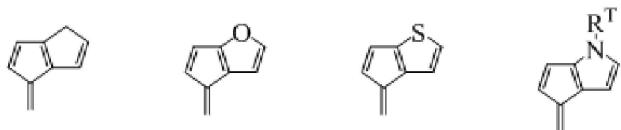


[0169]

[0170] 식 (W-42)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-42-1)~(W-42-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\ddagger} 로 치환되어도 됨)

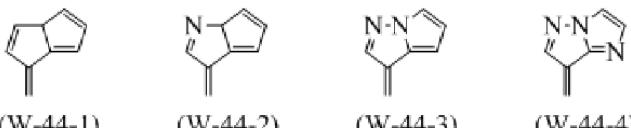


[0172] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-43)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-43-1)~(W-43-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



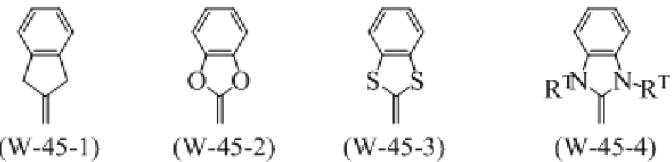
[0173] (W-43-1) (W-43-2) (W-43-3) (W-43-4)

[0174] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-44)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-44-1)~(W-44-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨).



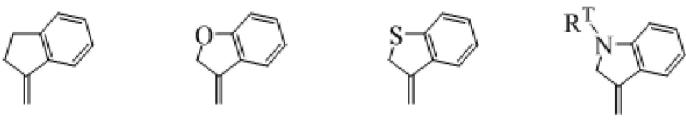
[0175] (W-44-1) (W-44-2) (W-44-3) (W-44-4)

[0176] 식 (W-45)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-45-1)~(W-45-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



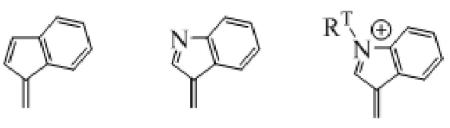
[0177] (W-45-1) (W-45-2) (W-45-3) (W-45-4)

[0178] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-46)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-46-1)~(W-46-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



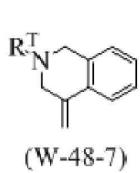
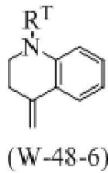
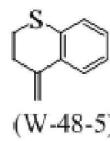
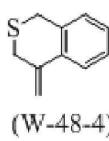
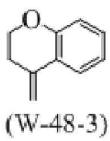
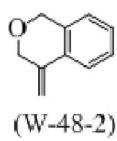
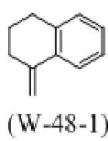
[0179] (W-46-1) (W-46-2) (W-46-3) (W-46-4)

[0180] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-47)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-47-1)~(W-47-3)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



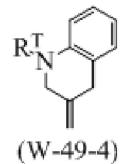
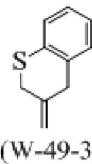
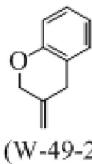
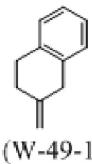
[0181] (W-47-1) (W-47-2) (W-47-3)

[0182] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-48)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-48-1)~(W-48-7)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^W 로 치환되어도 됨)



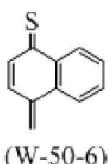
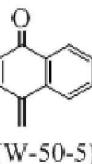
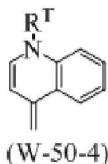
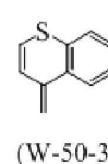
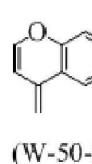
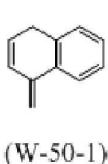
[0183]

[0184] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-49)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-49-1)~(W-49-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



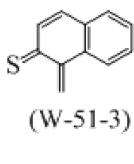
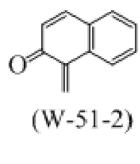
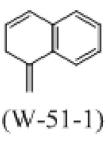
[0185]

[0186] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-50)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-50-1)~(W-50-6)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



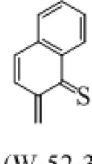
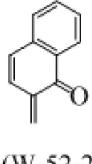
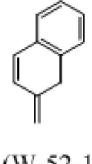
[0187]

[0188] (식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-51)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-51-1)~(W-51-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



[0189]

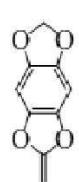
[0190] 식 (W-52)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-52-1)~(W-52-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



[0191]

[0192]

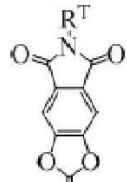
식 (W-53)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-53-1)~(W-53-8)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



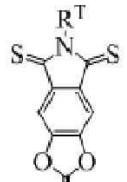
(W-53-1)



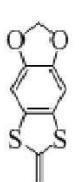
(W-53-2)



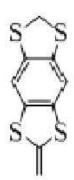
(W-53-3)



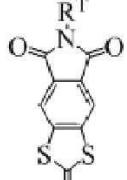
(W-53-4)



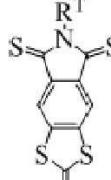
(W-53-5)



(W-53-6)



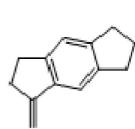
(W-53-7)



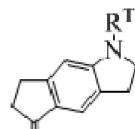
(W-53-8)

[0193]

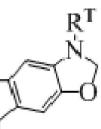
(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-54)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-54-1)~(W-54-5)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



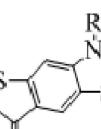
(W-54-1)



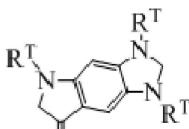
(W-54-2)



(W-54-3)



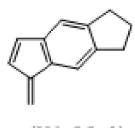
(W-54-4)



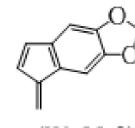
(W-54-5)

[0195]

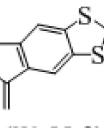
(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-55)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-55-1)~(W-55-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



(W-55-1)



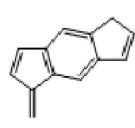
(W-55-2)



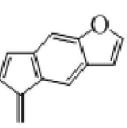
(W-55-3)

[0197]

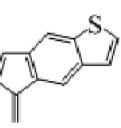
식 (W-56)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-56-1)~(W-56-5)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



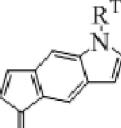
(W-56-1)



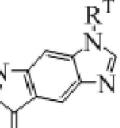
(W-56-2)



(W-56-3)



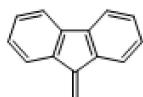
(W-56-4)



(W-56-5)

[0199]

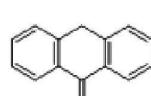
(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-57)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-57-1)로 표시되는 기를 나타낸다(이는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



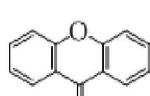
(W-57-1)

[0201]

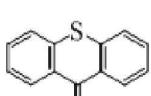
식 (W-58)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-58-1)~(W-58-6)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



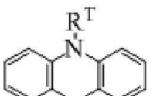
(W-58-1)



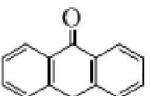
(W-58-2)



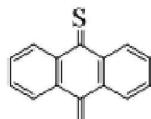
(W-58-3)



(W-58-4)



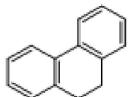
(W-58-5)



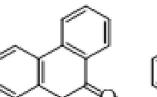
(W-58-6)

[0203]

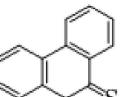
(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-59)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-59-1)~(W-59-3)으로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



(W-59-1)



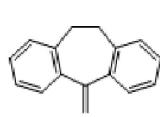
(W-59-2)



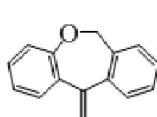
(W-59-3)

[0205]

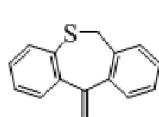
식 (W-60)으로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-60-1)~(W-60-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨)



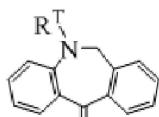
(W-60-1)



(W-60-2)



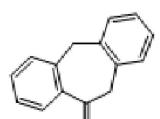
(W-60-3)



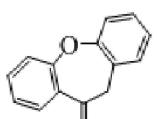
(W-60-4)

[0207]

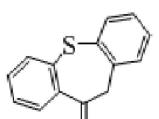
(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-61)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-61-1)~(W-61-4)로부터 선택되는 기를 나타낸다(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



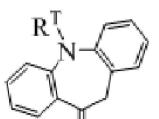
(W-61-1)



(W-61-2)



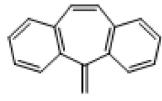
(W-61-3)



(W-61-4)

[0209]

(식 중, R^T 는 수소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 알킬기를 나타냄). 식 (W-62)로 표시되는 기는, 바람직하게는, 하기 식 (W-62-1)로 표시되는 기를 나타낸다(이는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^T 로 치환되어도 됨).



(W-62-1)

[0211]

[0212] 원료 입수의 용이함 및 합성의 용이함의 관점에서, 더 바람직하게는, $=CW^1W^2$ 로 표시되는 환상기는, 식 (W-42-2), (W-42-3), (W-43-2), (W-43-3), (W-45-3), (W-45-4), (W-57-1), (W-58-2), (W-58-3), (W-58-4), 및 (W-62-1)로부터 선택되는 기를 나타내고(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\parallel} 로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, 환상기는 식 (W-57-1) 및 (W-62-1)로부터 선택되는 기를 나타내고(그 각각은 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\parallel} 로 치환되어도 됨), 보다 더 바람직하게는, 환상기는 식 (W-57-1)로 표시되는 기를 나타낸다(이는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 상술한 치환기 L^{\parallel} 로 치환되어도 됨).

[0213]

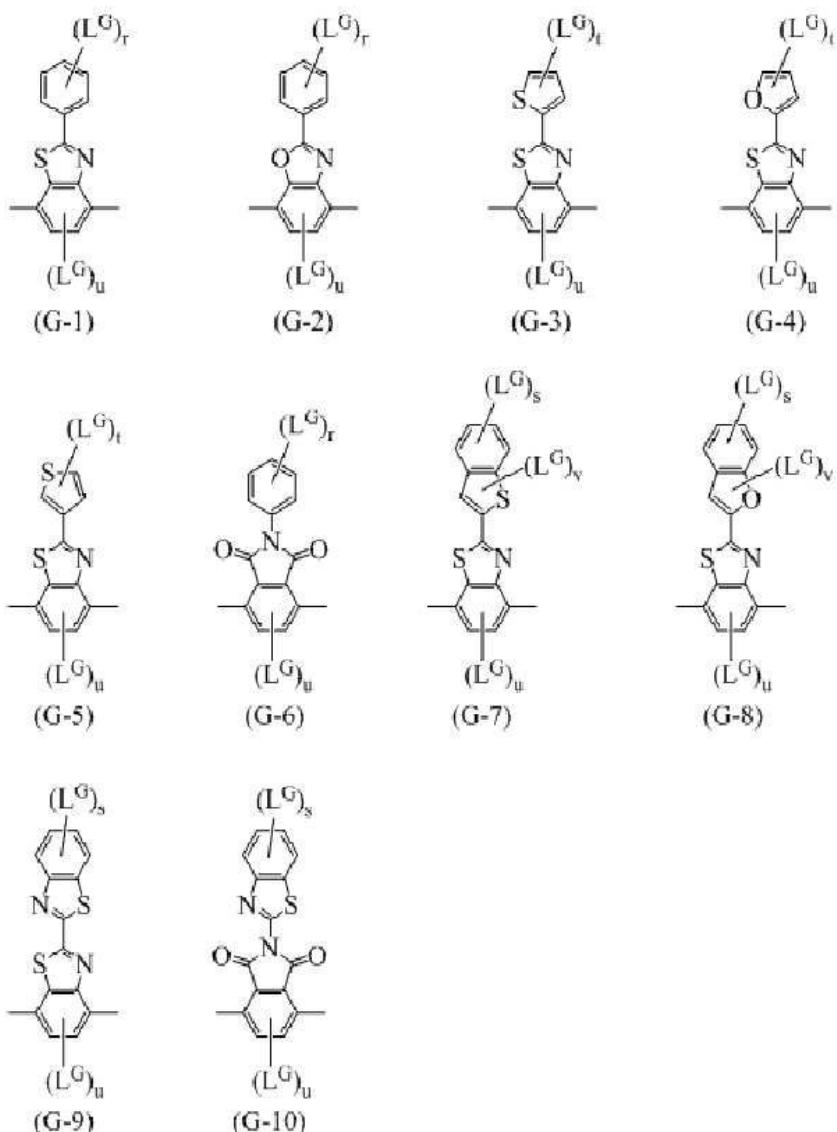
W^1 및 W^2 에 포함되는 π 전자의 총 수는, 과장 분산성, 보존 안정성, 액정성, 및 합성의 용이함의 관점에서, 바람직하게는, 4~24이다.

[0214]

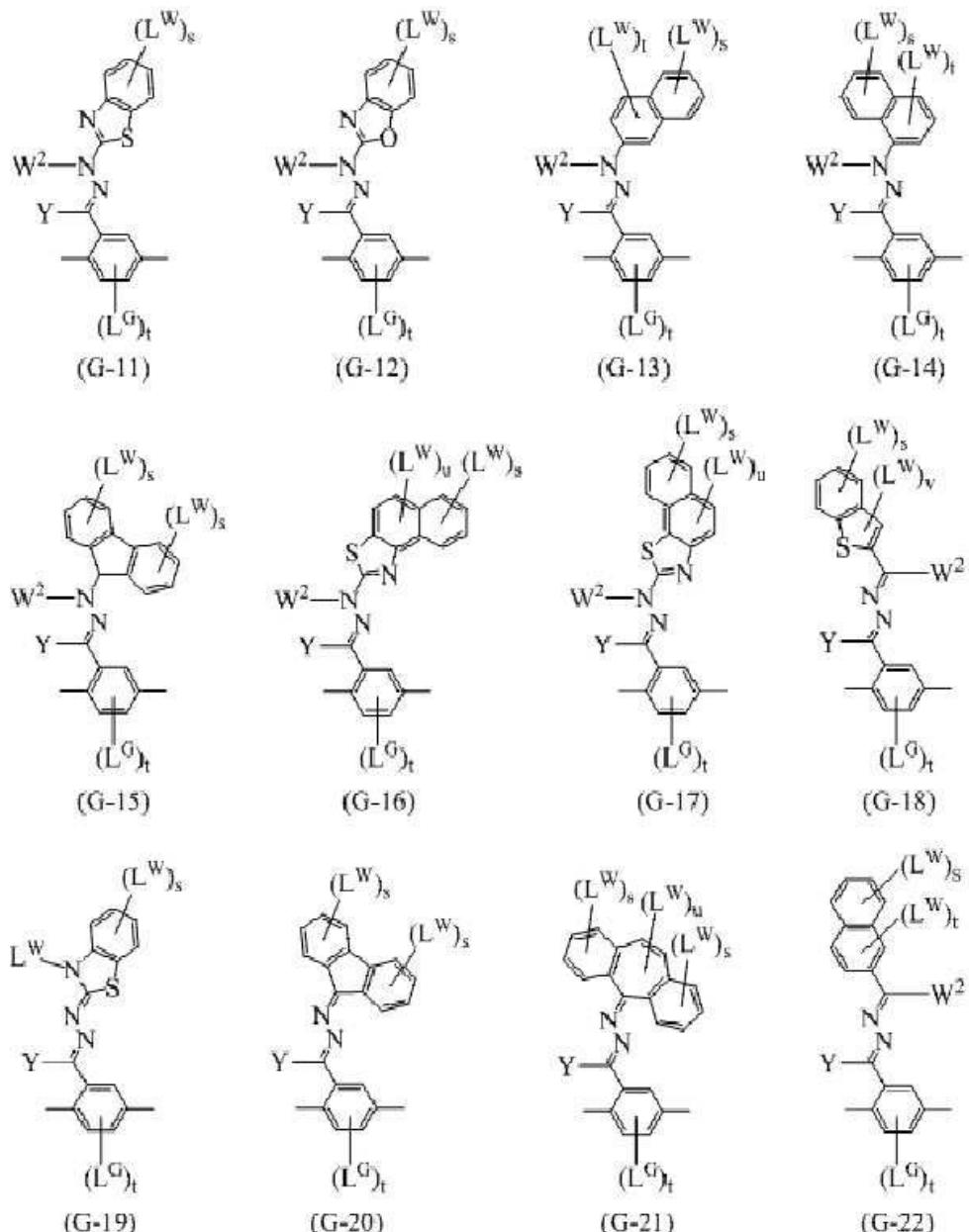
액정성 및 합성의 용이함의 관점에서, 바람직하게는, L^{\parallel} 는 불소 원자, 염소 원자, 펜ти플루오로설피라닐기, 니트로기, 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디이소프로필아미노기, 또는 탄소 원자수 1~12의 치환기 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 및 $-C\equiv C$ 로부터 선택되는 기로 치환되어도 됨), 더 바람직하게는, L^{\parallel} 는 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 치환기 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 되고, $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-COO-$, 및 $-OCO-$ 로부터 선택되는 기로 치환되어도 되고, 보다 더 바람직하게는, L^{\parallel} 는 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~12의 치환기 또는 분기상 알킬기 또는 알콕시기를 나타내고(여기에서, 어느 수소 원자는 불소 원자로 치환되어도 됨), 특히 바람직하게는, L^{\parallel} 는 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~8의 치환상 알킬기 또는 치환상 알콕시기를 나타낸다.

[0215]

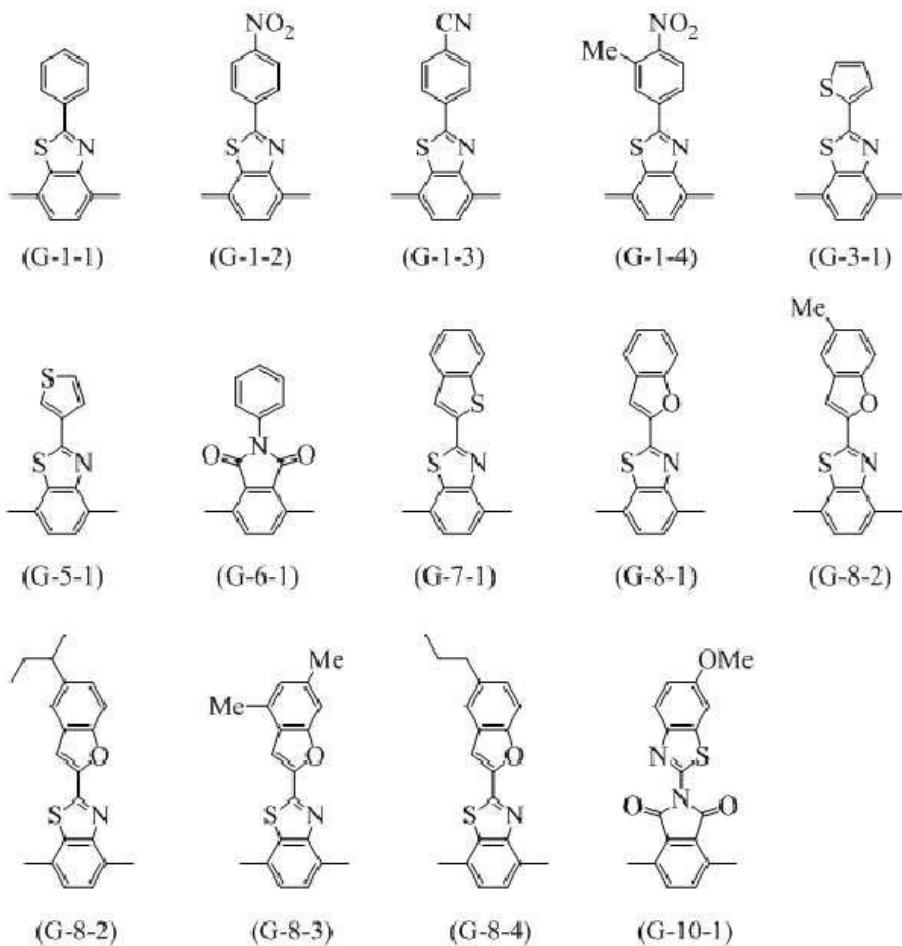
식 (I) 중, 더 바람직하게는, G^1 은 하기 식 (G-1)~(G-22)로부터 선택되는 기를 나타내고



[0216]

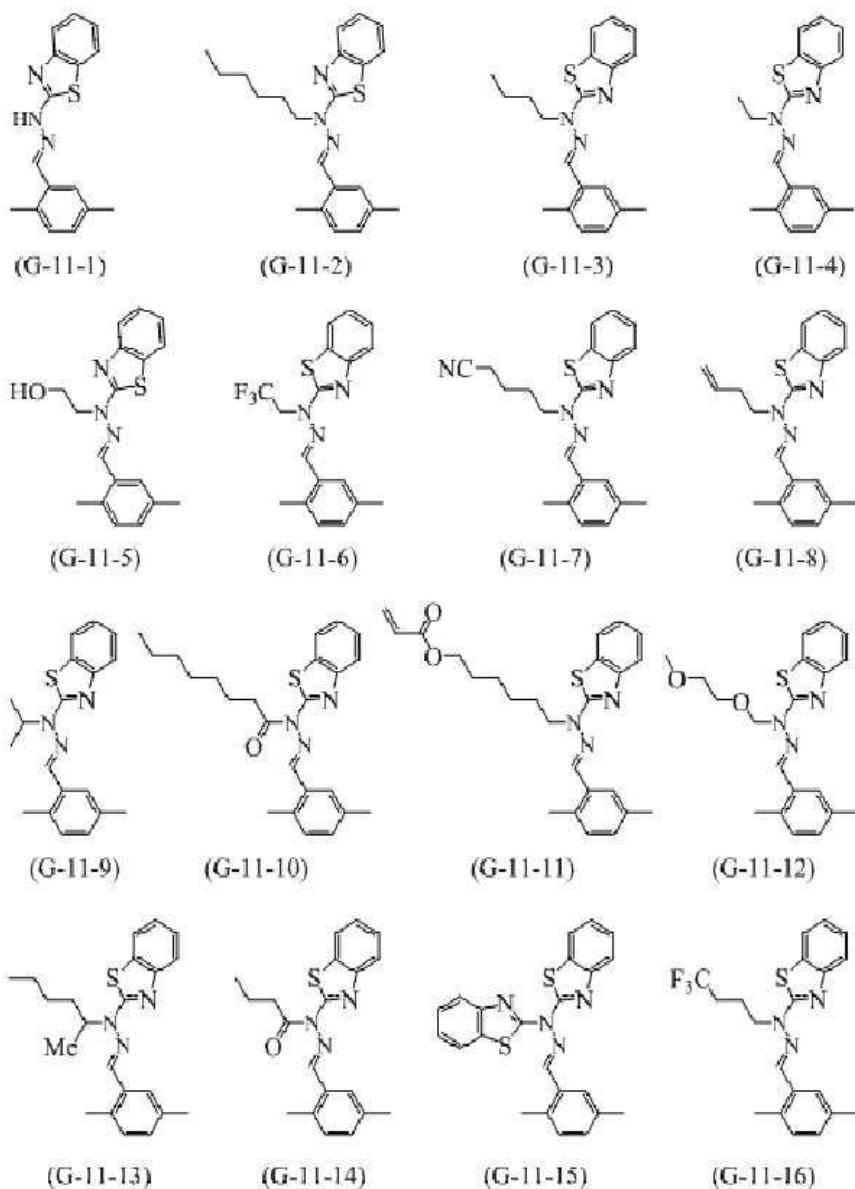


(식 중, L^G , L^W , Y , W^2 는 상기와 동일한 의미를 나타내고, r 은 정수 0~5를 나타내고, s 는 정수 0~4를 나타내고, t 는 정수 0~3을 나타내고, u 는 정수 0~2를 나타내고, v 는 0 또는 1를 나타낸다. 또한, 이들 기는, 좌우가 역으로 되도록 구성되어도 됨). 식 (G-1)~(G-10) 중, 식 (G-1), (G-3), (G-5), (G-6), (G-7), (G-8), 및 (G-10)으로부터 선택되는 기가 더 바람직하고, u 는, 더 바람직하게는, 0이고, 하기 식 (G-1-1)~(G-10-1)로부터 선택되는 기가 특히 바람직하다.

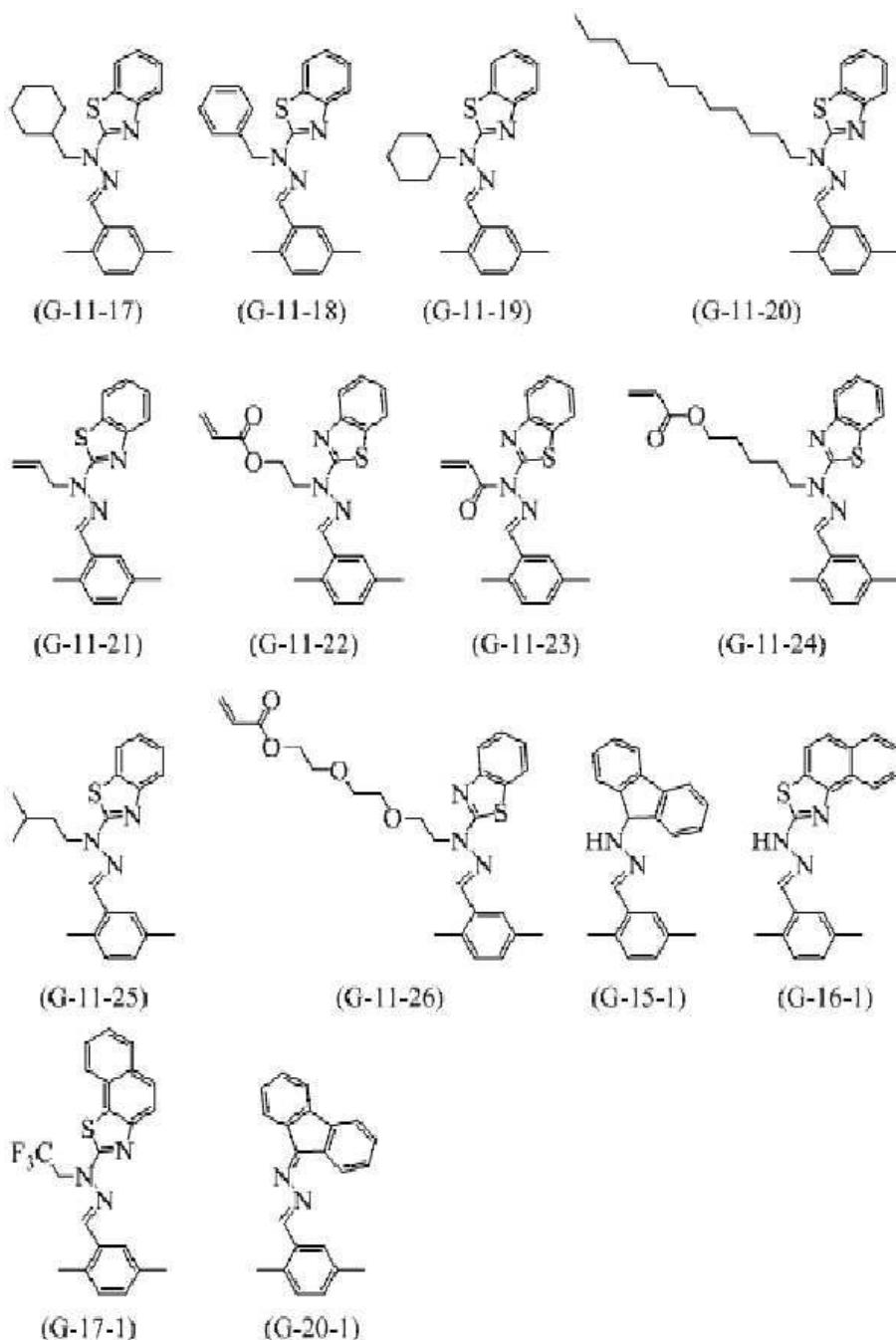


[0219]

[0220] (식 중, 이들 기는, 좌우가 역으로 되도록 구성되어도 됨). 또한, 식 (G-11)~(G-22) 중, Y는, 더 바람직하게는, 수소 원자를 나타내고, s, t, u, 및 v 각각은, 보다 더 바람직하게는, 0^o이고, 하기 식 (G-11-1)~(G-20-1)로부터 선택되는 기가 특히 바람직하다.



[0221]



[0222]

[0223] 식 (I)로 표시되는 화합물 중, 역분산성 및 액정성의 관점에서, 하기 식 (IA)로 표시되는 화합물이 바람직하다

[0224]

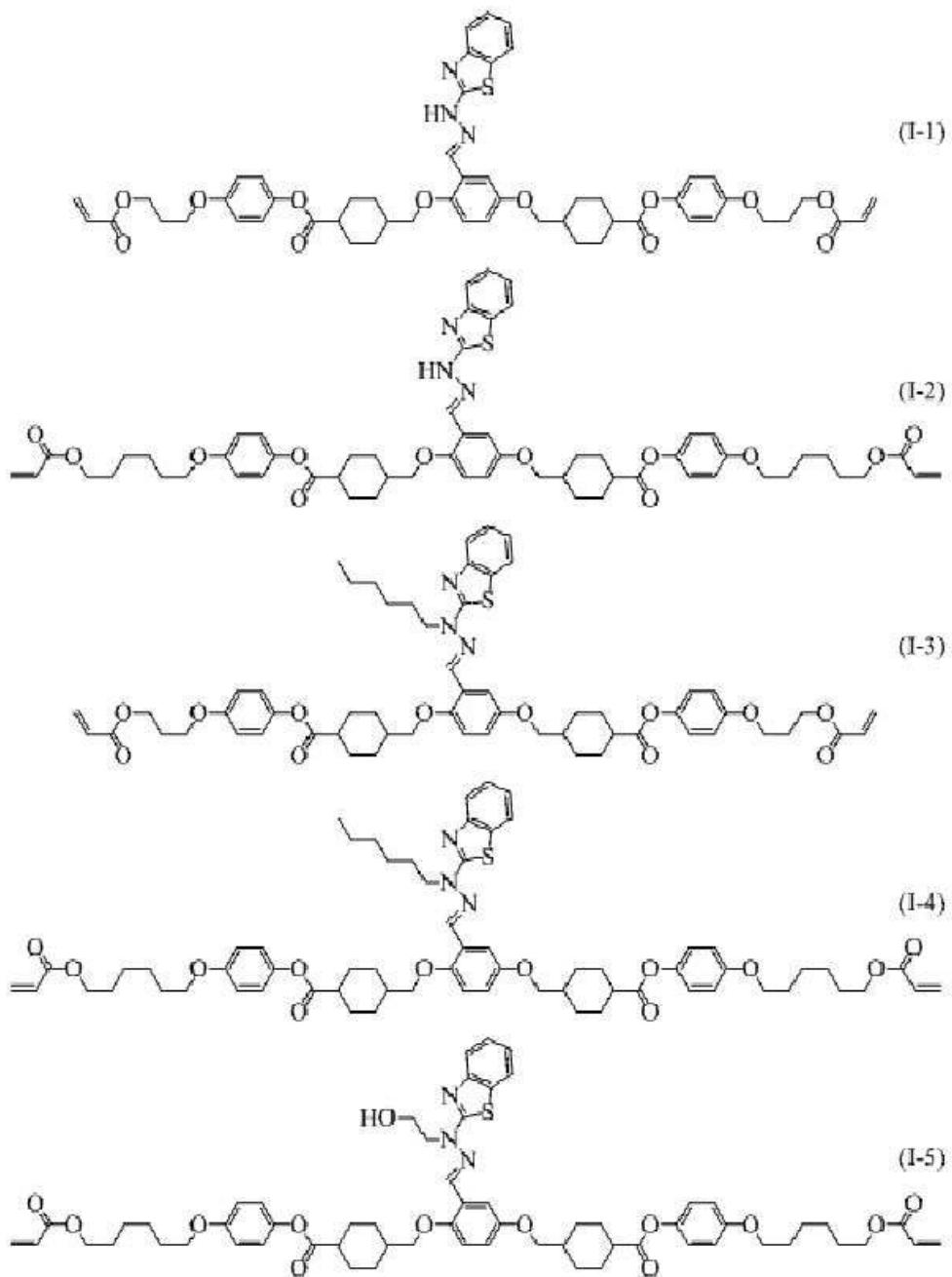
$R^1 - A^{11} - Z^{11} - A^{12} - Z^{12} - G^1 - Z^{21} - A^{21} - Z^{22} - A^{22} - R^2$ (IA)

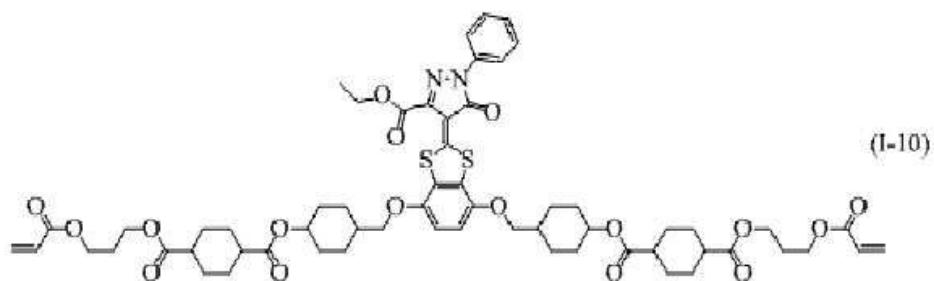
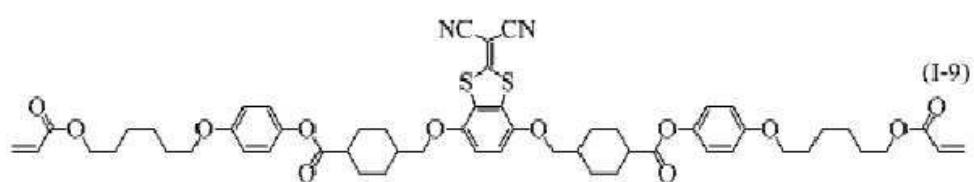
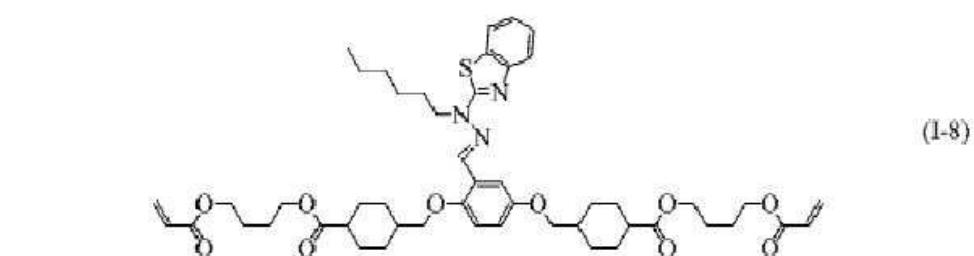
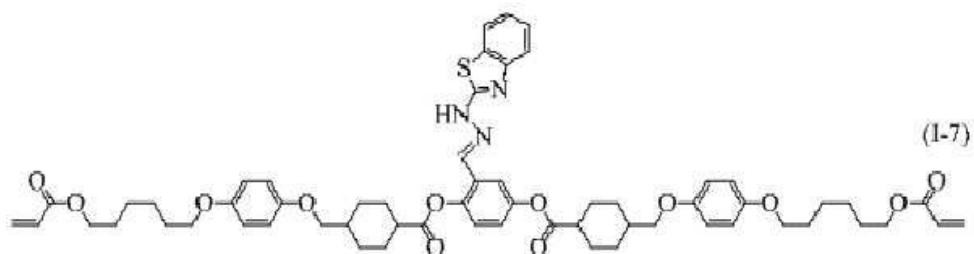
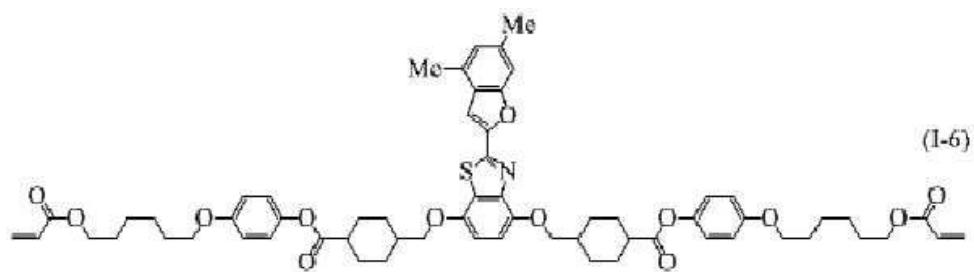
[0225]

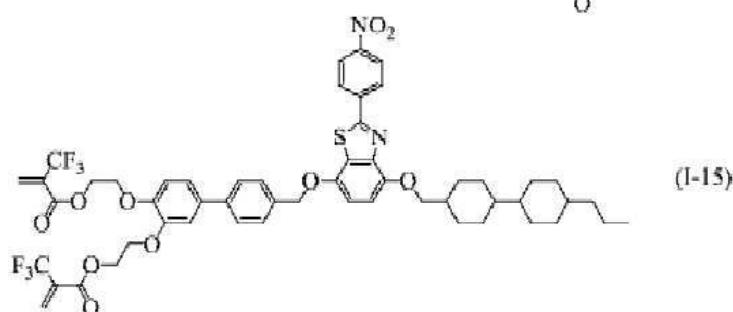
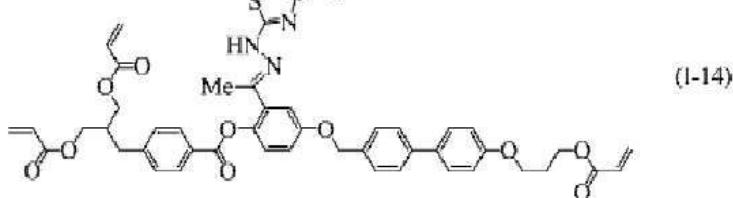
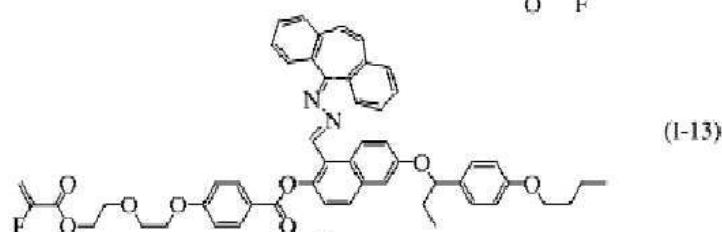
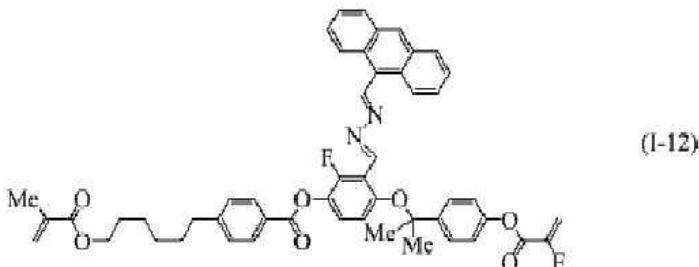
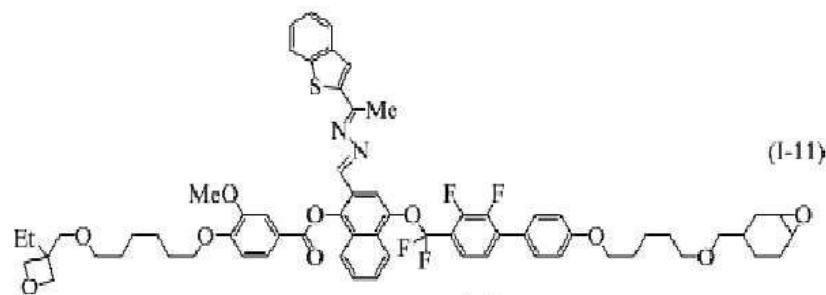
(식 중, R^1 , R^2 , 및 G^1 은 식 (I)의 것과 동일한 의미를 나타내고, A^{11} 및 A^{22} 는 식 (I)의 A^1 및 A^2 와 동일한 의미를 나타내고, Z^{11} 및 Z^{22} 는 식 (I)의 Z^1 및 Z^2 와 동일한 의미를 나타내고, A^{12} 및 A^{21} 는, 각각 독립적으로, 1,4-시클로헥실렌기(이는 비치환이어도 되고 또는 1개 이상의 치환기 L로 치환되어도 됨)를 나타내고, Z^{12} 및 Z^{21} 은, 각각 독립적으로, 식 (Z0-1) 또는 (Z0-2)로 표시되는 기를 나타냄). 각각 기의 바람직한 형태는, 식 (I)의 것과 동일하다.

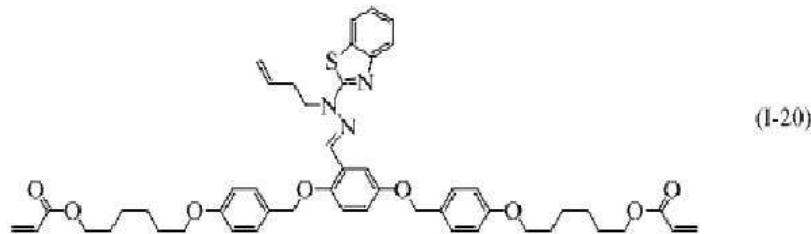
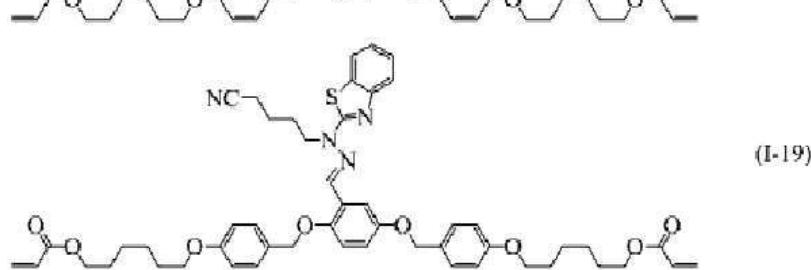
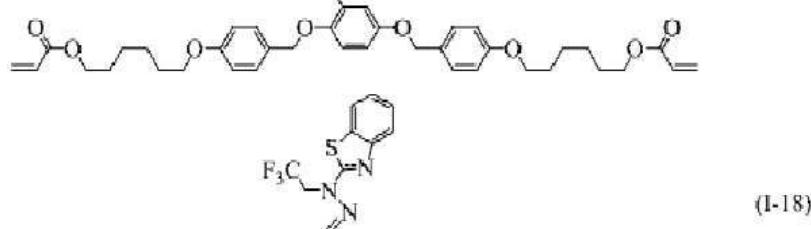
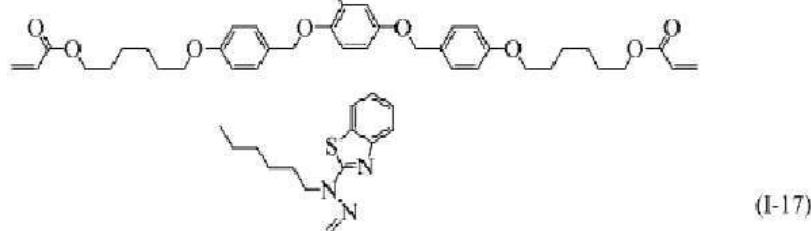
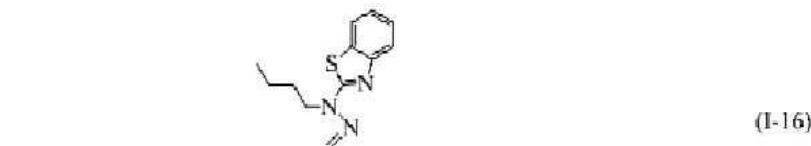
[0226]

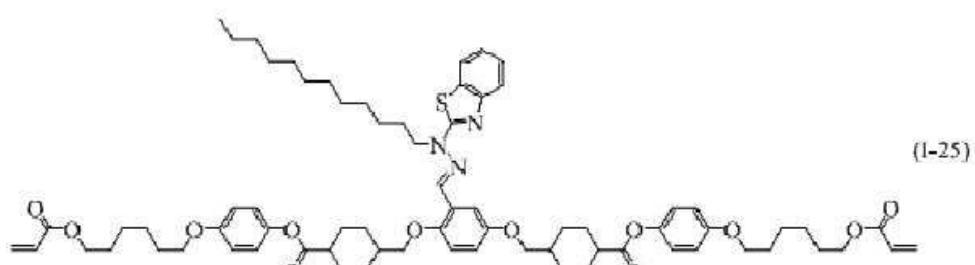
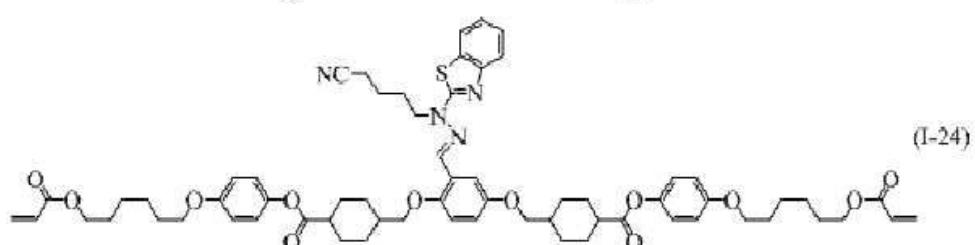
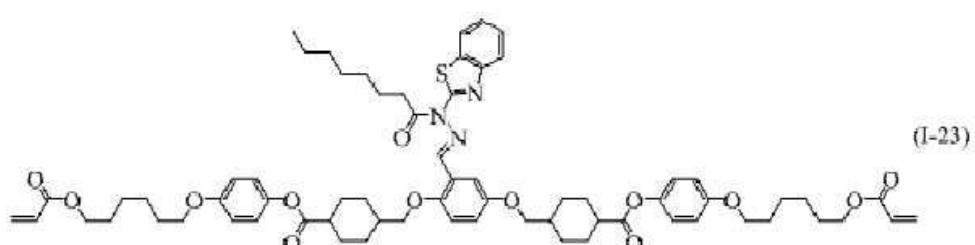
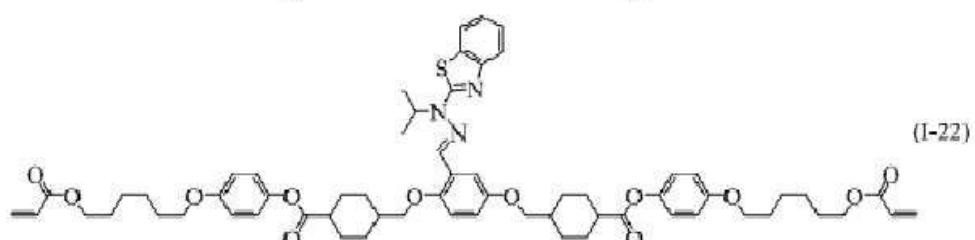
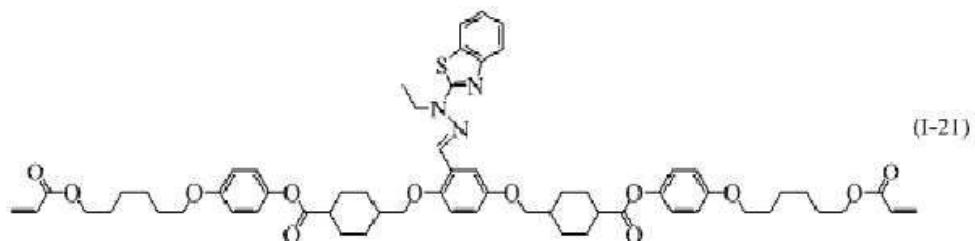
바람직하게는, 식 (I)로 표시되는 화합물의 구체예로서는, 하기 식 (I-1)~(I-125)로 표시되는 화합물을 포함한다.



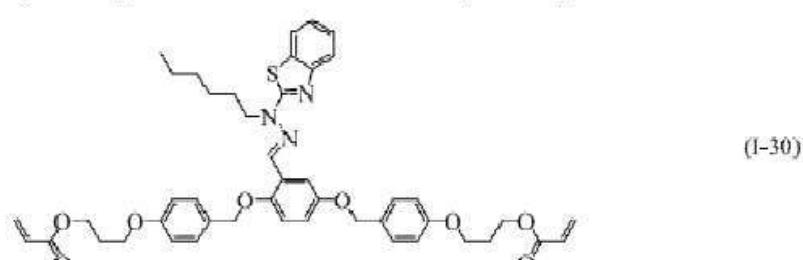
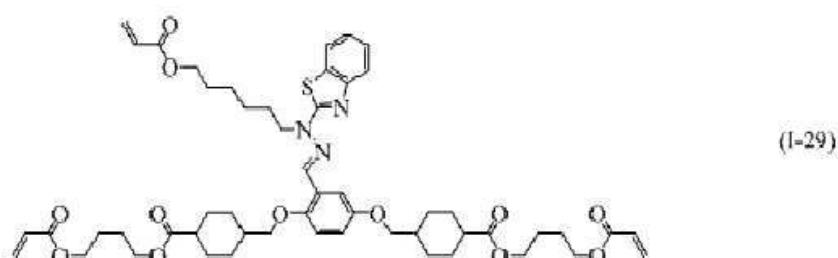
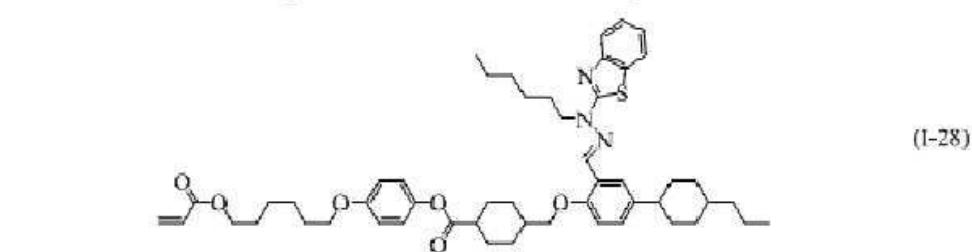
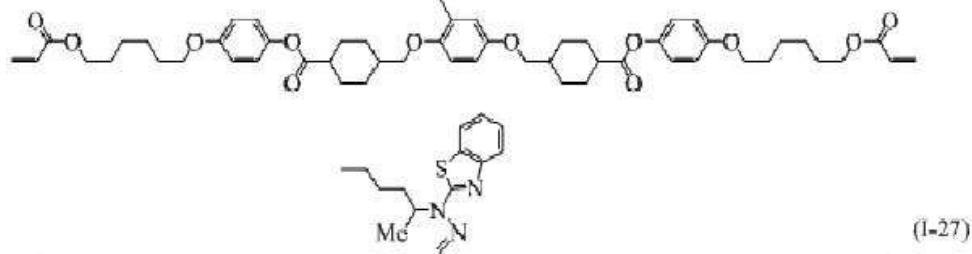
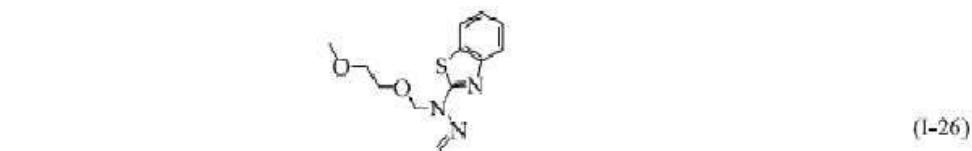


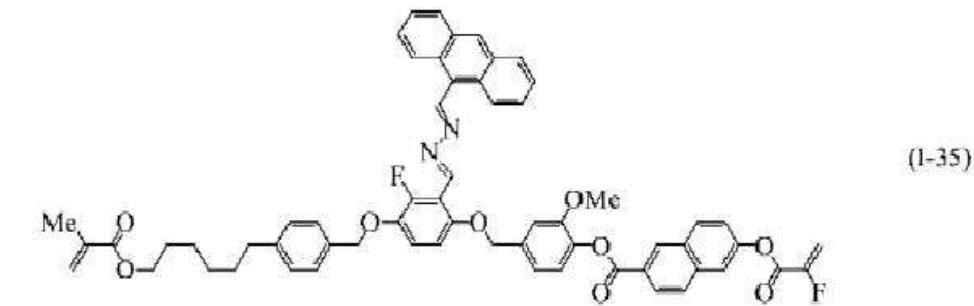
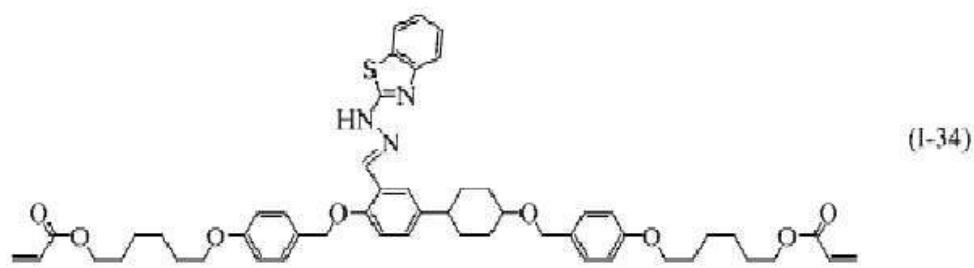
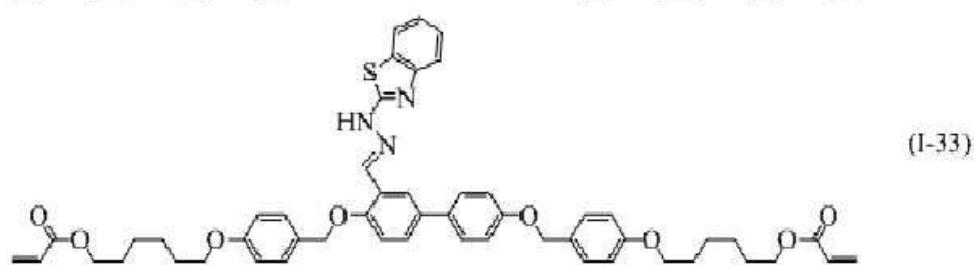
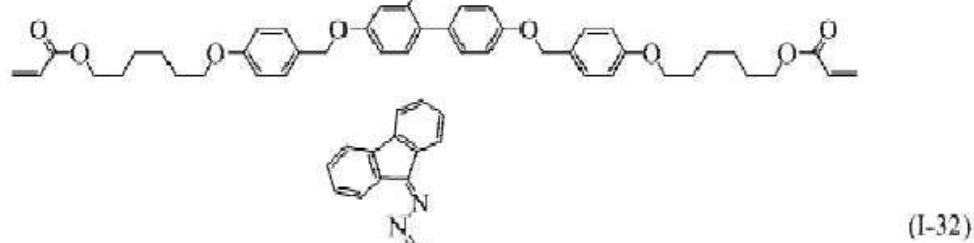


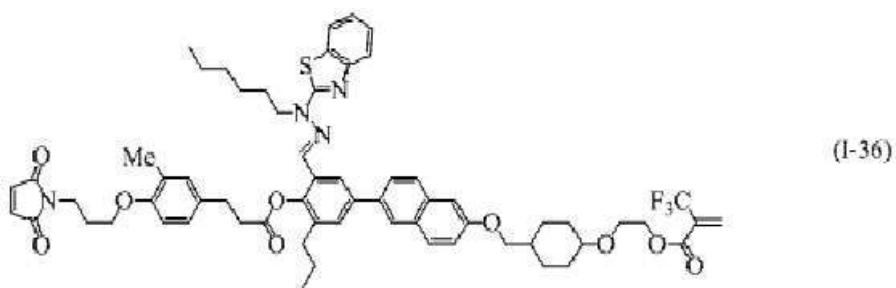




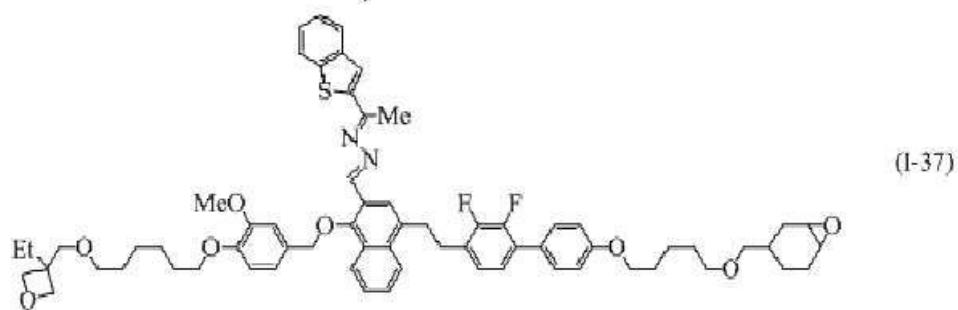
[0231]



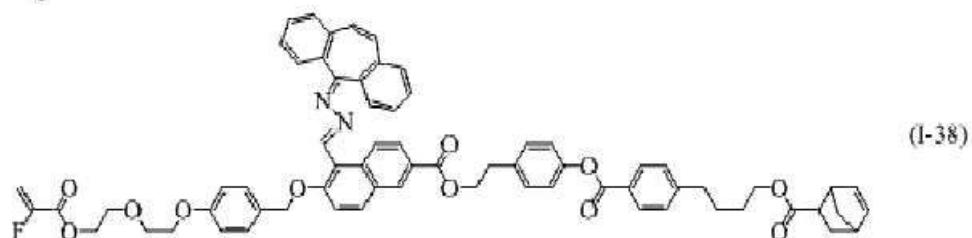




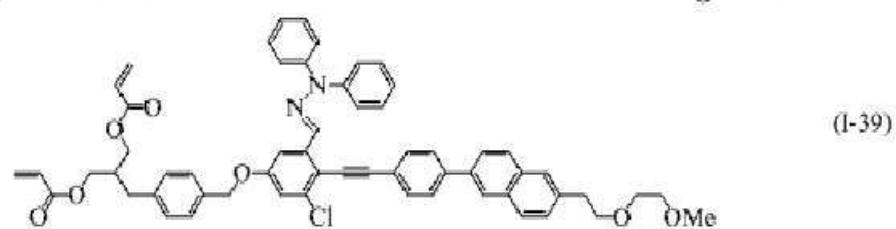
(1-36)



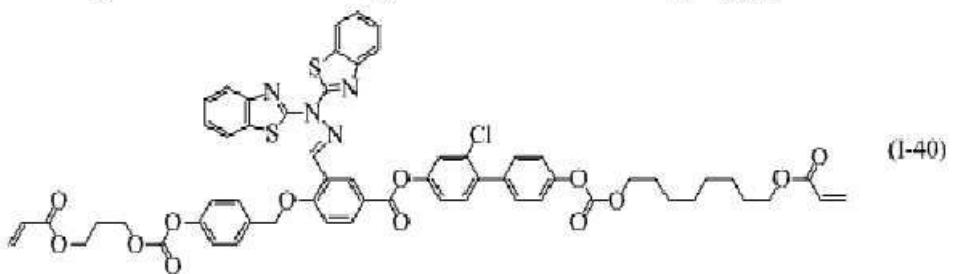
(1-37)



(1-38)

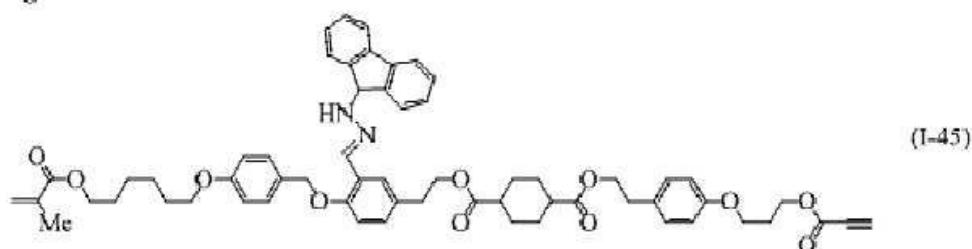
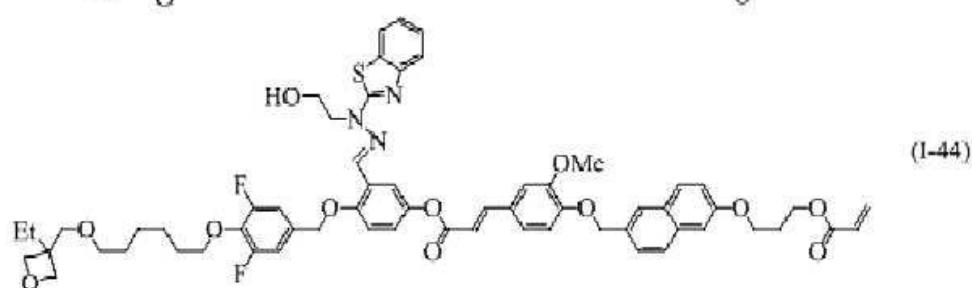
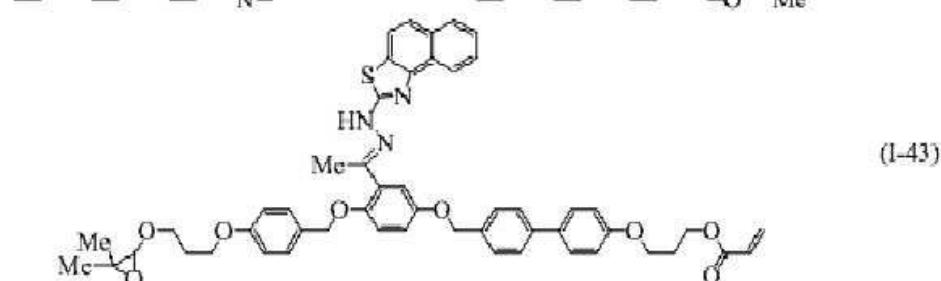
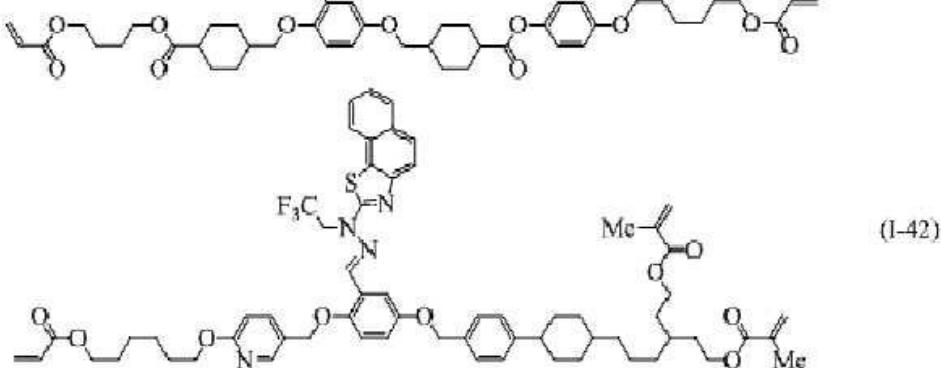
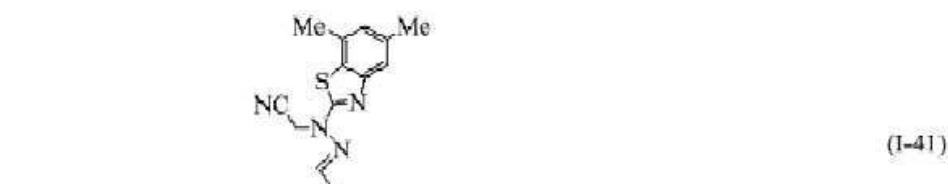


(1-39)

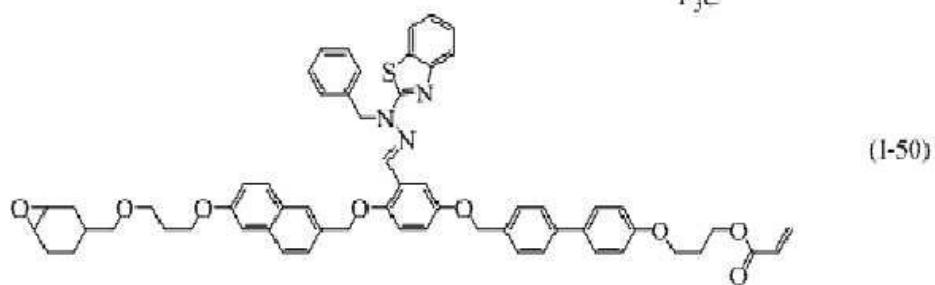
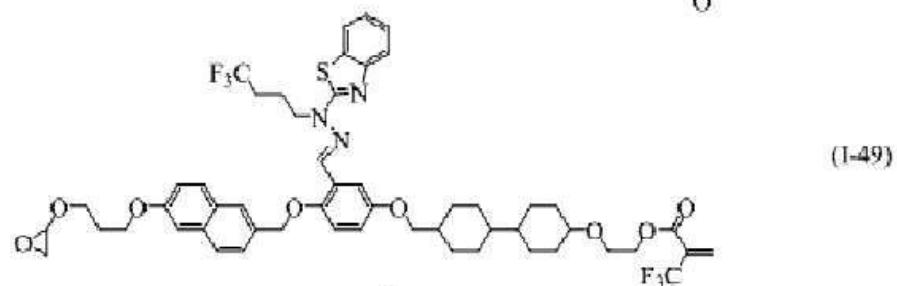
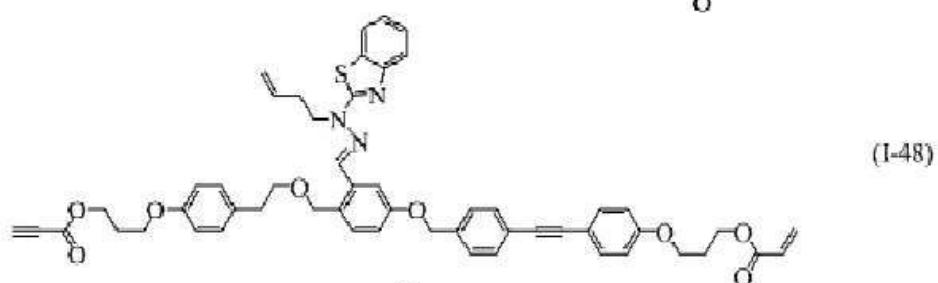
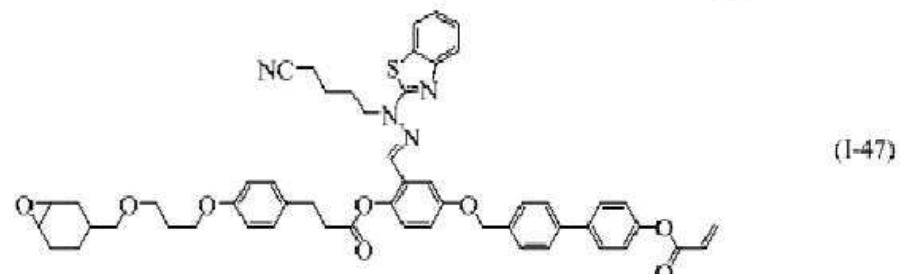
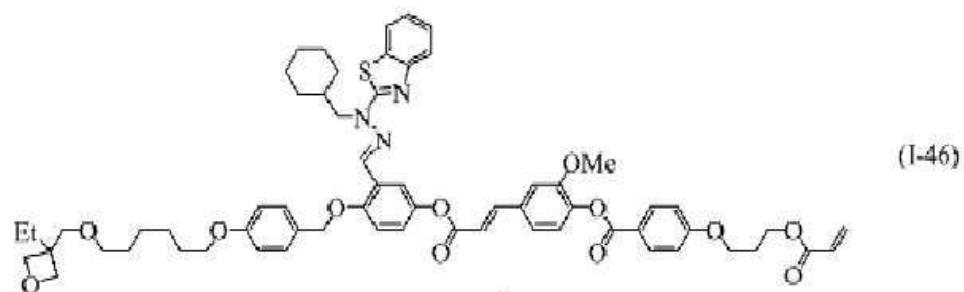


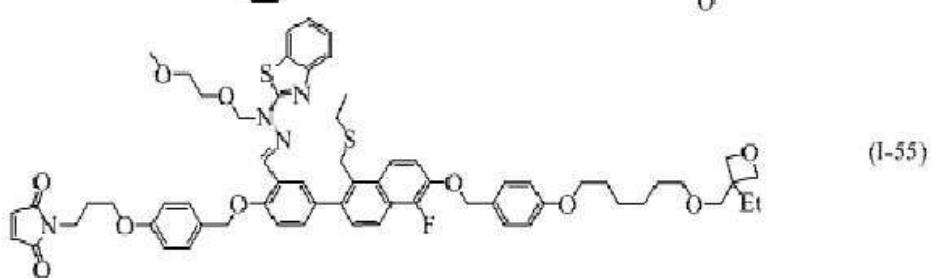
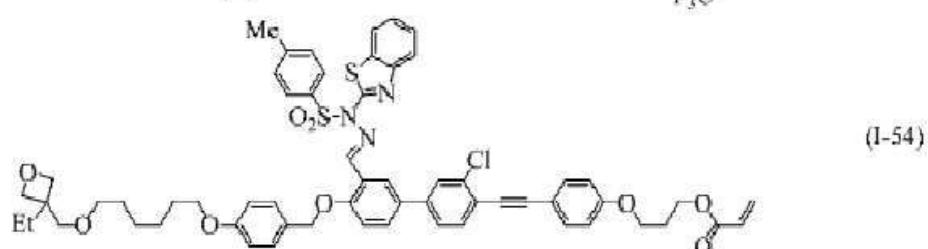
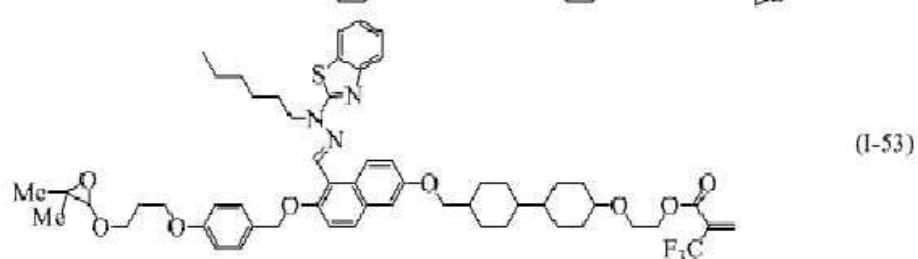
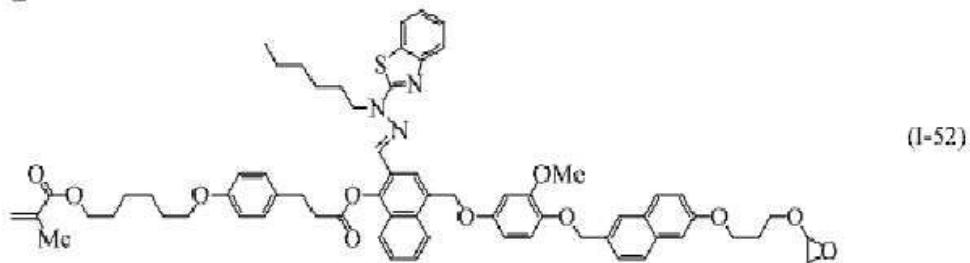
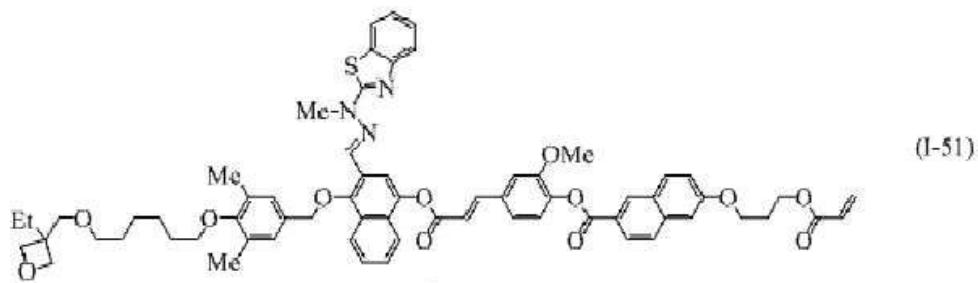
(I-40)

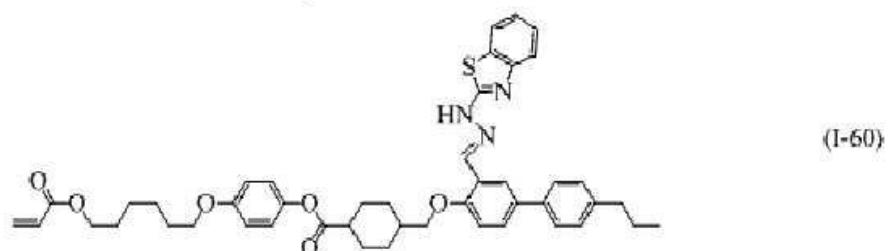
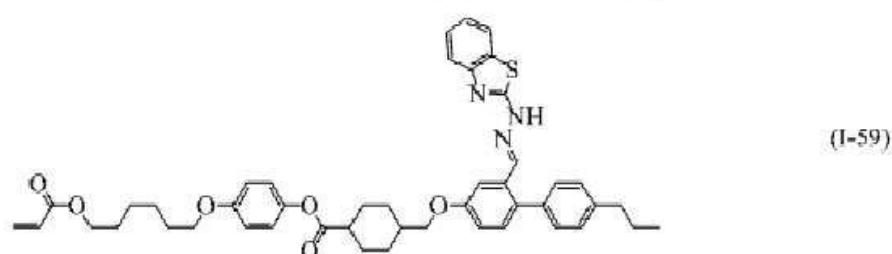
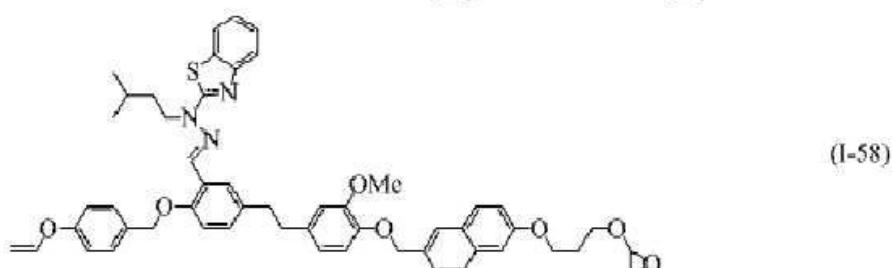
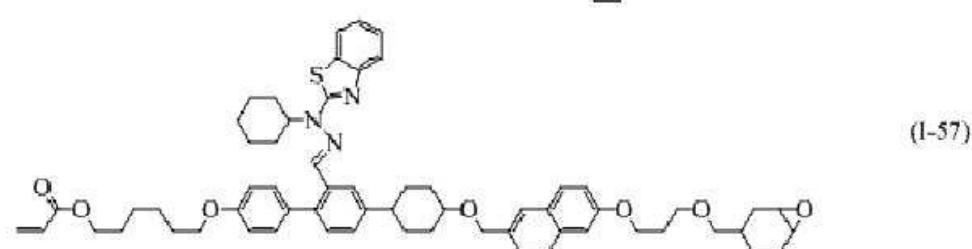
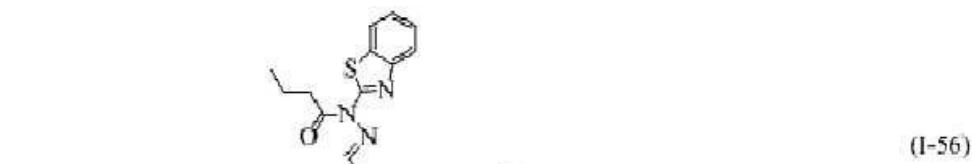
[0234]

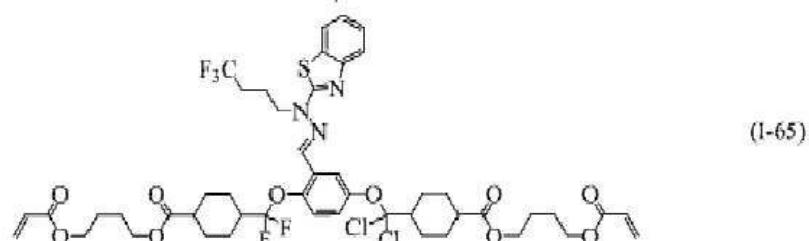
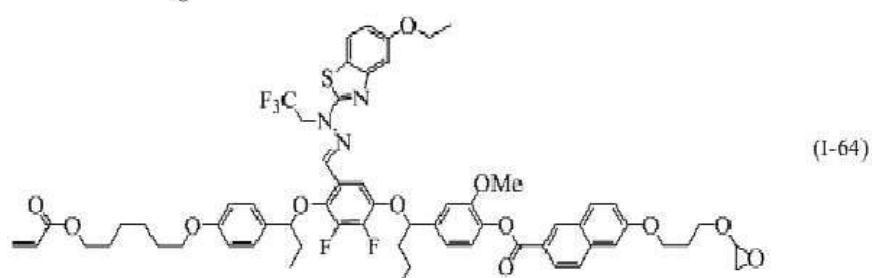
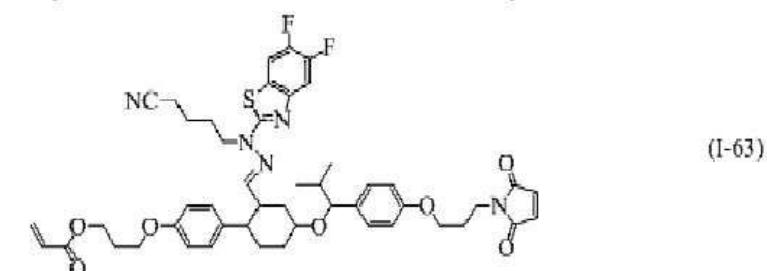
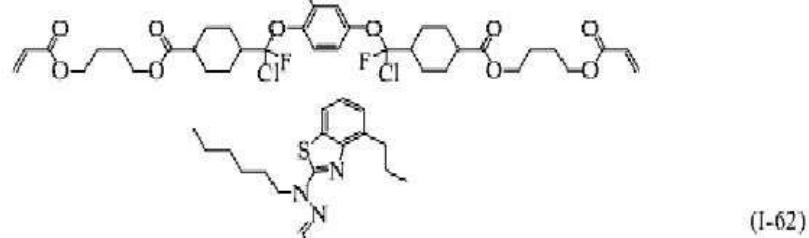
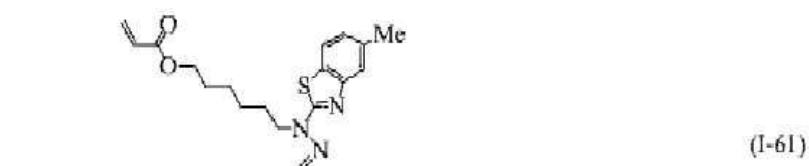


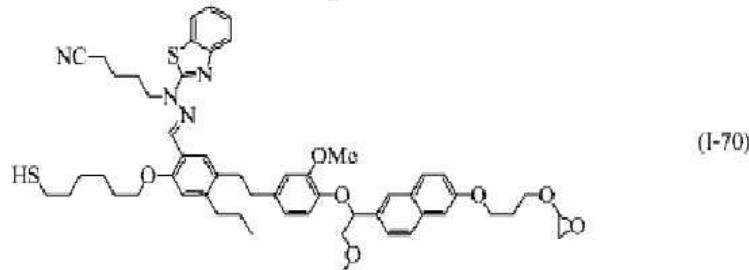
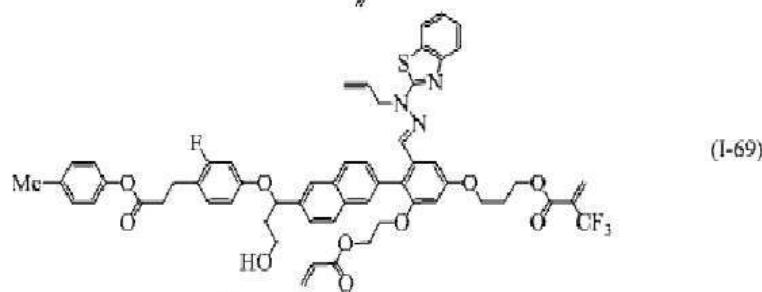
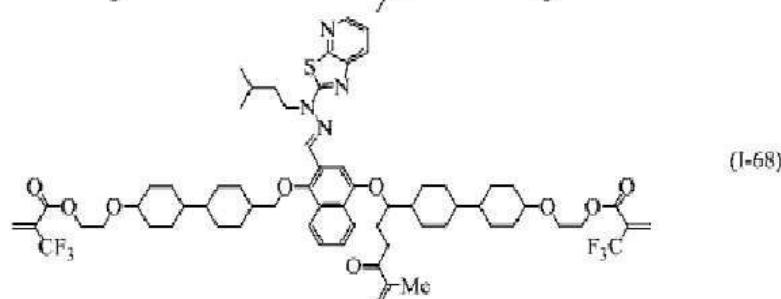
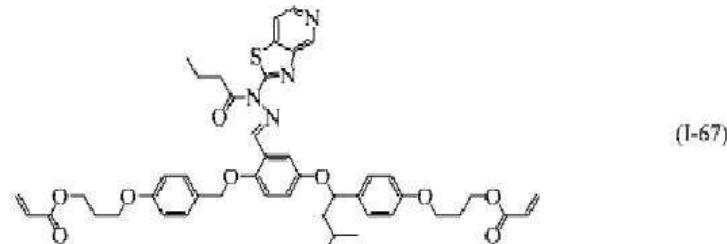
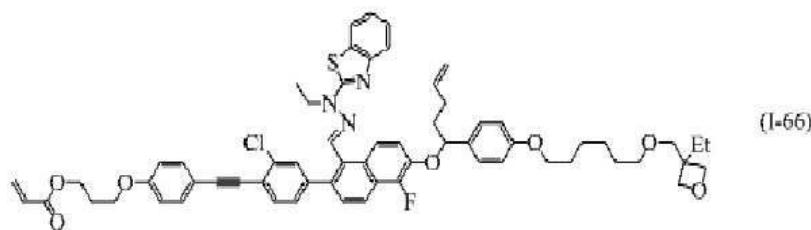
[0235]

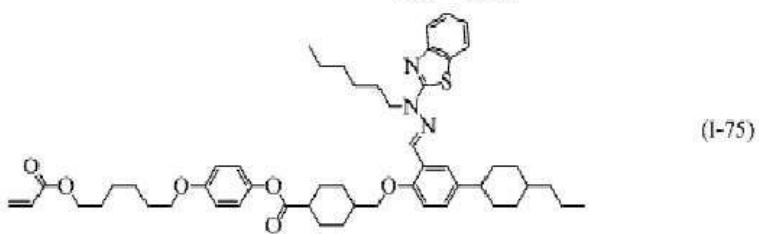
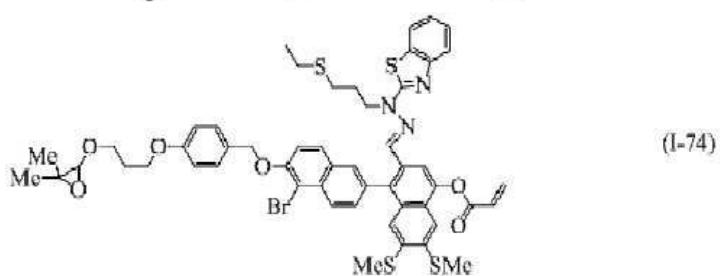
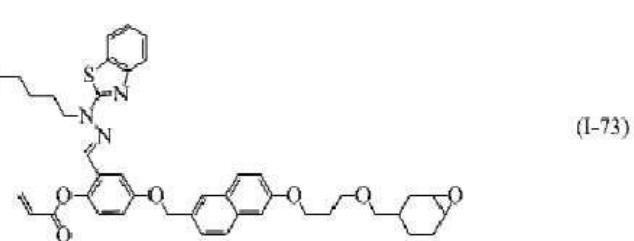
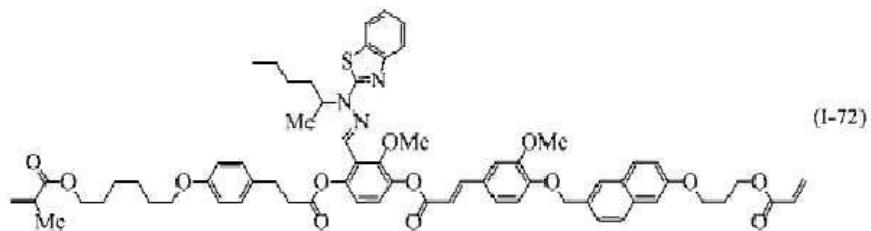
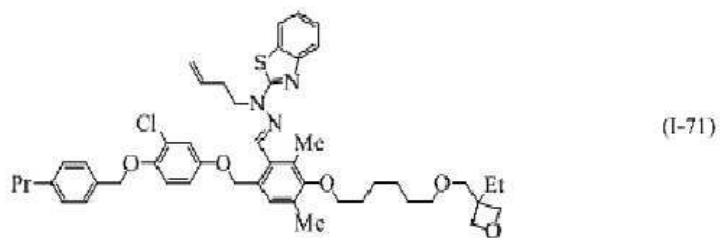


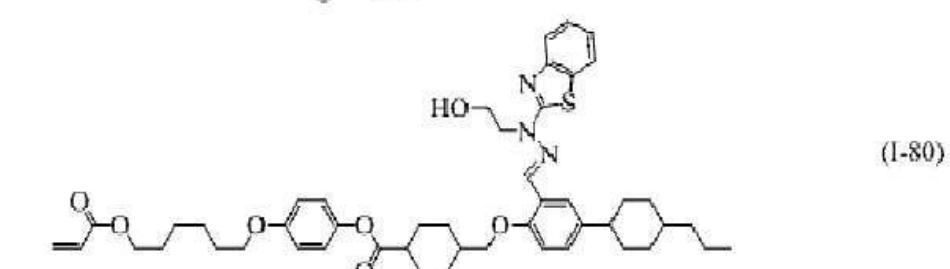
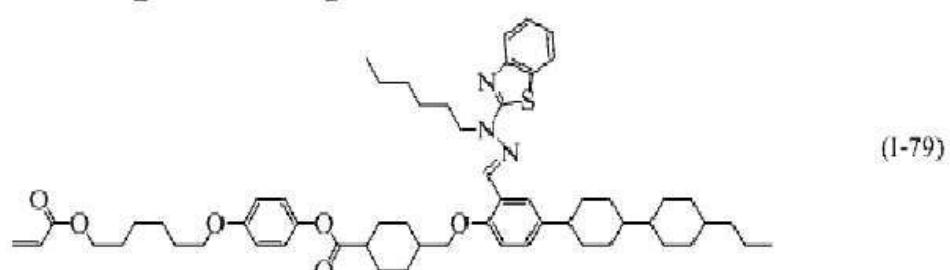
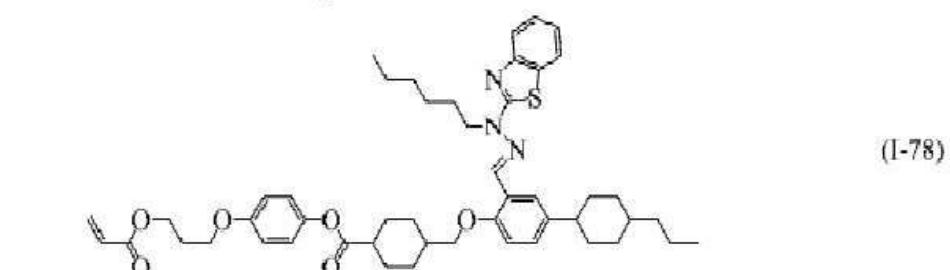
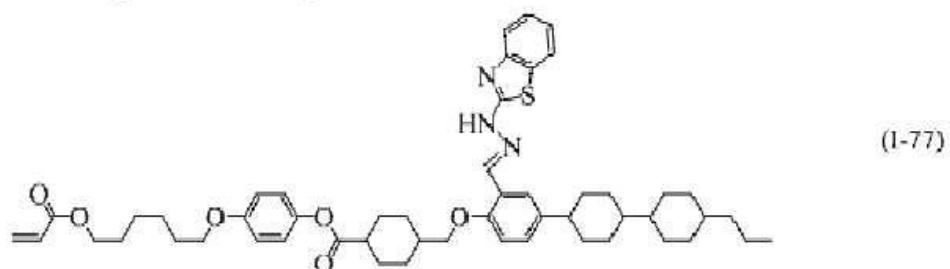
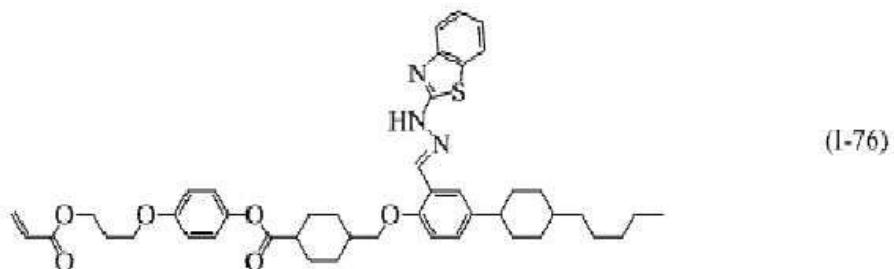


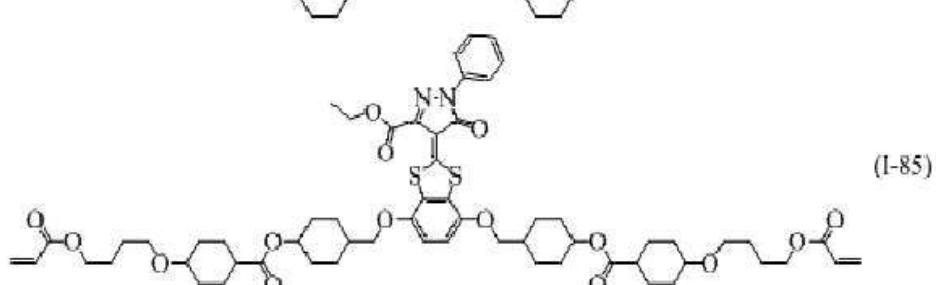
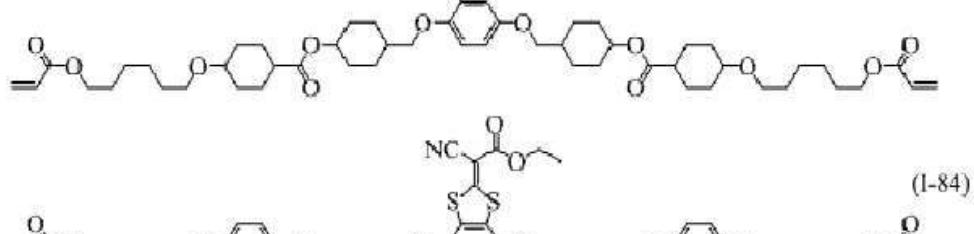
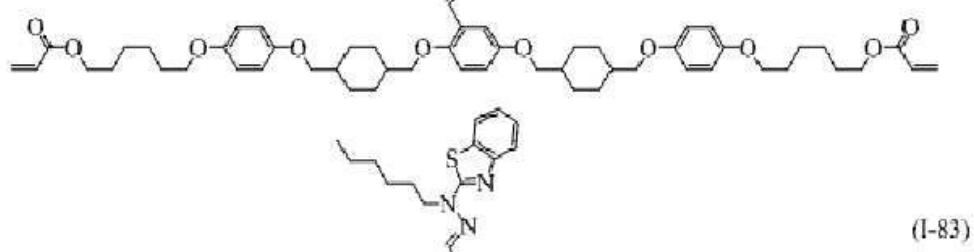
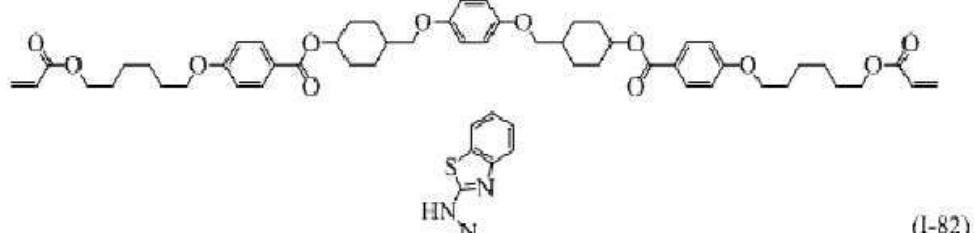


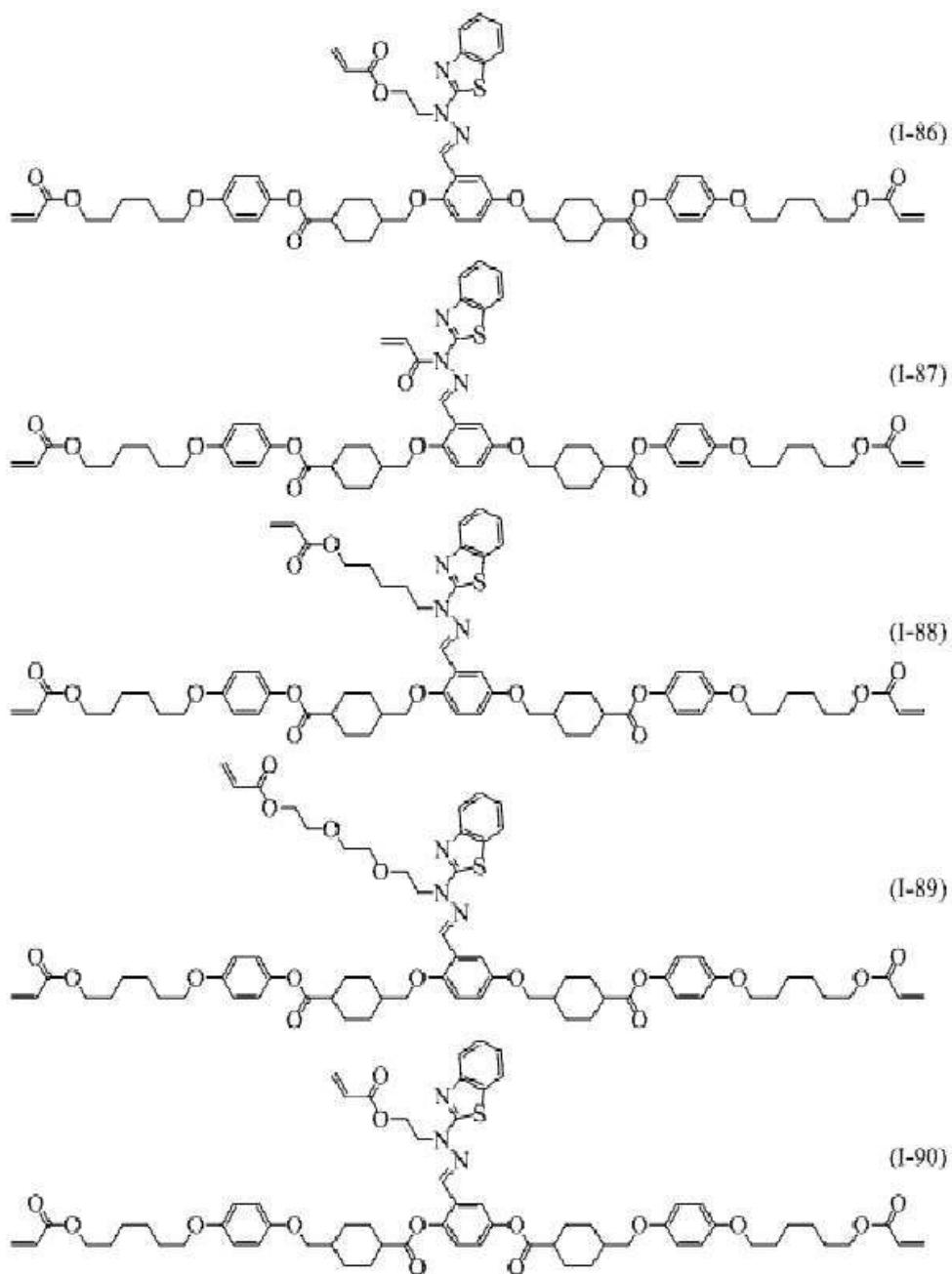


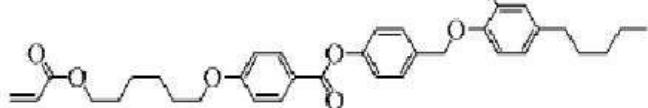
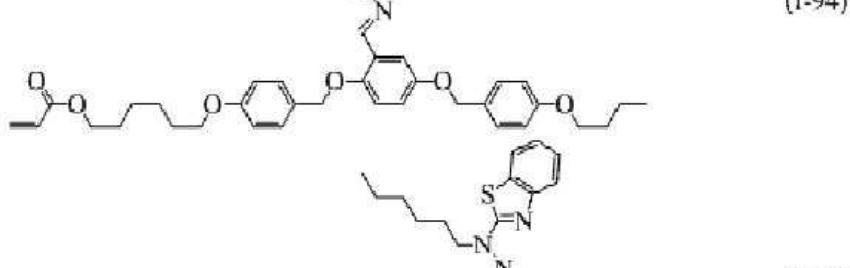
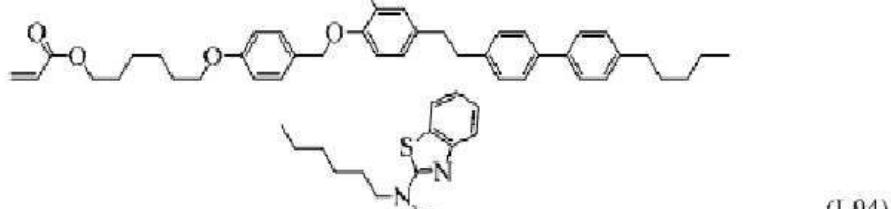
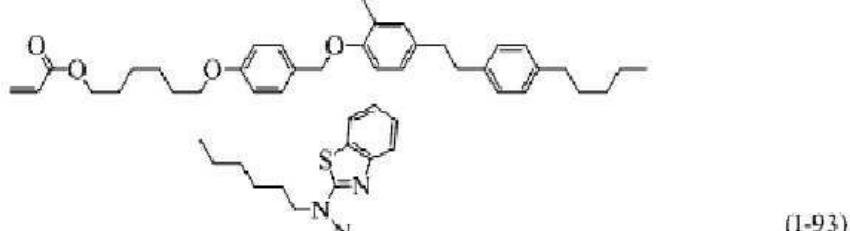
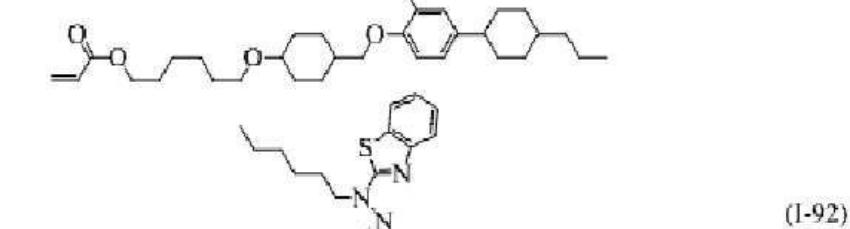
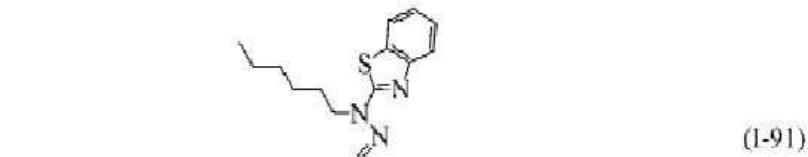


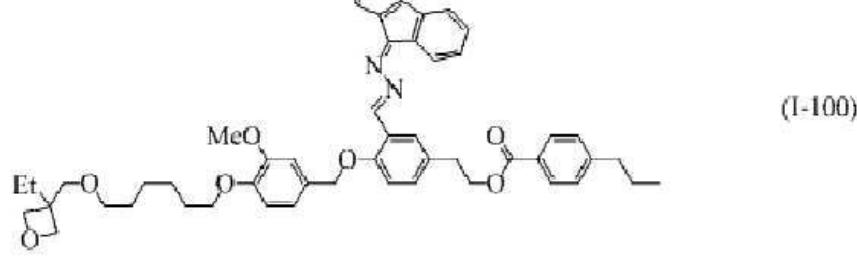
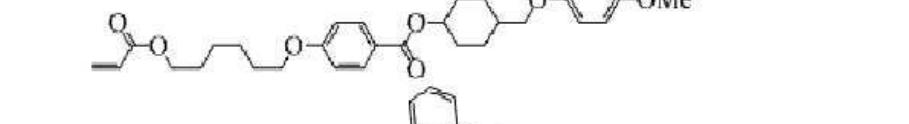
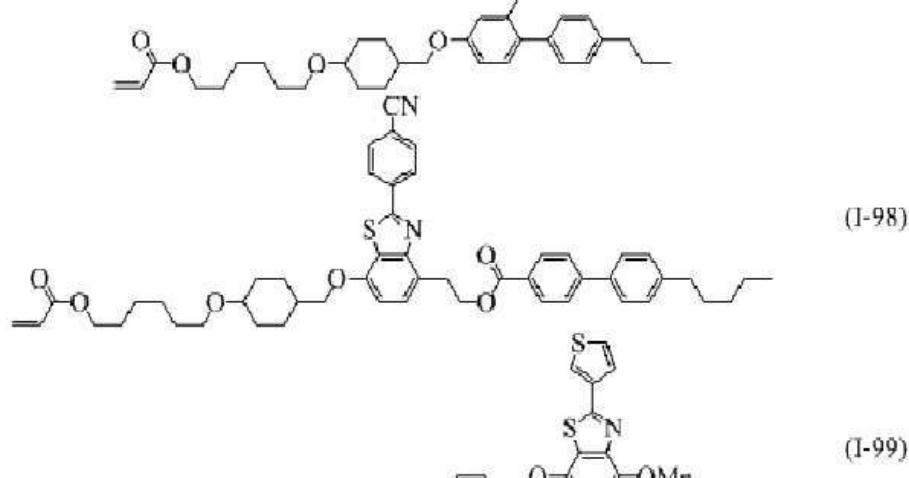
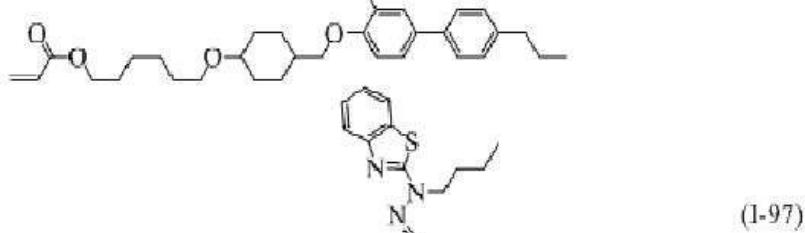


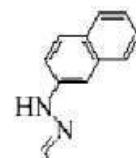




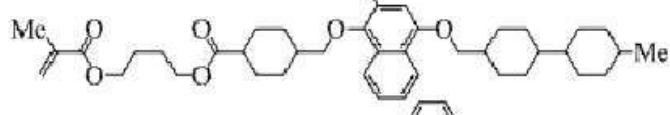




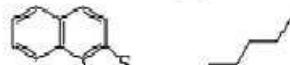
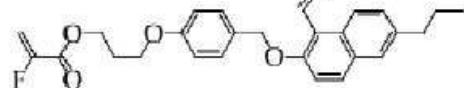




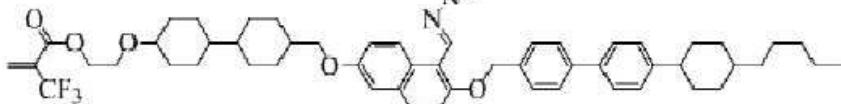
(I-101)



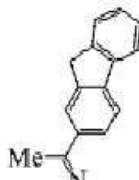
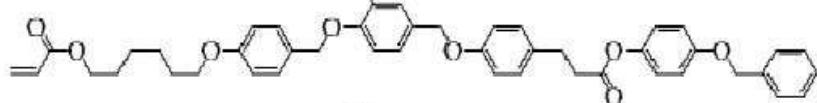
(I-102)



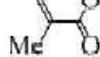
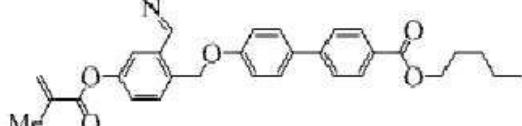
(I-103)

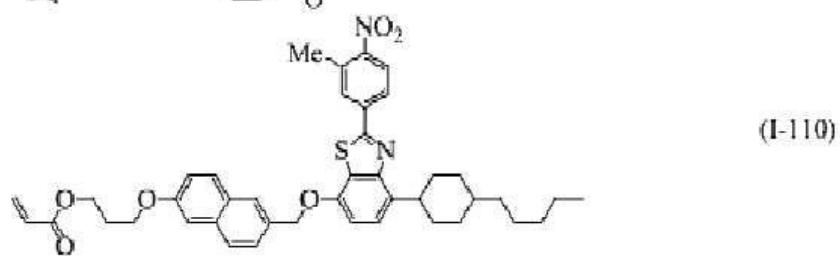
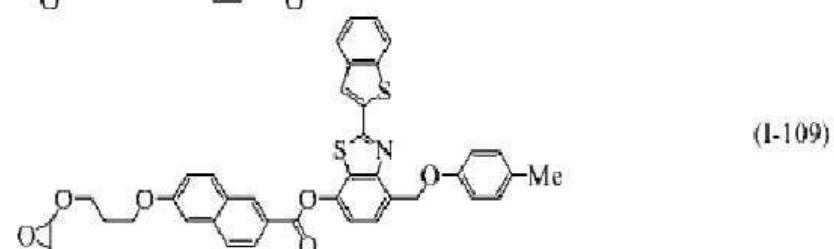
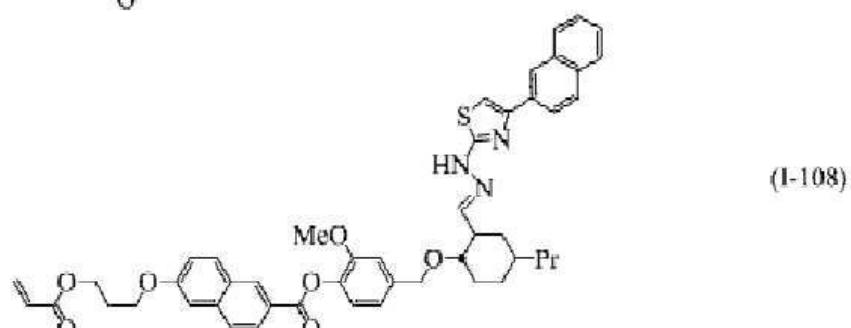
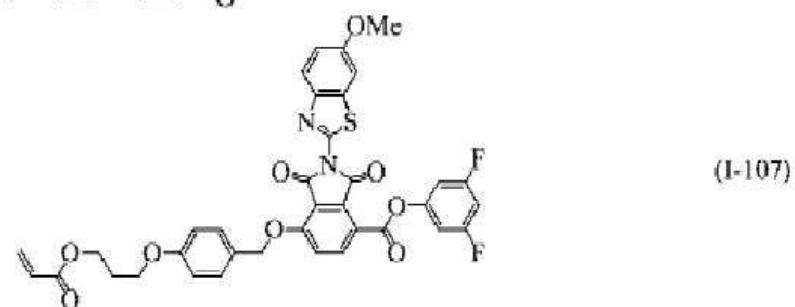
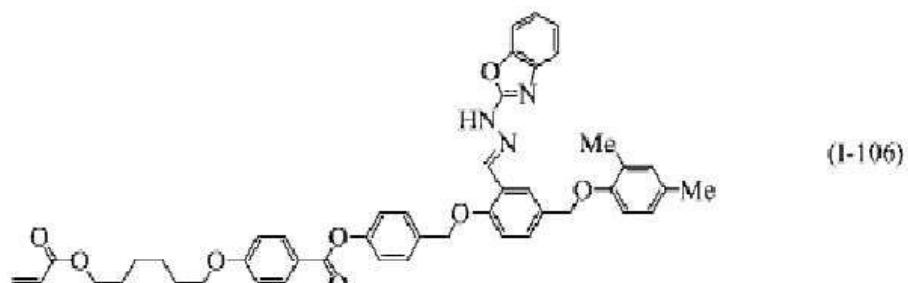


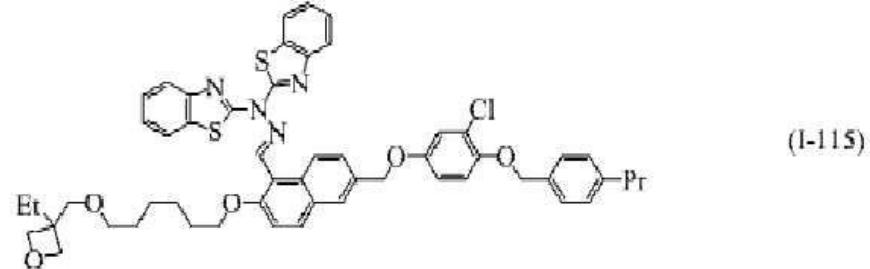
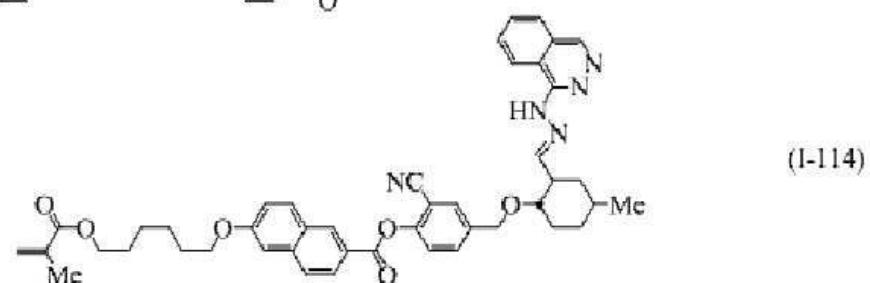
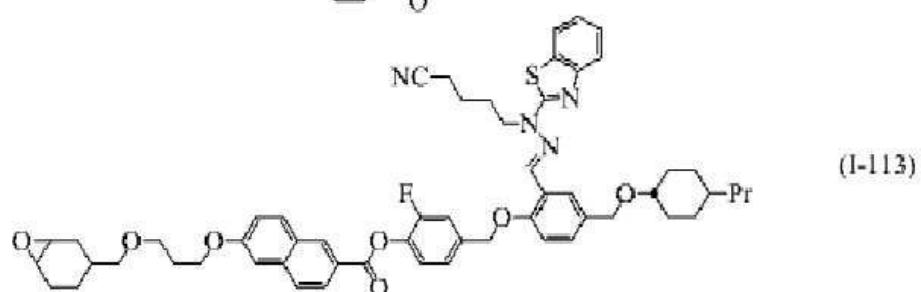
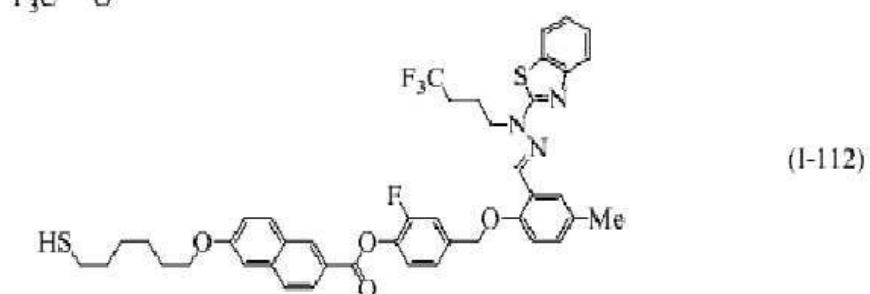
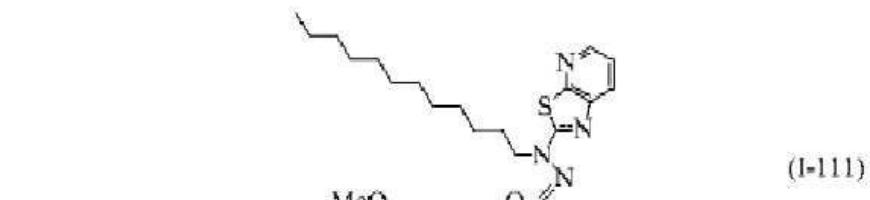
(I-104)



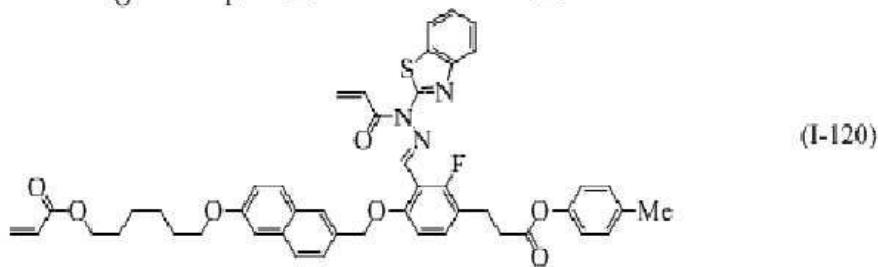
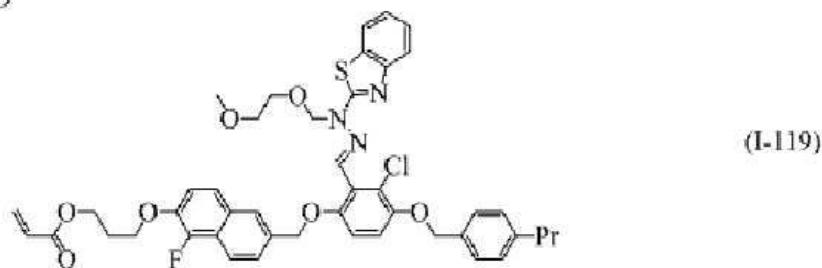
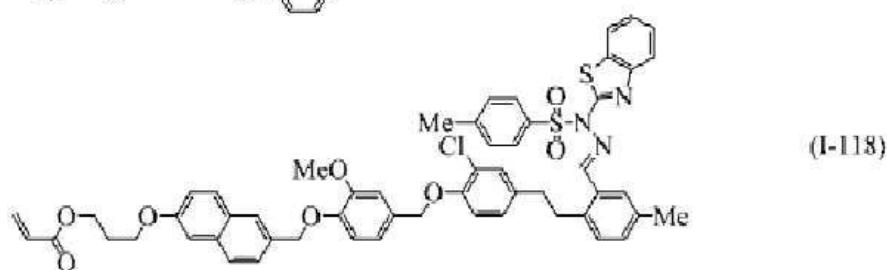
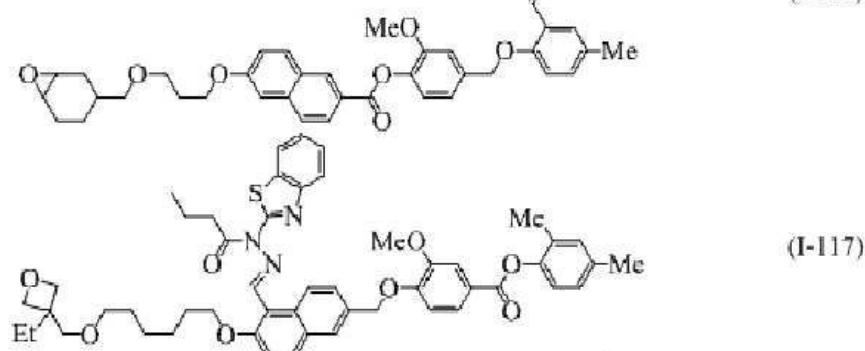
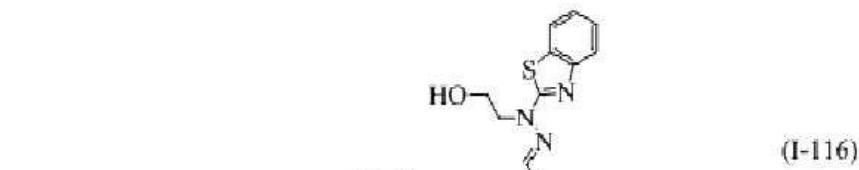
(I-105)



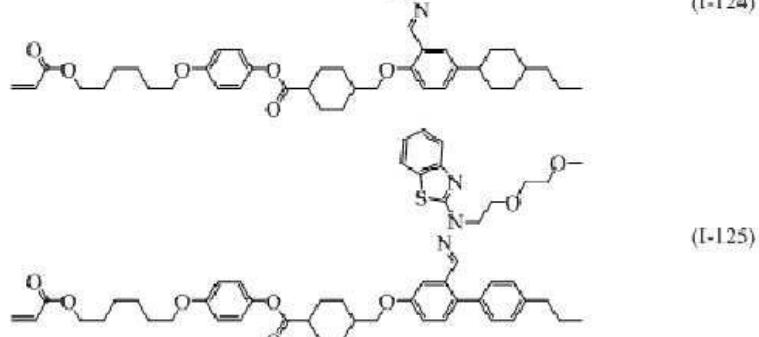
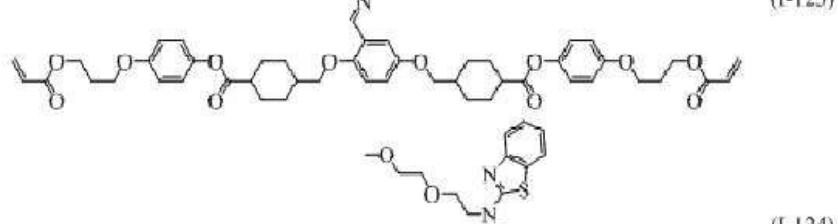
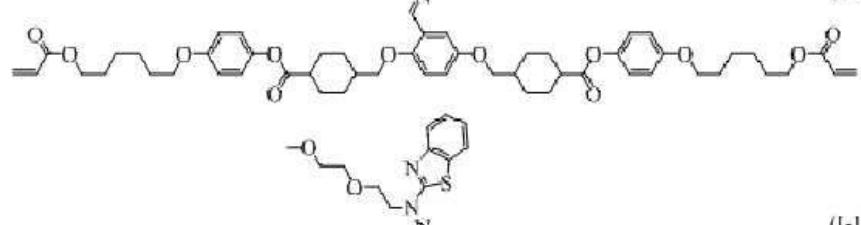
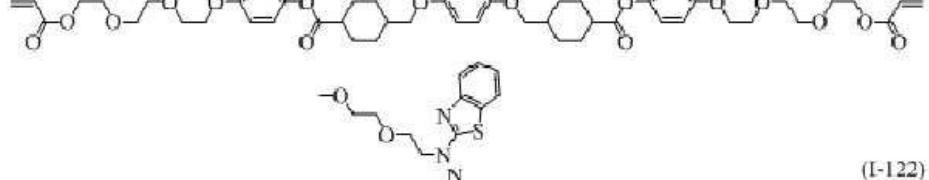
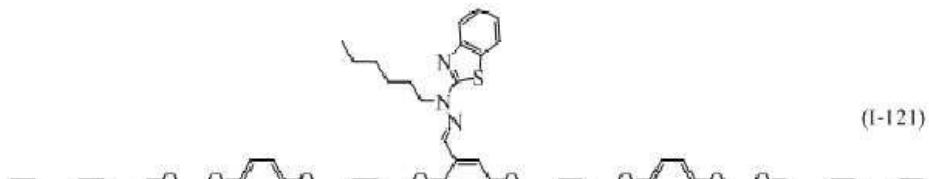




[0249]



[0250]

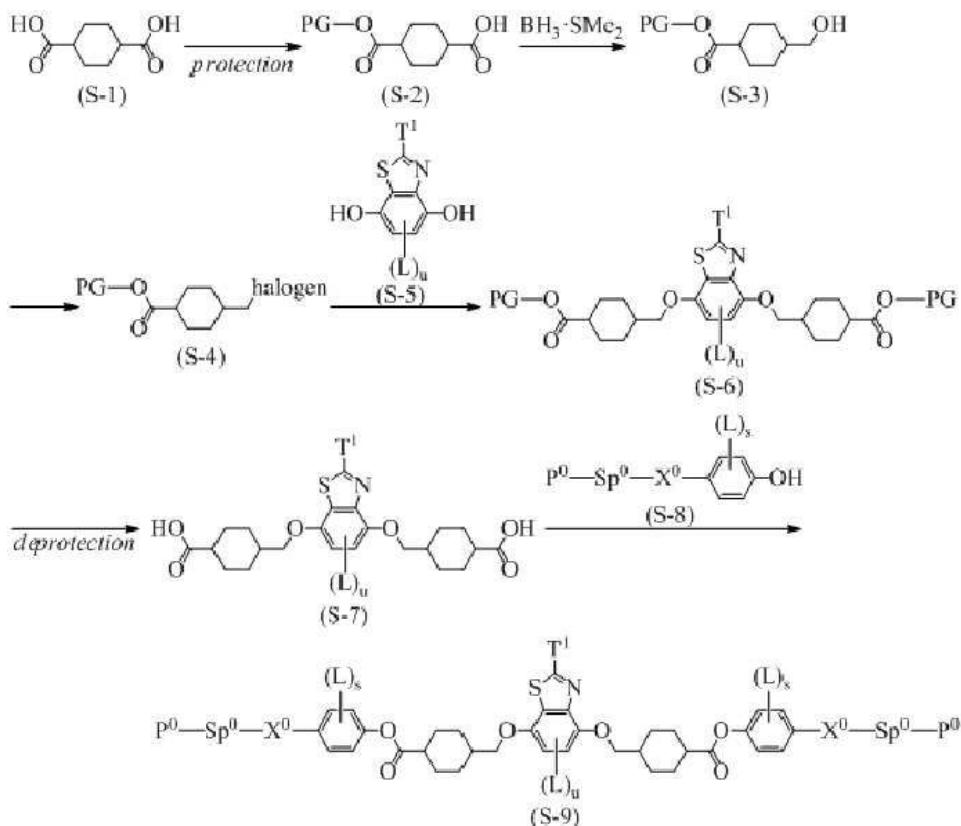


[0251]

본 발명의 화합물은, 이하의 제조 공정에 의해 제조할 수 있다.

[0252]

(제조 공정 1) 하기 식 (S-9)로 표시되는 화합물의 제조



[0254]

[0255] (식 중, P^0 , Sp^0 , X^0 , L, 및 T^1 은, 각각 독립적으로, 식 (Z-0), 식 (I-0-R), 및 식 (I)에서 정의된 것과 동일한 것을 나타냄, s는, 각각 독립적으로, 정수 0~4를 나타내고, u는 정수 0~2를 나타내고, PG는 보호기를 나타내고, 할로겐은 할로겐 원자 또는 할로겐 당량을 나타냄).

[0256]

식 (S-1)로 표시되는 화합물의 카르복실기는 보호기(PG)로 보호된다. 보호기(PG)는, 탈보호(deprotection) 스텝까지 안정된 보호을 제공할 수 있는 것이면 특별히 한정되지 않지만, 예를 들면, GREENE'S PROTECTIVE GROUPS IN ORGANIC SYNTHESIS((제4판), PETER G. M. WUTS, THEODORA W. GREENE 공저, John Wiley & Sons, Inc., 출판)에 기재된 보호기(PG)가 바람직하다. 보호기의 구체예로서는, 테트라하이드로파라닐기, tert-부틸기, 및 메톡시메틸기를 포함한다.

[0257]

식 (S-2)로 표시되는 화합물을 환원함으로써, 식 (S-3)으로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 환원제의 예는, 보란-테트라하이드로퓨란 착체 및 보란-디메틸설피드 착체 등의 보란 착체, 및 디보란을 포함한다.

[0258]

식 (S-3)으로 표시되는 화합물을 할로겐화함으로써, 식 (S-4)로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 할로겐화의 조건으로서는, 트리페닐포스핀 및 이미다졸의 존재 하에서 요오드와 반응시키는 방법, 트리페닐포스핀의 존재 하에서 사브롬화탄소 또는 N-브로모숙신이미드와 반응시키는 방법, 및 염기의 존재 하에서 염화리튬과 반응시키는 방법이 예시된다. 또한, 염기의 존재 하에서, 메탄설포닐클로라이드 또는 p-톨루엔설포닐클로라이드와 반응시켜 할로겐 당량으로 유도하는 방법이 예시된다.

[0259]

염기의 존재 하에서 식 (S-4)로 표시되는 화합물을 식 (S-5)로 표시되는 화합물과 반응시킴으로써, 식 (S-6)으로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 염기의 예는, 탄산칼륨, 탄산세슘, 및 트리에틸아민을 포함한다. 또한, 식 (S-3)으로 표시되는 화합물을 식 (S-5)로 표시되는 화합물과 Mitsunobu 반응을 통해 반응시킴으로써, 식 (S-6)으로 표시되는 화합물을 얻을 수도 있다. 이 때 사용되는 아조디카르복실산에스테르로서는, 아조디카르복실산디에틸, 아조디카르복실산디이소프로필 등이 예시된다.

[0260]

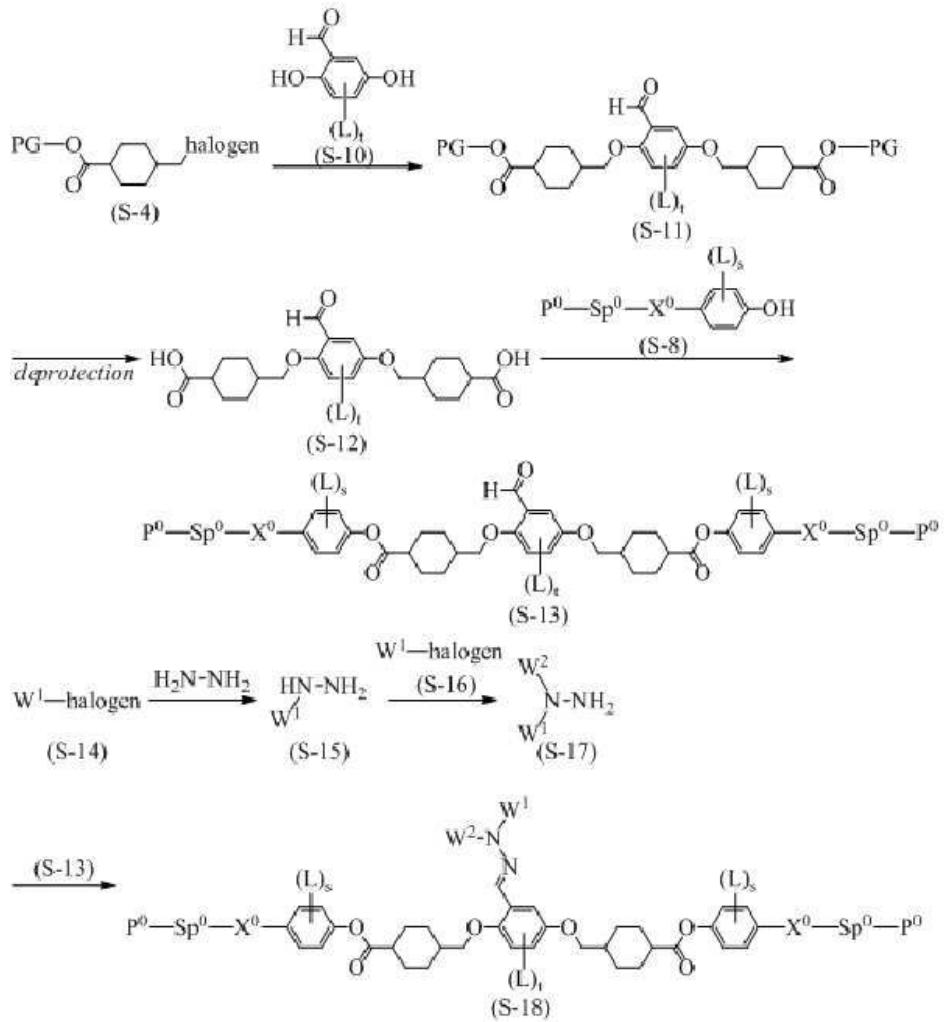
식 (S-6)으로 표시되는 화합물의 보호기(PG)를 탈보호한다. 탈보호의 반응 조건은, 식 (S-7)로 표시되는 화합물이 제조되는 한, 특별히 한정되지 않지만, 문헌에 기재된 것들이 바람직하다.

[0261]

식 (S-7)로 표시되는 화합물을 식 (S-8)로 표시되는 화합물과 반응시킴으로써, 식 (S-9)로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 반응 조건으로서는, 축합제를 사용하는 방법, 또는 식 (S-7)로 표시되는 화합물로부터 유도되는 산염화물, 혼합 산무수물, 또는 카르복실산무수물을 식 (S-8)로 표시되는 화합물과 반응시키는 방법이

예시된다. 본 반응에 촉합제를 사용할 경우, 촉합제의 예는, N,N'-디시클로헥실카르보디이미드, N,N'-디이소프로필카르보디이미드, 및 1-에틸-3-(3-디메틸아미노프로필)카르보디이미드염산염을 포함한다. 염기의 예는 트리에틸아민 및 디이소프로필에틸아민을 포함한다.

[0262] (제조 공정 2) 하기 식 (S-18)로 표시되는 화합물의 제조



[0263]

[0264] (식 중, P⁰, Sp⁰, X⁰, L, W¹, 및 W²는, 각각 독립적으로, 식 (Z-0), 식 (I-0-R), 및 식 (I)에서 정의되는 것과 동일한 것을 나타내고, s는, 각각 독립적으로, 정수 0~4를 나타내고, t는 정수 0~3을 나타내고, PG는 보호기를 나타내고, 할로겐은 할로겐 원자 또는 할로겐 당량을 나타냄).

[0265]

염기의 존재 하에서 식 (S-4)로 표시되는 화합물을 식 (S-10)으로 표시되는 화합물과 반응시킴으로써, 식 (S-11)로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 염기의 예는, 제조 공정 1에 기재한 것과 동일하다.

[0266]

식 (S-11)로 표시되는 화합물의 보호기(PG)를 탈보호한다. 탈보호의 반응 조건은, 식 (S-12)로 표시되는 화합물이 제조되는 한, 특별히 한정되지 않지만, 문헌에 기재된 것들이 바람직하다.

[0267]

식 (S-12)로 표시되는 화합물을 식 (S-8)로 표시되는 화합물과 반응시킴으로써, 식 (S-13)으로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 반응 조건의 예는, 제조 공정 1에 기재된 것을 포함한다.

[0268]

식 (S-14)로 표시되는 화합물을, 예를 들면, 히드라진일수화물과 반응시킴으로써, 식 (S-15)로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다.

[0269]

염기의 존재 하에서 식 (S-15)로 표시되는 화합물을 식 (S-16)으로 표시되는 화합물과 반응시킴으로써, 식 (S-17)로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 염기의 예는 탄산칼륨, 탄산세슘, 및 트리에틸아민을 포함한다.

[0270]

산 촉매의 존재 하에서 식 (S-17)로 표시되는 화합물을 식 (S-13)으로 표시되는 화합물과 반응시킴으로써, 식 (S-18)로 표시되는 화합물을 얻을 수 있다. 산의 예는, p-톨루엔설휤산, p-톨루엔설휤산파리디늄, 및 10-캄페

설명을 포함한다.

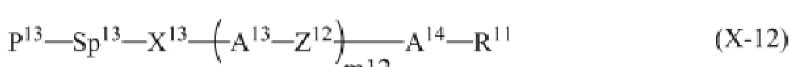
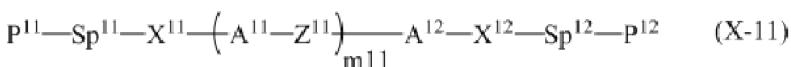
[0271] 제조 공정 1 및 2의 각 스텝에 기재된 것 이외의 반응 조건의 예는, Experimental Chemistry Course(the Chemical Society of Japan 편집, Maruzen Co., Ltd. 발행), Organic Syntheses(John Wiley & Sons, Inc., 발행), Beilstein Handbook of Organic Chemistry(Beilstein-Institut fuer Literatur der Organischen Chemie, Springer-Verlag Berlin 및 Heidelberg GmbH & Co. K), 및 Fieser's Reagents for Organic Synthesis(John Wiley & Sons, Inc.) 등의 문헌에 기재된 조건, 및 SciFinder(Chemical Abstracts Service, American Chemical Society) 및 Reaxys (Elsevier Ltd.) 등의 온라인 검색 서비스에 의해 제공되는 조건을 포함한다.

[0272] 또한, 각 스텝에 있어서, 적절한 반응 용매를 사용할 수 있다. 용매는, 원하는 화합물이 제조되는 한, 특별히 제한되지 않지만, 예를 들면, 이소프로필알코올, 에틸렌글리콜, 디에틸렌글리콜, 메탄올, 에탄올, 프로판올, 클로로포름, 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 아세톤, 아세토니트릴, N,N-디메틸포름아미드, N,N-디메틸아세트아미드, 디메틸실록시드, 디에틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 자일렌, 아세트산에틸, 아세트산부틸, 아세트산프로필, 아세트산메틸, 시클로헥산온, 1,4-디옥산, 디클로로메탄, 스티렌, 테트라하이드로퓨란, 퍼리딘, 1-메틸-2-피롤리디논, 톨루엔, 헥산, 시클로헥산, 햅탄, 벤젠, 메틸이소부틸케톤, tert-부틸메틸에테르, 및 메틸에틸케톤을 포함한다. 유기 용매 및 물의 2상계에서 반응을 행할 경우에는, 상간 이동 촉매를 첨가하는 것도 가능하다. 상간 이동 촉매의 예는, 벤질트리메틸암모늄클로리드, 폴리옥시에틸렌(20)소르비탄모노라우레이트[Tween20], 및 모노올레산소르비탄[Span80]을 포함한다.

[0273] 필요에 따라, 각 스텝에서 정제를 행할 수 있다. 정제 방법의 예는, 크로마토그래피, 재결정, 증류, 승화, 재침전, 흡착, 및 액분리 처리를 포함한다. 정화제를 사용할 경우, 정화제의 예는 실리카겔, 알루미나, 활성탄, 활성백토, 셀라이트, 제올라이트, 메조다공성 실리카, 카본 나노튜브, 카본 나노흔, 빈초탄, 목탄, 그래핀, 이온 교환 수지, 산성 클레이, 이산화규소, 규조토, 펄라이트, 셀룰로오스, 유기 중합체, 및 다공질겔을 포함한다.

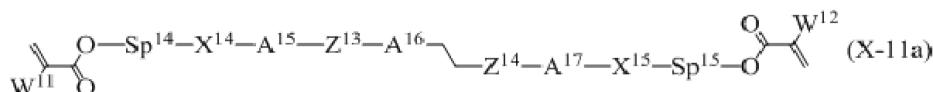
[0274] 바람직하게는, 본 발명의 화합물은, 네마틱 액정 조성물, 스멕틱 액정 조성물, 키랄 스멕틱 액정 조성물, 및 콜레스테릭 액정 조성물에 사용된다. 본 발명의 반응성 화합물을 사용하는 액정 조성물에는, 본 발명의 것 이외의 화합물을 첨가해도 된다.

[0275] 본 발명의 중합성 화합물과 혼합해서 사용되는 다른 중합성 화합물로서는, 구체적으로는, 식 (X-11) 및/또는 식 (X-12)로 표시되는 화합물이 바람직하고

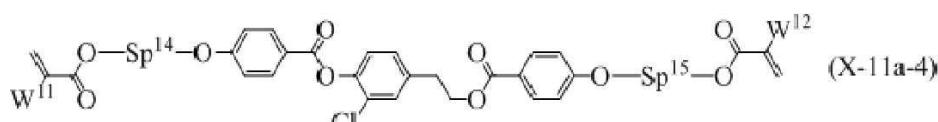
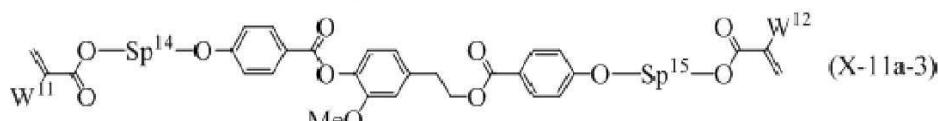
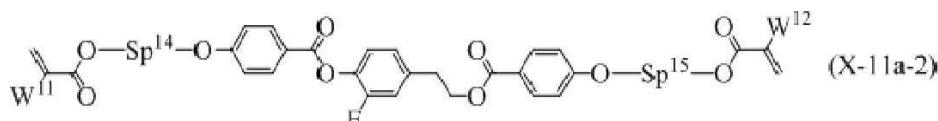
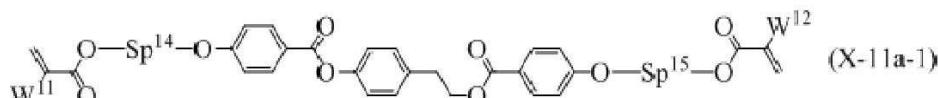


[0276] [0277] [0278] (식 중, P^{11} , P^{12} , 및 P^{13} 은, 각각 독립적으로, 중합성기를 나타내고; Sp^{11} , Sp^{12} , 및 Sp^{13} 은, 각각 독립적으로, 단결합 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬렌기를 나타내고, 여기에서 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는 $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-OCOO-$ 로 치환되어도 되고; X^{11} , X^{12} , 및 X^{13} 은, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-CO-$, $-C_2O-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고; Z^{11} 및 Z^{12} 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CF_2-$, $-CF_2CH_2-$, $-CF_2CF_2-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-COO-CH_2CH_2-$, $-OCO-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2-COO-$, $-CH_2CH_2-OCO-$, $-COO-CH_2-$, $-OCO-CH_2-$, $-CH_2-COO-$, $-CH_2-OCO-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, $-C\equiv C-$, 또는 단결합을 나타내고; A^{11} , A^{12} , A^{13} , 및 A^{14} 는, 각각 독립적으로, 1,4-페닐렌기, 1,4-시클로헥실렌기, 퍼리딘-2,5-디일기, 퍼리미딘-2,5-디

일기, 나프탈렌-2,6-디일기, 나프탈렌-1,4-디일기, 테트라히드로나프탈렌-2,6-디일기, 또는 1,3-디옥산-2,5-디일기를 나타내고, A^{11} , A^{12} , A^{13} , 및 A^{14} 는, 각각 독립적으로, 비치환이어도 되거나, 또는 알킬기, 할로겐화알킬기, 알콕시기, 할로겐화알콕시기, 할로겐 원자, 시아노기, 또는 니트로기로 치환되어도 되고; R^{11} 은 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 펜타플루오로설피라닐기, 시아노기, 니트로기, 이소시아노기, 티오이소시아노기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$, $-CH=CH-$, $-CF=CF-$, 또는 $-C\equiv C-$ 로 치환되어도 됨); $m11$ 및 $m12$ 는 0, 1, 2, 또는 3을 나타내고, $m11$ 및/또는 $m12$ 가 2 또는 3을 나타낼 경우, 2개 또는 3개의 A^{11} , A^{13} , Z^{11} , 및/또는 Z^{12} 는 서로 동일하거나 상이해도 됨), 식 (X-11) 및/또는 식 (X-12)로 표시되는 화합물(그 각각은 P^{11} , P^{12} , 및 P^{13} 은 아크릴기 또는 메타크릴기를 나타냄)이 특히 바람직하다. 식 (X-11)로 표시되는 화합물로서, 구체적으로는, 식 (X-11a)로 표시되는 화합물이 바람직하고,



[0280] (식 중, W^{11} 및 W^{12} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 메틸기를 나타내고; Sp^{14} 및 Sp^{15} 는, 각각 독립적으로, 탄소 원자수 2~18의 알킬렌기를 나타내고; X^{14} 및 X^{15} 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, 또는 단결합을 나타내고; Z^{13} 및 Z^{14} 는, 각각 독립적으로, $-COO-$ 또는 $-OCO-$ 를 나타내고; A^{15} , A^{16} 및 A^{17} 은, 각각 독립적으로, 1,4-페닐렌기를 나타내고(이는 비치환이어도 되고 또는 불소 원자, 염소 원자, 탄소 원자수 1~4의 직쇄상 또는 분기상 알킬기, 또는 탄소 원자수 1~4의 직쇄상 또는 분기상 알콕시기로 치환되어도 됨), 이하 식 (X-11a-1)~(X-11a-4)로 표시되는 화합물이 특히 바람직하다

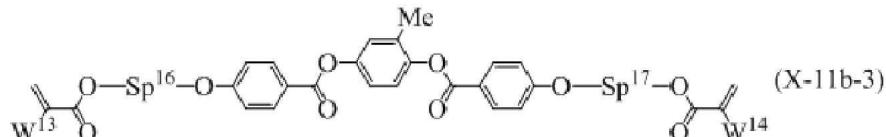
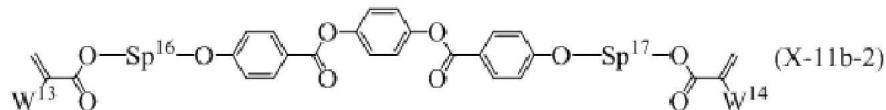
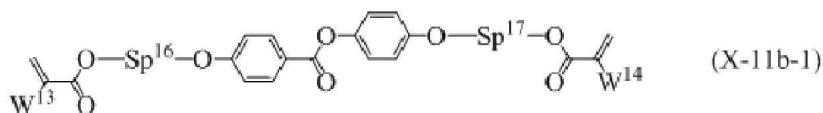


[0281]

[0282] (식 중, W^{11} , W^{12} , Sp^{14} , 및 Sp^{15} 는 식 (X-11a) 중의 것과 동일한 의미를 나타냄). 식 (X-11a-1)~(X-11a-4) 중, 각각에서 Sp^{14} 및 Sp^{15} 가, 각각 독립적으로, 탄소 원자수 2~8의 알킬렌기인 화합물이 특히 바람직하다.

[0283]

또한, 바람직한 2관능 중합성 화합물의 예는, 하기 식 (X-11b-1)~(X-11b-3)으로 표시되는 화합물을 포함한다

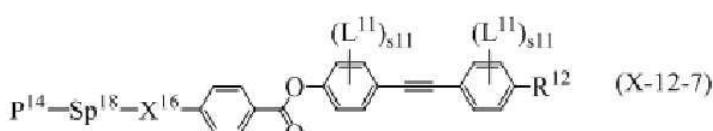
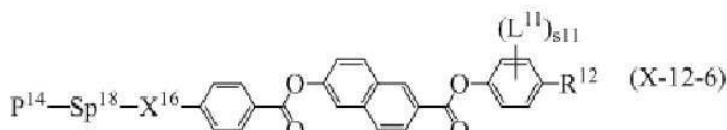
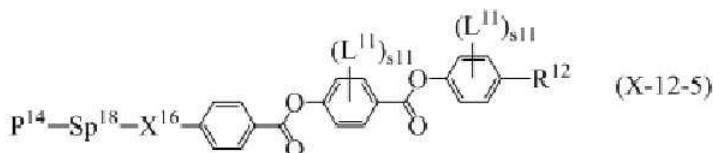
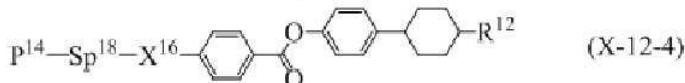
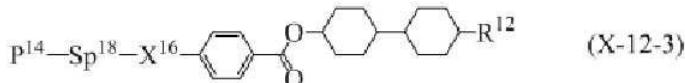
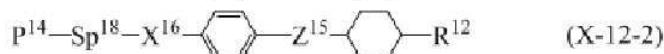
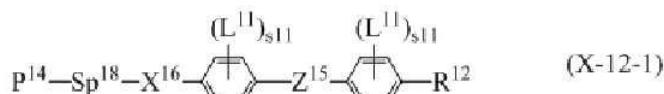


[0284]

[0285] (식 중, W^{13} 및 W^{14} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 메틸기를 나타내고; Sp^{16} 및 Sp^{17} 은, 각각 독립적으로, 탄소 원자수 2~18의 알킬렌기를 나타냄). 식 (X-11b-1)~(X-11b-3) 중, 각각에서 Sp^{16} 및 Sp^{17} 이, 각각 독립적으로, 탄소 원자수 2~8의 알킬렌기인 화합물이 특히 바람직하다.

[0286]

식 (X-12)로 표시되는 화합물의 구체예는, 하기 식 (X-12-1)~(X-12-7)로 표시되는 화합물을 포함한다



[0287]

[0288] (식 중, P^{14} 는 중합성기를 나타내고; Sp^{18} 은 단결합 또는 탄소 원자수 1~20의 알킬렌기를 나타내고(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는 $-O-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-O-CO-O-$ 로 치환되어됨 됨); X^{16} 은 단결합, $-O-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 를 나타내고; Z^{15} 는 단결합, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 를 나타내고; L^{11} 은 불소 원자, 염소 원자, 또는 탄소 원자수 1~10의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타내고(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-COO-$, 또는 $-OCO-$ 로 치환되어도 됨); $s11$ 은 정수 0~4를 나타내고; R^{12} 는 수소 원자, 불소 원자, 염소 원자, 시아노기, 니트로기, 또는 탄소 원자수 1~20의 직쇄상 또는 분기상 알킬기를 나타낸다(여기에서, 1개의 $-CH_2-$ 또는 2개 이상의 비인접 $-CH_2-$ 는, 각각 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-CO-S-$, $-S-CO-$, $-O-CO-O-$, $-CO-NH-$, $-NH-CO-$, $-CH=CH-COO-$, $-CH=CH-OCO-$, $-COO-CH=CH-$, $-OCO-CH=CH-$,

$-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CF}=\text{CF}-$, 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 치환되어도 됨)).

[0289]

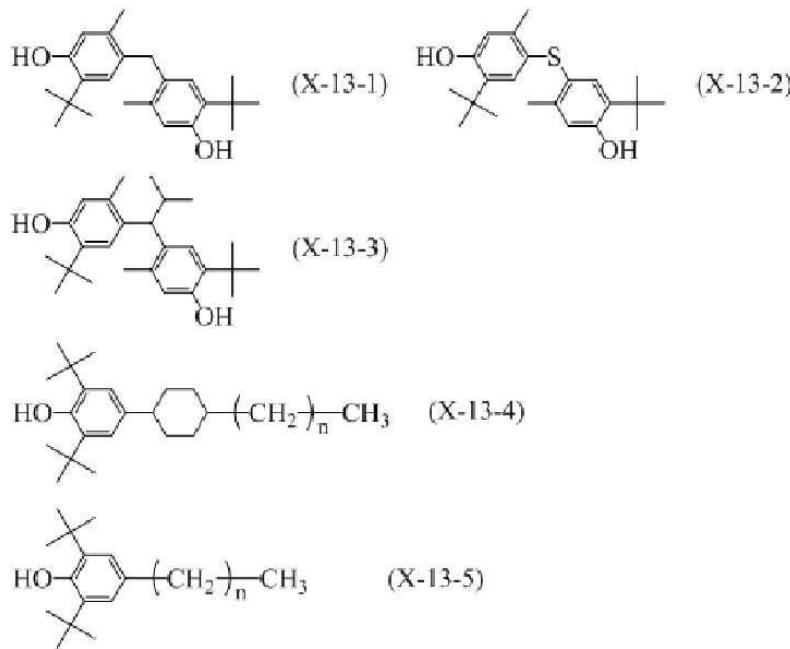
또한, 본 발명의 화합물을 포함하는 종합성 액정 조성물에는, 액정성을 나타내지 않는 종합성 화합물을 조성물의 액정성이 현저히 열화되지 않을 정도로 첨가할 수 있다. 구체적으로는, 당해 분야에서, 화합물이 중합체-형성성 모노머 또는 중합체-형성성 올리고머로서 인식되고 있으면, 특별한 제한 없이 사용할 수 있다. 그 구체예는, "Material edition (monomer, oligomer, photopolymerization initiator), Photocuring technology data book"(Ichimura Kunihiro 및 Kato Kiyomi(Techno net Co., Ltd.)에 의해 감수)에 기재되어 있다.

[0290]

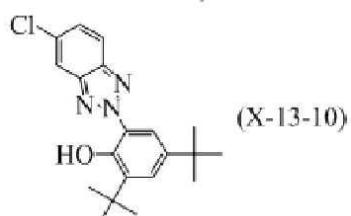
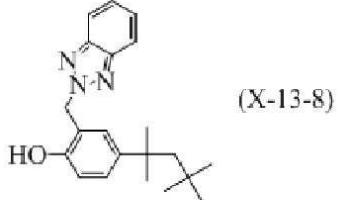
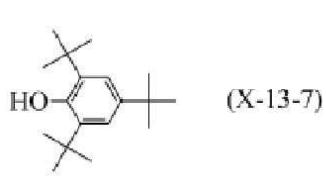
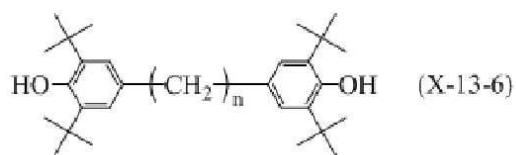
본 발명의 화합물은 광중합 개시제를 사용하지 않고 중합할 수도 있지만, 필요에 따라, 광중합 개시제를 첨가해도 된다. 이 경우, 본 발명의 화합물에 대한 광중합 개시제의 농도는, 바람직하게는, 0.1질량%~15질량%이고, 더 바람직하게는, 0.2질량%~10질량%이고, 보다 더 바람직하게는, 0.4질량%~8질량%이다. 광중합 개시제의 예는 벤조인에테르, 벤조페논, 아세토페논, 벤질케탈, 및 아실포스핀옥사이드를 포함한다. 광중합 개시제의 구체예는, 2-메틸-1-(4-메틸티오페닐)-2-모르폴리노프로판-1-온(IRGACURE 907) 및 벤조산[1-(4-(페닐티오)벤조일]헵틸리텐]아미노(IRGACURE OXE 01)를 포함한다. 열중합 개시제의 예는 아조 화합물 및 과산화물을 포함한다. 열중합 개시제의 구체예는, 2,2'-아조비스(4-메톡시-2,4-디메틸발레로니트릴) 및 2,2'-아조비스(이소부티로니트릴)를 포함한다. 중합 개시제는 단독으로 사용해도 되고, 2종 이상을 조합해서 사용해도 된다.

[0291]

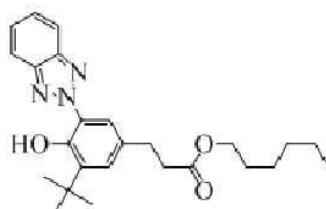
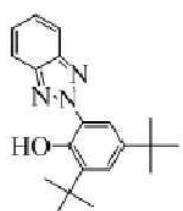
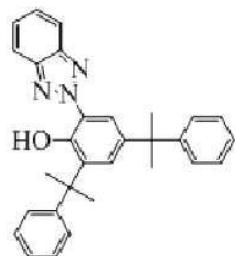
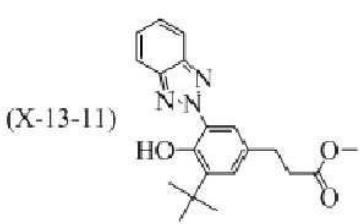
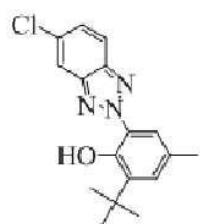
한편, 본 발명의 액정 조성물에는, 조성물의 보존 안정성을 향상시키기 위해 안정제를 첨가할 수 있다. 사용될 수 있는 안정제의 예는 하이드로퀴논, 하이드로퀴논모노알킬에테르, 터셔리 부틸카테콜, 피로갈룰, 티오페놀, 니트로 화합물, β -나프틸아민, β -나프톨, 및 니트로소 화합물을 포함한다. 안정제의 사용 시, 첨가되는 안정제의 양은, 바람직하게는, 0.005질량%~1질량%, 더 바람직하게는, 0.02질량%~0.8질량%, 보다 더 바람직하게는, 0.03질량%~0.5질량%이다. 안정제는 단독으로 사용해도 되고, 2종 이상을 조합해서 사용해도 된다. 안정제로서는, 구체적으로, 하기 식 (X-13-1)~(X-13-35)로 표시되는 화합물이 바람직하다



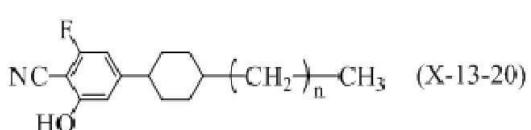
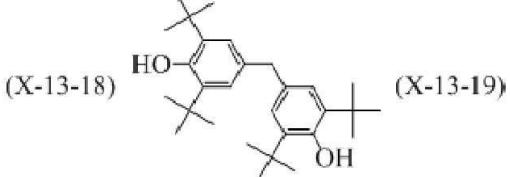
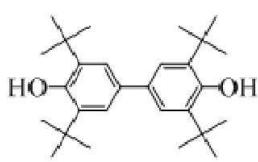
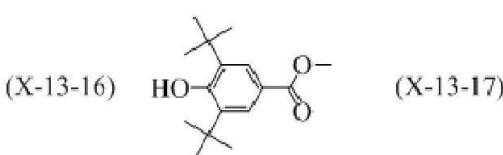
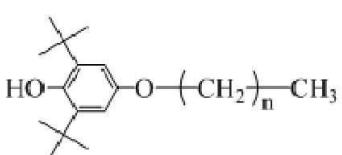
[0292]



[0293]



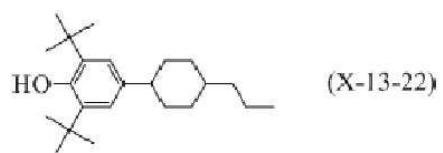
[0294]



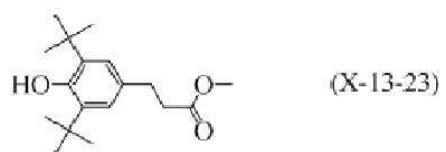
[0295]



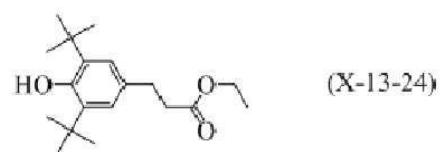
(X-13-21)



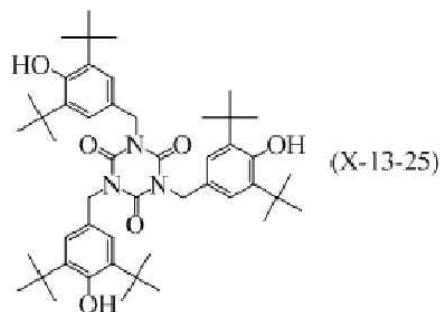
(X-13-22)



(X-13-23)

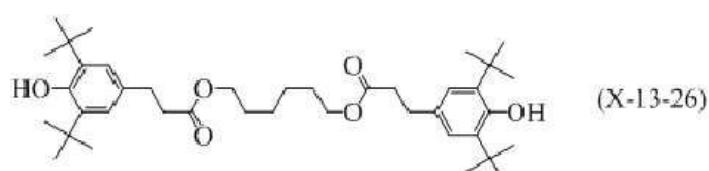


(X-13-24)

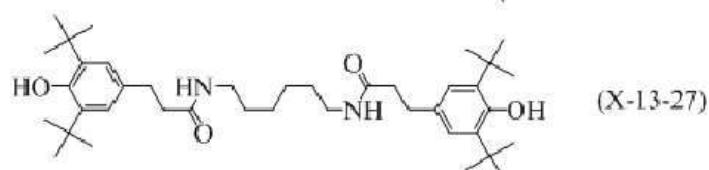


(X-13-25)

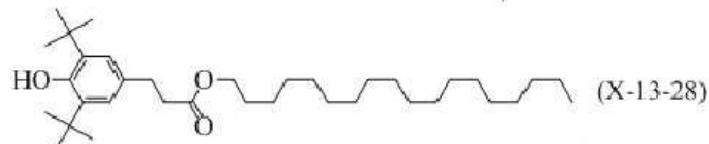
[0296]



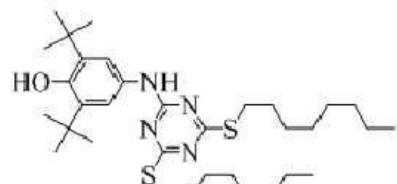
(X-13-26)



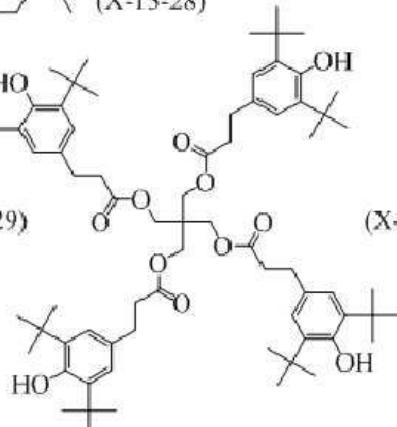
(X-13-27)



(X-13-28)

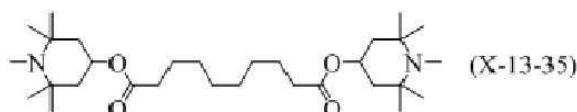
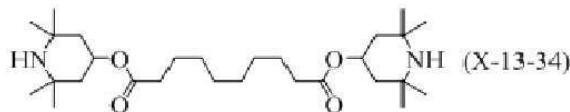
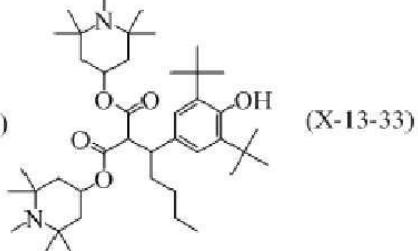
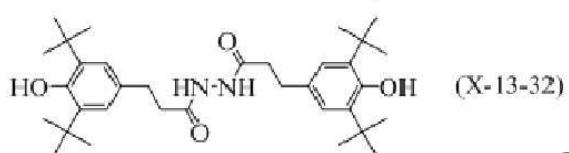
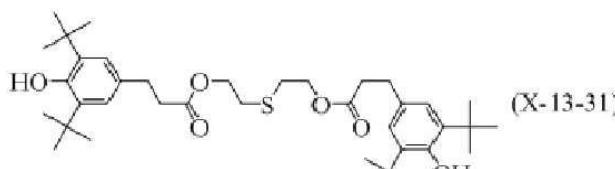


(X-13-29)



(X-13-30)

[0297]



[0298]

[0299] (식 중, n은 정수 0~20을 나타냄).

[0300]

한편, 본 발명의 화합물을 포함하는 중합성 액정 조성물을 필름, 광학 소자, 기능성 안료, 의약품, 화장품, 코팅제, 및 합성 수지에 사용할 경우, 필요에 따라, 금속, 금속 착체, 염료, 안료, 착색제, 형광 재료, 인광재료, 계면활성제, 레벨링제, 틱소트로피제, 젤화제, 디당류, 자외선 흡수제, 적외선 흡수제, 산화 방지제, 이온 교환 수지, 또는 산화티타늄 등의 금속 산화물을 첨가할 수도 있다.

[0301]

본 발명의 화합물을 포함하는 중합성 액정 조성물을 중합하여 얻어지는 중합체는 다양한 용도에 사용할 수 있다. 예를 들면, 본 발명의 화합물을 포함하는 중합성 액정 조성물을 배향 없이 중합시켜 얻어지는 중합체는, 광산란판, 편광 해소판, 및 모아레 스트라이프 방지판에 사용할 수 있다. 또한, 중합성 액정 조성물을 배향시켜서 중합시켜 얻어지는 중합체는, 광학 이방성을 갖기 때문에 유용하다. 이러한 광학 이방체는, 천으로 러빙된 기재, 유기박막이 설치된 기재, 또는 SiO_2 가 비스듬히 증착된 배향막을 갖는 기재 상에 본 발명의 화합물을 포함하는 중합성 액정 조성물을 서포트하거나, 중합성 액정 조성물을 기재 간에 개재시킨 후, 중합성 액정 조성물을 중합시킴으로써 제조될 수 있다.

[0302]

중합성 액정 조성물을 기재 상에 서포트하는 방법으로서는, 스판 코팅, 다이 코팅, 익스트루전 코팅, 롤 코팅, 와이어 바 코팅, 그라비어 코팅, 스프레이 코팅, 침지, 인쇄 등이 예시된다. 코팅 중에, 중합성 액정 조성물에 유기 용매를 첨가해도 된다. 유기 용매로서는, 탄화수소 용매, 할로겐화 탄화수소 용매, 에테르 용매, 알코올 용매, 케톤 용매, 에스테르 용매, 또는 비프로토ن성 용매를 사용할 수 있다. 예를 들면, 탄화수소 용매로서는, 톨루エン 또는 헥산을 사용할 수 있고, 할로겐화 탄화수소 용매로서는, 염화메틸렌을 사용할 수 있고, 에스테르 용매로서는, 테트라하이드로퓨란, 아세토시-2-에톡시-에탄, 또는 프로필렌글리콜모노메틸에테르아세테이트를 사용할 수 있고, 알코올 용매로서는, 메탄올, 에탄올, 또는 이소프로판을 사용할 수 있고, 케톤 용매로서는, 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥산온, γ -부티로락톤 또는 N-메틸피롤리디논을 사용할 수 있고, 에스테르 용매로서는, 아세트산에틸 또는 셀로솔브를 사용할 수 있고, 비프로토ن성 용매로서는, 디메틸포름아미드 또는 아세토니트릴을 사용할 수 있다. 이들 용매는 단독으로 또는 조합해서 사용할 수 있고, 중합성 액정 조성물의 용해성 및 그 증기압을 고려하여 적절히 선택될 수 있다. 첨가한 유기 용매를 휘발시키는 방법으로서는, 자연 건조, 가열 건조, 진공 건조, 또는 진공 가열 건조를 사용할 수 있다. 중합성 액정 재료의 도포성을 더 향상시키기 위해서는, 기재 상에 폴리이미드 박막 등의 중간층을 설치하거나, 중합성 액정 재료에 레벨링제를 첨가하는 것도 유효하다. 폴리이미드 박막 등의 중간층을 기재 상에 설치하는 방법은, 중합성 액정 재료를 중합시켜 얻어지는 중합체와 기재 사이의 밀착성을 향상시키는 데 유효하다.

[0303]

상기 이외의 배향 처리로서는, 액정 재료의 유동 배향의 이용이나 전계 또는 자계의 이용을 들 수 있다. 이들 배향 수단은, 단독으로 또는 조합해서 사용해도 된다. 또한, 배향 처리 방법으로서, 러빙을 대신해서 광배향법을 사용할 수 있다. 기재의 형상으로서는, 기재는 평판 이외에도 곡면을 구성 요소로서 가져도 된다. 기재를

구성하는 재료로서는, 유기 재료 및 무기 재료의 양쪽을 사용할 수 있다. 예를 들면, 기재의 재료로서 기능하는 유기 재료의 예는, 폴리에틸렌테레프탈레이트, 폴리카보네이트, 폴리이미드, 폴리아미드, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리스티렌, 폴리염화비닐, 폴리테트라플루오로에틸렌, 폴리클로로트리플루오로에틸렌, 폴리아릴레이트, 폴리설휘, 트리아세틸셀룰로오스, 셀룰로오스, 및 폴리에테르에테르케톤을 포함한다. 또한, 무기 재료의 예는 실리콘, 유리, 및 방해석을 포함한다.

[0304] 본 발명의 화합물을 포함하는 중합성 액정 조성물을 중합시킬 때는, 중합이 신속히 진행되는 것이 바람직하고, 이에 따라 자외선 또는 전자빔 등의 활성 에너지선을 조사해서 조성물을 중합시키는 방법이 바람직하다. 자외선을 사용할 경우에는, 편광 광원을 사용해도 되고, 비편광 광원을 사용해도 된다. 또한, 액정 조성물을 2개의 기재 사이에 끼운 상태에서 중합시킬 경우, 적어도 조사면측의 기재는, 활성 에너지선에 대해 적당한 투명성을 가져야 한다. 또한, 광조사 시에 마스크를 사용해서 특정 부분만을 중합시키고, 전계 및 자계 또는 온도 등의 조건을 바꿔 미중합 부분의 배향 상태를 변화시키고, 또한 중합을 행하기 위해 활성 에너지선을 조사하는 수단을 사용해도 된다. 또한, 조사 중의 온도는, 본 발명의 중합성 액정 조성물의 액정 상태가 유지되는 온도 범위 내인 것이 바람직하다. 특히, 광중합에 의해 광학 이방체를 제조하고자 할 경우에는, 의도하지 않는 열중합의 유도를 피하기 위해, 가능한 한 실온 부근, 즉 통상적으로 25°C 에서 중합을 행하는 것이 바람직하다. 활성 에너지선의 강도는, 바람직하게는, $0.1\text{mW/cm}^2\sim2\text{W/cm}^2$ 이다. 강도가 0.1mW/cm^2 이하이면, 광중합 완료까지 장시간이 걸리기 때문에 생산성이 저하되고, 강도가 2W/cm^2 이상이면, 중합성 액정 화합물 또는 중합성 액정 조성물을 열화시킬 위험이 있다.

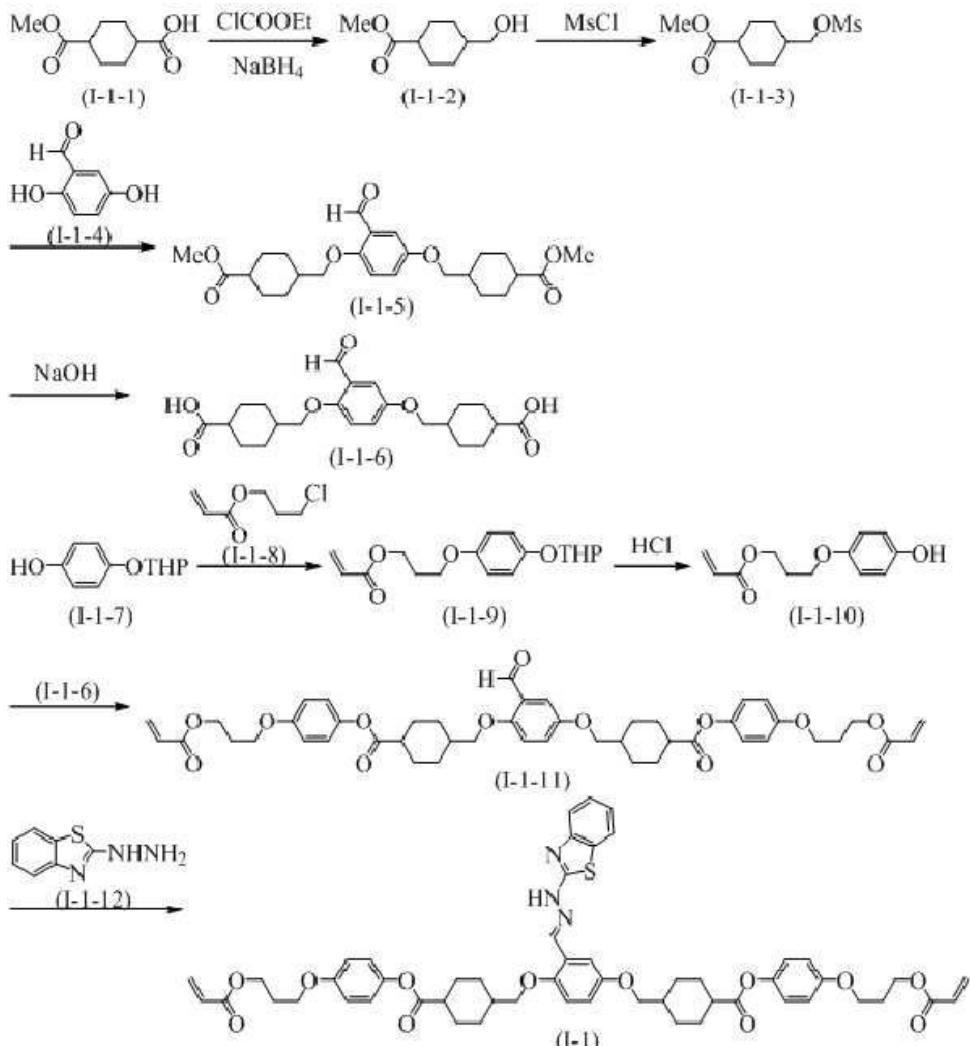
[0305] 또한, 중합에 의해 얻어지는 광학 이방체는, 초기 특성의 변화를 저감하고, 안정된 특성을 나타낼 목적으로 열처리될 수도 있다. 열처리 온도는, 바람직하게는, $50^{\circ}\text{C}\sim250^{\circ}\text{C}$ 이고, 열처리 시간은, 바람직하게는, 30초~12시간이다.

[0306] 이러한 방식으로 제조된 광학 이방체는 기재로부터 박리된 후에 단독으로 사용되어도 되고, 또는 기재로부터 박리되지 않고 사용되어도 된다. 또한, 얻어진 광학 이방체를 적층해도 되고, 다른 기재에 접합한 후 사용해도 된다.

[0307] [실시예]

[0308] 이하, 본 발명을 다음의 실시예를 참조하여 더 상세히 설명하지만, 본 발명은 이를 실시예에 한정되는 것은 아니다. 또한, 실시예 및 비교예의 조성물에서, "%"는 "질량%"를 의미한다. 각 스텝에서 산소 및/또는 수분에 대해 불안정한 물질을 처리할 경우, 질소 가스, 아르곤 가스 등의 불활성 가스 중에서 조작을 행하는 것이 바람직하다. "통상의 후처리"는, 반응액으로부터 원하는 화합물을 얻는 조작이고, 반응 정지(quenching), 액 분리 및 추출, 중화, 세정, 건조, 또는 농축 등의 조작을 의미하며, 이는 통상의 기술자에 의해 통상 행해진다.

[0309] (실시예 1) 식 (I-1)로 표시되는 화합물의 제조



[0310]

식 (I-1-1)로 표시되는 화합물, 트리에틸아민, 및 테트라히드로퓨란을 반응 용기에 넣었다. 빙냉(ice cooling) 하, 클로로포름산에틸을 적하하고, 이어서 실온에서 교반했다. 침전물을 여과해서 용액을 얻었다. 질소 분위기 하, 다른 반응 용기에 수소화붕소나트륨 및 테트라히드로퓨란을 넣었다. 빙냉 하, 용액을 적하하고, 얻어진 혼합물을 교반했다. 메탄올과 물의 혼합액을 적하한 후, 얻어진 혼합물을 더 교반했다. 염산을 첨가한 후, 아세트산에틸로 추출했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-1-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0312]

질소 분위기 하, 식 (I-1-2)로 표시되는 화합물, 피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화메탄설포닐을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-1-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0313]

식 (I-1-3)으로 표시되는 화합물, 식 (I-1-4)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼륨 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-1-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0314]

식 (I-1-5)로 표시되는 화합물, 메탄올, 및 수산화나트륨 수용액을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 염산으로 중화하고, 아세트산에틸로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-1-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0315]

식 (I-1-7)로 표시되는 화합물, 식 (I-1-8)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기애 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-1-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0316]

식 (I-1-9)로 표시되는 화합물, 테트라하이드로퓨란, 메탄올, 및 농염산을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 통상

의 후처리를 행한 후, 건조를 행하여, 식 (I-1-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

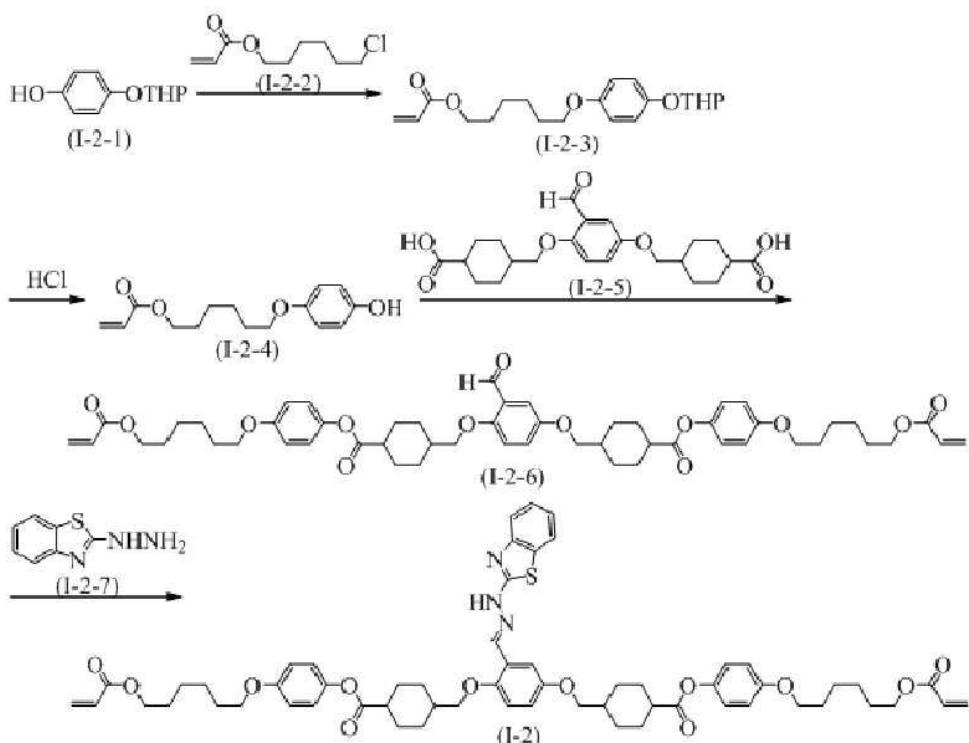
[0317] 식 (I-1-10)으로 표시되는 화합물, 식 (I-1-6)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 질소 폐지한 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔), 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-1-11)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0318] 식 (I-1-11)로 표시되는 화합물, 식 (I-1-12)로 표시되는 화합물, (±)-10-캄퍼설폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-1)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0319] 전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 155 N > 220 I

[0320] ^1H NMR(CDCl_3) δ 1.12(q, 2H), 1.26(q, 2H), 1.50(q, 2H), 1.67(qd, 2H), 1.91-2.27(m, 14H), 2.43(t, 1H), 2.56(tt, 2H), 3.77(d, 2H), 3.88(d, 2H), 4.09(t, 4H), 4.40(t, 4H), 5.88(d, 2H), 6.17(ddd, 2H), 6.45(d, 2H), 6.85(d, 1H), 6.92(m, 5H), 7.02(d, 4H), 7.19(t, 1H), 7.37(t, 1H), 7.59(m, 2H), 7.71(d, 1H), 8.44(s, 1H)ppm.

[0321] (실시예 2) 식 (I-2)로 표시되는 화합물의 제조



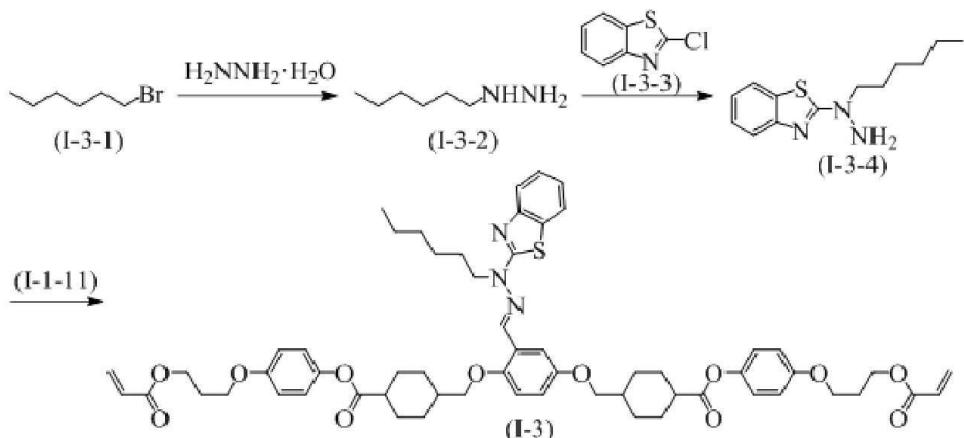
[0322]

[0323] (I-1-8)로 표시되는 화합물을 식 (I-2-2)로 표시되는 화합물로 변경한 것 이외는, 실시예 1과 마찬가지로 해서, 식 (I-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0324] 전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 90-110 N 182-187 I

[0325] ^1H NMR(CDCl_3) δ 1.07(q, 2H), 1.24(q, 2H), 1.47-1.90 (m, 24H), 2.09(m, 4H), 2.22(d, 2H), 2.39(t, 1H), 2.53(t, 1H), 3.74(d, 2H), 3.85(d, 2H), 3.94 (td, 4H), 4.17 (td, 4H), 5.82(d, 2H), 6.13(dd, 2H), 6.40(d, 2H), 6.80-6.99(m, 6H), 6.98(d, 4H), 7.16(t, 1H), 7.33(t, 1H), 7.55(m, 2H), 7.67(d, 1H), 8.40(s, 1H)ppm.

[0326] (실시예 3) 식 (I-3)으로 표시되는 화합물의 제조



[0327]

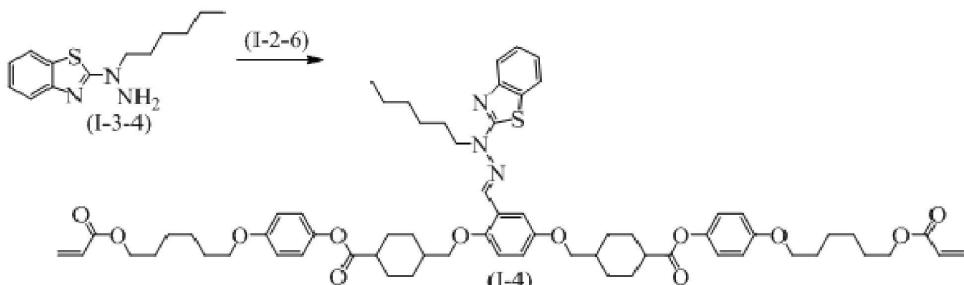
[0328] 히드라진일수화물 및 에탄올을 질소 폐지한 반응 용기에 넣었다. 가열하면서, 식 (I-3-1)로 표시되는 화합물을 적하한 후, 교반했다. 얻어진 생성물을 농축하여, 식 (I-3-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0329] 식 (I-3-3)으로 표시되는 화합물, 1,2-디메톡시에탄, 및 트리에틸아민을 질소 폐지한 반응 용기에 넣었다. 식 (I-3-2)로 표시되는 화합물을 적하한 후, 가열 교반했다. 반응액을 물에 넣고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 생성물을 헥산으로 세정하고, 이어서 건조해서, 식 (I-3-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0330] 식 (I-1-11)로 표시되는 화합물, 식 (I-3-4)로 표시되는 화합물, (\pm)-10-캄퍼슬폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0331] LCMS : 1058 [M+1]

[0332] (실시예 4) 식 (I-4)로 표시되는 화합물의 제조

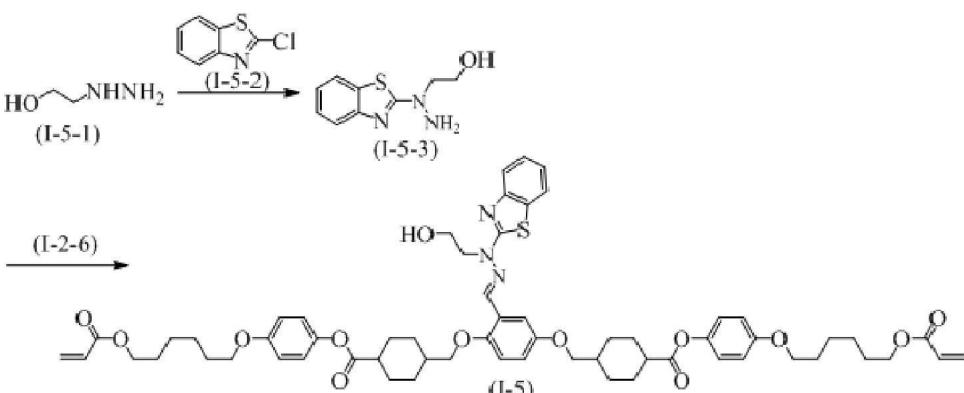


[0333]

[0334] 실시예 3과 마찬가지로 해서, 식 (I-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0335] LCMS : 1142 [M+1]

[0336] (실시예 5) 식 (I-5)로 표시되는 화합물의 제조



[0337]

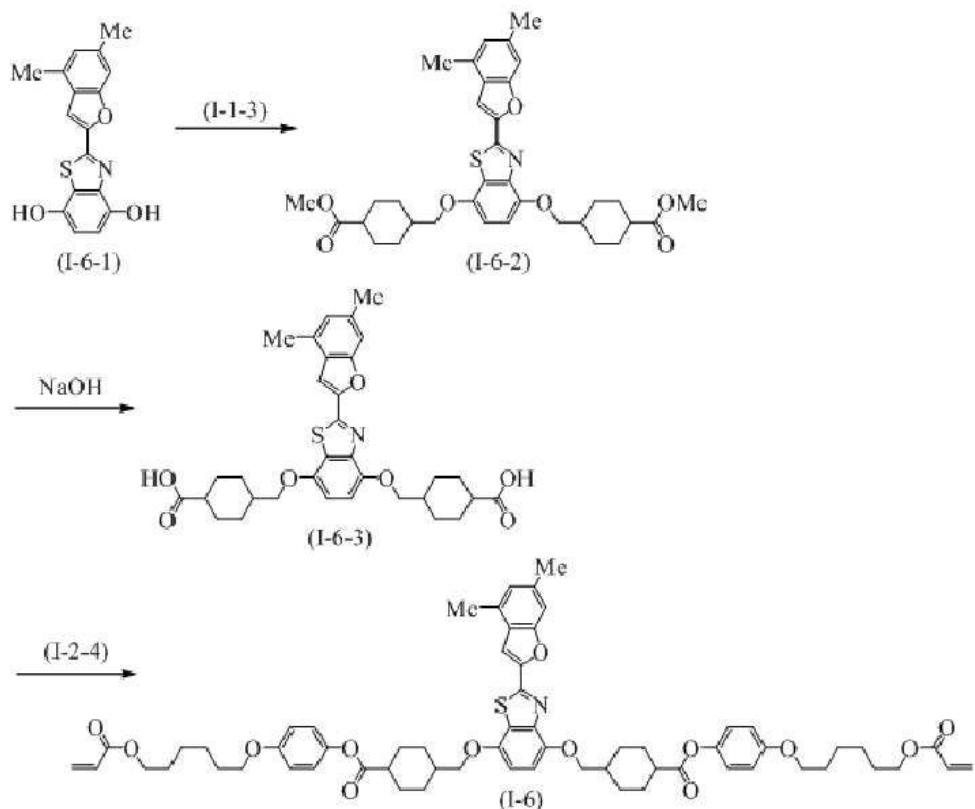
[0338] 실시예 3과 마찬가지로 해서, 식 (I-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0339] 전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 119–122 N 144 I

[0340] ^1H NMR(CDCl_3) δ 1.25(m, 4H), 1.48(m, 8H), 1.63–1.82(m, 12H), 1.90(m, 2H), 2.07(dd, 4H), 2.24(d, 4H), 2.52(m, 2H), 3.30(t, 1H), 3.86(dd, 4H), 3.94(t, 4H), 4.08(td, 2H), 4.17(t, 4H), 4.50(t, 2H), 5.82(dd, 2H), 6.12(dd, 2H), 6.40(dd, 2H), 6.88(m, 6H), 6.97(dd, 4H), 7.16(t, 1H), 7.33(t, 1H), 7.52(d, 1H), 7.64(d, 1H), 7.69(d, 1H), 8.28(s, 1H) ppm.

[0341] LCMS : 1102 [M+1]

[0342] (실시예 6) 식 (I-6)으로 표시되는 화합물의 제조



[0343]

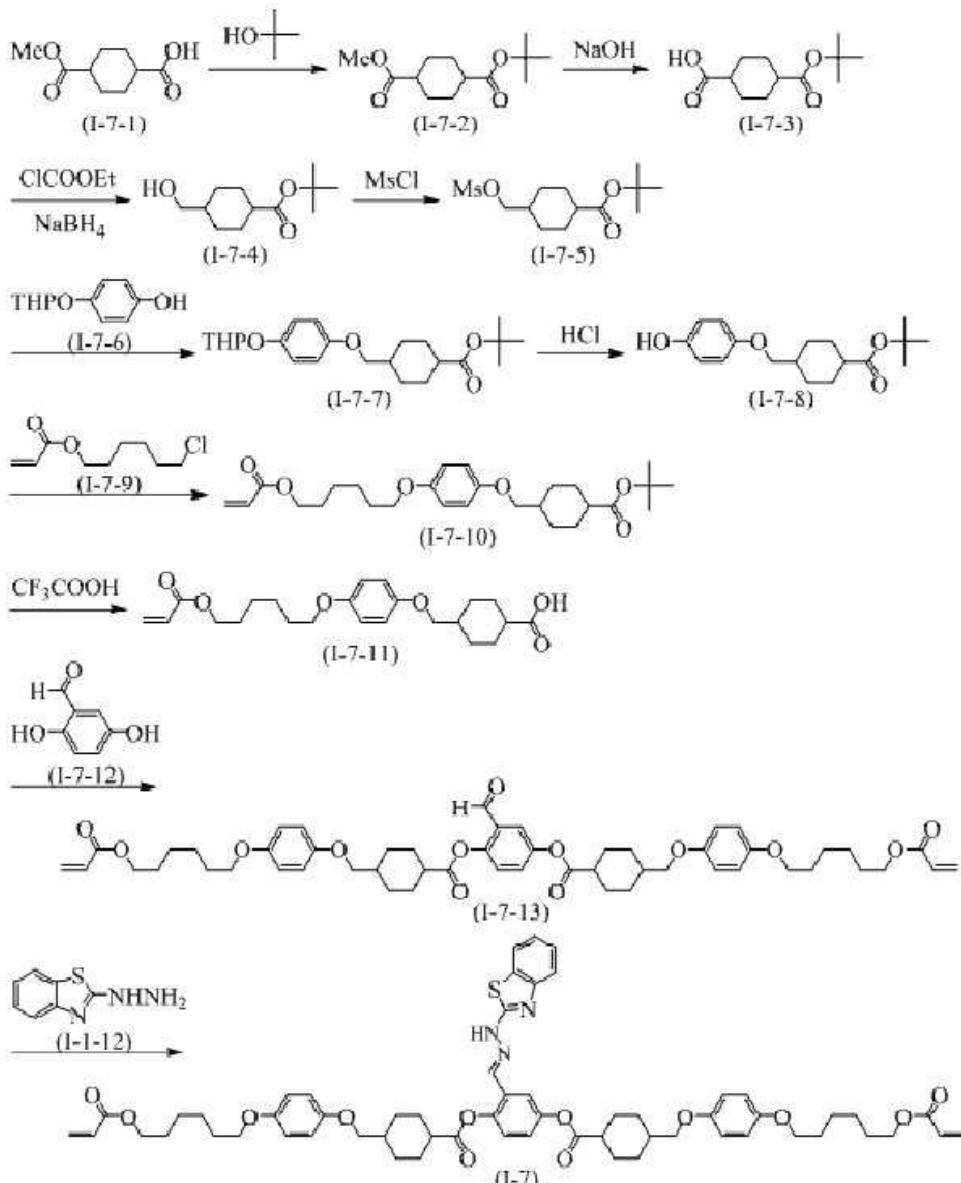
[0344] 일본국 특개2011-207765호 공보에 기재된 방법에 의해, 식 (I-6-1)로 표시되는 화합물을 제조했다. 식 (I-6-1)로 표시되는 화합물, 식 (I-1-3)으로 표시되는 화합물, 탄산세슘, 및 디메틸설폐시드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하고 재결정해서, 식 (I-6-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0345] 식 (I-6-2)로 표시되는 화합물, 테트라하이드로퓨란, 메탄올, 및 수산화나트륨 수용액을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 염산으로 중화한 후, 통상의 후처리를 행하여, 식 (I-6-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0346] 식 (I-6-3)으로 표시되는 화합물, 식 (I-2-4)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0347] LCMS : 1084 [M+1]

[0348] (실시예 7) 식 (I-7)로 표시되는 화합물의 제조



[0349]

[0350] 식 (I-7-1)로 표시되는 화합물, tert-부틸알코올, N,N-디메틸아미노피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-7-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0351]

식 (I-7-2)로 표시되는 화합물, 메탄올, 및 수산화나트륨 수용액을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 염산으로 중화하고, 클로로포름으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 셀라이트로 고체를 여과한 후, 용매를 증류 제거하여, 식 (I-7-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0352]

식 (I-7-3)으로 표시되는 화합물, 트리에틸아민, 및 테트라하이드로퓨란을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 클로로포름산에틸을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과해서 용액을 얻었다. 질소 분위기 하, 다른 반응 용기에 수소화붕소나트륨 및 테트라하이드로퓨란을 넣었다. 빙냉 하, 용액을 적하한 후, 교반했다. 메탄올과 물의 혼합액을 적하한 후, 더 교반했다. 염산을 첨가한 후, 아세트산에틸로 추출했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-7-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0353]

질소 분위기 하, 식 (I-7-4)로 표시되는 화합물, 피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화메탄설포닐을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-7-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0354]

식 (I-7-5)로 표시되는 화합물, 식 (I-7-6)으로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응

용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-7-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0355] 식 (I-7-7)로 표시되는 화합물, 테트라하이드로퓨란, 메탄올, 및 농염산을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 건조를 행하여, 식 (I-7-8)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0356] 식 (I-7-8)로 표시되는 화합물, 식 (I-7-9)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-7-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

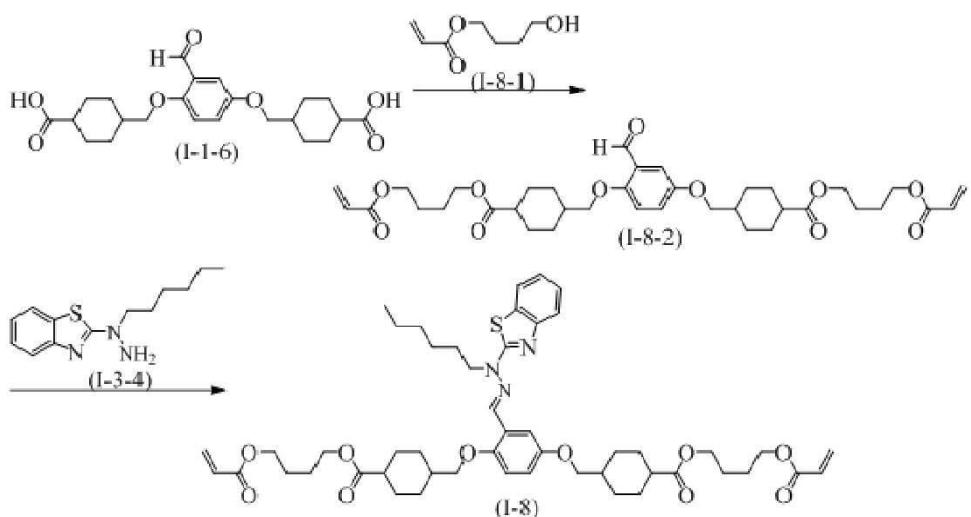
[0357] 식 (I-7-10)으로 표시되는 화합물, 디클로로메탄, 및 트리플루오로아세트산을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 디클로로메탄을 중류 제거한 후, 디이소프로필에테르를 첨가하고, 석출된 고체를 여과했다. 고체를 디이소프로필에테르로 세정하고 건조해서, 식 (I-7-11)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0358] 식 (I-7-11)로 표시되는 화합물, 식 (I-7-12)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-7-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0359] 실시예 1과 마찬가지로 해서, 식 (I-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0360] LCMS : 1058 [M+1]

[0361] (실시예 8) 식 (I-8)로 표시되는 화합물의 제조



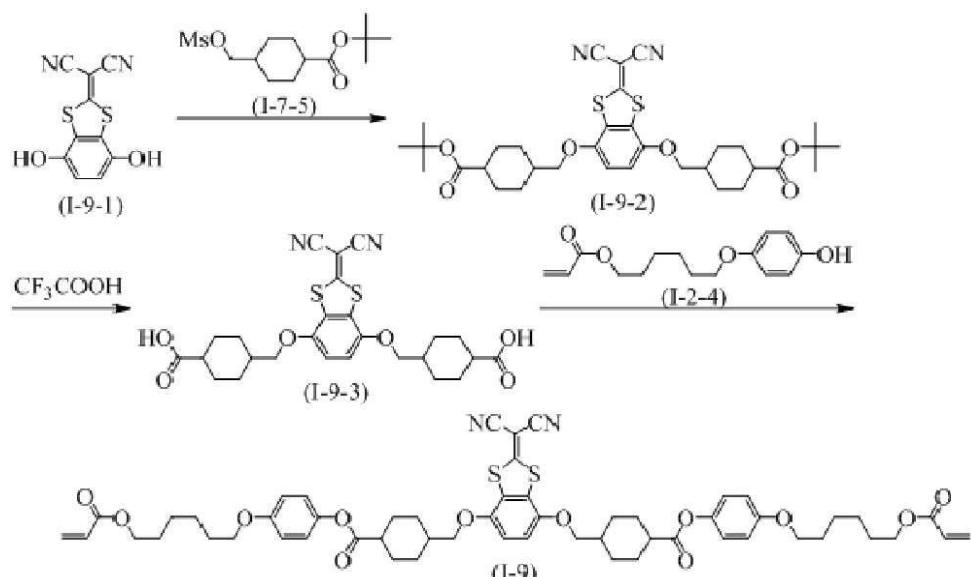
[0362]

식 (I-1-6)으로 표시되는 화합물, 식 (I-8-1)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-8-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0364] 실시예 3과 마찬가지로 해서, 식 (I-8)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0365] LCMS : 902 [M+1]

[0366] (실시예 9) 식 (I-9)로 표시되는 화합물의 제조



[0367]

[0368] 일본국 특개2008-107767호 공보에 기재된 방법에 의해, 식 (I-9-1)로 표시되는 화합물을 제조했다. 식 (I-9-1)로 표시되는 화합물, 식 (I-7-5)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-9-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0369]

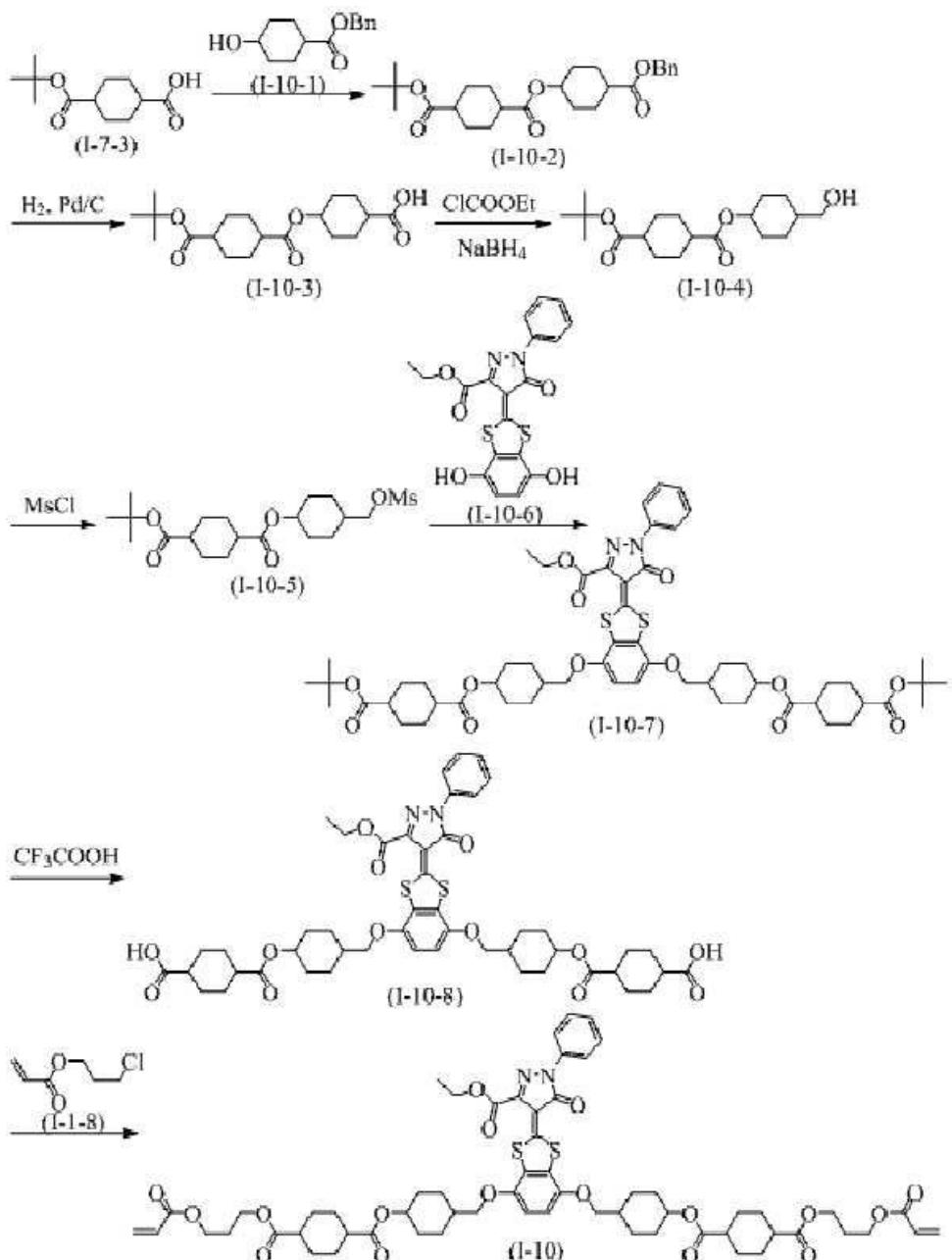
식 (I-9-2)로 표시되는 화합물, 디클로로메탄, 및 트리플루오로아세트산을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 디클로로메탄을 증류 제거한 후, 디이소프로필에테르를 첨가하고, 석출된 고체를 여과했다. 고체를 디이소프로필에테르로 세정하고 건조해서, 식 (I-9-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0370]

식 (I-9-3)으로 표시되는 화합물, 식 (I-2-4)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0371] LCMS : 1021 [M+1]

[0372] (실시예 10) 식 (I-10)으로 표시되는 화합물의 제조



[0373]

[0374] 일본국 특개2009-179563호 공보에 기재된 방법에 의해, 식 (I-10-1)로 표시되는 화합물을 제조했다. 식 (I-7-3)으로 표시되는 화합물, 식 (I-10-1)로 표시되는 화합물, N,N -디메틸아미노피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 삼염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-10-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0375]

식 (I-10-2)로 표시되는 화합물, 테트라하이드로퓨란, 에탄올, 및 5% 팔라듐탄소를 오토클레이브에 넣은 후, 수소압 0.5MPa에서 가열 교반했다. 촉매를 여과한 후, 용매를 증류 제거하고 건조시킴으로써, 식 (I-10-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0376]

식 (I-10-3)으로 표시되는 화합물, 트리에틸아민, 및 테트라하이드로퓨란을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 클로로포름산에틸을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과해서 용액을 얻었다. 질소 분위기 하, 다른 반응 용기에 수소화붕소나트륨 및 테트라하이드로퓨란을 넣었다. 빙냉 하, 용액을 적하한 후, 교반했다. 메탄올과 물의 혼합액을 적하한 후, 더 교반했다. 염산을 첨가한 후, 아세트산에틸로 추출했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-10-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0377]

질소 분위기 하, 식 (I-10-4)로 표시되는 화합물, 피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하,

염화메탄설포닐을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-10-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

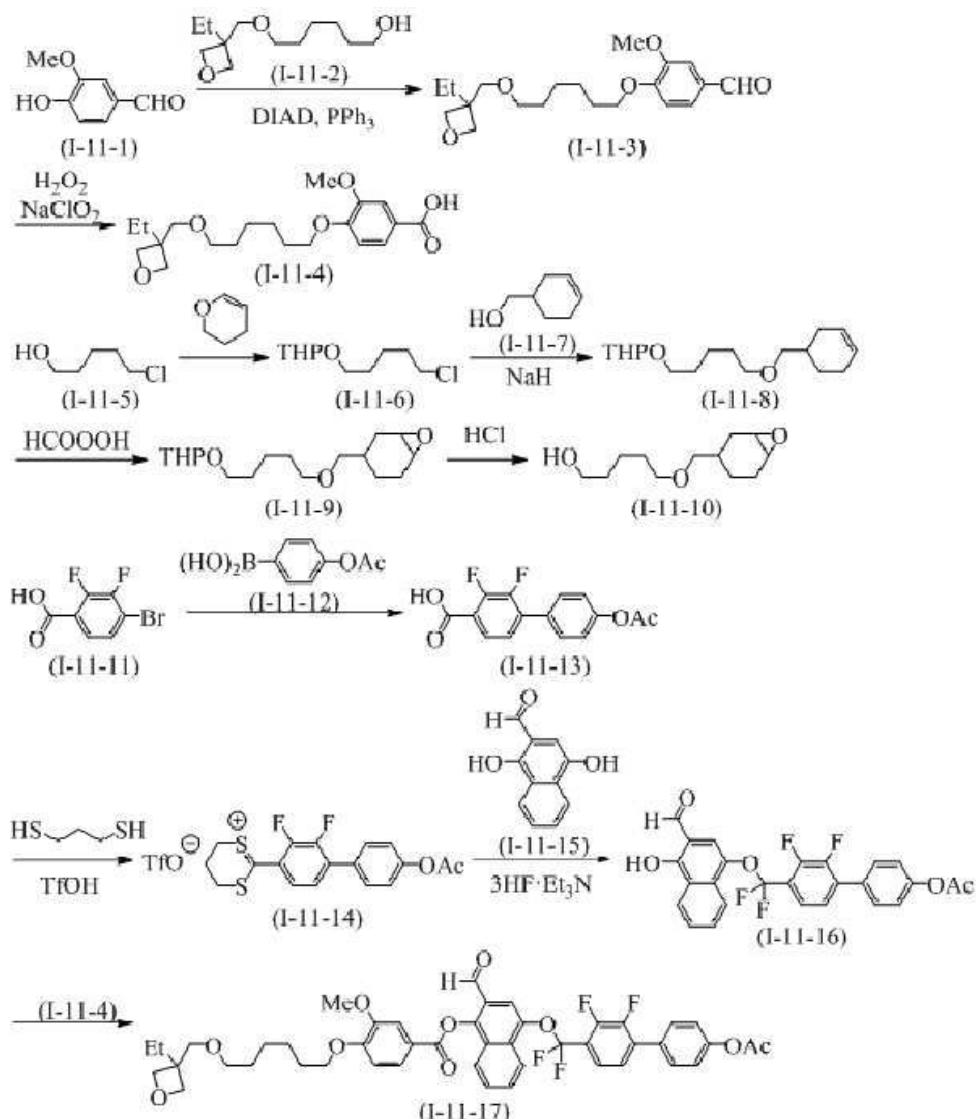
[0378] 일본국 특개2009-179563호 공보에 기재된 방법에 의해, 식 (I-10-6)으로 표시되는 화합물을 제조했다. 식 (I-10-5)로 표시되는 화합물, 식 (I-10-6)으로 표시되는 화합물, 탄산세슘, 및 디메틸설포시드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-10-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0379] 식 (I-10-7)로 표시되는 화합물, 디클로로메탄, 및 트리플루오로아세트산을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 디클로로메탄을 증류 제거한 후, 디이소프로필에테르를 첨가하고, 석출된 고체를 여과했다. 고체를 디이소프로필에테르로 세정하고 건조해서, 식 (I-10-8)로 표시되는 화합물을 얻었다.

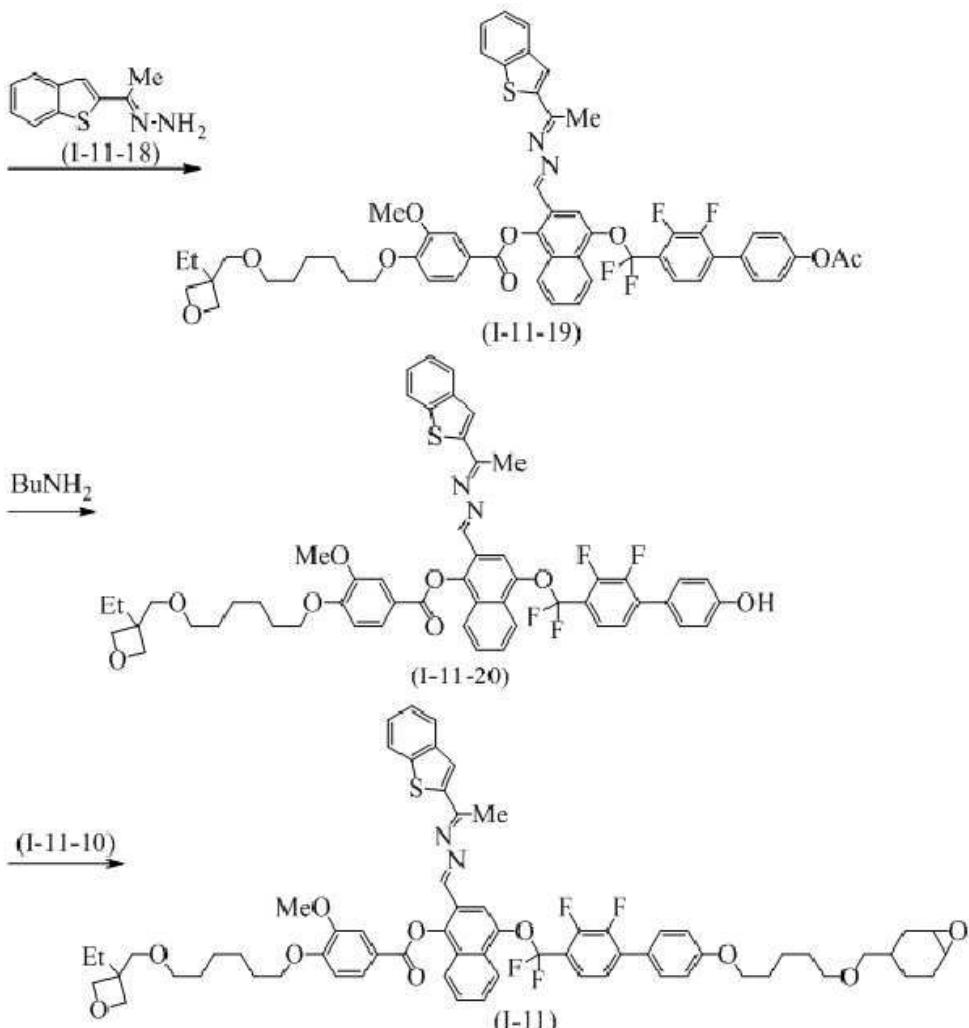
[0380] 식 (I-10-8)로 표시되는 화합물, 식 (I-1-8)로 표시되는 화합물, 탄산세슘, 및 디메틸설포시드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0381] LCMS : 1171 [M+1]

[0382] (실시예 11) 식 (I-11)로 표시되는 화합물의 제조



[0383]



[0384]

[0385] 저널 Macromolecular Chemistry and Physics(페이지 531~541, No. 7, Vol. 210, 2009)에 기재된 방법에 의해, 식 (I-11-2)로 표시되는 화합물을 얻었다. 질소 분위기 하, 식 (I-11-1)로 표시되는 화합물, 식 (I-11-2)로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 및 테트라하이드로퓨란을 첨가했다. 빙냉 하, 아조디카르복실산디이소프로필을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-11-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0386]

식 (I-11-3)으로 표시되는 화합물, 인산이수소나트륨이수화물, 메탄올, 물, 및 과산화수소수를 반응 용기에 넣었다. 아염소산나트륨 수용액을 적하한 후, 가열 교반했다. 물의 첨가에 의해 냉각하고, 침전물을 여과했다. 건조를 행하여, 식 (I-11-4)로 표시되는 화합물을 얻는다.

[0387]

질소 분위기 하, 식 (I-11-5)로 표시되는 화합물, 피리디늄 p-톨루엔설포네이트, 및 디클로로메탄을 반응 용기 에 넣었다. 빙냉 하, 3,4-디하이드로-2H-페란을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-11-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0388]

식 (I-11-7)로 표시되는 화합물, 테트라하이드로퓨란, 및 수소화나트륨을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 식 (I-11-6)으로 표시되는 화합물의 테트라하이드로퓨란 용액을 적하한 후, 가열 교반했다. 물을 적하했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-11-8)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0389]

포름산 및 과산화수소를 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 식 (I-11-8)로 표시되는 화합물의 디클로로메탄 용액을 적하한 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-11-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0390]

식 (I-11-9)로 표시되는 화합물, 메탄올, 테트라하이드로퓨란, 및 농염산을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-11-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0391]

질소 분위기 하, (I-11-11)로 표시되는 화합물, (I-11-12)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 테트라하이드로퓨란,

물, 및 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐(0)을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-11-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0392] 질소 분위기 하, 식 (I-11-13)으로 표시되는 화합물, 1,3-프로판디티올, 및 트리플루오로아세트산을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 냉각하면서, tert-부틸메틸에테르를 첨가하고, 침전물을 여과했다. 얻어진 생성물을 tert-부틸메틸에테르로 세정하고 건조해서, 식 (I-11-14)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0393] 질소 분위기 하, 식 (I-11-14)로 표시되는 화합물, 식 (I-11-15)로 표시되는 화합물, 트리에틸아민삼불화수소, 및 디클로로메탄을 -65°C까지 냉각한 반응 용기에 넣었다. 브롬을 적하한 후, 교반했다. 실온에서 수산화나트륨 수용액을 첨가하고, 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-11-16)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0394] 식 (I-11-16)으로 표시되는 화합물, 식 (I-11-4)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 삼염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-11-17)로 표시되는 화합물을 얻었다.

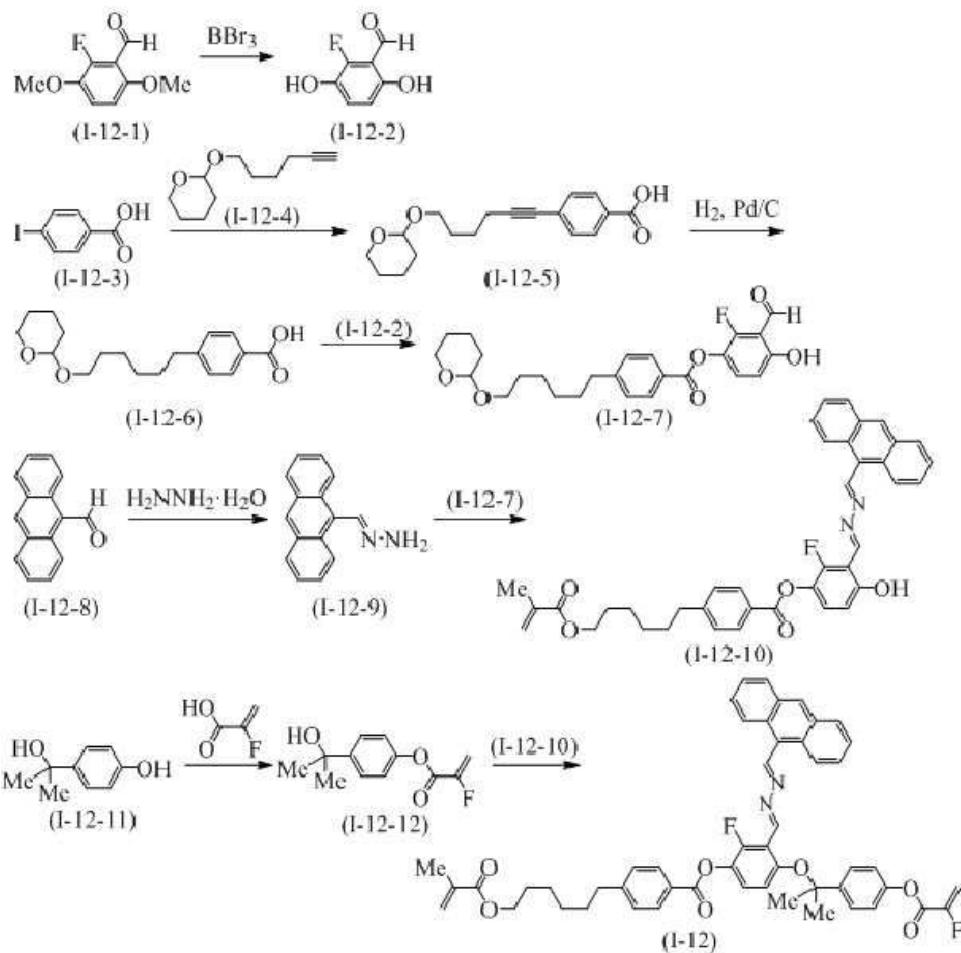
[0395] 식 (I-11-18)로 표시되는 화합물을, WO2012-141245A1에 기재된 방법에 의해 제조했다. 식 (I-11-17)로 표시되는 화합물, 식 (I-11-18)로 표시되는 화합물, (±)-10-캄퍼설폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-11-19)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0396] 식 (I-11-19)로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 및 부틸아민을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-11-20)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0397] 질소 분위기 하, 식 (I-11-20)으로 표시되는 화합물, 식 (I-11-10)으로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 및 테트라히드로퓨란을 첨가했다. 빙냉 하, 아조디카르복실산디이소프로필을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하고 재결정해서, 식 (I-11)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0398] LCMS : 1159 [M+1]

[0399] (실시예 12) 식 (I-12)로 표시되는 화합물의 제조



[0400]

[0401]

저널 Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters(페이지 1675-1681, No. 6, Vol. 15, 2005)에 기재된 방법에 의해, 식 (I-12-1)로 표시되는 화합물을 얻었다. 식 (I-12-1)로 표시되는 화합물 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 반응 용기를 -78°C까지 냉각하고, 삼브롬화붕소를 적하한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-12-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0402]

질소 분위기 하, 식 (I-12-3)으로 표시되는 화합물, 식 (I-12-4)로 표시되는 화합물, 요오드화구리(I), 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐(0), 트리에틸아민, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-12-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0403]

식 (I-12-5)로 표시되는 화합물, 5% 팔라듐탄소, 및 테트라히드로퓨란을 반응 용기에 넣었다. 수소 분위기 하, 교반했다. 촉매를 여과하고, 이어서 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 식 (I-12-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0404]

식 (I-12-6)으로 표시되는 화합물, 식 (I-12-2)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-12-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0405]

히드라진일수화물 및 에탄올을 반응 용기에 넣었다. 식 (I-12-8)로 표시되는 화합물의 테트라히드로퓨란 용액을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-12-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0406]

식 (I-12-9)로 표시되는 화합물, 식 (I-12-7)로 표시되는 화합물, (\pm)-10-캄페실폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-12-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0407]

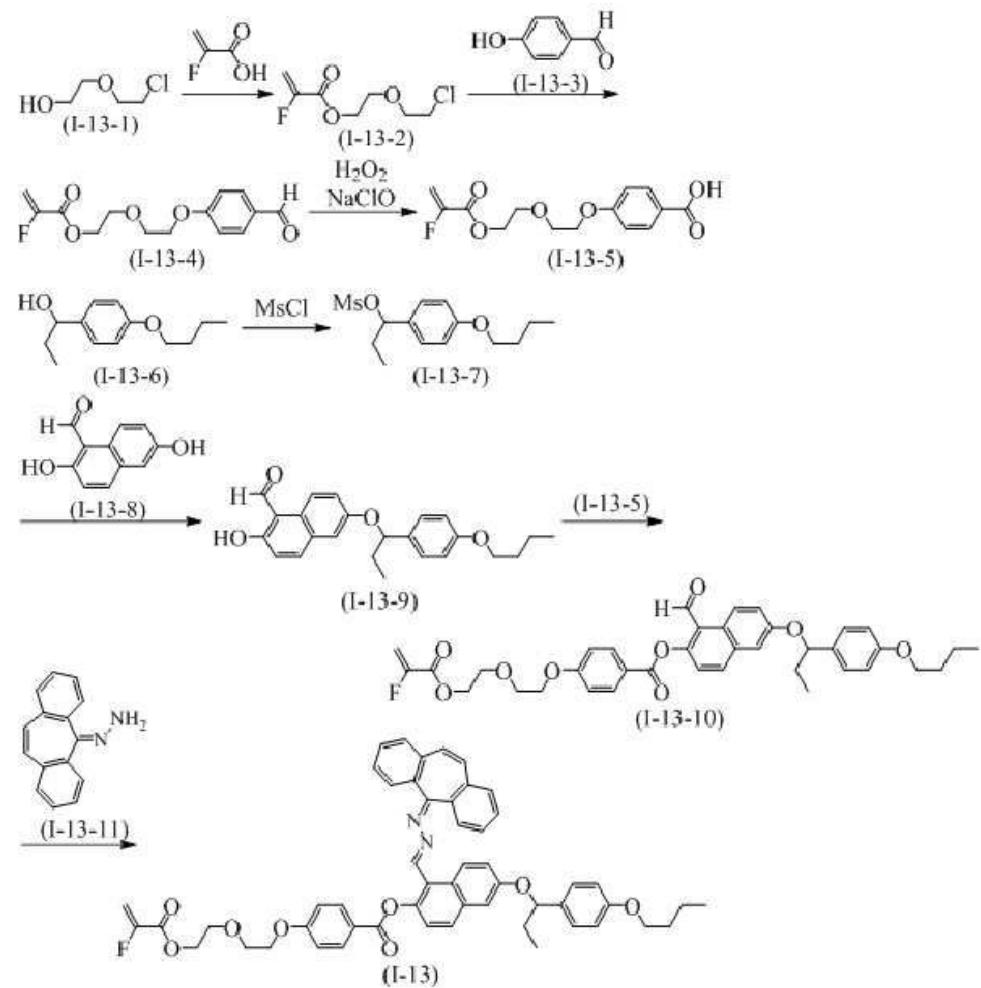
식 (I-12-11)로 표시되는 화합물, 2-플루오로아크릴산, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그

래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-12-12)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0408] 질소 분위기 하, 식 (I-12-12)로 표시되는 화합물, 식 (I-12-10)으로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 및 태트라히드로퓨란을 첨가했다. 빙냉 하, 아조디카르복실산디이소프로필을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하고 재결정해서, 식 (I-12)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0409] LCMS : 837 [M+1]

[0410] (실시예 13) 식 (I-13)으로 표시되는 화합물의 제조



[0411]

[0412] 질소 분위기 하, 2-플루오로아크릴산, 식 (I-13-1)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-13-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0413]

식 (I-13-2)로 표시되는 화합물, 식 (I-13-3)으로 표시되는 화합물, 탄산세슘, 및 디메틸설폐시드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-13-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0414]

식 (I-13-4)로 표시되는 화합물, 인산이수소나트륨이수화물, 메탄올, 물, 및 과산화수소수를 반응 용기에 넣었다. 아염소산나트륨 수용액을 적하한 후, 가열 교반했다. 물의 첨가에 의해 냉각하고, 침전물을 여과했다. 건조를 행하여, 식 (I-13-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0415]

질소 분위기 하, 식 (I-13-6)로 나타나는 화합물, 피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화메탄설폐닐을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-13-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0416]

식 (I-13-7)로 표시되는 화합물, 식 (I-13-8)로 표시되는 화합물, 탄산세슘, 및 디메틸설폐시드를 반응 용기에

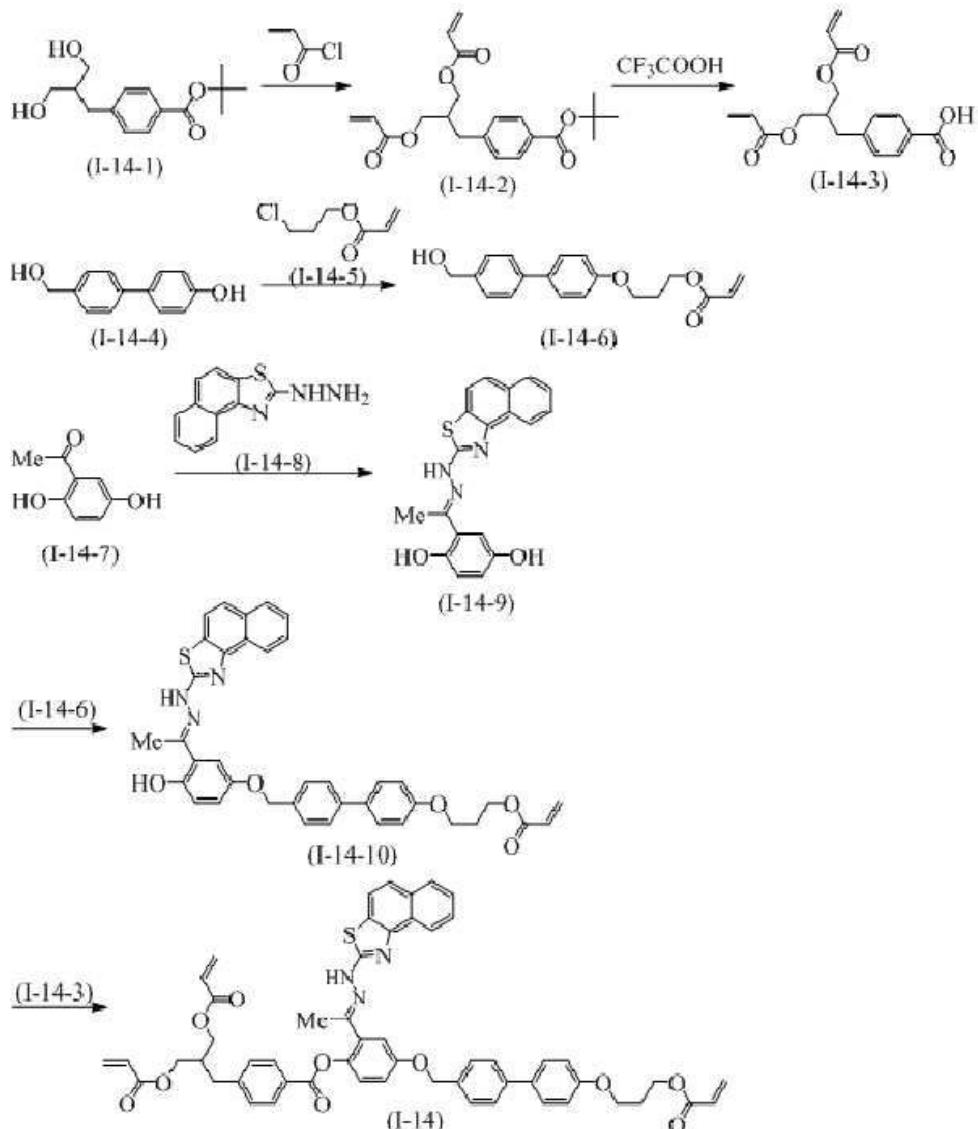
넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-13-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0417] 식 (I-13-9)로 표시되는 화합물, 식 (I-13-5)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-13-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0418] WO2012-141245A1에 기재된 방법에 의해, 식 (I-13-11)로 표시되는 화합물을 얻었다. 식 (I-13-10)으로 표시되는 화합물, 식 (I-13-11)로 표시되는 화합물, (±)-10-캄퍼설폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-13)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0419] LCMS : 861 [M+1]

[0420] (실시예 14) 식 (I-14)로 표시되는 화합물의 제조



[0421]

[0422] WO2008-010985A1에 기재된 방법에 의해, 식 (I-14-1)로 표시되는 화합물을 얻었다. 질소 분위기 하, 식 (I-14-1)로 표시되는 화합물, N-에틸디이소프로필아민, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화아크릴로일을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-14-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0423] 식 (I-14-2)로 표시되는 화합물 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 트리플루오로아세트산을 첨

가한 후, 교반했다. 용매를 증류 제거한 후, 수세, 얻어진 생성물을 물로 세정하고 건조하여, 식 (I-14-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0424] 저널 European Journal of Organic Chemistry(페이지 4482-4486, No.21, 2014)에 기재된 방법에 의해, 식 (I-14-4)로 표시되는 화합물을 제조했다. 식 (I-14-4)로 표시되는 화합물, 식 (I-14-5)로 표시되는 화합물, 탄산 세슘, 및 디메틸설폐시드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-14-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

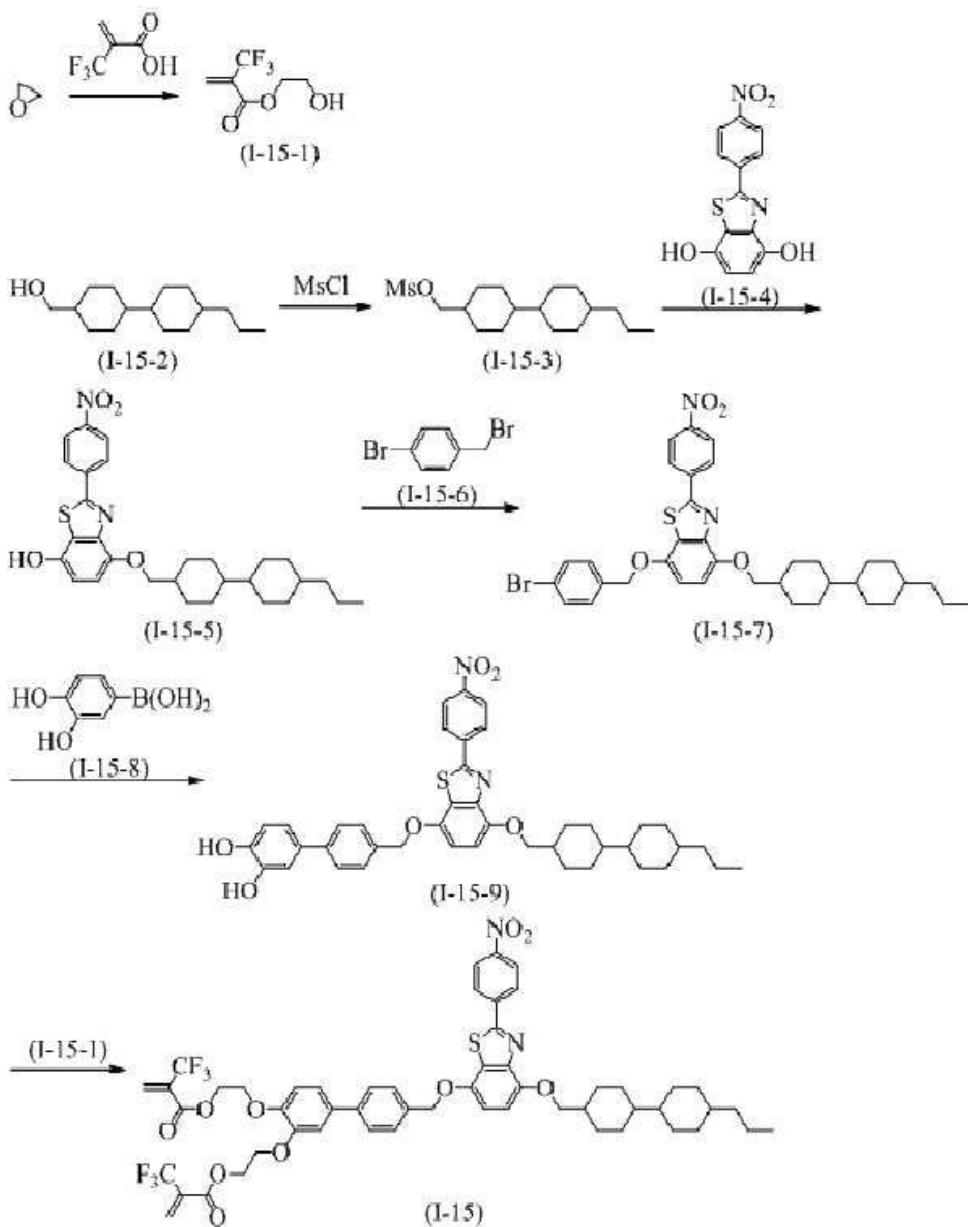
[0425] WO2014/010325A1에 기재된 방법에 의해, 식 (I-14-8)로 표시되는 화합물을 제조했다. 식 (I-14-7)로 표시되는 화합물, 식 (I-14-8)로 표시되는 화합물, 테트라하이드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 용매를 증류 제거하고, 얻어진 생성물을 건조해서, 식 (I-14-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0426] 질소 분위기 하, 식 (I-14-9)로 표시되는 화합물, 식 (I-14-6)으로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 및 테트라하이드로퓨란을 첨가했다. 빙냉 하, 아조디카르복실산디이소프로필을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-14-10)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0427] 식 (I-14-10)으로 표시되는 화합물, 식 (I-14-3)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-14)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0428] LCMS : 944 [M+1]

[0429] (실시예 15) 식 (I-15)로 표시되는 화합물의 제조



[0430]

[0431] 2-(트리플루오로메틸)아크릴레이트, 에틸렌옥사이드, 및 트리에틸아민을 오토클레이브에 넣은 후, 가열 교반했다. 감압 증류를 행하여, 식 (I-15-1)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0432]

질소 분위기 하, 식 (I-15-2)로 표시되는 화합물, 피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화메탄설포닐을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-15-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0433]

식 (I-15-3)으로 표시되는 화합물, 식 (I-15-4)로 표시되는 화합물, 탄산세슘, 및 디메틸설포시드를 반응 용기 에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-15-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0434]

식 (I-15-5)로 표시되는 화합물, 식 (I-15-6)으로 표시되는 화합물, 탄산세슘, 및 디메틸설포시드를 반응 용기 에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-15-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0435]

질소 분위기 하, 식 (I-15-7)로 표시되는 화합물, 식 (I-15-8)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 테트라하이드로퓨란, 물, 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐(0)을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-15-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0436]

질소 분위기 하, 식 (I-15-9)로 표시되는 화합물, 식 (I-15-1)로 표시되는 화합물, 트리페닐포스핀, 및 테트라

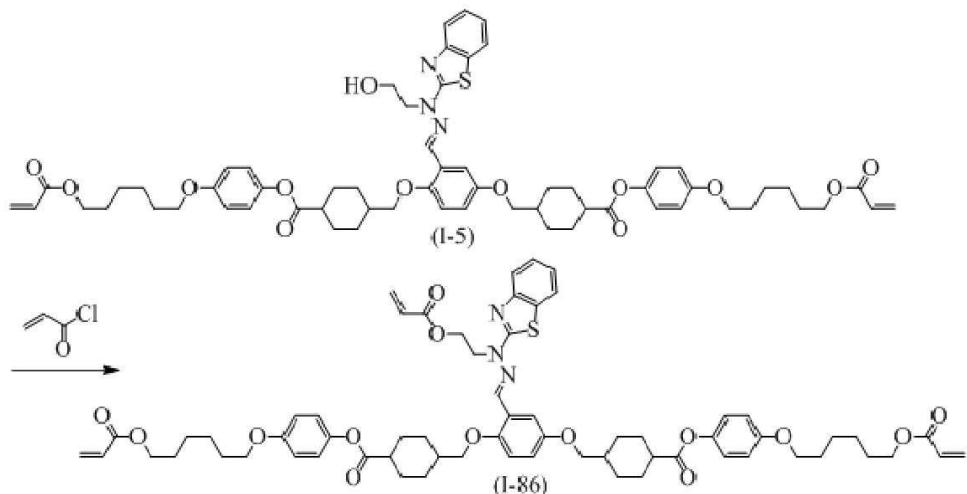
히드로퓨란을 첨가했다. 빙냉 하, 아조디카르복실산디이소프로필을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-15)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0437]

LCMS : 1039 [M+1]

[0438]

(실시예 16) 식 (I-86)으로 표시되는 화합물의 제조



[0439]

[0440]

질소 분위기 하, 식 (I-5)로 표시되는 화합물, N-에틸디이소프로필아민, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화아크릴로일을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-86)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0441]

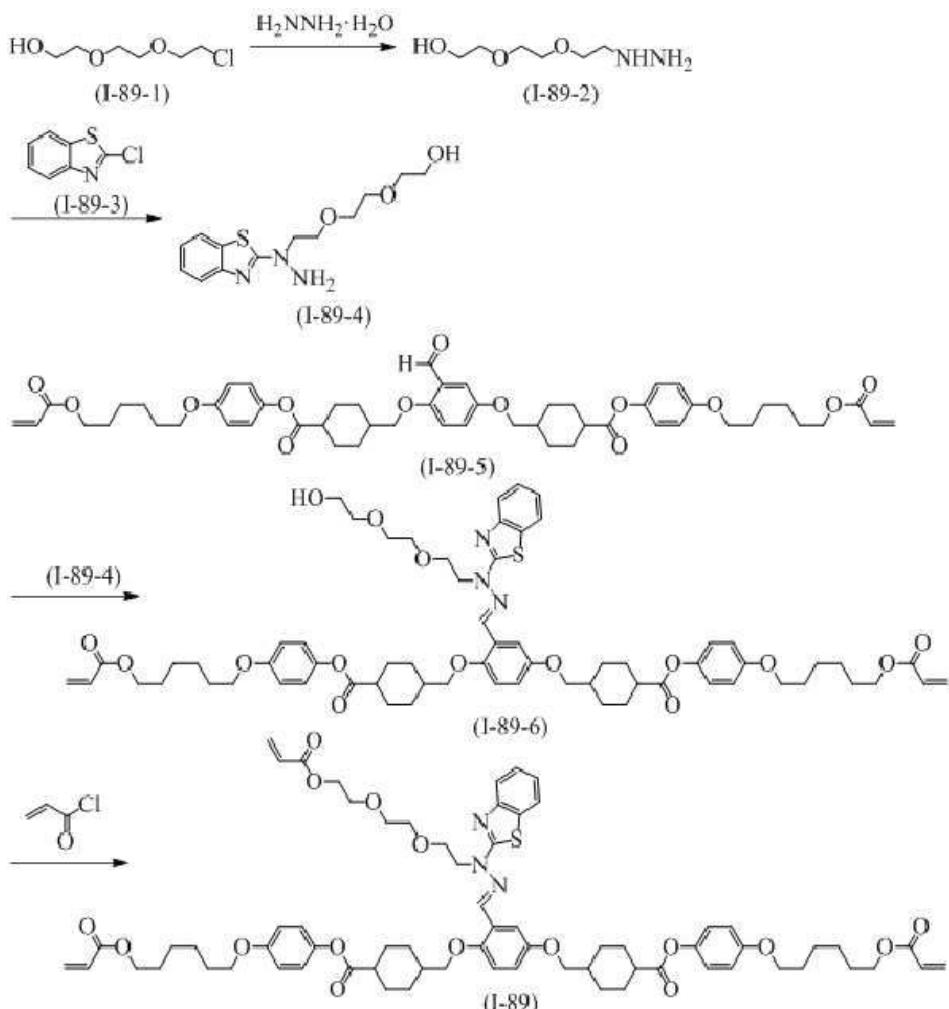
전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 122 N 142 I

[0442]

¹H NMR(CDCl₃) δ 1.24(m, 4H), 1.48(m, 8H), 1.60-1.83(m, 12H), 1.93(m, 2H), 2.08(t, 4H), 2.23(m, 4H), 2.54(m, 2H), 3.86(dd, 4H), 3.94(t, 4H), 4.17(t, 4H), 4.53(t, 2H), 4.65(t, 2H), 5.78(dd, 1H), 5.82(dd, 2H), 6.08(dd, 1H), 6.12(dd, 2H), 6.39(dd, 1H), 6.40(dd, 2H), 6.88(m, 6H), 6.97(dd, 4H), 7.16(t, 1H), 7.34(t, 1H), 7.54(d, 1H), 7.66(d, 1H), 7.70(d, 1H), 8.36(s, 1H) ppm.

[0443]

(실시예 17) 식 (I-89)로 표시되는 화합물의 제조



[0444]

[0444] 히드라진일수화물 및 에탄올을 질소 퍼지한 반응 용기에 넣었다. 가열하면서, 식 (I-89-1)로 표시되는 화합물을 적하한 후, 교반했다. 얻어진 생성물을 농축하여, 식 (I-89-2)로 표시되는 화합물을 포함하는 혼합물을 얻었다.

[0446]

[0446] 질소 분위기 하, 식 (I-89-3)으로 표시되는 화합물, 1,2-디메톡시에탄, 트리에틸아민, 및 식 (I-89-2)로 표시되는 화합물을 포함하는 혼합물을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반한다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 회색하고, 물 및 심염수로 세정했다. 이 용액을 황산나트륨으로 건조하고 용매를 농축해서, 식 (I-89-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0447]

[0447] 식 (I-89-5)로 표시되는 화합물, 식 (I-89-4)로 표시되는 화합물, (±)-10-캄퍼설론산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-89-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0448]

[0448] 질소 분위기 하, 식 (I-89-6)으로 표시되는 화합물, N-에틸디이소프로필아민, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화아크릴로일을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-89)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0449]

전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 71 N 115 I

[0450]

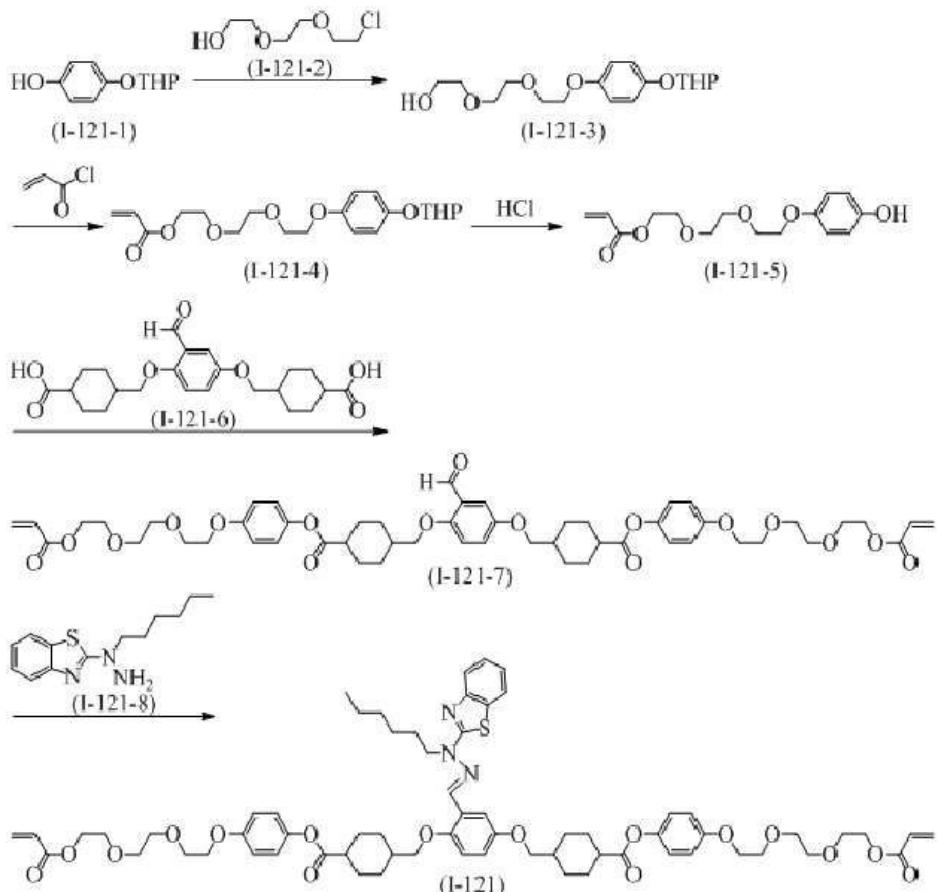
¹H NMR(CDCl₃) δ 1.19–1.29(m, 4H), 1.41–1.82(m, 22H), 1.91(m, 2H), 2.08(m, 4H), 2.24(m, 4H), 2.53(m, 2H), 3.62(m, 3H), 3.67(m, 2H), 3.84–3.90(m, 5H), 3.94(t, 4H), 4.15–4.19(m, 6H), 4.53(t, 2H), 5.76(dd, 1H), 5.82(dd, 2H), 6.08(dd, 1H), 6.12(dd, 2H), 6.37(dd, 1H), 6.40(dd, 2H), 6.84–6.90(m, 6H), 6.95–6.98(m, 4H), 7.14(t, 1H), 7.32(t, 1H), 7.53(d, 1H), 7.65(d, 1H), 7.69(d, 1H), 8.34(s, 1H)ppm.

[0451]

LCMS : 1244 [M+1]

[0452]

(실시예 18) 식 (I-121)로 표시되는 화합물의 제조



[0453]

[0454]

식 (I-121-1)로 표시되는 화합물, 식 (I-121-2)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-121-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0455]

질소 분위기 하, 식 (I-121-3)으로 표시되는 화합물, N-에틸디이소프로필아민, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화아크릴로일을 첨가한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(알루미나) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-121-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0456]

식 (I-121-4)로 표시되는 화합물, 테트라히드로퓨란, 메탄올, 및 농염산을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 건조를 행하여, 식 (I-121-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0457]

식 (I-121-5)로 표시되는 화합물, 식 (I-121-6)으로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노피리딘, 및 디클로로메탄을 질소 퍼지한 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-121-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0458]

식 (I-121-7)로 표시되는 화합물, 식 (I-121-8)로 표시되는 화합물, (±)-10-캄퍼설폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-121)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0459]

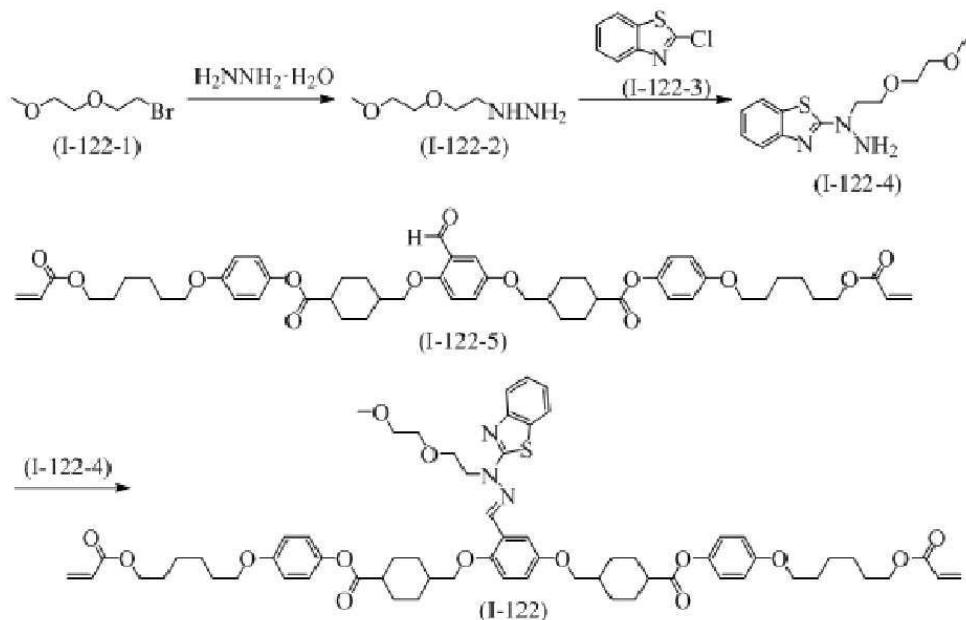
전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 77 S 90 N 109 I

[0460]

¹H NMR(CDCl₃) δ 0.89(t, 3H), 1.20–1.35(m, 10H), 1.61–1.69(m, 6H), 1.78(m, 2H), 1.90(m, 2H), 2.07(t, 4H), 2.23(d, 4H), 2.50(m, 2H), 3.69–3.76(m, 12H), 3.83–3.87(m, 8H), 4.11(t, 4H), 4.32(t, 6H), 5.82(d, 2H), 6.15(q, 2H), 6.42(d, 2H), 6.83–6.98(m, 10H), 7.13(t, 1H), 7.32(t, 1H), 7.53(t, 1H), 7.66(t, 2H), 8.13(s, 1H) ppm.

[0461]

(실시예 19) 식 (I-122)로 표시되는 화합물의 제조



[0462]

[0463] 질소 분위기 하, 히드라진일수화물 및 에탄올을 반응 용기에 넣었다. 식 (I-122-1)로 표시되는 화합물을 첨가한 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 농축하여, 식 (I-122-2)로 표시되는 화합물을 포함하는 혼합물을 얻었다.

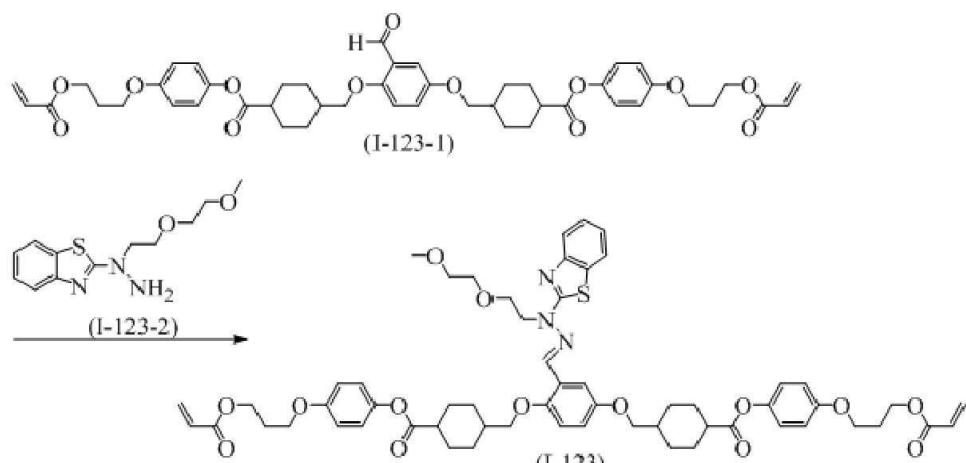
[0464] 질소 분위기 하, 식 (I-122-3)으로 표시되는 화합물, 1,2-디메톡시에탄, 트리에틸아민, 및 식 (I-122-2)로 표시되는 화합물을 포함하는 혼합물을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 물 및 심염수로 세정했다. 이 용액을 황산나트륨으로 건조하고, 용매를 농축해서, 식 (I-122-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0465] 식 (I-122-5)로 표시되는 화합물, 식 (I-122-4)로 표시되는 화합물, (\pm)-10-캄페슬폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-122)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0466] 전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 85 N 128 I

[0467] ^1H NMR(CDCl₃) δ 1.22–1.28(m, 4H), 1.44–1.47(m, 8H), 1.60–1.82(m, 12H), 1.90(m, 2H), 2.07(t, 4H), 2.24(d, 4H), 2.53(m, 2H), 3.30(s, 3H), 3.50(t, 2H), 3.66(t, 2H), 3.85–3.89(m, 6H), 3.93(t, 4H), 4.17(t, 4H), 4.53(t, 2H), 5.82(d, 2H), 6.13(q, 2H), 6.40(d, 2H), 6.83–6.90(m, 6H), 6.95–6.98(m, 4H), 7.14(t, 1H), 7.32(t, 1H), 7.52(t, 1H), 7.67(t, 2H), 8.33(s, 1H) ppm.

[0468] (실시예 20) 식 (I-123)으로 표시되는 화합물의 제조



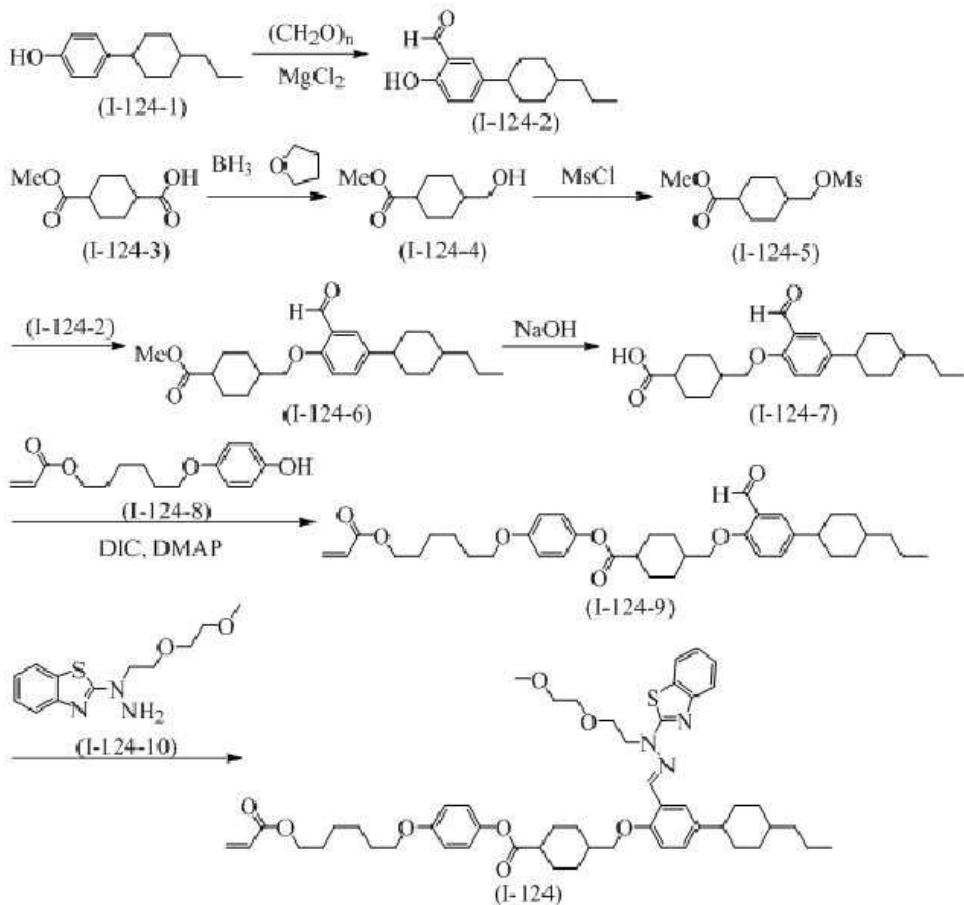
[0469]

[0470] 식 (I-123-1)로 표시되는 화합물, 식 (I-123-2)로 표시되는 화합물, (土)-10-캄페실폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-123)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0471] 전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 89-95 N 145 I

[0472] ^1H NMR(CDCl_3) δ 1.24(m, 4H), 1.65(m, 4H), 1.91(m, 2H), 2.05-2.25(m, 12H), 2.55(m, 2H), 3.30(s, 3H), 3.51(m, 2H), 3.67(m, 2H), 3.84-3.89(m, 6H), 4.05(t, 4H), 4.36(t, 4H), 4.54(t, 2H), 5.84(dd, 2H), 6.13(dd, 2H), 6.41(dd, 2H), 6.84-6.89(m, 6H), 6.97-7.00(m, 4H), 7.14(t, 1H), 7.33(t, 1H), 7.52(d, 1H), 7.67(dd, 2H), 8.34(s, 1H) ppm.

[0473] (실시예 21) 식 (I-124)로 표시되는 화합물의 제조



[0474]

[0475] 식 (I-124-1)로 표시되는 화합물, 염화마그네슘, 파라포름알데하이드, 트리에틸아민, 아세토니트릴을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 아세트산에틸로 희석하고, 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-124-2)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0476] 질소 분위기 하, 식 (I-124-3)으로 표시되는 화합물 및 테트라히드로퓨란을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 보란-테트라히드로퓨란 착체(0.9mol/L)를 적하한 후, 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 용매를 농축해서, 식 (I-124-4)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0477] 질소 분위기 하, 식 (I-124-4)로 표시되는 화합물, 피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 염화메탄설포닐을 적하한 후, 실온에서 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-124-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0478] 식 (I-124-5)로 표시되는 화합물, 식 (I-124-2)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-124-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0479] 식 (I-124-6)으로 표시되는 화합물, 메탄올, 및 수산화나트륨 수용액을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 염산으로 중화하고, 아세트산에틸로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-124-7)로 표시되는 화합물을 얻었다.

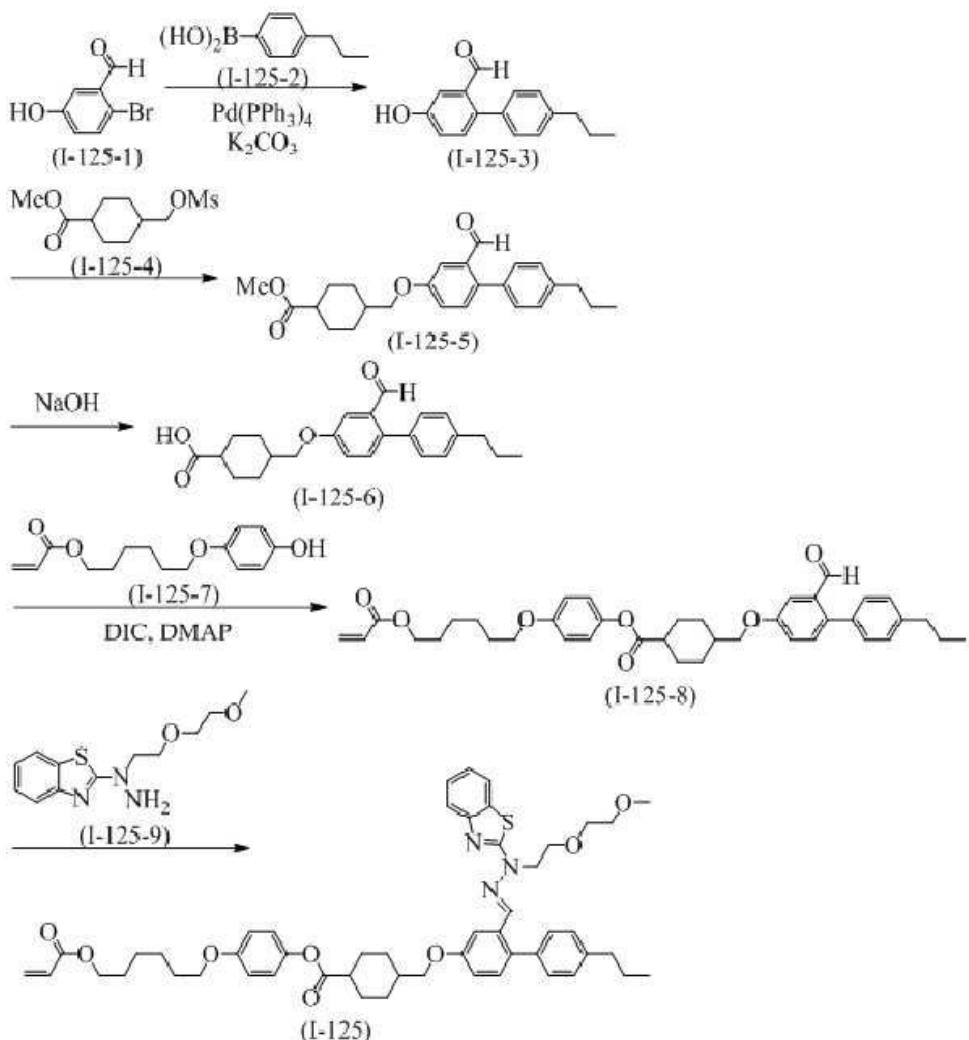
[0480] 식 (I-124-7)로 표시되는 화합물, 식 (I-124-8)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노페리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-124-9)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0481] 식 (I-124-9)로 표시되는 화합물, 식 (I-124-10)으로 표시되는 화합물, (土)-10-캄퍼설폰산, 테트라히드로큐란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-124)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0482] 전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 101-105(N 82) I

[0483] ^1H NMR(CDC₁₃) δ 0.92(t, 3H), 1.08–1.91(m, 26H), 2.06(d, 2H), 2.24(d, 2H), 2.51(m, 2H), 3.30(s, 3H), 3.51(dd, 2H), 3.67(dd, 2H), 3.87(quin, 4H), 3.94(t, 2H), 4.17(t, 2H), 4.54(t, 2H), 5.82(dd, 1H), 6.12(dd, 1H), 6.40(dd, 1H), 6.86(m, 3H), 6.97(m, 2H), 7.16(m, 2H), 7.32(t, 1H), 7.65(d, 1H), 7.70(d, 1H), 7.82(d, 1H), 8.36(s, 1H) ppm.

[0484] (실시예 22) 식 (I-125)로 표시되는 화합물의 제조



[0485]

[0486] 질소 분위기 하, 식 (I-125-1)로 표시되는 화합물, 식 (I-125-2)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 에탄올, 물, 및 테트라카스(트리페닐포스핀) 팔라듐(0)을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 통상의 후처리를 행한 후, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔)에 의해 정제하여, 식 (I-125-3)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0487] 식 (I-125-3)으로 표시되는 화합물, 식 (I-125-4)로 표시되는 화합물, 탄산칼륨, 및 N,N-디메틸포름아미드를 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 디클로로메탄으로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-125-5)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0488] 식 (I-125-5)로 표시되는 화합물, 메탄올, 및 수산화나트륨 수용액을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 얻어진 생성물을 염산으로 중화하고, 아세트산에틸로 희석하고, 이어서 물 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(알루미나)에 의해 정제하여, 식 (I-125-6)으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0489] 식 (I-125-6)으로 표시되는 화합물, 식 (I-125-7)로 표시되는 화합물, N,N-디메틸아미노피리딘, 및 디클로로메탄을 반응 용기에 넣었다. 빙냉 하, 디이소프로필카르보디이미드를 적하한 후, 실온에서 교반했다. 침전물을 여과하고, 이어서 염산, 물, 및 심염수로 세정했다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-125-8)로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0490] 식 (I-125-8)로 표시되는 화합물, 식 (I-125-9)로 표시되는 화합물, (±)-10-캄퍼설폰산, 테트라히드로퓨란, 및 에탄올을 반응 용기에 넣은 후, 가열 교반했다. 용매를 농축하고, 칼럼 크로마토그래피(실리카겔) 및 재결정에 의해 정제하여, 식 (I-125)로 표시되는 화합물을 얻었다.

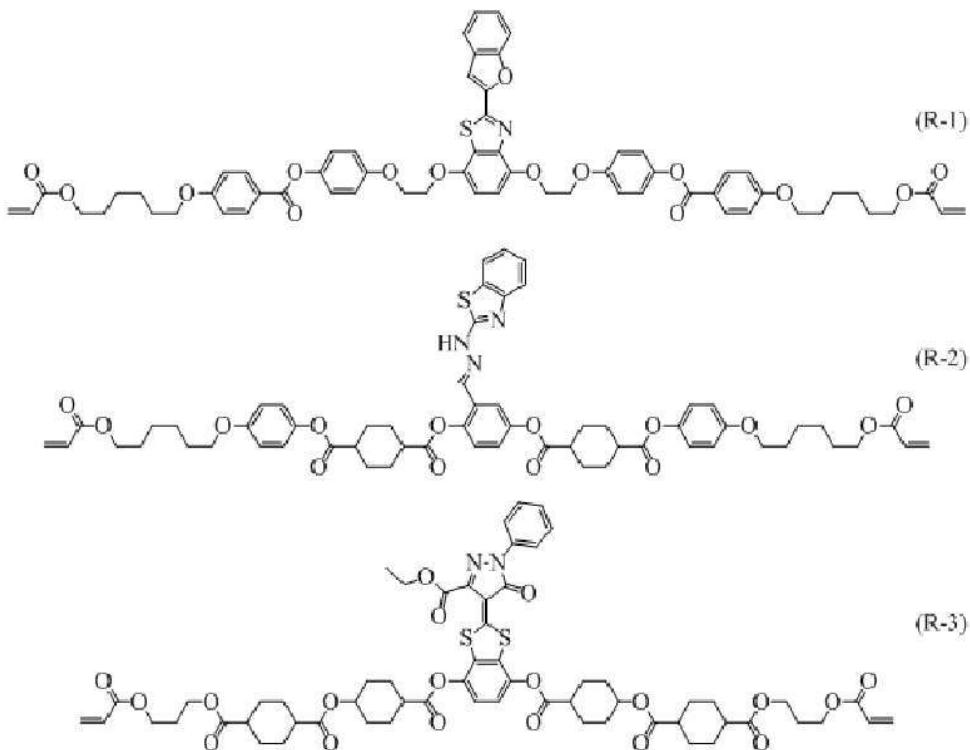
[0491] 전이 온도(승온 속도 5°C/분) C 67-100 I

[0492] ^1H NMR(CDCl_3) δ 1.00(t, 3H), 1.28(m, 2H), 1.45-1.81(m, 12H), 1.97(br, 1H), 2.13(m, 2H), 2.26(m, 2H), 2.57(tt, 1H), 2.65(t, 2H), 3.27(s, 3H), 3.37(m, 2H), 3.50(m, 2H), 3.70(t, 2H), 3.95(q, 4H), 4.17(t, 2H), 4.33(t, 2H), 5.82(dd, 1H), 6.12(dd, 1H), 6.40(dd, 1H), 6.87(d, 2H), 6.98(m, 3H), 7.15(t, 1H), 7.25(m, 5H), 7.32(t, 1H), 7.64(m, 2H), 7.69(d, 1H), 7.91(s, 1H) ppm.

[0493] 식 (I-16)~(I-85), 식 (I-87), 식 (I-88), 및 식 (I-90)~식 (I-120)으로 표시되는 화합물을 실시예 1~22 및 공지의 방법과 동일한 방법을 이용하여 제조했다.

[0494] (실시예 23~44 및 비교예 1~3)

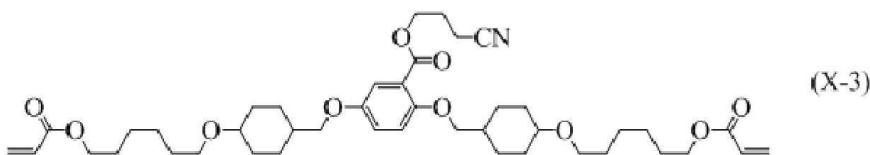
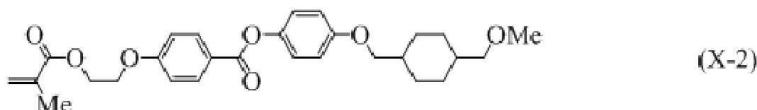
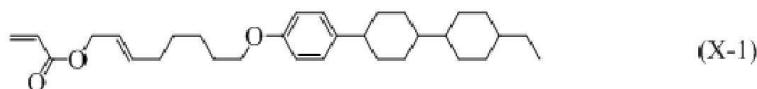
[0495] 실시예 1~22에 기재된 식 (I-1)~(I-15), 식 (I-86), 식 (I-89), 및 식 (I-121)~식 (I-125), 특허문헌 1에 기재된 화합물(R-1), 특허문헌 2에 기재된 화합물(R-2), 및 특허문헌 3에 기재된 화합물(R-3)을 평가 대상 화합물로서 마련했다.



[0496]

[0497] 또한, 일본국 특개2005-015473호 공보에 기재된 화합물(X-1) 50%, 일본국 특개평10-87565호 공보에 기재된 화

합물(X-2) 30%, 일본국 특개2002-537280호 공보에 기재된 화합물(X-3) 20%를 포함하는 액정 조성물을 모액정(X)으로서 사용했다.



[0498]

[0499] 배향막용 폴리아이미드 용액을 두께 0.7mm의 유리 기재 상에 스핀 코팅하고, 100°C에서 10분간 건조하고, 이어서 200°C에서 60분간 소성해서 도막을 얻었다. 얻어진 도막을 러빙했다. 러빙 처리는, 시판의 러빙 장치를 사용해서 행했다.

[0500]

모액정(X)에 평가 대상 화합물 40%를 첨가하여 제조한 각 조성물에, 광중합 개시제 IRGACURE 907(BASF사제) 1%, 4-메톡시페놀 0.1%, 및 클로로포름 80%를 첨가해 도포액을 제조했다. 도포액을, 러빙한 유리 기재 상에 스핀 코팅에 의해 도포했다. 도포액을 80°C에서 1분간 건조시키고, 120°C에서 1분간 더 건조시켰다. 이어서, 건조한 도포액에 고압 수은 램프를 사용해서 강도 40mW/cm^2 의 자외선을 25초간 조사함으로써, 평가 대상 막을 제작했다. 평가 대상 화합물에 대한 실시예의 막 번호의 대응 관계를 이하의 표 1에 나타낸다.

표 1

[0501]

막	사용 평가 대상 화합물
실시예 23	본 발명의 화합물 (I-1)
실시예 24	본 발명의 화합물 (I-2)
실시예 25	본 발명의 화합물 (I-3)
실시예 26	본 발명의 화합물 (I-4)
실시예 27	본 발명의 화합물 (I-5)
실시예 28	본 발명의 화합물 (I-6)
실시예 29	본 발명의 화합물 (I-7)
실시예 30	본 발명의 화합물 (I-8)
실시예 31	본 발명의 화합물 (I-9)
실시예 32	본 발명의 화합물 (I-10)
실시예 33	본 발명의 화합물 (I-11)
실시예 34	본 발명의 화합물 (I-12)
실시예 35	본 발명의 화합물 (I-13)
실시예 36	본 발명의 화합물 (I-14)
실시예 37	본 발명의 화합물 (I-15)
실시예 38	본 발명의 화합물 (I-86)
실시예 39	본 발명의 화합물 (I-89)
실시예 40	본 발명의 화합물 (I-121)
실시예 41	본 발명의 화합물 (I-122)
실시예 42	본 발명의 화합물 (I-123)
실시예 43	본 발명의 화합물 (I-124)
실시예 44	본 발명의 화합물 (I-125)
비교예 1	비교 화합물 (R-1)
비교예 2	비교 화합물 (R-2)
비교예 3	비교 화합물 (R-3)

[0502]

제작한 각 막의 San 시험을, Xenon 램프 조사 시험기(San test XLS, ATLAS사제)를 사용해서, 60mW/cm^2 , 26°C 및

120J의 조건에서 행했다. 얻어진 각 막의 변색 및 배향 불량을 평가했다.

[0503] <변색>

[0504] 각 막의 황색도 지수(YI)를 측정했다. San 시험 전의 YI값과 San 시험 후의 YI값의 차이(ΔYI)를 산출했다. 황색도 지수(YI)의 측정은, JASCO UV/VIS Spectrophotometer V-560을 사용해서 행하고, 황색도 지수(YI)는 부속 컬러 진단 프로그램에 의해 산출했다. 산출식은 다음 식으로 나타난다.

$$YI = 100(1.28X-1.06Z)/Y(\text{JIS K7373})$$

[0506] (X, Y, Z는 XYZ 표색계에서의 3 자극치(stimulus value)를 나타냄). ΔYI 값이 작을수록, 변색이 적음을 의미한다.

[0507] <배향 불량>

[0508] 필름 각각을 합계 100개의 정방형(종10×횡10)의 영역으로 분할했다. 편광 현미경 관찰에 의해, 배향 결함이 발생한 그리드 수를 카운트했다. 값이 작을수록, 배향 불량이 적음을 의미한다. 그 결과를 이하의 표 2에 요약한다.

표 2

막	ΔYI	배향 결함
실시예 23	0.6	0
실시예 24	0.6	0
실시예 25	0.4	0
실시예 26	0.4	0
실시예 27	0.5	0
실시예 28	0.8	1
실시예 29	0.8	1
실시예 30	0.5	2
실시예 31	1.4	6
실시예 32	1.4	7
실시예 33	1.1	4
실시예 34	1.2	4
실시예 35	1.3	5
실시예 36	1.3	6
실시예 37	1.3	7
실시예 38	0.4	0
실시예 39	0.4	0
실시예 40	0.5	2
실시예 41	0.4	0
실시예 42	0.4	0
실시예 43	0.5	1
실시예 44	0.5	1
비교예 1	1.5	8
비교예 2	2.7	7
비교예 3	5.2	9

[0510] 표 2로부터, 실시예 23~44의 본 발명의 화합물을 사용해서 제작한 막은 모두, 자외선 조사 시, 변색 및 배향 불량이 일어나기 어려움을 알았다. 따라서, 본 발명의 화합물 각각은, 중합성 조성물의 성분으로서 유용하다. 또한, 본 발명의 화합물을 포함하는 중합성 액정 조성물을 사용한 광학 이방체는, 광학 필름 등의 용도에 유용하다.