(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(51) 。Int. Cl. [7]
C07C 69/92

(11) 공개번호 특2001-0071986
(43) 공개일자 2001년07월31일

(21) 출원번호 10-2001-7000827
(22) 출원일자 2001년01월19일
번역문 제출일자 2001년01월19일
(86) 국제출원번호 PCT/IB1999/01294
(86) 국제출원출원일자 1999년07월19일
(87) 국제공개번호 WO 2000/05189
(87) 국제공개일자 2000년02월03일

(81) 지정국 국내특허 : 알바니아, 아르메니아, 오스트리아, 오스트레일리아, 아제르바이잔, 보스니아-헤르체고비나, 바베이도스, 불가리아, 브라질, 벨라루스, 캐나다, 스위스, 중국, 쿠바, 체코, 독일, 덴마크, 에스토니아, 스페인, 핀랜드, 영국, 그루지야, 헝가리, 이스라엘, 아이슬란드, 일본, 케냐, 키르기즈, 북한, 대한민국, 카자흐스탄, 세인트루시아, 스리랑카, 라이베리아, 레소토, 리투아니아, 룩셈부르크, 라트비아, 몰도바, 마다가스카르, 마케도니아, 몽고, 말라위, 멕시코, 노르웨이, 뉴질랜드, 슬로베니아, 슬로바키아, 타지키스탄, 투르크메니스탄, 터어키, 트리니다드토바고, 우크라이나, 우간다, 미국, 우즈베키스탄, 베트남, 폴란드, 포르투칼, 루마니아, 러시아, 수단, 스웨덴, 싱가포르, 아랍에미리트, 남아프리카, 그레나다, 가나, 감비아, 크로아티아, 인도네시아, 인도, 유고슬라비아, 짐바브웨, 시에라리온,
AP ARIPO특허: 케냐, 레소토, 말라위, 수단, 스와질랜드, 우간다, 시에라리온, 가나, 감비아, 짐바브웨,
EA 유라시아특허: 아르메니아, 아제르바이잔, 벨라루스, 키르기즈, 카자흐스탄, 몰도바, 러시아, 타지키스탄, 투르크메니스탄,
EP 유럽특허: 오스트리아, 벨기에, 스위스, 독일, 덴마크, 스페인, 프랑스, 영국, 그리스, 아일랜드, 이탈리아, 룩셈부르크, 모나코, 네덜란드, 포르투칼, 스웨덴, 핀랜드, 사이프러스,
OA OAPI특허: 부르키나파소, 베넹, 중앙아프리카, 콩고, 코트디브와르, 카메룬, 가봉, 기네, 말리, 모리타니, 니제르, 세네갈, 차드, 토고, 기네비쏘,

(30) 우선권주장 1564/98 1998년07월24일 스위스(CH)

(71) 출원인 롤리크 아게
보러 롤란드
스위스 체하-6301 쭈크 참머슈트라쎄 50

(72) 발명자 올레마허안겔라
독일데-79650쇼프하임-빅스레바커11
베네케카르스텐
독일데-79576바일암라인비르트하우엔9
슈미트클라우스
독일데-79541뢰르라흐가르텐슈트라쎄16베

(74) 대리인 이병호

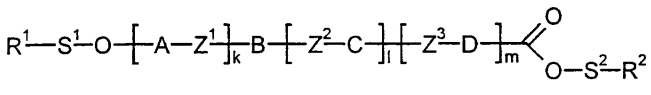
심사청구 : 없음

(54) 가교결합 가능한 액정 화합물

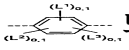
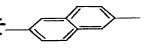
요약

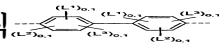
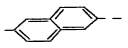
본 발명은 화학식 I의 화합물에 관한 것이다.

화학식 I



위의 화학식 I에서,

A, C 및 D는 화학식  또는  의 라디칼이고,

B는 화학식  또는  의 라디칼이며(여기서, 치환체 중의 적어도 하나는 수소가 아니고, 페닐렌 환 중의 적어도 하나는 인접하지 않은 1개 또는 2개의 CH 그룹이 질소원자로 대체된 1,4-페닐렌 환으로 대체될 수 있다),

k, l 및 m은 0 또는 1이고,

k+l+m은 1 또는 2이어야 하며,

Z^1, Z^2 및 Z^3은 각각 독립적으로 단일결합, -CH_2CH_2-, -CH_2O-, -OCH_2-, -COO-, -OOC-, -CH="CH-CO O-," -OOC-CH="CH-," -$(CH_2)_4$-, -$O(CH_2)_3$-, -$(CH_2)_3O$- 또는 -C≡C-이고,

R^1 및 R^2는 가교결합 가능한 그룹이며,

S^1 및 S^2는 스페이서 단위이다.

색인어
가교결합성, 액정, 광학 이방성, 융점, 투명점

명세서

본 발명은 가교결합할 수 있는, 특히 광가교결합할 수 있는 이반응성(bi-reactive) 액정 화합물, 이를 포함하는 액정 혼합물 및 가교결합 상태에서 광학 부재로서의 이의 용도에 관한 것이다.

적당량의 광개시제가 제공되어 있는 광가교결합 가능한 액정은 기판 상에서 배향되거나 적당한 배향층에 의해 셀 속에

서 배향되거나 역장(force field) 속에서 배향될 수 있으며, 이어서 적당한 파장의 빛으로 조사함으로써 그 상태로 가교결합될 수 있다. 생성된 구조는 고온에서도 유지된다. 따라서, 광학 부재, 예를 들면, 도파관, 광학 회절격자, 광학 필터, 광학 지연판, 압전 전지 및 비선형 광학(NLO) 특성을 갖는 전지 등을 제조할 수 있다. 이러한 광학 부재는, 예를 들면, 진동수 배가(SHG)를 위해 또는 색 필터에 사용될 수도 있다.

복굴절성, 굴절율, 투명도 등과 같은 추가의 특성들이 응용 분야에 따라 상이한 요건들을 만족시켜야 한다. 예를 들면, 광학 필터용 재료는 낮은 분산도 n="f(λ)와" 함께 높은 복굴절성(△n)을 가져야 한다.

중합 가능한, 즉 가교결합 가능한 광학 부재용 액정의 일반적인 효능에 더하여, 이들 액정 물질은 광학 데이터 전송용 유리 섬유를 피복시키기에 적합하다. 이러한 물질을 사용하면 섬유의 종축에서의 탄성 모듈러스가 증가하고 열팽창 계수가 감소하며 미세변형 손실률이 저하된다. 이에 따라 기계적 안정성이 증가된다. 또한, 가교결합 가능한 액정은 열을 특정 방향으로 유동시킬 수 있는 이방성 열 전도율을 나타낸다.

가교결합 가능한 액정은 우수한 화학적 안정성과 열 안정성, 통상의 용매에서의 우수한 용해도 및 전기장과 전자기 방사선에 대한 우수한 안정성을 가져야 한다. 이들은 약 25 내지 약 +100℃, 특히 약 25 내지 약 +80℃의 온도에서 적합한 메소상을 나타낸다. 액정은 일반적으로 몇가지 성분의 혼합물 형태로 사용되기 때문에, 이들 성분이 서로 우수한 혼화성을 나타내는 것도 중요하다.

광학 지연판, 편광 간섭 필터(예를 들면, Solc 필터) 등에 사용하기 위해서는, 광학 이방성(△n="｜$n_e - n_o$｜)이 가능한 한 크고 흡수 파장은 가능한 한 짧아야 한다. 이러한 방법으로, 충분히 얇은 LCP(Liquid Crystalline Polymer; 액정 중합체) 필름을 사용하여 목적하는 광학 지연을 수득할 수 있다. 이는 콜레스테릭 필터에도 동일하게 적용되는데, 그 이유는 선택적 반사의 밴드 폭이 광학 이방성(△n)에 비례하기 때문이다.

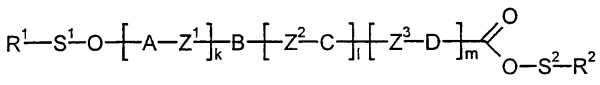
통상의 광화학적 올리고머성 또는 중합체성 액정은 일반적으로 융점과 투명점은 높고 광학 이방성은 중간 정도이다. 첫째, 융점이 높을 경우에는 가공 동안 융점을 초과하자마자 너무 빨리 자발적 열중합이 일어나는 단점이 있다. 이러한 자발적 중합은 도메인 형성을 야기시켜 생성된 가교결합층의 광학 특성과 열 특성을 상당히 손상시킨다. 둘째, 융점과 투명점 간의 온도차가 작을 경우에는 질서도가 낮아지고 이에 따라 광학 이방성도 낮아진다. 몇가지 성분을 포함하는 착물 혼합물을 제조함으로써 융점을 낮출 수 있으며, 이 경우 통상의 중합 가능한 액정이 결정화되는 위험이 수반되기는 하지만 저온에서도 가공을 수행할 수 있다. 광화학적 올리고머성 또는 중합체성 화합물이 예를 들면, EP-A 제0 331 233호에 기재되어 있다.

따라서, 본 발명의 목적은, 자체로 또는 혼합된 상태에서 광학 이방성은 가능한 한 크고 흡수 파장은 가능한 한 짧은, 특히 광학 부재에 사용하기 위한, 올리고머성 또는 중합체성, 즉 가교결합 가능한 화합물을 제공하는 것이다. 이들은 또한 가공 동안 질서도가 가능한 한 높고 이에 따라 광학 이방성도 높은 LCP 필름이 융점을 초과하자마자 수득되도록 가능한 한 융점은 낮고 투명점은 높아야 한다. 추가로, 화합물이 도메인을 형성하지 않으면서 배향 및 구조화될 수 있어야 하고, 또한 이들이 가교결합된 상태에서 탁월한 열 안정성과 장기간 안정성을 나타내야 한다. 통상의 광화학적 올리고머성 또는 중합체성 액정은 일반적으로 중간 정도의 광학 이방성을 가질 뿐이다.

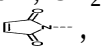
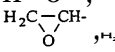
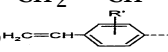
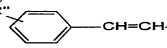
본 발명은 단독 성분으로서 또는 액정 혼합물 성분으로서 상기한 용도에 특히 적합한 화합물을 제공한다.

본 발명은 화학식 I의 화합물에 관한 것이다.

화학식 I

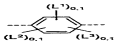
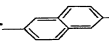


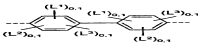
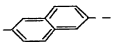
위의 화학식 I에서,

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 CH_2="CH-," CH_2="CH-COO-," CH_2="C(CH_3)-COO-, CH_2="C(Cl)-COO-," CH_2="C(Ph)-COO-," CH_2="CH-COO-Ph-," CH_2="CH-CO-NH-," CH_2="C(CH_3)-CONH-, CH_2="C(Cl)-CONH-," CH_2="C(Ph)-CONH-," CH_2="C(COOR')-CH_2-COO-, (R'OOC)-CH_2-C="CH_2-COO-, CH_2="CH-O-," CH_2="CH-OOC-," CH="CH-Ph-," 시스 또는 트랜스-HOO-CR'="CR'-COO-," 실록산,  ,  ,  또는  와 같은 가교결합 가능한 그룹(여기서, (Ph)는 페닐이고, Ph는 페닐렌이며, R'는 저급 알킬이고, R" 는 메틸, 메톡시, 시아노 또는 할로겐이다)이고,

S^1 및 S^2는 각각 독립적으로 불소에 의해 임의로 일치환 또는 다치환될 수 있는 화학식 $-(CH_2)_r-$ 또는 $-((CH_2)_2-O)_r-$의 직쇄 또는 측쇄 알킬렌 그룹 또는 불소에 의해 임의로 일치환 또는 다치환될 수 있는 화학식 $-(CH_2)_r-Y-(CH_2)_s-$의 쇄 등의 스페이서 단위[여기서, Y는 단일 결합이거나, -O-, -COO-, -OOC-, $-NR^3-$, $-NR^3-CO-$, $-CO-NR^3-$, $-NR^3-COO-$, $-OCO-NR^3-$, $-NR^3-CO-NR^3-$, -O-OC-O-, -CH="CH-," -C≡C-(여기서, R^3은 수소 또는 저급 알킬이다) 또는 $-(Si[(CH_3)_2]O)_u-$, $-O-(CH_2)_t(Si[(CH_3)_2]O)_uSi[(CH_3)_2](CH_2)_tO-$ 또는 $-NH(CH_2)_t(Si[(CH_3)_2]O)_uSi[(CH_3)_2](CH_2)_tNH-$(여기서, t는 1 내지 12의 정수이고, u는 1 내지 16의 정수이며, 단 2t+u는 20 이하이다)와 같은 관능성 결합 그룹이고, r 및 s는 각각 0 내지 20의 정수이며, 단 r+s는 2 내지 20이다]이며, 단

R^1-S^1 및 R^2-S^2는 -O-O- 또는 -N-O- 그룹을 함유하지 않고,

A, C 및 D는 화학식  또는  의 라디칼이며,

B는 화학식  또는  의 라디칼(여기서, A, B, C 또는 D의 페닐렌 환 중의 적어도 하나는 인접하지 않은 1개 또는 2개의 CH 그룹이 질소원자로 대체된 1,4-페닐렌 환으로 대체될 수 있고, L^1, L^2 및 L^3은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_2-C_{20} 알케닐옥시, C_1-C_{20} 알콕시카보닐, 포밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시 또는 니트로이며, 단 A, B, C 또는 D의 페닐렌 환 중의 적어도 하나에서, 상기한 치환체 중의 하나는 수소가 아니다)이고,

k, l 및 m은 0 또는 1이며,

k+l+m은 1 또는 2이어야 하고,

Z^1, Z^2 및 Z^3은 각각 독립적으로 단일 결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, -COO-, -OOC-, -CH="CH-COO-," -OOC-CH="CH-," $-(CH_2)_4-$, $-O(CH_2)_3-$, $-(CH_2)_3O-$ 또는 -C≡C-이다.

본 발명의 화학식에서, 절선[-- 또는 —]은 단일 결합에 의한 인접 원소와의 결합을 나타내는 데 사용된다.

필요에 따라, 위에서 사용한 용어를 아래에 설명할 것이다.

본원에서 " 할로겐" 은 불소, 염소, 브롬, 요오드, 특히 불소와 염소를 포함한다.

본원에서 " 저급 알킬" 은 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 이소프로필, 이소부틸 및 3급 부틸과 같은 탄소수 1 내지 4의 직쇄 또는 측쇄 알킬 그룹, 특히 메틸, 에틸, 프로필 또는 부틸을 나타낸다.

본원에서 C_1 - C_{20} 알킬, C_1 - C_{20} 알콕시, C_1 - C_{20} 알콕시카보닐, C_1 - C_{20} 알킬카보닐, C_1 - C_{20} 알킬카보닐옥시라는 용어는 탄소수 20 이하의 직쇄 또는 측쇄 포화 탄화수소 라디칼, 예를 들면, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 노닐, 데실, 운데실, 도데실, 메틸옥시, 에틸옥시, n-프로필옥시, 이소프로필옥시, 부틸옥시, 펜틸옥시, 헥실옥시, 헵틸옥시, 옥틸옥시, 노닐옥시, 데실옥시, 운데실옥시, 도데실옥시, 메톡시카보닐, 에톡시카보닐, 프로폭시카보닐, 부톡시카보닐, 펜틸옥시카보닐, 헥실옥시카보닐, 옥틸옥시카보닐, 노닐옥시카보닐, 데실옥시카보닐, 운데실옥시카보닐, 도데실옥시카보닐, 메틸카보닐, 에틸카보닐, 프로필카보닐, 부틸카보닐, 펜틸카보닐, 헥실카보닐, 옥틸카보닐, 노닐카보닐, 데실카보닐, 운데실카보닐, 도데실카보닐, 메틸카보닐옥시, 에틸카보닐옥시, 프로필카보닐옥시, 부틸카보닐옥시, 펜틸카보닐옥시, 헥실카보닐옥시, 옥틸카보닐옥시, 노닐카보닐옥시, 데실카보닐옥시, 운데실카보닐옥시, 도데실카보닐옥시 등을 포함한다.

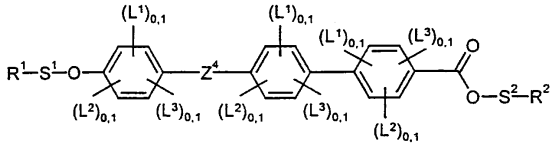
본원에서 C_2 - C_{20} 알케닐 및 C_2 - C_{20} 알케닐옥시라는 용어는 탄소수 2 내지 20의 알케닐 그룹, 예를 들면, 2-알케닐, 3-알케닐, 4-알케닐 및 말단 이중결합을 갖는 알케닐, 예를 들면, 알릴, 3-부테닐, 4-펜테닐, 5-헥세닐, 6-헵테닐, 7-옥테닐, 8-노네닐, 9-데세닐, 10-운데세닐, 알릴옥시, 3-부테닐옥시, 4-펜테닐옥시, 5-헥세닐옥시, 6-헵테닐옥시, 7-옥테닐옥시, 8-노네닐옥시, 9-데세닐옥시, 10-운데세닐옥시 등을 포함한다.

L^1, L^2 및 L^3 중의 어떠한 것이 C_2 - C_{20} 알케닐옥시인 경우, 이는 이중결합을 갖는 탄소원자가 산소원자에 직접 결합되어 있는, 즉 1-위치에 이중결합을 갖는 중합 가능한 그룹이거나 이중결합을 갖는 탄소원자가 산소원자에 직접 결합되지 않은 C_3 - C_{20} 알케닐옥시 그룹일 수 있다.

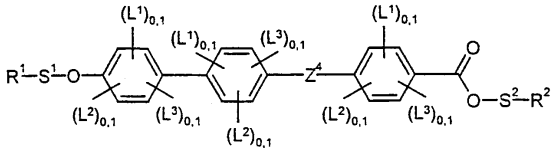
이러한 화합물은 놀라울 정도로 높은 광학 이방성(△n)을 갖는다. 또한, 이들은 적절한 혼합물 중의 성분으로서 배향층에 우수한 배향능을 제공하며, 이는 우수한 콘트라스트를 위해 중요하다.

바람직한 화학식 I의 화합물은 화학식 I-A 내지 I-G의 화합물이다.

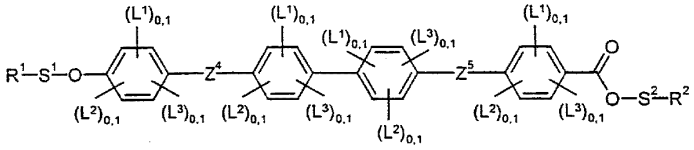
화학식 I-A



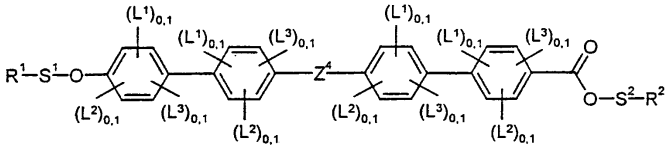
화학식 I-B



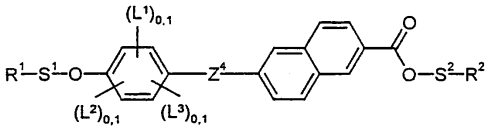
화학식 I-C



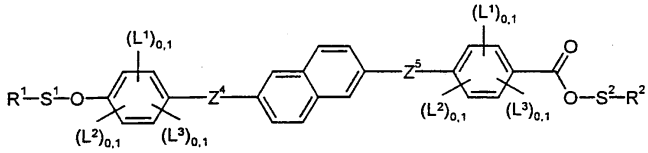
화학식 I-D



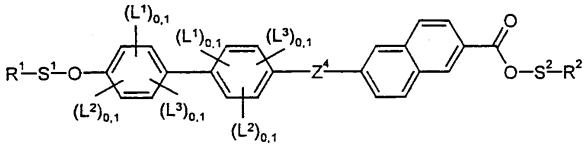
화학식 I-E



화학식 I-F



화학식 I-G



위의 화학식 I-A 내지 I-G에서,

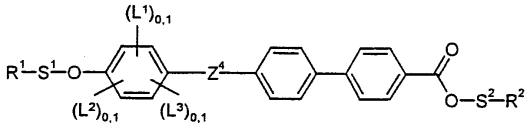
Z^4 및 Z^5는 각각 독립적으로 단일결합, -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO-이고,

R^1, R^2, S^1, S^2, L^1, L^2 및 L^3은 화학식 I에서 정의한 바와 같다.

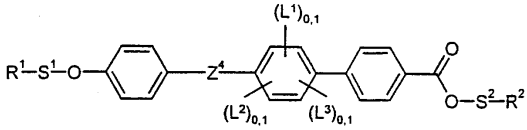
화학식 I-A, I-B, I-D, I-F 및 I-G의 화합물이 특히 바람직하다.

화학식 I-A의 화합물 중에서, 화학식 I-A-1 및 I-A-2의 화합물이 특히 바람직하다.

화학식 I-A-1



화학식 I-A-2



위의 화학식 I-A-1 및 I-A-2에서,

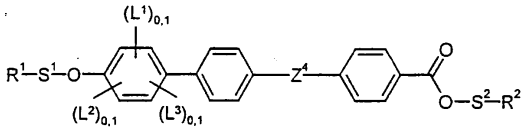
L^1, L^2 및 L^3은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시 또는 C_2-C_{20} 알케닐옥시(여기서, 치환체 중의 적어도 하나는 수소가 아니어야 한다)이고,

Z^4는 -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO-," 특히 -COO- 또는 -CH="CH-COO-," 보다 특히 -COO-이며,

R^1, R^2, S^1 및 S^2는 화학식 I에서 정의한 바와 같다.

화학식 I-B의 화합물 중에서, 화학식 I-B-1의 화합물이 특히 바람직하다.

화학식 I-B-1

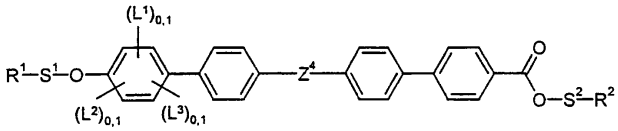


위의 화학식 I-B-1에서,

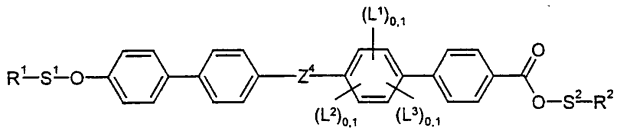
R^1, R^2, S^1, S^2, Z^4, L^1, L^2 및 L^3은 화학식 I-A-1에서 정의한 바와 같다.

화학식 I-D의 화합물 중에서, 화학식 I-D-1 및 I-D-2의 화합물이 특히 바람직하다.

화학식 I-D-1



화학식 I-D-2

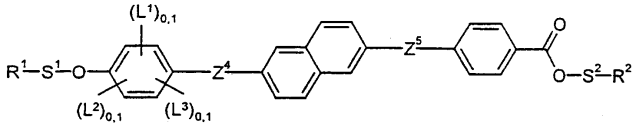


위의 화학식 I-D-1 및 I-D-2에서,

R^1, R^2, Z^4, L^1, L^2 및 L^3은 화학식 I-A-1에서 정의한 바와 같다.

화학식 I-F의 화합물 중에서, 화학식 I-F-1의 화합물이 특히 바람직하다.

화학식 I-F-1



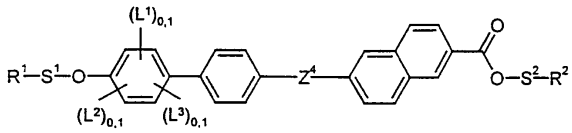
위의 화학식 I-F-1에서,

Z^5는 단일결합, -COO- 또는 -CH="CH-COO-," 특히 단일결합이고,

R^1, R^2, Z^4, L^1, L^2 및 L^3은 화학식 I-A-1에서 정의한 바와 같다.

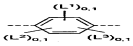
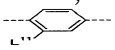
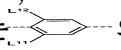
화학식 I-G의 화합물 중에서, 화학식 I-G-1의 화합물이 특히 바람직하다.

화학식 I-G-1



위의 화학식 I-G-1에서,

R^1, R^2, Z^4, L^1, L^2 및 L^3은 화학식 I-A-1에서 정의한 바와 같다.

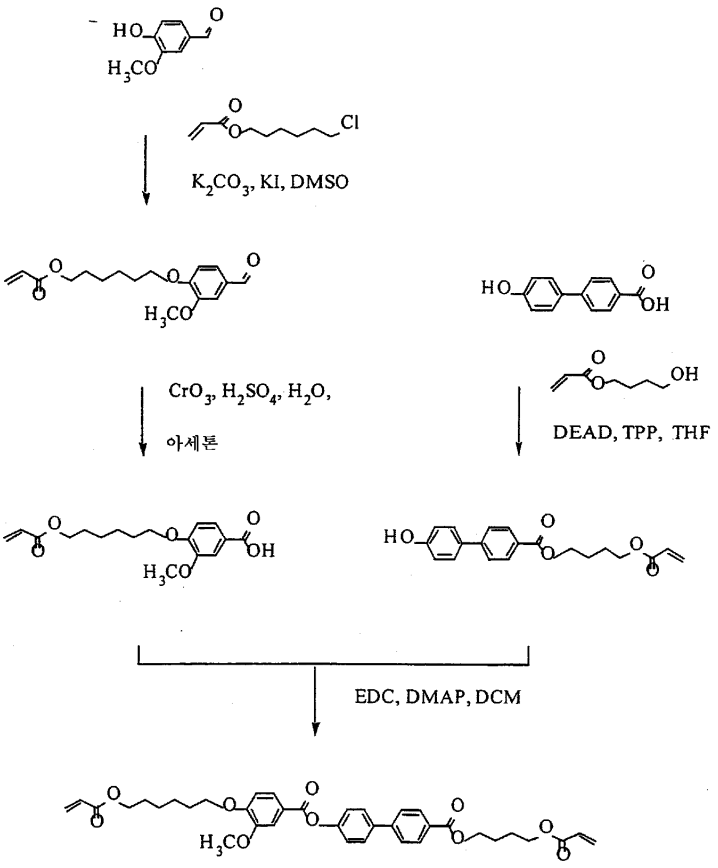
보다 특히 바람직한 화학식 I-A-1, I-A-2, I-B-1, I-D-1, I-D-2, I-F-1 및 I-G-1의 화합물은 화학식  의 그룹이 화학식  또는  의 라디칼(여기서, L^{11} 및 L^{12}는 각각 독립적으로 C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시 또는 C_2-C_{20} 알케닐옥시, 특히 C_1-C_{12} 알콕시이다)인 화합물이다.

본 발명에 따르는 화학식 I의 화합물은 합성에 의해 수득하기가 매우 용이하다. 이들은 예를 들면, 그중에서도 공지된 방법으로 다음의 반응식에 제시된 방법과 유사하게 제조할 수 있다.

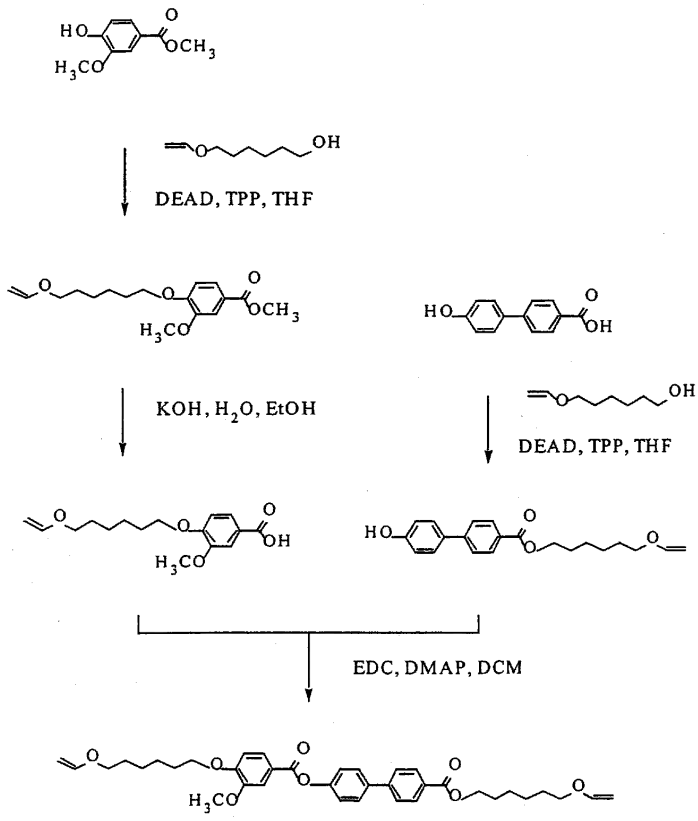
다음의 약자가 사용된다:

DCM, 디클로로메탄; DME, 디메톡시에탄; DMSO, 디메틸 설폭사이드; THF, 테트라하이드로푸란; EDC, N-(3-디메틸아미노프로필)-N'-에틸카보디이미드 하이드로클로라이드; DEAD, 아조디카복실산 디에틸 에스테르(디에틸 아조디카복실레이트); DMAP, 4-(디메틸아미노)피리딘; TPP, 트리페닐포스핀.

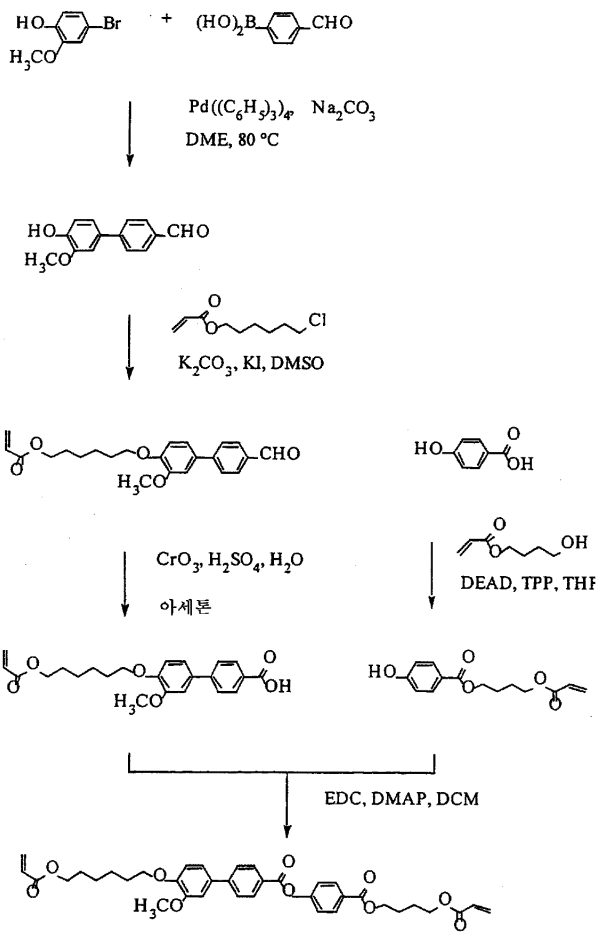
반응식 1


HO
O
H3CO
Cl
K2CO3, KI, DMSO
CrO3, H2SO4, H2O,
아세톤
OH
DEAD, TPP, THF
EDC, DMAP, DCM

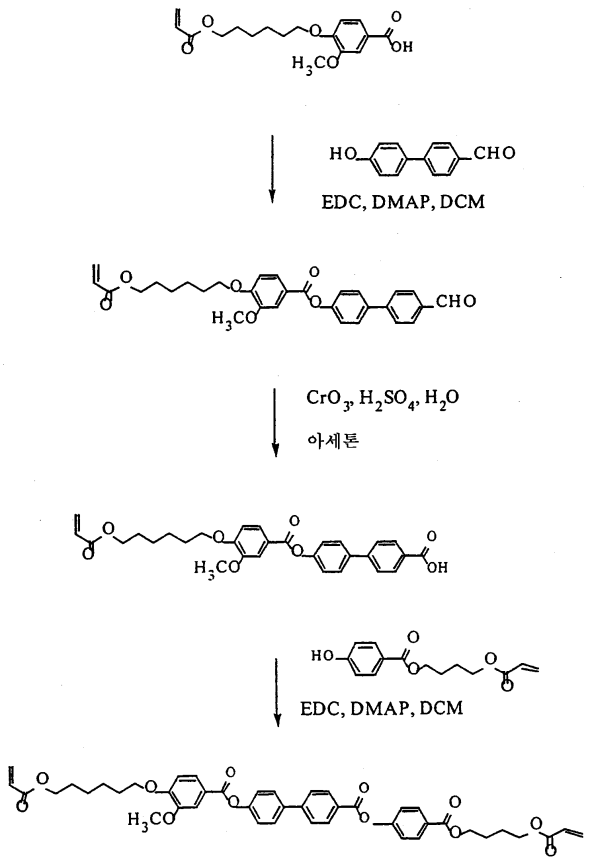
반응식 2


HO
OCH3
H3CO
OH
DEAD, TPP, THF
KOH, H2O, EtOH
EDC, DMAP, DCM

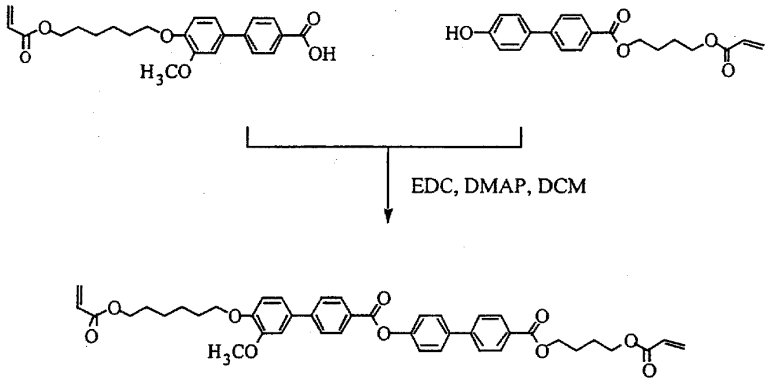
반응식 3


Pd((C6H5)3)4, Na2CO3
DME, 80 °C
K2CO3, KI, DMSO
CrO3, H2SO4, H2O
아세톤
DEAD, TPP, THF
EDC, DMAP, DCM

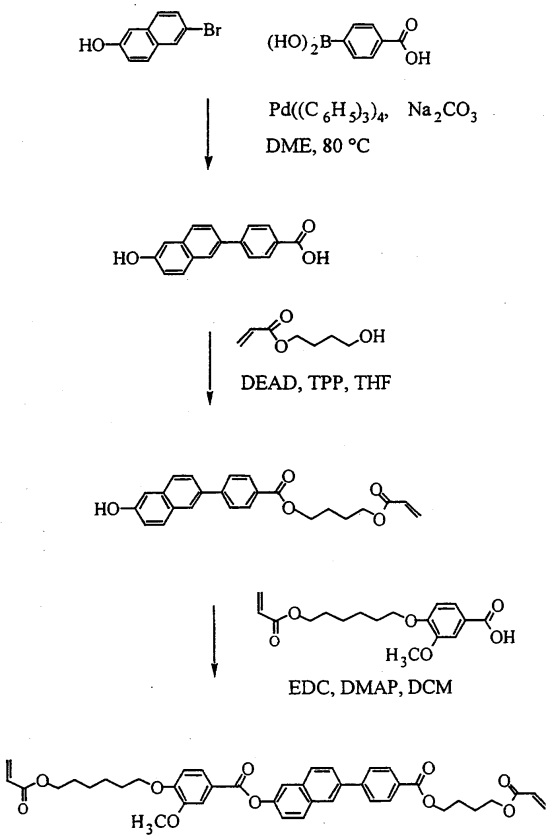
반응식 4


EDC, DMAP, DCM
CrO3, H2SO4, H2O
아세톤
EDC, DMAP, DCM

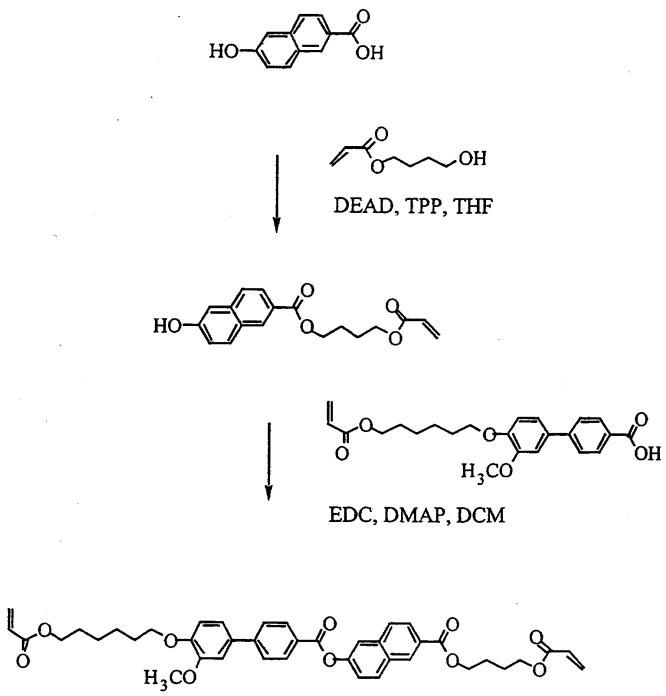
반응식 5



반응식 6



반응식 7



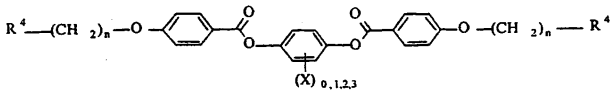
화학식 I의 화합물은 순수 화합물로서 사용되거나 순수 화합물 간의 혼합물 및/또는 순수 화합물과 다른 액정 성분들과의 혼합물의 형태로 사용될 수 있다.

본 발명에 따르는 액정 혼합물은 2가지 이상의 성분을 포함하며, 이중 하나 이상의 성분이 화학식 I의 화합물이다. 제2성분 및 추가의 임의 성분은 화학식 I의 화합물이거나, 하나 이상의 가교결합 가능한 그룹을 포함할 수 있는 그외의 공지된 액정 화합물일 수 있다. 혼합물은 또한 하나 이상의 키랄 성분 또는 등방성 도핑제를 포함할 수 있다.

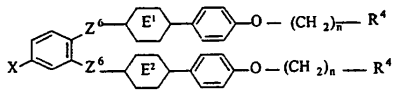
화학식 I의 화합물의 우수한 용해도와 이들 간의 우수한 혼화성으로 인해, 본 발명에 따르는 혼합물 중의 화학식 I의 화합물의 비율은 99중량%까지 높을 수 있다.

본 발명에 따르는 혼합물이 하나 이상의 화학식 I의 화합물 이외에 화학식 II 내지 IX의 화합물로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.

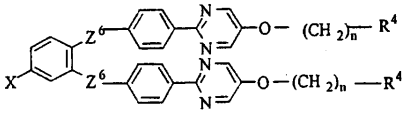
화학식 II



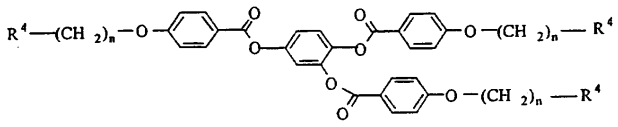
화학식 III



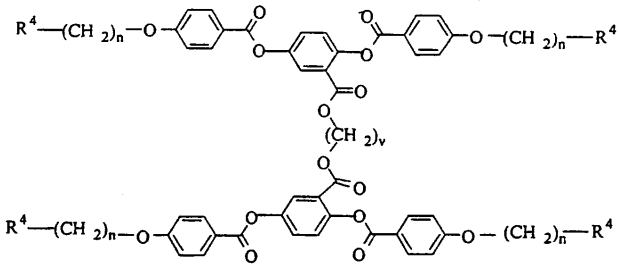
화학식 IV



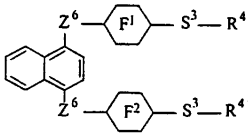
화학식 V



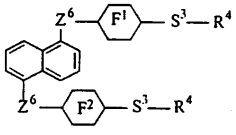
화학식 VI



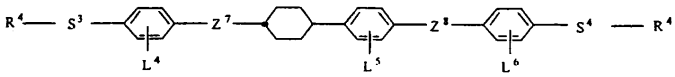
화학식 VII



화학식 VIII



화학식 IX



위의 화학식 II 내지 IX에서,

R^4 는 CH_2 ="CH - ," CH_2 ="CH - O - ," CH_2 ="CH - COO - ," CH_2 ="C(CH_3) - COO - , CH_2 ="C(Cl) - COO - " 또는 화학식 $H_2C\underset{O}{\diagdown\!\!\diagup}CH-$ 의 라디칼과 같은 중합 가능한 그룹이고,

S^3 및 S^4 는 각각 독립적으로 - $(CH_2)_n$ - 또는 - $O(CH_2)_n$ - 이며,

E^1 및 E^2 는 각각 독립적으로 1,4 - 페닐렌, 트랜스 - 1,4 - 사이클로헥실렌, 피리딘 - 2,5 - 디일, 피리미딘 - 2,5 - 디일 또는 트랜스 - 1,4 - 사이클로헥실렌 - 1,4 - 페닐렌이고,

F^1 및 F^2 는 각각 독립적으로 1,4 - 페닐렌 또는 2 - 또는 3 - 플루오로 - 1,4 - 페닐렌이며,

L^4, L^5 및 L^6은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_1-C_{20} 알콕시카보닐, 포밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시, 할로겐, 시아노 또는 니트로이고,

Z^6은 -COO-, -OOC-, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-O(CH_2)_3-$, $-OOC(CH_2)_2-$ 또는 $-COO(CH_2)_3-$이며,

Z^7은 단일결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, -COO-, -OOC-, $-(CH_2)_4-$, $-O(CH_2)_3-$, $-(CH_2)_3O-$ 또는 -C≡C-이고,

Z^8은 단일결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, -COO-, -OOC- 또는 -C≡C-이며,

X는 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_1-C_{20} 알콕시카보닐, 포밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시, 불소, 염소, 브롬, 시아노 또는 니트로이며,

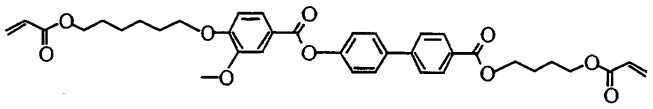
n은 2 내지 20의 정수이고,

v는 2 내지 12의 정수이다.

화학식 I의 화합물과 이들 화합물을 포함하는 액정 혼합물의 제조방법이 하기 실시예에 추가로 기재되어 있다. 실시예에서, C는 결정 상을 나타내고, N은 네마틱 상을 나타내며, S는 스메틱 상을 나타내고, I는 등방성 상을 나타낸다.

실시예 1

4'-[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3-메톡시벤조일옥시]비페닐-4-카복실산 4-아크릴로일옥시부틸 에스테르



N-(3-디메틸아미노프로필)-N'-에틸카보디이미드 하이드로클로라이드(EDC) 1.35g(7mmol)을 0℃에서 디클로로메탄(DCM) 180㎖ 중의 4'-하이드록시비페닐-4-카복실산 4-아크릴로일부틸 에스테르 2.38g(7mmol), 4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3-메톡시벤조산 2.26g(7mmol) 및 4-디메틸아미노피리딘(DMAP) 0.86g(7mmol)의 용액에 가한다. 이들 혼합물을 0℃에서 1시간 동안 교반한 다음 실온에서 밤새 교반한다. 이어서, 반응 혼합물을 물 300㎖에 부어 매회 DCM 150㎖로 3회 추출한다. 합한 유기상을 매회 물 200㎖로 2회 세척하고 황산마그네슘으로 건조시키고 여과하여 농축시킨다. 잔류물을 사이클로헥산/에틸 아세테이트(7:3)를 사용하여 실리카겔 300g 상에서 크로마토그래피로 정제하고 0℃에서 에탄올 20㎖로부터 1회 재결정화하여 4'-[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3-메톡시벤조일옥시]비페닐-4-카복실산 4-아크릴로일옥시부틸 에스테르 2.58g을 수득한다.

융점 (C-S_x) 77℃, S_x-N 60℃, 투명점 (N-I) 62℃.

출발물질로서 사용되는 4'-하이드록시비페닐-4-카복실산-4-아크릴로일부틸 에스테르는 다음과 같이 제조한다:

(a) 트리페닐포스핀(TPP) 5.24g(20mmol)을 0℃에서 테트라하이드로푸란(THF) 100㎖ 중의 4'-하이드록시-4-비페닐카복실산 4.28g(20mmol)과 4-하이드록시부틸 아크릴레이트 2.88g(29mmol)의 용액에 가하고, 이어서 동일 온도에서 여기에 디에틸 아조디카복실레이트(DEAD) 3.50g(20mmol)을 적가한다. 이들 혼합물을 0℃에서 1시간 동안 교반한 다음 실온에서 밤새 교반한다. 이어서, 이들 혼합물을 농축시키고, 잔류물을 사이클로헥산/에틸 아세테이트(2:1)를 사용하여 실리카겔 상에서 크로마토그래피로 정제하여 4'-하이드록시비페닐-4-카복실산 4-아크릴로일부

틸 에스테르 4.32g을 수득한다.

출발물질로서 사용되는 4-(6-아크릴로일헥실옥시)-3-메톡시벤조산은 다음과 같이 제조한다:

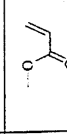
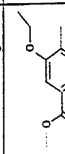
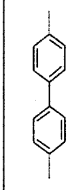
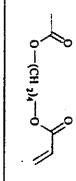
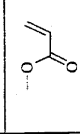
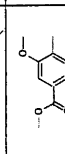
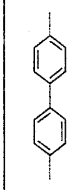
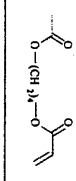
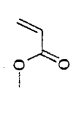
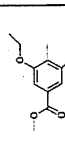
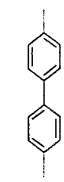
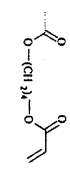
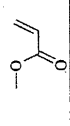
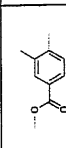
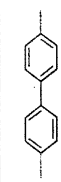
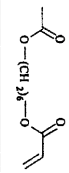
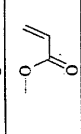
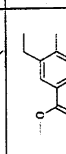
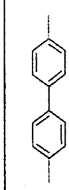
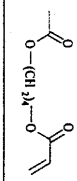
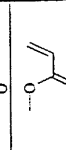
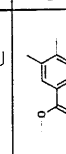
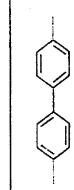
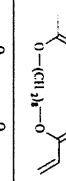
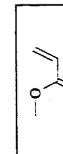
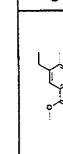
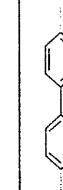
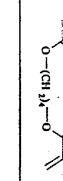
탄산칼륨 41.45g(300mmol)과 요오드화칼륨 27.4g(165mmol)을 디메틸 설폭사이드(DMSO) 500㎖ 중의 바닐린 22.8g(150mmol)과 6-클로로헥산올 30.7g(225mmol)의 용액에 가하고, 이들 혼합물을 질소하에 60℃에서 밤새 교반한다. 이어서, 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 물 600㎖에 부어 매회 에틸 아세테이트 150㎖로 3회 추출한다. 합한 유기상을 매회 물 200㎖로 2회 세척하고 황산마그네슘으로 건조시키고 여과하여 농축시킨다. 잔류물을 사이클로헥산/에틸 아세테이트(1:1)를 사용하여 실리카겔 400g 상에서 크로마토그래피로 정제하여 4-(6-헥실옥시)-3-메톡시벤즈알데히드 29.95g을 수득한다.

(b) 존스 시약 97㎖의 용액을 빙냉하에 5℃에서 아세톤 300㎖ 중의 4-(6-헥실옥시)-3-메톡시벤즈알데히드 27.3g(89.1mmol)의 용액에 서서히 적가한다. 이어서, 이들 혼합물을 실온에서 2시간 동안 교반한다. 출발물질이 더이상 감지되지 않으면, 반응 용액을 물 1ℓ와 에틸 아세테이트 0.3ℓ에 붓는다. 상을 분리하고 수성상을 매회 에틸 아세테이트 150㎖로 2회 추출한다. 합한 유기상을 물 0.5ℓ로 세척하여 황산마그네슘으로 건조시키고 여과하여 농축시킨다. 잔류물을 사이클로헥산/에틸 아세테이트(1:1)를 사용하여 실리카겔 상에서 크로마토그래피로 정제하고 에틸 아세테이트/에테르로부터 1회 재결정화하여 4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3-메톡시-벤조산 16.7g을 수득한다.

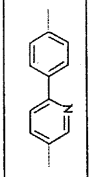
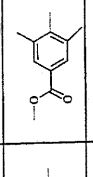
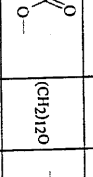
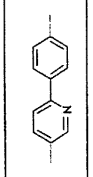
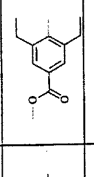
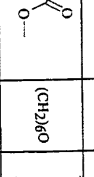
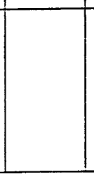
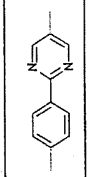
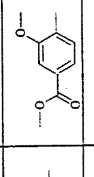
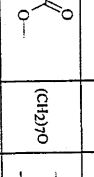
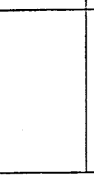
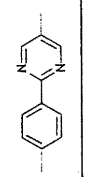
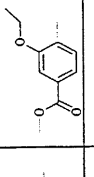
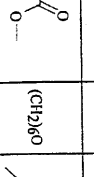
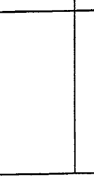
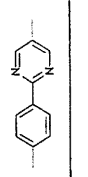
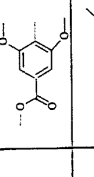
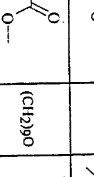
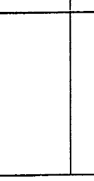
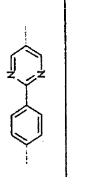
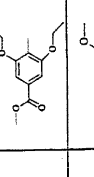
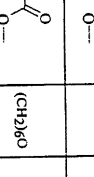
적절한 출발물질을 사용하여, 상응하는 화합물을 당해 기술분야의 숙련가들에게 공지되어 있는 반응에 따라 반응 그룹으로서 비닐 에테르를 사용하여 반응식 2에 제시된 바와 같이 유사하게 제조한다. 또한, 상이한 2개의 반응 그룹을 갖는 액정을 제시된 반응식에 따라 합성할 수 있다.

다음의 화합물들을 유사한 방법으로 제조할 수 있다.

$R^1-S^1-O-A-Z^1-B-COO-S^2-R^2$

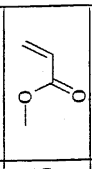
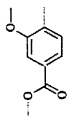
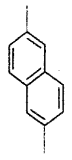
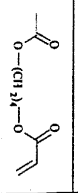
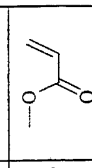
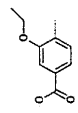
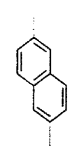
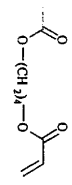
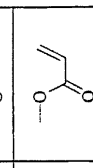
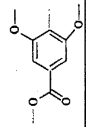
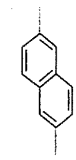
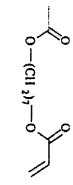
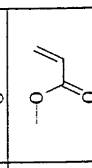
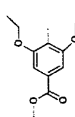
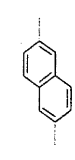
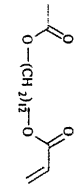
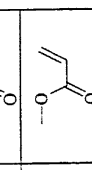
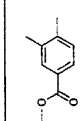
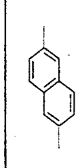
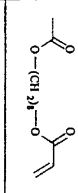
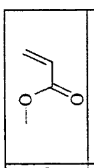
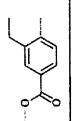
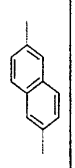
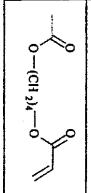
R1	S1-O	A-Z1	B	COO-S2-R2	상전이
	$(CH_2)_6O$				용점 (C-I) 79 °C
	$(CH_2)_8O$				
	$(CH_2)_7O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_4O$				
	$(CH_2)_6O$				

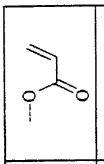
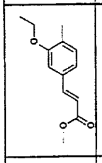
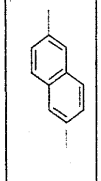
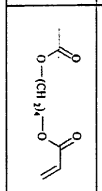
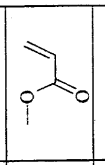
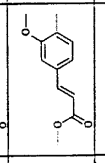
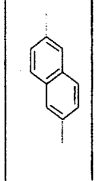
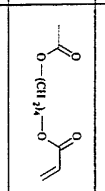
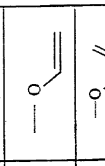
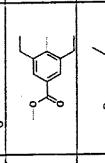
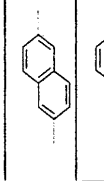
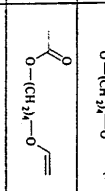
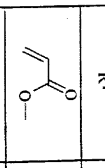
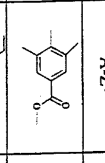
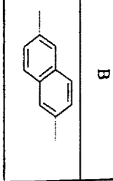
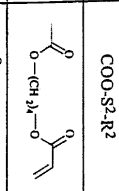
R^1	S^1-O	A-Z^1	B	COO-S^2-R^2	참전이
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_{10}O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_3O$				
	$(CH_2)_6O$				

참전이	$COO\text{-}S^2\text{-}R^2$	B	A-Z1	S1-O	R^1
				$(CH_2)_{12}O$	
				$(CH_2)_6O$	
				$(CH_2)_7O$	
				$(CH_2)_6O$	
				$(CH_2)_9O$	
				$(CH_2)_6O$	

R^1	S^1-O	A-Z^1	B	COO-S^2-R^2	상전이
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_7O$				
	$(CH_2)_6O$				융점 (C-N) 95 °C, N-I 102 °C
	$(CH_2)_6O$				

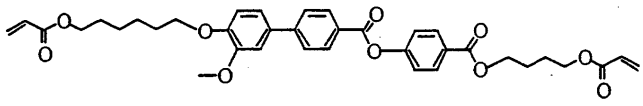
R^1	S^1-O	A-Z1	B	COO-S^2-R^2	상전이
	$(CH_2)_6O$				용-점 (C-S_A) 72 °C, S_A-I 81 °C
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				용-점 (C-Sx) 86 °C, Sx-I 93 °C
	$(CH_2)_6O$				용-점 (C-I) 66 °C
	$(CH_2)_6O$				용-점 (C-Sx) 64 °C, Sx-N 77 °C, N-I 83 °C

R^1	S^1-O	A-Z^1	B	COO-S^2-R^2	상전이
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_{12}O$				

R^1	S^1-O	$A-Z^1$	B	$COO-S^2-R^2$	상전이
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_7O$				
	$(CH_2)_6O$				

실시예 2

4' - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3' - 메톡시비페닐 - 4 - 카복실산 4 - (4 - 아크릴로일옥시부톡시카보닐)페닐 에스테르

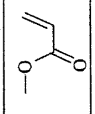
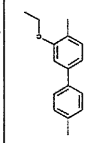
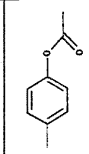
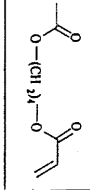
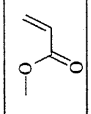
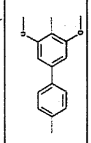
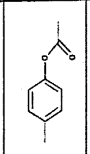
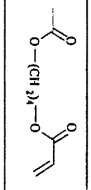
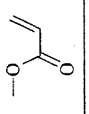
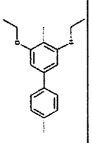
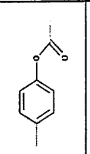
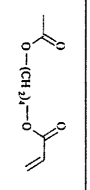
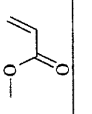
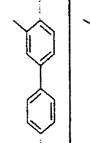
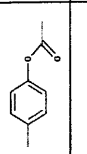
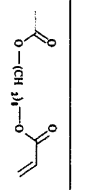
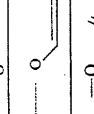
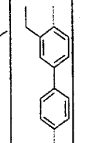
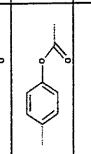
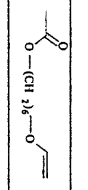
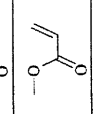
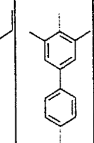
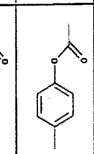
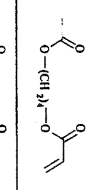
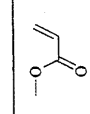
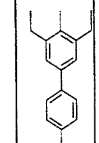
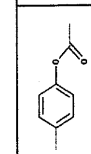
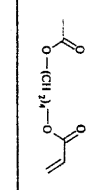


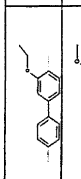
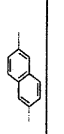
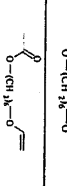
이의 제조는 4 - 하이드록시벤조산 4 - 아크릴로일옥시부틸 에스테르 2.64g(10mmol), 4' - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3' - 메톡시비페닐 - 4 - 카복실산 3.99g(10mmol), DMAP 0.12g(1mmol) 및 EDC 2.11g(11mmol)으로부터 실시예 1과 유사하게 수행한다. 잔류물을 사이클로헥산/에틸 아세테이트(7:3)를 사용하여 실리카겔 상에서 크로마토그래피로 정제하고 에탄올로부터 1회 재결정화하여 4' - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3' - 메톡시비페닐 - 4 - 카복실산 4 - (4 - 아크릴로일옥시부톡시카보닐)페닐 에스테르를 수득한다.

출발물질로서 사용되는 4' - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3' - 메톡시비페닐 - 4 - 카복실산은, 4 - 브로모 - 2 - 메톡시페놀과 4 - 포밀페닐붕산을 팔라듐 - 촉매된 붕산과 커플링시킨 다음 아크릴산 6 - 클로로헥실 에스테르로 페놀성 하이드록시 그룹을 윌리엄슨 에테르화시키고, 이어서 알데히드 관능기를 산으로 산화시킴으로써 공지된 방법에 따라 제조한다(반응식 3 참조).

다음의 화합물들을 유사한 방법으로 제조할 수 있다.

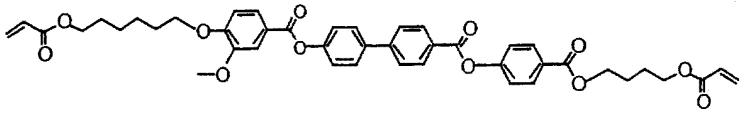
$R^1 - S^1 - O - B - Z^2 - C - COO - S^2 - R^2$

R^1	S^1-O	B	Z^2-C	COO-S^2-R^2	상전이
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_5O$				
	$(CH_2)_7O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_6O$				
	$(CH_2)_9O$				
	$(CH_2)_3O$				

R¹	S1-O	B	Z²-C	COO-S²-R²	상전이
	(CH2)6O				
	(CH2)6O				
	(CH2)6O				
	(CH2)6O				
	(CH2)6O				
	(CH2)6O				

실시예 3

4' - [4 - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3 - 메톡시벤조일옥시]비페닐 - 4 - 카복실산 - 4 - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) 페닐 에스테르

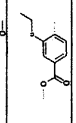
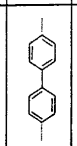
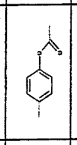
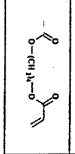
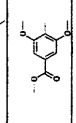
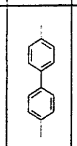
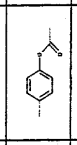
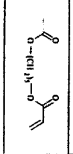
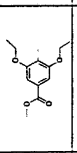
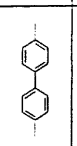
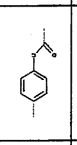
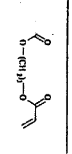
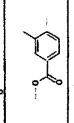
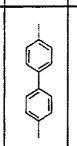
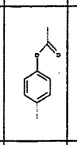
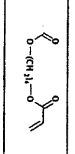
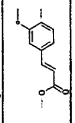
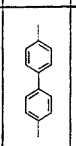
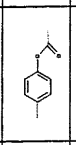
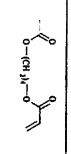
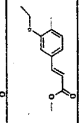
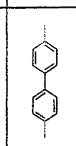
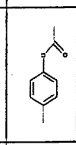
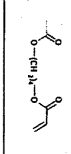
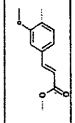
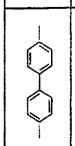
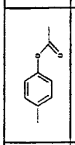
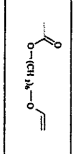


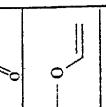
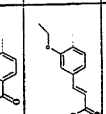
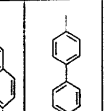
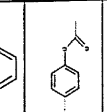
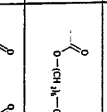
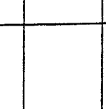
이의 제조는 4 - 하이드록시벤조산 4 - 아크릴로일옥시부틸 에스테르 2.64g(10mmol), 4' - [4 - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3 - 메톡시벤조일옥시]비페닐 - 4 - 카복실산 5.19g(10mmol), DMAP 0.12g(1mmol) 및 EDC 2.11g(11mmol)으로부터 실시예 1과 유사하게 수행한다. 잔류물을 사이클로헥산/에틸 아세테이트(7:3)를 사용하여 실리카겔 상에서 크로마토그래피로 정제하고 에탄올로부터 1회 재결정화하여 4' - [4 - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3 - 메톡시벤조일옥시]비페닐 - 4 - 카복실산 - 4 - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시)페닐 에스테르를 수득한다.

출발물질로서 사용되는 4' - [4 - (6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3 - 메톡시벤조일옥시]비페닐 - 4 - 카복실산은 4 - [6 - 아크릴로일옥시헥실옥시) - 3 - 메톡시벤조산으로부터 당해 기술분야의 숙련가들에게 공지된 방법에 따라 반응식 4에 도시된 바와 같이 제조한다.

다음의 화합물들을 유사한 방법으로 제조할 수 있다.

$R^1 - S^1 - O - A - Z^1 - B - Z^2 - C - COO - S^2 - R^2$

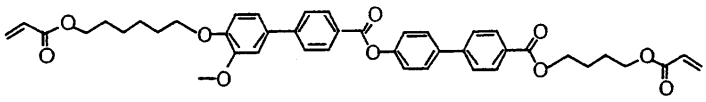
R^1	S^1-O	A-Z^1	B	Z^2-C	COO-S^2-R^2	상전이
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_5O$					
	$(CH_2)_8O$					
	$(CH_2)_6O$					

R^1	S^1-O	A-Z^1	B	Z^2-C	COO-S^2-R^2	상전이
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_8O$					
	$(CH_2)_7O$					
	$(CH_2)_6O$					

R^1	S^1-O	A-Z^1	B	Z^2-C	COO-S^2-R^2	상전이
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					

실시예 4

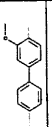
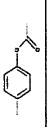
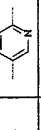
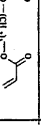
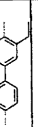
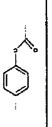
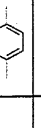
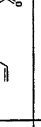
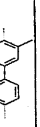
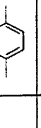
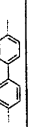
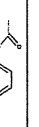
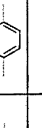
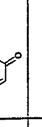
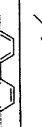
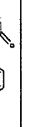
4'-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3'-메톡시비페닐-4-카복실산 4'-(4-아크릴로일옥시부톡시카보닐)비페닐-4-일 에스테르

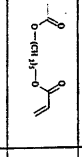
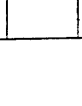
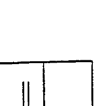
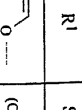
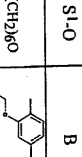
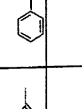
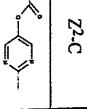
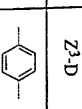
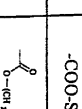
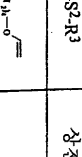
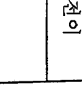
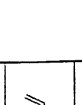
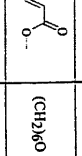
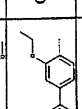
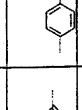
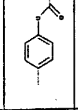
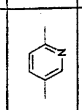


이의 제조는 4'-하이드록시비페닐-4-카복실산 4-아크릴로일부틸 에스테르 3.40g(10mmol), 4'-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3'-메톡시비페닐-4-카복실산 3.99g(10mmol), DMAP 0.12g(1mmol) 및 EDC 2.11g(11mmol)으로부터 실시예 1과 유사하게 수행한다. 잔류물을 사이클로헥산/에틸 아세테이트(7:3)를 사용하여 실리카겔 상에서 크로마토그래피로 정제하고 에탄올로부터 1회 재결정화하여 4'-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3'-메톡시비페닐-4-카복실산-4'-(4-아크릴로일옥시부톡시카보닐)비페닐-4-일 에스테르를 수득한다.

다음의 화합물들을 유사한 방법으로 제조할 수 있다.

$R^1 - S^1 - O - B - Z^2 - C - Z^3 - D - COO - S^2 - R^2$

R^1	S^1-O	B	Z^2-C	Z^3-D	-COO-S^2-R^3	상전이
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_5O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_{10}O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_6O$					
	$(CH_2)_5O$					
	$(CH_2)_6O$					

청전이	-COO-S²-R³	Z³-D	Z²-C	B	S¹-O	R¹
					(CH2)6O	
					(CH2)6O	
					(CH2)5O	
					(CH2)6O	
					(CH2)9O	
					(CH2)6O	
					(CH2)3O	

청전이	-COO-S²-R³	Z³-D	Z²-C	B	S¹-O	R¹
					(CH2)6O	
					(CH2)6O	
					(CH2)6O	
					(CH2)6O	
					(CH2)9O	
					(CH2)6O	
					(CH2)4O	

실시예 5

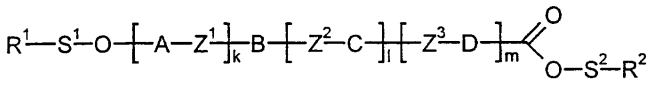
4'-[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3-메톡시-벤조일옥시]비페닐-4-카복실산 4-아크릴로일옥시부틸 에스테르 40중량%, 4'-[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-3-에톡시벤조일옥시]비페닐-4-카복실산-4-아크릴로일옥시부틸 에스테르 40중량% 및 4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조산 4-[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]-2-메틸페닐 에스테르 20중량%의 혼합물을 병렬 전지에 도입한다. 이들 전지의 이방성(△n)은 0.2이다. 혼합물의 투명점(Tc)은 54.3℃이고, 상전이 S_A/N은 35.3℃인 것으로 관찰된다. 혼합물을 실온 이하로 냉각시킬 수 있다.

(57) 청구의 범위

청구항 1.

화학식 I의 화합물.

화학식 I

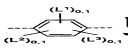
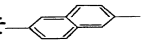


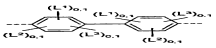
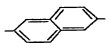
위의 화학식 I에서,

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 가교결합 가능한 그룹이고,

S^1 및 S^2는 각각 독립적으로 스페이서 단위이며, 단

R^1-S^1 및 R^2-S^2는 -O-O- 또는 -N-O- 그룹을 함유하지 않고,

A, C 및 D는 화학식  또는  의 라디칼이며,

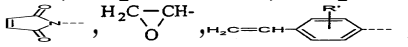
B는 화학식  또는  의 라디칼(여기서, A, B, C 또는 D의 페닐렌 환 중의 적어도 하나는 인접하지 않은 1개 또는 2개의 CH 그룹이 질소원자로 대체된 1,4-페닐렌 환으로 대체될 수 있고, L^1, L^2 및 L^3은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_2-C_{20} 알케닐옥시, C_1-C_{20} 알콕시카보닐, 포밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시 또는 니트로이며, 단 A, B, C 또는 D의 페닐렌 환 중의 적어도 하나에서, 상기한 치환체 중의 하나는 수소가 아니다)이고,

k, l 및 m은 0 또는 1이며,

k+l+m은 1 또는 2이어야 하고,

Z^1, Z^2 및 Z^3은 각각 독립적으로 단일 결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, -COO-, -OOC-, -CH="CH-COO-," -OOC-CH="CH-," $-(CH_2)_4-$, $-O(CH_2)_3-$, $-(CH_2)_3O-$ 또는 -C≡C-이다.

청구항 2.

제1항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 CH_2="CH-," CH_2="CH-COO-," CH_2="C(CH_3)-COO-, CH_2="C(Cl)-COO-," CH_2="C(Ph)-COO-," CH_2="CH-COO-Ph-," CH_2="CH-CO-NH-," CH_2="C(CH_3)-CONH-, CH_2="C(Cl)-CONH-," CH_2="C(Ph)-CONH-," CH_2="C(COOR')-CH_2-COO-, (R'OOC)-CH_2-C="CH_2-COO-, CH_2="CH-O-," CH_2="CH-OOC-," CH="CH-Ph-," 시스 또는 트랜스-HOO-CR'="CR'-COO-," 실록산,  , , , (여기서, (Ph)는 페닐이고, Ph는 페닐렌이며, R'는 저급 알킬이고, R" 는 메틸, 메톡시, 시아노 또는 할로겐이다)인 화합물.

청구항 3.

제1항 또는 제2항에 있어서, S^1 및 S^2가 각각 독립적으로 불소에 의해 임의로 일치환 또는 다치환될 수 있는 화학식 $-(CH_2)_r-$ 또는 $-((CH_2)_2-O)_r-$의 직쇄 또는 측쇄 알킬렌 그룹 또는 불소에 의해 임의로 일치환 또는 다치환될 수 있는 화학식 $-(CH_2)_r-Y-(CH_2)_s-$의 쇄(여기서, Y는 단일 결합 또는 관능성 결합 그룹이다) 등의 스페이서 단위인 화합물.

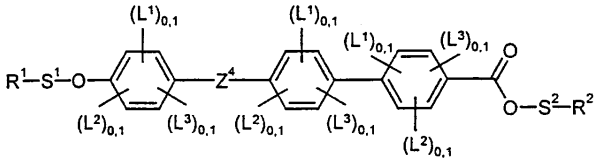
청구항 4.

제3항에 있어서, Y가 -O-, -COO-, -OOC-, $-NR^3-$, $-NR^3-CO-$, $-CO-NR^3-$, $-NR^3-COO-$, $-OCO-NR^3-$, $-NR^3-CO-NR^3-$, -O-OC-O-, -CH="CH-," -C≡C- (여기서, R^3은 수소 또는 저급 알킬이고, r 및 s는 각각 0 내지 20의 정수이며, 단 r+s는 2 내지 20이다) 또는 $-(Si[(CH_3)_2]O)_u-$, $-O-(CH_2)_t(Si[(CH_3)_2]O)_uSi[(CH_3)_2](CH_2)_tO-$ 또는 $-NH(CH_2)_t(Si[(CH_3)_2]O)_uSi[(CH_3)_2](CH_2)_tNH-$ (여기서, t는 1 내지 12의 정수이고, u는 1 내지 16의 정수이며, 단 2t+u는 20 이하이다)를 포함하는 관능성 결합 그룹인 화합물.

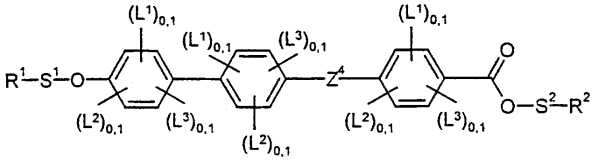
청구항 5.

제1항 내지 제4항 중의 어느 한 항에 있어서, 화학식 I-A 내지 I-G의 화합물.

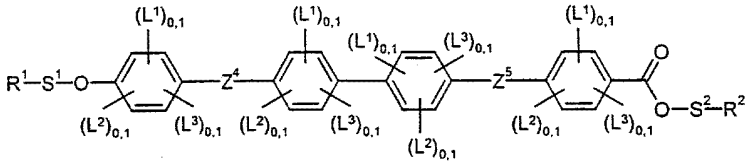
화학식 I-A



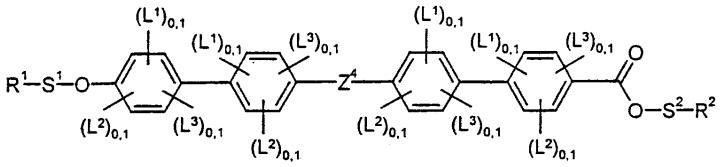
화학식 I-B



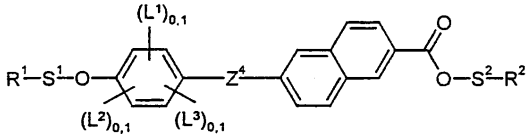
화학식 I-C



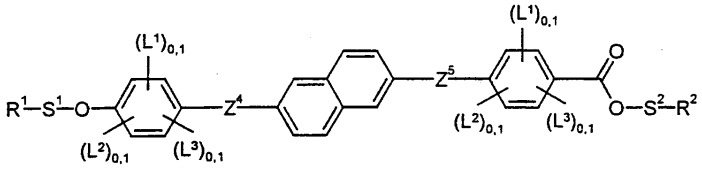
화학식 I-D



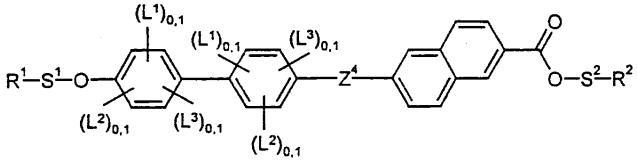
화학식 I-E



화학식 I-F



화학식 I-G



위의 화학식 I-A 내지 I-G에서,

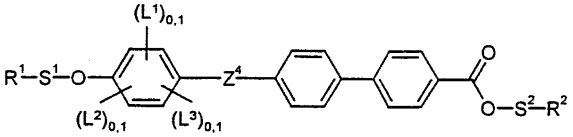
Z^4 및 Z^5는 각각 독립적으로 단일결합, -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO-이고,

R^1, R^2, S^1, S^2, L^1, L^2 및 L^3은 제1항에서 정의한 바와 같다.

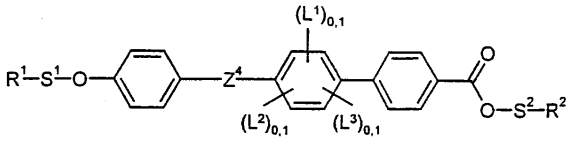
청구항 6.

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 화학식 I-A-1 및 I-A-2의 화합물.

화학식 I-A-1



화학식 I-A-2



위의 화학식 I-A-1 및 I-A-2에서,

L^1, L^2 및 L^3은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시 또는 C_2-C_{20} 알케닐옥시(여기서, 치환체 중의 적어도 하나는 수소가 아니어야 한다)이고,

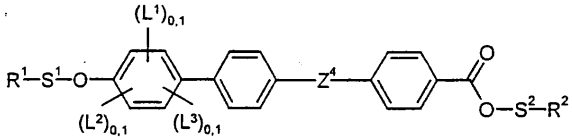
Z^4는 -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO-," 특히 -COO- 또는 -CH="CH-COO-," 보다 특히 -COO-이며,

R^1, R^2, S^1 및 S^2는 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 7.

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 화학식 I-B-1의 화합물.

화학식 I-B-1



위의 화학식 I-B-1에서,

L^1, L^2 및 L^3은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시 또는 C_2-C_{20} 알케닐옥시(여기서, 치환체 중의 적어도 하나는 수소가 아니어야 한다)이고,

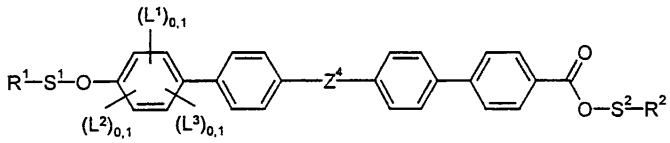
Z^4는 -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO-," 특히 -COO- 또는 -CH="CH-COO-," 보다 특히 -COO-이며,

R^1, R^2, S^1 및 S^2는 제1항에서 정의한 바와 같다.

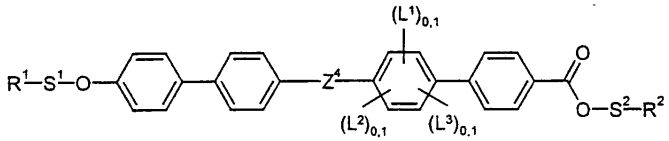
청구항 8.

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 화학식 I-D-1 및 I-D-2의 화합물.

화학식 I-D-1



화학식 I-D-2



위의 화학식 I-D-1 및 I-D-2에서,

L^1, L^2 및 L^3 은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_6-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시 또는 C_2-C_{20} 알케닐옥시(여기서, 치환체 중의 적어도 하나는 수소가 아니어야 한다)이고,

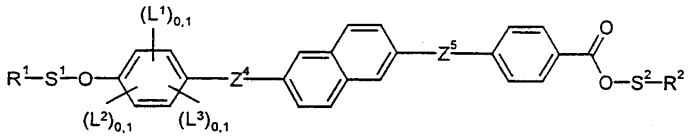
Z^4 는 -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO- 이며,

R^1, R^2, S^1 및 S^2 는 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 9.

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 화학식 I-F-1의 화합물.

화학식 I-F-1



위의 화학식 I-F-1에서,

L^1, L^2 및 L^3 은 각각 독립적으로 수소, C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시 또는 C_2-C_{20} 알케닐옥시(여기서, 치환체 중의 적어도 하나는 수소가 아니어야 한다)이고,

Z^4 는 -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO- 이며,

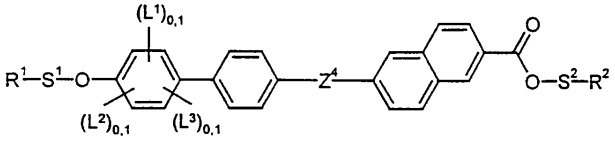
Z^5 는 단일결합, -COO- 또는 -CH="CH-COO- 이고,

R^1, R^2, S^1 및 S^2 는 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 10.

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 화학식 I-G-1의 화합물.

화학식 I-G-1



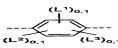
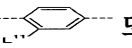
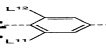
위의 화학식 I-G-1에서,

L^1, L^2 및 L^3 은 각각 독립적으로 수소, C_1 - C_{20} 알킬, C_2 - C_{20} 알케닐, C_1 - C_{20} 알콕시 또는 C_2 - C_{20} 알케닐옥시(여기서, 치환체 중의 적어도 하나는 수소가 아니어야 한다)이고,

Z^4 는 -C≡C-, -COO- 또는 -CH="CH-COO- 이며,

R^1, R^2, S^1 및 S^2 는 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 11.

제6항 내지 제10항 중의 어느 한 항에 있어서, 화학식  의 그룹이 화학식  또는  의 라디칼(여기서, L^{11} 및 L^{12} 는 각각 독립적으로 C_1 - C_{20} 알킬, C_2 - C_{20} 알케닐, C_1 - C_{20} 알콕시 또는 C_2 - C_{20} 알케닐옥시이다)인 화합물.

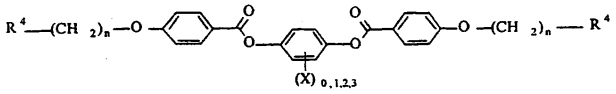
청구항 12.

2개 이상의 성분으로 이루어진 가교결합 가능한 액정 혼합물로서, 하나 이상의 성분이 제1항 내지 제11항 중의 어느 한 항에 따르는 화합물인, 가교결합 가능한 액정 혼합물.

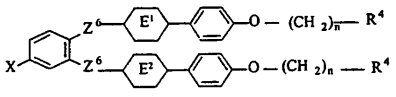
청구항 13.

제12항에 있어서, 제1항 내지 제11항 중의 어느 한 항에 따르는 하나 이상의 화합물 이외에 하나 이상의 화학식 II 내지 IX의 화합물을 포함함을 특징으로 하는, 가교결합 가능한 액정 혼합물.

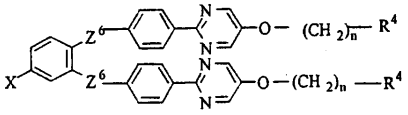
화학식 II



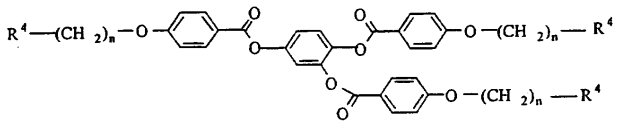
화학식 III



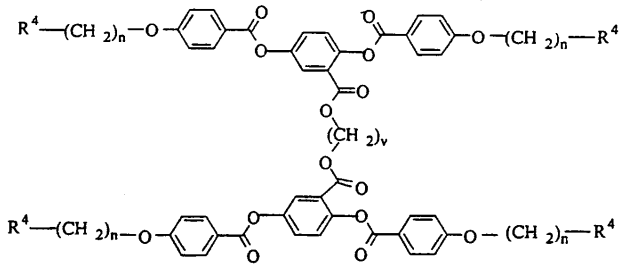
화학식 IV



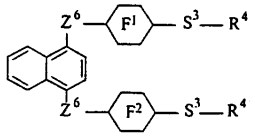
화학식 V



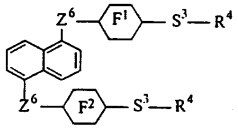
화학식 VI



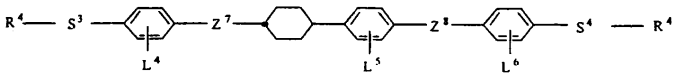
화학식 VII



화학식 VIII



화학식 IX



위의 화학식 II 내지 IX에서,

R^4는 중합 가능한 그룹이고,

S^3 및 S^4는 각각 독립적으로 $-(CH_2)_n-$ 또는 $-O(CH_2)_n-$이며,

E^1 및 E^2는 각각 독립적으로 1,4-페닐렌, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일 또는 트랜스-1,4-사이클로헥실렌-1,4-페닐렌이고,

F^1 및 F^2는 각각 독립적으로 1,4-페닐렌 또는 2- 또는 3-플루오로-1,4-페닐렌이며,

L^4, L^5 및 L^6 은 각각 독립적으로 수소, C_1 - C_{20} 알킬, C_2 - C_{20} 알케닐, C_1 - C_{20} 알콕시, C_1 - C_{20} 알콕시카보닐, 포밀, C_1 - C_{20} 알킬카보닐, C_1 - C_{20} 알킬카보닐옥시, 할로겐, 시아노 또는 니트로이고,

Z^6 은 각각 -COO-, -OOC-, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-O(CH_2)_3-$, $-OOC(CH_2)_2-$ 또는 $-COO(CH_2)_3-$ 이며,

Z^7 은 단일결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, -COO-, -OOC-, $-(CH_2)_4-$, $-O(CH_2)_3-$, $-(CH_2)_3O-$ 또는 -C≡C- 이고,

Z^8 은 단일결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, -COO-, -OOC- 또는 -C≡C- 이며,

X는 각각 독립적으로 수소, C_1 - C_{20} 알킬, C_2 - C_{20} 알케닐, C_1 - C_{20} 알콕시, C_1 - C_{20} 알콕시카보닐, 포밀, C_1 - C_{20} 알킬카보닐, C_1 - C_{20} 알킬카보닐옥시, 불소, 염소, 브롬, 시아노 또는 니트로이며,

n은 각각 2 내지 20의 정수이고,

v는 2 내지 12의 정수이다.

청구항 14.

제13항에 있어서, R^4 가 CH_2="CH-," CH_2="CH-O-," CH_2="CH-COO-," CH_2="C(CH_3)-COO-, CH_2="C(Cl)-COO-" 또는  를 포함하는 중합 가능한 그룹인, 가교결합 가능한 액정 혼합물.

청구항 15.

제1항 내지 제11항 중의 어느 한 항에 따르는 화합물을 포함하는 광학 또는 전기광학 장치.

청구항 16.

제12항 내지 제14항 중의 어느 한 항에 따르는 가교결합 가능한 액정 혼합물을 포함하는 광학 또는 전기광학 장치.

청구항 17.

광학 또는 전기광학 장치를 위한, 가교결합 상태의 제1항 내지 제11항 중의 어느 한 항에 따르는 화합물의 용도.

청구항 18.

광학 또는 전기광학 장치를 위한, 가교결합 상태의 제12항 내지 제14항 중의 어느 한 항에 따르는 가교결합 가능한 액정 혼합물의 용도.