



(19) 대한민국특허청(KR)
 (12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2012년12월04일
 (11) 등록번호 10-1208244
 (24) 등록일자 2012년11월28일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 19/16 (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2004-0082604
 (22) 출원일자 2004년10월15일
 심사청구일자 2009년10월12일
 (65) 공개번호 10-2005-0037379
 (43) 공개일자 2005년04월21일
 (30) 우선권주장
 03023430.6 2003년10월17일
 유럽특허청(EPO)(EP)
 (56) 선행기술조사문헌
 JP2000178233 A*
 US06613245 B1*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
메르크 패트ент 게엠베하
 독일 64293 다틈스타트 프랑크푸르터 스트라세
 250
 (72) 발명자
하딩리처드
 영국 한츠 에스오50 7제이와이 이스트레이 페어
 오크 엘란드 클로즈4
하살이안빅터에드워드
 영국 도셋 비에이치23 7엔디 크리스트처치 번함
 로드 22
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
제일특허법인, 장성구

전체 청구항 수 : 총 16 항

심사관 : 조한솔

(54) 발명의 명칭 **측방향 치환기를 갖는 중합성 신나메이트****(57) 요 약**

본 발명은 측방향으로 치환된 신나메이트 기를 포함하는 새로운 중합성 메소제닉 또는 액정 화합물, 그로부터 제조된 중합성 메소제닉 또는 액정 혼합물 및 비동방성 중합체, 및 상기 새로운 화합물 및 그로부터 제조된 혼합물 및 중합체의 광학 및 전기광학 장치, 접착제, 비동방성 기계적 특성을 갖는 합성 수지, 화장품, 진단 제품, 액정 안료, 장식 및 보안 용도, 비선형 광학제품, 광학 정보 저장, 유기 전계 효과 트랜지스터(FET 또는 OFET)와 같은 전자 장치, 전기발광 장치, 또는 키랄 도판트로서의 용도에 관한 것이다.

(72) 발명자
마텐셜리안
영국 풀 도셋 비에이치15 파크스톤 링우드 로드
244

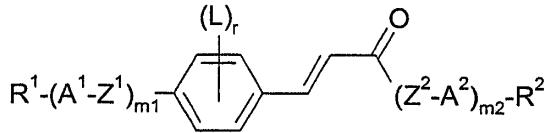
브라운다렌
영국 풀 비에이치15 2에이제이 스터트 아베뉴 17

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1의 화합물:

화학식 1



상기 식에서,

A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 탄소수 20 이하의 지방족 또는 방향족 카보환식 또는 헤테로환식 기로서, 또한 융합된 고리를 포함할 수 있고 비치환되거나 L로 일치환 또는 다치환될 수 있으며,

$m1$ 은 0, 1, 2 또는 3이고,

$m2$ 는 1, 2, 3 또는 4이고,

Z^1 및 Z^2 는 서로 독립적으로 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{S-CO}-$, $-\text{CO-S}-$, $-\text{O-COO}-$, $-\text{CO-NR}^0-$, $-\text{NR}^0-\text{CO}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{SCF}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CH=N}-$, $-\text{N=CH}-$, $-\text{N=N}-$, $-\text{CH=CR}^0-$, $-\text{CY}^1=\text{CY}^2-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{CH=CH-COO}-$, $-\text{OCO-CH=CH-}$ 또는 단일 결합이고,

Y^1 및 Y^2 는 서로 독립적으로 H, F, Cl 또는 CN이고,

R^0 및 R^{00} 는 서로 독립적으로 H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이고,

R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로 H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, NCS, SF₅, 또는 비치환되거나 F, Cl, Br, I 또는 CN으로 일치환 또는 다치환된 탄소수 1 내지 30의 직쇄 또는 분지 알킬(여기서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂ 기는 임의적으로 각각의 경우에 서로 독립적으로 O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않도록 하는 방식으로 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{NH}-$, $-\text{NR}^0-$, $-\text{SiR}^0\text{R}^{00}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{OCO-O-}$, $-\text{S-CO}-$, $-\text{CO-S}-$, $-\text{CY}^1=\text{CY}^2-$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C-}$ 로 대체됨)이거나, P-Sp를 나타내고, 여기서 R^1 및 R^2 중 하나 이상은 P-Sp이고,

P는 중합성 기이고,

Sp는 화학식 Sp'-X로부터 선택되어 P-Sp-가 P-Sp'-X-가 되거나, 또는 단일 결합이고,

Sp'는, 비치환되거나 F, Cl, Br, I 또는 CN으로 일치환 또는 다치환된 탄소수 30 이하의 알킬렌이며, 이때 하나 이상의 CH₂기가 각각의 경우 서로 독립적으로 O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않도록 하는 방식으로 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{NH}-$, $-\text{NR}^0-$, $-\text{SiR}^0\text{R}^{00}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{OCO-O-}$, $-\text{S-CO}-$, $-\text{CO-S}-$, $-\text{CH=CH-}$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C-}$ 로 대체될 수 있고,

X는 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{O-COO}-$, $-\text{CO-NR}^0-$, $-\text{NR}^0-\text{CO}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{SCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CH=N}-$, $-\text{N=CH}-$, $-\text{N=N}-$, $-\text{CH=CR}^0-$, $-\text{CY}^1=\text{CY}^2-$, $-\text{C}\equiv\text{C-}$, $-\text{CH=CH-COO}-$, $-\text{OCO-CH=CH-}$ 또는 단일 결합이고,

L은, 여러 번 나타나는 경우 서로 독립적으로, F, Cl, Br, I, CN, NO₂이거나, 또는 하나 이상의 H 원자가 F 또는 Cl로 치환될 수 있는 탄소수 1 내지 20의 알킬, 알콕시, 알킬카보닐, 알콕시카보닐, 알킬카보닐옥시 또는 알콕시카보닐옥시이고,

r은 1, 2, 3 또는 4이다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

R^1 또는 R^2 가 F, Cl, CN 또는 임의적으로 불소화된 탄소수 1 내지 12의 알킬, 알콕시, 설파닐알킬, 티오카복실, 알킬설포닐 또는 알켄일임을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

$m1\leq 0$ 이고 $m2\geq 1$ 또는 2인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

R^1 이 P-Sp인 것을 특징으로 하는 화합물.

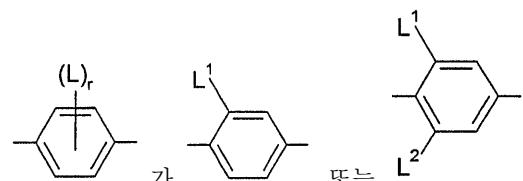
청구항 5

제 1 항에 있어서,

A^1 및 A^2 가 퓨란-2,5-다이일, 티오펜-2,5-다이일, 피롤-2,5-다이일, 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-다이일, 피리미딘-2,5-다이일, 나프탈렌-2,6-다이일, 1,2,3,4-테트라하이드로-나프탈렌-2,6-다이일, 인데인-2,5-다이일 및 1,4-사이클로헥실렌(여기서 상기 기들은 비치환되거나 화학식 1에 정의된 바와 같은 L로 일치환 또는 다치환되고, 상기 기들 중 1 또는 2개의 인접하지 않은 CH_2 기는 추가로 0 및/또는 S로 대체될 수 있음)으로부터 선택됨을 특징으로 하는 화합물.

청구항 6

제 1 항에 있어서,



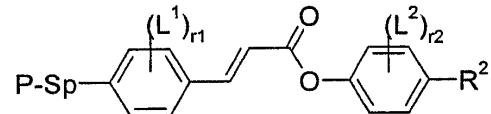
이고, 여기서 L^1 및 L^2 가 서로 독립적으로 화학식 1의 L의 의미중 하나를 갖는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

하기 화학식 1a로부터 선택되는 화합물:

화학식 1a



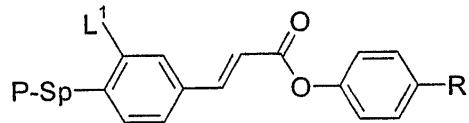
상기 식에서, P, Sp 및 R^2 는 화학식 1의 의미를 갖고, L^1 및 L^2 는 서로 독립적으로 화학식 1의 L의 의미중 하나를 갖고, $r1$ 은 1, 2, 3 또는 4이고 $r2$ 는 0, 1, 2, 3 또는 4이다.

청구항 8

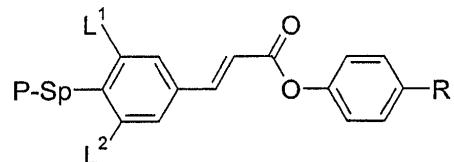
제 7 항에 있어서,

하기 화학식 1aa 내지 1ad로부터 선택되는 화합물:

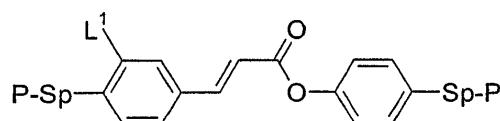
화학식 1aa



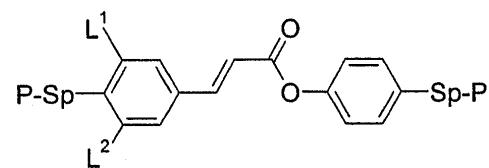
화학식 1ab



화학식 1ac



화학식 1ad



상기 식에서, R은 화학식 1의 R^2 의 의미중 P-Sp 이외의 하나를 갖고, P, Sp, L^1 및 L^2 는 화학식 1a에 대해 정의된 바와 같다.

청구항 9

제 1 항에 따른 하나 이상의 화합물을 포함하는 중합성 액정 물질.

청구항 10

제 9 항에 따른 중합성 액정 물질로부터 수득된 중합체.

청구항 11

제 10 항에 있어서,

비틀림 방향(twist sense), 반사 파장, 복굴절률 및 위상차로부터 선택된 하나 이상의 특성이 상이한 둘 이상의 영역의 패턴을 갖는 것을 특징으로 하는 중합체.

청구항 12

제 11 항에 있어서,

상이한 위상차를 갖는 둘 이상의 영역의 패턴을 갖는 것을 특징으로 하는 중합체.

청구항 13

제 12 항에 있어서,

패턴화된 1/4 파장 필름인 것을 특징으로 하는 중합체.

청구항 14

제 13 항에 있어서,
패턴화된 1/2 파장 필름인 것을 특징으로 하는 중합체.

청구항 15

제 10 항에 있어서,
광학적 이축 필름인 것을 특징으로 하는 중합체.

청구항 16

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물, 제 9 항에 따른 중합성 액정 물질, 또는 제 10 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 따른 중합체를 포함하는,

광학 필름, 편광기, 보상기, 이축 필름, 빔 스플리터, 반사성 필름, 정렬층, 컬러 필터, 홀로그래픽 요소, 핫스탬핑 호일, 착색된 화상(image), 장식 또는 보안 마킹, 액정 안료, 접착제, 비등방성 기계적 특성을 갖는 합성 수지, 화장품, 진단 제품, 비선형 광학 장치, 광학 정보 저장 장치, 키랄 도판트, 전자 장치, 접착 회로의 구성요소로서의 전계 효과 트랜지스터(FET), 평판 디스플레이 제품 또는 무선 주파수 확인(RFID) 태그용 박막 트랜지스터, 유기 발광 다이오드(OLED)용 반도체 커포넌트, 전기발광 디스플레이, 액정 디스플레이의 백라이트, 광전지 또는 센서 장치, 전지의 전극 물질, 광전도체, 또는 전자사진 기록 장치로 이루어진 군으로부터 선택되는 제품.

명세서**발명의 상세한 설명****발명의 목적****발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술**

[0001] 본 발명은 측방향으로 치환된 신나메이트 기를 포함하는 새로운 중합성 메소제닉 또는 액정 화합물, 그로부터 제조된 중합성 메소제닉 또는 액정 혼합물 및 비등방성 중합체, 및 상기 새로운 화합물 및 그로부터 제조된 혼합물 및 중합체의 광학 및 전기광학 장치, 접착제, 비등방성 기계적 특성을 갖는 합성 수지, 화장품, 진단 제품, 액정 안료, 장식 및 보안 용도, 비선형 광학제품, 광학 정보 저장, 유기 전계 효과 트랜지스터(FET 또는 OFET)와 같은 전자 장치, 전기발광 장치, 또는 키랄 도판트로서의 용도에 관한 것이다.

[0002] 중합성 메소제닉 또는 액정(LC) 화합물, 일명 반응성 메소젠(RM)은 종래 기술에서 다양한 목적에 대해 기술되어 왔다. 예를 들어, 이들은 선형 또는 가교결합된 액정 층쇄 중합체의 제조를 위해 사용될 수 있다. 게다가, 이들은 그들의 액정 상으로 정렬된 후 동일 반응계에서 중합되어 고품질의 균일한 배향을 갖는 선형 또는 가교결합된 액정 중합체 필름을 수득할 수 있다. 이들 필름은 예를 들어 EP 0 397 263호, WO 98/00475호, WO 98/04651호 또는 WO 98/12584호에 기술된 바와 같이 평판 디스플레이에서 편광기 또는 보상기와 같은 광학 부재로서 사용될 수 있다.

[0003] 또한, RM은 가시광의 선택적 반사를 나타내고 예를 들어 EP 0 606 940호 또는 WO 97/35219호에 기술된 바와 같이 협밴드 또는 광밴드 반사성 편광기 또는 컬러 필터와 같은 광학 필름으로서 적합한 중합된 콜레스테릭 액정 필름 또는 코팅에의 사용을 위해, 또는 예를 들어 WO 97/30136호에 기술된 바와 같이 액정 안료의 제조를 위해 제안되었다. 다른 중요한 사용 분야는 예를 들어 US 5,678,863호에 기술된 바와 같은 보안 마킹 또는 예를 들어 GB 2,357,061호에 기술된 바와 같은 핫 스탬핑 호일이다.

[0004] 또한, 광조사시에 E-Z 또는 시스-트랜스 이성질화를 나타내고 따라서 복굴절률 또는 키랄 화합물의 경우 키랄성 및 비틀림 파워(twist power)와 같은 그들의 형태 및 물성이 변화되는 이성질화가능한 RM이 종래 기술에 공지되어 있다. 이러한 광이성질화가능한 RM은 예를 들어 액정 디스플레이에서 컬러 필터 또는 광밴드 반사성 편광기와 같은 광학 구성요소로서 사용될 수 있는 패턴화된 광학 특성을 갖는 콜레스테릭 중합체 필름을 제조하기 위해 제안되어 왔다. 패턴화된 콜레스테릭 필름의 제조는 예를 들어 WO 00/34808호에 기술되어 있다. 또한, 이들은 예를 들어 US 5,602,661호에 기술된 바와 같이 상이한 배향을 갖는 지역의 패턴을 갖는 정렬 층 또는 광학

필름의 제조와 같이 선형 편광된 광의 조사에 의한 광정렬을 사용하는 용도를 위한 광배향가능한 물질로서 사용될 수 있다. 게다가, 광이성질화가능한 RM은 WO 98/57223호에 개시된 바와 같이 콜레스테릭 또는 다중-도메인 액정 디스플레이에의 사용을 위해 제안되어 왔다.

[0005] 신남산 기를 포함하는 RM이 광이성질화 또는 광배향가능한 물질로서 적합하다는 것이 공지되었다. 이러한 화합물은 예를 들어 US 5,770,107호에 기술되어 있다.

[0006] 그러나, 종래 기술의 화합물은 종종 합성하기 곤란하다. 중간체 신남산은 유기 용매에 대해 단지 한정된 용해도를 나타내어 합성에 불리하다. 예를 들어, 종래 기술의 물질은 표준 딘 앤드 스타크(Dean and Stark) 조건에서 반응할 수 없는데, 상기 물질이 다이클로로메탄(DCM)에 불용성이기 때문이다. 이는 중간체 신남산의 용해도가 반응이 일어나는 것을 돋도록 다량의 THF가 첨가되어야 하기 때문에 문제점이 있다. 이 과정은 최적화하고는 거리가 면데, THF중에도 중간체가 단지 부분적으로 가용성이기 때문이다. 예를 들어 20체적의 THF가 신남산 중간체를 재결정화하는데 사용될 수 있다. 대조적으로, 새로운 측방향 치환된 신남산(화학식 1의 물질 합성을 위해 사용됨)은 DCM에 가용성이어서, 표준 딘 앤드 스타크 조건을 사용하여 반응시킬 수 있다.

[0007] 따라서, 용이하게 광범위한 유도체로 합성할 수 있고, DCM에 양호한 가용성을 나타내고, 낮은 용점을 갖고, LC 혼합물 또는 중합성 LC 혼합물의 액정 상 거동에 악영향을 미치지 않으며 전술된 용도에 적합한 광이성질화 또는 광배향가능한 RM에 대한 수요가 있다. 상기 물질은 바람직하게는 넓은 액정 상, 특히 네마티 상을 갖고, 다른 반응성 액정 물질과 매우 혼화성이어야 한다. 이러한 방식으로 이들은 바람직하게는 0 내지 0.4 범위의 적합한 값의 복굴절률 Δn 을 가질 수 있다.

발명이 이루고자 하는 기술적 과제

[0008] 본 발명의 목적은 상기 특성을 가지나 전술한 바와 같은 종래 기술의 화합물의 불리점을 갖지 않는, 광이성질화 및 광배향가능한 중합성 메소제닉 또는 액정 화합물을 제공하는 것이다. 본 발명의 또 다른 목적은 전문가가 사용할 수 있는 반응성 광이성질화가능한 화합물의 집단을 확장시키는 것이다.

[0009] 본 발명의 발명자들은 상기 목적이 본원에서 청구하는 화합물을 제공함으로써 달성될 수 있다는 것을 발견했다.

발명의 구성 및 작용

[0010] 본원에서 '필름'이란 용어는 다소 두드러진 기계적 안정성 및 가요성을 갖는 자기지지, 즉 자립(free-standing) 필름, 및 지지 기재 상 또는 두 기재 사이의 코팅 또는 층이다.

[0011] 이상 및 이하에서 사용되는 '메소제닉 화합물'이란 용어는 막대형, 윗가지(lath)형 또는 원반형 메소제닉 기, 즉 메소상 거동을 유도할 수 있는 기를 갖는 화합물을 나타낸다. 상기 화합물은 꼭 그 자체로 메소상 거동을 나타내는 것은 아니다. 또한, 상기 화합물이 다른 화합물과의 혼합물에서만 메소상 거동을 나타내거나 메소제닉 화합물 또는 이를 포함하는 혼합물이 중합될 경우에 메소상 거동을 나타내는 것도 가능하다. 막대형 및 윗가지형 메소제닉 기가 특히 바람직하다.

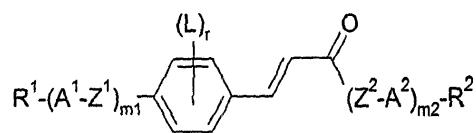
[0012] 단순화를 위해, 이후 액정 물질 및 메소제닉 물질 둘 다에 대해 '액정(LC) 물질'이란 용어를 사용하며, 상기 물질의 메소제닉 기에 대해 '메소젠'이란 용어를 사용한다.

[0013] 하나의 중합성 기를 갖는 중합성 화합물을 또한 '일반응성' 화합물이라 지칭하고, 두 개의 중합성 기를 갖는 화합물을 '이반응성' 화합물이라 지칭하며, 둘 초과의 중합성 기를 갖는 화합물을 '다반응성' 화합물이라 지칭한다. 중합성 기를 갖지 않는 화합물을 또한 '비반응성' 화합물이라 지칭한다.

[0014] 중합성 메소제닉 또는 액정 화합물을 또한 간략하게 '반응성 메소젠(RM)'이라 지칭한다.

[0015] 본 발명은 화학식 1의 화합물에 관한 것이다:

화학식 1



[0016]

[0017] 상기 식에서,

[0018] A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 탄소수 20 이하의 지방족 또는 방향족 카보환식 또는 헤테로환식 기로서, 또한 융합된 고리를 포함할 수 있고 비치환되거나 L로 일치환 또는 다치환될 수 있으며,

[0019] $m1$ 은 0, 1, 2 또는 3이고,

[0020] $m2$ 는 1, 2, 3 또는 4이고,

[0021] Z^1 내지 Z^4 는 서로 독립적으로 $-0-$, $-S-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-S-CO-$, $-CO-S-$, $-O-COO-$, $-CO-NR^0-$, $-NR^0-CO-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-SCH_2-$, $-CH_2S-$, $-CF_2O-$, $-OCF_2-$, $-CF_2S-$, $-SCF_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CF_2CH_2-$, $-CH_2CF-$, $-CF_2CF_2-$, $-CH=N-$, $-N=CH-$, $-N=N-$, $-CH=CR^0-$, $-CY^1=CY^2-$, $-C\equiv C-$, $-CH=CH-COO-$, $-OCO-CH=CH-$ 또는 단일 결합이고,

[0022] Y^1 및 Y^2 는 서로 독립적으로 H, F, Cl 또는 CN이고,

[0023] R^0 및 R^{00} 는 서로 독립적으로 H 또는 탄소수 1 내지 12의 알킬이고,

[0024] R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로 H, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, NCS, SF₅, 또는 비치환되거나 F, Cl, Br, I 또는 CN으로 일치환 또는 다치환된 탄소수 1 내지 30의 직쇄 또는 분지 알킬(여기서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂기는 임의적으로 각각의 경우에 서로 독립적으로 O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않도록 하는 방식으로 $-0-$, $-S-$, $-NH-$, $-NR^0-$, $-SiR^0R^{00}-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OCO-$, $-OCO-O-$, $-S-CO-$, $-CO-S-$, $-CY^1=CY^2-$ 또는 $-C\equiv C-$ 로 대체됨)이거나, P-Sp를 나타내고, 여기서 R^1 및 R^2 중 하나 이상은 P-Sp이고,

[0025] P는 중합성 기이고,

[0026] Sp는 스페이서 기 또는 단일 결합이고,

[0027] L은 여러 번 나타나는 경우 서로 독립적으로, H 이외의 R^1 의 의미중 하나를 갖고,

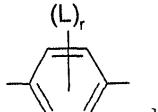
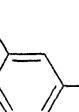
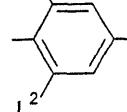
[0028] r은 1, 2, 3 또는 4이다.

[0029] 본 발명은 또한 상기 화학식 1의 하나 이상의 화합물을 포함하는 중합성 액정 물질에 관한 것이다.

[0030] 본 발명은 또한 화학식 1의 하나 이상의 화합물로부터 또는 화학식 1의 하나 이상의 물질을 포함하는 중합성 액정 물질로부터 수득된 비등방성 중합체 또는 중합체 필름에 관한 것이다.

[0031] 본 발명은 또한 화학식 1의 화합물, 그로부터 제조된 중합성 물질 또는 중합체의, 광학 필름, 편광기, 보상기, 이축 필름, 범스플리터, 반사성 필름, 정렬층, 컬러 필터, 홀로그래픽 부재, 핫스탬핑 호일, 착색된 화상, 장식 또는 보안 마킹, 액정 안료, 접착제, 비등방성 기계적 특성을 갖는 합성 수지, 화장품, 진단 제품, 비선형 광학, 광학 정보 저장에서, 키랄 도판트로서, 접적 회로의 구성요소로서의 예를 들어 전계 효과 트랜지스터(FET)와 같은 전자 장치에서, 평판 디스플레이 분야에서의 또는 무선 주파수 확인(Radio Frequency Identification; RFID) 태그를 위한 박막 트랜지스터로서, 또는 전기발광 디스플레이 또는 예컨대 액정 디스플레이의 백라이트와 같은 유기 발광 다이오드(OLED)용 반도체 컴포넌트에서, 광전지(photovoltaic) 또는 센서 장치를 위해, 전지의 전극 물질로서, 광전도체로서, 또는 전자사진 기록과 같은 전자사진용으로 사용하기 위한 용도에 관한 것이다.

[0032] 본 발명은 또한 화학식 1의 하나 이상의 화합물 및 하나 이상의 낮은 몰 질량의 액정 화합물을 포함하는 액정 혼합물 또는 중합체 겔 또는 망상구조물에 관한 것이다.

- [0033] 본 발명은 또한 그의 능동 층에 화학식 1의 하나 이상의 화합물 또는 화학식 1의 하나 이상의 화합물을 포함하는 액정 혼합물 또는 중합체를 포함하는 디스플레이에 관한 것이다.
- [0034] 화학식 1의 화합물은 광이성질화 또는 광배향을 이용하는 용도를 위한 액정 중합성 조성물에 사용하기에 특히 적합하다. 이들은 그 자체가 메소상 거동을 나타낼 필요는 없으나, 또한 다른 화합물과의 혼합물중에서 메소상 거동을 나타낼 수 있다. 그러나, 넓은 LC 상을 갖는 화학식 1의 화합물이 특히 바람직하다. 게다가, 화학식 1의 화합물은 높은 용해도를 갖는 단량체이고, 광범위한 변형물로 합성하기 용이하다.
- [0035] 특히 바람직한 것은 화학식 1에서 $m_1+m_2=1$ 또는 2인 화합물, m_1 이 0인 화합물, m_2 가 1 또는 2인 화합물, 특히 m_1 또는 m_2 가 1일 경우 A^1 및 A^2 가 방향족 기인 화합물, m_2 가 1이고 A^1 이 임의적으로 치환된 1,4-페닐렌인 화합물, Z^1 및 Z^2 가 $-COO-$, $-OCO-$, $-C\equiv C-$ 및 $-CY^1=CY^2-$ 로부터 선택되는 화합물, r 이 1 또는 2인 화합물, R^1 또는 R^2 가 F, Cl, CN 또는 임의적으로 불소화된 탄소수 1 내지 12의 알킬, 알콕시, 살파닐알킬, 티오카복실, 알킬설포닐 또는 알케닐로부터 선택되는 화합물, R^1 이 P-Sp-인 화합물, R^1 및 R^2 가 P-Sp인 화합물, Sp가 임의적으로 F로 일치환 또는 다치환되고 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 가 각각의 경우에 서로 독립적으로 $-O-$, $-CH=CH-$ 또는 $-C\equiv C-$ 로 대체될 수 있는 탄소수 1 내지 12의 알킬렌인 화합물, Sp가 단일 결합인 화합물이다.
- [0036] 또한, 화학식 1에서  가  또는  이고 여기서 L^1 및 L^2 가 서로 독립적으로 화학식 1에 주어지거나 하기에 주어진 바와 같은 L의 의미중 하나를 갖는 화합물이 바람직하다.
- [0037] 화학식 1에서 L은 바람직하게는 F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , 또는 탄소수 1 내지 20의 하나 이상의 H 원자가 F 또는 Cl로 치환될 수 있는 알킬, 알콕시, 알킬카보닐, 알콕시카보닐, 알킬카보닐옥시 또는 알콕시카보닐옥시이다.
- [0038] 특히 바람직한 L기는 F, Cl, CN, NO_2 , CH_3 , C_2H_5 , OCH_3 , OC_2H_5 , $COCH_3$, COC_2H_5 , $COOCH_3$, $COOC_2H_5$, CF_3 , OCF_3 , $OCHF_2$ 또는 OC_2F_5 , 특히 F, Cl, CN, CH_3 , C_2H_5 , OCH_3 , $COCH_3$ 또는 OCF_3 , 가장 바람직하게는 F, Cl, CH_3 , OCH_3 또는 $COCH_3$ 이다.
- [0039] 화학식 1에서 A^1 및 A^2 는 바람직하게는 방향족 또는 지환족 5원 또는 6원 고리, 또는 2 또는 3개의 융합된 방향족 또는 지환족 5원 또는 6원 고리를 포함하는 기이고, 상기 고리는 또한 하나 이상의, 특히 N, O 및 S로부터 선택된 혼테로원자를 함유할 수 있고, 또한 L로 일치환 또는 다치환될 수 있다.
- [0040] 화학식 1에서 바람직한 A^1 및 A^2 기는 예를 들어 퓨란, 피롤, 티오펜, 옥사졸, 티아졸, 티아다이아졸, 이미다졸, 페닐렌, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 인데인, 나프탈렌, 테트라하이드로나프탈렌, 안트라센 및 페난트レン이다.
- [0041] 특히 바람직하게는 A^1 및 A^2 는 퓨란-2,5-다이일, 티오펜-2,5-다이일, 피롤-2,5-다이일, 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-다이일, 피리미딘-2,5-다이일, 나프탈렌-2,6-다이일, 1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌-2,6-다이일, 인데인-2,5-다이일 또는 1,4-사이클로헥실렌(여기서, 상기 기들은 비치환되거나 상기 정의된 바와 같은 L로 일치환 또는 다치환되고, 상기 기들 중 1 또는 2개의 인접하지 않은 CH_2 기는 0 및/또는 S로 추가로 대체될 수 있음)으로부터 선택된다.
- [0042] 바람직하게는 화학식 1에서 $-(Z^1-A^1)_{m_1}-$ 및 $-(A^2-Z^2)_{m_2}-$ 기는 단지 단환식 기 A^1 및 A^2 를 함유한다. 매우 바람직하게는 $-(A^1-Z^1)_{m_1}-$ 및 $-(Z^2-A^2)_{m_2}-$ 기는 서로 독립적으로 1 또는 2개의 5원 또는 6원 고리를 갖는 기를 나타낸다. $-(A^1-Z^1)_{m_1}-$ 및 $-(Z^2-A^2)_{m_2}-$ 기는 동일하거나 상이할 수 있다. $-(A^1-Z^1)_{m_1}-$ 및 $-(Z^2-A^2)_{m_2}-$ 가 상이한 화합물이 특히 바람직하다.
- [0043] $-(A^1-Z^1)_{m_1}-$ 및 $-(Z^2-A^2)_{m_2}-$ 기에 대한 바람직한 하위화학식들을 하기에 열거한다. 단순화의 이유로, 이들 기에서 Phe는 1,4-페닐렌이고, Phe L은 상기 정의된 바와 같은 1 내지 4개의 L 기로 치환된 1,4-페닐렌 기이고, Pyd는

페리딘-2,5-다이일이고 Pyr은 페리미딘-2,5-다이일이다. 바람직한 $-(A^1-Z^1)_{m1}-$ 및 $-(Z^2-A^2)_{m2}-$ 기의 하기 목록은 하위화학식 2a 내지 2p 및 그의 거울 상을 포함하며, 이들은 화학식 1에서 라디칼 Z를 통해 톨레인기에 연결된다.

화학식 2a

[0044] -Phe-Z-

화학식 2b

[0045] -Pyd-Z-

화학식 2c

[0046] -Pyr-Z-

화학식 2d

[0047] -PheL-Z-

화학식 2e

[0048] -Phe-Z-Phe-Z-

화학식 2f

[0049] -Phe-Z-Pyd-Z-

화학식 2g

[0050] -Pyd-Z-Phe-Z-

화학식 2h

[0051] -Phe-Z-Pyr-Z-

화학식 2i

[0052] -Pyr-Z-Phe-Z-

화학식 2j

[0053] -PheL-Z-Phe-Z-

화학식 2k

[0054] -PheL-Z-Pyd-Z-

화학식 2l

[0055] -PheL-Z-Pyr-Z-

화학식 2m

[0056] -Pyr-Z-Pyd-Z-

화학식 2n

[0057] -Pyd-Z-Pyd-Z-

화학식 2o

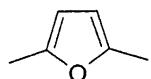
[0058] -Pyr-Z-Pyr-Z-

화학식 2p

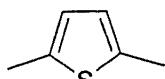
[0059] -PheL-Z-PheL-Z-

[0060] 상기 바람직한 기에서 Z는 화학식 1에서 주어진 바와 같은 Z^1 의 의미를 갖는다. 바람직하게는 Z는 $-COO^-$, $-OCO^-$, $-CH_2CH_2^-$, $-C\equiv C-$ 또는 단일 결합이다.

[0061] 매우 바람직하게는 $-(A^1-Z^1)_{m1}^-$ 및 $-(Z^2-A^2)_{m2}^-$ 는 서로 독립적으로 하기 화학식 및 그의 거울 상으로부터 선택되며, 이들은 화학식 1에서 라디칼 Z를 통해 톨레인 기에 연결된다.

화학식 2aa

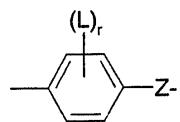
[0062]

화학식 2ab

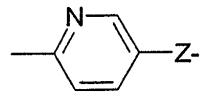
[0063]

화학식 2ac

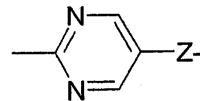
[0064]

화학식 2ad

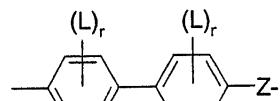
[0065]

화학식 2ae

[0066]

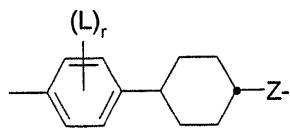
화학식 2af

[0067]

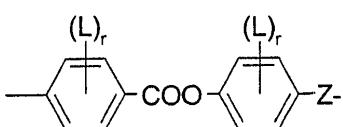
화학식 2ag

[0068]

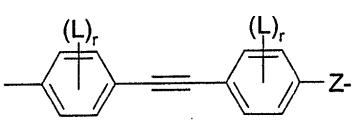
화학식 2ah



화학식 2ai



화학식 2ak



[0072] 상기 식에서 Z 및 L은 상기에 주어진 의미를 가지고 r은 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2이다.

[0073] 화학식 1에서 아세틸렌 기에 부착된 $-(\text{A}^1\text{-Z}^1)_{\text{m}1}-$ 기에 대해, 바람직한 화학식 2aa 내지 2af에서 Z는 바람직하게는 단일 결합이다.

[0074] 상기 바람직한 화학식에서 기는 매우 바람직하게는 , 또는 , 또한 을 나타내고, 여기서 L은 각각 독립적으로 상기 주어진 의미중 하나를 갖는다.

[0075] 하위 화학식 2aa, 2ac, 2af, 2ag 및 2ah, 특히 하위화학식 2aa, 2ad 및 2af가 특히 바람직하다.

[0076] 특히 바람직한 것은 하나 이상의 기(여기서, r은 1임)를 포함하는 화학식 1의 화합물이다.

[0077] 또한 바람직한 것은 둘 이상의 기(여기서, r은 1임) 및/또는 하나 이상의 기(여기서, r은 2임)를 포함하는 화학식 1의 화합물이다.

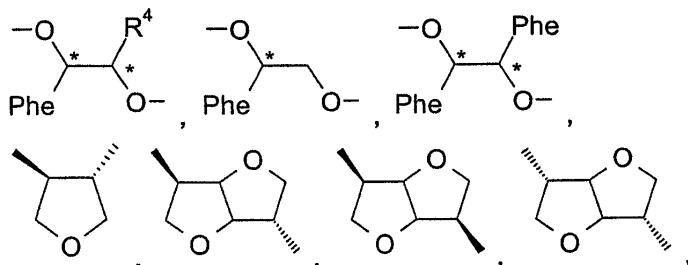
[0078] 다른 바람직한 실시양태에서, A^1 및 A^2 중 하나 이상은 2가 키랄 기이거나, 화학식 1의 R^1 또는 R^2 와 함께 종결 키랄 기를 형성한다.

[0079] 바람직한 키랄 기 $\text{A}^{1/2}$ 및 $\text{A}^{1/2}\text{-R}^{1/2}$ 는 예전대 WO 96/17901호에 개시된 바와 같은 예를 들어 바람직하게는 멘틸, 네오멘틸, 캄페일, 피네일, 터페네일, 아이소롱기풀릴, 펜칠, 카레일, 미르테닐, 노필, 제라니일, 리날로일, 네릴, 시트로넬릴 및 다이하이드로시트로넬릴, 특히 멘틸 또는 멘톤 유도체로부터 선택된 콜레스테릴, 터페노이드라디칼, 또는 WO 95/16007호에 개시된 키랄 당으로부터 유도된 기와 같은 피라노즈 또는 푸라노즈 고리를 갖는 단환식 또는 이환식 라디칼을 포함하는 종결 키랄 당 유도체이다.

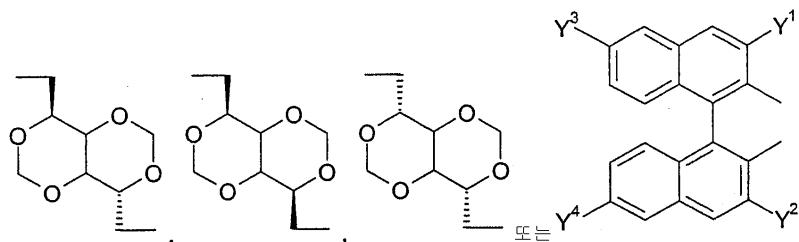
[0080] 바람직한 키랄 기 $\text{A}^{1/2}$ 및 $\text{A}^{1/2}\text{-R}^{1/2}$ 는 예를 들어 콜레스테릴, 또는 당으로부터 유도된 기, 바이나프틸 유도체, 또는 광학 활성 글라이콜, 특히 1- 및/또는 2-위치가 알킬 또는 아릴 기로 치환된 에탄-1,2-다이올이다. 당 기의

경우, 이들은 바람직하게는 펜토즈 또는 헥소즈 고리를 포함하는 단환식 또는 이환식 기로부터 선택된다.

[0081] 특히 바람직한 것은 하기 $A^{1/2}$ 및 $A^{1/2}-R^{1/2}$ 기이다.

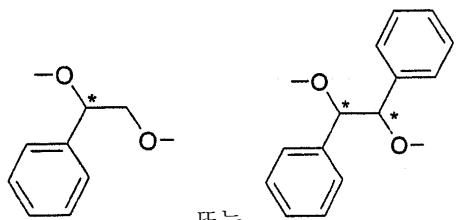


[0082]



[0083]

[0084] 상기 식에서, Phe는 상기 주어진 의미를 갖고, R^4 는 F 또는 탄소수 1 내지 4의 임의적으로 불소화된 알킬이고, Y^1 , Y^2 , Y^3 및 Y^4 는 화학식 1에서의 R^1 의 의미중 하나를 갖는다.



[0085]

[0085] 바람직하게는 $A^{1/2}$ 또는 $A^{1/2}-R^{1/2}$ 는 다이안하이드로소비톨, 또는 Y^1 , Y^2 , Y^3 및 Y^4 는 H, F 또는 탄소수 1 내지 8의 임의적으로 불소화된 알킬임)이다. 와 같은 치환 된 에탄 다이올(여기서, R^4 는 F, CH_3 또는 CF_3 임), 또는 임의적으로 치환된 바이나프틸 (여기서, Y^1 , Y^2 , Y^3 및 Y^4 는 H, F 또는 탄소수 1 내지 8의 임의적으로 불소화된 알킬임)이다.

[0086]

$CY^1=CY^2$ 는 바람직하게는 $-CH=CH-$, $-CH=CF-$, $-CF=CH-$, $-CF=CF-$, $-CH=C(CN)-$ 또는 $-C(CN)=CH-$ 이다.

[0087]

화학식 1에서 R^1 또는 R^2 가 알킬 또는 알콕시 라디칼, 즉 종결 CH_2 기가 $-O-$ 로 대체된 것일 경우, 이는 직쇄 또는 분지형일 수 있다. 이는 바람직하게는 직쇄형이며, 탄소수 2 내지 8이고 따라서 바람직하게는 예를 들어 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 에톡시, 프로포록시, 부톡시, 펜톡시, 헥속시, 헵톡시 또는 옥톡시, 또한 메틸, 노닐, 데실, 운데실, 도데실, 트라이데실, 테트라데실, 펜타데실, 노녹시, 데록시, 운데록시, 도데록시, 트라이데록시 또는 테트라데록시이다.

[0088]

옥사알킬, 즉 하나의 CH_2 기가 $-O-$ 로 대체된 것은, 바람직하게는 예를 들어 직쇄 2-옥사프로필(=메톡시메틸), 2-(=에톡시메틸) 또는 3-옥사부틸(=2-메톡시에틸), 2-, 3- 또는 4-옥사펜틸, 2-, 3-, 4- 또는 5-옥사헥실, 2-, 3-, 4-, 5- 또는 6-옥사헵틸, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-옥사옥틸, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-옥사노닐 또는 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8- 또는 9-옥사데실이다.

[0089]

R^1 또는 R^2 가 알킬설파닐 라디칼, 즉 인접하는 기에 연결된 CH_2 기가 $-S-$ 로 대체된 알킬인 경우, 이는 직쇄 또는 분지형일 수 있다. 이는 바람직하게는 직쇄이고, 탄소수 1 내지 7이고 따라서 바람직하게는 예를 들어 메틸설파닐

파닐, 에틸설파닐, 프로필설파닐, 부틸설파닐, 펜틸설파닐, 헥실설파닐, 헵틸설파닐, 옥틸설파닐, 또한 노닐설파닐, 데실설파닐, 운데실설파닐 또는 도데실설파닐이다.

[0090] R^1 또는 R^2 가 티오카복실 또는 알킬설포닐카보닐 기, 즉 이웃하는 기에 연결된 CH_2 기가 $-CO-S-$ 또는 $-S-CO-$ 로 대체된 알킬일 경우, 이는 직쇄 또는 분지형일 수 있다. 이는 바람직하게는 직쇄이고, 탄소수 2 내지 8이고 따라서 바람직하게는 예를 들어 티오아세틸, 티오프로피오닐, 티오부티릴, 티오펜타노일, 티오헥사노일, 티오헵타노일, 티오옥타노일, 메틸설파닐카보닐, 에틸설파닐카보닐, 프로필설파닐카보닐, 부틸설파닐카보닐, 펜틸설파닐카보닐, 헥실설파닐카보닐 또는 헵틸설파닐카보닐이다.

[0091] R^1 또는 R^2 가 알킬설포닐 기, 즉 인접하는 기에 이웃하는 CH_2 기가 설포닐 기 $-SO_2-$ 로 대체된 알킬인 경우, 이는 직쇄 또는 분지형일 수 있다. 이는 바람직하게는 직쇄이고, 탄소수 1 내지 8이고 따라서 바람직하게는 예를 들어 메틸설퐤, 에틸설퐤, 프로필설퐤, 부틸설퐤, 펜틸설퐤, 헥실설퐤, 헵틸설퐤 또는 옥틸설퐤, 또한 노닐설퐤, 데실설퐤, 운데실설퐤 또는 도데실설퐤이다.

[0092] R^1 또는 R^2 가 하나 이상의 CH_2 기가 $-CH=CH-$ 로 대체된 알킬 기인 경우, 이는 직쇄 또는 분지형일 수 있다. 이는 바람직하게는 직쇄이고, 탄소수 2 내지 10이고 따라서 바람직하게는 비닐, 프로프-1- 또는 프로프-2-엔일, 부트-1-, 2- 또는 부트-3-엔일, 펜트-1-, 2-, 3- 또는 펜트-4-엔일, 헥스-1-, 2-, 3-, 4- 또는 헥스-5-엔일, 헵트-1-, 2-, 3-, 4-, 5- 또는 헵트-6-엔일, 옥트-1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 옥트-7-엔일, 논-1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 논-8-엔일, 데크-1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8- 또는 데크-9-엔일이다.

[0093] 특히 바람직한 알켄일기는 C_2-C_7-1E -알켄일, C_4-C_7-3E -알켄일, C_5-C_7-4 -알켄일, C_6-C_7-5 -알켄일 및 C_7-6 -알켄일, 특히 C_2-C_7-1E -알켄일, C_4-C_7-3E -알켄일, 및 C_5-C_7-4 -알켄일이다. 특히 바람직한 알켄일기의 예는 비닐, 1E-프로펜일, 1E-부텐일, 1E-펜텐일, 1E-헥센일, 1E-헵텐일, 3-부텐일, 3E-펜텐일, 3E-헥센일, 3E-헵텐일, 4-펜텐일, 4Z-헥센일, 4E-헥센일, 4Z-헵텐일, 5-헥센일, 6-헵텐일 등이다. 탄소수 5 이하의 기가 일반적으로 바람직하다.

[0094] R^1 또는 R^2 가, 하나의 CH_2 기가 $-O-$ 로 대체되고 하나는 $-CO-$ 로 대체된 알킬 기인 경우, 상기 라디칼은 바람직하게는 이웃한다. 따라서 상기 라디칼은 함께 카보닐옥시 기 $-CO-O-$ 또는 옥시카보닐 기 $-O-CO-$ 를 형성한다. 바람직하게는 상기 기는 직쇄이고 탄소수 2 내지 6이다.

[0095] 이는 따라서 바람직하게는 아세틸옥시, 프로피오닐옥시, 부티릴옥시, 펜타노일옥시, 헥사노일옥시, 아세틸옥시메틸, 프로피오닐옥시메틸, 부티릴옥시메틸, 펜타노일옥시메틸, 2-아세틸옥시에틸, 2-프로피오닐옥시에틸, 2-부티릴옥시에틸, 3-아세틸옥시프로필, 3-프로피오닐옥시프로필, 4-아세틸옥시부틸, 메톡시카보닐, 에톡시카보닐, 프로폭시카보닐, 부톡시카보닐, 펜톡시카보닐, 메톡시카보닐메틸, 에톡시카보닐메틸, 프로폭시카보닐메틸, 부톡시카보닐메틸, 2-(메톡시카보닐)에틸, 2-(에톡시카보닐)에틸, 2-(프로폭시-카보닐)에틸, 3-(메톡시카보닐)프로필, 3-(에톡시카보닐)프로필, 4-(메톡시카보닐)-부틸이다.

[0096] R^1 또는 R^2 가, 둘 이상의 CH_2 기가 $-O-$ 및/또는 $-COO-$ 로 대체된 알킬 기인 경우, 이는 직쇄 또는 분지형일 수 있다. 이는 바람직하게는 직쇄이고 탄소수 3 내지 12이다. 따라서 이는 바람직하게는 비스-카복시-메틸, 2,2-비스-카복시-에틸, 3,3-비스-카복시-프로필, 4,4-비스-카복시-부틸, 5,5-비스-카복시-펜틸, 6,6-비스-카복시-헥실, 7,7-비스-카복시-헵틸, 8,8-비스-카복시-옥틸, 9,9-비스-카복시-노닐, 10,10-비스-카복시-데실, 비스-(메톡시카보닐)-메틸, 2,2-비스-(메톡시카보닐)-에틸, 3,3-비스-(메톡시카보닐)-프로필, 4,4-비스-(메톡시카보닐)-부틸, 5,5-비스-(메톡시카보닐)-펜틸, 6,6-비스-(메톡시카보닐)-헥실, 7,7-비스-(메톡시카보닐)-헵틸, 8,8-비스-(메톡시카보닐)-옥틸, 비스-(에톡시카보닐)-메틸, 2,2-비스-(에톡시카보닐)-에틸, 3,3-비스-(에톡시카보닐)-프로필, 4,4-비스-(에톡시카보닐)-부틸, 5,5-비스-(에톡시카보닐)-헥실이다.

[0097] R^1 또는 R^2 가 CN 또는 CF_3 로 일치환된 알킬 또는 알켄일 기인 경우, 이는 바람직하게는 직쇄이다. CN 또는 CF_3 에 의한 치환은 임의의 목적하는 위치에 있을 수 있다.

[0098] R^1 또는 R^2 가 할로겐에 의해 적어도 일치환된 알킬 또는 알켄일 기인 경우, 이는 바람직하게는 직쇄이다. 할로겐은 바람직하게는 F 또는 Cl이고, 다중 치환의 경우 바람직하게는 F이다. 생성된 기는 또한 과불소화된 기를 포함한다. 일치환의 경우 F 또는 Cl 치환체는 임의의 목적하는 위치에 있을 수 있지만, 바람직하게는 ω-위치

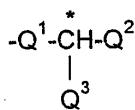
에 있다. 특히 바람직한 종결 F 치환체를 갖는 직쇄 기의 예는 플루오르메틸, 2-플루오르에틸, 3-플루오르프로필, 4-플루오르부틸, 5-플루오르펜틸, 6-플루오르헥실 및 7-플루오르헵틸이다. 그러나, F의 다른 위치가 배제되는 것은 아니다.

[0099] 할로겐은 바람직하게는 F 또는 Cl이다.

[0100] 화학식 1에서 R¹ 또는 R²는 극성 또는 비극성 기일 수 있다. 극성 기인 경우, 이는 CN, SF₅, 할로겐, OCH₃, SCN, COR⁵, COOR⁵ 또는 탄소수 1 내지 4의 모노-, 올리고- 또는 폴리불소화 알킬 또는 알콕시 기로부터 선택된다. R⁵는 임의적으로 불소화된 탄소수 1 내지 4, 바람직하게는 1 내지 3의 알킬이다. 특히 바람직한 극성 기는 F, Cl, CN, OCH₃, COCH₃, COC₂H₅, COOCH₃, COOC₂H₅, CF₃, CHF₂, CH₂F, OCF₃, OCHF₂, OCH₂F, C₂F₅ 및 OC₂F₅, 특히 F, Cl, CN, CF₃, OCHF₂ 및 OCF₃로부터 선택된다. 비극성 기의 경우, 이는 바람직하게는 탄소수 15 이하의 알킬 또는 탄소수 2 내지 15의 알콕시이다.

[0101] 화학식 1에서 R¹ 또는 R²는 비키랄 또는 키랄 기일 수 있다. 키랄 기의 경우 이는 바람직하게는 화학식 3으로부터 선택된다.

화학식 3



[0102]

[0103] 상기 식에서,

[0104] Q¹은 탄소수 1 내지 9의 알킬렌 또는 알킬렌-옥시 기 또는 단일 결합이고,

[0105] Q²는 비치환되거나 F, Cl, Br 또는 CN으로 일치환 또는 다치환될 수 있는 탄소수 1 내지 10의 알킬 또는 알콕시 기로서, 또한 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂ 기가 각각의 경우 서로 독립적으로, 산소 원자가 서로 직접 연결되지 않도록 하는 방식으로 -C≡C-, -O-, -S-, -NH-, -N(CH₃)-, -CO-, -COO-, -OCO-, -OCO-O-, -S-CO- 또는 -CO-S-로 대체될 수 있고,

[0106] Q³은 F, Cl, Br, CN, 또는 Q²에 대해 정의된 바와 같으나 Q²와는 상이한 알킬 또는 알콕시이다.

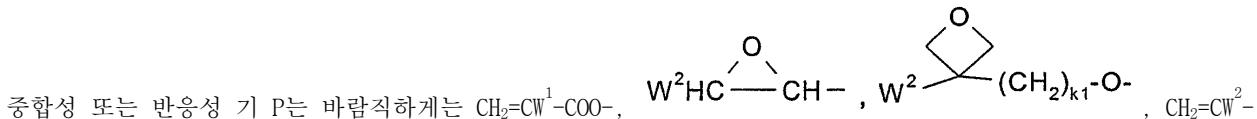
[0107] 화학식 3에서 Q¹이 알킬렌-옥시 기인 경우, O 원자는 바람직하게는 키랄 C 원자에 인접한다.

[0108] 화학식 3에서 바람직한 키랄 기는 2-알킬, 2-알콕시, 2-메틸알킬, 2-플루오로알킬, 2-플루오로알콕시, 2-(2-에틴)-알킬, 2-(2-에틴)-알콕시, 1,1,1-트라이플루오로-2-알킬 및 1,1,1-트라이플루오로-2-알콕시이다.

[0109] 특히 바람직한 키랄 기는 예를 들어 2-부틸(=1-메틸프로필), 2-메틸부틸, 2-메틸펜틸, 3-메틸펜틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, 특히 2-메틸부틸, 2-메틸부톡시, 2-메틸펜톡시, 3-메틸펜톡시, 2-에틸헥속시, 1-메틸헥속시, 2-옥틸옥시, 2-옥사-3-메틸부틸, 3-옥사-4-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 2-헥실, 2-옥틸, 2-노닐, 2-데실, 2-도데실, 6-메톡시옥톡시, 6-메틸옥톡시, 6-메틸옥타노일옥시, 5-메틸헵틸옥시카보닐, 2-메틸부티릴옥시, 3-메틸발레로일옥시, 4-메틸헥사노일옥시, 2-클로르프로파오닐옥시, 2-클로로-3-메틸부티릴옥시, 2-클로로-4-메틸발레릴옥시, 2-클로로-3-메틸발레릴옥시, 2-메틸-3-옥사펜틸, 2-메틸-3-옥사헥실, 1-메톡시프로필-2-옥시, 1-에톡시프로필-2-옥시, 1-프로포시프로필-2-옥시, 1-부톡시프로필-2-옥시, 2-플루오로옥틸옥시, 2-플루오로데실옥시, 1,1,1-트라이플루오로-2-옥틸옥시, 1,1,1-트라이플루오로-2-옥틸, 2-플루오로메틸옥틸옥시이다. 매우 바람직한 것은 2-헥실, 2-옥틸, 2-옥틸옥시, 1,1,1-트라이플루오로-2-헥실, 1,1,1-트ライ플루오로-2-옥틸 및 1,1,1-트라이플루오로-2-옥틸옥시이다.

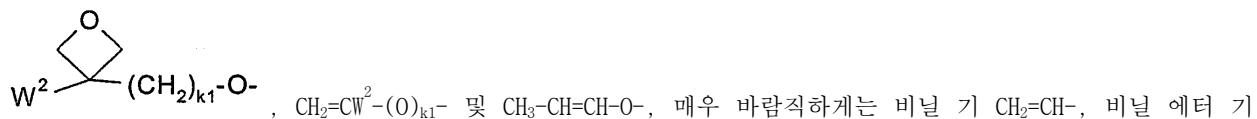
[0110] 또한, 비키랄 분자된 기 R¹ 또는 R²를 함유하는 화학식 1의 화합물이 종종 예를 들어 결정화 경향을 감소시키기 때문에 중요할 수 있다. 이러한 유형의 분자된 기는 일반적으로 하나 초과의 쇄 분자를 함유하지 않는다. 바람직한 비키랄 분자된 기는 아이소프로필, 아이소부틸(=메틸프로필), 아이소펜틸(=3-메틸부틸),

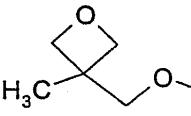
아이소프로록시, 2-메틸-프로록시 및 3-메틸부록시이다.



$(\text{O})_{k_1}-$, $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{O}-$, $(\text{CH}_2=\text{CH})_2\text{CH}-\text{OCO}-$, $(\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2)_2\text{CH}-\text{OCO}-$, $(\text{CH}_2=\text{CH})_2\text{CH}-\text{O}-$, $(\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2)_2\text{N}-$, $\text{HO}-\text{CW}^3-$, $\text{HS}-\text{CW}^2\text{W}^3-$, $\text{HW}^2\text{N}-$, $\text{HO}-\text{CW}^2\text{W}^3-\text{NH}-$, $\text{CH}_2=\text{CW}^1-\text{CO}-\text{NH}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-(\text{COO})_{k_1}\text{-Phe}-\text{(O})_{k_2}-$, $\text{Phe}-\text{CH}=\text{CH}-$, $\text{HOOC}-$, $\text{OCN}-$, 및 $\text{W}^4\text{W}^5\text{W}^6\text{Si}-$ 로부터 선택되고, 여기서, W^1 은 H, Cl, CN, 폐닐 또는 탄소수 1 내지 5의 알킬, 특히 H, Cl 또는 CH_3O 이고, W^2 및 W^3 은 서로 독립적으로 H 또는 탄소수 1 내지 5의 알킬, 특히 H, 메틸, 에틸 또는 n-프로필이고, W^4 , W^5 및 W^6 은 서로 독립적으로 Cl, 탄소수 1 내지 5의 옥사알킬 또는 옥사카보닐알킬이고, Phe는 1,4-폐닐렌이고, k_1 및 k_2 는 서로 독립적으로 0 또는 1이다.

[0112] 특히 바람직하게는 P는 카보닐 잔기를 갖지 않는 기이고, 바람직하게는 상기 정의된 바와 같은



$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{O}-$, 프로펜일 에터 기 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{O}-$ 또는 화학식 H_3C  $\text{O}-$ 의 옥세테인 기, 가장 바람직하게는 비닐 에터 기로부터 선택된다.

[0113] 스페이서 기 Sp에 대해서는, 당업자에게 이 목적에 대해 공지된 모든 기를 사용할 수 있다. 스페이서 기 Sp는 바람직하게는 화학식 $\text{Sp}'-\text{X}$ 의 기로, P-Sp 가 $\text{P-Sp}'-\text{X}-$ 가 되도록 하는 것이며, 여기서,

[0114] Sp' 은 비치환되거나 F, Cl, Br, I 또는 CN으로 일치환 또는 다치환된 탄소수 30 이하의 알킬렌으로서, 또한 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기가 각각의 경우 서로 독립적으로 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{NH}-$, $-\text{NR}^0-$, $-\text{SiR}^0\text{R}^{00}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-$, $-\text{OCO-O}-$, $-\text{S-CO}-$, $-\text{CO-S}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$ 또는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로, O 및/또는 S 원자가 서로 직접 연결되지 않도록 하는 방식으로 대체될 수 있고,

[0115] X는 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{O-COO}-$, $-\text{CO-NR}^0-$, $-\text{NR}^0-\text{CO}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{S}-$, $-\text{SCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CH}=\text{N}-$, $-\text{N}=\text{CH}-$, $-\text{N}=\text{N}-$, $-\text{CH}=\text{CR}^0$, $-\text{CY}^1=\text{CY}^2-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}-$, $-\text{OCO}-\text{CH}=\text{CH}-$ 또는 단일 결합이고,

[0116] R^0 , R^{00} , Y^1 및 Y^2 는 상기 주어진 의미중 하나를 갖는다.

[0117] X는 바람직하게는 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{SCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{S}-$, $-\text{CF}_2\text{O}-$, $-\text{OCF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{S}-$, $-\text{SCF}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CF}_2\text{CF}_2-$, $-\text{CH}=\text{N}-$, $-\text{N}=\text{CH}-$, $-\text{N}=\text{N}-$, $-\text{CH}=\text{CR}^0$, $-\text{CX}^1=\text{CX}^2-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 또는 단일 결합, 특히 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{CX}^1=\text{CX}^2-$ 또는 단일 결합이다. 다른 바람직한 실시양태에서 X는 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 또는 $-\text{CX}^1=\text{CX}^2-$ 와 같은 공액 시스템을 형성할 수 있는 기, 또는 단일 결합이다.

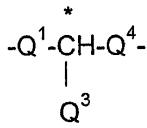
[0118] 전형적인 Sp' 기는 예를 들어 $-(\text{CH}_2)_p-$, $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_q-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{S}-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 또는 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{NH}-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 또는 $-(\text{SiR}^0\text{R}^{00}-\text{O})_p-$ (여기서, p는 2 내지 12의 정수이고, q는 1 내지 3의 정수이고, R^0 및 R^{00} 는 상기 주어진 의미를 갖는다)이다.

[0119] 바람직한 Sp' 기는 예를 들어 에틸렌, 프로필렌, 부틸렌, 펜틸렌, 헥실렌, 헵틸렌, 옥틸렌, 노닐렌, 데실렌, 운데실렌, 도데실렌, 옥타데실렌, 에틸렌옥시에틸렌, 메틸렌옥시부틸렌, 에틸렌-티오에틸렌, 에틸렌-N-메틸-이미

노에틸렌, 1-메틸알킬렌, 에텐일렌, 프로펜일렌 및 부텐일렌이다.

[0120] 다른 바람직한 실시양태에서 Sp'은 화학식 4의 키를 기이다.

화학식 4



[0121]

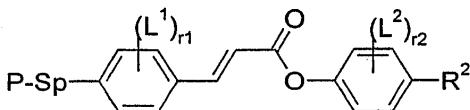
[0122] 상기 식에서, Q¹ 및 Q³은 화학식 3에 주어진 의미를 갖고, Q⁴는 Q¹과는 상이하며 탄소수 1 내지 10의 알킬렌 또는 알킬렌-옥시 기 또는 단일 결합이고, Q¹은 중합성 기 P에 연결되어 있다.

[0123] 또한 바람직한 것은 1 또는 2개의 P-Sp- 기를 갖고 Sp가 단일 결합인 화합물이다.

[0124] 2개의 P-Sp기를 갖는 화합물의 경우, 2개의 중합성 기 P 및 2개의 스페이서 기 Sp 각각은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0125] 특히 바람직한 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 1a의 화합물이다.

화학식 1a



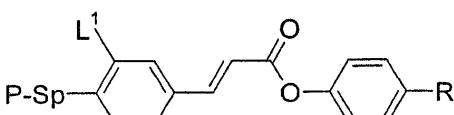
[0126]

[0127] 상기 식에서, P, Sp 및 R²는 화학식 1의 의미를 갖고, L¹ 및 L²는 서로 독립적으로 상기 주어진 L의 의미중 하나를 갖고, r1은 1, 2, 3 또는 4이고 r2는 0, 1, 2, 3 또는 4이다.

[0128] 특히 바람직한 것은 상기 화학식들에서 R²가 P-Sp-X인 화합물, 또한 R²가 F, Cl, CN 또는 탄소수 1 내지 8의 임의적으로 불소화된 알킬 또는 알콕시인 화합물이다. 또한 r1이 1 또는 2이고 r2가 0, 1 또는 2인 화합물이 바람직하다.

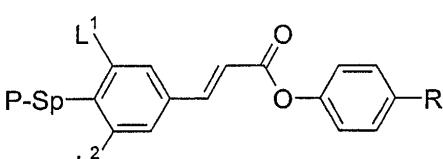
[0129] 특히 바람직한 화학식 1a의 화합물은 하기 화학식의 화합물이다.

화학식 1aa



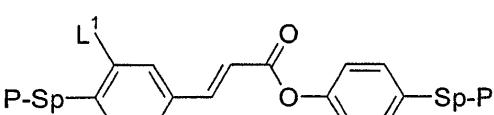
[0130]

화학식 1ab



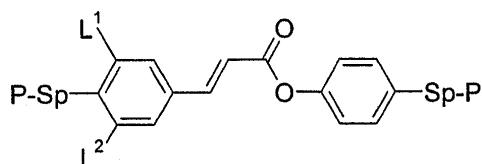
[0131]

화학식 1ac



[0132]

화학식 1ad



[0133]

- [0134] 상기 식에서, R은 P-Sp 이외의 R²의 의미중 하나를 갖고, 바람직하게는 Cl, CN 또는 탄소수 1 내지 8의 알킬 또는 알콕시이고, P-Sp는 상기 주어진 의미를 갖고, L¹ 및 L²는 상기 주어진 의미를 갖고, 바람직하게는 F, Cl, CN, CH₃, C₂H₅, OCH₃, COCH₃, OC₂H₅ 또는 OCF₃이다.

[0135]

화학식 1의 화합물은 널리 공지되고 예를 들어 문헌[Houben-Weyl, Methoden der organischen Chemie, Thieme-Verlag, Stuttgart]과 같은 유기 화학의 표준적인 작업에 기술된 방법에 따라 또는 그와 유사하게 합성될 수 있다. 일부 특정한 제조 방법은 실시예로부터 취할 수 있다.

[0136]

화학식 1의 화합물 및 이를 포함하는 중합성 액정 혼합물은 비등방성 중합체 필름 또는 코팅의 제조에 유용하다.

[0137]

비등방성 중합체 필름의 제조를 위해, 본 발명에 따른 액정 혼합물은 하나 이상의 중합성 화합물을 포함해야 하며, 이는 화학식 1의 화합물 또는 추가의 중합성 메소제닉 또는 액정 화합물일 수 있다.

[0138]

본 발명의 바람직한 실시양태에서 중합성 물질은 하나 이상의 이- 또는 다반응성 비키랄 중합성 메소제닉 화합물 및 하나 이상의 일반응성 비키랄 중합성 메소제닉 화합물을 포함한다.

[0139]

본 발명의 다른 바람직한 실시양태에서 중합성 물질은 둘 이상의 일반응성 비키랄 중합성 메소제닉 화합물을 포함한다.

[0140]

본 발명의 바람직한 실시양태에서 중합성 물질은 하나 이상의 이- 또는 다반응성 키랄 중합성 메소제닉 화합물 및 하나 이상의 일-, 이- 또는 다반응성 비키랄 중합성 메소제닉 화합물을 포함한다.

[0141]

본 발명의 다른 바람직한 실시양태에서 중합성 물질은 하나 이상의 일반응성 키랄 중합성 메소제닉 화합물 및 하나 이상의 일-, 이- 또는 다반응성 비키랄 중합성 메소제닉 화합물을 포함한다.

[0142]

본 발명의 다른 바람직한 실시양태에서 중합성 물질은 하나 이상의 비반응성 키랄 화합물 및 하나 이상의 일-, 이- 또는 다반응성 중합성 메소제닉 화합물을 포함한다.

[0143]

이- 또는 다반응성 화합물이 중합성 물질중에 존재하는 경우, 3차원 중합체 망상구조가 형성된다. 이러한 망상구조로 만들어진 광학 위상차 필름은 자기지지성이고 높은 기계적 및 열적 안정성 및 그의 물성 및 광학적 특성에 대한 낮은 온도 의존성을 나타낸다.

[0144]

이- 및 다반응성 화합물의 농도를 변화시킴에 의해 중합체 필름의 가교결합 밀도를 쉽게 조정할 수 있고, 따라서 광학 위상차 필름의 광학 특성의 온도 의존성에 또한 중요한 유리 전이 온도와 같은 그의 물리적 및 화학적 특성, 열적 및 기계적 안정성 또는 내용매성을 용이하게 조정할 수 있다.

[0145]

바람직한 중합성 LC 혼합물은 5 내지 100%의 화학식 1의 하나 이상의 화합물, 0 내지 80%, 바람직하게는 5 내지 50%의 하나 이상의 이반응성 비키랄 메소제닉 화합물, 5 내지 80%, 바람직하게는 5 내지 70%의 하나 이상의 일반응성 비키랄 메소제닉 화합물 및/또는 0 내지 20%의 하나 이상의 비반응성 키랄 화합물(메소제닉일 수 있음), 0 내지 15%, 바람직하게는 0.1 내지 10%, 매우 바람직하게는 0.5 내지 5%의 하나 이상의 광개시제(바람직하게는 이들중 하나 이상은 액정 광개시제임), 0 내지 10%의 하나 이상의 쇄 전달제, 0 내지 3%의 하나 이상의 비반응성, 일반응성, 이- 또는 다반응성 계면활성제를 포함한다.

[0146]

본 발명에 사용하기 위한 중합성 메소제닉 일-, 이- 및 다반응성 화합물은 공지되고 예를 들어 문헌[Houben-Weyl, Methoden der organischen Chemie, Thieme-Verlag, Stuttgart]과 같은 유기 화학의 표준 작업에 기술된 방법에 의해 제조될 수 있다.

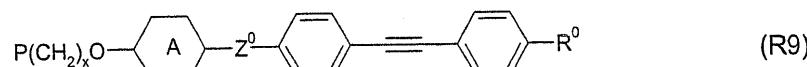
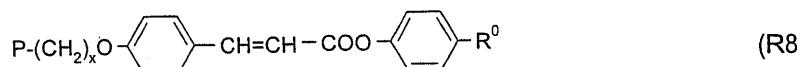
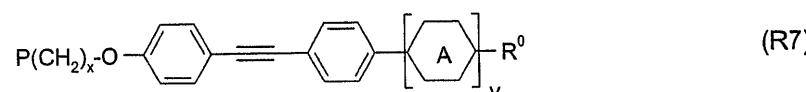
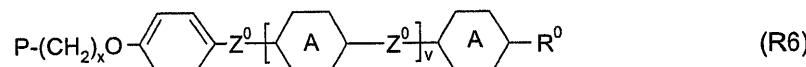
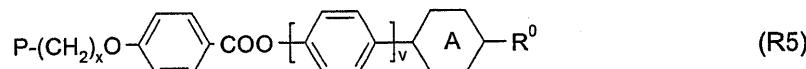
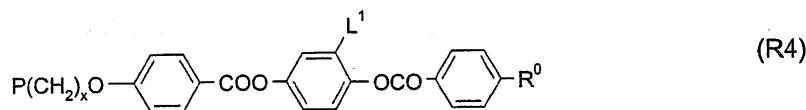
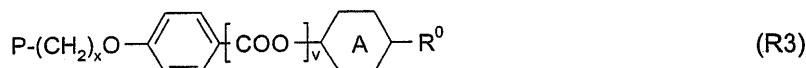
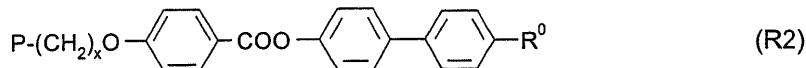
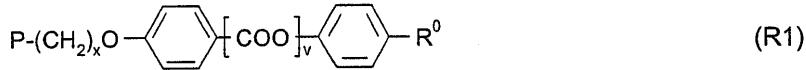
[0147]

본 발명에 따른 중합성 LC 혼합물중의 단량체 또는 공단량체로서 사용될 수 있는 적합한 중합성 메소제닉 화합

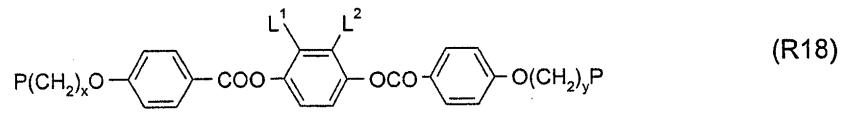
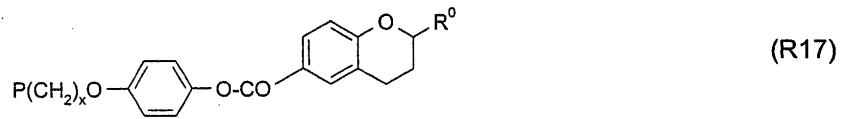
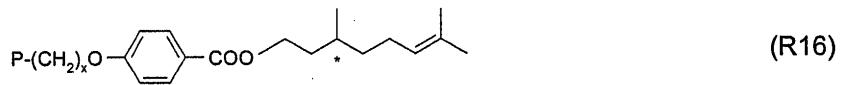
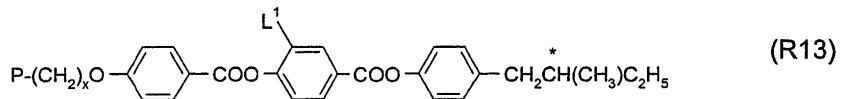
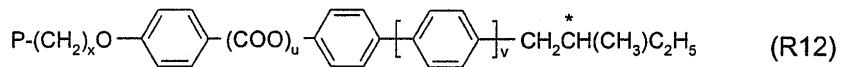
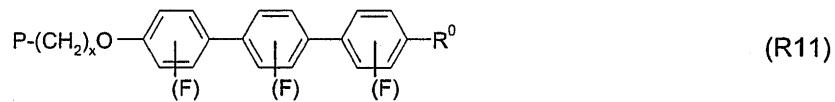
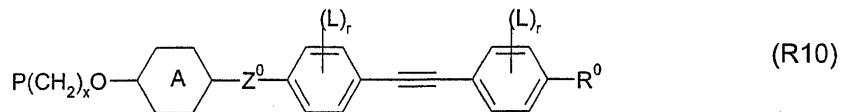
물의 예는 예를 들어 WO 93/22397호, EP 0 261 712호, DE 195 04 224호, WO 95/22586호, WO 97/00600호 및 GB 2 351 734호에 개시되어 있다. 그러나, 상기 문헌에 개시된 화합물은 단지 예로서 고려되는 것이며 본 발명의 범위를 한정해서는 안 된다.

[0148]

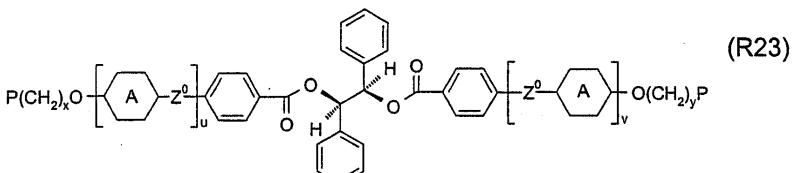
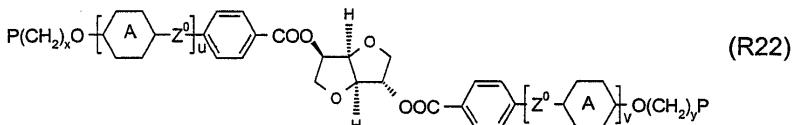
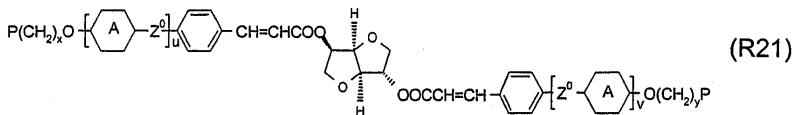
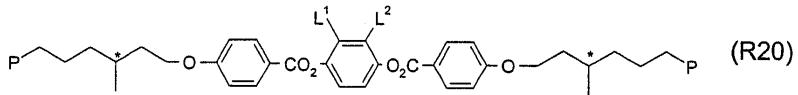
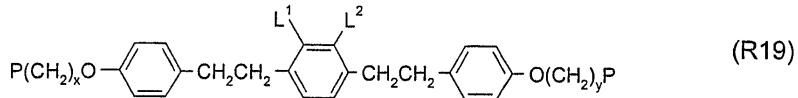
특히 유용한 키랄 및 비키랄 중합성 메소체닉 화합물(반응성 메소젠)의 예를 하기 목록에 나타내지만, 이들은 예시만을 위한 것이며 본 발명을 제한하고자 하는 대신 설명하고자 하는 것임을 알아야 한다.



[0149]



[0150]



[0151]

[0152] 상기 화학식들에서, P는 중합성 기, 바람직하게는 아크릴, 메타크릴, 비닐, 비닐옥시, 프로펜일 에터, 에폭시, 옥세테인 또는 스티릴 기이고, x 및 y는 1 내지 12의 동일하거나 상이한 정수이고, A는 L¹로 임의적으로 일치환, 이치환 또는 삼치환된 1,4-페닐렌, 또는 1,4-사이클로헥실렌이고, u 및 v는 서로 독립적으로 0 또는 1이고, Z⁰는 -COO-, -OCO-, -CH₂CH₂- , -CH=CH-, -C≡C- 또는 단일 결합이고, R⁰는 극성 기 또는 비극성 기이고, Ter는 예컨대 펜틸과 같은 터페노이드 라디칼이고, Chol은 콜레스테릴 기이고, L, L¹ 및 L²는 서로 독립적으로 H, F, Cl, CN 또는 탄소수 1 내지 7의 임의적으로 할로겐화된 알킬, 알콕시, 알킬카보닐, 알킬카보닐옥시, 알콕시카보닐 또는 알콕시카보닐옥시 기이고, r은 0, 1, 2, 3 또는 4이다. 상기 화학식들에서 페닐 기는 1, 2, 3 또는 4개의 L기로 임의적으로 치환된다.

[0153] 이와 관련하여 '극성 기'라는 용어는 F, Cl, CN, NO₂, OH, OCH₃, OCN, SCN, 탄소수 4 이하의 임의적으로 불소화된 알킬카보닐, 알콕시카보닐, 알킬카보닐옥시 또는 알콕시카보닐옥시 기 또는 탄소수 1 내지 4의 모노-, 올리고- 또는 폴리불소화된 알킬 또는 알콕시 기로부터 선택된 기를 의미한다. '비극성 기'라는 용어는 '극성 기'에 대한 상기 정의에 포함되지 않는 탄소수 1 이상, 바람직하게는 1 내지 12의 임의적으로 할로겐화된 알킬, 알콕시, 알킬카보닐, 알콕시카보닐, 알킬카보닐옥시 또는 알콕시카보닐옥시 기를 의미한다.

[0154] 적합한 키랄 도판트는 예컨대 상업적으로 구입가능한 R- 또는 S-811, R- 또는 S-1011, R- 또는 S-2011, R- 또는 S-3011, R- 또는 S-4011, R- 또는 S-5011, 또는 CB 15(독일 다름슈타트 메르크 카게아아(Merck KGaA) 제)로부터 선택될 수 있다. 매우 바람직한 것은 높은 나선 비틀림 파워(HTP)를 갖는 키랄 화합물, 특히 WO 98/00428호에 기술된 바와 같은 소비톨 기를 포함하는 화합물, GB 2,328,207호에 기술된 바와 같은 하이드로벤조인 기를 포함하는 화합물, WO 02/94805호에 기술된 바와 같은 키랄 바이나프틸 유도체, WO 02/34739호에 기술된 바와 같은 키랄 바이나프톨 아세탈 유도체, WO 02/06265호에 기술된 바와 같은 키랄 TADDOL 유도체, 및 WO 02/06196호 및 WO 02/06195호에 기술된 바와 같은 하나 이상의 불소화된 연결 기 및 종결 또는 중심 키랄 기를 갖는 키랄 화합물이다.

[0155] 화학식 1의 화합물의 광이성질화를 유발시키는데 사용되는 광조사는 바람직하게는 UV-A 범위(320-400nm)의 광장 또는 365nm의 광장을 갖는 UV-조사이다.

[0156] 중합체 필름의 제조를 위해, 중합성 LC 물질을 바람직하게는 기판상에 코팅하고, 균일한 배향으로 정렬시키고 중합시켜 콜레스테릭 구조를 영구적으로 고정시킨다. 기판으로서는 예를 들어 유리 또는 석영 시이트 또는 플

라스틱 필름 또는 시이트를 사용할 수 있다. 또한 코팅된 혼합물의 상부에 중합 전 및/또는 동안 및/또는 후에 제 2 기판을 놓을 수 있다. 기판들은 중합 후에 제거되거나 그렇지 않을 수 있다. 화학선 조사에 의한 경화의 경우 두 개의 기판을 사용할 때, 기판중 하나 이상은 중합을 위해 사용되는 화학선 조사에 대해 투과성이어야 한다. 등방성 또는 복굴절성 기판이 사용될 수 있다. 기판을 중합 후에 중합된 필름으로부터 제거하지 않는 경우, 바람직하게는 등방성 기판을 사용한다.

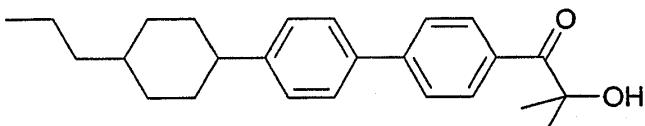
[0157] 바람직하게는 하나 이상의 기판은 예를 들어 폴리에틸렌테레프탈레이트(PET) 또는 폴리에틸렌나프탈레이트(PE N)와 같은 폴리에스터, 폴리비닐알콜(PVA), 폴리카보네이트(PC) 또는 트라이아세틸셀룰로즈(TAC) 필름과 같은 플라스틱 기판이고, 특히 바람직하게는 PET 필름 또는 TAC 필름이다. 복굴절성 기판으로서는 예를 들어 일축연신된 플라스틱 필름을 사용할 수 있다. 예를 들어 PET 필름은 듀퐁 테이진 필름(Dupont Teijin Films)으로부터 상표명 멜리넥스(Melinex^R)로 구입가능하다.

[0158] 중합성 물질은 또한 용매, 바람직하게는 유기 용매에 용해될 수 있다. 이후 용액을 기판상에 예를 들어 스판-코팅 또는 다른 공지된 기법에 의해 코팅하고, 용매를 증발시킨 후 중합시킨다. 대부분의 경우에 용매의 증발을 용이하게 하기 위해 혼합물을 가열하는 것이 적합하다.

[0159] LC 물질의 중합은 바람직하게는 열 또는 화학선 조사에 노출시킴으로써 달성된다. 화학선 조사는 광(예컨대 UV 광, IR광 또는 가시광)의 조사, X선 또는 감마선 조사 또는 이온 또는 전자와 같은 고에너지 입자의 조사를 의미한다. 바람직하게는 중합은 광조사에 의해 수행되며, 특히 UV광, 매우 바람직하게는 선형 편광된 UV광을 사용한다. 화학선 조사원으로서는 예를 들어 단일 UV 램프 또는 UV 램프 세트를 사용할 수 있다. 높은 램프 출력을 사용할 경우 경화 시간이 단축될 수 있다. 다른 가능한 광조사원은 레이저, 예컨대 UV 레이저, IR 레이저 또는 가시 레이저이다.

[0160] 중합은 화학선 조사의 과정에서 흡수하는 개시제의 존재하에 수행되는 것이 바람직하다. 예를 들어, UV 광을 사용하여 중합시킬 경우, UV 조사하에 분해되어 자유 라디칼 또는 이온을 생성하여 중합 반응을 출발시키는 광개시제를 사용할 수 있다. UV 광개시제, 특히 라디칼 UV 광개시제가 바람직하다.

[0161] 바람직하게는 중합성 혼합물은 하나 이상의 통상적인 또는 액정 광개시제를 포함한다. 라디칼 중합을 위한 표준 광개시제로서는 예를 들어 상업적으로 구입가능한 이르가큐어(등록상표)(Irgacure^R) 651, 이르가큐어(등록상표) 184, 다로큐어(등록상표)(Darocure^R) 1173 또는 다로큐어(등록상표) 4205(모두 시바 가이기 아게(Ciba Geigy AG) 제)를 사용할 수 있으나, 양이온성 광중합의 경우 상업적으로 구입가능한 UVI 6974(유니온 카바이드(Union Carbide))를 사용할 수 있다. LC 광개시제로서는 예를 들어 EP-A-1388538호에 개시된 화합물중 하나 또는 하기 화합물을 사용할 수 있다.



[0162]

[0163] 경화 시간은 특히 중합성 물질의 반응성, 코팅된 층의 두께, 중합 개시제의 유형 및 UV 램프의 출력에 좌우된다. 본 발명에 따른 경화 시간은 바람직하게는 10분 이하, 특히 바람직하게는 5분 이하이고 매우 바람직하게는 2분보다 짧다. 대량 생산을 위해서는 3분 이하, 매우 바람직하게는 1분 이하, 특히 30초 이하의 짧은 경화 시간이 바람직하다.

[0164] 중합성 LC 물질은 하나 이상의 다른 적당한 성분, 예를 들어 촉매, 중감제, 안정화제, 쇄전달제, 억제제, 가속제, 공반응 단량체, 표면활성 화합물, 윤활제, 습윤제, 분산제, 소수제, 접착제, 유동 개선제, 소포제, 탈기제(deaerator), 희석제, 반응성 희석제, 보조제, 착색제, 염료 또는 안료를 더 포함할 수 있다.

[0165] 또한, 혼합물은 중합에 사용되는 조사의 과정에 조정된 최대 흡광도를 갖는 하나 이상의 염료, 특히 예컨대 4,4'-아족시 아니솔 또는 상업적으로 구입가능한 티누빈(Tinuvin)(스위스 바젤 소재 시바 아게(Ciba AG) 제조)과 같은 UV 염료를 포함할 수 있다.

[0166] 다른 바람직한 실시양태에서 중합성 물질의 혼합물을 하나의 중합성 작용기를 갖는 70% 이하, 바람직하게는 1 내지 50%의 하나 이상의 비-메소제닉 화합물을 포함한다. 전형적인 예는 알킬아크릴레이트 또는 알킬메타크릴레이트이다.

- [0167] 또한, 중합체의 가교결합을 증가시키기 위해, 둘 이상의 중합성 작용기를 갖는 20% 이하의 하나 이상의 비-메소제닉 화합물을 이- 또는 다반응성 중합성 메소제닉 화합물 대신에 또는 이에 부가적으로 중합성 LC 물질에 첨가하여 중합체의 가교결합을 증가시킨다. 이반응성 비-메소제닉 단량체의 전형적인 예는 탄소수 1 내지 20의 알킬 기를 갖는 알킬다이아크릴레이트 또는 알킬다이메타크릴레이트이다. 다반응성 비-메소제닉 단량체의 전형적인 예는 트라이메틸프로판트라이메타크릴레이트 또는 펜타에리트리톨테트라아크릴레이트이다.
- [0168] 또한, 본 발명의 중합체 필름의 물성을 개질하기 위해 하나 이상의 쇄전달체를 중합성 물질에 첨가할 수 있다. 특히 바람직한 것은 티올 화합물, 예컨대 도데케인 티올과 같은 일작용성 티올 화합물 또는 예컨대 트라이메틸프로판 트라이(3-머캅토프로피오네이트)와 같은 다작용성 티올 화합물, 매우 바람직하게는 예를 들어 WO 96/12209호, WO 96/25470호 또는 US 6,420,001호에 개시된 것과 같은 메소제닉 또는 액정 티올 화합물이다. 쇄 전달체를 첨가하는 경우, 자유 중합체 쇄의 길이 및/또는 본 발명의 중합체 필름중의 두 가교결합 사이의 중합체 쇄의 길이는 제어될 수 있다. 쇄 전달체의 양이 증가할 경우, 수득된 중합체 필름중의 중합체 쇄 길이는 감소한다.
- [0169] 중합체 필름을 제조할 경우, 중합성 물질의 균일한 정렬을 달성하는 것이 일반적으로 필요하다. 예를 들어, 일부 용도에서는 평면 정렬, 즉 비키랄 물질의 경우 LC 지향자가 필름 평면에 평행하게 배향되는 정렬, 또는 콜레스테릭 물질의 경우 콜레스테릭 나선축이 필름 평면에 실질적으로 수직하게 배향되는 정렬이 필요하다. 평면 정렬은 예를 들어 물질을 예컨대 닥터 블레이드를 사용하여 전단시킴으로써 달성될 수 있다. 또한 기판들중 하나 이상의 상부에 정렬층, 예를 들어 러빙(rubbing)된 폴리이미드 또는 스퍼터링된 SiO_x 의 층을 도포할 수도 있다. 평면 정렬은 또한 추가의 정렬층을 도포하지 않고 기판을 예컨대 러빙 천 또는 러빙 롤러로 러빙시킴으로써 달성될 수 있다. 낮은 경사각을 갖는 평면 정렬은 또한 하나 이상의 계면활성제를 중합성 메소제닉 물질에 첨가함으로써 달성될 수 있다. 적합한 계면활성제는 예를 들어 문헌[J. Congnard, Mol.Cryst.Liq.Cryst. 78, Supplement 1, 1-77(1981)]에 기술되어 있다. 특히 바람직한 것은 비이온성 계면활성제, 예컨대 비이온성 플루오로카본 계면활성제, 예를 들어 상업적으로 시판되는 플루오라드(등록상표)(Fluorad^R(쓰리엠(3M)), 또는 조닐(Zony1) FSN^R(듀퐁), 또는 EP 1 256 617 A1호에 개시된 바와 같은 중합성 계면활성제이다. 또한 바람직한 것은 GB 2 383 040 A호에 개시된 바와 같은 멀티블록 계면활성제이다.
- [0170] 일부 경우에 정렬을 보조하고 중합을 억제할 수 있는 산소를 배제하기 위해 제 2 기판을 적용하는 것이 유리하다. 다르게는 경화는 불활성 기체의 분위기하에 수행될 수 있다. 그러나, 적당한 광개시제 및 높은 UV 램프 출력을 사용하여 공기 중에서 경화시키는 것도 가능하다. 양이온성 광개시제를 사용할 경우, 산소 배제는 대개 필요하지 않으나, 물이 배제되어야 한다. 본 발명의 바람직한 실시양태에서 중합성 물질의 중합은 불활성 기체의 분위기하에, 바람직하게는 질소 분위기하에 수행된다.
- [0171] 또한, 화학식 1의 화합물은 예를 들어 집적 회로의 구성요소로서의 전계 효과 트랜지스터(FET)와 같은 전자 장치에서, 평판 디스플레이 분야에서의 또는 무선 주파수 확인(FRID) 태그를 위한 박막 트랜지스터에서, 전기발광 디스플레이 또는 예컨대 액정 디스플레이의 백라이트와 같은 유기 발광 다이오드(OLED)용 반도체 커먼포넌트에서, 광전지 또는 센서 장치, 광전도체, 또는 전자사진 기록 장치와 같은 전자사진용으로 사용될 수 있는 반도체 또는 전하 담체 특성을 갖는 액정 물질을 위한 공단량체로서 적합하다.
- [0172] 예를 들어, 중합성 액정 화합물을 포함하는 반도체는 WO 00/79617호, JP-A-2000-347432호, JP-A-11-209761호, 문헌[Sirringhaus et al., Appl. Phys. Lett., 77(3)(2000) 406-408] 및 문헌[Grell et al., J. Korean Phys. Soc. 2000, 36(6), 331]에 개시되어 있다. 액정 물질을 사용하는 전기발광 장치는 예를 들어 WO 95/17018호 및 WO 95/04306호에 기술되어 있다. 액정 특성을 갖는 유기 광전도체는 예를 들어 EP 0 563 768호 및 EP 0 527 376호에 기술되어 있다.
- [0173] 본 발명의 다른 목적은 화학식 1의 하나 이상의 화합물을 포함하는 액정 혼합물, 특히 네마틱 액정 혼합물이다.
- [0174] 본 발명의 또 다른 목적은 화학식 1의 하나 이상의 화합물을 함유하는 액정 매질을 포함하는 액정 디스플레이이다.
- [0175] 상기 용도를 위해 액정 혼합물은 바람직하게는 화학식 1의 하나 이상의 화합물, 및 하나 이상의 네마틱 또는 네마토젠성 화합물을 포함하는 네마틱 호스트 혼합물을 함유한다.
- [0176] 바람직하게는 액정 혼합물은 그중 1종 이상이 화학식 1의 화합물인 2 내지 25종, 바람직하게는 3 내지 15종의 화합물로 구성된다. 네마틱 호스트 혼합물을 형성하는 나머지 화합물들은 바람직하게는 네마틱 또는 네마토젠

성 물질로부터 선택된 저분자량 액정 화합물이고, 예를 들어 아족시벤젠, 벤질리텐-아닐린, 바이페닐, 터페닐, 폐닐 또는 사이클로헥실 벤조에이트, 사이클로헥산카복실산의 폐닐 또는 사이클로헥실 에스터, 사이클로헥실벤조산의 폐닐 또는 사이클로헥실 에스터, 사이클로헥실사이클로헥산카복실산의 폐닐 또는 사이클로헥실 에스터, 벤조산의 사이클로헥실페닐 에스터, 사이클로헥산카복실산의 사이클로헥실페닐 에스터 및 사이클로헥실사이클로헥산카복실산의 사이클로헥실페닐 에스터, 폐닐사이클로헥산, 사이클로헥실바이페닐, 폐닐사이클로헥실사이클로헥산, 사이클로헥실사이클로헥산, 사이클로헥실사이클로헥센, 사이클로헥실사이클로헥실사이클로헥센, 1,4-비스-사이클로헥실벤젠, 4,4'-비스-사이클로헥실바이페닐, 폐닐- 또는 사이클로헥실피리미딘, 폐닐- 또는 사이클로헥실피리미딘, 폐닐- 또는 사이클로헥실피리다진, 폐닐- 또는 사이클로헥실다이옥세인, 폐닐- 또는 사이클로헥실-1,3-다이티안, 1,2-다이페닐-에탄, 1,2-다이사이클로헥실에탄, 1-폐닐-2-사이클로헥실에탄, 1-사이클로헥실-2-(4-폐닐사이클로헥실)-에탄, 1-사이클로헥실-2-바이페닐-에탄, 1-폐닐-2-사이클로헥실페닐에탄, 임의적으로 할로겐화된 스틸벤, 벤질 폐닐 에터, 툴레인, 치환된 신남산 및 네마틱 또는 네마토젠성 물질의 추가의 부류의 공지된 부류로부터 선택된 것들이다. 상기 화합물중의 1,4-페닐렌 기는 또한 측방향으로 일불소화 또는 이불소화 될 수 있다.

- [0177] 상기 바람직한 실시양태의 액정 혼합물은 상기 유형의 비키랄 화합물을 기본으로 한다.
- [0178] 상기 액정 혼합물의 성분으로서 가능한 가장 중요한 화합물은 하기 화학식을 특징으로 할 수 있다.
- [0179] R'-L'-G'-E-R"
- [0180] 상기 식에서, L' 및 E는 동일하거나 상이할 수 있으며 각각의 경우에 서로 독립적으로 -Phe-, -Cyc-, -Phe-Phe-, -Phe-Cyc-, -Cyc-Cyc-, -Pyr-, -Dio-, -B-Phe- 및 -B-Cyc- 및 이들의 거울상으로 형성된 기로부터의 2가 라디칼이고, 여기서 Phe는 비치환되거나 불소-치환된 1,4-페닐렌이고, Cyc는 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 또는 1,4-사이클로헥세닐렌이고, Pyr은 피리미딘-2,5-다이일 또는 피리딘-2,5-다이일이고, Dio는 1,3-다이옥세인-2,5-다이일이고, B는 2-(트랜스-1,4-사이클로헥실)에틸, 피리미딘-2,5-다이일, 피리딘-2,5-다이일 또는 1,3-다이옥세인-2,5-다이일이다.
- [0181] 상기 화합물에서 G'은 하기 2가 기 -CH=CH-, -N(O)N-, -CH=CY-, -CH=N(O)-, -C≡C-, -CH₂-CH₂-, -CO-O-, -CH₂-O-, -CO-S-, -CH₂-S-, -CH=N-, -COO-Phe-COO- 또는 단일 결합으로부터 선택되고, Y는 할로겐, 바람직하게는 염소, 또는 -CN이다.
- [0182] R' 및 R"은 각각의 경우에 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 18, 바람직하게는 3 내지 12의 알킬, 알켄일, 알콕시, 알켄일옥시, 알카노일옥시, 알콕시카보닐 또는 알콕시카보닐옥시이거나, 다르게는 R' 및 R"중 하나는 F, CF₃, OCF₃, Cl, NCS 또는 CN이다.
- [0183] 상기 화합물 대부분에서, R' 및 R"은 각각의 경우 서로 독립적으로, 네마틱 매질중의 탄소수의 합이 일반적으로 2 내지 9, 바람직하게는 2 내지 7인 상이한 쇄 길이의 알킬, 알켄일 또는 알콕시이다.
- [0184] 상기 화합물 또는 그의 혼합물중 많은 것들이 상업적으로 구입가능하다. 상기 화합물 모두는 그 자체로 공지되었거나 문헌(예를 들어 문헌[Houben-Weyl, Methoden der Organischen Chemie [Methods of Organic Chemistry], Georg-Thieme-Verlag, Stuttgart]과 같은 표준 작업에서)에 기술된 바와 같은 방법에 의해, 공지되고 그 반응에 적합한 반응 조건에 맞도록 제조될 수 있다. 공지되어 있으나 본원에서 언급되지 않은 변형물이 본원에서 사용될 수도 있다.
- [0185] 화학식 1의 화합물은 예를 들어 TN 또는 STN 디스플레이, 능동 매트릭스 디스플레이, VAN(수직 정렬 네마틱) 또는 VAC(수직 정렬 콜레스테릭)과 같은 IPS(면내 스위칭) 또는 VA(수직 정렬) 모드의 디스플레이, ECB(전기적으로 제어된 복굴절률), DAP(정렬된 상의 변형), CSH(컬러 초 호메오토로픽) 또는 ASM(축 대칭 마이크로셀) 모드의 디스플레이, 상-변화, 게스트-호스트, 플렉소일렉트릭(flexoelectric), 강유전성 디스플레이, 이중안정성 네마틱 및 콜레스테릭 디스플레이, 예컨대 PSCT(중합체 안정화된 콜레스테릭 텍스쳐), 또는 PDLC, 중합체 겔 또는 중합체 망상구조 디스플레이와 같은 디스플레이용 액정 혼합물에 사용될 수 있다.
- [0186] 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물 및 중합성 액정 혼합물은 예를 들어 US 5,602,661호에 기술된 바와 같은 선형 편광 광의 조사를 사용하는 광정렬에 의해 상이한 배향을 갖는 지역의 패턴을 갖는 정렬층 또는 광학 필름의 제조, 또는 WO 98/57223호에 개시된 바와 같은 콜레스테릭 또는 멀티-도메인 액정 디스플레이의 제조에 특히 적합하다.

- [0187] 또한, 이들은 예를 들어 EP 1 247 796호, EP 1 247 797호 및 EP 1 295 929호에 기술된 바와 같은 비틀림 방향 (sense), 반사 파장 및 복굴절률로부터 선택된 하나 이상의 특성이 상이한 둘 이상의 지역의 패턴을 갖는 콜레스테릭 구조를 갖는 중합체 필름의 제조에, 또는 넓은 반사 밴드폭을 갖는 콜레스테릭 필름의 제조에 적합하다. 상기 필름은 예를 들어 보안 마킹으로서 또는 컬러 필터 또는 위상차판과 같은 LC 디스플레이(LCD)용 광학 필름으로서, 특히 LCD중의 셀내(in-cell) 용도, 즉 디스플레이의 스위칭가능한 LC 셀 내측의 용도를 위해 사용될 수 있다.
- [0188] 화학식 1의 화합물은 또한 예를 들어 EP 03007017.2 또는 EP 03007918.0호에 기술된 바와 같이 상이한 배향 및/ 또는 위상차를 갖는 지역 또는 영역의 패턴을 포함하는 필름의 제조를 위해 사용될 수 있다.
- [0189] 따라서, 본 발명은 또한 상기 및 하기에 기술된 바와 같은 비등방성 중합체 필름에 관한 것이고, 이는 화학식 1의 하나 이상의 화합물로부터 또는 화학식 1의 하나 이상의 화합물을 포함하는 중합성 LC 물질로부터 수득되며, 상기 필름은 비틀림 방향, 반사 파장, 복굴절률 및 위상차로부터 선택된 하나 이상의 특성이 상이한 둘 이상의 지역의 패턴을 갖는 것을 특징으로 한다.
- [0190] 본 발명의 특히 바람직한 실시양태는 하나 이상의 광이성질화가능한 화합물을 포함하는 중합된 액정(LC) 물질을 포함하는 필름에 관한 것으로, 상기 필름은 LC 물질의 상이한 위상차를 갖는 둘 이상의 지역 또는 영역 및/또는 상이한 배향을 갖는 둘 이상의 지역 또는 영역을 포함하고 상기 물질은 화학식 1의 하나 이상의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다. 특히 바람직한 것은 LC 물질의 상이한 위상차를 갖는 둘 이상의 지역 및 상이한 배향을 갖는 둘 이상의 지역을 포함하는 패턴화된 필름이다.
- [0191] 또한 바람직한 것은 패턴화된 위상차 필름, 예를 들어 패턴화된 1/4 파장 필름(QWF) 또는 1/2 파장 필름(HWF)이다. 특히 바람직한 것은 특정한 위상차, 예컨대 1/4 또는 1/2 파장 위상차를 갖는 영역 및 위상차가 없는 영역의 패턴을 갖는 필름, 또는 상이한 위상차 값을 갖는 영역의 패턴을 갖는 필름이다.
- [0192] 상기 필름은 바람직하게는 본 발명의 또 다른 목적인 하기 단계를 포함하는 방법에 의해 제조된다:
- [0193] a) 기관 상에 화학식 1의 하나 이상의 광이성질화가능한 화합물을 포함하는 중합성 LC 물질의 층을 제공하는 단계,
- [0194] b) LC 물질의 층을 평면 배향으로 정렬시키는 단계,
- [0195] c) 층중의, 또는 층의 선택된 지역중의 LC 물질을 광조사, 바람직하게는 UV 조사에 노출시켜 이성질화가능한 화합물의 이성질화를 유발시키는 단계,
- [0196] d) 상기 물질의 노출된 지역의 적어도 일부에서 LC 물질을 중합시킴으로써 배향을 고정시키는 단계, 및
- [0197] e) 임의적으로 중합된 필름을 기관으로부터 제거하는 단계,
- [0198] 여기서, LC 물질의 위상차 및/또는 배향은 광이성질화가능한 화합물의 양 및/또는 유형을 변화시키고/시키거나 광조사의 조사량 및/또는 노출 시간을 변화시킴에 의해 제어한다.
- [0199] 또한, 본 발명의 또 다른 목적인 하기 단계를 포함하는 방법에 의해 상이한 배향을 갖는 중합된 LC 물질의 둘 이상의 층을 포함하는 다층을 제조할 수 있다.
- [0200] A) 기관 상에 화학식 1의 하나 이상의 광이성질화가능한 화합물을 포함하는 중합성 LC 물질의 제 1 층을 제공하는 단계,
- [0201] B) LC 물질의 제 1 층을 평면 배향으로 정렬시키고 물질을 중합시킴으로써 배향을 고정시키는 단계,
- [0202] C) 단계 A) 및 B)에 기술된 바와 같이 LC 물질의 제 2 층을 제공하되, 제 1 층이 기관의 역할을 하는 단계,
- [0203] 여기서, 상기 제 1 및 제 2 층 중 하나 이상, 또는 그의 선택된 지역의 LC 물질은 중합 전에 이성질화가능한 화합물의 이성질화를 유발하는 광조사, 바람직하게는 UV 조사에 노출된다.
- [0204] 또한, 본 발명은 상기 방법에 의해 수득된 필름 또는 다층에 관한 것이다.
- [0205] 패턴화된 필름은 바람직하게는 상기 a) 내지 e)의 단계를 포함하는 방법에 의해 제조된다. a) 내지 e) 단계는 전문가에게 공지되고 문헌에 기술된 표준 방법에 따라, 또는 전술된 방법에 따라 수행될 수 있다. 상기 방법에서, 중합성 LC 물질은 광이성질화가능한 화합물, 바람직하게는 광이성질화가능한 메소제닉 또는 LC 화합물, 매우 바람직하게는 또한 중합가능한 광이성질화가능한 화합물을 포함한다. 이성질화가능한 화합물은 특정 파장의

조사, 예컨대 UV 조사에 노출될 때 예컨대 E-Z-이성질화에 의해 그의 형상을 변화시킨다. 이는 LC 물질의 균일한 평면 배향의 붕괴를 가져와, 그의 복굴절률의 하락을 초래한다. 배향된 LC 층의 광학 위상차가 층 두께 d 와 LC 물질의 복굴절률 Δn 의 곱 $d \cdot \Delta n$ 으로 주어지므로, 복굴절률의 하락은 또한 LC 물질의 조사된 부분의 위상차의 감소를 초래한다. 이후 LC 물질의 배향 및 위상차는 조사된 지역 또는 전체 필름의 동일반응계 중합에 의해 고정된다.

[0206] 이성질화의 정도 및 따라서 LC 물질의 층에서의 복굴절률 변화는 예컨대 조사량, 조사 강도, 조사 시간 및/또는 출력을 변화시킴으로써 제어할 수 있다. 또한, 조사원과 LC 층 사이에 포토마스크를 적용함으로써, 서로 상이한 특정한 위상차값을 갖는 지역 또는 화소의 패턴을 갖는 필름을 제조할 수 있다. 예를 들어, 두 상이한 위상차값으로 구성된 필름은 단순 단색 마스크를 사용하여 제조할 수 있다. 상이한 위상차의 여러 지역을 나타내는 더욱 복잡한 필름은 그레이-스케일 마스크를 사용하여 제조할 수 있다. 목적하는 위상차값이 달성된 후 LC 층을 중합시킨다. 이러한 방식으로 초기 LC 층의 위상차값으로부터 영(0)까지 범위의 위상차값을 갖는 중합체 위상차 필름을 제조할 수 있다. LC 물질의 초기 층에 대해 위상차값은 층 두께 및 LC 물질의 개별 성분의 유형 및 양의 적절한 선택에 의해 제어된다.

[0207] 상기 바람직한 실시양태에 사용하기 위한 중합성 LC 물질은 바람직하게는 네마틱 또는 스멕티 LC 물질, 특히 네마틱 물질이고, 바람직하게는 하나 이상의 이- 또는 다반응성 비키랄 RM 및 임의적으로 하나 이상의 일반응성 비키랄 RM을 포함한다. 이- 또는 다반응성 RM을 사용함으로써 가교결합된 필름이 수득되고, 이는 높은 기계적 안정성 및 온도 또는 용매와 같은 외부 영향에 대한 광학 특성의 높은 안정성을 나타낸다. 가교결합된 LC 물질을 포함하는 필름은 따라서 특히 바람직하다. 일-, 이- 및 다반응성 RM은 바람직하게는 전술된 (R1) 내지 (R23)을 포함하는 목록으로부터 선택된다.

[0208] 추가의 바람직한 실시양태에서, 본 발명에 따른 필름은 LCD에서 디스플레이의 스위칭가능한 LC 셀의 외부가 아닌 기판(보통 유리 기판) 사이에 광학 위상차 필름 또는 컬러 필터로서 사용되어 스위칭가능한 LC 셀을 형성하고 스위칭가능한 LC 매질을 함유한다(셀내 적용).

[0209] 광학 위상차 필름이 통상적으로 LC 셀과 편광기 사이에 배치되는 통상적인 디스플레이에 비해, 광학 위상차 필름의 셀내 적용은 몇 가지 이점을 갖는다. 예를 들어, 광학 필름이 유리 기판의 외측에 부착되어 LC 셀을 형성하는 디스플레이에는 통상적으로 시차(parallax) 문제를 가지며, 이는 시야각 특성을 심각하게 해친다. 위상차 필름이 LC 디스플레이 셀 내측에 준비되는 경우, 상기 시차 문제는 감소되거나 심지어 회피될 수 있다.

[0210] 본 실시양태에 따른 LCD는 바람직하게는

[0211] 1) 하기 요소 11) 내지 17)을 셀의 가장자리로부터 출발하여 중심으로 하기 순서로 포함하는 액정(LC) 셀;

[0212] 11) 서로 평행하고 그중 하나 이상이 입사광에 대해 투명한 제 1 및 제 2 기판 평면,

[0213] 12) 상기 기판중 하나 위의, 상기 LC 셀의 개별 픽셀을 개별적으로 스위칭하는데 사용될 수 있는 바람직하게는 트랜ジ스터와 같은 능동 요소, 매우 바람직하게는 TFT인 비선형 전기 요소의 어레이,

[0214] 13) 상기 기판중 하나 위, 바람직하게는 상기 비선형 요소의 어레이를 담은 기판 반대편의 기판 위에 제공된 것으로, 임의적으로 평탄화 층에 의해 덮여 있는 컬러 필터 어레이,

[0215] 14) 상기 제 1 기판의 내측에 제공된 제 1 전극 층,

[0216] 15) 임의적으로 상기 제 2 기판의 내측에 제공된 제 2 전극 층,

[0217] 16) 임의적으로 상기 제 1 및 제 2 전극 상에 제공된 제 1 및 제 2 정렬층,

[0218] 17) 전기장의 인가에 의해 둘 이상의 상이한 상태 사이에서 스위칭가능한 LC 매질,

[0219] 2) 상기 LC 셀의 한쪽 측면 상의 제 1 선형 편광기;

[0220] 3) 임의적으로 상기 제 1 선형 편광기 반대편의 LC 셀의 측면 상의 제 2 선형 편광기; 및

[0221] 4) 본 발명에 따른 하나 이상의 패턴화된 광학 위상차 필름을 포함하고, 상기 패턴화된 광학 위상차 필름 4)이 상기 LC 셀의 제 1 및 제 2 기판 사이, 바람직하게는 컬러 필터와 액정 매질 사이, 매우 바람직하게는 컬러 필터와 상기 전극 층중 하나 사이에 놓이거나, 평탄화 층이 존재하는 경우, 상기 평탄화 층과 상기 전극 층중 하나 사이에 놓이는 것을 특징으로 한다.

[0222] 본 발명의 중합성 화합물 및 물질은 또한 이축 네거티브 C형 대칭을 갖는 이축 필름의 제조에 적합하며, 여기서

주 굴절률 n_x 및 n_y (필름 평면의 직교 방향) 및 n_z (필름 평면의 수직 방향)이 $n_x \neq n_y \neq n_z$ 이고 $n_x, n_y > n_z$, 특히 $n_x > n_y > n_z$ 이다.

[0223] 예를 들어, 화학식 1의 화합물은 EP04015969.1호에 기술된 바와 같은 광학적 이축 필름을 제조하는데 사용될 수 있으며, 상기 필름은 균일한 나선 및 나선축 방향으로 주기적으로 변화하는 국소 복굴절률을 갖는 나선으로 비틀린 구조를 갖는 비등방성 물질을 포함하며, 바람직하게는 400nm 미만의 광을 반사한다(이후, 유형 1이라고도 지칭함). 게다가, 이들은 EP04015970.9호에 기술된 바와 같은 광학적 이축 필름의 제조에 사용될 수 있으며, 상기 필름은 변형된(또는 뒤틀린) 나선 및 나선축 방향으로 주기적으로 변화하는 국소 복굴절률을 갖는 나선으로 비틀린 구조를 갖는 비등방성 물질을 포함한다(이후, 유형 2이라고도 지칭함).

[0224] 유형 1의 이축 필름의 제조를 위해, 바람직하게는 화학식 1의 하나 이상의 화합물, 콜레스테릭 구조를 유도하는 하나 이상의 키랄 화합물, 및 광개시제를 포함하는 콜레스테릭 중합성 LC 물질이 사용된다. 추가의 키랄 화합물을 사용하는 대신, 화학식 1의 하나 이상의 키랄 화합물을 사용할 수 있다. 중합성 물질을 기판 상에 도포하고 평면 배향으로 정렬시킨다. 키랄 화합물의 양 및 나선 비틀림 파워(HTP)는 바람직하게는 콜레스테릭 물질이 짧은 피치 및 400nm 미만의 반사 파장을 갖도록 선택된다. 이후 물질을 화학식 1의 화합물의 광이성질화 및 그의 굴절률의 변화를 유도하는 선형 편광된 UV광으로 조사한다. 이는 콜레스테릭 나선의 선택된 부분 내의 복굴절률을 국소적으로 변화시킨다. 물질이 편광된 광으로 조사될 때, LC 지향자가 편광된 광의 방향을 따라 오는 나선의 도메인만이 광반응하게 되어, 상기 영역에서만 복굴절률의 감소가 일어난다. 동시에 광개시제는 나선 구조를 '고정'시키면서 감광성 물질을 나선 내의 그의 위치에 따라 높거나 낮은 복굴절률 상태로 '가두는(trapping)' 중합 과정을 시작한다. 이러한 방식으로 나선 구조는 균일하게 유지되나 복굴절률은 나선을 통해 국소적으로 변화하고, 이로써 이축 광학 필름이 형성된다.

[0225] 유형 2의 이축 필름의 제조를 위해, 바람직하게는 콜레스테릭 중합성 LC 물질을 상기 유형 1에서와 같이 사용하지만, 여기서는 광개시제가 예를 들어 EP-A-1388538호에 개시된 바와 같이 2색성 또는 LC 광개시제이다. 다시 상기 물질을 기판상에 도포하고, 평면 배향으로 정렬시키고 선형 편광된 UV광으로 조사하여 나선을 통해 국소적으로 변화하는 복굴절률을 제공한다. 또한, 이색성 광개시제는 LC 지향자에 평행한 그의 UV-흡수 측으로 국소적으로 정렬시킨다. 편광된 UV 조사시에 LC 광개시제는 중합-개시 자유 라디칼을 지배적으로 생성하며 국소 지향자는 편광 방향에 평행하게 놓인다. 이는 주로 이작용성 또는 다작용성 중합성 화합물의 국소 중합을 초래하여, 나선의 반 회전 내에서 높은 반응성 성분과 낮은 반응성 성분 사이의 농도 구배를 가져온다. 높은 반응성 성분은 지향자가 E-장에 평행하게 놓일 경우 농축되며(자유 라디칼의 최대 농도) 낮은 반응성 성분은 일작용성 중합성 또는 비중합성 화합물과 마찬가지로 지향자가 E-장에 수직할 경우 농축된다. 키랄 성분이 국소적으로 변화함으로써 사인곡선 나선의 뒤틀림이 생겨, '뒤틀린' 또는 '변형된' 나선 및 광학적 이축 필름이 생성된다.

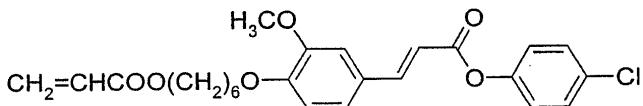
[0226] 바람직하게는, 이축 필름은 가시광 파장보다 상당히 낮은 값으로 감소된 나선 피치를 가져, 단지 평균 방향 굴절률만이 경험된다. 그 결과 브래그(Bragg) 반사 밴드가 UV에서 발생하여, 필름은 가시광 파장에 대해 투명하고 상기 가시광 파장에 대해 순수하게 위상차판으로서 거동한다.

[0227] 상기 및 하기 실시예에서, 달리 지시되지 않은 한, 모든 온도는 섭씨로 정정되지 않고 기재되며 모든 부 및 %는 중량 기준이다. 화합물들의 액정 상 거동을 예시하기 위해 하기 약어를 사용한다: K=결정성; N=네마틱; S=스멕틱; Ch=콜레스테릭; I=아이소트로픽. 기호 사이의 숫자는 상 전이 온도를 °C로 나타낸 것이다. 또한, mp는 융점이고, Δn 은 20°C 및 589nm에서 측정된 광학 비등방성이고, $\Delta \varepsilon$ 은 20°C 및 1kHz에서의 유전 비등방성이다.

[0228] 실시예 1

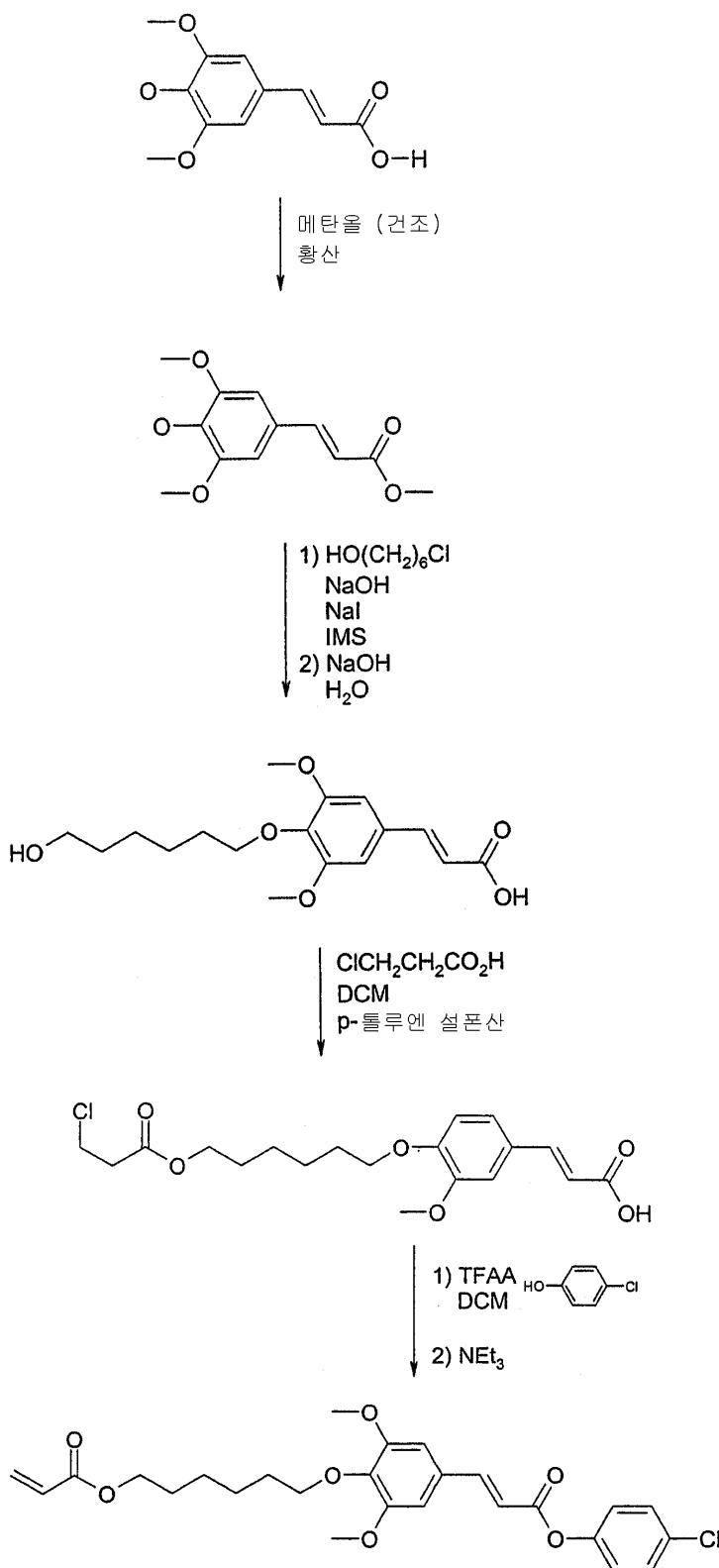
[0229] 하기 화학식 5의 화합물(1)은 하기 반응식 1과 같이 제조된다.

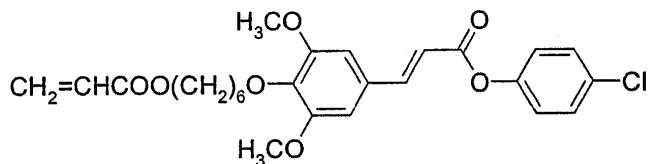
화학식 5



[0230]

반응식 1



화학식 6

[0234]

[0235] 화합물(1)은 87.0℃에서 결정성 고체로부터 액체로 용해된다.

[0236]

[0236] 화합물(2)는 69.7℃에서 결정성 고체로부터 액체로 용해된다.

[0237]

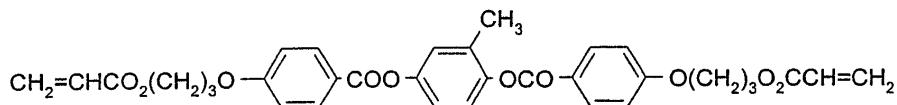
실시예 2

[0238]

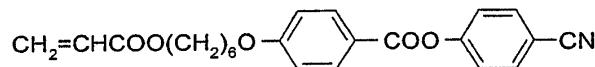
[0238] 실시예 1의 화합물(1) 및 (2)는 광이성질화가능한 위상차 필름을 제조하는데 사용된다. 비교를 위해 측방향으로 치환되지 않은 종래 기술의 신나메이트 RM(3)를 함유하는 유사한 혼합물을 또한 제조한다. 각각의 경우에 15몰%의 화합물(1), (2) 또는 (3) 각각을 하기 조성을 갖는 중합성 네마틱 호스트 혼합물에 첨가한다.

[0239]

[0239] 화학식 7의 화합물(4) 39.40%, 화학식 8의 화합물(5) 24.60%, 화학식 9의 화합물(6) 24.60%, 화학식 10의 화합물(7) 9.72%, 이르가큐어651 1.00%, 플루오라드 FC171 0.60% 및 이르가녹스1076 0.08%.

화학식 7

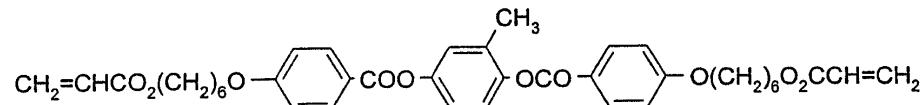
[0240]

화학식 8

[0241]

화학식 9

[0242]

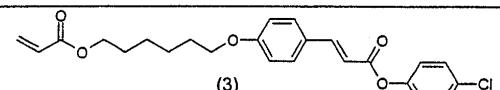
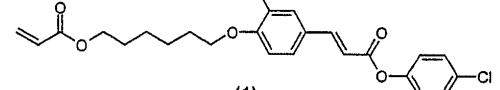
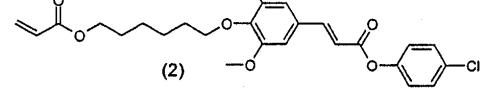
화학식 10

[0243]

[0244] 이르가큐어651(등록상표)은 광개시제이고, 이르가녹스1076(등록상표)은 안정화제이며, 둘 모두 상업적으로 구입 가능하다(스위스 바젤 소재 시바 아게). FC171(등록상표)은 비이온성 플루오로카본 계면활성제이다(쓰리엠 캠파니 제조).

[0245]

[0245] 고체 혼합물을 PGMEA에 용해시켜 50% 용액(중량 기준)을 생성한다. 용액을 여과하고(0.2μm PTFE 필터) 러빙된 폴리이미드(JSR AL1054)/유리 슬라이드 상에 스판 코팅한다. 각각의 슬라이드를 공기 분위기에서 UV 조사에 노출시킨 후(300초, 35mWcm⁻², 365nm, 공기) 광중합시킨다(10초, 20mWcm⁻², UV-A, N₂). 대조군 실험을 위해 샘플을 스판코팅하고 즉시 광중합시킨다(10초, 20mWcm⁻², UV-A, N₂). 각 필름의 축상 위상차를 측정한다. 이성질화된 위상차값과 이성질화되지 않은 위상차값을 비교하여 위상차 변화의 정도를 결정한다. 결과를 아래에 나타낸다.

혼합물	혼합물중 신남산 RM	% 위상차 하락
1 (종래 기술)	 (3)	8.8
2	 (1)	15.7
3	 (2)	15.5

[0246]

[0247]

상기 결과는, 주어진 몰%의 신나메이트 RM에 대해, 본 발명의 실시예 1 및 2에 따른 측방향 치환된 물질이 더 큰 위상차 변화를 제공한다는 것을 보여준다. 따라서, 상기 물질은 합성을 용이하게 할 뿐만 아니라 광이성질화 가능한 혼합물중에서 더욱 잘 기능한다.

발명의 효과

[0248]

본 발명에 따른 측방향으로 치환된 신나메이트 기를 포함하는 새로운 중합성 메소제닉 또는 액정 화합물은 용이하게 광범위한 유도체로 합성될 수 있고, DCM에 양호한 가용성을 나타내고, 낮은 융점과 넓은 액정 상을 갖고, LC 혼합물 또는 중합성 LC 혼합물의 액정 상 거동에 악영향을 미치지 않으며 바람직하게는 넓은 액정 상, 특히 네마티 상을 갖고, 다른 반응성 액정 물질과 매우 혼화성이어서, 광학 및 전기광학 장치, 접착제, 비등방성 기계적 특성을 갖는 합성 수지, 화장품, 진단 제품, 액정 안료, 장식 및 보안 용도, 비선형 광학제품, 광학 정보 저장, 유기 전계 효과 트랜지스터(FET 또는 OFET)와 같은 전자 장치, 전기발광 장치, 또는 키랄 도판트로서 유용하게 사용될 수 있다.