



(21)申請案號：110128491

(22)申請日：中華民國 110 (2021) 年 08 月 03 日

(51)Int. Cl. : **C09K19/60 (2006.01)** **C09K19/30 (2006.01)**
G02B1/04 (2006.01) **G02B5/30 (2006.01)**

(30)優先權：2020/08/03 日本 2020-131810
 2020/08/03 日本 2020-131811

(71)申請人：日商三菱化學股份有限公司 (日本) MITSUBISHI CHEMICAL CORPORATION
 (JP)
 日本

(72)發明人：竹下慶 TAKESHITA, KEI (JP)；志賀靖 SHIGA, YASUSHI (JP)；秋山誠治
 AKIYAMA, SEIJI (JP)；門脇雅美 KADOWAKI, MASAMI (JP)；大澤輝恒 OSAWA,
 TERUTSUNE (JP)；大泉淳一 OIZUMI, JUNICHI (JP)；高見芳惠 TAKAMI,
 YOSHIE (JP)；小島奏也 KOJIMA, SOUYA (JP)

(74)代理人：陳長文

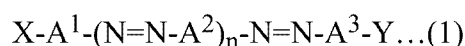
申請實體審查：無 申請專利範圍項數：20 項 圖式數：0 共 150 頁

(54)名稱

化合物、包含該化合物之異向性色素膜用組合物、異向性色素膜及光學元件

(57)摘要

本發明係一種化合物，其係以下述式(1)或下述式(11)表示。



(式(1)中，

-A¹-及-A²-分別獨立地表示可具有取代基、包含 1 個以上 S 原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之 2 價基、可具有取代基之苯并異噻唑環之 2 價基、或可具有取代基之芳香族烴環之 2 價基，

-A³-表示可具有取代基之芳香族烴環之 2 價基，

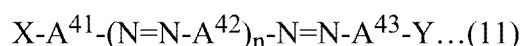
-X 表示具有分支之碳數 3 以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y 表示 1 價有機基，

n 表示 1、2 或 3；

於 n 為 2 或 3 之情形時，複數個-A²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A¹-及-A²-不會均為可具有取代基之芳香族烴環之 2 價基)



(式(11)中，

-A⁴²-之至少一者為可具有取代基且包含 1 個以上 S 原子之芳香族雜環之 2 價基，

-A⁴¹-及-A⁴³-分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之 2 價基，

-X 表示具有分支之碳數 3 以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y 表示 1 價有機基，

n 表示 1、2 或 3；

於 n 為 2 或 3 之情形時，複數個-A⁴²-彼此可相同亦可不同)

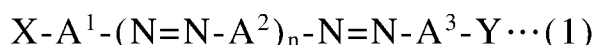
【發明摘要】

【中文發明名稱】

化合物、包含該化合物之異向性色素膜用組合物、異向性色素膜及光學元件

【中文】

本發明係一種化合物，其係以下述式(1)或下述式(11)表示。



(式(1)中，

-A¹-及-A²-分別獨立地表示可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之2價基、可具有取代基之苯并異噻唑環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

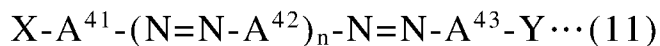
-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A¹-及-A²-不會均為可具有取代基之芳香族烴環之2價基)



(式(11)中，

-A⁴²-之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，

-A⁴¹-及-A⁴³-分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A⁴²-彼此可相同亦可不同)

【指定代表圖】

無

【代表圖之符號簡單說明】

無

【發明說明書】

【中文發明名稱】

化合物、包含該化合物之異向性色素膜用組合物、異向性色素膜及光學元件

【技術領域】

【0001】 本發明係關於一種適合用於調光元件、液晶元件(LCD)及有機電致發光元件(OLED)之顯示元件所具備之偏光膜等之化合物。又，本發明係關於一種包含該化合物之異向性色素膜形成用組合物、異向性色素膜及光學元件。

【先前技術】

【0002】 於LCD中，使用直線偏光膜及圓偏光膜以控制顯示中之旋光性或雙折射性。於OLED中，亦使用圓偏光膜以防止外界光於亮處反射。

【0003】 先前，此種偏光膜已知包括例如藉由低濃度之碘對聚乙醇(PVA)進行染色所得之偏光膜(碘-PVA偏光膜)者(專利文獻1)。然而，低濃度碘-PVA偏光板根據使用環境不同，存在碘昇華或變質導致色調發生變化之問題、或者因PVA之延伸被緩和而產生翹曲之問題。

【0004】 亦已知塗佈含有色素之液晶組合物而形成之異向性色素膜作為偏光膜發揮功能(專利文獻2)。然而，關於在波長560 nm～800 nm之範圍內具有極大吸收且兼顧充分之二色比與溶解性之二色性色素，並未進行揭示。

【0005】 關於在波長550 nm～800 nm之範圍內具有極大吸收之二色性色素，已知有將具有苯并噻唑或噻吩并噻唑骨架之色素與聚合性液晶

組合所得之異向性色素膜(專利文獻3)。然而，關於具有苯并噻唑或噻吩并噻唑骨架之色素，有於要求溶解性之異向性色素膜形成用組合物中，色素析出之虞。

【0006】 專利文獻1：日本專利特開平1-105204號公報

專利文獻2：日本專利特開2013-210624號公報

專利文獻3：日本專利特開2016-170368號公報

【0007】 <第1發明之問題>

於塗佈含有色素之液晶組合物而形成之偏光膜中，期望即便為薄膜亦具有較高之光吸收選擇性能，於350 nm～800 nm之波長區域中不會發生漏光。因此，需要以如下方式進行調節，即，使用複數種二色性較高之色素來全面地吸收350 nm～800 nm之波長區域。然而，於此情形時，由於包含複數種色素，故組合物中之色素濃度變高，於薄膜條件下進行塗佈之情形時，相對於液晶之色素濃度變濃，由此導致色素容易析出，從而會使塗佈性能下降。

【0008】 為了抑制色素析出，需要提昇色素之溶解性。作為其方法，可例舉導入與組合物中之化合物之相溶性較高之取代基。然而，根據所導入之取代基之種類及導入位置不同，有因色素之提供吸收軸之躍遷矩與分子長軸方向所成之角度擴大而導致二色比降低之虞。又，於取代基體積過大之情形時，有因阻礙色素之分子配向而導致二色比降低之虞。

【0009】 已知於塗佈含有聚合性液晶化合物及色素之異向性色素膜形成用組合物而形成之異向性色素膜中，因色素與液晶化合物之分子間相互作用導致二色比、極大吸收波長不同。於色素與液晶化合物之組合中，色素具有適合液晶分子之分子結構較為重要。

【0010】 於此種狀況下，期待開發使所形成之異向性色素膜顯示出較高之二色性並且表現出良好之塗膜性能的色素分子及包含該色素分子之異向性色素膜形成用組合物。

【0011】 <第2發明之問題>

由低濃度之碘染色所得之碘-PVA偏光膜根據使用環境不同，存在碘昇華或變質導致色調發生變化；或者因PVA之延伸被緩和而產生翹曲等問題。

【0012】 於塗佈含有色素之液晶組合物而形成之偏光膜中，即便為薄膜亦獲得較高之光吸收選擇性能。期待於該偏光膜中，於380 nm～780 nm之波長區域中不會發生漏光。因此，需要以如下方式進行調節，即，使用複數種二色性較高之色素來全面地吸收380 nm～780 nm之波長區域。然而，於此情形時，由於包含複數種色素故組合物中之色素濃度變高，於以薄膜條件塗佈之情形時，相對於液晶之色素濃度變濃，由此導致色素容易析出，從而會使塗佈性能下降。

【0013】 作為於550 nm～800 nm之波長範圍內具有極大吸收之色素之設計方法，有導入雜環之方法。然而，為了獲得良好之二色性，所導入之雜環必須為可提高色素分子結構之直線性之雜環。雜環中，導入苯并噻唑或噻吩并噻唑骨架之情形時，分子結構之直線性呈變良好之趨勢，從而可提高二色比。但另一方面，擔心會發生如下情況，即，就分子結構而言體積較大，由此導致溶解性下降，而自異向性色素膜形成用組合物析出。又，根據所導入之雜環之種類不同，有因電子分佈不同導致分子間相互作用產生變化，從而阻礙配向之虞。

【0014】 已知於塗佈含有聚合性液晶化合物及二色性色素之組合物

而形成之偏光膜中，因色素與液晶化合物之分子間相互作用導致二色比、極大吸收波不同，從而組合具有適合所使用之液晶化合物之分子結構之二色性色素較為重要。

【0015】 於此種狀況下，期待開發如下異向性色素膜形成用組合物，該異向性色素膜形成用組合物係色素之溶解性較高而無需擔心色素等在組合物中析出等，故而塗佈性能良好，所獲得之異向性色素膜表現出較高之二色性。

【發明內容】

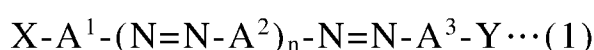
【0016】 第1發明之目的在於提供一種兼顧較高之二色性與較高之溶解度之化合物。

又，第1發明之目的在於提供一種包含該化合物之異向性色素膜形成用組合物、異向性色素膜及光學元件。

【0017】 第1發明藉由具有特定結構之化合物來解決上述問題。

第1發明具有以下形態。

【0018】 [1]一種化合物，其係以下述式(1)或下述式(11)表示。



(式(1)中，

-A¹-及-A²-分別獨立地表示可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之2價基、可具有取代基之苯并異噻唑環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

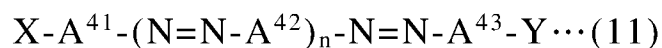
-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A¹-及-A²-不會均為可具有取代基之芳香族烴環之2價基)



(式(11)中，

-A⁴²-之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，

-A⁴¹-及-A⁴³-分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A⁴²-彼此可相同亦可不同)

【0019】 [2]如[1]所記載之化合物，其中於上述式(1)中，包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環為噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環或苯并噻唑環。

【0020】 [3]如[1]或[2]所記載之化合物，其中於上述式(1)中，-A³-為可具有取代基之伸苯基。

【0021】 [4]如[1]至[3]中任一項所記載之化合物，其中於上述式(1)中，-A²-為可具有取代基之伸苯基。

【0022】 [5]如[1]至[4]中任一項所記載之化合物，其中於上述式(1)中，-Y為-O-R^x或-N(-R^y)-R^x。

其中，-R^x及-R^y分別獨立地表示可具有分支之碳數1~15之烷基、構

成環之原子數為5~14之環烷基或構成環之原子數為5~14之芳基，

-R^x及-R^y亦可一體地形成環，

該可具有分支之碳數1~15之烷基及該構成環之原子數為5~14之芳基亦可分別具有取代基；

該可具有分支之碳數1~15之烷基、構成環之原子數為5~14之環烷基或-R^x及-R^y一體地形成之環所包含之一個或一個以上亞甲基可為由-O-、-S-、-NH-、-N(R^z)-、-C(=O)-、-C(=O)-O-、-C(=O)-NH-、-CHF-、-CF₂-、-CHCl-、-CCl₂-、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基或縮水甘油氧基取代之結構，

R^z表示碳數1~6之直鏈狀或分支狀烷基。

【0023】 [6]如[1]至[5]中任一項所記載之化合物，其中於上述式(11)中，於n為2或3之情形時，-A⁴²-分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基、或可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基。

【0024】 [7]如[1]至[6]中任一項所記載之化合物，其中於上述式(11)中，-A⁴²-之芳香族雜環為噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、異噻唑環、1,3,4-噻二唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噻唑環或苯并噻唑環。

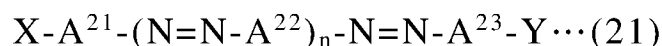
【0025】 [8]如[1]至[7]中任一項所記載之化合物，其中於上述式(11)中，-A⁴³-為可具有取代基之伸苯基。

【0026】 [9]如[1]至[8]中任一項所記載之化合物，其中於上述式(11)中，-A⁴¹-為可具有取代基之伸苯基。

【0027】 [10]一種異向性色素膜形成用組合物，其包含如[1]至[9]中

任一項所記載之化合物及聚合性液晶化合物。

【0028】 [11]一種異向性色素膜形成用組合物，其包含下述式(21)所表示之化合物及聚合性液晶化合物。



(式(21)中，

-A²¹-及-A²²-分別獨立地表示可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A²³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A²²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A²¹-及-A²²-中之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基)

【0029】 第2發明之目的在於提供如下異向性色素膜形成用組合物，該異向性色素膜形成用組合物係色素之溶解性較高而無需擔心色素等在組合物中析出等，故而塗佈性能良好，所獲得之異向性色素膜可實現較高之二色性，尤其是，於550～800 nm之波長區域中，可實現充分之二色比。

又，第2發明之目的在於提供一種具有優異之光學性能、尤其是充分之二色比之異向性色素膜及光學元件。

【0030】 第2發明藉由使用包含具有特定結構之色素及聚合性液晶化合物之異向性色素膜形成用組合物，來解決上述問題。

第2發明具有以下形態。

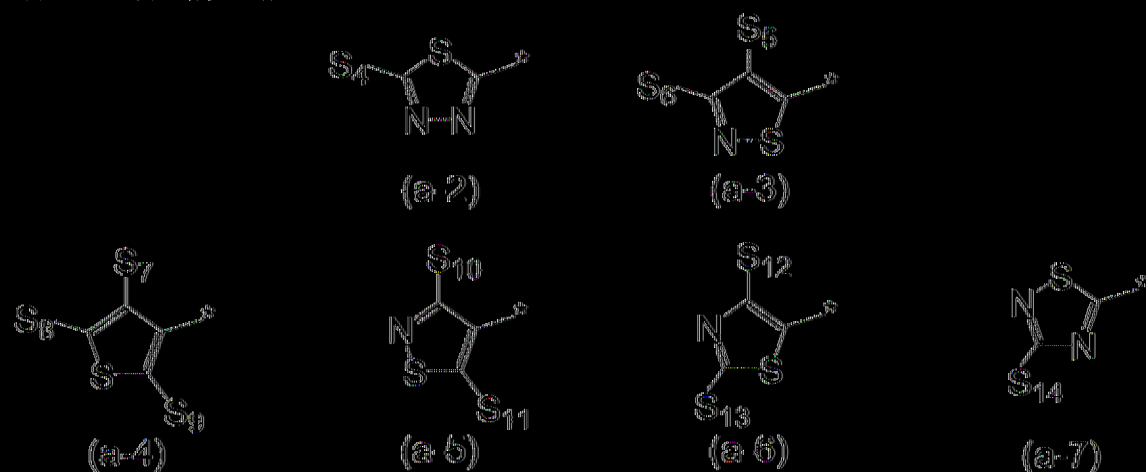
〔0031〕〔12〕一種異向性色素膜形成用組合物，其包含下述式(31)所表示之化合物及聚合性液晶化合物。



(式(31)中，

--A³¹表示可具有取代基之下述式(a-2)～(a-7)之任一者所表示之基(於下述式(a-2)～(a-7)中，*表示-N側之鍵，S₄～S₁₄表示具有取代基之情形時之取代位置)

〔0032〕〔化1〕



〔0033〕--A³²表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基或可具有取代基之芳香族雜環之2價基，

--A³³表示可具有取代基之仲苯基，

--Y表示1價有機基，

m表示1、2或3；

於m為2或3之情形時，複數個--A³²彼此可相同亦可不同)

〔0034〕〔13〕如〔12〕所記載之異向性色素膜形成用組合物，其中於上述式(31)中，--A³²為可具有取代基之芳香族烴環之2價基。

【0035】 [14]如[12]或[13]所記載之異向性色素膜形成用組合物，其中於上述式(3)中，-Y為-O-R^x或-N(-R^y)-R^x。

其中，-R^x及-R^y分別獨立地表示可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷基或構成環之原子數為5～14之芳基，

-R^x及-R^y亦可一體地形成環，

該可具有分支之碳數1～15之烷基及該構成環之原子數為5～14之芳基亦可分別具有取代基；

該可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷基或-R^x及-R^y一體地形成之環所包含之一個或一個以上亞甲基可為由-O-、-S-、-NH-、-N(R^z)-、-C(=O)-、-C(=O)-O-、-C(=O)-NH-、-CHF-、-CF₂-、-CHCl-、-CCl₂-、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基或縮水甘油氧基取代之結構，

R^z表示碳數1～6之直鏈狀或分支狀烷基。

【0036】 又，第1發明與第2發明具有以下共通形態。

【0037】 [15]如[10]至[14]中任一項所記載之異向性色素膜形成用組合物，其中上述聚合性液晶化合物所具有之環結構之數量(r_{n1})與上述式(1)、上述式(11)、上述式(21)或上述式(31)所表示之化合物所具有之環結構之數量(r_{n2})的比(r_{n1}/r_{n2})為0.7～1.5。

【0038】 [16]如[10]至[15]中任一項所記載之異向性色素膜形成用組合物，其中上述聚合性液晶化合物為具有碳-碳三鍵之化合物。

【0039】 [17]如[10]至[16]中任一項所記載之異向性色素膜用組合物，其進而包含如下色素，該色素於350 nm～800 nm之波長區域之吸收曲線中顯示出最大值之波長較上述式(1)、上述式(11)、上述式(21)或上述

式(31)所表示之化合物於350 nm～800 nm之波長區域之吸收曲線中顯示出最大值之波長更短。

【0040】 [18]一種異向性色素膜，其係使用如[10]至[17]中任一項所記載之異向性色素膜形成用組合物而形成。

【0041】 [19]一種光學元件，其包含如[18]所記載之異向性色素膜。

【0042】 [20]一種異向性色素膜之製造方法，其具有將如[10]至[17]中任一項所記載之異向性色素膜形成用組合物塗佈於基板之步驟。

[發明之效果]

【0043】 第1發明之化合物係具有體積較大之取代基且兼顧較高之二色性與溶解度者。

第1發明之異向性色素膜形成用組合物由於包含此種本發明之化合物，故而可抑制化合物析出，謀求塗佈性能提昇，並且實現較高之二色比。

第1發明之異向性色素膜由於係使用本發明之異向性色素膜形成用組合物而形成，故而具有複數個極大吸收，可實現優異之塗膜性及優異之光學性能。

第1發明之光學元件由於包含本發明之異向性色素膜，故而具有複數個極大吸收，可實現優異之塗膜性及優異之光學性能。

【0044】 第2發明之異向性色素膜形成用組合物由於色素之溶解性較高而無需擔心色素等在組合物中析出等，故而塗佈性能良好，所獲得之異向性色素膜可實現較高之二色性。因此，根據第2發明之異向性色素膜形成用組合物，能夠以較高之生產性提供具有優異之光學性能尤其是於

550~800 nm之波長區域中具有充分之二色比之異向性色素膜。

【0045】 根據本發明之異向性色素膜及光學元件，可實現優異之光學性能、尤其是充分之二色比。

【實施方式】

【0046】 以下，對本發明之實施方式進行具體說明。本發明並不限定於以下實施方式，可於其主旨範圍內進行各種變更而實施。

【0047】 如上所述，本發明包含第1發明及第2發明。將第1發明及第2發明稱為「本發明」。

【0048】 <異向性色素膜>

本發明中所謂異向性色素膜，係於選自異向性色素膜之厚度方向及任意正交之面內2個方向之立體座標系統中之合計3個方向的任意2個方向上之電磁性質具有異向性之色素膜。作為電磁性質，例如可例舉吸收、折射等光學性質、電阻、電容等電性質。

作為具有吸收、折射等光學異向性之膜，例如可例舉直線偏光膜、圓偏光膜等偏光膜、相位差膜、導電異向性色素膜。本發明之異向性色素膜較佳為用作偏光膜或導電異向性色素膜，更佳為用於偏光膜。

【0049】 <異向性色素膜形成用組合物>

本發明之異向性色素膜形成用組合物包含色素及聚合性液晶化合物。

本發明之異向性色素膜形成用組合物可為溶液，亦可為液晶，還可為分散狀態，只要為不引起相分離之狀態即可，就容易塗佈於基材之觀點而言，異向性色素膜形成用組合物較佳為溶液。另一方面，就如下所述配向於基板上之觀點而言，自異向性色素膜形成用組合物中去除溶劑後之固

形物成分較佳為於任意溫度下均為液晶相狀態。

【0050】 於本發明中，所謂液晶相之狀態，具體而言，據「液晶之基礎與應用」(松本正一、角田市良著；1991年)第1～16頁所載，係顯示出液體與結晶兩者或中間之性質之液晶狀態，有向列相、層列相、膽固醇相或圓盤相。

【0051】 <色素>

於本發明中，所謂色素，係吸收可見光區域(350 nm～800 nm)之波長之至少一部分之物質或化合物。

作為本發明中可使用之色素，可例舉二色性色素。再者，二色性色素係指具有分子之長軸方向上之吸光度與短軸方向上之吸光度不同之性質之色素。又，色素可為具有液晶性之色素，亦可不具有液晶性。再者，所謂具有液晶性，係指於任意溫度下均表現出液晶相。

【0052】 [第1發明之化合物]

第1發明之化合物係下述式(1)或下述式(11)所表示之新穎化合物。



(式(1)中，

-A¹-及-A²-分別獨立地表示可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之2價基、可具有取代基之苯并異噻唑環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A¹-及-A²-不會均為可具有取代基之芳香族烴環之2價基)



(式(11)中，

-A⁴²-之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，

-A⁴¹-及-A⁴³-分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A⁴²-彼此可相同亦可不同)

【0055】 又，下述第1發明之異向性色素膜形成用組合物包含聚合性液晶化合物及下述式(21)所表示之化合物。



(式(21)中，

-A²¹-及-A²²-分別獨立地表示可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A²³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A²²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A²¹-及-A²²-中之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原

子之芳香族雜環之2價基)

【0057】 以下，將式(1)所表示之化合物稱為「化合物(1)」。將式(11)所表示之化合物稱為「化合物(11)」。將式(21)所表示之化合物稱為「化合物(21)」。將化合物(1)、化合物(11)、化合物(21)總稱為「第1發明之化合物」。

【0058】 (-X)

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基(-R)、烷氧基(-O-R)或烷基硫基(-S-R)。基於與第1發明中所使用之聚合性液晶化合物之分子配向變良好之觀點，-X之碳數較佳為3以上15以下，更佳為3以上10以下。

【0059】 作為-R，例如可例舉：1-甲基乙基、1,1-二甲基乙基、1-甲基丙基、2-甲基丙基、1,2-二甲基丙基、2,2-二甲基丙基、1,2,2-三甲基丙基、1-甲基丁基、2-甲基丁基、3-甲基丁基、3,3-二甲基丁基、1,3,3-三甲基丁基、2,3,3-三甲基丁基、2,2,3-三甲基丁基、1,2,2-三甲基丁基、4-甲基戊基、3-甲基戊基、2-甲基戊基、1-甲基戊基、4,4-二甲基戊基、3,3-二甲基戊基、2,2-二甲基戊基、2,4-二甲基戊基、1,4-二甲基戊基、3,4,4-三甲基戊基、2,4,4-三甲基戊基、1,4,4-三甲基戊基、3,3,4-三甲基戊基、2,3,3-三甲基戊基、1,3,3-三甲基戊基、2,2,4-三甲基戊基、2,2,3-三甲基戊基、1,2,2-三甲基戊基、5-甲基己基、4-甲基己基、3-甲基己基、2-甲基己基、1-甲基己基、5,5-二甲基己基、4,4-二甲基己基、3,3-二甲基己基、2,2-二甲基己基、1,5-二甲基己基、1,4-二甲基己基、3,5,5-三甲基己基、5-甲基庚基、6-甲基辛基、3-甲基辛基、1-甲基辛基、1-甲基壬基等。

【0060】 上述之中，就第1發明之化合物之分子配向變良好之觀點

而言，較理想為於-R末端側具有分支之結構，較佳為：2-甲基丙基、3-甲基丁基、3,3-二甲基丁基、2,3,3-三甲基丁基、4-甲基戊基、3-甲基戊基、2-甲基戊基、4,4-二甲基戊基、3,3-二甲基戊基、2,4-二甲基戊基、3,4,4-三甲基戊基、2,4,4-三甲基戊基、3,3,4-三甲基戊基、2,3,3-三甲基戊基、5-甲基己基、4-甲基己基、3-甲基己基、2-甲基己基、5,5-二甲基己基、4,4-二甲基己基、3,3-二甲基己基、3,5,5-三甲基己基、5-甲基庚基、6-甲基辛基、3-甲基辛基、1-甲基辛基、1-甲基壬基。

【0061】 就使與第1發明中所使用之聚合性液晶化合物之分子配向變良好之觀點而言，-X較佳為不具有環烷基結構。

又，就使與第1發明中所使用之聚合性液晶化合物之分子配向變良好之觀點而言，-X較佳為不包含下述聚合性基。

另一方面，就提昇異向性色素膜之機械強度之觀點而言，-X較佳為包含下述聚合性基。

【0062】 (-A¹-，-A²-，-A³-，-A⁴¹-，-A⁴²-，-A⁴³-，-A²¹-，-A²²-，-A²³-)

於式(1)中，-A¹-及-A²-分別獨立地表示可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之2價基、可具有取代基之苯并異噻唑環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基。

其中，-A¹-及-A²-不會均為可具有取代基之芳香族烴環之2價基。

【0063】 於式(11)中，-A⁴²-之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，

-A⁴¹-及-A⁴³-分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基。

【0064】 於式(21)中， $-A^{21}$ -及 $-A^{22}$ -分別獨立地表示可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

$-A^{23}$ -表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基。

其中， $-A^{21}$ -及 $-A^{22}$ -中之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基。

【0065】 可具有取代基且包含1個以上S原子之2價芳香族雜環基：

可具有取代基且包含1個以上S原子之2價芳香族雜環基之芳香族雜環基係單環或縮合之芳香族雜環基。該芳香族雜環之碳數並無特別限定，較佳為4以上20以下。

【0066】 作為該芳香族雜環，可例舉：噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、異噻唑環、1,3,4-噻二唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噻唑環、苯并噻唑環等。其中，就第1發明之化合物之分子配向變良好之觀點而言，較佳為噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、異噻唑環、1,3,4-噻二唑環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噻唑環或苯并噻唑環。以下所示之結構由於第1發明之化合物之吸收躍遷矩呈與色素之長軸方向一致之趨勢而可提高二色比，故而更佳。(下述結構中之*1表示式(1)中之-X側或-N側之鍵，*2表示-N側之鍵)

【0067】 [化2]

-SH、-S-R^A、三氟甲基、胺磺醯基、羧基、氰基、硝基、鹵素。此處，-R^A及-R^B分別獨立地表示碳數1~15之直鏈狀或分支狀烷基。基於與第1發明中所使用之聚合性液晶化合物之分子配向變良好之觀點，-R^A及-R^B之碳數較佳為1以上12以下，更佳為1以上9以下。

【0072】該直鏈狀或分支狀烷基所包含之一個或一個以上亞甲基可為由醚性氧原子、硫醚性硫原子、胺性氮原子(-NH-、-N(R^z)-：此處，R^z表示碳數1~6之直鏈狀或分支狀烷基，較佳為碳數1~4之直鏈狀或分支狀烷基)、羰基、酯鍵、醯胺鍵、-CHF-、-CF₂-、-CHCl-、-CCl₂-取代之結構，亦可經丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、縮水甘油氧基之聚合性基取代。

【0073】其中，芳香族烴環之2價基中容許之取代基較佳為：-R^A、-O-R^A、三氟甲基、氟基。作為-R^A，例如可例舉：正丙基、正丁基、正戊基、正己基、正庚基、正辛基、5,5-二甲基-3-甲基己基等。藉由具有上述取代基，第1發明之化合物之色素之分子配向呈變良好之趨勢。

【0074】於式(1)中，-A¹-及-A²-分別獨立地為可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之2價基、可具有取代基之苯并異噻唑環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基(其中，-A¹-及-A²-不會均為可具有取代基之芳香族烴環之2價基)，此處，作為可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環，可例舉：噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并噻唑環。尤其是，於-A²-為可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之情形時，就可提高分子直線性之觀

點而言，較佳為噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環。

【0075】 式(1)中之 $-A^2-$ 、 $-A^3-$ 分別獨立地較佳為可具有取代基之伸苯基。

【0076】 於式(11)中， $-A^{42}-$ 之至少一個為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，作為該芳香族雜環，較佳為噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、異噻唑環、1,3,4-噻二唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噻唑環、苯并噻唑環，更佳為苯并噻吩環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并噻唑環，就提高分子直線性之觀點而言，進而較佳為噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環。

【0077】 於式(11)中，於n為2或3之情形時，2個或3個 $-A^{42}-$ 中之至少1個為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，剩餘 $-A^{12}-$ 分別獨立地較佳為可具有取代基之芳香族烴環之2價基、或可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基。

【0078】 於式(11)中， $-A^{41}-$ 、 $-A^{43}-$ 分別獨立地較佳為可具有取代基之伸苯基。

【0079】 於式(21)中， $-A^{23}-$ 較佳為可具有取代基之伸苯基。

【0080】 於式(21)中， $-A^{21}-$ 、 $-A^{22}-$ 之至少一個為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，作為該芳香族雜環，更佳為噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、異噻唑環、1,3,4-噻二唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噻

唑環、苯并噻唑環，就提高分子直線性之觀點而言，進而較佳為噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環。

【0081】於式(21)中， $-A^{21}$ -及 $-A^{22}$ -中包含可具有取代基之芳香族烴環之2價基之情形時，該基較佳為可具有取代基之伸苯基。

【0082】(-Y)

-Y表示1價有機基。

【0083】作為-Y中之1價有機基，可例舉：氫原子、羥基、胺基、氰基、胺甲醯基、硝基、鹵素原子、 $-R^x$ 、 $-O-R^x$ 、 $-NH-R^x$ 、 $-N(-R^y)-R^x$ 、 $-C(=O)-R^x$ 、 $-C(=O)-O-R^x$ 、 $-C(=O)-NH-R^x$ 、 $-C(=O)-N(-R^y)-R^x$ 、 $-O-C(=O)-R^x$ 、 $-NH-C(=O)-R^x$ 、 $-N(-R^y)-C(=O)-R^x$ 等。 $-R^x$ 及 $-R^y$ 分別獨立地表示可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷基或構成環之原子數為5～14之芳基。 $-R^x$ 及 $-R^y$ 亦可為一體地形成碳數2～15之環，較佳為一體地形成碳數2～10之環。

就使與第1發明中所使用之聚合性液晶化合物之分子配向良好之觀點而言，-Y中之1價有機基較佳為不具有下述聚合性基。另一方面，就提昇異向性色素膜之機械強度之觀點而言，-Y中之1價有機基較佳為具有下述聚合性基。

【0084】可具有分支之碳數1～15之烷基較佳為碳數1～6，構成環之原子數為5～14之環烷基較佳為構成環之原子數為5～10，構成環之原子數為5～14之芳基較佳為構成環之原子數為5～10。

【0085】可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷基及構成環之原子數為5～14之芳基亦可分別具有取代基。

又，可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環

烷基、或- R^x 及- R^y 一體地形成之環所包含之一個或一個以上亞甲基可為由-O-、-S-、-NH-、-N(R^z)-、-C(=O)-、-C(=O)-O-、-C(=O)-NH-、-CHF-、-CF₂-、-CHCl-、-CCl₂-取代(displace)之結構，亦可為由丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、縮水甘油氧基之聚合性基取代之結構。此處， R^z 表示碳數1~6之直鏈狀或分支狀烷基。

【0086】 作為- R^x 及- R^y 中之可具有分支之碳數1~15之烷基中容許之取代基，可例舉：-OH、-O- R^f 、-O-C(=O)- R^f 、-NH₂、-NH- R^f 、-N(- R^g)- R^f 、-C(=O)- R^f 、-C(=O)-O- R^f 、-C(=O)-NH₂、-C(=O)-NH- R^f 、-C(=O)-N(- R^g)- R^f 、-SH、-S- R^f 、胺磺醯基、羧基、氰基、硝基、鹵素等。此處，- R^f 及- R^g 分別獨立地表示碳數1~15之直鏈狀或分支狀烷基，較佳為碳數1~10之直鏈狀或分支狀烷基。

上述碳數1~15之直鏈狀或分支狀烷基所包含之一個或一個以上亞甲基可為由-O-、-S-、-NH-、-N(R^h)-、-C(=O)-、-C(=O)-O-、-C(=O)-NH-、-CHF-、-CF₂-、-CHCl-、-CCl₂-取代(displace)之結構，亦可為由丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、縮水甘油氧基之聚合性基取代之結構。再者， R^h 表示碳數1~6之直鏈狀或分支狀烷基。

其中，- R^x 及- R^y 中之可具有分支之碳數1~15之烷基中容許之取代基較佳為-O- R^f ，例如可例舉：甲氧基、乙氧基、正丙氧基、正丁氧基、正戊氧基、正己氧基、正庚氧基、正辛氧基、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、縮水甘油氧基等。

【0087】 作為- R^x 及- R^y 中之構成環之原子數為5~14之環烷基或芳基中容許之取代基，可例舉：- R^i 、-OH、-O- R^i 、-O-C(=O)- R^i 、-NH₂、-NH- R^i 、-N(- R^j)- R^i 、-C(=O)- R^i 、-C(=O)-O- R^i 、-C(=O)-NH₂、-C(=O)-

NH-R^i 、 $-\text{C}(=\text{O})-\text{N}(-\text{R}^j)-\text{R}^i$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{S-R}^i$ 、三氟甲基、胺磺醯基、羧基、氰基、硝基、鹵素。 $-\text{R}^i$ 及 $-\text{R}^j$ 分別獨立地表示碳數1~10之直鏈狀或分支狀烷基，較佳為碳數1~5之直鏈狀或分支狀烷基。

【0088】其中， $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ 中之構成環之原子數為5~14之環烷基或芳基中容許之取代基較佳為 $-\text{R}^i$ 、 $-\text{O-R}^i$ ，例如可例舉：甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、正庚基、正辛基、2-乙基己基、甲氧基、乙氧基、正丙氧基、正丁氧基、正戊氧基、正己氧基、正庚氧基、正辛氧基、2-乙基己氧基、5,5-二甲基-3-甲基己氧基等。

【0089】作為 $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ 之構成環之原子數為5~14之環烷基之環烷烴環，可例舉：環丙烷環、環丁烷環、環戊烷環、環己烷環、環庚烷環、環辛烷環、環己烯環、降莰烷環、莰烷環、金剛烷環、四氫萘環、二環[2.2.2]辛烷環等。

【0090】作為 $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ 之構成環之原子數為5~14之芳基，可例舉作為式(1)之 $-\text{A}^1$ -中之芳香族雜環、 $-\text{A}^2$ -及 $-\text{A}^3$ -中之芳香族烴環例示之環之1價基。

【0091】作為 $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ ，較佳為可具有分支之碳數1~15之烷基，或者較佳為 $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ 一體地形成可具有取代基之碳數2~15之環。進而，更佳為可具有分支之碳數1~6之烷基，或者更佳為 $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ 一體地形成碳數2~10之環；進而較佳為可具有分支之碳數1~3之烷基，或者進而較佳為 $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ 一體地形成碳數2~6之環；尤佳為不具有分支之碳數1~3之烷基，或者尤佳為 $-\text{R}^x$ 及 $-\text{R}^y$ 一體地形成碳數2~6之環。藉由如上所述，第1發明之化合物之分子配向呈變良好之趨勢。

【0092】 $-\text{Y}$ 中之1價有機基較佳為 $-\text{R}^x$ 、 $-\text{O-R}^x$ 、 $-\text{O-C}(=\text{O})-\text{R}^x$ 、-

$C(=O)-O-R^x$ 、 $-N(-R^y)-R^x$ ，更佳為 $-O-R^x$ 、 $-O-C(=O)-R^x$ 、 $-N(-R^y)-R^x$ ，進而較佳為 $-O-R^x$ 、 $-N(-R^y)-R^x$ ，尤佳為 $-N(-R^y)-R^x$ 。作為 $-N(-R^y)-R^x$ ，具體可例舉：二甲胺基、二乙胺基、二正丙胺基、乙基甲基胺基、甲基丙基胺基、氮雜環丁基、吡咯啉基、哌啉基、氮雜環庚烷基、嗎啉基、哌啶基、硫代嗎啉基作為較佳之基，更佳為二乙胺基、吡咯啉基、哌啉基。藉由如上所述，第1發明之化合物之吸收之躍遷矩與化合物之長軸方向一致，故而二色性呈變良好之趨勢。

【0093】 (n)

n表示1、2或3。

n較佳為1或2，更佳為1。藉由如上所述，第1發明之化合物之分子配向呈變良好之趨勢。

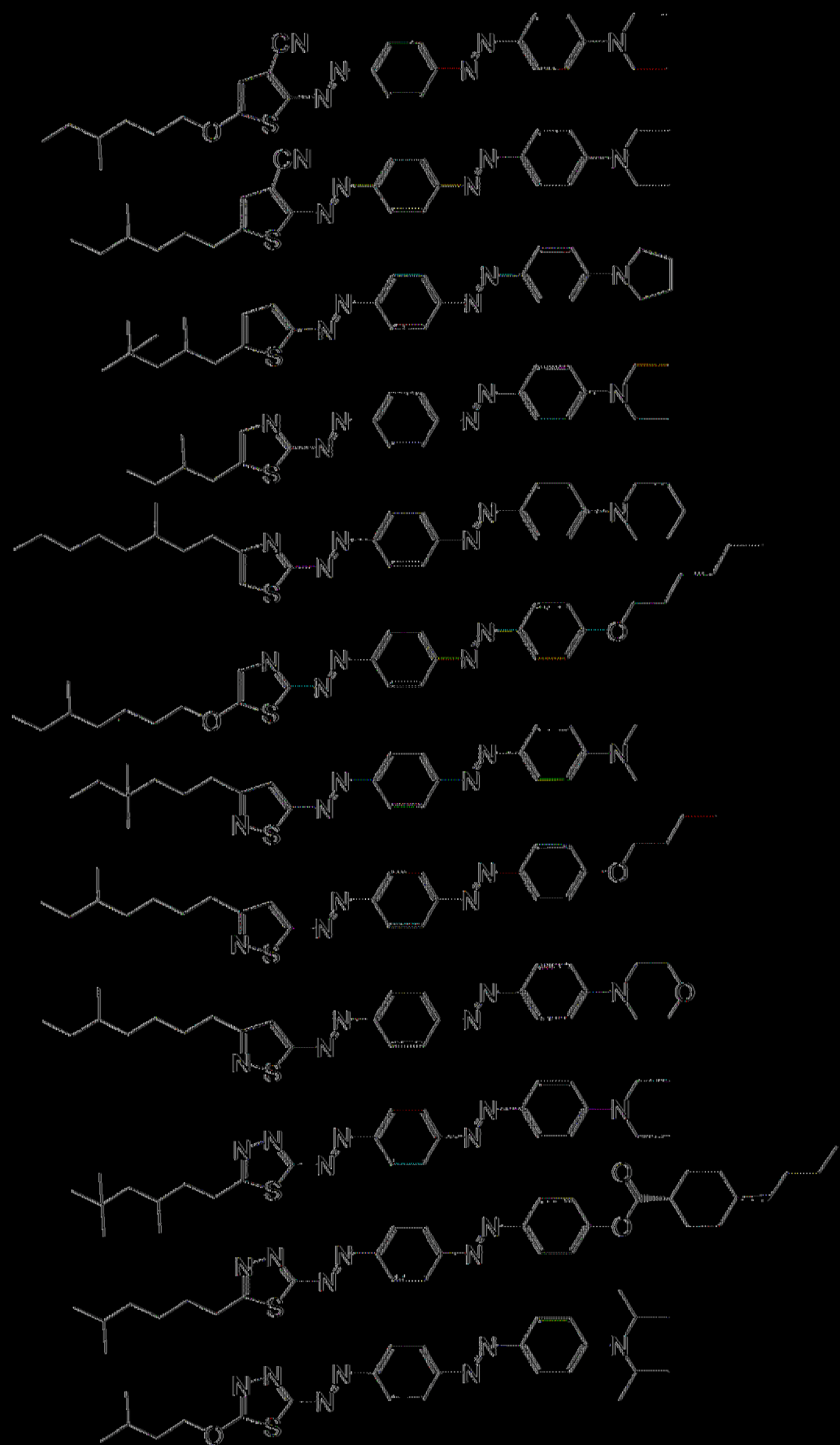
於n為2或3之情形時，各 $-A^2-$ 、 $-A^{42}-$ 、 $-A^{22}-$ 可相同亦可不同。

【0094】 基於提高第1發明之化合物之直線性之觀點，式(1)、式(11)、式(21)中之 $-N=N-$ 較佳為反型。

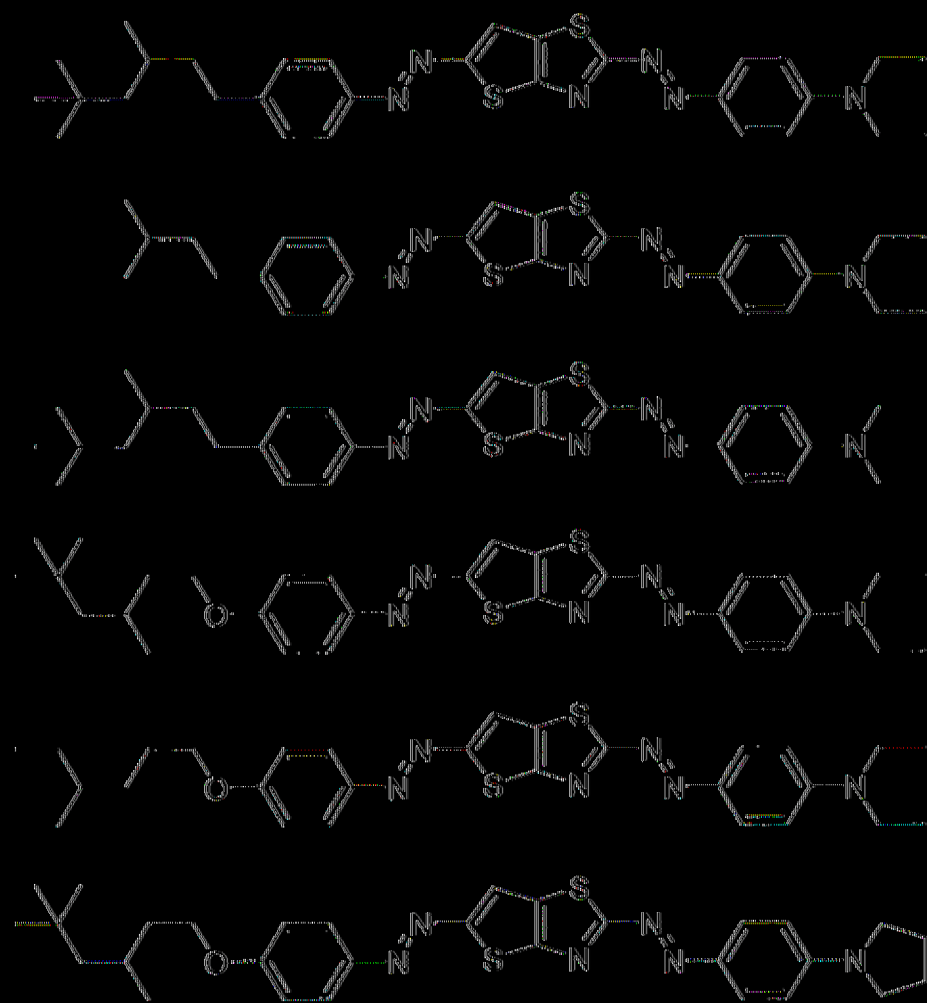
【0095】 (第1發明之化合物之具體例)

作為第1發明之化合物之具體例，可例舉以下化合物，但並不限定於該等。

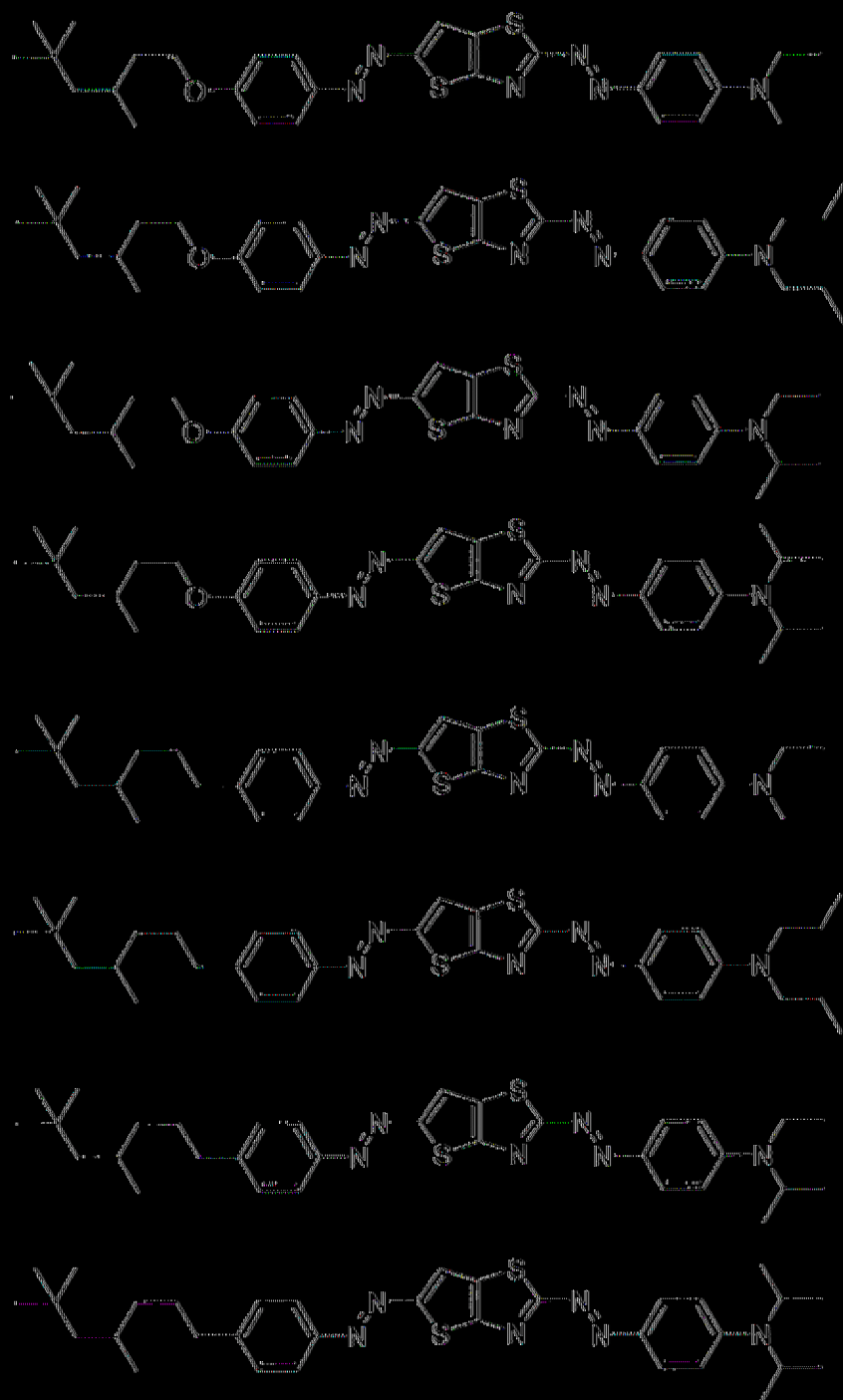
【0096】 [化3]



[(009')| [144]



[(0099)] [1:6]



[(0100)] (吸收特性)

第1發明之化合物於藉由下述方法製成之異向性色素膜中，可於350～800 nm之波長範圍內具有極大吸收(λ_{max1})，較佳為於50～800 nm之波長範圍內具有極大吸收，更佳為於510～750 nm之波長範圍內具有極大吸收，進而較佳為於510～700 nm之波長範圍內具有極大吸收。藉由在該波長範圍內具有極大吸收(λ_{max1})，於與在更短波長側具有極大吸收之色

素組合之情形時，呈可全面地吸收350～800 nm之波長範圍之趨勢。

【0101】 第1發明之化合物較佳為，相較於溶解於溶劑進行測定所得之極大吸收($\lambda_{\max 2}$)，異向性色素膜中之極大吸收(上述 $\lambda_{\max 1}$)存在於更長波長中。該長波長位移係因第1發明之化合物分散於聚合性液晶化合物及/或具有基於聚合性液晶化合物之單元之聚合物中而表現出之現象，表示第1發明之化合物與聚合性液晶化合物及/或具有基於聚合性液晶化合物之單元之聚合物強烈地發生分子間相互作用。長波長位移係指吸收極大之差量($\lambda_{\max 1} - \lambda_{\max 2}$)為正值，該差較佳為10 nm以上，更佳為20 nm以上。

【0102】 (溶解度)

第1發明之化合物之溶解度並無特別限定，於甲苯中之溶解度較佳為0.3質量%以上，更佳為0.4質量%以上。藉由溶解度為上述下限以上，呈可獲得良好之塗膜性能之趨勢。

【0103】 [第2發明之化合物]

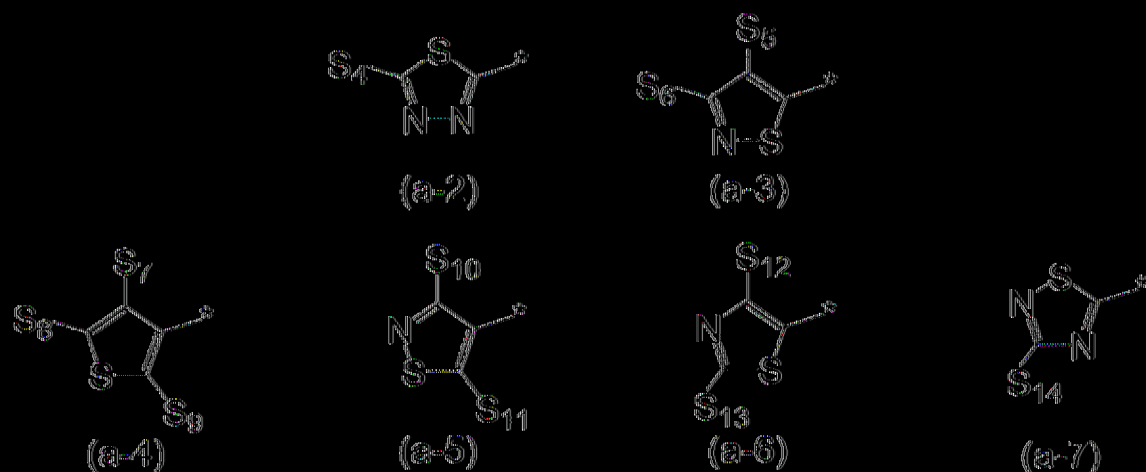
第2發明之異向性色素膜形成用組合物包含下述式(31)所表示之化合物(以下稱為「化合物(31)」或「第2發明之化合物」)及聚合性液晶化合物。



【0104】 (式(31)中，

$-A^{31}$ 表示可具有取代基之下述式(a-2)～(a-7)之任一者所表示之基(於下述式(a-2)～(a-7)中，*表示-N側之鍵， $S_4 \sim S_{14}$ 表示具有取代基之情形時之取代位置)，

[化7]



·A³²表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基或可具有取代基之芳香族雜環之2價基，

·A³³表示可具有取代基之仲苯基，

·Y表示1價有機基，

m表示1、2或3；

於m為2或3之情形時，複數個·A³²彼此可相同亦可不同)

[0105] (·A³¹)

·A³¹係可具有取代基之上述式(a-2)~(a-7)之任一者所表示之基。就與聚合性液晶化合物之分子配向變良好之觀點而言，·A³¹較佳為可具有取代基之上述式(a-2)~(a-3)之任一者所表示之基。

[0106] 作為·A³¹可具有之取代基，可例舉：·R^a、·OH、·O·R^a、·O·C(=O)·R^a、·NH₂、·NH·R^a、·N(·R^b)·R^a、·C(=O)·R^a、·C(=O)·O·R^a、·C(=O)·NH₂、·C(=O)·NH·R^a、·C(=O)·N(·R^b)·R^a、·SH、·S·R^a、三氟甲基、胺磺醯基、羧基、氰基、硝基、鹵素等。·A³¹可為僅具有1個該等取代基之1種者，亦可為具有2個以上1種或複數種取代基者。

[0107] 上述·R^a及·R^b分別獨立地表示可具有分支之碳數1~15之烷基、構成環之原子數為5~14之環烷基或構成環之原子數為5~14之芳

基。作為 $-R^a$ 及 $-R^b$ 之碳數，於烷基之情形時，較佳為1～12，更佳為1～9。又，於芳基之情形時，較佳為5～12，更佳為5～9。於環烷基之情形時，較佳為5～12，更佳為5～9。藉由碳數處於該等範圍內，與聚合性液晶化合物之分子配向呈變良好之趨勢。

【0108】該可具有分支之碳數1～15之烷基、或構成環之原子數為5～14之環烷基所包含之一個或一個以上亞甲基可為由 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-NH-$ 、 $-N(R^c)-$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-C(=O)-O-$ 、 $-C(=O)-NH-$ 、 $-CHF-$ 、 $-CF_2-$ 、 $-CHCl-$ 、 $-CCl_2-$ 取代之結構，亦可為由丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、縮水甘油氧基之聚合性基取代之結構。此處， R^c 表示碳數1～6之直鏈狀或分支狀烷基。

【0109】其中，作為 $-A^{31}$ 可具有之取代基，較佳為 $-R^a$ 、 $-O-R^a$ 、 $-S-R^a$ 、三氟甲基、氟基、氰基。作為 $-R^a$ ，更佳為正甲基、正乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、正庚基、正辛基、5,5-二甲基-3-甲基己基。藉由具有上述取代基，與聚合性液晶化合物之分子配向呈變良好之趨勢。

【0110】 $-A^{31}$ 所具有之取代基之取代位置並無特別限定，但尤其是於式(a-2)中，較佳為 S_4 。於式(a-3)中，較佳為 S_5 或 S_6 ，若取代基為單數則更佳為 S_6 。於式(a-4)中，較佳為 S_7 、 S_8 或 S_9 ，更佳為 S_8 。於式(a-5)中，較佳為 S_{10} 或 S_{11} 。於式(a-6)中，較佳為 S_{12} 或 S_{13} ，更佳為 S_{13} 。於式(a-7)中，較佳為 S_{14} 。藉由為該等取代位置，呈化合物(31)之吸收之躍遷矩與化合物(31)之長軸方向一致之趨勢，從而呈可提高二色比之趨勢。

【0111】($-A^{32}$ -及 $-A^{33}$ -)

$-A^{32}$ -表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基或可具有取代基之芳香

族雜環之2價基。

又，-A³³-表示可具有取代基之伸苯基。

【0112】 -A³²-中之芳香族烴環為單環或縮合之芳香族烴環。芳香族烴環之碳數較佳為6以上，又，較佳為20以下，更佳為10以下。藉由為該等碳數，呈化合物(31)之吸收之躍遷矩與化合物(31)之長軸方向一致之趨勢，從而可提高二色比。

【0113】 作為芳香族烴環，可例舉：苯環、萘環、蒽環、菲環、芘環、稠四苯環、芑環、苯并芑環、蒽環、9,10-苯并菲環、乙烷合萘環、螢蒽環、萓環等。

【0114】 就呈化合物(31)之吸收躍遷矩與化合物(31)之長軸方向一致之趨勢從而可提高二色比而言，作為-A³²-之芳香族烴環之2價基，較佳為苯環之2價基(伸苯基)、萘環之2價基(伸萘基)，更佳為1,4-伸苯基、1,4-伸萘基、2,6-伸萘基，進而較佳為1,4-伸苯基。

【0115】 -A³²-中之芳香族雜環為單環或縮合之芳香族雜環。芳香族雜環之碳數較佳為4以上，又，較佳為20以下，更佳為10以下。藉由為該等碳數，呈化合物(31)之吸收之躍遷矩與化合物(31)之長軸方向一致之趨勢，從而可提高二色比。

【0116】 作為芳香族雜環，可例舉：呋喃環、苯并呋喃環、噻吩環、苯并噻吩環、吡咯環、吡唑環、咪唑環、噻唑環、異噻唑環、噁二唑環、噻二唑環、三唑環、吡啶環、吡嗪環、吡嗪并咪唑環、吡嗪并吡唑環、吡嗪并吡咯環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并吡咯環、呋喃并呋喃環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噁唑環、苯并異噻唑環、苯并咪唑環、吡啶環、吡嗪環、噻吩環、三

吡啶環、喹啉環、異喹啉環、吡啶環、喹啉環、啡啶環、喹啉環、萘環等。

【0117】 $-A^{32}$ -中之芳香族烴環之2價基或芳香族雜環之2價基中容許之取代基、 $-A^{33}$ -之伸苯基中容許之取代基與 $-A^{31}$ -可具有之取代基相同。

【0118】 作為 $-A^{32}$ -，較佳為可具有取代基之芳香族烴環之2價基，更佳為可具有取代基之伸苯基，進而較佳為不具有取代基之1,4-伸苯基。藉由如上所述，呈化合物(31)之吸收之躍遷矩與化合物(31)之長軸方向一致之趨勢，從而可提高二色比。

【0119】 作為 $-A^{33}$ -，進而較佳為不具有取代基之1,4-伸苯基。藉由如上所述，呈化合物(31)之吸收之躍遷矩與化合物(31)之長軸方向一致之趨勢，從而可提高二色比。

【0120】 (-Y)

-Y表示1價有機基。

作為-Y之1價有機基，可例舉與上述式(1)中之-Y之1價有機基相同之基，較佳之基、較佳之原因亦相同。

【0121】 (n)

n表示1、2或3。於n表示2或3之情形時，各 $-A^{32}$ -可相同亦可不同。

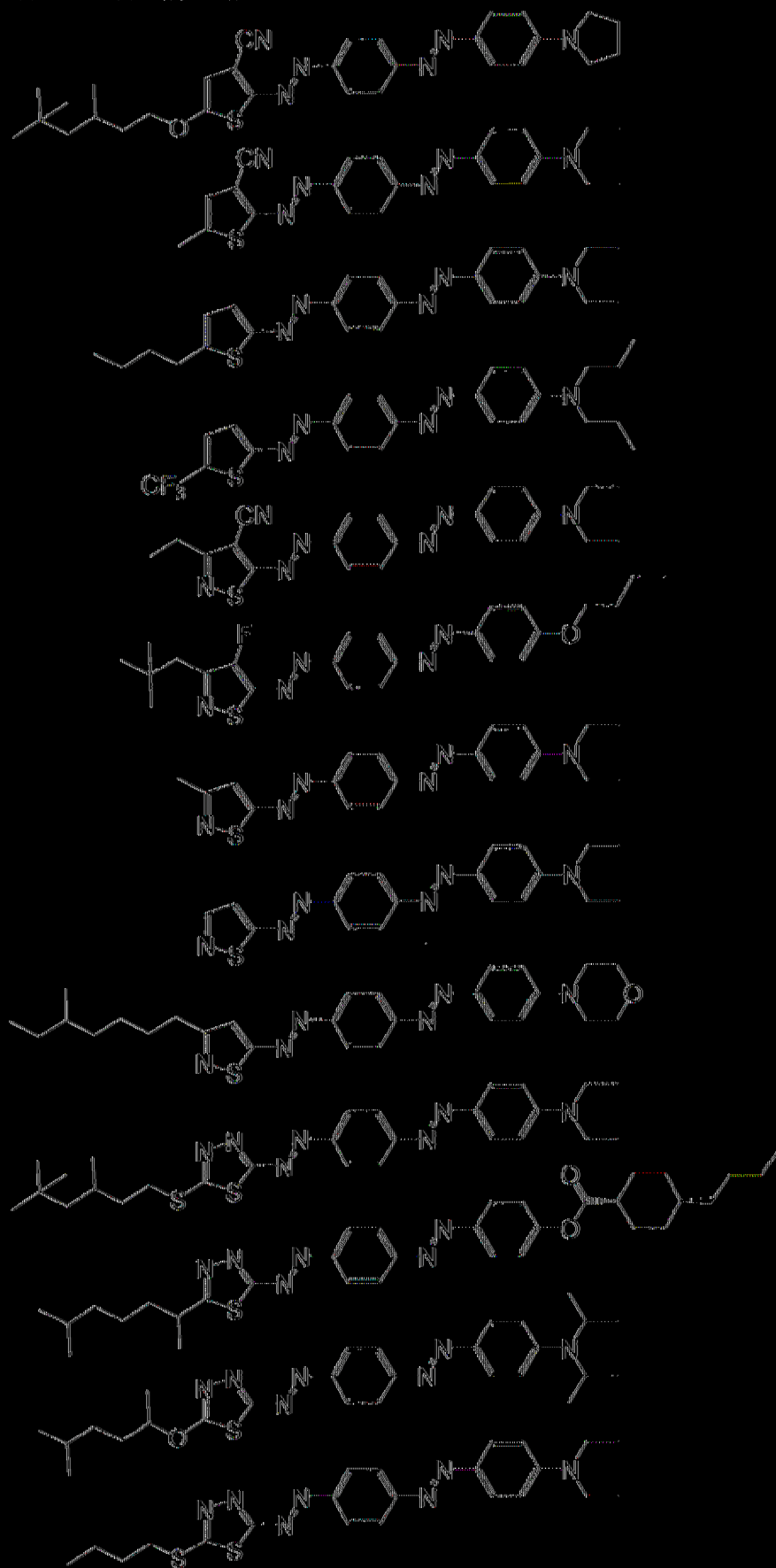
n較佳為1或2，更佳為1。如此，使化合物(31)之分子配向呈變良好之趨勢。

【0122】 再者，基於提高化合物(31)之直線性之觀點，化合物(31)中之 $-N=N-$ 較佳為反型。

【0123】 (化合物(31)之具體例)

具體而言，作為化合物(31)，例舉以下化合物，但並不限定於該等。

[0124] [148]



【0125】 (吸收特性)

作為化合物(31)之第2發明之化合物於藉由下述方法製成之異向性色素膜中，可於350～800 nm之波長範圍內具有極大吸收($\lambda_{\max 1}$)。較佳為於450～800 nm之波長範圍內具有極大吸收，更佳為於480～750 nm之波長範圍內具有極大吸收，進而較佳為於510～700 nm之波長範圍內具有極大吸收。藉由在該範圍內具有極大吸收，於與在更短波長側具有極大吸收之色素組合之情形時，呈全面地吸收350～800 nm之波長範圍之趨勢。

【0126】 第2發明之化合物較佳為，相較於溶解於溶劑進行測定所得之極大吸收($\lambda_{\max 2}$)，異向性色素膜中之極大吸收(上述 $\lambda_{\max 1}$)存在於更長波長中。該長波長位移係因第2發明之化合物分散於聚合性液晶化合物及/或具有基於聚合性液晶化合物之單元之聚合物中而表現出之現象，表示第2發明之化合物與聚合性液晶化合物及/或具有基於聚合性液晶化合物之單元之聚合物強烈地發生分子間相互作用。長波長位移係指吸收極大之差量($\lambda_{\max 1} - \lambda_{\max 2}$)為正值，該差較佳為10 nm以上，進而較佳為20 nm以上。

【0127】 [異向性色素膜形成用組合物]**<色素>**

本發明之異向性色素膜形成用組合物係包含色素及聚合性液晶化合物者，至少包含上述第1發明之化合物或第2發明之化合物(以下，將該等稱為「本發明之化合物」)作為該色素。

本發明之異向性色素膜形成用組合物可僅包含本發明之化合物之1種，亦可包含2種以上。

【0128】 <其他色素>

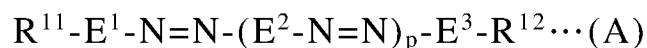
本發明之異向性色素膜形成用組合物包含本發明之化合物作為色素，亦可包含除本發明之化合物以外之色素，作為本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之除本發明之化合物以外之色素，可例舉：偶氮系色素、醌系色素(包括蒽醌系色素、蒽醌系色素等)、萘系色素、花青系色素、酞菁系色素、靛藍系色素、縮合多環系色素(包括芘系色素、嘔吩系色素、吡啶系色素等)等。

【0129】 本發明之異向性色素膜用組合物中，可僅單獨包含1種除本發明之化合物以外之色素，亦可以任意組合及比率包含2種以上除本發明之化合物以外之色素。

【0130】 上述所例示之色素中，偶氮系色素由於可於異向性色素膜中獲得較高之分子排列故而較佳。

【0131】 偶氮系色素係指具有至少1個以上偶氮基(-N=N-)之色素，就於溶劑中之溶解性、與液晶化合物之相溶性、色調及製造容易性之觀點而言，其一分子中之偶氮基之數量較佳為1以上，更佳為2以上，且較佳為6以下，更佳為4以下，進而較佳為3以下。

【0132】 作為偶氮系色素，例如可例舉下述式(A)所表示之化合物。



(式(A)中，

-E¹-、-E²-及-E³-分別獨立地表示可具有取代基之伸苯基、可具有取代基之伸萘基、或可具有取代基之2價雜環基，

p表示0～4之整數，

於p為2以上之整數之情形時，複數個-E²-彼此可相同亦可不同；

R^{11} 及 R^{12} 分別獨立地表示1價有機基)

【0133】 $-E^1-$ 、 $-E^2-$ 及 $-E^3-$ 分別獨立地表示可具有取代基之伸苯基、可具有取代基之伸萘基、或可具有取代基之2價雜環基。

關於伸苯基之取代位置，1,4-伸苯基由於分子之直線性較高故而較佳。

關於伸萘基之取代位置，1,4-伸萘基或2,6-伸萘基由於分子之直線性較高故而較佳。

【0134】 作為2價雜環基，較佳為形成環之碳數為3以上14以下之雜環基，進而較佳為形成環之碳數10以下之雜環基。尤佳為單環或雙環式雜環基。

【0135】 作為構成2價雜環基之碳以外之原子，可例舉選自氮原子、硫原子及氧原子中之至少1種。於雜環基具有複數個碳以外之構成環之原子之情形時，該等可相同亦可不同。

作為2價雜環基，具體可例舉：吡啶二基、喹啉二基、異喹啉二基、噻唑二基、苯并噻唑二基、噻吩并噻唑二基、噻吩并噻吩二基、苯并咪唑啉酮二基、苯并呋喃二基、鄰苯二甲醯亞胺二基、噁唑二基、苯并噁唑二基等。

【0136】 作為 $-E^1-$ 、 $-E^2-$ 及 $-E^3-$ 中之伸苯基、伸萘基及2價雜環基任意具有之取代基，可例舉：碳數1~4之烷基；甲氧基、乙氧基及丁氧基等碳數1~4之烷氧基；三氟甲基等碳數1~4之氟化烷基；氰基；硝基；羥基；鹵素原子；胺基、二乙胺基及吡咯烷基等經取代或未經取代胺基(取代胺基係指具有1個或2個碳數1~4之烷基之胺基、或者2個取代烷基相互鍵結而形成碳數2~8之烷二基之胺基；未經取代胺基係 $-NH_2$ ；再者，作

為碳數1~4之烷基，可例舉甲基、乙基及丁基等；作為碳數2~8之烷二基，可例舉伸乙基、丙烷-1,3-二基、丁烷-1,3-二基、丁烷-1,4-二基、戊烷-1,5-二基、己烷-1,6-二基、庚烷-1,7-二基、辛烷-1,8-二基等)。

【0137】 就分子直線性較高之方面而言，-E¹-、-E²-及-E³-中之伸苯基、伸萘基及2價雜環基較佳為，未經取代或者於經取代之情形時由甲基、甲氧基、羥基、氟原子、氯原子、二甲胺基、吡咯啉基、哌啉基取代。

【0138】 p表示0~4之整數。就於溶劑中之溶解性、與液晶化合物之相溶性、色調及製造容易性之觀點而言，p較佳為1以上，且較佳為4以下，更佳為3以下。

【0139】 R¹¹及R¹²表示同一或各不相同之1價有機基。

作為R¹¹及R¹²中之1價有機基，可例舉：氫原子、可具有分支之碳數1~15之烷基；脂環式之碳數1~15之烷基；甲氧基、乙氧基及丁氧基等可具有分支之碳數1~15之烷氧基；三氟甲基等可具有分支之碳數1~15之氟化烷基；氰基；硝基；羥基；鹵素原子；胺基、二乙胺基及吡咯烷基等經取代或未經取代胺基(取代胺基係指具有1個或2個可具有分支之碳數1~15之烷基之胺基、或者2個取代烷基相互鍵結而形成碳數2~15之烷二基之胺基；未經取代胺基係-NH₂)；作為碳數1~15之烷基，可例舉甲基、乙基及丁基等；作為碳數2~15之烷二基，可例舉伸乙基、丙烷-1,3-二基、丁烷-1,3-二基、丁烷-1,4-二基、戊烷-1,5-二基、己烷-1,6-二基、庚烷-1,7-二基、辛烷-1,8-二基等)；羧基；丁氧基羧基等可具有分支之碳數1~15之烷氧基羧基；2-(4-丁基苯基)乙烯基等烷基苯基烯基；胺甲醯基；丁基胺甲醯基等可具有分支之碳數1~15之烷基胺甲醯基；胺磺醯

基；丁基胺磺醯基等可具有分支之碳數1~15之烷基胺磺醯基；丁基羰基胺基等可具有分支之碳數1~15之醯胺基；丁基羰氧基等可具有分支之碳數1~15之醯氧基；硫基；丁基硫基等碳數1~15之烷基硫基；下述液晶化合物中之 $-R^1$ 及 $-R^2$ 。

【0140】 作為 R^{11} 及 R^{12} ，可例舉：氫原子、鏈狀基、脂肪族有機基(「脂肪族有機基」包括鏈狀者及環狀者)、碳原子之一部分由氮原子及/或氧原子取代之脂肪族有機基(「碳原子之一部分由氮原子及/或氧原子取代之脂肪族有機基」包括鏈狀者及環狀者，且包括脂肪族有機基之一部分甲基分別被取代為羥基、側氧基(=O)、胺基、亞胺基等者)等，於某一形態中，較佳為氫原子、鏈狀基，於另一形態中，較佳為氫原子、脂肪族有機基，於又一形態中，較佳為氫原子、碳原子之一部分由氮原子及/或氧原子取代之脂肪族有機基。

【0141】 作為鏈狀基，可例舉：上述可具有分支之碳數1~15之烷基；可具有分支之碳數1~15之烷氧基；可具有分支之碳數1~15之氟化烷基；經取代或未經取代胺基(取代胺基係指具有1個或2個可具有分支之碳數1~15之烷基之胺基；未經取代胺基係 $-NH_2$)；羧基；可具有分支之碳數1~15之烷氧基羰基；胺甲醯基；可具有分支之碳數1~15之烷基胺甲醯基；胺磺醯基；可具有分支之碳數1~15之烷基胺磺醯基；可具有分支之碳數1~15之醯胺基；可具有分支之碳數1~15之醯氧基；硫基；碳數1~15之烷基硫基等。鏈狀基與脂肪族有機基有一部分重複。

【0142】 作為脂肪族有機基，可例舉上述可具有分支之碳數1~15之烷基、脂環式之碳數1~15之烷基等。

【0143】 作為碳原子之一部分由氮原子及/或氧原子取代之脂肪族有

機基，可例舉：上述可具有分支之碳數1~15之烷氧基；經取代或未經取代胺基(取代胺基係指具有1個或2個可具有分支之碳數1~15之烷基之胺基、或者2個取代烷基相互鍵結而形成碳數2~15之烷二基之胺基；未經取代胺基係-NH₂；再者，作為碳數1~15之烷基，可例舉甲基、乙基及丁基等；作為碳數2~15之烷二基，可例舉伸乙基、丙烷-1,3-二基、丁烷-1,3-二基、丁烷-1,4-二基、戊烷-1,5-二基、己烷-1,6-二基、庚烷-1,7-二基、辛烷-1,8-二基等)；羧基；可具有分支之碳數1~15之烷氧基羧基；胺甲醯基；可具有分支之碳數1~15之烷基胺甲醯基；可具有分支之碳數1~15之醯胺基；可具有分支之碳數1~15之醯氧基等。

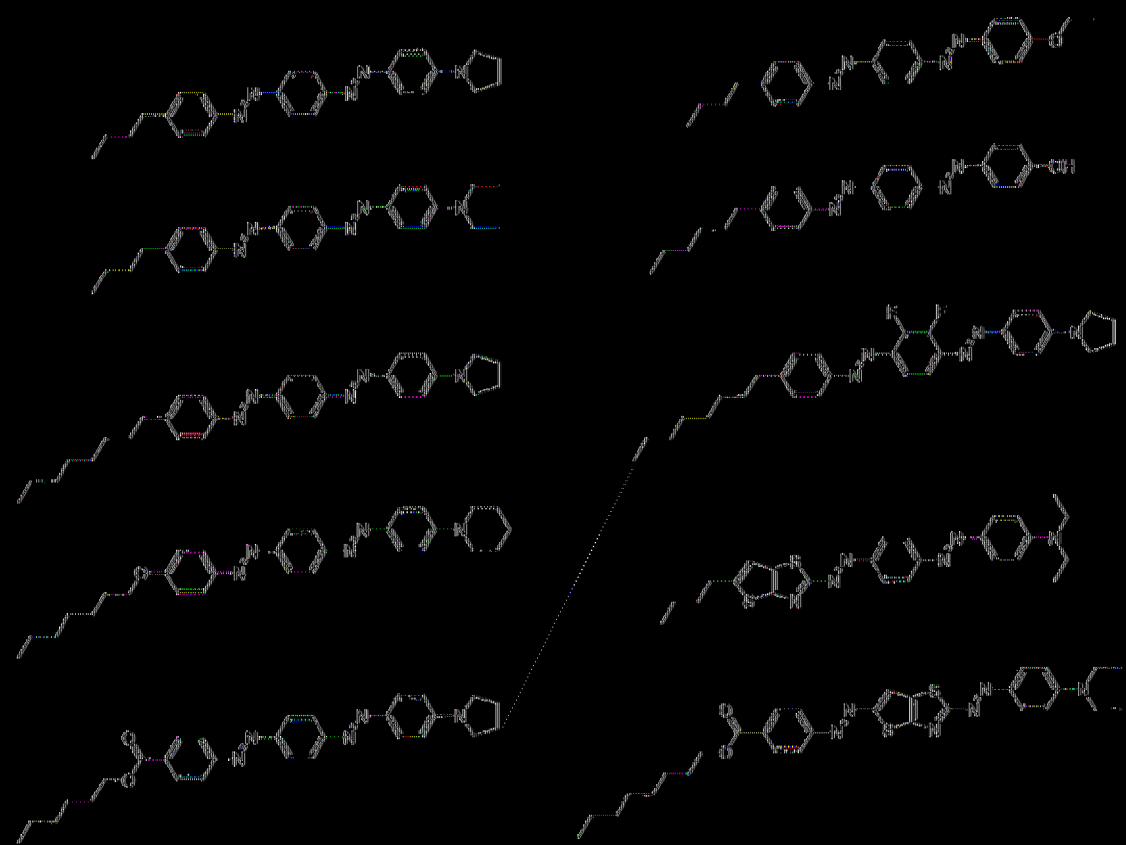
【0144】就分子直線性較高之方面而言，R¹¹及R¹²分別獨立地較佳為：氫原子、或由丁基、戊基、己基、庚基、辛基等碳數1~10之烷基；丁氧基、戊氧基、己氧基、庚氧基、辛氧基等碳數1~10之烷氧基、二乙胺基、吡咯烷基及哌啶基取代。又，下述液晶化合物中之-R¹及-R²亦較佳。

【0145】本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之除本發明之化合物以外之偶氮系色素並無特別限定，亦可使用公知之偶氮系色素。

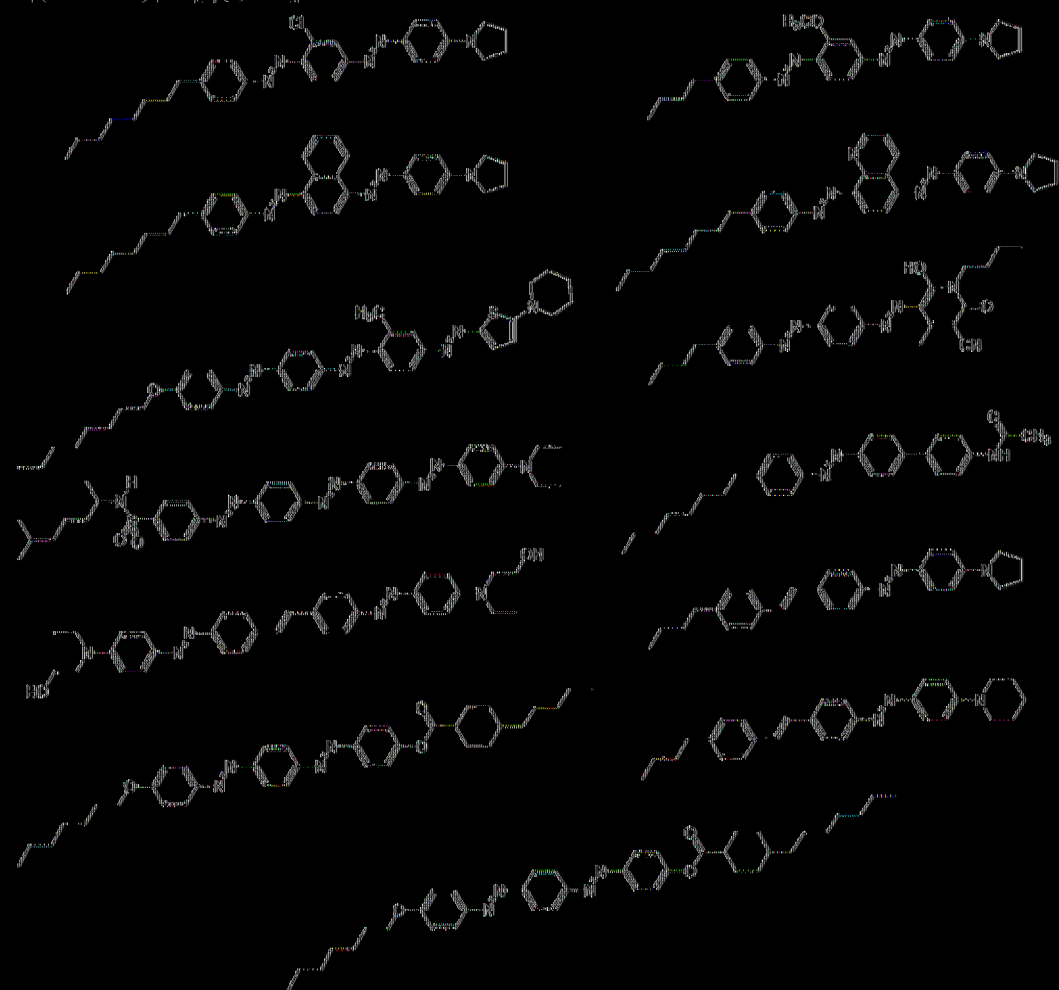
【0146】作為公知之偶氮系色素，例如可例舉：上述專利文獻1、日本專利第5982762號公報、日本專利特開2017-025317號公報、日本專利特開2014-095899號公報所記載之色素(二色性色素、二色性染料)。

【0147】具體可例舉以下所記載之偶氮系色素，但並不限定於該等。

【0148】[化9]



[0149] [化10]



元件之情形時，可於可見光區域較廣之範圍內表現出偏光特性。

【0154】（色素之分子量）

本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之色素之分子量(併用2種以上色素之情形時為各者之分子量)較佳為300以上，更佳為350以上，進而較佳為380以上，且較佳為1500以下，更佳為1200以下，進而較佳為1000以下。具體而言，本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之色素之分子量較佳為300～1500，更佳為350～1200，進而較佳為380～1000。藉由處於上述範圍內，會變成適當之分子長度、體積，故而色素之分子配向呈變良好之趨勢。

【0155】（色素之含量）

關於二色性色素等色素於本發明之異向性色素膜形成用組合物中所占之含量(併用2種以上色素之情形時為各者含量之總和)，例如相對於異向性色素膜形成用組合物之固形物成分(100質量份)較佳為0.01質量份以上，更佳為0.05質量份以上，且較佳為30質量份以下，更佳為10質量份以下。具體而言，關於色素(二色性色素)於異向性色素膜形成用組合物中所占之含量，例如相對於異向性色素膜形成用組合物之固形物成分(100質量份)為0.01～30質量份，較佳為0.05～10質量份。

【0156】 若色素所占之含量處於上述範圍內，則呈如下趨勢，即，可使本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物聚合而不使本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之液晶化合物之配向混亂。若色素所占之含量為上述下限值以上，則呈獲得充分之光吸收而獲得充分之偏光性能之趨勢。若色素所占之含量為上述上限值以下，則呈容易抑制液晶分子之配向之阻礙之趨勢。

此處，異向性色素膜用組合物之固形物成分相當於異向性色素膜用組合物中之除溶劑以外之所有成分之合計。

【0157】 本發明之異向性色素膜用組合物只要包含作為色素之本發明之化合物以作為必須成分即可，亦可在包含本發明之化合物之同時包含上述其他色素。

於本發明之異向性色素膜用組合物含有其他色素之情形時，就更有效地獲得使用本發明之化合物所產生之本發明之效果之觀點而言，於本發明之異向性色素膜用組合物中之色素之總量100質量%中，本發明之化合物之比率較佳為5質量%以上，更佳為10質量%以上，尤佳為15～100質量%。

【0158】 (色素之製造方法)

本發明之異向性色素膜形成用組合物所含有之本發明之化合物等色素可藉由組合烷基化反應、酯化反應、醯胺化反應、醚化反應、本位取代反應、重氮偶合反應、使用金屬觸媒之偶合反應等公知之化學反應而製造。

【0159】 例如，本發明之化合物可依照下述實施例所記載之方法、或「新染料化學」(細田豐著，1973年12月21日，技報堂)、「總說合成染料」(堀口博著，1968年，三共出版)、「理論製造 染料化學」(細田豐著，1957年，技報堂)所記載之方法合成。

【0160】 <聚合性液晶化合物>

於本發明中，液晶化合物係指顯示出液晶狀態之物質，具體而言，據「液晶便覽」(丸善股份有限公司，2000年10月30日發行)第1～28頁所載，係指不自結晶直接轉變為液體而經由顯示出結晶與液體兩者之性質之

中間狀態變成液體之化合物。

【0161】 本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物係具有下述聚合性基之液晶化合物。

【0162】 於聚合性液晶化合物中，聚合性基可配置於液晶化合物分子內之任意位置，但就容易進行聚合之觀點而言，聚合性基較佳為於液晶化合物分子之末端進行取代。

於聚合性液晶化合物中，聚合性基可於液晶化合物分子內存在1個以上，於存在2個以上之情形時，就容易進行聚合之觀點而言，較佳為分別存在於液晶化合物分子之兩末端。

【0163】 聚合性液晶化合物較佳為於液晶化合物分子內具有碳-碳三鍵之化合物。若為具有碳-碳三鍵之化合物，則該碳-碳三鍵可進行旋轉運動並且可成為液晶分子之芯，從而分子之運動性較高且液晶分子彼此或與具有色素分子等之 π 共軛系之化合物之分子間相互作用較強，從而分子配向呈提高之趨勢。

【0164】 作為本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物，並無特別限定，可使用具有聚合性基之液晶化合物。

【0165】 例如，作為本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物，可例舉下述式(2)所表示之化合物(以下，有時稱為「聚合性液晶化合物(2)」)。



【0167】 (式(2)中，

- Q^1 表示氫原子或聚合性基，

- Q^2 表示聚合性基，

-R¹-及-R²-分別獨立地表示鏈狀有機基，

-A¹¹-及-A¹³-分別獨立地表示下述式(3)所表示之部分結構、2價有機基或單鍵，

-A¹²-表示下述式(3)所表示之部分結構或2價有機基，

-Y¹-及-Y²-分別獨立地表示單鍵、-C(=O)O-、-OC(=O)-、-C(=S)O-、-OC(=S)-、-C(=O)S-、-SC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、-C≡C-、-C(=O)NH-、-NHC(=O)-、-CH₂O-、-OCH₂-、-CH₂S-或-SCH₂-，

-A¹¹-及-A¹³-之一者為下述式(3)所表示之部分結構或2價有機基；

k為1或2；

於k為2之情形時，2個-Y²-A¹³-彼此可相同亦可不同。)

【0168】 -C^y-X²-C≡C-X¹-…(3)

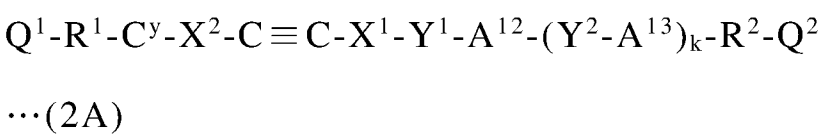
(式(3)中，

-C^y-表示烴環基或雜環基，

-X¹-表示-C(=O)O-、-OC(=O)-、-C(=S)O-、-OC(=S)-、-C(=O)S-、-SC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、-C(=O)NH-、-NHC(=O)-、-CH₂O-、-OCH₂-、-CH₂S-或-SCH₂-，

-X²-表示單鍵、-C(=O)O-、-OC(=O)-、-C(=S)O-、-OC(=S)-、-C(=O)S-、-SC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、-C(=O)NH-、-NHC(=O)-、-CH₂O-、-OCH₂-、-CH₂S-、或-SCH₂-)

【0169】 再者，於-A¹¹-為式(3)所表示之部分結構之情形時，式(2)可為下述式(2A)，亦可為下述式(2B)。



$$Q^1-R^1-X^1-C \equiv C-X^2-C^y-Y^1-A^{12}-(Y^2-A^{13})_k-R^2-Q^2$$

...(2B)

【0170】 又，於-A¹²-為式(3)所表示之部分結構之情形時，式(2)可為下述式(2C)，亦可為下述式(2D)。

$$Q^1-R^1-A^{11}-Y^1-C^y-X^2-C \equiv C-X^1-(Y^2-A^{13})_k-R^2-Q^2$$

...(2C)

$$Q^1-R^1-A^{11}-Y^1-X^1-C \equiv C-X^2-C^y-(Y^2-A^{13})_k-R^2-Q^2$$

...(2D)

【0171】 又，於-A¹³-為式(3)所表示之部分結構之情形時，式(2)可為下述式(2E)，亦可為下述式(2F)。

$$Q^1-R^1-A^{11}-Y^1-A^{12}-(Y^2-C^y-X^2-C \equiv C-X^1)_k-R^2-Q^2$$

...(2E)

$$Q^1-R^1-A^{11}-Y^1-A^{12}-(Y^2-X^1-C \equiv C-X^2-C^y)_k-R^2-Q^2$$

...(2F)

【0172】 同樣地，於-A¹¹-、-A¹²-及-A¹³-中之兩者以上為式(3)所表示之部分結構之情形時，亦可分別獨立地使式(3)所表示之部分結構之朝向反轉。

【0173】 如上所述，-A¹¹-、-A¹²-及-A¹³-分別獨立地為式(3)所表示之部分結構或2價有機基，此外，-A¹¹-及-A¹³-亦可為單鍵，但-A¹¹-及-A¹³-不會均為單鍵。

【0174】 (-C^y-)

-C^y-中之烴環基包括芳香族烴環基及非芳香族烴環基。

芳香族烴環基包括非連結芳香族烴環基及連結芳香族烴環基。

【0175】 非連結芳香族烴環基係單環或縮合之芳香族烴環之2價基，其碳數為6～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。非連結芳香族烴環基之碳數更佳為6～15。作為芳香族烴環，可例舉：苯環、萘環、蒽環、菲環、芘環、稠四苯環、芘環、苯并芘環、蒽環、9,10-苯并菲環、乙烷合萘環、螢蒽環、蒽環等。

【0176】 連結芳香族烴環基係複數個單環或縮合之芳香族烴環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基。單環或縮合環之碳數為6～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。單環或縮合環之碳數更佳為6～15。作為連結芳香族烴環基，例如可例舉如下2價基，該2價基係第1碳數6～20之單環或縮合之芳香族烴環與第2碳數6～20之單環或縮合之芳香族烴環以單鍵鍵結，於第1碳數6～20之單環或縮合之芳香族烴環之構成環的原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數6～20之單環或縮合之芳香族烴環之構成環的原子上具有第2鍵結鍵。作為連結芳香族烴環基，具體可例舉聯苯-4,4'-二基。

【0177】 關於芳香族烴環基，非連結芳香族烴環基會使作用於液晶化合物之間之分子間相互作用最佳藉此使分子配向性變良好，故而較佳。

其中，作為芳香族烴環基，較佳為苯環之2價基、萘環之2價基，更佳為苯環之2價基(伸苯基)。作為伸苯基，較佳為1,4-伸苯基。藉由-C^y-為該等基，呈液晶分子之直線性提高而獲得分子配向性提昇之效果之趨勢。

【0178】 非芳香族烴環基包括非連結非芳香族烴環基及連結非芳香族烴環基。

【0179】 非連結非芳香族烴環基係單環或縮合之非芳香族烴環之2價基，其碳數為3～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故

而較佳。非連結非芳香族烴環基之碳數更佳為3～15。作為非芳香族烴環，可例舉：環丙烷環、環丁烷環、環戊烷環、環己烷環、環庚烷環、環辛烷環、環己烯環、降莰烷環、莰烷環、金剛烷環、四氫萘環、二環[2.2.2]辛烷環等。

【0180】非連結非芳香族烴環基包括不具有不飽和鍵作為非芳香族烴環之構成環之原子間鍵之脂環式烴環基、及具有不飽和鍵作為非芳香族烴環之構成環之原子間鍵之不飽和非芳香族烴環基。就生產性之觀點而言，非連結非芳香族烴環基較佳為脂環式烴環基。

【0181】連結非芳香族烴環基係複數個單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基；或者選自由單環之芳香族烴環、縮合之芳香族烴環、單環之非芳香族烴環及縮合之非芳香族烴環所組成之群中之1種以上之環與單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵的2價基。

基於適當之芯之大小使分子配向性變良好之原因，單環或縮合環之碳數較佳為3～20。

【0182】作為連結非芳香族烴環基，例如可例舉如下2價基，該2價基係第1碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環與第2碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結，於第1碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。進而，例如可例舉如下2價基，該2價基係碳數3～20之單環或縮合之芳香族烴環與碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結，於碳數3～20之單環或縮合之芳香族烴環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於碳數3～20之單環

或縮合之非芳香族烴環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。

【0183】 作為連結非芳香族烴環基，具體可例舉：雙(環己烷)-4,4'-二基、1-環己基苯-4,4'-二基。

【0184】 作為非芳香族烴環基，非連結非芳香族烴環基會使作用於液晶化合物之間之分子間相互作用最佳藉此使分子配向性變良好，故而較佳。

【0185】 作為非連結非芳香族烴環基，較佳為環己烷之2價基(環己二基)，作為環己二基，較佳為環己烷-1,4-二基。藉由-C^y-為該等基，呈液晶分子之直線性提高而獲得分子配向性提昇之效果之趨勢。

【0186】 -C^y-中之雜環基包括芳香族雜環基及非芳香族雜環基。

【0187】 芳香族雜環基包括非連結芳香族雜環基及連結芳香族雜環基。

【0188】 非連結芳香族雜環基係單環或縮合之芳香族雜環之2價基，其碳數為4～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。非連結芳香族雜環基之碳數更佳為4～15。

【0189】 作為芳香族雜環，可例舉：呋喃環、苯并呋喃環、噻吩環、苯并噻吩環、吡咯環、吡啶環、咪唑環、噻唑環、異噻唑環、喹啉環、噻二唑環、三唑環、吡嗪環、呋喃并吡啶環、吡咯并咪唑環、吡咯并吡啶環、吡咯并吡咯環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并吡咯環、呋喃并呋喃環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異喹啉環、苯并異噻唑環、苯并咪唑環、吡啶環、吡嗪環、嗒嗪環、嘧啶環、三吡嗪環、喹啉環、異喹啉環、吡啶環、喹啉環、喹啉酮環、萘環等。

【0190】 連結芳香族雜環基係複數個單環或縮合之芳香族雜環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基。單環或縮合環之碳數為4～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。連結芳香族雜環基之碳數更佳為4～15。

【0191】 作為連結芳香族雜環基，例如可例舉如下2價基，該2價基係第1碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環與第2碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環以單鍵鍵結，於第1碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。

【0192】 非芳香族雜環基包括非連結非芳香族雜環基及連結非芳香族雜環基。

【0193】 非連結非芳香族雜環基係單環或縮合之非芳香族雜環之2價基，其碳數為4～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。非連結非芳香族雜環基之碳數更佳為4～15。

【0194】 作為碳數4～20之單環或縮合之非芳香族雜環之2價基之非芳香族雜環，可例舉：四氫呋喃環、四氫吡喃環、二噁烷環、四氫噻吩環、四氫噻喃環、吡咯啉環、哌啉環、二氫吡啉環、哌啶環、四氫噻唑環、四氫噻吩環、八氫喹啉環、四氫喹啉環、八氫喹啉環、四氫喹啉環、四氫咪唑環、四氫苯并咪唑環、吡啶環等。

【0195】 連結非芳香族雜環基係複數個單環或縮合之非芳香族雜環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基。單環或縮合環之碳數為4～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。連結非芳香族雜環基之碳數更佳為4～15。

【0196】 作為連結芳香族雜環基，例如可例舉如下2價基，該2價基係第1碳數4～20之單環或縮合之非芳香族雜環與第2碳數4～20之單環或縮合之非芳香族雜環以單鍵鍵結，於第1碳數4～20之單環或縮合之非芳香族雜環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數4～20之單環或縮合之非芳香族雜環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。

【0197】 $-C^y-$ 中之芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基分別可由選自由 $-R^k$ 、 $-OH$ 、 $-O-R^k$ 、 $-O-C(=O)-R^k$ 、 $-NH_2$ 、 $-NH-R^k$ 、 $-N(R^{k'})-R^k$ 、 $-C(=O)-R^k$ 、 $-C(=O)-O-R^k$ 、 $-C(=O)-NH_2$ 、 $-C(=O)-NH-R^k$ 、 $-C(=O)-N(R^{k'})-R^k$ 、 $-SH$ 、 $-S-R^k$ 、三氟甲基、胺磺醯基、羧基、磺基、氰基、硝基及鹵素所組成之群中之1種以上之基取代。 $-R^k$ 及 $-R^{k'}$ 分別獨立地表示碳數1～6之直鏈狀或分支狀烷基。

【0198】 就分子結構之直線性較高，聚合性液晶化合物(2)彼此容易聚集而容易表現出液晶狀態之方面而言， $-C^y-$ 中之芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基分別獨立地較佳為未經取代、或經甲基、甲氧基、氟原子、氯原子、溴原子取代，更佳為未經取代。

【0199】 $-C^y-$ 中之芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基所具有之取代基可相同亦可不同，又，芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基可全部經取代，亦可全部未經取代，還可一部分經取代且一部分未經取代。

【0200】 就聚合性液晶化合物(2)之分子配向性變良好而言， $-C^y-$ 較佳為烴環基，更佳為伸苯基、環己二基。就可提高聚合性液晶化合物(2)之分子結構之直線性而言， $-C^y-$ 進而較佳為1,4-伸苯基、環己烷-1,4-二基，特佳為1,4-伸苯基。

【0201】 (-X¹-)

-X¹-表示-C(=O)O-、-OC(=O)-、-C(=S)O-、-OC(=S)-、-C(=O)S-、-SC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、-C(=O)NH-、-NHC(=O)-、-CH₂O-、-OCH₂-、-CH₂S-或-SCH₂-。其中，就呈容易進行聚合性液晶化合物(2)之直線性或繞分子短軸之旋轉運動之趨勢而言，作為-X¹-，例舉 π 鍵結性較小之-C(=O)O-、-OC(=O)-、-C(=S)O-、-OC(=S)-、-C(=O)S-、-SC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH₂O-、-OCH₂-、-CH₂S-、-SCH₂-等為較佳者。其中，更佳為-C(=O)O-、-OC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH₂O-、-OCH₂-，-X¹-進而較佳為-C(=O)O-或-OC(=O)-。於另一形態中，-X¹-較佳為-CH₂CH₂-、-CH₂O-或-OCH₂-。

【0202】 (-X²-)

-X²-表示單鍵、-C(=O)O-、-OC(=O)-、-C(=S)O-、-OC(=S)-、-C(=O)S-、-SC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、-C(=O)NH-、-NHC(=O)-、-CH₂O-、-OCH₂-、-CH₂S-或-SCH₂-。

【0203】 就增大聚合性液晶化合物(2)之芯，增大由異向性色素膜形成用組合物形成之異向性色素膜之二色性之觀點而言，較佳為以直線性較高之基將-C^y-與-C $\equiv$ C-連結。具體而言，-X²-較佳為單鍵或具有 π 鍵結性之-C(=O)O-、-OC(=O)-、-C(=S)O-、-OC(=S)-、-C(=O)S-、-SC(=O)-、-CH=CH-、-C(=O)NH-、-NHC(=O)-，就直線性更高而言，進而較佳為單鍵。

【0204】 (-Q¹及-Q²)

-Q¹及-Q²中之聚合性基係具有可藉由光、熱及/或放射線而聚合之部分結構之基，且係為了確保聚合功能所需之官能基或原子團。就異向性色

素膜之製造之觀點而言，該聚合性基較佳為光聚合性基。

【0205】作為該聚合性基，具體而言，例如可例舉：丙烯醯基、甲基丙烯醯基、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、丙烯醯基胺基、甲基丙烯醯胺基、乙烯基、乙烯氧基、乙炔基、乙炔氧基、1,3-丁二烯基、1,3-丁二烯氧基、環氧乙烷基、氧雜環丁基、縮水甘油基、縮水甘油氧基、苯乙烯基、苯乙烯氧基等；較佳為丙烯醯基、甲基丙烯醯基、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、丙烯醯基胺基、甲基丙烯醯胺基、環氧乙烷基、縮水甘油基、縮水甘油氧基，更佳為丙烯醯基、甲基丙烯醯基、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、丙烯醯基胺基、甲基丙烯醯胺基、縮水甘油基、縮水甘油氧基，進而較佳為丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基、縮水甘油氧基。

【0206】(-R¹-及-R²-)

-R¹-及-R²-中之鏈狀有機基係不包含上述芳香族烴環、非芳香族烴環、芳香族雜環、非芳香族雜環等環狀結構之2價有機基。

作為此種鏈狀有機基，可例舉：-(伸烷基)-、-O-(伸烷基)-、-S-(伸烷基)-、-NH-(伸烷基)-、-N(烷基)-(伸烷基)-、-OC(=O)-(伸烷基)-、-C(=O)O-(伸烷基)-。

【0207】作為該等鏈狀有機基中之伸烷基，可例舉碳數1～25之直鏈狀或分支狀伸烷基。伸烷基之碳-碳鍵可一部分成為不飽和鍵。伸烷基所包含之一個或一個以上亞甲基可為由-O-、-S-、-NH-、-N(R^m)-、-C(=O)-、-C(=O)-O-、-C(=O)-NH-、-CHF-、-CF₂-、-CHCl-、-CCl₂-取代(displace)之結構。R^m表示碳數1～6之直鏈狀或分支狀烷基。

【0208】作為該等鏈狀有機基中之伸烷基，就分子直線性較高而言，較佳為伸烷基之碳之一部分可為不飽和鍵、或伸烷基所包含之一個或

一個以上亞甲基可為由上述基取代(displace)之結構且碳數1~25之直鏈狀之伸烷基。

【0209】 鏈狀有機基中之主鏈(意指鏈狀有機基中之最長之鏈狀部分)之原子數較佳為3~25，更佳為5~20，進而較佳為6~20。

【0210】 作為鏈狀有機基，較佳為 $-(CH_2)_r-CH_2-$ 、 $-O-(CH_2)_r-CH_2-$ 、 $-(O)_{r1}-(CH_2CH_2O)_{r2}-(CH_2)_{r3}-$ 、 $-(O)_{r1}-(CH_2)_{r2}-(CH_2CH_2O)_{r3}-$ 。該等式中之 r 為1~24之整數，較佳為2~24之整數，更佳為4~19之整數，進而較佳為5~19之整數。又，該等式中之 $r1$ 、 $r2$ 、 $r3$ 分別獨立地表示整數，將鏈狀有機基中之主鏈(意指鏈狀有機基中之最長之鏈狀部分)之原子數以較佳成為3~25，更佳成為5~20，進而較佳成為6~20之方式適當調整。

【0211】 $-R^1-$ 及 $-R^2-$ 分別獨立地較佳為 $-(伸烷基)-$ 、 $-O-(伸烷基)-$ ，更佳為 $-(伸烷基)-$ 、 $-O-(伸烷基)-$ 。於某一形態中， $-R^1-$ 及 $-R^2-$ 中之鏈狀有機基為 $-(伸烷基)-$ ，於另一形態中， $-R^1-$ 及 $-R^2-$ 中之鏈狀有機基為 $-O-(伸烷基)-$ 。

【0212】 於如上述式(2B)、式(2E)般， $-X^1-$ 與 $-R^1-$ 或 $-X^1-$ 與 $-R^2-$ 鍵結之情形；或者於上述式(2B)中 $-A^{13}-$ 為單鍵或於上述式(2E)中 $-A^{11}-$ 為單鍵，且 $-R^1-$ 或 $-R^2-$ 與 $-Y^1-$ 或 $-Y^2-$ 鍵結之情形時，與 $-X^1-$ 、 $-Y^1-$ 或 $-Y^2-$ 直接鍵結之 $-R^1-$ 或 $-R^2-$ 較佳為 $-(伸烷基)-$ 。

【0213】 除上述以外，不與 $-X^1-$ 、 $-Y^1-$ 或 $-Y^2-$ 直接鍵結之 $-R^1-$ 或 $-R^2-$ 較佳為 $-O-(伸烷基)-$ 。

【0214】 $(-A^{11}-、-A^{12}-及-A^{13}-$ 中之2價有機基)

$-A^{11}-、-A^{12}-及-A^{13}-$ 中之2價有機基較佳為下述式(4)所表示之基。

【0215】 $-Q^3-\cdots(4)$

(式(4)中， Q^3 表示烴環基或雜環基)

【0216】 $-Q^3$ -中之烴環基包括芳香族烴環基及非芳香族烴環基。

芳香族烴環基包括非連結芳香族烴環基及連結芳香族烴環基。

【0217】 非連結芳香族烴環基係單環或縮合之芳香族烴環之2價基，其碳數為6~20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。非連結芳香族烴環基之碳數更佳為6~15。作為芳香族烴環，可例舉：苯環、萘環、蒽環、菲環、芘環、稠四苯環、芘環、苯并芘環、蒽環、9,10-苯并菲環、乙烷合萘環、螢蒽環、萘環等。

【0218】 連結芳香族烴環基係複數個單環或縮合之芳香族烴環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基。單環或縮合環之碳數為6~20時，藉由適當之芯之大小使配向性變良好，故而較佳。連結芳香族烴環基之碳數更佳為6~15。作為連結芳香族烴環基，例如可例舉如下2價基，該2價基係第1碳數6~20之單環或縮合之芳香族烴環與第2碳數6~20之單環或縮合之芳香族烴環以單鍵鍵結，於第1碳數6~20之單環或縮合之芳香族烴環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數6~20之單環或縮合之芳香族烴環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。作為連結芳香族烴環基，具體可例舉聯苯-4,4'-二基。

【0219】 作為芳香族烴環基，非連結芳香族烴環基會使作用於液晶化合物之間之分子間相互作用最佳藉此使分子配向性變良好，故而較佳。

其中，作為芳香族烴環基，較佳為苯環之2價基、萘環之2價基，更佳為苯環之2價基(伸苯基)。作為伸苯基，較佳為1,4-伸苯基。藉由 $-Q^3$ -為該等基，呈液晶分子之直線性提高而獲得分子配向性提昇之效果之趨勢。

【0220】 非芳香族烴環基包括非連結非芳香族烴環基及連結非芳香

族烴環基。

【0221】 非連結非芳香族烴環基係單環或縮合之非芳香族烴環之2價基，其碳數為3～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。非連結非芳香族烴環基之碳數更佳為3～15。作為非芳香族烴環，可例舉：環丙烷環、環丁烷環、環戊烷環、環己烷環、環庚烷環、環辛烷環、環己烯環、降莰烷環、莰烷環、金剛烷環、四氫萘環、二環[2.2.2]辛烷環等。

【0222】 非連結非芳香族烴環基包括不具有不飽和鍵作為非芳香族烴環之構成環之原子間鍵之脂環式烴環基、及具有不飽和鍵作為非芳香族烴環之構成環之原子間鍵之不飽和非芳香族烴環基。就生產性之觀點而言，非連結非芳香族烴環基較佳為脂環式烴環基。

【0223】 連結非芳香族烴環基係複數個單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基；或者選自由單環之芳香族烴環、縮合之芳香族烴環、單環之非芳香族烴環及縮合之非芳香族烴環所組成之群中之1種以上之環與單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵的2價基。

基於適當之芯之大小使分子配向性變良好之原因，單環或縮合環之碳數較佳為3～20。

【0224】 作為連結非芳香族烴環基，例如可例舉下述2價基，該2價基係第1碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環與第2碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結，於第1碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。進而，例如可例

舉如下2價基，該2價基係碳數3～20之單環或縮合之芳香族烴環與碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環以單鍵鍵結，於碳數3～20之單環或縮合之芳香族烴環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於碳數3～20之單環或縮合之非芳香族烴環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。

【0225】 作為連結非芳香族烴環基，具體可例舉：雙(環己烷)-4,4'-二基、1-環己基苯-4,4'-二基。

【0226】 作為非芳香族烴環基，非連結非芳香族烴環基會使作用於液晶化合物之間之分子間相互作用最佳藉此使分子配向性變良好，故而較佳。

【0227】 作為非連結非芳香族烴環基，較佳為環己烷之2價基(環己二基)，作為環己二基，較佳為環己烷-1,4-二基。

【0228】 -Q³-中之雜環基包括芳香族雜環基及非芳香族雜環基。

【0229】 芳香族雜環基包括非連結芳香族雜環基及連結芳香族雜環基。

【0230】 非連結芳香族雜環基係單環或縮合之芳香族雜環之2價基，其碳數為4～20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。非連結芳香族雜環基之碳數更佳為4～15。

【0231】 作為芳香族雜環，可例舉：呋喃環、苯并呋喃環、噻吩環、苯并噻吩環、吡咯環、吡唑環、咪唑環、噻唑環、噁二唑環、吡啶環、吡嗪環、吡咯并咪唑環、吡咯并吡唑環、吡咯并吡啶環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并吡咯環、呋喃并呋喃環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噁唑環、苯并異噻唑環、苯并咪唑環、吡啶環、吡嗪環、噁吡啶環、三吡啶環、喹啉環、異喹啉環、吡啶環、喹啉環、

啡啶環、喹唑啉環、喹唑啉酮環、萘環等。

【0232】 連結芳香族雜環基係複數個單環或縮合之芳香族雜環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基。單環或縮合環之碳數為4~20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。連結芳香族雜環基之碳數更佳為4~15。

【0233】 作為連結芳香族雜環基，例如可例舉2價基，該2價基係第1碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環與第2碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環以單鍵鍵結，於第1碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數4～20之單環或縮合之芳香族雜環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。

【0234】 非芳香族雜環基包括非連結非芳香族雜環基及連結非芳香族雜環基。

【0235】 非連結非芳香族雜環基係單環或縮合之非芳香族雜環之2價基，其碳數為4~20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。非連結非芳香族雜環基之碳數更佳為4~15。

【0236】 作為碳數4~20之單環或縮合之非芳香族雜環之2價基之非芳香族雜環，可例舉：四氫呋喃環、四氫吡喃環、二噁烷環、四氫噻吩環、四氫噻喃環、吡咯啉環、哌啶環、二氫吡啶環、哌嗪環、四氫噻唑環、四氫噻吩環、八氫喹啉環、四氫喹啉環、八氫喹啉環、四氫喹啉環、四氫咪唑環、四氫苯并咪唑環、吡啶環等。

【0237】 連結非芳香族雜環基係複數個單環或縮合之非芳香族雜環以單鍵鍵結而於構成環之原子上具有鍵結鍵之2價基。單環或縮合環之碳數為4~20時，藉由適當之芯之大小使分子配向性變良好，故而較佳。連

結非芳香族雜環基之碳數更佳為4~15。

【0238】 作為連結芳香族雜環基，例如可例舉如下2價基，該2價基係第1碳數4~20之單環或縮合之非芳香族雜環與第2碳數4~20之單環或縮合之非芳香族雜環以單鍵鍵結，於第1碳數4~20之單環或縮合之非芳香族雜環之構成環之原子上具有第1鍵結鍵，於第2碳數4~20之單環或縮合之非芳香族雜環之構成環之原子上具有第2鍵結鍵。

【0239】 $-Q^3$ -中之芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基分別可由選自由 $-R^n$ 、 $-OH$ 、 $-O-R^n$ 、 $-O-C(=O)-R^n$ 、 $-NH_2$ 、 $-NH-R^n$ 、 $-N(R^{n'})-R^n$ 、 $-C(=O)-R^n$ 、 $-C(=O)-O-R^n$ 、 $-C(=O)-NH_2$ 、 $-C(=O)-NH-R^n$ 、 $-C(=O)-N(R^{n'})-R^n$ 、 $-SH$ 、 $-S-R^n$ 、三氟甲基、胺磺醯基、羧基、磺基、氰基、硝基及鹵素所組成之群中之1種以上之基取代。 $-R^n$ 及 $-R^{n'}$ 分別獨立地表示碳數1~6之直鏈狀或分支狀烷基。

【0240】 就分子結構之直線性較高，聚合性液晶化合物(2)彼此容易聚集而容易表現出液晶狀態之方面而言， $-Q^3$ -中之芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基分別獨立地較佳為未經取代、或經甲基、甲氧基、氟原子、氯原子、溴原子取代，更佳為未經取代。

【0241】 $-Q^3$ -中之芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基所具有之取代基可相同亦可不同，又，芳香族烴環基、非芳香族烴環基、芳香族雜環基、非芳香族雜環基可全部經取代，亦可全部未經取代，還可一部分經取代且一部分未經取代。

【0242】 $-A^{11}$ -、 $-A^{12}$ -及 $-A^{13}$ -中之2價有機基所具有之取代基相同亦可不同，可 $-A^{11}$ -、 $-A^{12}$ -及 $-A^{13}$ -中之2價有機基可全部經取代，亦可全部未經取代，還可一部分經取代且一部分未經取代。

【0243】 $-Q^3$ -較佳為烴環基，更佳為伸苯基、環己二基。就可提高聚合性液晶化合物(2)之分子結構之直線性而言， $-Q^3$ -進而較佳為1,4-伸苯基、環己烷-1,4-二基。

【0244】 作為 $-A^{11}$ -、 $-A^{12}$ -及 $-A^{13}$ -之2價有機基，較佳為 $-Q^3$ -為烴環基，即，2價有機基為烴環基。作為2價有機基，更佳為伸苯基、環己二基，就可提高聚合性液晶化合物(2)之分子結構之直線性而言，進而較佳為1,4-伸苯基、環己烷-1,4-二基。

【0245】 作為聚合性液晶化合物(2)，較佳為 $-A^{11}$ -、 $-A^{12}$ -及 $-A^{13}$ -中之一者為式(3)所表示之部分結構且另外兩者分別獨立地為2價有機基，更佳為 $-A^{11}$ -、 $-A^{12}$ -及 $-A^{13}$ -中之式(3)所表示之部分結構之 $-C^y$ -為烴環基，尤佳為2價有機基為烴環基。進而，較佳為該烴環基為1,4-伸苯基或環己烷-1,4-二基。又，較佳為 $-A^{11}$ -及 $-A^{13}$ -之一者為環己烷-1,4-二基。

【0246】 更佳為 $-A^{11}$ -及 $-A^{13}$ -中之一者為式(3)所表示之部分結構，另外一者及 $-A^{12}$ -為2價有機基。於此情形時，較佳為 $-A^{11}$ -及 $-A^{13}$ -中之為2價有機基之一者為環己烷-1,4-二基，尤佳為 $-A^{12}$ -為1,4-伸苯基。

【0247】 ($-Y^1$ -及 $-Y^2$ -)

$-Y^1$ -及 $-Y^2$ -分別獨立地表示單鍵、 $-C(=O)O-$ 、 $-OC(=O)-$ 、 $-C(=S)O-$ 、 $-OC(=S)-$ 、 $-C(=O)S-$ 、 $-SC(=O)-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-C(=O)NH-$ 、 $-NHC(=O)-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2S-$ 或 $-SCH_2-$ 。就呈容易進行聚合性液晶化合物(2)之直線性或繞分子短軸之旋轉運動之趨勢而言，作為 $-Y^1$ -及 $-Y^2$ -，分別獨立地較佳為 π 鍵結性較小之單鍵、 $-C(=O)O-$ 、 $-OC(=O)-$ 、 $-C(=S)O-$ 、 $-OC(=S)-$ 、 $-C(=O)S-$ 、 $-SC(=O)-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C(=O)NH-$ 、 $-NHC(=O)-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2S-$ 或 $-SCH_2-$ 。

SCH₂-，更佳為單鍵、-C(=O)O-、-OC(=O)-、-CH₂CH₂-、-CH₂O-、-OCH₂-。

【0248】於如上述式(2A)、式(2C)、式(2D)、式(2F)般，-X¹-與-Y¹-或-X¹-與-Y²-鍵結之情形時，與-X¹-鍵結之-Y¹-或與-X¹-鍵結之-Y²-較佳為單鍵。-X¹-與-Y¹-及-Y²-之另一者較佳為-C(=O)O-或-OC(=O)-。

【0249】於如上述式(2B)、式(2E)般，-X¹-與-Y¹-及-Y²-中之任一者均未鍵結之情形時，-X¹-較佳為-CH₂CH₂-、-CH₂O-或-OCH₂-，-Y¹-及-Y²-均較佳為-C(=O)O-或-OC(=O)-。

【0250】 (k)

k為1或2。於某一形態中，k較佳為1。於另一形態中，k較佳為2。

於k為2之情形時，各-Y²-彼此可相同亦可不同，各-A¹³-彼此可相同亦可不同。

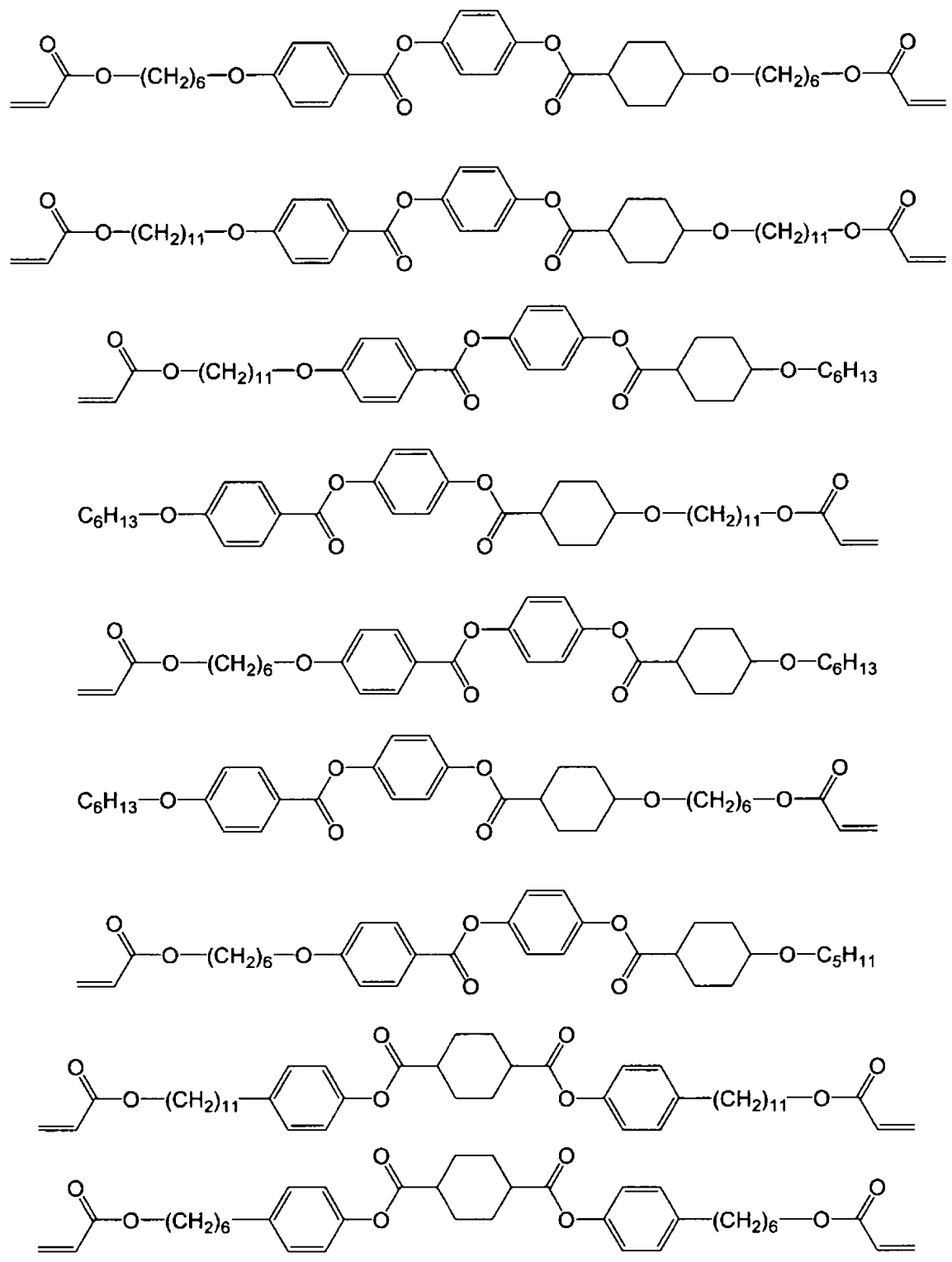
【0251】 (適宜結構)

作為聚合性液晶化合物(2)，上述式(2A)、(2B)、(2E)或(2F)所表示之化合物因會使作用於液晶化合物之間之分子間相互作用最佳，且成為適當之芯之大小而使分子配向性變良好，故而較佳。

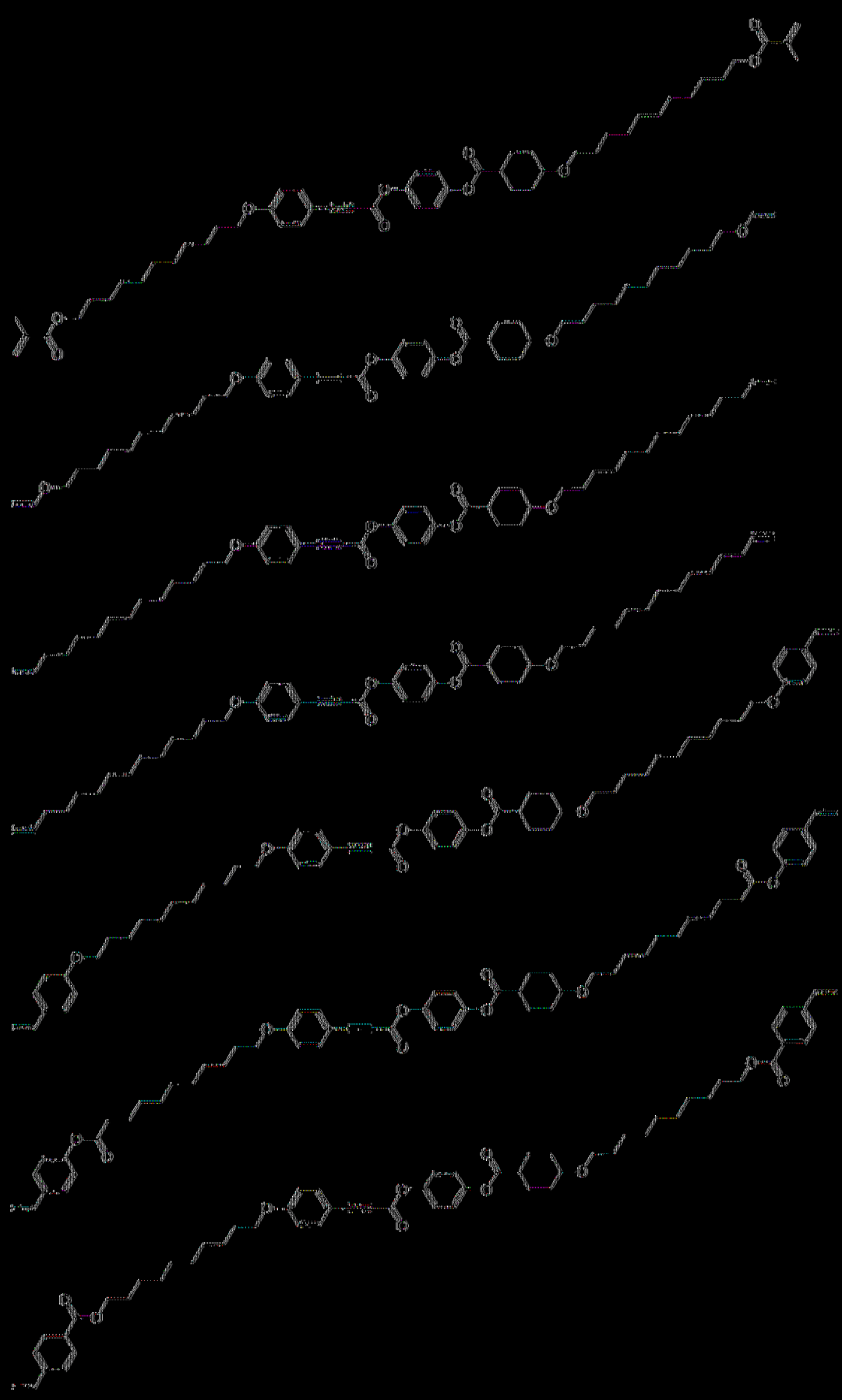
【0252】 (聚合性液晶化合物之具體例)

作為本發明之異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物，具體可例舉以下所記載之聚合性液晶化合物，但並不限定於該等。以下例示式中，C₆H₁₃係指正己基，C₅H₁₁係指正戊基。

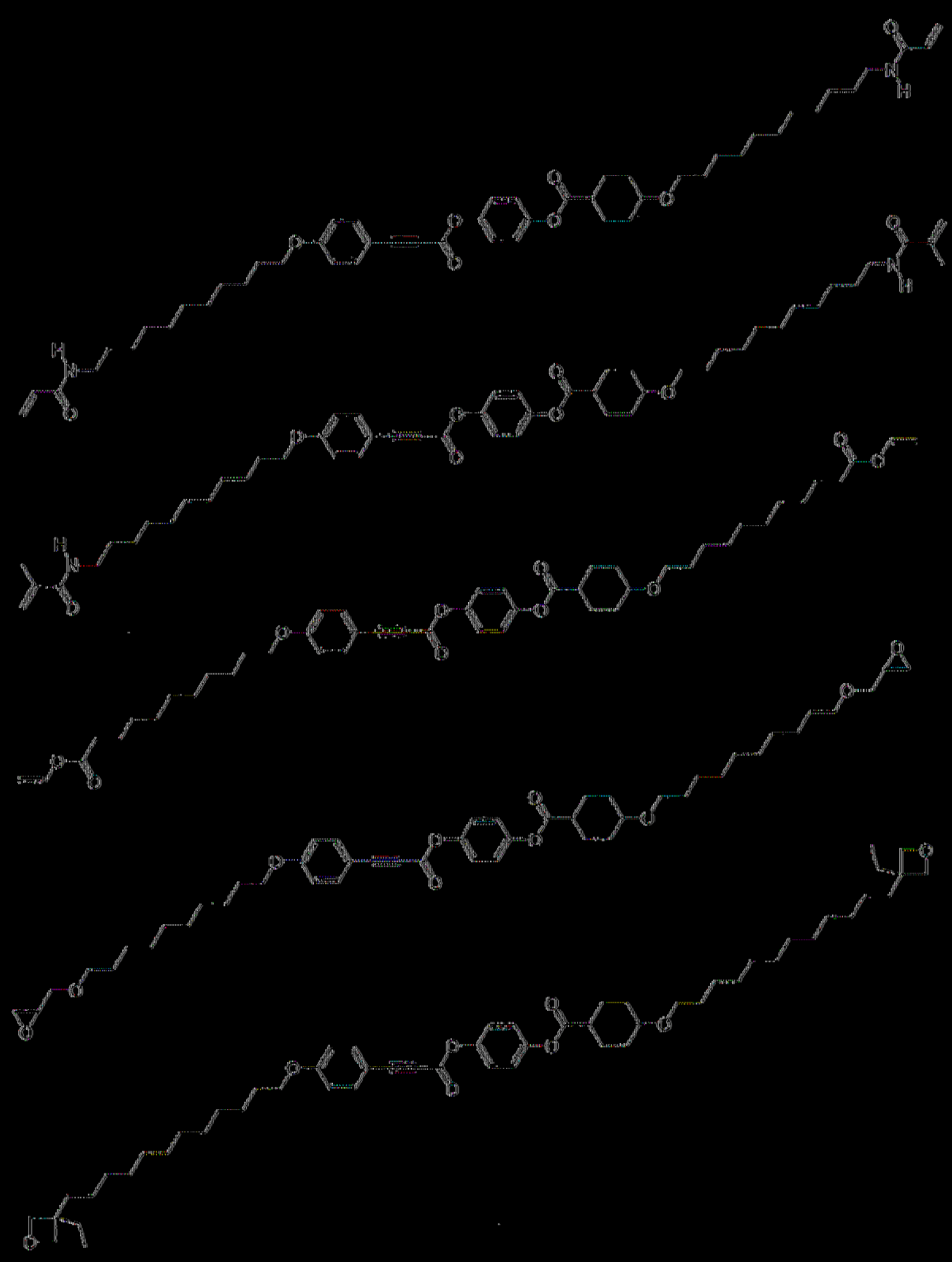
【0253】 [化13]



【0254】 [化14]

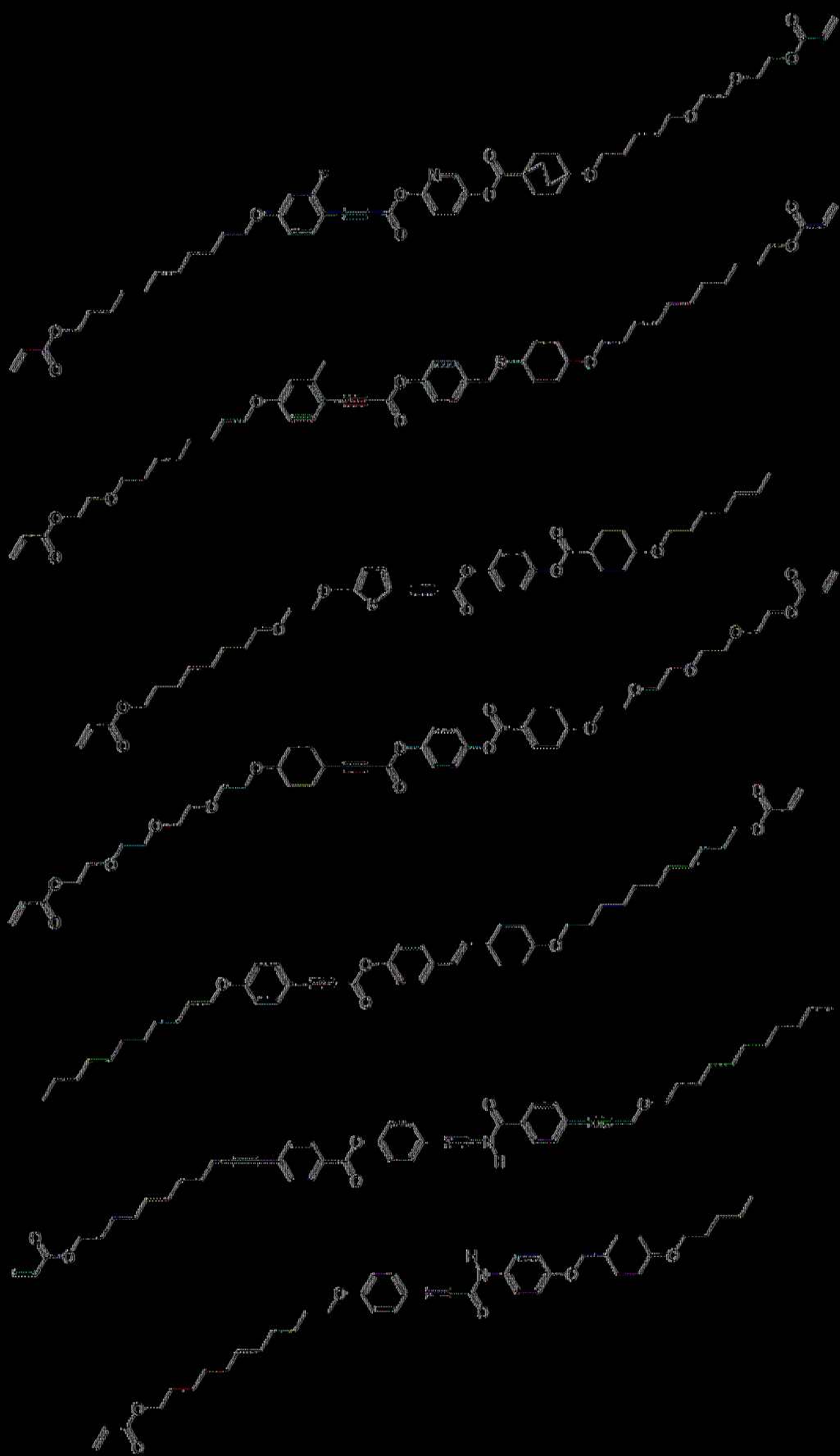


[(0256)] [化16]

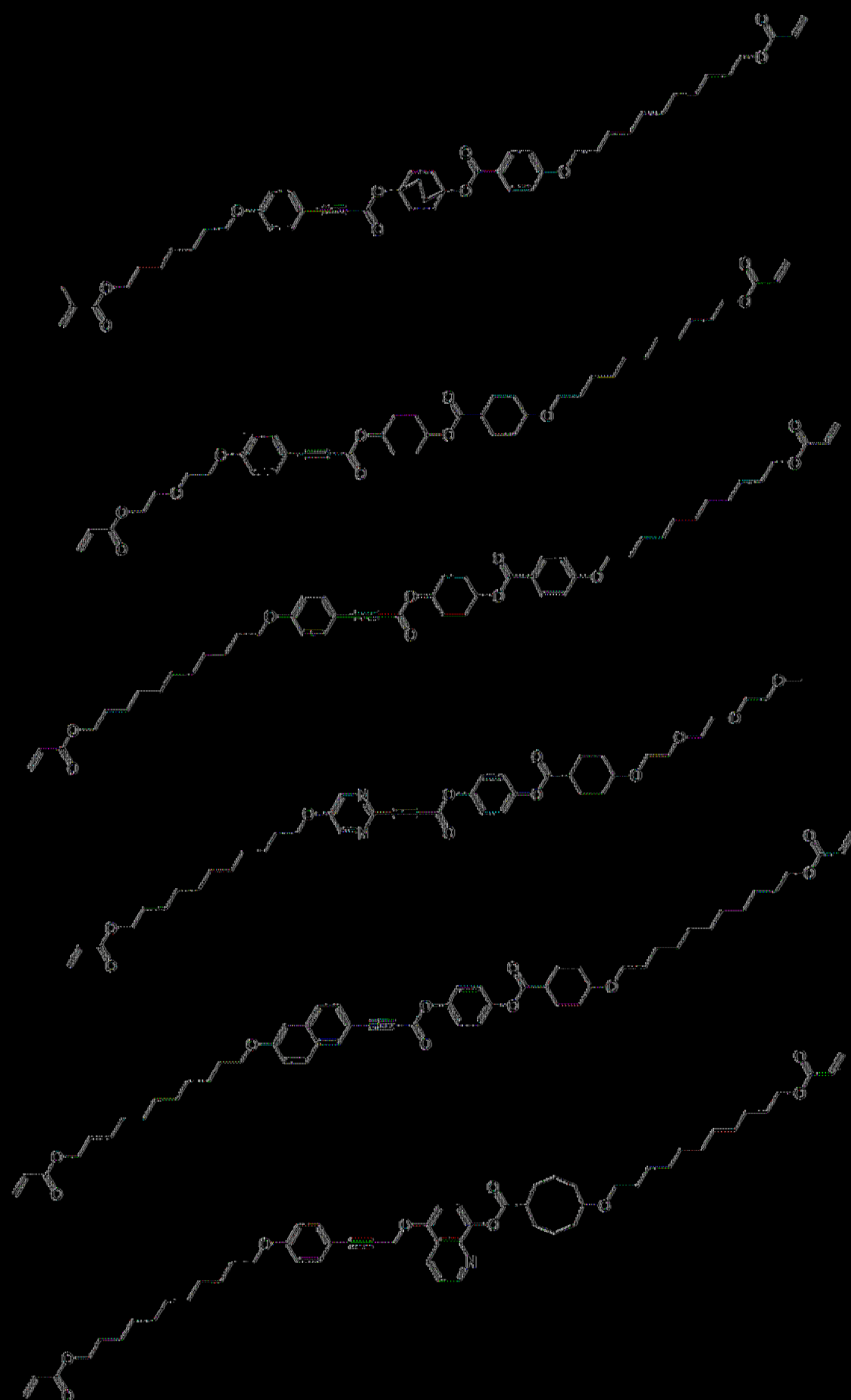


[(025')][4:1']

$$|(0258)| \quad [4; 18]$$

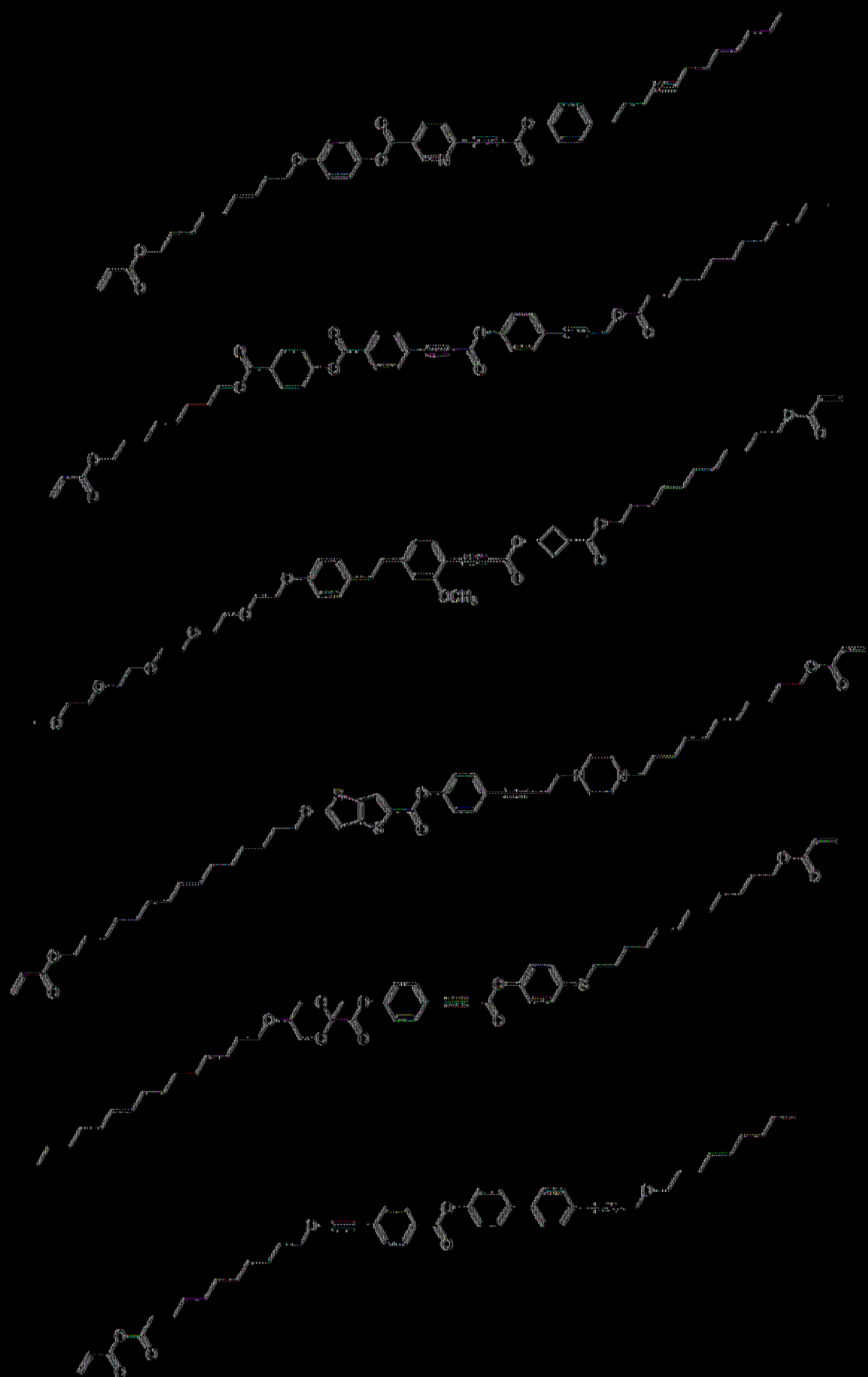


〔0259〕 [化19]



[02.60] [14:20]

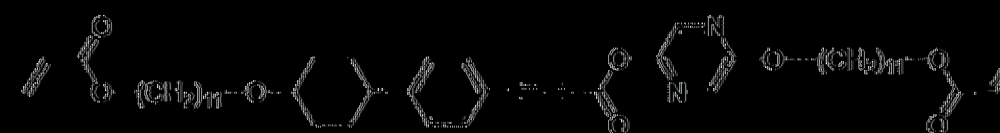
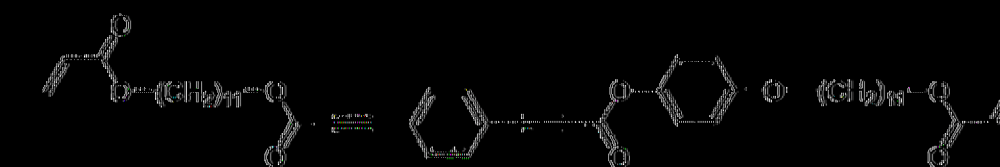
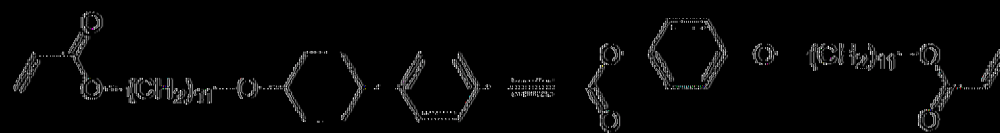
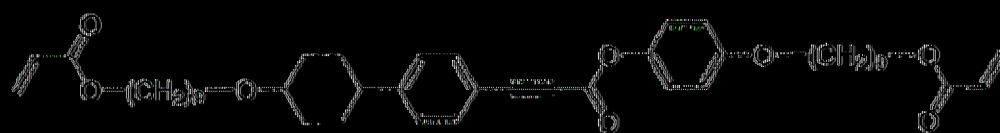
$$|(02,61)| \quad |[11,21]|$$



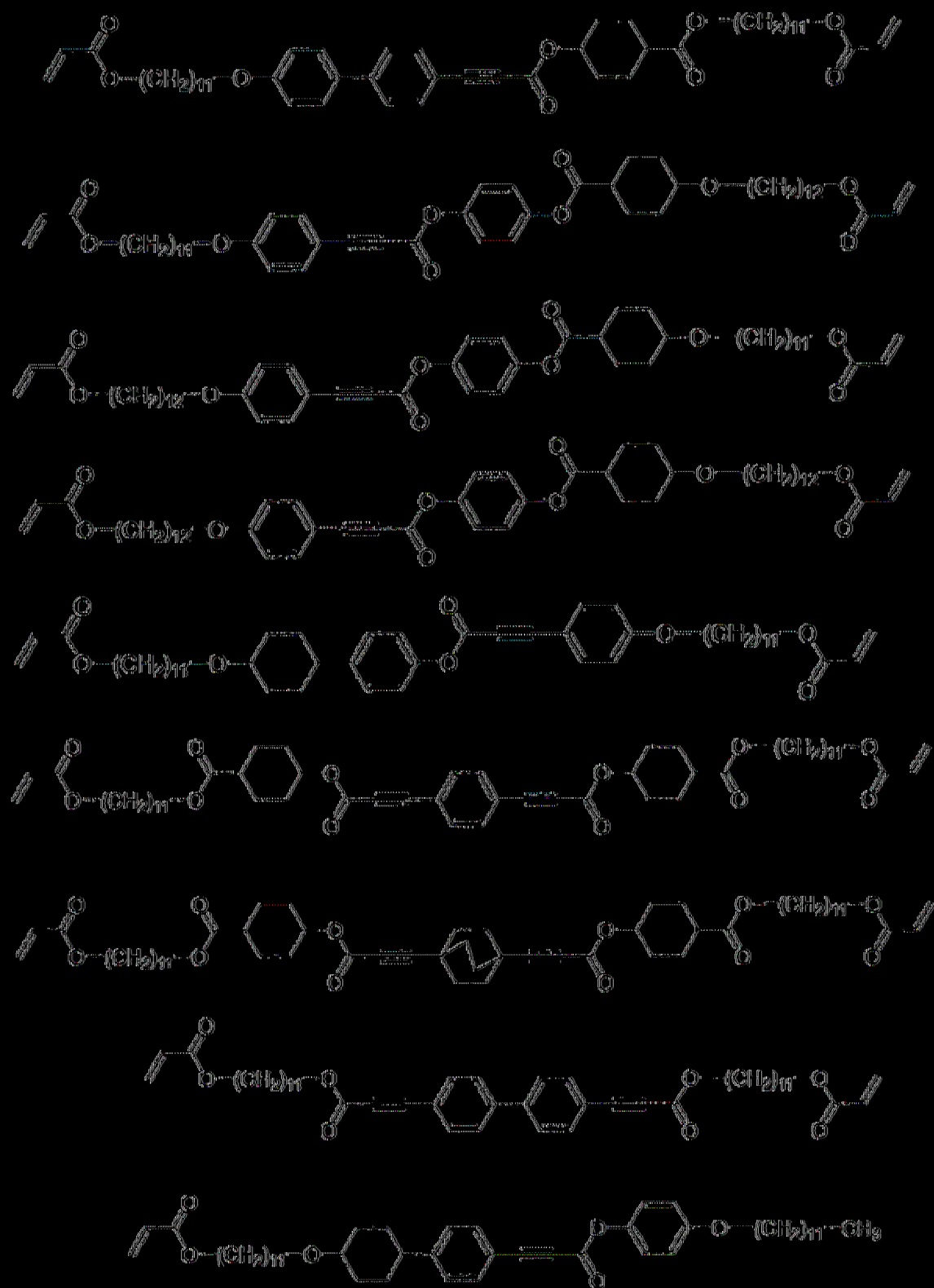
[(02.63)] [14.23]



[(02.64)] [(11.24)]



[(0265)] [1425]



[(02.66)] (液晶化合物之含量)

本發明之異向性色素膜形成用組合物所含有之液晶化合物較佳為由聚合性液晶化合物(2)構成。本發明之異向性色素膜形成用組合物中，可僅單獨包含1種聚合性液晶化合物，亦可以任意組合及比率包含2種以上聚合性液晶化合物。

第 75 頁(發明說明書)

合性液晶化合物。

【0267】 本發明之異向性色素膜用組合物中之液晶化合物之含量(併用2種以上液晶化合物之情形時為各者含量之總和)相對於異向性色素膜用組合物之固形物成分(100質量份)較佳為50質量份以上，更佳為55質量份以上，且較佳為99質量份以下，更佳為98質量份以下。若異向性色素膜用組合物之液晶化合物之含量為上述下限以上且上限以下，則液晶分子之配向性呈提高之趨勢。

【0268】 本發明之異向性色素膜用組合物亦可包含1種或2種以上除聚合性液晶化合物(2)以外之其他聚合性或非聚合性液晶化合物，就更進一步有效地獲得使用聚合性液晶化合物(2)所產生之本發明之效果之觀點而言，本發明之異向性色素膜用組合物所包含之液晶化合物之總量100質量%中的聚合性液晶化合物(2)之比率較佳為5質量%以上，更佳為10質量%以上，尤佳為15~100質量%。

【0269】 (各向同性相出現溫度)

就製程之觀點而言，本發明之異向性色素膜形成用組合物所含有之聚合性液晶化合物之各向同性相出現溫度較佳為160℃以下，更佳為140℃以下，進而較佳為115℃以下，進而更佳為110℃以下，尤佳為105℃以下。

此處，各向同性相出現溫度係指自液晶向液體之相轉移溫度及自液體向液晶之相轉移溫度。於本發明中，較佳為該等相轉移溫度之至少一者為上述上限以下，更佳為該等相轉移溫度兩者均為上述上限以下。

【0270】 (聚合性液晶化合物之製造方法)

本發明之異向性色素膜形成用組合物所含有之聚合性液晶化合物可

藉由組合烷基化反應、酯化反應、醯胺化反應、醚化反應、本位取代反應、使用金屬觸媒之偶合反應等公知之化學反應而製造。

例如，本發明之異向性色素膜形成用組合物所含有之聚合性液晶化合物可依照下述實施例所記載之方法、或「液晶便覽」(丸善股份有限公司，2000年10月30日發行)第449～468頁所記載之方法合成。

【0271】 (聚合性液晶化合物與本發明之化合物之關係)

基於容易提昇使用異向性色素膜形成用組合物形成之異向性色素膜之配向性之觀點，於異向性色素膜形成用組合物中，若聚合性液晶化合物之分子長度與色素之分子長度之差較小，則液晶分子與色素分子之分子間相互作用較強，色素分子不易阻礙液晶分子彼此之聚集，故而較佳。

【0272】 因此，於本發明之異向性色素膜形成用組合物中，異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物所具有之環結構之數量(r_{n1})與異向性色素膜形成用組合物所包含之本發明之化合物所具有之環結構之數量(r_{n2})的比(r_{n1}/r_{n2})較佳為0.7～1.5。

再者，2個以上之環縮合之縮合環以環結構計，計為1個。

【0273】 此處，式(1)所表示之化合物(1)所具有之環結構之數量(r_{n2})係式中之 A^1 、 A^2 及 A^3 之總和，具體而言，於 n 為1之情形時， r_{n2} 為3；於 n 為2之情形時， r_{n2} 為4；於 n 為3之情形時， r_{n2} 為5。

再者，即便 $-Y$ 為如吡咯啉基或哌啉基之環狀官能基， $-Y$ 所包含之環結構亦不包含於式(1)所表示之化合物(1)所具有之環結構之數量(r_{n2})。

【0274】 又，式(11)所表示之化合物(11)所具有之環結構之數量(r_{n2})係指式中之 A^{41} 、 A^{42} 及 A^{43} 之總和，具體而言，於 n 為1之情形時， r_{n2} 為3；於 n 為2之情形時， r_{n2} 為4；於 n 為3之情形時， r_{n2} 為5。

再者，即便-Y為如吡咯啉基或哌啉基之環狀官能基，-Y所包含之環結構亦不包含於式(11)所表示之化合物(11)所具有之環結構之數量(r_{n2})。

【0275】 又，式(21)所表示之化合物(11)所具有之環結構之數量(r_{n2})係指式中之 A^{21} 、 A^{22} 及 A^{23} 之總和，具體而言，於n為1之情形時， r_{n2} 為3；於n為2之情形時， r_{n2} 為4；於n為3之情形時， r_{n2} 為5。

再者，即便-Y為如吡咯啉基或哌啉基之環狀官能基，-Y所包含之環結構亦不包含於式(21)所表示之化合物(21)所具有之環結構之數量(r_{n2})。

【0276】 又，式(31)所表示之化合物(31)所具有之環結構之數量(r_{n2})係指式(31)中之 $-A^{31}-$ 、 $-A^{32}-$ 及 $-A^{33}-$ 之總和，具體而言，於n為1之情形時， r_{n2} 為3；於n為2之情形時， r_{n2} 為4；於n為3之情形時， r_{n2} 為5。

再者，即便-Y為如吡咯啉基或哌啉基之環狀官能基，-Y所包含之環結構亦不包含於化合物(31)所具有之環結構之數量(r_{n2})。

【0277】 更具體而言，於n為1之情形時， r_{n2} 為3，故而 r_{n1} 為3或4；於n為2之情形時， r_{n2} 為4，故而 r_{n1} 為3、4、5或6；於n為3之情形時， r_{n2} 為5，故而 r_{n1} 為4、5、6或7，若如此，則異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物所具有之環結構之數量(r_{n1})與異向性色素膜形成用組合物所包含之本發明之化合物所具有之環結構之數量(r_{n2})的比(r_{n1}/r_{n2})成為0.7~1.5，故而較佳。

【0278】 異向性色素膜形成用組合物所包含之聚合性液晶化合物所具有之環結構之數量(r_{n1})不包含聚合性液晶化合物中之聚合性基所包含之環結構(例如環氧乙烷環或氧雜環丁烷環等)。

【0279】 <聚合起始劑>

本發明之異向性色素膜形成用組合物亦可視需要包含聚合起始劑。

【0280】 聚合起始劑係可使聚合性液晶化合物之聚合反應開始之化合物。作為聚合起始劑，較佳為藉由光之作用產生活性自由基之光聚合起始劑。

【0281】 作為可使用之聚合起始劑，例如可例舉：二茂鈦衍生物類；聯咪唑衍生物類；鹵甲基化嘔二唑衍生物類；鹵甲基對稱三吡衍生物類；苯烷酮衍生物類；脲酯系衍生物類；安息香類；二苯甲酮衍生物類；醯基氧化膦衍生物類；鋇鹽類；銻鹽類；蔥醌衍生物類；苯乙酮衍生物類；9-氧硫吡嗪衍生物類；苯甲酸酯衍生物類；吡啶衍生物類；啡吡衍生物類；蔥酮衍生物類等。

【0282】 該等光聚合起始劑中，更佳為苯烷酮衍生物類、脲酯系衍生物類、聯咪唑衍生物類、苯乙酮衍生物類、9-氧硫吡嗪衍生物類。

【0283】 具體而言，作為二茂鈦衍生物類，可例舉：二環戊二烯基二氯化鈦、二環戊二烯基二苯基鈦、二環戊二烯基雙(2,3,4,5,6-五氟苯-1-基)鈦、二環戊二烯基雙(2,3,5,6-四氟苯-1-基)鈦、二環戊二烯基雙(2,4,6-三氟苯-1-基)鈦、二環戊二烯基二(2,6-二氟苯-1-基)鈦、二環戊二烯基二(2,4-二氟苯-1-基)鈦、二(甲基環戊二烯基)雙(2,3,4,5,6-五氟苯-1-基)鈦、二(甲基環戊二烯基)雙(2,6-二氟苯-1-基)鈦、二環戊二烯基[2,6-二氟-3-(吡咯-1-基)-苯-1-基]鈦等。

【0284】 作為聯咪唑衍生物類，可例舉：2-(2'-氯苯基)-4,5-二苯基咪唑二聚物、2-(2'-氯苯基)-4,5-雙(3'-甲氧基苯基)咪唑二聚物、2-(2'-氟苯基)-4,5-二苯基咪唑二聚物、2-(2'-甲氧基苯基)-4,5-二苯基咪唑二聚物、(4'-甲氧基苯基)-4,5-二苯基咪唑二聚物等。

【0285】 作為鹵甲基化嘔二唑衍生物類，可例舉：2-三氯甲基-5-

(2'-苯并呋喃基)-1,3,4-噁二唑、2-三氯甲基-5-[β -(2'-苯并呋喃基)乙烯基]-1,3,4-噁二唑、2-三氯甲基-5-[β -(2'-(6''-苯并呋喃基)乙烯基)]-1,3,4-噁二唑、2-三氯甲基-5-呋喃基-1,3,4-噁二唑等。

【0286】 作為鹵甲基對稱三吡啉衍生物類，可例舉：2-(4-甲氧基苯基)-4,6-雙(三氯甲基)-對稱三吡啉、2-(4-甲氧基萘基)-4,6-雙(三氯甲基)-對稱三吡啉、2-(4-乙氧基萘基)-4,6-雙(三氯甲基)-對稱三吡啉、2-(4-乙氧基羰基萘基)-4,6-雙(三氯甲基)-對稱三吡啉等。

【0287】 作為苯烷酮衍生物類，可例舉：二乙氧基苯乙酮、2-甲基-1-[4-(甲硫基)苯基]-2-嗎啉基丙烷-1-酮、2-苄基-2-二甲基胺基-1-(4-嗎啉基苯基)-丁酮-1、2-苄基-2-二甲基胺基-1-(4-嗎啉基苯基)丁烷-1-酮、4-二甲基胺基苯甲酸乙酯、4-二甲基胺基苯甲酸異戊酯、4-二乙基胺基苯乙酮、4-二甲基胺基苯丙酮、1,4-二甲基胺基苯甲酸2-乙基己酯、2,5-雙(4-二乙基胺基亞苄基)環己酮、7-二乙基胺基-3-(4-二乙基胺基苯甲醯基)香豆素、4-(二乙基胺基)查耳酮等。

【0288】 作為脲酯系衍生物類，可例舉：2-(苯甲醯氧基亞胺基)-1-[4-(苯硫基)苯基]-1-辛酮、O-乙醯基-1-[6-(2-甲基苯甲醯基)-9-乙基-9H-吡啶-3-基]乙酮脲、日本專利特開2000-80068號公報、日本專利特開2006-36750號公報、國際公開第2009/131189號等所記載之脲酯衍生物。

【0289】 作為安息香類，可例舉：安息香、安息香甲醚、安息香苯醚、安息香異丁醚、安息香異丙醚等。

【0290】 作為二苯甲酮衍生物類，可例舉：二苯甲酮、米其勒酮、2-甲基二苯甲酮、3-甲基二苯甲酮、4-甲基二苯甲酮、2-氯二苯甲酮、4-溴二苯甲酮、2-羧基二苯甲酮、鄰苯甲醯基苯甲酸甲酯、4-苯基二苯甲

酮、4-苯甲醯基-4'-甲基二苯硫醚、3,3',4,4'-四(第三丁基過氧基羰基)二苯甲酮及2,4,6-三甲基二苯甲酮等。

【0291】 作為醯基氧化膦衍生物類，可例舉：2,4,6-三甲基苯甲醯基二苯基氧化膦、雙-(2,6-二甲氧基苯甲醯基)-2,4,4-三甲基戊基氧化膦及雙(2,4,6-三甲基苯甲醯基)苯基氧化膦等。

【0292】 作為鎢鹽類，可例舉：二苯基鎢-四(五氟苯基)硼酸鹽、二苯基鎢-六氟磷酸鹽、二苯基鎢-六氟銻酸鹽、二(4-壬基苯基)鎢-六氟磷酸鹽等。

【0293】 作為銻鹽類，可例舉：三苯基銻-六氟磷酸鹽、三苯基銻-六氟銻酸鹽、三苯基銻-四(五氟苯基)硼酸鹽、二苯基[4-(苯硫基)苯基]銻-六氟磷酸鹽、4,4'-雙[二苯基銻基]二苯硫醚-雙六氟磷酸鹽、4,4'-雙[二(β-羥基乙氧基)苯基銻基]二苯硫醚-雙六氟銻酸鹽、4,4'-雙[二(β-羥基乙氧基)苯基銻基]二苯硫醚-雙六氟磷酸鹽、7-[二(對甲苯甲醯基)銻基]-2-異丙基9-氧硫吡啶-六氟銻酸鹽、7-[二(對甲苯甲醯基)銻基]-2-異丙基9-氧硫吡啶-四(五氟苯基)硼酸鹽、4-苯基羰基-4'-二苯基銻基-二苯硫醚-六氟磷酸鹽、4-(對第三丁基苯基羰基)-4'-二苯基銻基-二苯硫醚-六氟銻酸鹽、4-(對第三丁基苯基羰基)-4'-二(對甲苯甲醯基)銻基-二苯硫醚-四(五氟苯基)硼酸鹽等。

【0294】 作為蒽醌衍生物類，可例舉：2-甲基蒽醌、2-乙基蒽醌、2-第三丁基蒽醌、1-氯蒽醌等。

【0295】 作為苯乙酮衍生物類，可例舉：2,2-二甲氧基-2-苯基苯乙酮、2,2-二乙氧基苯乙酮、1-羥基環己基苯基酮、α-羥基-2-甲基苯基丙酮、1-羥基-1-甲基乙基-(對異丙基苯基)酮、1-羥基-1-(對十二烷基苯基)

酮、2-甲基-(4'-甲硫基苯基)-2-嗎啉基-1-丙酮、1,1,1-三氯甲基-(對丁基苯基)酮等。

【0296】 作為9-氧硫吡啶衍生物類，可例舉：9-氧硫吡啶、2-乙基9-氧硫吡啶、2-異丙基9-氧硫吡啶、2-氯9-氧硫吡啶、2,4-二甲基9-氧硫吡啶、2,4-二乙基9-氧硫吡啶、2,4-二異丙基9-氧硫吡啶等。

【0297】 作為苯甲酸酯衍生物類，可例舉：對二甲基胺基苯甲酸乙酯、對二乙基胺基苯甲酸乙酯等。

【0298】 作為吡啶衍生物類，可例舉：9-苯基吡啶、9-(對甲氧基苯基)吡啶等。

【0299】 作為啡啉衍生物類，可例舉9,10-二甲基苯并啡啉等。

【0300】 作為蒽酮衍生物類，可例舉苯并蒽酮等。

【0301】 聚合起始劑可單獨使用1種，亦可併用2種以上。

【0302】 亦可使用市售品作為聚合起始劑。

作為市售品，例如可例舉：IRGACURE(註冊商標，下同)250、IRGACURE 651、IRGACURE 184、DAROCURE 1173、IRGACURE 2959、IRGACURE 127、IRGACURE 907、IRGACURE 369、IRGACURE 379EG、LUCIRIN TPO、IRGACURE 819、IRGACURE 784、OXE-01、OXE-02(均為BASF公司製造)；SEIKUOL(註冊商標)BZ、Z及BEE(精工化學股份有限公司製造)；kayacure(註冊商標)BP100及UVI-6992(陶氏化學股份有限公司製造)；Adeka Optomer SP-152及SP-170(ADEKA股份有限公司製造)；TAZ-A及TAZ-PP(日本SiberHegner股份有限公司製造)；以及TAZ-104(三和化學股份有限公司製造)；TRONLYTR-PBG-304、TRONLYTR-PBG-309、TRONLYTR-

PBG-305、TRONLYTR-PBG-314(常州強力電子新材料有限公司(CHANGZHOU TRONLY NEW ELECTRONIC MATERIALS CO., LTD)製造)。

【0303】於本發明之異向性色素膜形成用組合物包含聚合起始劑之情形時，就不易使聚合性液晶化合物之配向混亂之觀點而言，本發明之異向性色素膜形成用組合物中之聚合起始劑之含量相對於聚合性液晶化合物100質量份，通常為0.1～30質量份，較佳為0.5～10質量份，更佳為0.5～8質量份。

【0304】亦可視需要於聚合起始劑中併用聚合加速劑。作為所使用之聚合加速劑，例如可例舉：N,N-二甲基胺基苯甲酸乙酯等N,N-二烷基胺基苯甲酸烷基酯類；2-巰基苯并噻唑、2-巰基苯并呋唑、2-巰基苯并咪唑等具有雜環之巰基化合物；脂肪族多官能巰基化合物等巰基化合物類等。

又，聚合加速劑可單獨使用1種，亦可併用2種以上。

【0305】亦可視需要併用增感色素以提高感應感度。可根據曝光光源之波長使用適當之增感色素。例如可例舉：日本專利特開平4-221958號公報、日本專利特開平4-219756號公報等所記載之吡啶系色素；日本專利特開平3-239703號公報、日本專利特開平5-289335號公報等所記載之具有雜環之香豆素系色素；日本專利特開平3-239703號公報、日本專利特開平5-289335號公報等所記載之3-酮基香豆素系色素；日本專利特開平6-19240號公報等所記載之吡咯亞甲基系色素；日本專利特開昭47-2528號公報、日本專利特開昭54-155292號公報、日本專利特公昭45-37377號公報、日本專利特開昭48-84183號公報、日本專利特開昭52-112681號公

報、日本專利特開昭58-15503號公報、日本專利特開昭60-88005號公報、日本專利特開昭59-56403號公報、日本專利特開平2-69號公報、日本專利特開昭57-168088號公報、日本專利特開平5-107761號公報、日本專利特開平5-210240號公報、日本專利特開平4-288818號公報等所記載之具有二烷基胺基苯骨架之色素等。

又，增感色素可單獨使用1種，亦可併用2種以上。

【0306】 <溶劑>

本發明之異向性色素膜形成用組合物亦可視需要含有溶劑。

【0307】 作為本發明之異向性色素膜形成用組合物可使用之溶劑，並無特別限定，只要可使色素或其他添加劑於聚合性液晶化合物中充分地分散或溶解即可。例如可例舉：甲醇、乙醇、乙二醇、異丙醇、丙二醇、乙二醇甲醚、乙二醇丁醚、丙二醇單甲醚等醇溶劑；乙酸乙酯、乙酸丁酯、乙二醇甲醚乙酸酯、 γ -丁內酯、丙二醇甲醚乙酸酯、乳酸乙酯等酯溶劑；丙酮、甲基乙基酮、環戊酮、環己酮、2-庚酮、甲基異丁基酮等酮溶劑；戊烷、己烷、庚烷等脂肪族烴溶劑；甲苯、二甲苯等芳香族烴溶劑；乙腈等腈溶劑；四氫呋喃、二甲氧基乙烷、乙二醇二甲醚、乙二醇二乙醚等醚溶劑；全氟苯、全氟甲苯、全氟十氫萘、全氟甲基環己烷、六氟-2-丙醇等含氟溶劑；及氯仿、二氯甲烷、氯苯、二氯苯等含氯溶劑。

該等溶劑可僅使用一種，亦可組合使用兩種以上。

【0308】 溶劑較佳為可使聚合性液晶化合物及色素溶解之溶劑，進而較佳為使聚合性液晶化合物及色素完全溶解之溶劑。又，溶劑較佳為對聚合性液晶化合物之聚合反應為惰性之溶劑。又，就塗佈下述本發明之異向性色素膜形成用組合物之觀點而言，溶劑較佳為沸點處於50～200℃之

範圍內之溶劑。

【0309】於本發明之異向性色素膜形成用組合物含有溶劑之情形時，溶劑於異向性色素膜形成用組合物中所占之含有比率較佳為相對於本發明之組合物之總量(100質量%)為50~98質量%。換言之，本發明之異向性色素膜形成用組合物中之固形物成分較佳為2~50質量%。

若異向性色素膜形成用組合物中之固形物成分含量為上述上限值以下，則呈異向性色素膜形成用組合物之黏度不會變得過高，所獲得之偏光膜之厚度變均勻從而偏光膜中不易產生不均之趨勢。

【0310】本發明之異向性色素膜形成用組合物之固形物成分含量可考慮所欲製造之偏光膜之厚度來決定。

【0311】本發明之異向性色素膜用組合物之黏度並無特別限定，只要可藉由下述塗佈方法製作不存在厚度不均之均勻之膜即可。就獲得大面積下之厚度均勻性、塗佈速度等生產性、光學特性之面內均勻性之觀點而言，本發明之異向性色素膜形成用組合物之黏度較佳為0.1 mPa·s以上，且較佳為500 mPa·s以下，更佳為100 mPa·s以下，進而較佳為50 mPa·s以下。

【0312】 <其他添加劑>

本發明之異向性色素膜形成用組合物亦可除上述聚合起始劑等以外，視需要進而含有聚合抑制劑、聚合助劑、聚合性非液晶化合物、界面活性劑、調平劑、偶合劑、pH值調整劑、分散劑、抗氧化劑、有機、無機填料、有機、無機奈米片材、有機、無機奈米纖維、金屬氧化物等其他添加劑作為色素及聚合性液晶化合物以外之成分。藉由含有該等添加劑，而有可能可提昇本發明之異向性色素膜形成用組合物之塗佈性或穩定性

等，或提昇由本發明之異向性色素膜形成用組合物形成之異向性色素膜之穩定性。

【0313】 <異向性色素膜形成用組合物之製造方法>

製造本發明之異向性色素膜用組合物之方法並無特別限定。例如，將包含本發明之化合物之色素、聚合性液晶化合物、視需要添加之溶劑、其他添加劑等混合，於0～80℃下進行攪拌、振盪而使色素溶解。於難溶性之情形時，亦可使用均質機、珠磨機分散機等。

【0314】 作為製造本發明之異向性色素膜用組合物之方法，亦可具有過濾步驟以去除組合物中之異物等。

【0315】 關於本發明之異向性色素膜形成用組合物，自異向性色素膜形成用組合物中去除溶劑後之組合物於任意溫度下可為液晶亦可並非液晶，但較佳為於任意溫度下均顯示出液晶性。

【0316】 就下述所記載之塗敷製程之觀點而言，自本發明之異向性色素膜形成用組合物中去除溶劑後之組合物之各向同性相出現溫度較佳為未達160℃，更佳為未達140℃，進而較佳為未達115℃，進而更佳為未達110℃，尤佳為未達105℃。

【0317】 [異向性色素膜]

本發明之異向性色素膜係使用本發明之異向性色素膜形成用組合物而形成。因此，本發明之異向性色素膜包含色素、以及聚合性液晶化合物及具有基於聚合性液晶化合物之單元之聚合物之一者或兩者，色素包含本發明之化合物。

【0318】 本發明之異向性色素膜亦可包含非聚合性液晶化合物、聚合起始劑、聚合抑制劑、聚合助劑、聚合性非液晶化合物、非聚合性非液

晶化合物、界面活性劑、調平劑、偶合劑、pH值調整劑、分散劑、抗氧化劑、有機、無機填料、有機、無機奈米片材、有機、無機奈米纖維、金屬氧化物等作為其他成分。

【0319】 本發明之異向性色素膜除可作為利用光吸收之異向性而獲得直線偏光、圓偏光、橢圓偏光等之偏光膜發揮功能以外，還可藉由膜形成製程及基板或含有有機化合物(色素或透明材料)之組合物之選擇，而作為折射異向性或傳導異向性等各種異向性色素膜功能化。

【0320】 於將本發明之異向性色素膜用作液晶顯示器用或OLED用抗反射膜之偏光元件之情形時，異向性色素膜之配向特性可使用二色比來表示。只要二色比為8以上，則作為偏光元件發揮功能，較佳為15以上，更佳為20以上，進而較佳為25以上，尤佳為30以上，特佳為40以上。異向性色素膜之二色比越高越佳。藉由二色比為上述下限值以上，適合用作下述光學元件、尤其是偏光元件。

【0321】 於用作OLED用抗反射膜之偏光元件之情形時，即便相位差膜等周邊材料之性能較低，只要偏光元件之性能較高，則作為抗反射膜之特性亦會提昇。因此，只要偏光元件之性能較高，則容易簡化層構成，且即便為薄膜構成亦容易表現出充分之功能，從而亦適宜用於進行彎折、彎曲等變形後使用之用途。又，亦可將成本抑制得較低。

【0322】 本發明中所謂色比(D)於色素均勻地配向之情形時，以如下之式表示。

$$D = A_z / A_y$$

此處， A_z 係入射至異向性色素膜之光之偏光方向平行於異向性色素之配向方向之情形時所觀測到之吸光度。 A_y 係入射至異向性色素膜之光

之偏光方向垂直之情形時所觀測到之吸光度。

【0323】 各吸光度(A_z 、 A_y)並無特別限制，只要使用相同波長者即可，可根據目的選擇任一波長。於表示異向性色素膜之配向程度之情形時，較佳為使用在異向性色素膜之350 nm～800 nm之特定波長區域中以視感度修正所得之值、或可見光區域之極大吸收波長下之值。

【0324】 本發明之異向性色素膜之透過率於所使用之目標波長下，較佳為25%以上，進而較佳為35%以上，尤佳為40%以上。於將本發明之異向性色素膜用作於整個可見光波長區域中具有異向性之色素膜之情形時，異向性色素膜於可見光波長區域中之透過率較佳為25%以上，進而較佳為35%以上，尤佳為40%以上。本發明之異向性色素膜之透過率只要上限與用途相應即可。例如，於提高偏光度之情形時，透過率較佳為50%以下。藉由透過率處於上述範圍內，適合用作下述光學元件，尤其適合用作彩色顯示所使用之液晶顯示器用、或將異向性色素膜與相位差膜組合所得之抗反射膜用之光學元件。

【0325】 異向性色素膜之膜厚以乾燥膜厚計，較佳為10 nm以上，更佳為100 nm以上，進而較佳為500 nm以上。異向性色素膜之膜厚較佳為30 μm 以下，更佳為10 μm 以下，進而較佳為5 μm 以下，特佳為3 μm 以下。藉由異向性色素膜之膜厚處於上述範圍內，呈可於膜內獲得色素均勻之配向及均勻之膜厚之趨勢。

【0326】 [異向性色素膜之製造方法]

本發明之異向性色素膜較佳為使用本發明之異向性色素膜形成用組合物，並藉由濕式成膜法而製作。

【0327】 本發明中所謂濕式成膜法係藉由某些方法使異向性色素膜

用組合物塗佈、配向於基板上之方法。因此，異向性色素膜用組合物只要具有流動性即可，可含有溶劑，亦可不含有溶劑。就塗佈時之黏度或膜均勻性之觀點而言，更佳為含有溶劑。

【0328】 關於異向性色素膜中之液晶或色素之配向，可於塗佈過程中藉由剪切等進行配向，亦可於溶劑乾燥之過程中進行配向。又，亦可經由在塗佈、乾燥後進行加熱使液晶或色素等再配向之製程，使液晶或色素等在基板上配向、積層。於濕式成膜法中，若向基板上賦予異向性色素膜用組合物，則已於異向性色素膜用組合物中，或於溶劑乾燥之過程中，或於溶劑完全去除後，色素或液晶化合物獲得自我聚集(液晶狀態等之分子聚集狀態)，藉此引起微小面積下之配向。藉由在該狀態下施加外場，可於大區域中配向於一定方向上，而獲得具有所需性能之異向性色素膜。於此方面，與如下原理之方法有所不同，該原理係藉由包含色素之溶液對聚乙烯醇(PVA)膜等進行染色並延伸，並僅藉由延伸步驟使色素配向。此處，關於外場，可例舉：預先向基板上施加之配向處理層之影響、剪切力、磁場、電場、熱等，該等可單獨使用，亦可組合使用複數。視需要，亦可經由加熱步驟。

【0329】 向基板上賦予異向性色素膜用組合物並使之成膜之過程、施加外場進行配向之過程、使溶劑乾燥之過程可逐次進行，亦可同時進行。

【0330】 作為濕式成膜法中之向基板上賦予異向性色素膜形成用組合物之方法，例如可例舉：塗佈法、浸漬塗佈法、LB(Langmuir-Blodgett，朗謬-布洛傑)膜形成法、公知之印刷法等。亦有將以此方式獲得之異向性色素膜轉印至另一基板之方法。

【0331】 其中，較佳為使用塗佈法向基板上賦予異向性色素膜形成用組合物。

【0332】 異向性色素膜之配向方向可與塗佈方向不同。於本發明中，所謂異向性色素膜之配向方向，例如若為偏光膜，則係指偏光之透過軸(偏光軸)或吸收軸，若為相位差膜，則係指進相軸或遲相軸。

【0333】 作為塗佈異向性色素膜用組合物而獲得異向性色素膜之方法，並無特別限定，例如可例舉：原崎勇次著「塗佈工學」(朝倉書店股份有限公司，1971年3月20日發行)第253～277頁所記載之方法；市村國宏主編「分子協調材料之創製與應用」(CMC股份有限公司出版，1998年3月3日發行)第118～149頁所記載之方法；藉由狹縫式模嘴塗佈法、旋轉塗佈法、噴塗法、棒式塗佈法、輥式塗佈法、刮刀塗佈法、淋幕式塗佈法、噴注法、浸漬法等塗佈於階差構造之基板(亦可預先實施配向處理)上之方法。其中，若採用狹縫式模嘴塗佈法或棒式塗佈法，則可獲得均勻性較高之異向性色素膜故而較為適宜。

【0334】 狹縫式模嘴塗佈法所使用之模嘴塗佈機通常具備噴出塗佈液之塗佈機、所謂狹縫口模。狹縫口模例如揭示於日本專利特開平2-164480號公報、日本專利特開平6-154687號公報、日本專利特開平9-131559號公報、「分散、塗佈、乾燥之基礎及應用」(2014年，Techno System股份有限公司，ISBN9784924728707 C 305)、「顯示器、光學構件中之濕式塗佈技術」(2007年，資訊機構，ISBN9784901677752)、「電子學領域中之精密塗佈、乾燥技術」(2007年，技術資訊協會，ISBN9784861041389)等中。關於該等公知之狹縫口模，即便為膜或帶等具有可撓性之構件或如玻璃基板之較硬之構件，亦可實施塗佈。

【0335】 作為本發明之異向性色素膜形成所使用之基板，可例舉：玻璃、或者三乙酸酯、丙烯酸、聚酯、聚醯亞胺、聚醚醯亞胺、聚醚醯酮、聚碳酸酯、環烯烴聚合物、聚烯烴、聚氯乙烯、三乙醯纖維素或胺基甲酸酯系膜等。

【0336】 為了控制色素之配向方向，亦可於基板表面，藉由「液晶便覽」(丸善股份有限公司，2000年10月30日發行)第226～239頁等所記載之公知之方法(摩擦法、於配向膜表面上形成溝槽(微細之槽構造)之方法、使用偏光紫外光、偏光雷射之方法(光配向法)、藉由LB膜形成所進行之配向方法、藉由無機物之斜向蒸鍍之配向方法等)實施配向處理(配向膜)。尤佳可例舉藉由摩擦法、光配向法之配向處理。作為用於摩擦法之材料，可例舉：聚乙烯醇(PVA)、聚醯亞胺(PI)、環氧樹脂、丙烯酸樹脂等。作為用於光配向法之材料，可例舉：聚肉桂酸酯系、聚醯胺酸-聚醯亞胺系、偶氮苯系等。於設置有配向處理層之情形時，認為藉由配向處理層之配向處理之影響、及塗佈時施加於異向性色素膜用組合物之剪切力，使液晶化合物或色素配向。

【0337】 塗佈異向性色素膜用組合物時之異向性色素膜用組合物之供給方法、供給間隔並無特別限定。由於存在塗佈液之供給操作變繁雜，或塗佈液開始時及停止時塗佈膜厚發生變動之情形，故而於異向性色素膜之膜厚較薄時，較為理想的是一面連續地供給異向性色素膜用組合物一面塗佈異向性色素膜用組合物。

【0338】 塗佈異向性色素膜用組合物之速度通常為0.001 m/分鐘以上，較佳為0.01 m/分鐘以上，更佳為0.1 m/分鐘以上，進而較佳為1.0 m/分鐘以上，尤佳為5.0 m/分鐘以上。塗佈異向性色素膜用組合物之速度通

常為400 m/分鐘以下，較佳為200 m/分鐘以下，更佳為100 m/分鐘以下，進而較佳為50 m/分鐘以下。藉由塗佈速度處於上述範圍內，呈獲得異向性色素膜之異向性而可均勻地塗佈之趨勢。

【0339】異向性色素膜用組合物之塗佈溫度通常為0℃以上100℃以下，較佳為80℃以下，進而較佳為60℃以下。

【0340】塗佈異向性色素膜用組合物時之濕度較佳為10%RH以上，且較佳為80RH%以下。

【0341】亦可對異向性色素膜進行不溶化處理。不溶化係指藉由使異向性色素膜中之化合物之溶解性降低，抑制化合物自異向性色素膜溶出從而提高膜之穩定性之處理。

具體而言，就後續步驟之容易性、異向性色素膜之耐久性等方面而言，膜之聚合或外覆等較佳。

【0342】於進行膜之聚合之情形時，對液晶分子與色素分子配向所得之膜，使用光、熱及/或放射線進行聚合。

【0343】於使用光或放射線進行聚合之情形時，較佳為照射波長處於190～450 nm之範圍內之活性能量線。

波長190～450 nm之活性能量線之光源並無特別限定，例如可例舉：氙氣燈、鹵素燈、鎢絲燈、高壓水銀燈、超高壓水銀燈、金屬鹵素燈、中壓水銀燈、低壓水銀燈、碳弧、螢光燈等燈光源；氬離子雷射、YAG(Yttrium Aluminum Garnet，鈮鋁石榴石)雷射、準分子雷射、氮雷射、氮-鎘雷射、半導體雷射等雷射光源等。於照射特定波長之光而使用之情形時，亦可利用光學濾光片。活性能量線之曝光量較佳為10～10,000 J/m²。

【0344】 於使用熱進行聚合之情形時，較佳為於50～200℃之範圍內進行，進而較佳為於60～150℃之範圍內進行。

【0345】 聚合可使用光、熱及/或放射線進行，但使用光聚合或併用光聚合與熱聚合時，膜形成製程之時間較短且裝置亦簡易，故而較佳。

【0346】 [光學元件]

本發明之光學元件包含本發明之異向性色素膜。

【0347】 本發明中之光學元件表示利用光吸收之異向性而獲得直線偏光、圓偏光、橢圓偏光等之偏光元件、相位差元件、具有折射異向性或傳導異向性等功能之元件。該等功能可藉由異向性色素膜形成製程、及基板或含有有機化合物(色素或透明材料)之組合物之選擇而適當調整。

【0348】 本發明之光學元件最佳為用作偏光元件。

就可藉由塗佈等在基板上形成異向性色素膜而獲得偏光元件之方面而言，本發明之光學元件亦適宜用於軟性顯示器等用途。

【0349】 為了維持、提昇異向性色素膜之功能，光學元件亦可設置有其他層。作為其他層，例如可例舉：用以提昇耐光性、耐熱性、耐水性等耐久性之具有阻斷特定波長之功能之層或具有阻斷特定物質之功能之層(氧阻斷膜、水蒸氣阻斷膜等障壁膜等)；含有用以變更色域或提昇光學特性之波長截止濾光鏡或吸收特定波長之材料之層等。

【0350】 [偏光元件]

可使用本發明之異向性色素膜製造偏光元件(以下，有時稱為「本發明之偏光元件」)。

【0351】 本發明之偏光元件只要具有本發明之異向性色素膜則可具有其他任意膜(層)。例如，可藉由在基板上設置配向膜，並在配向膜之表

面形成本發明之異向性色素膜而製造。

【0352】 偏光元件並不僅限於異向性色素膜，亦可與如下之層等組合使用：具有提昇偏光性能、提昇機械強度等功能之外覆層；黏著層或抗反射層；配向膜；具有作為相位差膜之功能、作為亮度提昇膜之功能、作為反射或抗反射膜之功能、作為半透過反射膜之功能、作為擴散膜之功能等光學功能之層。具體而言，亦可藉由塗佈或貼合等積層形成具有上述各種功能之層，並以積層體之形式使用。

【0353】 該等層可根據製造製程、特性及功能適當設置，其積層位置、順序等並無特別限定。例如，形成各層之位置可為異向性色素膜之上，亦可為設置有異向性色素膜之基板之相反面。又，形成各層之順序可為形成異向性色素膜之前，亦可為形成異向性色素膜之後。

【0354】 該等具有光學功能之層可藉由如下方法形成。

【0355】 具有作為相位差膜之功能之層可藉由將相位差膜塗佈或貼合於構成偏光元件之其他層等而形成。相位差膜例如可藉由實施日本專利特開平2-59703號公報、日本專利特開平4-230704號公報等所記載之延伸處理，或實施日本專利特開平7-230007號公報等所記載之處理而形成。

【0356】 具有作為亮度提昇膜之功能之層可藉由將亮度提昇膜塗佈或貼合於構成偏光元件之其他層等而形成。亮度提昇膜例如可藉由利用如日本專利特開2002-169025號公報及日本專利特開2003-29030號公報所記載之方法形成微細孔，或藉由將選擇反射之中心波長不同之2層以上膽固醇液晶層重疊而形成。

【0357】 具有作為反射膜或半透過反射膜之功能之層例如可藉由將利用蒸鍍或濺鍍等獲得之金屬薄膜塗佈或貼合於構成偏光元件之其他層等

而形成。

【0358】 具有作為擴散膜之功能之層例如可藉由將包含微粒子之樹脂溶液塗佈於構成偏光元件之其他層而形成。

【0359】 具有作為相位差膜或光學補償膜之功能之層可藉由使圓盤型液晶性化合物、向列液晶性化合物、層列液晶性化合物、膽固醇液晶性化合物等液晶性化合物塗佈並配向於構成偏光元件之其他層而形成。此時，亦可於基板上設置配向膜，並於配向膜之表面形成相位差膜或光學補償膜。

【0360】 於將本發明之異向性色素膜作為異向性色素膜等用於液晶元件(LCD)或有機電致發光元件(OLED)等各種顯示元件之情形時，可於構成該等顯示元件之電極基板等之表面直接形成本發明之異向性色素膜，亦可將形成有本發明之異向性色素膜之基板用作該等顯示元件之構成構件。

實施例

【0361】 以下，藉由實施例對本發明更具體地進行說明。本發明只要不超出其主旨，便不限定於以下實施例。

於以下之記載中，「份」係指「質量份」。

【0362】 [液晶相之鑑定方法]

所獲得之異向性色素膜形成用組合物之液晶性係藉由示差掃描熱量測定(精工電子公司製造之「DSC220CU」)、X射線結構分析(RIGAKU股份有限公司製造之「NANO-Viewer」)、高溫載台(東陽技術股份有限公司製造之「HCS302-LN190」)附帶之偏光顯微鏡(NIKON INSTECH 股份有限公司製造之「ECLIPSE LV100N POL」)進行觀察，並依照「液晶便

覽」(丸善股份有限公司，2000年10月30日發行)第9～50頁、117～176頁等所記載之方法，進行是否為液晶之鑑定。

【0363】 [異向性色素膜對於吸收軸/偏光軸方向之偏光之透過率之測定及二色比]

所獲得之異向性色素膜對於吸收軸/偏光軸方向之偏光之透過率係使用具備葛蘭-湯普生偏光元件之分光光度計(大塚電子(股)製造，製品名「RETS-100」)進行測定。

向異向性色素膜入射直線偏光之測定光，測定異向性色素膜對於吸收軸方向之偏光之透過率及異向性色素膜對於偏光軸方向之偏光之透過率，並根據下式計算出二色比(D)。

$$D = A_z / A_y$$

(式中，

$$A_y = -\log(T_y) ;$$

$$A_z = -\log(T_z) ;$$

T_z 係異向性色素膜對於吸收軸方向之偏光之透過率；

T_y 係異向性色素膜對於偏光軸方向之偏光之透過率)

【0364】 具體而言，於作為基材之玻璃上形成有聚醯亞胺之配向膜(LX1400，Hitachi Chemical DuPont Microsystems Ltd.製造)之夾層單元(單元間隙：8.0 μm 、10.0 μm ，預先用布對已成膜之聚醯亞胺實施摩擦處理所得者)，以各向同性相注入異向性色素膜用組合物，並以5℃/min冷卻至80℃，藉此獲得異向性色素膜，進而以5℃/min冷卻至0℃，並且於各溫度下測定二色比。其中，將顯示出最大二色比之溫度及波長下之二色比確定為該異向性色素膜之二色比。又，於該溫度下之測定中，亦測定於異向

全版

9. 全國液品化

0 mmol) of N,N -

第 9 / 頁 (發明說明書)

中，添加丙炔酸乙酯(9.7 g，99 mmol)、氧化銅(I)(7.5 g，94 mmol)，於110℃下攪拌9小時，並自然冷卻至室溫。將沈澱過濾分離之後，添加乙酸乙酯，並利用水進行洗淨，繼而利用飽和食鹽水進行洗淨。利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，獲得7.3 g褐色結晶(I-1-a)。

【0368】 (I-1-b)之合成：

將(I-1-a)(4.20 g，22.1 mmol)、11-溴-1-十一醇(5.55 g，22.1 mmol)、碳酸鉀(6.10 g，44.2 mmol)、N,N-二甲基甲醯胺(30 mL)混合，並於80℃下攪拌4小時。將沈澱過濾分離後，添加二乙醚，並利用水進行洗淨，繼而利用飽和食鹽水進行洗淨。利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，獲得5.5 g橙色固體(I-1-b)。

【0369】 (I-1-c)之合成：

將(I-1-b)(3.6 g，10 mmol)、氫氧化鉀(1.7 g，30 mmol)、水(20 mL)混合，並於100℃下攪拌2小時。添加水(20 mL)，並利用濃鹽酸使之成為酸性之後，將所析出之沈澱過濾分離。利用乙腈懸浮清洗所獲得之沈澱，獲得3.2 g乳白色固體(I-1-c)。

【0370】 (I-1-d)之合成：

將(I-1-c)(2.33 g，7.0 mmol)、四氫呋喃(20 mL)混合，繼而添加N,N-二甲基苯胺(1.02 g，8.4 mmol)、2,5-二-第三丁基苯酚(54 mg)。藉由冰浴進行冷卻之後，緩緩添加丙烯醯氯(0.76 g，8.4 mmol)。於冰浴下攪拌6小時之後，添加二氯甲烷，並利用1 mol/L鹽酸、飽和碳酸氫鈉水溶液、飽和食鹽水依序進行洗淨。利用矽膠管柱層析法(氯仿/甲醇)進行純化，獲得2.0 g白色固體(I-1-d)。

【0371】 (I-1-e)之合成：

繼而，將(I-1-i)(僅反式體)(42.9 g，107.6 mmol)、對甲苯磺酸吡啶鎘鹽(2.6 g，10.8 mmol)、乙醇(430 mL)混合，並於78℃下攪拌2小時。蒸餾去除溶劑後溶解於乙酸乙酯(150 mL)中，添加己烷(750 mL)，並進行冷卻。將所析出之沈澱過濾分離，利用己烷進行洗淨後，使之乾燥，獲得29.2 g白色固體(I-1-j)。

【0377】 將(I-1-j)(37.2 g，118.3 mmol)、N,N-二甲基苯胺(21.5 g，177.5 mmol)、2,5-二-第三丁基苯酚(0.24 g)、四氫呋喃(350 mL)混合。藉由冰浴進行冷卻之後，緩緩添加丙烯醯氯(16.1 g，177.5 mmol)。於滴加後，於50℃下攪拌2小時之後，蒸餾去除溶劑直至液量變成190 mL，並釋出至冰浴冷卻下之1 mol/L鹽酸中。將所析出之沈澱過濾分離，並利用水、己烷進行洗淨。利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，獲得39.4 g白色固體(I-1-h)。

【0378】 (I-1)之合成：

將(I-1-g)(494 mg，1.03 mmol)、(I-1-h)(400 mg，1.09 mmol)、N,N-二甲基胺基-4-吡啶(27 mg，0.22 mmol)、2,5-二-第三丁基苯酚(2 mg)、二氯甲烷(10 mL)混合，藉由冰浴進行冷卻之後，添加1-乙基-3-(3-二甲基胺基丙基)碳二醯亞胺鹽酸鹽(230 mg，1.19 mmol)。於冰浴下攪拌4小時之後，利用氯化銨飽和水溶液進行洗淨，繼而利用飽和食鹽水進行洗淨。利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，以白色固體之形式獲得530 mg液晶化合物(I-1)。

【0379】 下文表示該液晶化合物(I-1)之液體層析-質譜分析之結果。

LC-MS(APCI)m/z 851.5(M + Na⁺)

又，藉由NMR(nuclear magnetic resonance，核磁共振)進行結構確認。以下表示結果。

^1H NMR(CDCl_3 , 400 MHz) δ 1.20-1.70(m,38H),1.74-1.85(m,2H), 2.05-2.25(m,4H),2.49-2.57(m,1H),3.21-3.29(m,1H),3.46(t,2H,J=6.8 Hz), 3.99(t,2H,J=6.8 Hz),4.15(t,4H,J=6.8 Hz),5.80(d,2H,J=10.4 Hz), 6.12 (dd,2H,J=17.2,10.4 Hz),6.39(d,2H,J=17.2 Hz),6.89(d,2H,J=6.8 Hz), 7.10(d,2H,J=6.8 Hz),7.19(d,2H,J=6.8 Hz),7.55(d,2H,J=6.8 Hz)

【0380】對於液晶化合物(I-1)，藉由示差掃描熱量測定求出各向同性相出現溫度(自液晶向液體之相轉移溫度及自液體向液晶之相轉移溫度)。於示差掃描熱量測定中，使用相對於液晶化合物(I-1)100質量份添加作為聚合抑制劑之0.2質量份4-甲氧基苯酚所得者。

自該液晶化合物(I-1)之液晶向液體之相轉移溫度為111.0℃，自液體向液晶之相轉移溫度為109.4℃。

藉由偏光顯微鏡觀察及X射線結構分析來確認該溫度為各向同性相出現溫度。

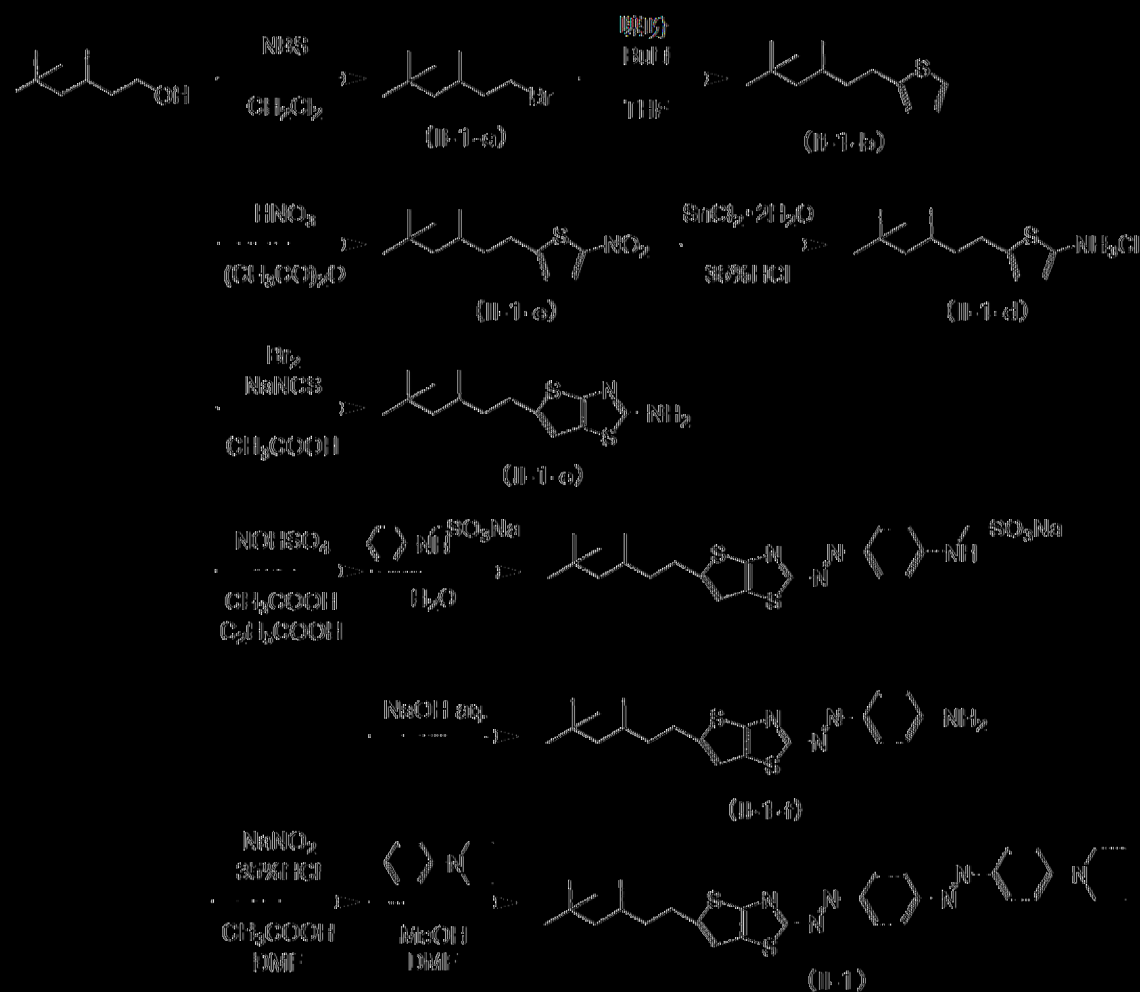
【0381】[第1發明之合成例以及實施例及比較例]

[色素之合成]

<色素(II-1)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(II-1)。

【0382】[化28]



〔0383〕 (III-1-a)之合成：

於氮氣流下，將三苯基膦(12.1 g, 277.3 mmol)、3,5,5-三甲基己醇(40.0 g, 277.3 mmol)、二氯甲烷(220 mL)混合，冷卻至0℃後，添加N-溴丁二醯亞胺(49.4 g, 277.3 mmol)，並於0℃下攪拌2小時。將反應液濃縮，添加二異丙醚(200 mL)並施加超音波10分鐘後，濾取析出物。反覆進行2次本操作，並利用矽膠層析法(己烷)進行純化，獲得43.4 g(III-1-a)。

〔0384〕 (III-1-b)之合成：

於氮氣流下，將四氫呋喃(290 mL)、己烷(195 mL)混合，冷卻至-20℃後，藉由針筒滴加正丁基鋰1.6 M己烷溶液(12.1 mL)，升溫至5℃。向其中花費10分鐘添加噻吩(12.5 g, 154.5 mmol)，升溫至25℃後，一次性

添加(II-1-a)(32.0 g, 154.5 mmol)，並於50℃下攪拌30分鐘。向其中添加冷水(500 mL)，並藉由二異丙醚進行萃取，濃縮油層。利用矽膠層析法(己烷)進行純化，獲得27.3 g(II-1-b)。

【0385】 (II-1-c)之合成：

將發煙硝酸(10.6 g, 168.7 mmol)、乙酸酐(60 mL)混合，冷卻至-30℃後，花費2小時滴加將(II-1-b)(27.3 g, 129.8 mmol)、乙酸酐(60 mL)混合所得之溶液，並於-30℃下攪拌1.5小時。於室溫下放置一晚後，添加經粉碎之冰(200 g)，並利用25%氫氧化鈉水溶液，將反應液之pH值調整為4。藉由二氯甲烷進行萃取，濃縮油層，藉此獲得27.1 g(II-1-c)。

【0386】 (II-1-d)之合成：

將(II-1-c)(27.1 g, 106.0 mmol)、35%鹽酸(75 mL)混合，升溫至50℃後，分批添加氯化錫二水合物(47.9 g, 212.1 mmol)，一面自然冷卻一面攪拌1小時。將反應液冷卻至5℃，濾取析出物後，利用35%鹽酸、二異丙醚進行洗淨，藉此於未乾燥狀態下獲得8.8 g(II-1-d)。

【0387】 (II-1-e)之合成：

將未乾燥(II-1-d)(8.8 g)、硫氰酸鈉(2.7 g, 33.5 mmol)、N-溴丁二醯亞胺(6.0 g, 33.5 mmol)混合，於25℃下攪拌2小時後，濾取析出物，利用矽膠層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，藉此獲得7.4 g(II-1-e)。

【0388】 (II-1-f)之合成：

將(II-1-e)(7.4 g, 26.2 mmol)、乙酸(46 mL)、丙酸(31 mL)混合，並冷卻至2℃。添加40%亞硝基硫酸(10.0 g, 31.4 mmol)，並於2℃下攪拌1小時後，添加胺基磺酸(7.9 g, 8.1 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將苯胺(10.0 g, 107.3 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(14.4 g, 107.3

mmol)、水(300 mL)混合，並於70℃下攪拌2小時。冷卻至3℃後，花費1小時滴加上述重氮鎘溶液，並於3℃下攪拌1小時。濾取所析出之固體，使其分散於25%氫氧化鈉水溶液(40 mL)、水(200 mL)之中，並於90℃下攪拌1.5小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，並利用矽膠層析法(己烷/乙酸乙酯)對所獲得之粗產物進行純化，獲得2.6 g(II-1-f)。

【0389】 (II-1)之合成：

將(II-1-f)(2.6 g, 6.7 mmol)、二甲基甲醯胺(85 mL)、乙酸(22 mL)混合，並冷卻至2℃。向其中添加35%鹽酸(2 mL)後，添加溶解於水(5 mL)中之亞硝酸鈉(0.5 g, 7.3 mmol)，並於2℃下攪拌2小時，製備重氮鎘溶液。

將二乙基苯胺(1.0 g, 6.7 mmol)、甲醇(32 mL)、二甲基甲醯胺(3 mL)混合，並冷卻至2℃後，利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為5，並且花費30分鐘滴加上述重氮鎘溶液，其後，於2℃下攪拌3小時。濾取所析出之固體，並利用矽膠層析法(己烷/二氯甲烷)對所獲得之粗產物進行純化，藉此獲得0.5 g色素(II-1)。

【0390】 色素(II-1)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為551 nm，克吸光係數為100.7 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

¹H-NMR(CDCl₃, 400 MHz) δ0.91(s,9H),δ1.01(d,3H,J=6.3 Hz),δ1.24-1.31(m,8H),δ1.59-1.67(m,2H),δ1.73-1.81(m,1H),δ2.91-2.97(m,2H),δ3.48(q,4H,J=7.1 Hz),δ6.74(d,2H,J=9.2 Hz),δ6.98(s,1H),δ7.90(d,2H,J=9.2 Hz),δ7.97(d,2H,J=8.8 Hz),δ8.10(d,2H,J=8.8 Hz),

【0391】 測定色素(II-1)於甲苯中之溶解度。

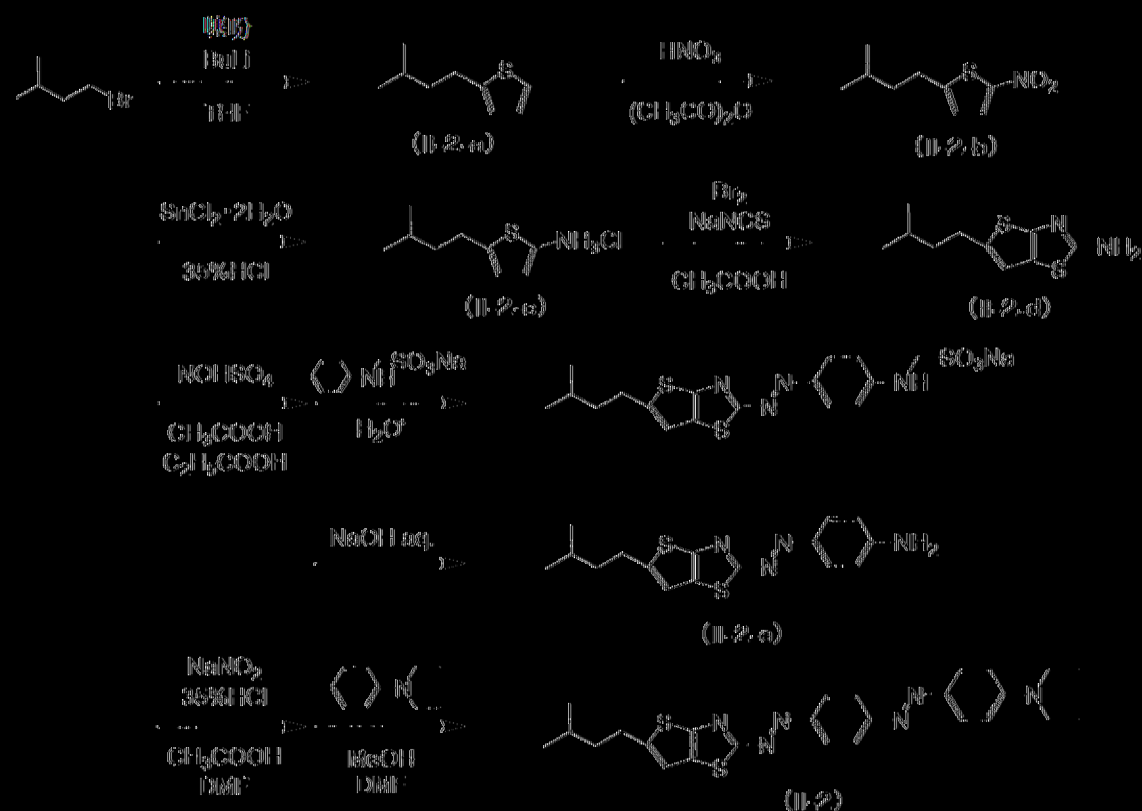
向101 mg 甲苯中添加3 mg 色素(II-1)，並於80℃下攪拌5分鐘。其後，於室溫下靜置1小時，使用具備針筒過濾器(Membrane Solutions公司製造，PTFE13045，口徑0.45 μm)之針筒對所獲得之混合液進行過濾，藉此獲得色素(II-1)之甲苯飽和溶液。利用767 mg 四氫呋喃將該溶液稀釋，使用HPLC(日立高新技術公司製造之L-2300系列)來確定濃度。將色素(II-1)0.1質量%溶解於四氫呋喃中製作溶液，並於吸收波長254 nm下繪製校準曲線。使用該校準曲線，測定甲苯飽和溶液之濃度，將所得之結果示於表1。

【0392】 對於下述比較色素(III-1)、(III-3)，亦同樣地測定甲苯飽和溶液之濃度。

【0393】 <色素(II-2)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(II-2)。

【0394】 [化29]



[(0395)] (II-2-a)之合成：

於氮氣流下，將噻吩(12.7 g, 150.9 mmol)、四氫呋喃(130 mL)混合，冷卻至 -50°C 後，藉由針筒滴加正丁基鋰1.6 M己烷溶液(107 mL)，攪拌1小時，並於 -50°C 下添加1-溴-3-甲基丁烷(25.0 g, 165.5 mmol)，於該狀態下攪拌30分鐘，然後於室溫下攪拌1小時。向其中添加水(300 mL)後，藉由己烷進行萃取，對已利用水、飽和食鹽水進行洗淨之油層進行減壓濃縮。利用矽膠層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，獲得17.0 g(II-1-a)。

[(0396)] (II-2-b)之合成：

於氮氣流下，將(II-1-a)(17.0 g, 110.2 mmol)、乙酸酐(170 mL)混合，冷卻至 -30°C 後，添加硝酸(8.7 mL, 121.2 mmol)，於 -30°C 下攪拌1小時，於 0°C 下攪拌2小時。向其中添加水(500 mL)後，藉由二氯甲烷進行萃取，對已利用水、鹽水進行洗淨之油層進行減壓濃縮。利用矽膠層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，獲得7.0 g(II-1-b)。

【0397】 (II-2-c)之合成：

將(II-1-b)(3.2 g, 16.1 mmol)、35%鹽酸(15 mL)混合，於2℃下添加氯化錫二水合物(10.9 g, 48.3 mmol)並激烈攪拌後，於25℃下攪拌4小時。傾析上清液，並利用乙酸乙酯(50 mL)將殘渣溶解，對過濾後之濾液進行減壓濃縮，藉此於未乾燥狀態下獲得6.1 g(II-2-c)。

【0398】 (II-2-d)之合成：

將未乾燥(II-2-c)(6.1 g)、乙酸(30 mL)、硫氰酸鈉(5.2 g, 64.5 mmol)混合並冷卻至2℃。添加將溴(1.7 mL, 33.9 mmol)與乙酸(10 mL)混合所得之溶液，並於25℃下攪拌1小時。向其中添加亞硫酸鈉後，添加25%氫氧化鈉水溶液(30 mL)，藉由乙酸乙酯進行萃取，對已利用水、飽和食鹽水進行洗淨之油層進行減壓濃縮。利用矽膠層析法(己烷/乙酸乙酯)進行純化，藉此獲得0.5 g(II-2-d)。

【0399】 (II-2-e)之合成：

將(II-2-d)(7.4 g, 32.7 mmol)、乙酸(46 mL)、丙酸(31 mL)混合，並冷卻至2℃。向其中添加40%亞硝基硫酸(12.5 g, 39.2 mmol)，並於2℃下攪拌1小時，製備重氮鎊溶液。

將苯胺(12.5 g, 133.9 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(18.0 g, 133.9 mmol)、水(440 mL)混合，並於70℃下攪拌2小時。冷卻至3℃後，花費1小時滴加上述重氮鎊溶液，並於3℃下攪拌1小時。濾取所析出之固體，使其分散於25%氫氧化鈉水溶液(40 mL)、水(200 mL)之中，並於90℃下攪拌1.5小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，獲得11.2 g(II-2-e)之粗產物。

【0400】 (II-2)之合成：

將(II-2-e)(2.6 g, 6.7 mmol)、二甲基甲醯胺(81 mL)、乙酸(23 mL)混合，並冷卻至2℃。添加35%鹽酸(3 mL)後，添加溶解於水(6 mL)中之亞硝酸鈉(0.6 g, 8.6 mmol)，並於2℃下攪拌2小時，製備重氮鎊溶液。

將二乙基苯胺(1.2 g, 7.8 mmol)、甲醇(33 mL)、二甲基甲醯胺(3 mL)混合，並冷卻至2℃後，利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為5，並且花費30分鐘滴加上述重氮鎊溶液，其後，於2℃下攪拌3小時。濾取所析出之固體，利用矽膠層析法(己烷/二氯甲烷)對所獲得之粗產物進行純化，藉此獲得0.5 g色素(II-2)。

【0401】 色素(II-2)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為550 nm，克吸光係數為110.5 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

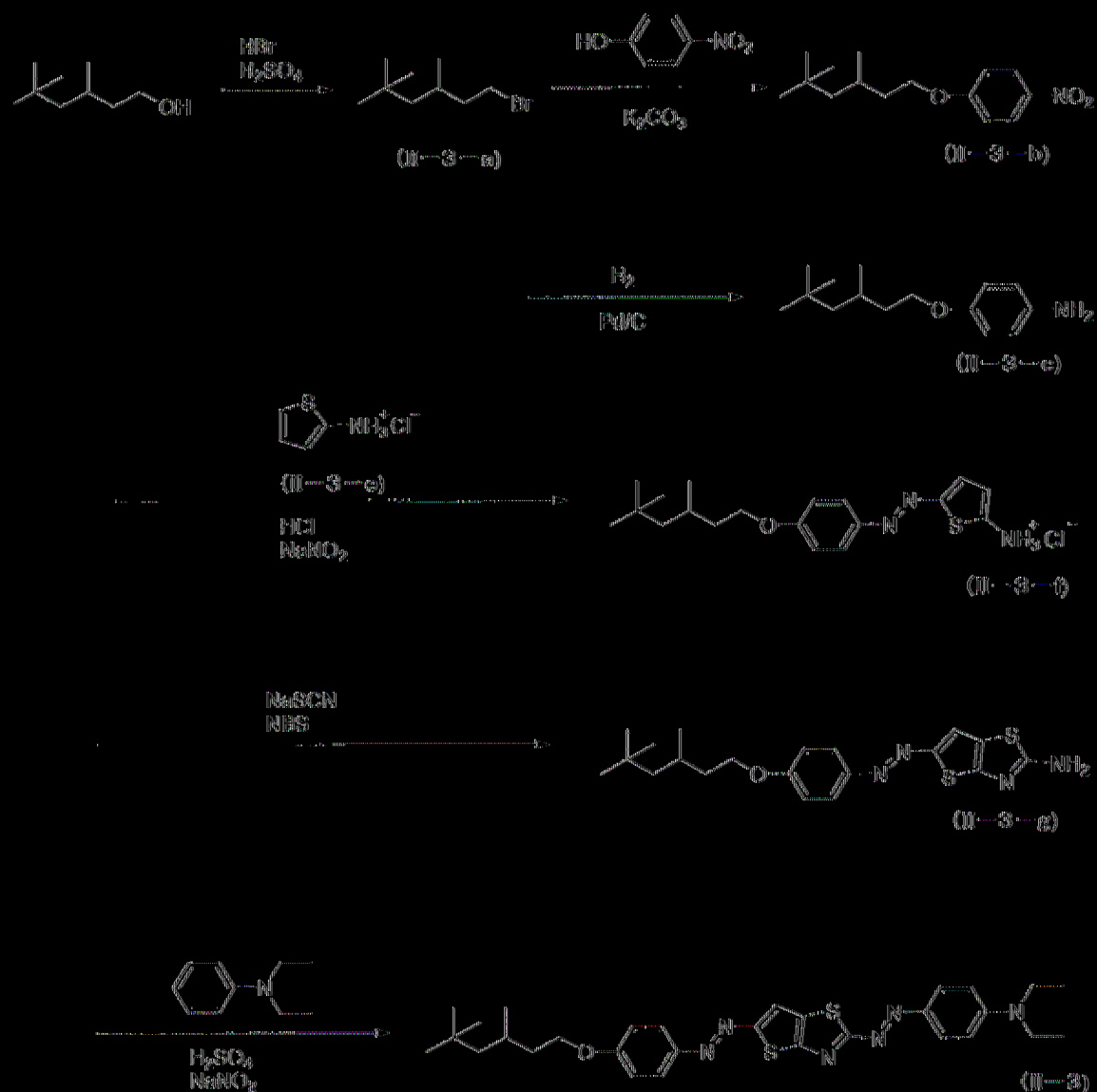
¹H-NMR(CDCl₃, 400 MHz) δ 0.97(d, 6H, J=7.7 Hz), δ 1.25(t, 6H, J=7.1 Hz), δ 1.65-1.69(m, 3H), δ 2.96(t, 2H, J=7.1 Hz), δ 3.48(q, 4H, J=7.1 Hz), δ 6.74(d, 2H, J=9.3 Hz), δ 6.98(s, 1H), δ 7.90(d, 2H, J=9.2 Hz), δ 7.97(d, 2H, J=8.9 Hz), δ 8.10(d, 2H, J=8.8 Hz),

藉由與色素(II-1)同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)色素(II-2)於甲苯中之溶解度，結果為0.7%。

【0402】 <色素(II-3)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(II-3)。

【0403】 [化30]



〔0404〕 (III-3-a)之合成：

將3,5,5-三乙基-1-己醇(38.4 g, 266 mmol)、47% HBr 水溶液(50.4 g, 293 mmol)、濃硫酸(8.3 g, 82.5 mmol)混合，於 120°C 下攪拌5小時。冷卻至 25°C 後，向己烷(600 mL)中添加，並利用水(1200 mL $\times$ 3)進行洗淨。將有機層濃縮後，利用矽膠層析法(己烷)進行純化，獲得35.5 g(III-3-a)。

〔0405〕 (III-3-b)之合成：

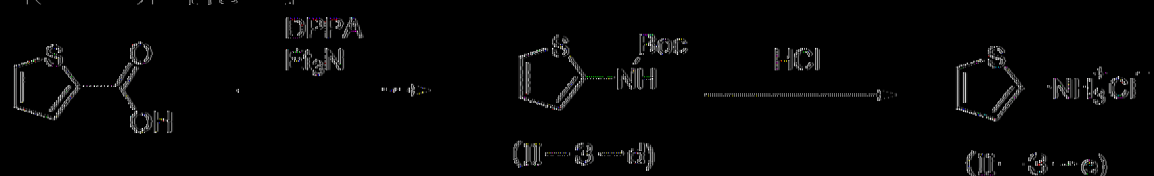
於氮氣流下，將4-硝基苯酚(65.0 g, 467 mmol)、(III-3-a)(116.2 g, 560 mmol)、 N,N -二甲基甲醯胺(520 mL)、碳酸鉀(129.1 g, 934 mmol)混

合，並於90℃下攪拌6小時。向其中添加水(1000 mL)，並藉由乙酸乙酯/己烷(=1/4)混合液進行萃取，濃縮油層。利用矽膠層析法(乙酸乙酯/己烷)進行純化，獲得113.5 g(III-3-b)。

[(0406)] (III-3-c)之合成：

於氮氣流下，將(III-3-b)(113.5 g，427.7 mmol)、乙酸乙酯(1100 mL)混合後，添加鈰碳(5%Pd/C，含水量55 wt%，11.4 g)，並於氮氣氛圍下於25℃下攪拌60小時。對容器內進行氮置換後，將觸媒過濾分離。藉由二氯甲烷對觸媒進行萃取，合併有機層進行濃縮後，利用矽膠層析法(二氯甲烷)進行純化，獲得99.5 g(III-3-c)。

[(0407)] [化31]



[(0408)] (III-3-d)之合成：

將2-噻吩羧酸(2.00 g，15.6 mmol)、疊氮磷酸二苯酯(4.30 g，15.6 mmol)、三乙基胺(2.2 mL，15.6 mmol)、第三丁基醇(20 mL)混合，並於回流狀態下加熱攪拌5小時。冷卻至25℃後，向其中添加水(300 mL)，並藉由二乙醚進行萃取。將有機層濃縮後，利用矽膠層析法(己烷/二氯甲烷)進行純化，獲得1.9 g(III-3-d)。

[(0409)] (III-3-e)之合成：

將(III-3-d)(2.00 g，10.0 mmol)、12 N鹽酸(36 mL)、二乙醚(85 mL)混合，並於25℃下攪拌30分鐘後，蒸餾去除溶劑，獲得1.36 g(III-3-e)。

[(0410)] (III-3-f)之合成：

於氮氣流下，將(III-3-e)(47.3 g，201 mmol)、12 N鹽酸(375 mL)混

合，並冷卻至0℃攪拌1小時。向其中添加將亞硝酸鈉(17.3 g，251 mmol)與水(130 mL)混合所得之水溶液，並於5℃下攪拌1小時，製備重氮鎊溶液。

將(II-3-e)(37.2 g，241 mmol)與MeOH混合，冷卻至0℃後，花費40分鐘滴加上述重氮鎊溶液。升溫至25℃攪拌3小時，濾取所析出之固體，並利用己烷對所獲得之粗產物進行洗淨，藉此獲得48.1 g(II-3-f)。

【0411】 (II-3-g)之合成：

於氮氣流下，將(II-3-f)(48.1 g，125.7 mmol)、硫氰酸鈉(20.4 g，251.4 mmol)、乙酸(720 mL)混合後，滴加N-溴丁二醯亞胺(24.6 g，138.3 mmol)，並於25℃下攪拌3小時。向其中添加水(600 mL)加以混合後進行過濾分離，其後，對所獲得之固形物成分進行減壓乾燥，獲得粗產物。利用矽膠層析法(二氯甲烷/甲醇)對粗產物進行純化，獲得31.4 g(II-3-g)。

【0412】 (II-3)之合成：

將(II-3-g)(0.75 g，1.86 mmol)、乙酸(3.8 mL)、鹽酸(3.8 mL)混合，並冷卻至3℃。添加亞硝酸鈉(0.17 g，2.42 mmol)，並於3℃下攪拌1小時，製備重氮鎊溶液。

將二乙基苯胺(0.56 g，3.73 mmol)、四氫呋喃(15 mL)、乙酸鈉(7.4 g)混合，冷卻至3℃後，花費1小時滴加上述重氮鎊溶液，並於3℃下攪拌3小時。升溫至25℃攪拌12小時後，添加水(7.5 mL)、甲醇(15 mL)並進行攪拌。濾取所析出之固體，利用矽膠層析法(己烷/二氯甲烷)對所獲得之粗產物進行純化，藉此獲得0.14 g色素(II-3)。

【0413】 色素(II-3)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為

563 nm，克吸光係數為134.8 Lg⁻¹cm⁻¹。

【0414】 又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

¹H-NMR(CDCl₃, 400 MHz)δ0.93(s,9H), δ1.03(d,3H,J=6.7 Hz), δ1.13-1.18(m,1H),δ1.28-1.37(m,7H),δ1.65-1.72(m,1H),δ1.76-1.91(m,2H),δ3.53(q,4H,J=7.2 Hz),δ4.09(t,2H,J=6.7 Hz),δ6.76(d,2H,9.4 Hz), δ7.00(d,2H,9.1 Hz),δ7.85(s,1H),δ7.88(d,2H,9.1 Hz),δ7.95(d,2H,9.4 Hz)

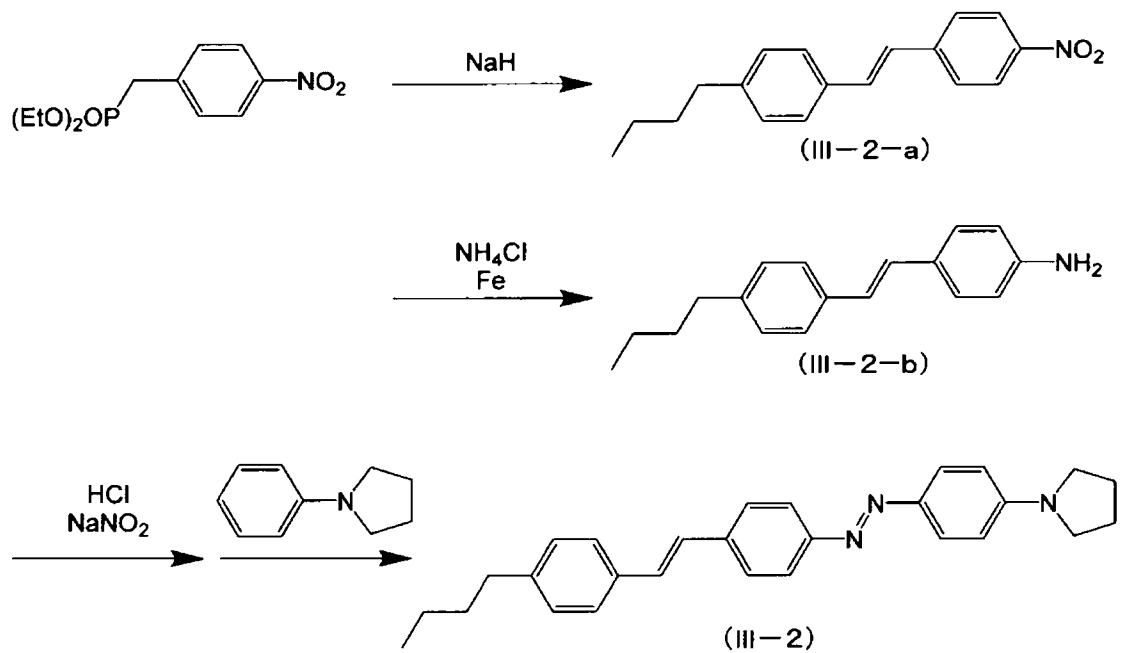
藉由與下述色素(IV-1)於環戊酮中之溶解度之測定同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)色素(II-3)於環戊酮中之溶解度，結果為0.3%。

【0415】 對於下述比較色素(III-4)，亦同樣地測定環戊酮飽和溶液之濃度。

【0416】 <色素(III-2)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(III-2)。

【0417】 [化32]



【0418】 (III-2-a)之合成：

向經冰浴冷卻之反應器中，添加四氫呋喃(100 mL)、氫化鈉(純度 60%，6.7 g，168.0 mmol)，並花費10分鐘滴加(4-硝基苄基)膦酸二乙酯(18.0 g，65.9 mmol)、4-丁基苯甲醛(9.1 g，56.1 mmol)、四氫呋喃(50 mL)之混合物，以四氫呋喃(30 mL)進行沖洗後，於50℃下攪拌0.5小時。將反應液注入至水中，藉由乙酸乙酯進行萃取，並利用水、飽和食鹽水進行洗淨，蒸餾去除溶劑。將所獲得之粗產物加熱溶解於乙酸乙酯(20 mL)後，添加己烷(50 mL)並進行冷卻，將所析出之沈澱過濾分離，並利用己烷進行洗淨後，於減壓下進行乾燥，獲得15.0 g(III-2-a)。

【0419】 (III-2-b)之合成：

將(III-2-a)(15.0 g，53.3 mmol)、四氫呋喃(150 mL)、鐵粉(13.9 g，248.9 mmol)混合，滴加溶解於水(30 mL)中之氯化銨(13.3 g，248.6 mmol)，於50℃下攪拌3小時。使用矽藻土進行過濾，藉由乙酸乙酯進行萃取，並利用水、飽和食鹽水進行洗淨，蒸餾去除溶劑。利用己烷使所獲得之粗產物懸浮，將沈澱物過濾分離，並利用己烷進行洗淨後，進行乾燥，獲得10.9 g(III-2-b)。

【0420】 (III-2)之合成：

將(III-2-b)(2.51 g，10.0 mmol)、N-甲基吡咯啉酮(40 mL)、濃鹽酸(2.2 mL)、水(20 mL)混合，冷卻至3℃後，添加亞硝酸鈉(789 mg，11.4 mmol)，並於15℃下攪拌3.5小時。

將1-苯基吡咯啉(1.47 g，10.0 mmol)、甲醇(60 mL)、水(30 mL)混合，並藉由濃鹽酸使pH值成為3.5。添加氫氧化鈉水溶液使pH值保持於3~5，並且滴加上述含有重氮鎘鹽之液後，於15℃下攪拌3小時。

對所獲得之沈澱物進行過濾，並利用水進行洗淨，於減壓下進行乾

燥。利用矽膠管柱層析法(己烷/二氯甲烷)對所獲得之粗產物進行純化，獲得3.06 g紅色固體之色素(III-2)。

【0421】 該色素(III-2)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為459 nm，克吸光係數為 $107.6 \text{ Lg}^{-1}\text{cm}^{-1}$ 。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

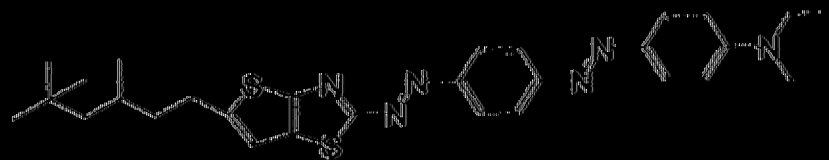
$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3, 400 \text{ MHz})$ δ 0.94(t,3H,J=7.2 Hz), 1.32-1.43(m,2H), 1.55-1.68(m,2H),2.00-2.12(m,4H),2.62(t,2H,J=7.6 Hz),3.41(t,4H,J=6.4 Hz),6.63(d,2H,J=8.8 Hz),7.14(d,2H,J=8.8 Hz),7.19(d,2H,J=8.0 Hz), 7.45(d,2H,J=8.0 Hz),7.60(d,2H,J=8.4 Hz),7.84(d,2H,J=8.4 Hz), 7.88(d,2H,J=9.2 Hz)

【0422】 以下表示上述合成所得之聚合性液晶化合物(I-1)及色素(II-1)、(III-2)、(II-2)、(II-3)之化學結構。式中， $\text{C}_{11}\text{H}_{22}$ 係指11個亞甲基鏈呈直鏈狀地鍵結。

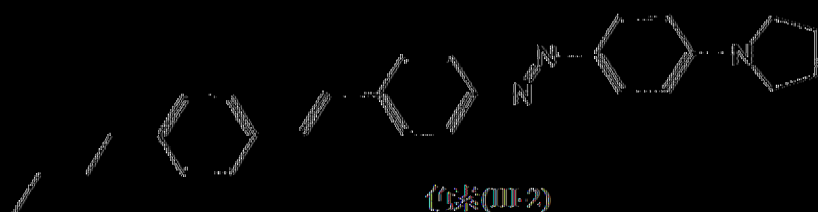
【0423】 [化33]



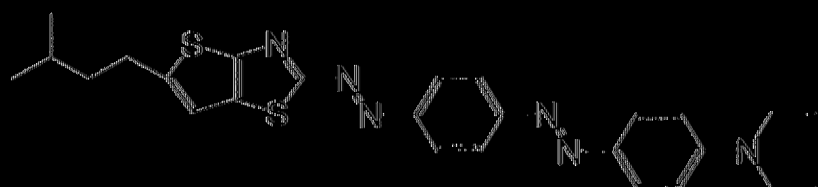
聚合性液晶化合物(I-1)



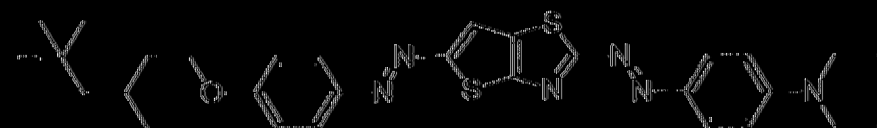
色素(III-1)



色素(III-2)



色素(III-2)



色素(III-3)

[0424] 以下表示實施例、比較例中使用之色素(III-1)及(III-3)、(III-4)之化學結構。

[0425] [化34]

素(II-1)，除此以外，與實施例I-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物I-2及異向性色素膜I-2。異向性色素膜形成用組合物I-2之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物I-2顯示出液晶性。

又，確定異向性色素膜I-2之二色比。

將其結果示於表1。

【0428】 [表1]

	實施例I-1	比較例I-1
聚合性液晶化合物	I-1	I-1
色素	II-1	III-1
顯示出最大二色比之溫度(℃)	40	40
於350～800 nm間顯示出極大二色比之波長(nm)	645	645
上述波長下之二色比	42.4	40.4
所使用之色素於甲苯中之溶解度(質量%)	0.5	0.2

【0429】 根據表1，實施例I-1中使用之色素(II-1)於甲苯中之溶解性較高，且於所獲得之異向性色素膜中顯示出較高之二色比。另一方面，於比較例I-1中，顯示出無法兼顧於甲苯中之較高之溶解性與較高之二色比。

【0430】 [實施例I-2]

向19.65份聚合性液晶化合物(I-1)中，添加溶解於885.3份氯仿中之0.09份色素(III-2)、溶解於1039.9份氯仿中之0.10份色素(III-3)(林原股份有限公司製造)、溶解於2305.2份氯仿中之0.23份色素(II-1)，進行攪拌使其等相溶後，去除溶劑，藉此獲得異向性色素膜形成用組合物I-3。異向性色素膜形成用組合物I-3之 r_{n1}/r_{n2} 於所有液晶、色素之組合中均為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物I-3顯示出液晶性。

使用所獲得之異向性色素膜形成用組合物I-3，並藉由與實施例I-1同

樣之方法製作異向性色素膜I-3，確定異向性色素膜I-3之二色比。

該異向性色素膜I-3之最大二色比於40°C、波長620 nm下為40.5。聚合性液晶化合物(I-1)中之色素(III-2)、色素(III-3)之最大吸收波長分別為495 nm、530 nm。

【0431】 [實施例I-3]

向718.2份環戊酮中，添加243.6份聚合性液晶化合物(I-1)、4.07份色素(II-1)、5.58份IRGACURE(註冊商標)369(BASF公司製品)、3.62份BYK-361N(BYK-Chemie公司製造)，並於80°C下加熱攪拌後，使用具備針筒過濾器(Membrane Solutions公司製造，PTFE13045，口徑0.45 μm)之針筒進行過濾，藉此獲得異向性色素膜用組合物I-4。異向性色素膜用組合物I-4之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

藉由旋轉塗佈法，使異向性色素膜用組合物I-4成膜於玻璃板上形成聚醯亞胺配向膜(LX1400，Hitachi Chemical DuPont Microsystems Ltd.製造，藉由摩擦法形成配向膜)所得之基板，並於120°C下加熱乾燥2分鐘後，冷卻至液晶相，以曝光量500 mj/cm^2 (365 nm基準)進行聚合，獲得異向性色素膜I-4。

若將所獲得之異向性色素膜I-4遮蓋在市售之偏光板之上並使之旋轉，則發生明暗變化，從而可確認顯示出可作為偏光膜加以利用之良好性能。

【0432】 [實施例I-4]

使用0.28份色素(II-2)來代替0.30份色素(II-1)，除此以外，與實施例I-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物I-5及異向性色素膜I-5。異向性色素膜形成用組合物I-5之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物I-5顯示出液晶性。

又，確定異向性色素膜I-5之二色比。

將其結果示於表2。

【0433】 [表2]

	實施例I-4
聚合性液晶化合物	I-1
色素	II-2
溫度(℃)	40
於350～800 nm間顯示出極大二色比之波長(nm)	645
上述波長下之二色比	41
所使用之色素於甲苯中之溶解度(質量%)	0.7

【0434】 根據表2，實施例I-4中使用之色素(II-2)於甲苯中之溶解性較高，且於所獲得之異向性色素膜中顯示出較高之二色比。

【0435】 [實施例I-5]

使用0.27份色素(II-3)來代替0.30份色素(II-1)，除此以外，與實施例I-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物I-6及異向性色素膜I-6。異向性色素膜形成用組合物I-6之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物I-6顯示出液晶性。

又，確定異向性色素膜I-6之二色比。

將其結果示於表3。

【0436】 [比較例I-2]

使用0.20份色素(III-4)來代替0.30份色素(II-1)，除此以外，與實施例I-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物I-7及異向性色素膜I-7。異向性色素膜形成用組合物I-7之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確

認異向性色素膜形成用組合物117顯示出液晶性。

又，確定異向性色素膜117之二色比。

將其結果示於表3。

〔0437〕 〔表3〕

聚合性液晶化合物	實施例15	比較例12
色素	1003	1004
溫度(℃)	40	40
於350～800 nm間顯示出極大二色比之波長(nm)	665	665
上述波長下之二色比	4/	4/
所使用之色素於環戊酮中之溶解度(質量%)	0.3	0.2

〔0438〕 根據表3，實施例15中使用之色素(1003)於所獲得之異向性色素膜中顯示出較高之二色比，並且相較於比較例12中使用之色素(1004)，於環戊酮中之溶解性較良好。

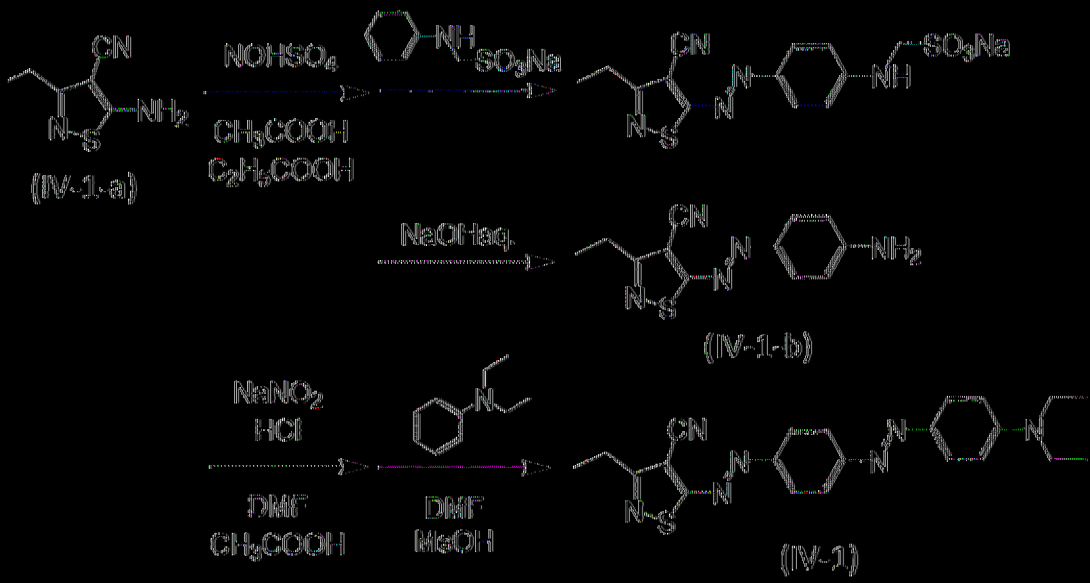
〔0439〕 〔第2發明之合成例以及實施例及比較例〕

〔色素之合成〕

<色素(IV-1)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(IV-1)。

〔0440〕 〔化35〕



【0441】 (IV-1-a)之合成：

藉由國際公開第2015/048281號所記載之方法合成(IV-1-a)。

【0442】 (IV-1-b)之合成：

將(IV-1-a)(0.5 g, 3.3 mmol)、乙酸(5 mL)、丙酸(3 mL)混合，並冷卻至0℃。添加於水(2 mL)中混合濃硫酸(2 mL)所得之溶液，並添加40%亞硝基硫酸(1.1 g, 3.4 mmol)，於0℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.3 g, 0.3 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將苯胺(1.3 g, 13.4 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(1.8 g, 13.4 mmol)、水(50 mL)混合，並於70℃下攪拌2小時。冷卻至0℃，花費30分鐘滴加上述重氮鎘溶液後，於0℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，使其分散於1 M氫氧化鈉水溶液(3 mL)、水(14 mL)中，並於90℃下攪拌2小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，利用水進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得0.6 g(IV-1-b)。

【0443】 (IV-1)之合成：

將(IV-1-b)(0.6 g, 2.4 mmol)、二甲基甲醯胺(20 mL)、乙酸(5 mL)混合，並添加35%鹽酸(1 mL)後，冷卻至3℃。添加溶解於水(2 mL)中之亞硝酸鈉(0.2 g, 2.7 mmol)，並於3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.2 g, 0.2 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將二乙基苯胺(0.4 g, 2.4 mmol)、甲醇(8 mL)、二甲基甲醯胺(1 mL)混合，並冷卻至3℃。利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為3~4，並且花費30分鐘滴加上述重氮鎘溶液，其後，於3℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，利用矽膠管柱層析法(己烷/二氯甲烷)對所獲得之粗產物進行純化，獲得0.2 g色素(IV-1)。

【0444】 色素(IV-1)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為581 nm，克吸光係數為 $95.1 \text{ L g}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ 。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 、400 MHz) δ 1.26(t,6H, $J=7.1 \text{ Hz}$), δ 1.44(t,3H, $J=7.5 \text{ Hz}$), δ 3.04(q,2H, $J=7.6 \text{ Hz}$), δ 3.49(q,4H, $J=7.2 \text{ Hz}$), δ 6.75(d,2H, $J=9.3 \text{ Hz}$), δ 7.91(d,2H, $J=9.2 \text{ Hz}$), δ 7.97(d,2H, $J=8.8 \text{ Hz}$), δ 8.12(d,2H, $J=8.8 \text{ Hz}$)

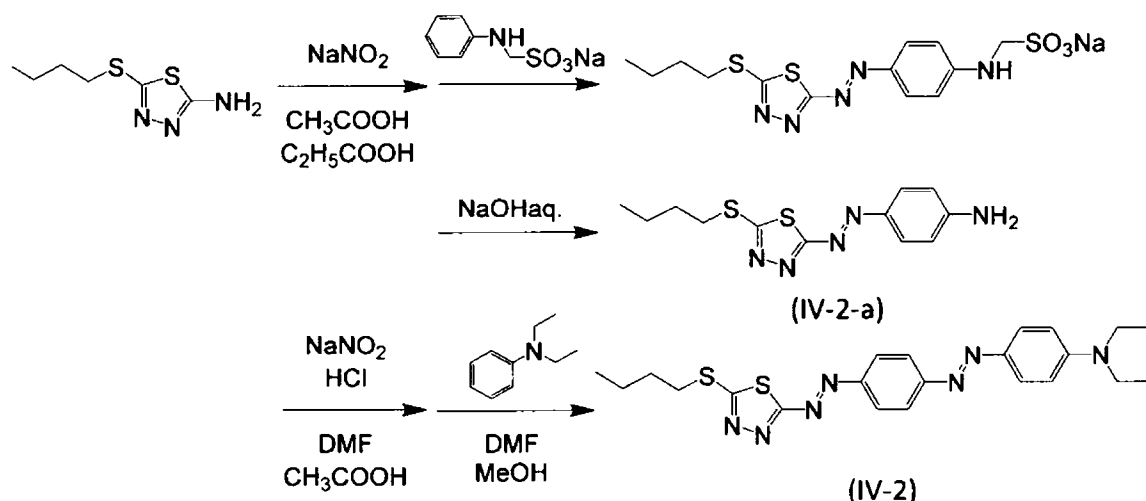
【0445】 測定色素(IV-1)於環戊酮中之溶解度。

向103 mg環戊酮中添加3 mg色素(IV-1)，並於 80°C 下攪拌5分鐘。其後，於室溫下靜置1小時，使用具備針筒過濾器(Membrane Solutions公司製造，PTFE13045，口徑 $0.45 \mu\text{m}$)之針筒對所獲得之混合液進行過濾，藉此獲得色素(IV-1)之環戊酮飽和溶液。利用746 mg四氫呋喃將該溶液稀釋，使用HPLC(日立高新技術公司製造之L-2300系列)來確定濃度。將色素(IV-1)0.1質量%溶解於四氫呋喃中製作溶液，並於吸收波長254 nm下繪製校準曲線。使用該校準曲線，測定環戊酮飽和溶液之濃度。將結果示於表4。

【0446】 <色素(IV-2)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(IV-2)。

【0447】 [化36]



【0448】 (IV-2-a)之合成：

將濃硫酸(1 mL)、亞硝酸鈉(0.2 g, 2.8 mmol)混合，於60℃下攪拌30分鐘後，冷卻至3℃。添加乙酸(5 mL)、丙酸(2 mL)，添加5-丁硫基-1,3,4-噻二唑-2-胺(0.5 g, 2.6 mmol)，並於3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.3 g, 0.3 mmol)，製備重氮鎊溶液。

將苯胺(1.0 g, 10.8 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(1.5 g, 10.8 mmol)、水(50 mL)混合，並於70℃下攪拌2小時。冷卻至3℃，花費30分鐘滴加上述重氮鎊溶液後，於3℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，使其分散於25%氫氧化鈉水溶液(1 mL)、水(16 mL)中，並於90℃下攪拌2小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，利用水進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得0.4 g(IV-2-a)。

【0449】 (IV-2)之合成：

將(IV-2-a)(0.4 g, 1.5 mmol)、二甲基甲醯胺(14 mL)、乙酸(4 mL)混合，並添加35%鹽酸(1 mL)後，冷卻至3℃。添加溶解於水(1 mL)中之亞硝酸鈉(0.1 g, 1.6 mmol)，於3℃下攪拌3小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.1 g, 0.1 mmol)，製備重氮鎊溶液。

將二乙基苯胺(0.2 g, 1.5 mmol)、甲醇(5 mL)、二甲基甲醯胺(1

mL)混合，並冷卻至3℃。利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為3~4，並且花費30分鐘滴加上述重氮鑷溶液，其後，於3℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)對所獲得之粗產物進行純化，獲得0.1 g色素(IV-2)。

[0450] 色素(IV-2)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為551 nm，克吸光係數為83.9 L·g⁻¹·cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

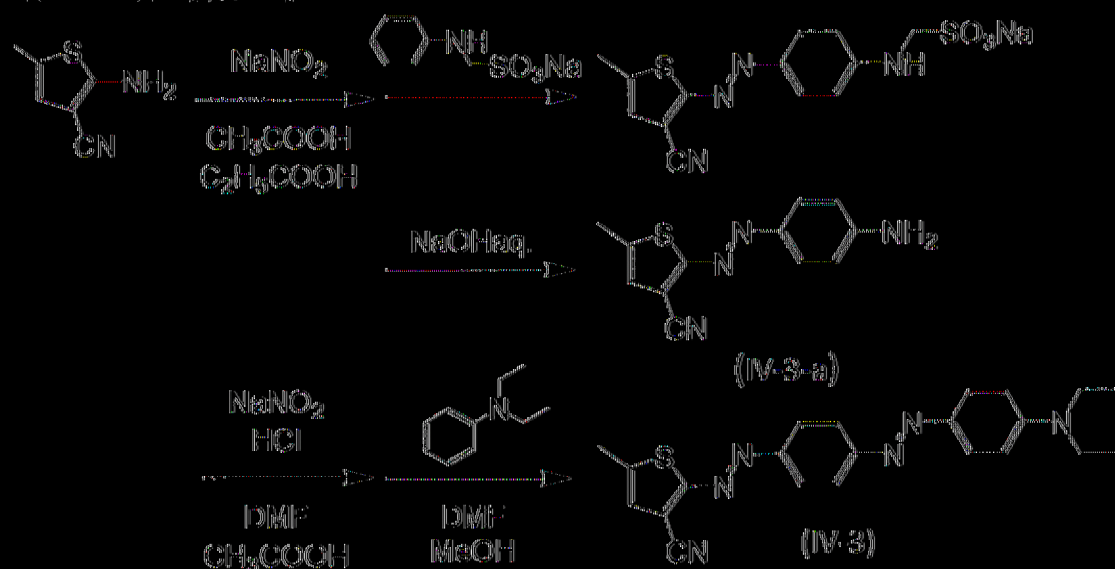
¹H-NMR(CDCl₃、400 MHz) δ0.99(t,3H,J = 7.4 Hz),δ1.26(t,6H,J = 7.1 Hz),δ1.48-1.58(m,2H),δ1.81-1.89(m,2H),δ3.42-3.52(m,6H),δ6.74(d,2H,J = 9.2 Hz),δ7.90(d,2H,J = 9.2 Hz),δ7.96(d,2H,J = 8.8 Hz),δ8.10(d,2H,J = 8.8 Hz)

[0451] 藉由與色素(IV-1)同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)色素(IV-2)於環戊酮中之溶解度。將結果示於表4。

[0452] <色素(IV-3)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(IV-3)。

[0453] [化37]



【0454】 (IV-3-a)之合成：

將2-胺基-5-甲基-3-噻吩甲腈(0.5 g, 3.6 mmol)、乙酸(5 mL)、丙酸(3 mL)混合並冷卻至3℃。添加於水(2 mL)中混合濃硫酸(2 mL)所得之溶液，並添加40%亞硝基硫酸(1.2 g, 3.8 mmol)，於3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.4 g, 0.4 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將苯胺(1.4 g, 14.8 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(2.0 g, 14.8 mmol)、水(50 mL)混合，並於70℃下攪拌2.5小時。冷卻至3℃，花費30分鐘滴加上述重氮鎘溶液後，於3℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，使其分散於25%氫氧化鈉水溶液(1 mL)、水(16 mL)中，並於90℃下攪拌2小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，利用水進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得0.6 g(IV-3-a)。

【0455】 (IV-3)之合成：

將(IV-3-a)(0.6 g, 2.5 mmol)、二甲基甲醯胺(20 mL)、乙酸(5 mL)混合，並添加35%鹽酸(1 mL)後，冷卻至3℃。添加溶解於水(2 mL)中之亞硝酸鈉(0.2 g, 2.8 mmol)，並於3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.2 g, 0.2 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將二乙基苯胺(0.4 g, 2.5 mmol)、甲醇(7 mL)、二甲基甲醯胺(1 mL)混合，並冷卻至3℃。利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為3~4，並且花費30分鐘滴加上述重氮鎘溶液，其後，於3℃下攪拌1.5小時。濾取所析出之固體，利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)對所獲得之粗產物進行純化，獲得0.2 g色素(IV-3)。

【0456】 色素(IV-3)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為541 nm，克吸光係數為100.0 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

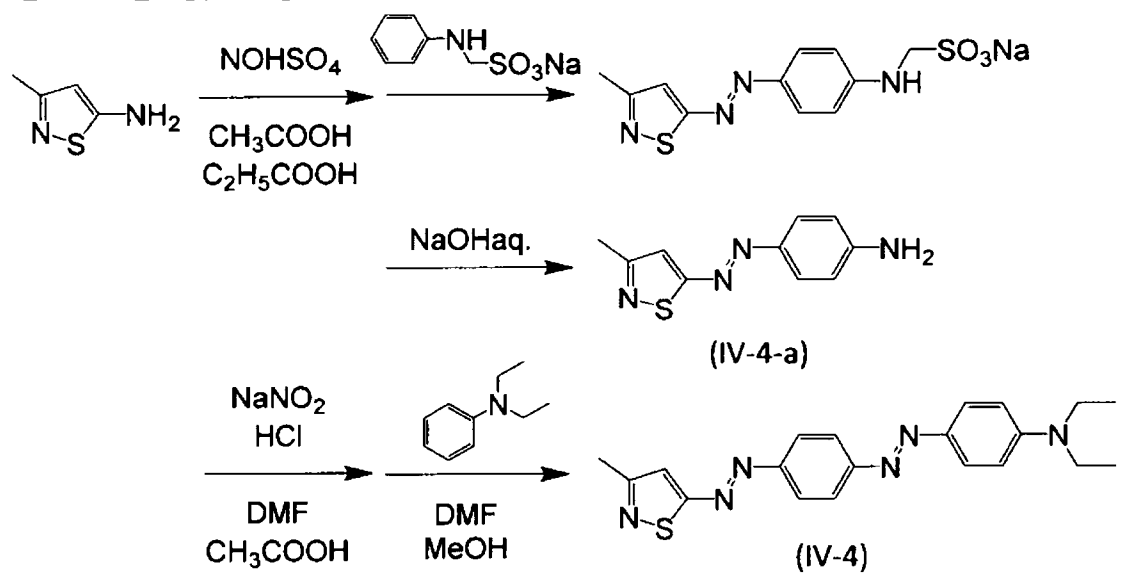
¹H-NMR(CDCl₃、400 MHz) δ1.25(t,6H,J=7.1 Hz), δ2.55(s,3H), δ3.48(q,4H,J=7.1 Hz),δ6.74(d,2H,J=9.3 Hz), δ7.05(s,1H), δ7.90(d,2H,J=9.2 Hz),δ7.94(d,2H,J=8.9 Hz), δ8.05(d,2H,J=8.9 Hz)

【0457】 藉由與色素(IV-1)同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)色素(IV-3)於環戊酮中之溶解度。將結果示於表4。

【0458】 <色素(IV-4)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(IV-4)。

【0459】 [化38]



【0460】 (IV-4-a)之合成：

將5-氨基-3-甲基異噻唑(0.5 g，4.4 mmol)、乙酸(5 mL)、丙酸(3 mL)混合並冷卻至0℃。添加於水(2 mL)中混合濃硫酸(2 mL)所得之溶液，並添加40%亞硝基硫酸(1.5 g，4.6 mmol)，於0℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.4 g，0.4 mmol)，製備重氮鎊溶液。

將苯胺(1.7 g，18.0 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(2.4 g，18.0 mmol)、水(50 mL)混合，並於70℃下攪拌2.5小時。冷卻至0℃，花費1小時滴加上

述重氮鎘溶液後，於0℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，使其分散於25%氫氧化鈉水溶液(1 mL)、水(16 mL)中，並於60℃下攪拌3小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，利用水進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得0.6 g(IV-4-a)。

【0461】 (IV-4)之合成：

將(IV-4-a)(0.6 g, 2.9 mmol)、二甲基甲醯胺(21 mL)、乙酸(5 mL)混合，添加35%鹽酸(1 mL)後，冷卻至-3℃。添加溶解於水(2 mL)中之亞硝酸鈉(0.2 g, 3.2 mmol)，並於-3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.3 g, 0.3 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將二乙基苯胺(0.4 g, 2.9 mmol)、甲醇(8 mL)、二甲基甲醯胺(1 mL)混合，並冷卻至-3℃。利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為3~4，並且花費30分鐘滴加上述重氮鎘溶液，其後，於0℃下攪拌1小時。濾取所析出之固體，利用水、己烷對所獲得之粗產物進行洗淨，獲得0.5 g色素(IV-4)。

【0462】 色素(IV-4)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為528 nm，克吸光係數為104.9 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

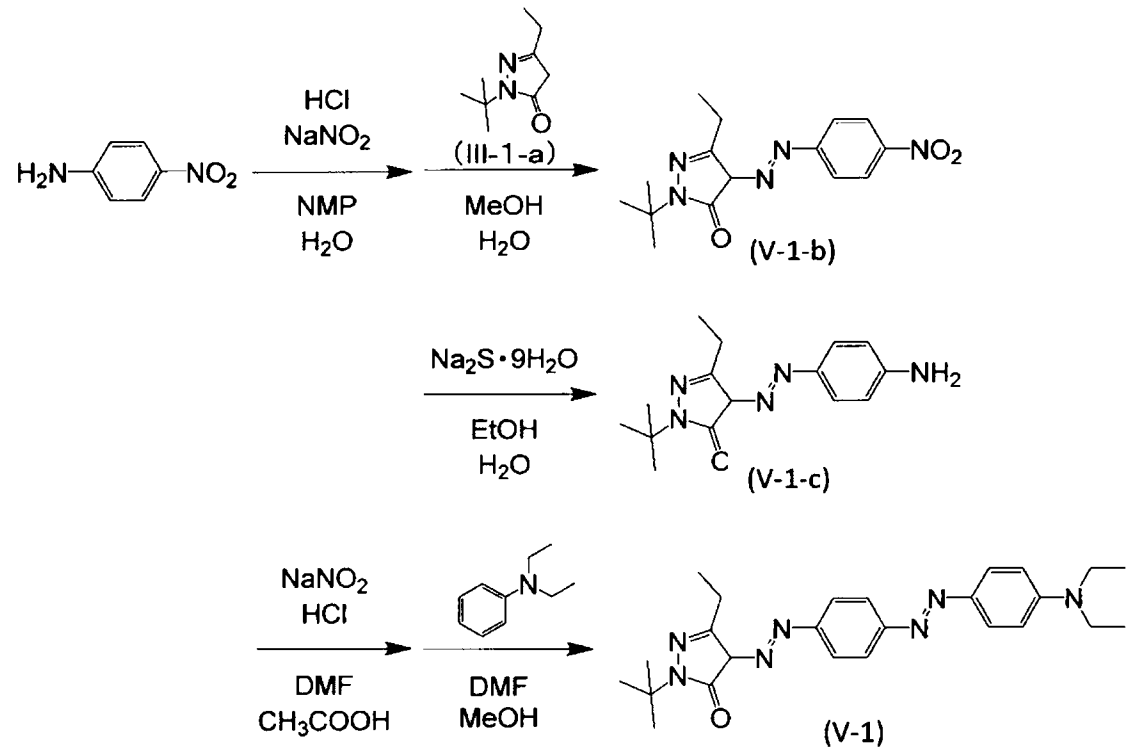
¹H-NMR(CDCl₃、400 MHz) δ 1.25(t,6H,J=7.0 Hz), δ 2.54 (s,3H), δ 3.47(q,4H,J=7.1 Hz), δ 6.74(d,2H,J=9.2 Hz), δ 7.72-7.75(m,1H), δ 7.88(d,2H,J=9.2 Hz), δ 7.96(d,2H,J=8.9 Hz), δ 8.09(d,2H,J=8.9 Hz)

【0463】 藉由與色素(IV-1)同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)色素(IV-4)於環戊酮中之溶解度。將結果示於表4。

【0464】 <色素(V-1)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(V-1)。

【0465】 [化39]



【0466】 (V-1-a)之合成：

藉由國際公開第2010/126163號所記載之方法合成(V-1-a)。

【0467】 (V-1-b)之合成：

將4-硝基苯胺(0.5 g，3.6 mmol)、N-甲基吡咯啉酮(10 mL)、水(8 mL)混合，並添加35%鹽酸(1 mL)，冷卻至3℃。添加溶解於水(3 mL)中之亞硝酸鈉(0.3 g，4.0 mmol)，並於3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.4 g，0.4 mmol)，製備重氮鎢溶液。

將(V-1-a)(0.6 g，3.6 mmol)、甲醇(6 mL)、水(1 mL)混合並冷卻至3℃。花費30分鐘滴加上述重氮鎢溶液，其後，於3℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，利用水進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得1.1 g(V-1-b)。

【0468】 (V-1-c)之合成：

將(V-1-b)(1.1 g, 3.5 mmol)、乙醇(70 mL)混合，並升溫至80℃。添加溶解於水(20 mL)中之硫化鈉九水合物(3.3 g, 13.9 mmol)後，於60℃下攪拌5小時。將自然冷卻之反應液濃縮，並利用水進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得0.4 g(V-1-c)。

【0469】 (V-1)之合成：

將(V-1-c)(0.4 g, 1.4 mmol)、二甲基甲醯胺(13 mL)、乙酸(3 mL)混合，添加35%鹽酸(1 mL)後，冷卻至3℃。添加溶解於水(1 mL)中之亞硝酸鈉(0.1 g, 1.5 mmol)，並於3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.3 g, 0.3 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將二乙基苯胺(0.5 g, 3.6 mmol)、甲醇(6 mL)、二甲基甲醯胺(1 mL)混合，並冷卻至3℃。利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為3~4，並且花費30分鐘滴加上述重氮鎘溶液，其後，於3℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)對所獲得之粗產物進行純化，獲得0.2 g色素(V-1)。

【0470】 色素(V-1)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為502 nm，克吸光係數為114.0 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

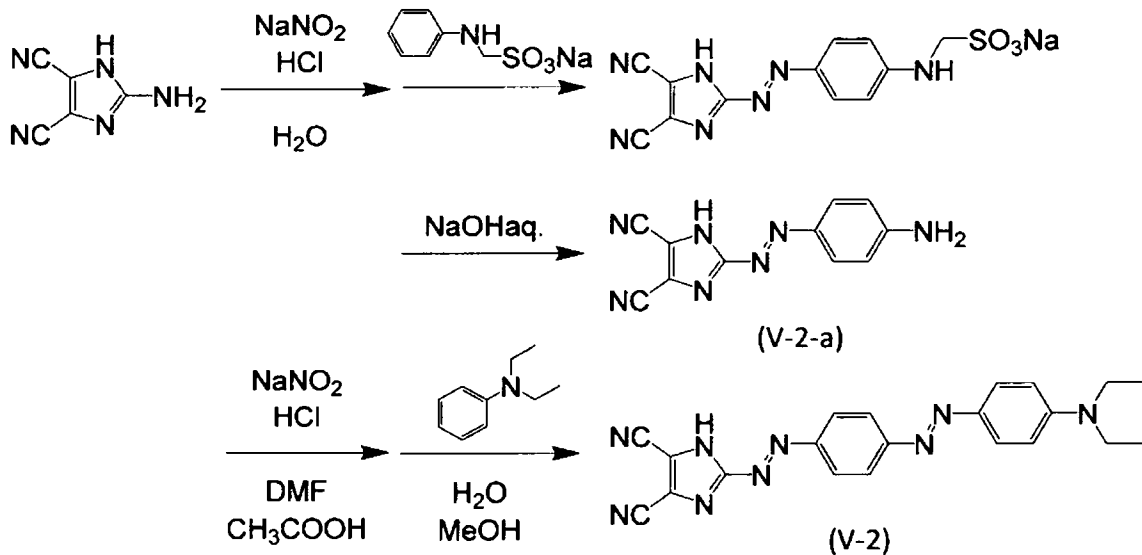
¹H-NMR(CDCl₃, 400 MHz) δ 1.24(t, 6H, J=7.1 Hz), δ 1.32(t, 3H, J=7.6 Hz), δ 1.53(s, 9H), δ 2.67(q, 2H, J=7.6 Hz), δ 3.45(q, 4H, J=7.1 Hz), δ 6.72(d, 2H, J=9.2 Hz), δ 7.44(d, 2H, J=8.9 Hz), δ 7.84(d, 2H, J=9.2 Hz), δ 7.88(d, 2H, J=8.9 Hz)

【0471】 藉由與色素(IV-1)同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)色素(V-1)於環戊酮中之溶解度。將結果示於表4。

【0472】 <色素(V-2)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(V-2)。

【0473】 [化40]



【0474】 (V-2-a)之合成：

將2-胺基-4,5-二氰基-1H-咪唑(2.0 g，8.4 mmol)、水(60 mL)混合，並添加35%鹽酸(2 mL)，冷卻至3℃。添加溶解於水(3 mL)中之亞硝酸鈉(0.6 g，9.3 mmol)，並於3℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.8 g，0.8 mmol)，製備重氮鎘溶液。

將苯胺(5.7 g，18.0 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(2.4 g，18.0 mmol)、水(50 mL)混合，並於70℃下攪拌2小時。冷卻至3℃，花費1小時滴加上述重氮鎘溶液後，於3℃下攪拌2小時。濾取所析出之固體，並使其分散於25%氫氧化鈉水溶液(1 mL)、水(14 mL)中，於90℃下攪拌3小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，利用水進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得0.3 g(V-2-a)。

【0475】 (V-2)之合成：

將(V-2-a)(0.3 g，1.1 mmol)、二甲基甲醯胺(9 mL)、乙酸(2 mL)混

合，添加35%鹽酸(1 mL)後，冷卻至3°C。添加溶解於水(1 mL)中之亞硝酸鈉(0.1 g，1.3 mmol)，並於3°C下攪拌2小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.2 g，0.2 mmol)，製備重氮鎊溶液。

將二乙基苯胺(0.2 g，1.1 mmol)、甲醇(8 mL)、水(1 mL)混合，並冷卻至3°C。利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為3~4，並且花費30分鐘滴加上述重氮鎊溶液，其後，於3°C下攪拌2小時。濾取所析出之固體，利用矽膠管柱層析法(己烷/乙酸乙酯)對所獲得之粗產物進行純化，獲得0.1 g色素(V-2)。

【0476】 色素(V-2)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為545 nm，克吸光係數為80.5 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

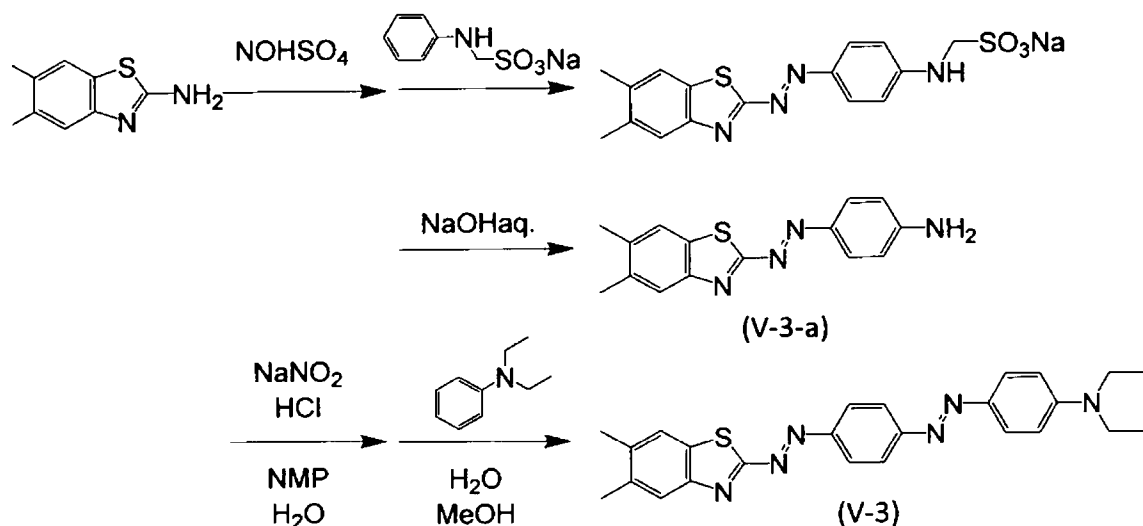
¹H-NMR(DMSO-d₆、400 MHz) δ 1.17(t,6H,J=7.0 Hz), δ 3.49(q,4H,J=7.0 Hz), δ 6.85(d,2H,J=9.3 Hz), δ 7.84(d,2H,J=9.2 Hz), δ 7.97(d,2H,J=8.7 Hz), δ 8.06(d,2H,J=8.7 Hz)

【0477】 藉由與色素(IV-1)同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)該色素(V-2)於環戊酮中之溶解度。將結果示於表4。

【0478】 <色素(V-3)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(V-3)。

【0479】 [化41]



【0480】 (V-3-a)之合成：

將2-氨基-5,6-二甲基苯并噻唑(2.5 g, 14.0 mmol)、85%磷酸(38 mL)混合，並加熱至80℃進行分散。將其冷卻至5~10℃，並添加40%亞硝基硫酸(5.6 g, 17.6 mmol)，於5~10℃下攪拌1小時，製備重氮鎘溶液。

將苯胺(4.3 g, 46.3 mmol)、甲醛重亞硫酸鈉(6.2 g, 46.3 mmol)、水(431 mL)混合，並於70℃下攪拌2小時。冷卻至5~10℃，添加胺基磺酸(0.3 g, 2.8 mmol)。花費1小時滴加上述重氮鎘溶液後，於5~10℃下攪拌30分鐘，並添加氯化鈉(30 g)攪拌10分鐘。濾取所析出之固體，使其分散於1 M氫氧化鈉水溶液(250 L)中，並於90℃下攪拌2小時。自然冷卻後，濾取所析出之固體，利用甲醇進行洗淨後，使固體溶解於氯仿，並藉由矽藻土過濾去除不溶成分。濃縮濾液後，利用矽膠管柱層析法(氯仿)對所獲得之粗產物進行純化。利用二甲基甲醯胺(10 mL)/水(15 mL)進行再沈澱，並利用甲醇對濾取之固體進行洗淨後，於40℃下進行減壓乾燥，藉此獲得2.0 g(V-3-a)。

【0481】 (V-3)之合成：

將(V-3-a)(2.0 g, 7.1 mmol)、N-甲基吡咯啉酮(24 mL)混合，並冷

卻至5~10℃。添加35%鹽酸(2 mL)、水(14 mL)後，添加溶解於水(31 mL)中之亞硝酸鈉(0.5 g, 7.8 mmol)，並於5~10℃下攪拌1小時。向其中添加10%胺基磺酸溶液(0.1 g, 0.1 mmol)，製備重氮鎊溶液。

將二乙基苯胺(1.1 g, 7.1 mmol)、甲醇(30 mL)、水(30 mL)混合，並利用35%鹽酸將pH值調整為3.5。冷卻至5~10℃，利用25%氫氧化鈉水溶液將pH值調整為5~6，並且花費45分鐘滴加上述重氮鎊溶液後，於5~10℃下攪拌1小時。添加水(350 mL)，濾取所析出之固體，並利用水、甲醇進行洗淨。利用甲醇(80 mL)對所獲得之固體進行懸浮洗淨後，利用二氯甲烷(50 mL)/甲醇(150 mL)進行再沈澱。利用矽膠管柱層析法(己烷/二氯甲烷)對所獲得之粗產物進行純化，獲得0.6 g色素(V-3)。

【0482】 色素(V-3)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為546 nm，克吸光係數為106.0 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

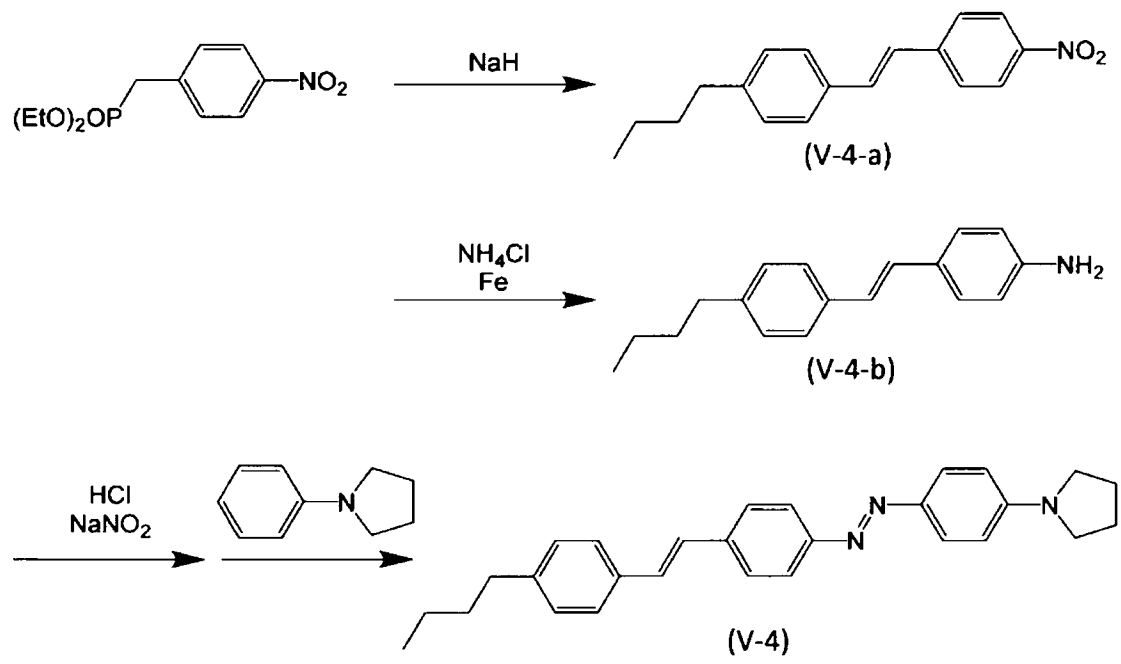
¹H-NMR(CDCl₃、400 MHz) δ 1.26(t,6H,J=7.1 Hz), δ 2.43 (s,6H), δ 3.49(q,4H,J=7.1 Hz), δ 6.74(d,2H,J=8.9 Hz), δ 7.66 (s,1H), δ 7.90 - 8.00(m,5H), δ 8.17(d,2H,J=8.6 Hz)

【0483】 藉由與色素(IV-1)同樣之方法測定(檢測吸收波長：254 nm)色素(V-3)於環戊酮中之溶解度。將結果示於表4。

【0484】 <色素(V-4)>

依照下述所記載之合成法，合成色素(V-4)。

【0485】 [化42]



【0486】 (V-4-a)之合成：

向經冰浴冷卻之反應器中，添加四氫呋喃(100 mL)、氫化鈉(純度 60%，6.7 g，168.0 mmol)，並花費10分鐘滴加(4-硝基苄基)膦酸二乙酯 (18.0 g，65.9 mmol)、4-丁基苯甲醛(9.1 g，56.1 mmol)、四氫呋喃(50 mL)之混合物，以四氫呋喃(30 mL)進行沖洗後，於50℃下攪拌0.5小時。將反應液注入至水中，藉由乙酸乙酯進行萃取，並利用水、飽和食鹽水進行洗淨，蒸餾去除溶劑。將所獲得之粗產物加熱溶解於乙酸乙酯(20 mL)後，添加己烷(50 mL)並進行冷卻，將所析出之沈澱過濾分離，並利用己烷進行洗淨後，於減壓下進行乾燥，獲得15.0 g(V-4-a)。

【0487】 (V-4-b)之合成：

將(V-4-a)(15.0 g，53.3 mmol)、四氫呋喃(150 mL)、鐵粉(13.9 g，248.9 mmol)混合，並滴加溶解於水(30 mL)中之氯化銨(13.3 g，248.6 mmol)，於50℃下攪拌3小時。使用矽藻土進行過濾，藉由乙酸乙酯進行萃取，並利用水、飽和食鹽水進行洗淨，蒸餾去除溶劑。利用己烷使所獲得之粗產物懸浮，將沈澱物過濾分離，並利用己烷進行洗淨後，進行

乾燥，獲得10.9 g(V-4-b)。

【0488】 (V-4)之合成：

將(V-4-b)(2.51 g，10.0 mmol)、N-甲基吡咯啉酮(40 mL)、濃鹽酸(2.2 mL)、水(20 mL)混合，冷卻至3℃後，添加亞硝酸鈉(789 mg，11.4 mmol)，並於15℃下攪拌3.5小時。

將1-苯基吡咯啉(1.47 g，10.0 mmol)、甲醇(60 mL)、水(30 mL)混合，並藉由濃鹽酸使pH值成為3.5。添加氫氧化鈉水溶液使pH值保持於3~5，並且滴加上述含有重氮鎘鹽之液後，於15℃下攪拌3小時。

對所獲得之沈澱物進行過濾，並利用水進行洗淨，於減壓下進行乾燥。利用矽膠管柱層析法(己烷/二氯甲烷)對所獲得之粗產物進行純化，獲得3.06 g紅色固體之色素(V-4)。

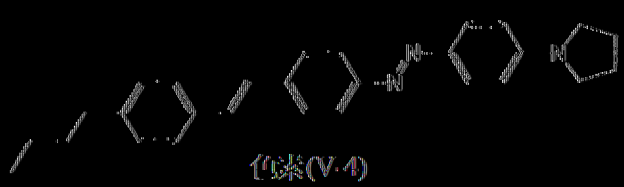
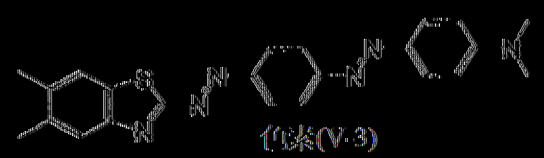
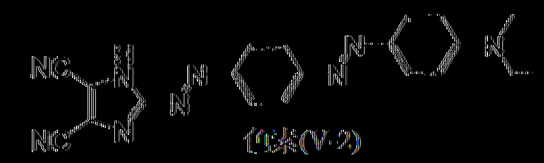
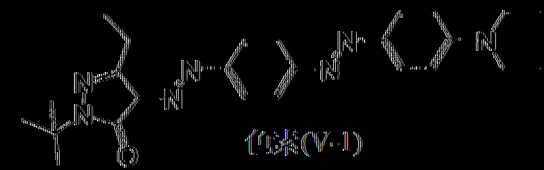
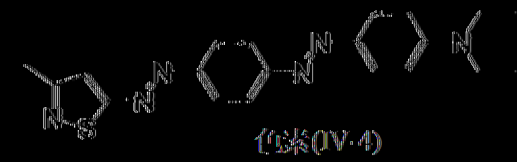
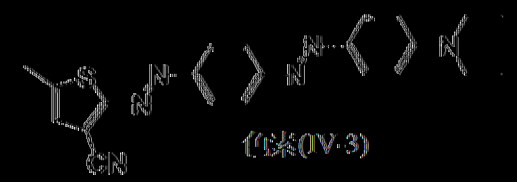
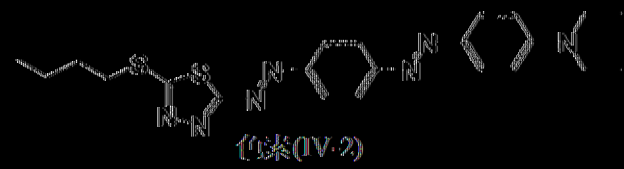
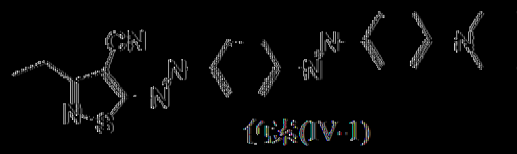
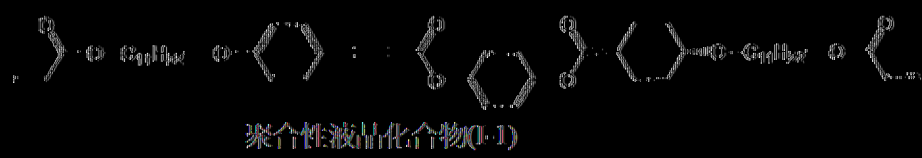
【0489】 色素(V-4)於10 ppm氯仿溶液中之極大吸收波長($\lambda_{\max}$)為459 nm，克吸光係數為107.6 Lg⁻¹cm⁻¹。

又，藉由NMR進行結構確認。以下表示結果。

¹H-NMR(CDCl₃、400 MHz) δ0.94(t,3H,J=7.2 Hz), 1.32-1.43(m,2H), 1.55-1.68(m,2H),2.00-2.12(m,4H),2.62(t,2H,J=7.6 Hz), 3.41(t,4H,J=6.4 Hz),6.63(d,2H,J=8.8 Hz),7.14(d,2H,J=8.8 Hz),7.19(d,2H,J=8.0 Hz), 7.45(d,2H,J=8.0 Hz),7.60(d,2H,J=8.4 Hz),7.84(d,2H,J=8.4 Hz), 7.88 (d,2H,J=9.2 Hz)

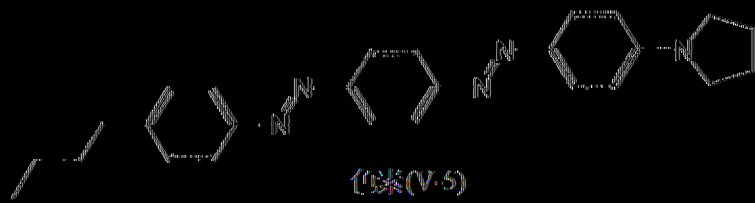
【0490】 將上述合成所得之聚合性液晶化合物及色素之化學結構彙總示於以下。式中，C₁₁H₂₂係指11個亞甲基鏈呈直鏈狀地鍵結。

【0491】 [化43]



[0492] 以下表示實施例中使用之色素(V-5)之化學結構。

[0493] [化44]



[(0494)] [實施例100.1]

向3154.6份氯仿中，添加120.00份聚合性液晶化合物(IV.1)、0.32份色素(IV.1)，進行攪拌使其等相溶後，去除溶劑，藉此獲得異向性色素膜形成用組合物100.1。異向性色素膜形成用組合物100.1之 r_{11}/r_{22} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物100.1顯示出液晶性。

為了使用所獲得之異向性色素膜形成用組合物100.1，並利用上述方法來確定二色比，使用單元間隙8.0 μm 之夾層單元製作異向性色素膜100.1，確定異向性色素膜100.1之二色比。

將其結果示於表4。

[(0495)] [實施例100.2]

使用0.36份色素(IV.2)來代替0.32份色素(IV.1)，除此以外，與實施例100.1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物100.2及異向性色素膜100.2。異向性色素膜形成用組合物100.2之 r_{11}/r_{22} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物100.2顯示出液晶性。

又，確定異向性色素膜100.2之二色比。

將其結果示於表4。

[(0496)] [實施例100.3]

使用0.28份色素(IV.3)來代替0.32份色素(IV.1)，除此以外，與實施例100.1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物100.3及異向性色素膜100.3。異

向性色素膜形成用組合物II-3之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物II-3顯示出液晶性。

又，確定異向性色素膜II-3之二色比。

將其結果示於表4。

【0497】 [實施例II-4]

使用0.29份色素(IV-4)來代替0.32份色素(IV-1)，除此以外，與實施例II-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物II-4及異向性色素膜II-4。異向性色素膜形成用組合物II-4之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確認異向性色素膜形成用組合物II-4顯示出液晶性。

又，確定異向性色素膜II-4之二色比。

將其結果示於表4。

【0498】 [比較例II-1]

使用0.26份色素(V-1)來代替0.32份色素(IV-1)，除此以外，與實施例II-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物II-5及異向性色素膜II-5。異向性色素膜形成用組合物II-5之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

又，確定異向性色素膜II-5之二色比。

將其結果示於表4。

【0499】 [比較例II-2]

使用0.37份色素(V-2)來代替0.32份色素(IV-1)，除此以外，與實施例II-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物II-6及異向性色素膜II-6。異向性色素膜形成用組合物II-6之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

又，確定異向性色素膜II-6之二色比。

將其結果示於表4。

【0500】 [比較例II-3]

使用0.28份色素(V-3)來代替0.32份色素(IV-1)，除此以外，與實施例II-1同樣地獲得異向性色素膜形成用組合物II-7及異向性色素膜II-7。異向性色素膜形成用組合物II-7之 r_{n1}/r_{n2} 為1。

又，確定異向性色素膜II-7之二色比。

將其結果示於表4。

【0501】 [表4]

	實施例				比較例		
	II-1	II-2	II-3	II-4	II-1	II-2	II-3
色素	IV-1	IV-2	IV-3	IV-4	V-1	V-2	V-3
顯示出最大二色比之溫度(℃)	40	40	40	40	40	40	40
於350～800 nm間顯示出極大二色比之波長(nm)	720	650	655	620	615	630	645
上述波長下之二色比	30.1	44.0	20.5	41.4	3.7	5.9	20.8
所使用之色素於環戊酮中之溶解度(質量%)	0.6	2.2	2.7	1.8	2.6	3.0	0.1

【0502】 根據表4，實施例II-1～4中使用之色素(IV-1)～(IV-4)於環戊酮中之溶解性較高，且於所獲得之異向性色素膜中顯示出較高之二色比。另一方面，於比較例II-1～3中，顯示出無法兼顧於環戊酮中之較高之溶解性與較高之二色比。

【0503】 [實施例II-5]

向19.65份聚合性液晶化合物(I-1)中，添加溶解於885.3份氯仿中之0.09份色素(V-4)、溶解於1039.9份氯仿中之0.10份色素(V-5)(林原股份有限公司製造)、溶解於2237.2份氯仿中之0.22份色素(IV-2)，進行攪拌使其等相溶後，去除溶劑，藉此獲得異向性色素膜形成用組合物II-8。

根據藉由高溫載台附帶之偏光顯微鏡，於40℃下觀察到雙折射來確

認異向性色素膜形成用組合物II-8顯示出液晶性。

為了使用所獲得之異向性色素膜形成用組合物II-8，並利用上述方法來確定二色比，製作異向性色素膜II-8，確定異向性色素膜II-8之二色比。

異向性色素膜II-8之最大二色比於40℃、波長645 nm下為38.0。聚合性液晶化合物(I-1)中之色素(V-4)、色素(V-5)之最大吸收波長分別為495 nm、530 nm。

【0504】 [實施例II-6]

向718.2份環戊酮中，添加243.6份聚合性液晶化合物(I-1)、3.95份色素(IV-2)、5.58份IRGACURE(註冊商標)369(BASF公司製品)、3.62份BYK-361N(BYK-Chemie公司製造)，並於80℃下加熱攪拌後，使用具備針筒過濾器(Membrane Solutions公司製造，PTFE13045，口徑0.45 μm)之針筒進行過濾，藉此獲得異向性色素膜用組合物II-9。

藉由旋轉塗佈法，使異向性色素膜用組合物II-9成膜於玻璃板上形成聚醯亞胺配向膜(LX1400，Hitachi Chemical DuPont Microsystems Ltd.製造，藉由摩擦法形成配向膜)所得之基板，並於120℃下加熱乾燥2分鐘後，冷卻至液晶相，以曝光量500 mj/cm²(365 nm基準)進行聚合，獲得異向性色素膜II-9。

若將所獲得之異向性色素膜II-9遮蓋在市售之偏光板之上並使之旋轉，則發生明暗變化，從而可確認顯示出可作為偏光膜而利用之良好性能。

【0505】 使用特定形態，對本發明進行了詳細說明，但對於業者而言顯而易見的是，可不脫離本發明之意圖及範圍而進行各種變更。

本申請基於2020年8月3日提出申請之日本專利申請2020-131810及2020年8月3日提出申請之日本專利申請2020-131811，且該等申請之全部內容藉由引用而援用於本申請中。

[產業上之可利用性]

【0506】 根據本發明之異向性色素膜形成用組合物，藉由使用特定色素及聚合性液晶化合物，可實現優異之塗膜性、及因較高之二色性而優異之光學性能。

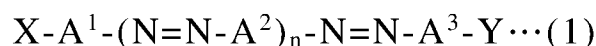
本發明之異向性色素膜係使用本發明之異向性色素膜形成用組合物而形成者，因此可實現優異之光學性能。

本發明之光學元件包含本發明之異向性色素膜，因此可實現優異之光學性能。

【發明申請專利範圍】

【請求項1】

一種化合物，其係以下述式(1)或下述式(11)表示；



(式(1)中，

-A¹-及-A²-分別獨立地表示可具有取代基、包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環之2價基、可具有取代基之苯并異噻唑環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

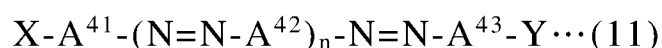
-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A¹-及-A²-不會均為可具有取代基之芳香族烴環之2價基)



(式(11)中，

-A⁴²-之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基，

-A⁴¹-及-A⁴³-分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3。

於n為2或3之情形時，複數個-A⁴²-彼此可相同亦可不同)。

【請求項2】

如請求項1之化合物，其中於上述式(1)中，包含1個以上S原子且所含之碳原子以外之原子不相鄰之芳香族雜環為噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環或苯并噻唑環。

【請求項3】

如請求項1或2之化合物，其中於上述式(1)中， $-A^3-$ 為可具有取代基之伸苯基。

【請求項4】

如請求項1至3中任一項之化合物，其中於上述式(1)中， $-A^2-$ 為可具有取代基之伸苯基。

【請求項5】

如請求項1至4中任一項之化合物，其中於上述式(1)中， $-Y$ 為 $-O-R^x$ 或 $-N(-R^y)-R^x$ ；

其中， $-R^x$ 及 $-R^y$ 分別獨立地表示可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷基或構成環之原子數為5～14之芳基，

$-R^x$ 及 $-R^y$ 亦可一體地形成環，

該可具有分支之碳數1～15之烷基及該構成環之原子數為5～14之芳基亦可分別具有取代基；

該可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷基或 $-R^x$ 及 $-R^y$ 一體地形成之環所包含之一個或一個以上亞甲基可為由 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-NH-$ 、 $-N(R^z)-$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-C(=O)-O-$ 、 $-C(=O)-NH-$ 、 $-CHF-$ 、 $-CF_2-$ 、 $-CHCl-$ 、 $-CCl_2-$ 、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基或縮水甘油氧基取

代之結構，

R^z 表示碳數1~6之直鏈狀或分支狀烷基。

【請求項6】

如請求項1至5中任一項之化合物，其中於上述式(11)中，於n為2或3之情形時， $-A^{42}-$ 分別獨立地表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基、或可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基。

【請求項7】

如請求項1至6中任一項之化合物，其中於上述式(11)中， $-A^{42}-$ 之芳香族雜環為噻吩環、苯并噻吩環、噻唑環、異噻唑環、1,3,4-噻二唑環、噻吩并吡咯環、噻吩并噻吩環、呋喃并噻唑環、噻吩并呋喃環、噻吩并噻唑環、苯并異噻唑環或苯并噻唑環。

【請求項8】

如請求項1至7中任一項之化合物，其中於上述式(11)中， $-A^{43}-$ 為可具有取代基之伸苯基。

【請求項9】

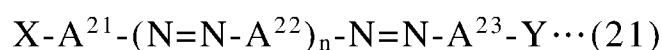
如請求項1至8中任一項之化合物，其中於上述式(11)中， $-A^{41}-$ 為可具有取代基之伸苯基。

【請求項10】

一種異向性色素膜形成用組合物，其包含如請求項1至9中任一項之化合物及聚合性液晶化合物。

【請求項11】

一種異向性色素膜形成用組合物，其包含下述式(21)所表示之化合物及聚合性液晶化合物；



(式(21)中，

-A²¹-及-A²²-分別獨立地表示可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基、或可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-A²³-表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基，

-X表示具有分支之碳數3以上之烷基、烷氧基或烷基硫基，

-Y表示1價有機基，

n表示1、2或3；

於n為2或3之情形時，複數個-A²²-彼此可相同亦可不同；

其中，-A²¹-及-A²²-中之至少一者為可具有取代基且包含1個以上S原子之芳香族雜環之2價基)。

【請求項12】

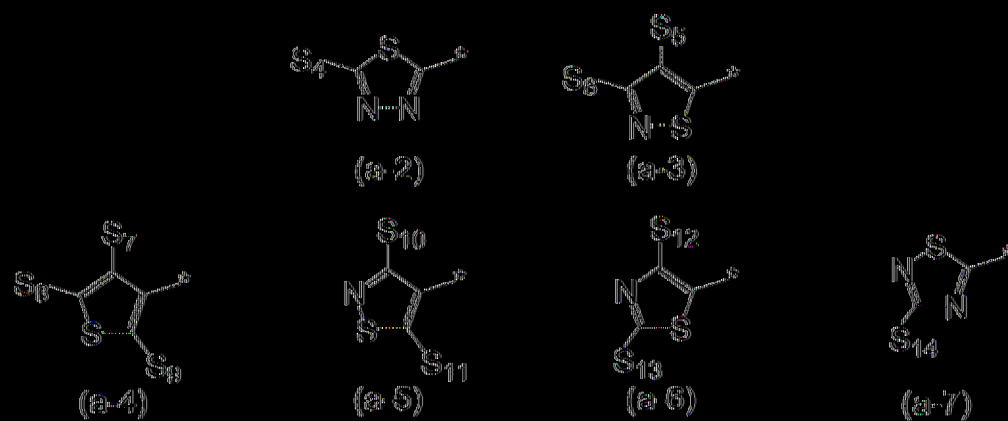
一種異向性色素膜形成用組合物，其包含下述式(31)所表示之化合物及聚合性液晶化合物；



(式(31)中，

-A³¹表示可具有取代基之下述式(a-2)～(a-7)之任一者所表示之基(於下述式(a-2)～(a-7)中，*表示-N側之鍵，S₄～S₁₄表示具有取代基之情形時之取代位置)；

[化1]



·A³²表示可具有取代基之芳香族烴環之2價基或可具有取代基之芳香族雜環之2價基，

·A³³表示可具有取代基之仲苯基，

·Y表示1價有機基，

m表示1、2或3；

於m為2或3之情形時，複數個·A³²彼此可相同亦可不同。

〔請求項13〕

如請求項12之異向性色素膜形成用組合物，其中於上述式(31)中，·A³²為可具有取代基之芳香族烴環之2價基。

〔請求項14〕

如請求項12或13之異向性色素膜形成用組合物，其中於上述式(3)中，·Y為·O·R^x或·N(·R^y)·R^x；

其中，·R^x及·R^y分別獨立地表示可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷基或構成環之原子數為5～14之芳基，

·R^x及·R^y亦可一體地形成環，

該可具有分支之碳數1～15之烷基及該構成環之原子數為5～14之芳基亦可分別具有取代基，

該可具有分支之碳數1～15之烷基、構成環之原子數為5～14之環烷

基或- R^x 及- R^y 一體地形成之環所包含之一個或一個以上亞甲基可為由-O-、-S-、-NH-、-N(R^z)-、-C(=O)-、-C(=O)-O-、-C(=O)-NH-、-CHF-、-CF₂-、-CHCl-、-CCl₂-、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯氧基或縮水甘油氧基取代之結構，

R^z 表示碳數1~6之直鏈狀或分支狀烷基。

【請求項15】

如請求項10至14中任一項之異向性色素膜形成用組合物，其中上述聚合性液晶化合物所具有之環結構之數量(r_{n1})與上述式(1)、上述式(11)、上述式(21)或上述式(31)所表示之化合物所具有之環結構之數量(r_{n2})的比(r_{n1}/r_{n2})為0.7~1.5。

【請求項16】

如請求項10至15中任一項之異向性色素膜形成用組合物，其中上述聚合性液晶化合物為具有碳-碳三鍵之化合物。

【請求項17】

如請求項10至16中任一項之異向性色素膜用組合物，其進而包含如下色素，該色素於350 nm~800 nm之波長區域之吸收曲線中顯示出最大値之波長較上述式(1)、上述式(11)、上述式(21)或上述式(31)所表示之化合物於350 nm~800 nm之波長區域之吸收曲線中顯示出最大値之波長更短。

【請求項18】

一種異向性色素膜，其係使用如請求項10至17中任一項之異向性色素膜形成用組合物而形成。

【請求項19】

一種光學元件，其包含如請求項18之異向性色素膜。

【請求項20】

一種異向性色素膜之製造方法，其具有將如請求項10至17中任一項之異向性色素膜形成用組合物塗佈於基板之步驟。