



(19)대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(51) 。 Int. Cl.	(45) 공고일자	2007년08월22일
C09K 19/44 (2006.01)	(11) 등록번호	10-0750822
	(24) 등록일자	2007년08월14일

(21) 출원번호	10-2001-7011671	(65) 공개번호	10-2002-0004966
(22) 출원일자	2001년09월14일	(43) 공개일자	2002년01월16일
심사청구일자	2005년02월15일		
변역문 제출일자	2001년09월14일		
(86) 국제출원번호	PCT/IB2000/000158	(87) 국제공개번호	WO 2000/55110
국제출원일자	2000년02월15일	국제공개일자	2000년09월21일

(81) 지정국

국내특허 : 아랍에미리트, 알바니아, 아르메니아, 오스트리아, 오스트레일리아, 아제르바이잔, 보스니아 헤르체고비나, 바베이도스, 불가리아, 브라질, 벨라루스, 캐나다, 스위스, 중국, 코스타리카, 쿠바, 체코, 독일, 덴마크, 도미니카, 에스토니아, 스페인, 핀란드, 영국, 그라나다, 그루지야, 가나, 감비아, 크로아티아, 헝가리, 인도네시아, 이스라엘, 인도, 아이슬란드, 일본, 케냐, 키르기스스탄, 북한, 대한민국, 카자흐스탄, 세인트루시아, 스리랑카, 리베이라, 레소토, 리투아니아, 룩셈부르크, 라트비아, 모로코, 몰도바, 마다가스카르, 마케도니아공화국, 몽고, 말라위, 멕시코, 노르웨이, 뉴질랜드, 폴란드, 포르투갈, 루마니아, 러시아, 수단, 스웨덴, 싱가포르, 슬로베니아, 슬로바키아, 시에라리온, 타지키스탄, 투르크멘, 터키, 트리니다드토바고, 탄자니아, 우크라이나, 우간다, 미국, 우즈베키스탄, 베트남, 세르비아 앤 몬테네그로, 남아프리카, 짐바브웨,

AP ARIPO특허 : 가나, 감비아, 케냐, 레소토, 말라위, 수단, 시에라리온, 스와질랜드, 탄자니아, 우간다, 짐바브웨,

EA 유라시아특허 : 아르메니아, 아제르바이잔, 벨라루스, 키르기스스탄, 카자흐스탄, 몰도바, 러시아, 타지키스탄, 투르크멘,

EP 유럽특허 : 오스트리아, 벨기에, 스위스, 사이프러스, 독일, 덴마크, 스페인, 핀란드, 프랑스, 영국, 그리스, 아일랜드, 이탈리아, 룩셈부르크, 모나코, 네덜란드, 포르투갈, 스웨덴,

OA OAPI특허 : 부르키나파소, 베닌, 중앙아프리카, 콩고, 코트디부아르, 카메룬, 가봉, 기니, 기니 비사우, 말리, 모리타니, 니제르, 세네갈, 차드, 토고,

(30) 우선권주장 9906168.1 1999년03월17일 영국(GB)

(73) 특허권자

롤리크 아게
스위스 체하-6301 쭈크 참머슈트라쎄 50

(72) 발명자

루카크테오도르
스위스체하-4054바젤오베르빌러슈트라쎄66

베네키카르스텐
독일데-79576바일암라인피어트하우엔9

부헬커리하르트
스위스체하-8008쾰리히펠젠슈트라쎄12아

(74) 대리인 이병호
장훈

(56) 선행기술조사문헌
US5707544 A WO9964924 A
WO9937735 A

심사관 : 조한술

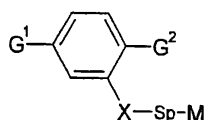
전체 청구항 수 : 총 19 항

(54) 액정 화합물, 및 이를 포함하는 LCP 혼합물, LCP 네트워크 및 광학 또는 전자 광학 장치

(57) 요약

본 발명은 화학식 I의 화합물을 제공할 뿐만 아니라, 당해 화합물을 포함하는 액정 혼합물, 필름 및 전자광학 장치를 제공한다.

화학식 I



위의 화학식 I에서,

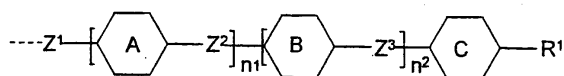
G¹과 G²는 독립적으로 중합성 메소젠 잔기이고,

X는 -CH₂-, -O-, -CO-, -COO-, -OOC-, -CONR'-, -OCOO- 및 -OCONR'(여기서, R'는 수소, 저급 비키랄 알킬 그룹 및 저급 비키랄 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다)로부터 선택된 그룹이고,

Sp는 화학식 -(CH₂)ₚ-의 그룹[여기서, p는 1 내지 18의 정수이고, 1개 또는 2개의 비인접 -CH₂- 그룹은 -CH=CH-로 대체되지 않거나 대체되고, 또는 1개 또는 2개의 -CH₂- 그룹은 -O-, -CO-, -COO-, -OOC-, -CONR'-, -OCOO- 및 -OCONR'(여기서, R'는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 1개 또는 2개의 그룹으로 대체되지 않거나 대체된다]이고, 단 당해 스페이서 Sp 그룹은 2개의 인접한 헤테로 원자를 함유하지 않고, X가 -CH₂-인 경우, p는 0일 수 있고,

M은 화학식 II의 비키랄 그룹이다.

화학식 II



위의 화학식 II에서,

A와 B는 독립적으로, 치환되지 않거나 치환된 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 또는 나프탈렌디일이고,

C는 치환되지 않거나 치환된 5원 또는 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 및 나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

n^1 과 n^2 는 0 또는 1이며, 단 n^1 과 n^2 의 합은 1 내지 2이고, C가 나프탈렌디일인 경우, n^1 과 n^2 의 합은 0 내지 2이고,

Z^1 은 $-O-$, $-COO-$, $-OOC-$, $-CO-$, $-CONR'-$, $-NR'CO-$, $OCOO-$, $-OCONR'-$, $-NR'COO-$ (여기서, R'는 위에서 정의한 바와 같다) 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^2 와 Z^3 은 독립적으로 단일 결합, $-COO-$, $-OOC-$, $-CH_2-CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-CH=CH-$, $-C\equiv C-$, $-(CH_2)_4-$ 및 $-(CH_2)_3O-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

R^1 은 $-CN$, $-COR$, $-COOR$, $-OCOR$, $-CONR'R$, $-NR'COR$, $OCOOR$, $-OCONR'R$, $-NR'COOR$, $-F$, $-Cl$, $-CF_3$, $-OCF_3$, $-OR$ 및 $-R$ (여기서, R은 수소, 비키랄 C_{1-18} 알킬 그룹 및 3위치 이상의 위치에 이중 결합을 갖는 비키랄 C_{4-18} 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고, R'는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

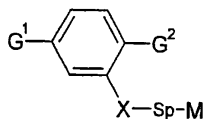
단, 환 A, B 및 C는 이들 중 2 이상이 동시에 나프탈렌디일 그룹일 수 없다.

특허청구의 범위

청구항 1.

화학식 I의 화합물.

화학식 I



위의 화학식 I에서,

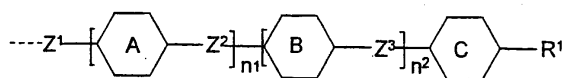
G^1 과 G^2 는 독립적으로 중합성 메소젠 잔기이고,

X는 $-CH_2-$, $-O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OOC-$, $-CONR'-$, $-OCOO-$ 및 $-OCONR'$ (여기서, R'는 수소, 저급 비키랄 알킬 그룹 및 저급 비키랄 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 그룹이고,

Sp는 화학식 $-(CH_2)_p-$ 의 그룹[여기서, p는 1 내지 18의 정수이고, 1개 또는 2개의 비인접 $-CH_2-$ 그룹은 $-CH=CH-$ 로 대체(replace)되지 않거나 대체되고, 또는 1개 또는 2개의 $-CH_2-$ 그룹은 $-O-$, $-CO-$, $-COO-$, $-OOC-$, $-CONR'-$, $-OCOO-$ 및 $-OCONR'$ (여기서, R'는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 1개 또는 2개의 그룹으로 대체되지 않거나 대체된다]이고, 단 당해 스페이서 Sp 그룹은 2개의 인접한 헤테로 원자를 함유하지 않고, X가 $-CH_2-$ 인 경우, p는 0일 수 있고,

M은 화학식 II의 비키랄 그룹이다.

화학식 II



위의 화학식 II에서,

A와 B는 독립적으로, 치환되지 않거나 치환된 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 또는 나프탈렌디일이고,

C는 치환되지 않거나 치환된 5원 또는 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 및 나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

n^1 과 n^2 는 각각 0 또는 1이며, 단 n^1 과 n^2 의 합은 1 내지 2이고, C가 나프탈렌디일인 경우, n^1 과 n^2 의 합은 0 내지 2이고,

Z^1 은 $-O-$, $-COO-$, $-OOC-$, $-CO-$, $-CONR'-$, $-NR'CO-$, $OCOO-$, $-OCONR'-$, $-NR'COO-$ (여기서, R' 는 위에서 정의한 바와 같다) 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^2 와 Z^3 은 독립적으로 단일 결합, $-COO-$, $-OOC-$, $-CH_2-CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-C\equiv C-$, $-(CH_2)_4-$ 및 $-(CH_2)_3O-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

R^1 은 $-CN$, $-COR$, $-COOR$, $-OCOR$, $-CONR'R$, $-NR'COR$, $OCOOR$, $-OCONR'R$, $-NR'COOR$, $-F$, $-Cl$, $-CF_3$, $-OCF_3-$, $-OR$ 및 $-R$ (여기서, R 은 수소, 비키랄 C_{1-18} 알킬 그룹 및 3위치 이상의 위치에 이중 결합을 갖는 비키랄 C_{4-18} 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고, R' 는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

단, 환 A, B 및 C는 이들 중 2 이상이 동시에 나프탈렌디일 그룹일 수 없다.

청구항 2.

제1항에 있어서, G^1 과 G^2 가 동일한 화합물.

청구항 3.

제1항 또는 제2항에 있어서, X가 $-CH_2-$, $-O-$, $-COO-$ 및 $-OOC-$ 로부터 선택되는 화합물.

청구항 4.

제1항 또는 제2항에 있어서, 그룹 Sp 의 정수 p 가 1 내지 12인 화합물.

청구항 5.

제1항 또는 제2항에 있어서, 스페이서 Sp 그룹의 $-CH_2-$ 그룹 중의 1개 또는 2개가 $-O-$ 로 대체될 수 있는 화합물.

청구항 6.

제1항 또는 제2항에 있어서, 스페이서 Sp 그룹의 $-\text{CH}_2-$ 그룹 중의 1개가 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{OCOO}-$ 및 $-\text{OCONR}'$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택된 그룹으로 대체될 수 있는 화합물.

청구항 7.

제1항 또는 제2항에 있어서, 그룹 M에 대한 그룹 A와 B가 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 또는 트랜스-1,3-디옥산-2,5-디일, 1,4-나프탈렌디일 및 2,6-나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 화합물.

청구항 8.

제1항 또는 제2항에 있어서, 그룹 M에 대한 그룹 C가 푸란-2,4-디일, 푸란-2,5-디일, 테트라하이드로푸란-2,4-디일, 테트라하이드로푸란-2,5-디일, 디옥솔란-2,4-디일, 디옥솔란-2,5-디일, 옥사졸-2,4-디일, 옥사졸-2,5-디일, 사이클로펜탄-1,3-디일, 사이클로펜탄-1,4-디일, 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 또는 디옥산-2,5-디일 및 2,6-나프탈렌디일로부터 선택되는 화합물.

청구항 9.

제1항 또는 제2항에 있어서, 비키탈 그룹 M에 대한 그룹 Z^1 이 $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$ 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 화합물.

청구항 10.

제1항 또는 제2항에 있어서, 비키탈 그룹 M에 대한 그룹 Z^2 와 Z^3 이 $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 화합물.

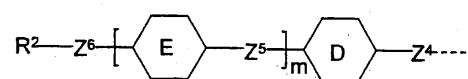
청구항 11.

제1항 또는 제2항에 있어서, 비키탈 그룹 M에 대한 그룹 R^1 이 $-\text{CN}$, $-\text{COOR}$, $-\text{OCOR}$, F , Cl , CF_3 , OCF_3 , OR 및 R (여기서, R 은 수소, 비키탈 C_{1-12} 알킬, 또는 3위치 이상의 위치에 이중 결합을 갖는 비키탈 C_{4-12} 알케닐 그룹이다)로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 화합물.

청구항 12.

제1항 또는 제2항에 있어서, 중합성 메소젠 잔기 G^1 과 G^2 가 각각 독립적으로 화학식 IIIa의 그룹인 화합물.

화학식 IIIa



위의 화학식 IIIa에서,

D와 E는 치환되지 않거나 치환된 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 및 트랜스-1,3-디옥산-2,5-디일로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되고,

m은 1 또는 0이고,

Z^4 와 Z^5 는 독립적으로 단일 결합, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-(\text{CH}_2)_4$ 및 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^6 은 화학식 $-(\text{CH}_2)_p\text{X}-$ 의 그룹(여기서, p는 1 내지 18의 정수이고, X는 제1항에서 정의한 바와 같고, 1개 또는 2개의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 로 대체되지 않거나 대체되고, 또는 1개 또는 2개의 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 추가의 연결 그룹 X 1개 또는 2개로 대체될 수 있다)이며, 단 그룹 Z^6 은 2개의 인접한 헤테로 원자를 함유하지 않고, X가 $-\text{CH}_2$ 인 경우, p는 0일 수 있고,

R^2 는 $\text{CH}_2=\text{C}(\text{Ph})-$, $\text{CH}_2=\text{CW}-\text{COO}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{COO}-\text{Ph}-$, $\text{CH}_2=\text{CW}-\text{CO}-\text{NH}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{O}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{OOC}-$, $\text{Ph}-\text{CH}=\text{CH}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{Ph}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{Ph}-\text{O}-$, $\text{R}^3-\text{Ph}-\text{CH}=\text{CH}-\text{COO}-$, $\text{R}^3-\text{OOC}-\text{CH}=\text{CH}-\text{Ph}-\text{O}-$ 및 2-W-에폭시에틸(여기서, W는 H, Cl, Ph 또는 저급 알킬이고, R^3 은 저급 알킬이며, 단 R^3 이 페닐렌 그룹($-\text{Ph}-$)에 결합되는 경우, R^3 은 수소 또는 저급 알콕시일 수 있다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 중합성 그룹이다.

청구항 13.

제12항에 있어서, 그룹 D와 그룹 E가 치환되거나 치환되지 않은 1,4-페닐렌 및 1,4-사이클로헥실렌 환으로부터 선택되는 화합물.

청구항 14.

제12항에 있어서, Z^4 와 Z^5 가 단일 결합, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$ 및 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 화합물.

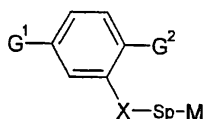
청구항 15.

제12항에 있어서, 그룹 R^2 가 $\text{CH}_2=\text{CW}-\text{COO}-$ 및 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{O}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 화합물.

청구항 16.

화학식 I의 화합물과, 하기 화학식 IIIb, 화학식 IV, 화학식 V, 화학식 VI, 화학식 VII, 화학식 VIII, 화학식 IX 및 화학식 X으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 추가의 적합한 성분을 포함하는 LCP 혼합물.

화학식 I



위의 화학식 I에서,

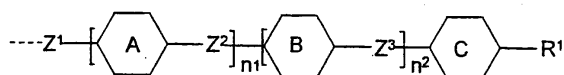
G^1 과 G^2 는 독립적으로 중합성 메소젠 잔기이고,

X는 $-\text{CH}_2-$, $-\text{O}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{OCOO}-$ 및 $-\text{OCONR}'$ (여기서, R'는 수소, 비키랄 저급 알킬 그룹 및 비키랄 저급 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 그룹이고,

Sp 는 화학식 $-(\text{CH}_2)_p-$ 의 그룹[여기서, p는 1 내지 18의 정수이고, 1개 또는 2개의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 로 대체되지 않거나 대체되고, 또는 1개 또는 2개의 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 $-\text{O}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{OCOO}-$ 및 $-\text{OCONR}'$ (여기서, R'는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 1개 또는 2개의 그룹으로 대체되지 않거나 대체된다]이고, 단 당해 스페이서 Sp 그룹은 2개의 인접한 헤테로 원자를 함유하지 않고, X가 $-\text{CH}_2-$ 인 경우, p는 0 일 수 있고,

M은 화학식 II의 비키랄 그룹이다.

화학식 II



위의 화학식 II에서,

A와 B는 독립적으로, 치환되지 않거나 치환된 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 또는 나프탈렌디일이고,

C는 치환되지 않거나 치환된 5원 또는 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 및 나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

n^1 과 n^2 는 각각 0 또는 1이며, 단 n^1 과 n^2 의 합은 1 내지 2이고, C가 나프탈렌디일인 경우, n^1 과 n^2 의 합은 0 내지 2이고,

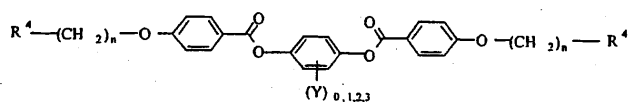
Z^1 은 $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{NR}'\text{CO}-$, $\text{OCOO}-$, $-\text{OCONR}'-$, $-\text{NR}'\text{COO}-$ (여기서, R'는 위에서 정의한 바와 같다) 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^2 와 Z^3 은 독립적으로 단일 결합, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-(\text{CH}_2)_4-$ 및 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

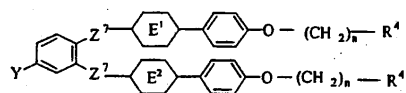
R^1 은 $-\text{CN}$, $-\text{COR}$, $-\text{COOR}$, $-\text{OCOR}$, $-\text{CONR}'\text{R}$, $-\text{NR}'\text{COR}$, OCOOR , $-\text{OCONR}'\text{R}$, $-\text{NR}'\text{COOR}$, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{CF}_3$, $-\text{OCF}_3-$, $-\text{OR}$ 및 $-\text{R}$ (여기서, R은 수소, 비키랄 C_{1-18} 알킬 그룹 및 3위치 이상의 위치에 이중 결합을 갖는 비키랄 C_{4-18} 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고, R'는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

단, 환 A, B 및 C는 이들 중 2 이상이 동시에 나프탈렌디일 그룹일 수 없다.

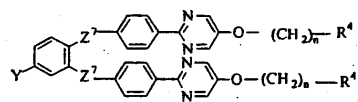
화학식 IIIb



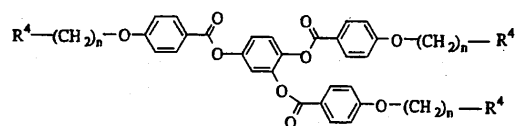
화학식 IV



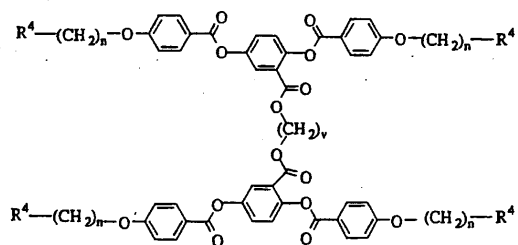
화학식 V



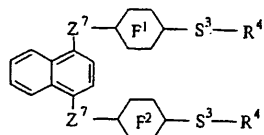
화학식 VI



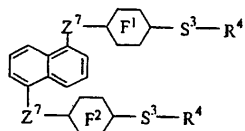
화학식 VII



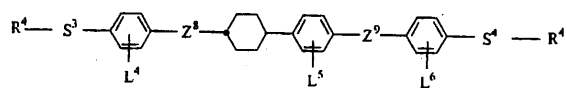
화학식 VIII



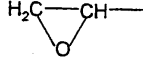
화학식 IX



화학식 X



위의 화학식 IIIb 내지 화학식 X에서,

R^4 는 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{O}-$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{COO}-$, $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{COO}-$, $\text{CH}_2=\text{C}(\text{Cl})-\text{COO}-$ 및  로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

S^3 과 S^4 는 독립적으로 $-(\text{CH}_2)_n-$ 또는 $-\text{O}(\text{CH}_2)_n-$ 이고,

E^1 과 E^2 는 독립적으로 1,4-페닐렌, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일 및 트랜스-1,4-사이클로헥실렌-1,4-페닐렌으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

F^1 과 F^2 는 독립적으로 1,4-페닐렌 및 2- 또는 3-플루오로-1,4-페닐렌으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

L^4 , L^5 및 L^6 은 독립적으로 OH, C_1-C_{20} 알킬, C_1-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_1-C_{20} 알콕시-카보닐, 포르밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시, 할로젠, 시아노 및 니트로로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^7 은 $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{O}(\text{CH}_2)_3-$, $-\text{OOC}(\text{CH}_2)_2-$ 및 $-\text{COO}(\text{CH}_2)_3-$ 으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^8 은 단일 결합, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-(\text{CH}_2)_4-$, $-\text{O}(\text{CH}_2)_3-$, $(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 및 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^9 는 단일 결합, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$ 및 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Y 는 독립적으로 하이드록시, C_1-C_{20} 알킬, C_1-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_1-C_{20} 알콕시카보닐, 포르밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시, 플루오로, 클로로, 브로모, 시아노 및 니트로로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

n 은 2 내지 20의 정수이고,

v 는 2 내지 12의 정수이다.

청구항 17.

제1항에 따르는 화합물 또는 제16항에 따르는 LCP 혼합물을 가교결합된 형태 또는 중합된 형태로 포함하는 LCP 네트워크.

청구항 18.

삭제

청구항 19.

제1항에 따르는 화합물 또는 제16항에 따르는 LCP 혼합물을 포함하는 광학 또는 전자광학 장치.

청구항 20.

제17항에 따르는 LCP 네트워크를 포함하는 광학 또는 전자광학 장치.

명세서

본 발명은 메소겐 특성을 갖는 측면 치환된 경화성 액정(LCP) 또는 이들 LCP가 메소겐 분자 구조와 상용되도록 하는 특성을 갖는 LCP에 관한 것이다. 특히, 본 발명은 광학 이방성이 조정가능한 동시에 용점이 낮거나 과냉각성(supercoolability)이 우수하고 투명점이 비교적 높고 정렬성이 우수한 측면 치환된 경화성 액정(LCP) 및 LCP 분자의 평면에서의 배향 및 기판면에 대한 배향이 조절될 수 있는 실질적으로 균일하거나 패턴화된 필름의 제조에 있어서의 당해 LCP의 용도에 관한 것이다.

경화성 액정으로부터 제조되는 필름(LCP 필름)은 당해 기술분야의 숙련인들에게 공지되어 있는 것으로, 광학 장치 및 전자광학 장치의 제조에 사용된다. 미국 특허 제5,650,534호에는 비선형 광학(NLO) 용품에 사용하기에 적합한 성분을 제조하는 데 사용되는 화합물 및 혼합물이 기재되어 있다. 이들 화합물은 광학적으로 활성이고 키랄 스멕틱 또는 키랄 네마틱 중간상을 나타낸다. 미국 특허 제5,707,544호에도 또한 NLO 용품에 사용하기에 적합한 화합물 및 혼합물이 기재되어 있다. 그러나, 이들 화합물은 비교적 높은 용점을 가짐을 특징으로 한다. 미국 특허 제5,593,617호에는 광학 및 전자 부재를 제조하는 데 사용되는 광화학적 중합성 액정 화합물 및 혼합물이 기재되어 있다. 그러나, 이들 혼합물은 작용 범위가 비교적 좁고 고온에서 사용하는 데 부적합하다.

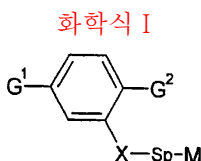
LCP 필름은 일반적으로 스핀 피복과 같은 공지되어 있는 피복 기술을 사용하여 제조한다. 이는 가교결합성 LCP 또는 LCP 혼합물의 유기 용액을 배향 층이 제공되어 있는 기판 위에 캐스팅하는 공정을 포함한다. 이어서, 유기 용매를 제거하여 잘 배향된 용매 부재 메소겐 LCP 층을 제공하고, 이를 다시 가교결합시켜 LCP 필름을 제공한다. 이러한 필름의 목적하는 광학 성능은 LCP 재료가 동시에 충족시켜야 하는 특정 재현가능한 물리적 파라미터에 결정적으로 좌우된다. 당해 특성은 네마틱 중간상, 높은 투명점, 낮은 용점 또는, 용점 미만으로 냉각되는 경우(과냉각)의 낮은 결정화 경향, 유기 용매에 대한 우수한 용해도, 다른 LCP와의 우수한 혼화성, 배향 층에서의 우수한 정렬 특성, 및 경사 영역과 디스클리네이션(disclination)이 거의 없는 기판면에 대한 조정가능한 경사를 형성하는 성능이다. 경사 영역은 LCP 필름 내에서 LCP 분자의 장축이 기판면에 대해 크기는 동일하지만 방향이 반대인 경사각을 형성하는 영역이다. 디스클리네이션은 경사각이 반대인 LCP 분자들이 인접하게 있는, 이웃하는 경사 영역들의 경계선이다. 이들 경사 영역 및 디스클리네이션은 필름의 균일한 외관을 교란시키고 광학 성능을 불균일화한다.

우수한 정렬 특성 및 조정가능한 경사각을 형성하는 성능은 광배향되고 광패턴화된 배향층이 LCP의 배향에 사용되는 경우와 특히 관련이 있다. 소위 이러한 선형 광중합(LPP) 기술[참조: Nature, 381, p.212(1996)]은 균일할 뿐만 아니라 구조화된(광패턴화된) 배향층을 생성시킨다. 당해 구조화된 배향층이 LCP의 배향에 사용되는 경우, LCP 분자는 배향층이 제공한 정보를 정렬 방향 및 경사각에 대해 적합하도록 해야 한다.

예를 들면, 지연 필름으로서 LCP로 제조된 층 및 필름의 광학 특성을 조정하기 위해서, 광학 이방성이 상이한, 주로 광학 이방성이 높은 각종 LCP 재료를 사용하는 것이 또한 필수적이다. 높은 광학 이방성을 나타내는 LCP는 종종 몇가지 상기 특성에 악영향을 미치는 것으로 공지되어 있다. 특히, 스멕틱 중간상의 형성, 높은 용점, 향상된 결정화 경향, 유기 용매에 대한 낮은 용해도 또는 다른 LCP와의 감소된 혼화성이 관찰된다. 또한, 경사 영역과 디스클리네이션이 없는 균일한 정렬 성능이 종종 감소한다.

따라서, 위에서 언급한 단점들이 상당히 감소된, LCP 혼합물의 제조에 사용될 수 있는 새로운 LCP 재료가 필요하다. 본 발명은 이러한 필요성에 근거한다.

본 발명의 제1 양태는 화학식 I의 화합물을 제공한다.



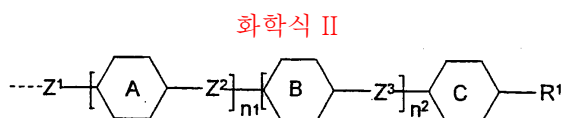
위의 화학식 I에서,

G^1 과 G^2 는 독립적으로 중합성 메소겐 잔기이고,

X는 $-\text{CH}_2-$, $-\text{O}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{OCOO}-$ 및 $-\text{OCONR}'-$ (여기서, R'는 수소, 저급 비키탈 알킬 그룹 및 저급 비키탈 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 그룹이고,

Sp는 화학식 $-(\text{CH}_2)_p-$ 의 그룹[여기서, p는 1 내지 18의 정수이고, 1개 또는 2개의 비인접 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 로 대체되지 않거나 대체되고, 또는 1개 또는 2개의 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 $-\text{O}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{OCOO}-$ 및 $-\text{OCONR}'-$ (여기서, R'는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 1개 또는 2개의 그룹으로 대체되지 않거나 대체된다]이고, 단 당해 스페이서 Sp 그룹은 2개의 인접한 헤테로 원자를 함유하지 않고, X가 $-\text{CH}_2-$ 인 경우, p는 0일 수 있고,

M은 화학식 II의 비키탈 그룹이다.



위의 화학식 II에서,

A와 B는 각각 독립적으로, 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 또는 나프탈렌디일이고,

C는 5원 및 6원 이소사이클릭 또는 헤테로사이클릭 그룹 및 나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

n^1 과 n^2 는 각각 0 또는 1이며, 단 n^1 과 n^2 의 합은 1 내지 2이고, C가 나프탈렌디일인 경우, n^1 과 n^2 의 합은 0내지 2이고,

Z^1 은 $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{NR}'\text{CO}-$, $\text{OCOO}-$, $-\text{OCONR}'-$, $-\text{NR}'\text{COO}-$ (여기서, R'는 위에서 정의한 바와 같다) 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^2 와 Z^3 은 독립적으로 단일 결합, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-(\text{CH}_2)_4-$ 및 $-(\text{CH}_2)_3\text{O}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

R^1 은 $-\text{CN}$, $-\text{COR}$, $-\text{COOR}$, $-\text{OCOR}$, $-\text{CONR}'\text{R}$, $-\text{NR}'\text{COR}$, OCOOR , $-\text{OCONR}'\text{R}$, $-\text{NR}'\text{COOR}$, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{CF}_3$, $-\text{OCF}_3-$, $-\text{OR}$ 및 $-\text{R}$ (여기서, R은 수소, 비키탈 C_{1-18} 알킬 그룹 및 3위치 이상의 위치에 이중 결합을 갖는 비키탈 C_{4-18} 알케닐 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고, R'는 위에서 정의한 바와 같다)로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

단, 환 A, B 및 C 중 둘 이상은 동시에 나프탈렌디일 그룹일 수 없다.

위에서 언급한 측면 치환된 메소겐 화합물 이외에, 이러한 화합물은 국제공개공보 제WO 95/24454호 및 제WO 95/24455호에도 기재되어 있다. 그러나, 이들 화합물 중 다수는 하나 이상의 위에서 언급한 단점없이 광학 이방성이 높은 LCP 필름을 제조하는 데 적합하지 않다. 본 발명의 화합물을 사용함으로써 용점의 상당한 증가 또는 투명점의 감소없이 LCP의 광학 이방성을 조절할 수 있는 것으로 밝혀졌다. 또한, 이들은 일반적으로 용점보다 훨씬 낮은 온도에서조차도 결정화 경향이 놀랍게 낮다(우수한 과냉각성). 또한, 이들은 일반적으로 특히 구조화된 LCP 배향층에 대해 향상된 정렬 특성을 나타내고, 경사각을 형성시킬 수 있으며, 감소된 경사 영역 및 디스클리네이션을 형성하는 경향을 나타낸다. 또한, 본 발명의 화합물은 유기 용매에 대한 용해도가 비교적 우수하고 다른 LCP 화합물과의 혼화성이 우수하다.

본 발명의 화합물의 광학 이방성은 주요 분자 코어를 변화시키지 않고 단지 화학식 I의 그룹 M을 상이하게 선택함으로써 요건에 쉽게 적합하도록 할 수 있다. 이는 상이한 광학 이방성을 나타내는 광범위한 LCP를 최소한의 화학적 단계로 경제적으로 제조할 수 있도록 한다.

중합성 메소겐 잔기 G^1 과 G^2 는 동일하거나 상이할 수 있지만, 바람직하게는 동일하다.

그룹 X는 바람직하게는 $-\text{CH}_2-$, $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$ 및 $-\text{OOC}-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

스페이스 그룹 Sp는 하나 이상의 불소 또는 염소 원자로 임의로 치환될 수 있다. 치환체 그룹이 존재하지 않는 그룹이 바람직하다. 정수 p는 1 내지 12이고, 2개 이하의 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 $-\text{O}-$ 로 대체되고, 1개 이하의 $-\text{CH}_2-$ 그룹은 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CO}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CONR}'-$, $-\text{OCOO}-$ 및 $-\text{OCONR}'-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나의 그룹으로 대체된다.

비키랄 그룹 M을 구성하는 그룹 A와 B는 포화되거나 포화되지 않거나 방향족 그룹이다. 이들은 F, Cl, CN, 저급 알킬, 저급 알케닐, 저급 알콕시 및 저급 알케닐옥시로 이루어진 그룹으로부터 선택된 1개 또는 2개의 치환체로 임의로 치환된다. 바람직하게는, 그룹 A와 B는 각각 단지 하나의 치환체를 함유한다. 그룹 A와 B는 치환체를 함유하지 않는 것이 특히 바람직하다.

그룹 A와 B는 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 또는 트랜스-1,3-디옥산-2,5-디일, 1,4-나프탈렌디일 및 2,6-나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 것이 바람직하다. A와 B는 1,4-페닐렌, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 및 2,6-나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 것이 특히 바람직하다.

비키랄 그룹 M을 구성하는 그룹 C는 포화되거나 포화되지 않거나 방향족 그룹이다. 이는 F, Cl, CN, 저급 알킬, 저급 알케닐, 저급 알콕시 및 저급 알케닐옥시로 이루어진 그룹으로부터 선택된 1개 또는 2개의 치환체로 임의로 치환된다. 그룹 C는 하나 이하의 치환체를 함유하는 것이 바람직하다. 그룹 C는 치환체를 함유하지 않는 것이 특히 바람직하다.

그룹 C는 푸란-2,4-디일, 푸란-2,5-디일, 테트라하이드로푸란-2,4-디일, 테트라하이드로푸란-2,5-디일, 디옥솔란-2,4-디일, 디옥솔란-2,5-디일, 옥사졸-2,4-디일, 옥사졸-2,5-디일, 사이클로펜탄-1,3-디일, 사이클로펜탄-1,4-디일, 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 또는 디옥산-2,5-디일, 1,4-나프탈렌디일 및 2,6-나프탈렌디일로부터 선택되는 것이 바람직하다. C는 푸란-2,5-디일, 테트라하이드로푸란-2,5-디일, 옥사졸-2,5-디일, 1,4-페닐렌, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 및 2,6-나프탈렌디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 것이 특히 바람직하다.

비키랄 그룹 M을 구성하는 그룹 Z^1 은 바람직하게는 $-\text{O}-$, $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$ 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. Z^1 은 $-\text{O}-$ 및 단일 결합으로부터 선택되는 것이 특히 바람직하다.

비키랄 그룹 M을 구성하는 그룹 Z^2 와 Z^3 은 바람직하게는 $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{O}-$, $-\text{OCH}_2-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. Z^2 와 Z^3 은 $-\text{COO}-$, $-\text{OOC}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 및 단일 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 것이 특히 바람직하다.

비키랄 그룹 M을 구성하는 그룹 R^1 은 바람직하게는 $-\text{CN}$, $-\text{COOR}$, $-\text{OCOR}$, F, Cl, CF_3 , OCF_3 , OR 및 R(여기서, R은 비키랄 C_{1-12} 알킬, 3위치 이상의 위치에 이중 결합을 갖는 비키랄 C_{4-12} 알케닐 그룹 또는 수소이다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. R^1 은 $-\text{CN}$, F, Cl, CF_3 , OCF_3 , OR 및 R(여기서, R은 비키랄 C_{1-8} 알킬 그룹 또는 수소이다)로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 것이 특히 바람직하다.

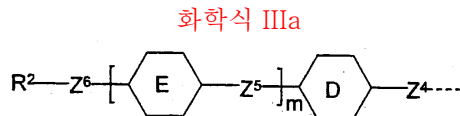
용어 "저급 알킬"은 비키랄 C_{1-6} 측쇄 또는 직쇄 알킬 그룹을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명의 화합물 내에 존재할 수 있는 저급 알킬 그룹의 예는 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실 등이다.

용어 "저급 알케닐"은 이중 결합이 2위치 이상의 위치에 존재하는 비키랄 C_{3-6} 측쇄 또는 직쇄 알케닐 그룹을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명의 화합물 내에 존재할 수 있는 저급 알케닐 그룹의 예는 2-프로페닐, 3-부테닐, 3-이소펜테닐, 4-펜테닐, 5-헥세닐, 4-이소헥세닐 등이다.

용어 "저급 알콕시"는 비키랄 C_{1-6} 측쇄 또는 직쇄 알콕시 그룹을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명의 화합물 내에 존재할 수 있는 저급 알콕시 그룹의 예는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 펜톡시, 헥소시 등이다.

용어 "알케닐옥시"는 이중 결합이 2위치 이상의 위치에 존재하는 비키랄 C₃₋₆ 측쇄 또는 직쇄 알케닐옥시 그룹을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명의 화합물 내에 존재할 수 있는 저급 알케닐옥시 그룹의 예는 2-프로페닐옥시, 3-부테닐옥시, 4-펜테닐옥시, 5-헥세닐옥시 등이다.

바람직하게는, 중합성 메소겐 잔기 G¹과 G²는 각각 독립적으로 화학식 IIIa의 그룹이다.



위의 화학식 IIIa에서,

D와 E는 독립적으로 1,4-페닐렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌 및 트랜스-1,3-디옥산-2,5-디일로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

m은 1 또는 0이고,

Z⁴와 Z⁵는 독립적으로 단일 결합, -COO-, -OOC-, -CH₂-CH₂-, -CH₂O-, -OCH₂-, -CH=CH-, -C≡C-, -(CH₂)₄- 및 -(CH₂)₃O-로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z⁶은 화학식 -(CH₂)_pX-의 그룹(여기서, p는 1 내지 18의 정수이고, X는 위에서 정의한 바와 같고, 1개 또는 2개의 비인접 -CH₂- 그룹은 -CH=CH-로 대체되지 않거나 대체되고, 또는 1개 또는 2개의 -CH₂- 그룹은 추가의 연결 그룹 X 1개 또는 2개로 대체될 수 있다)이며, 단 그룹 Z⁶은 2개의 인접한 헤테로 원자를 함유하지 않고, X가 -CH₂인 경우, p는 0일 수 있고,

R²는 CH₂=C(Ph)-, CH₂=CW-COO-, CH₂=CH-COO-Ph-, CH₂=CW-CO-NH-, CH₂=CH-O-, CH₂=CH-OOC-, Ph-CH=CH-, CH₂=CH-Ph-, CH₂=CH-Ph-O-, R³-Ph-CH=CH-COO-, R³-OOC-CH=CH-Ph-O- 및 2-W-에폭시에틸(여기서, W는 H, Cl, Ph 또는 저급 알킬이고, R³은 저급 알킬이며, 단 R³이 페닐렌 그룹(-Ph-)에 결합되는 경우, 수소 또는 저급 알콕시일 수 있다)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 중합성 그룹이다.

용어 "Ph"와 "Ph-"는 페닐 그룹을 나타내는 것으로 이해될 것이다. 용어 "-Ph-"는 문맥이 다른 의미를 요구하는 경우를 제외하고는 페닐렌의 이성체, 즉 1,2-페닐렌, 1,3-페닐렌 또는 1,4-페닐렌을 의미하는 것으로 이해될 것이다.

그룹 D와 E는 1개 또는 2개의 할로젠, -CN, 저급 알킬, 저급 알케닐, 저급 알콕시 또는 저급 알케닐옥시 그룹으로 임의로 치환된다. 할로젠 치환체가 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 F 또는 Cl이다. 그룹 D와 E는 임의로 치환된 1,4-페닐렌 및 1,4-사이클로헥실렌 환으로부터 선택된다. 그룹 D와 E는 치환체를 함유하지 않는 것이 특히 바람직하다.

그룹 Z⁴와 Z⁵는 단일 결합, -COO-, -OOC-, -CH₂-CH₂-, -CH₂O-, -OCH₂-, -CH=CH- 및 -C≡C-로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 것이 바람직하다. Z⁴와 Z⁵는 단일 결합, -C≡C-, -COO- 또는 -OOC-이다.

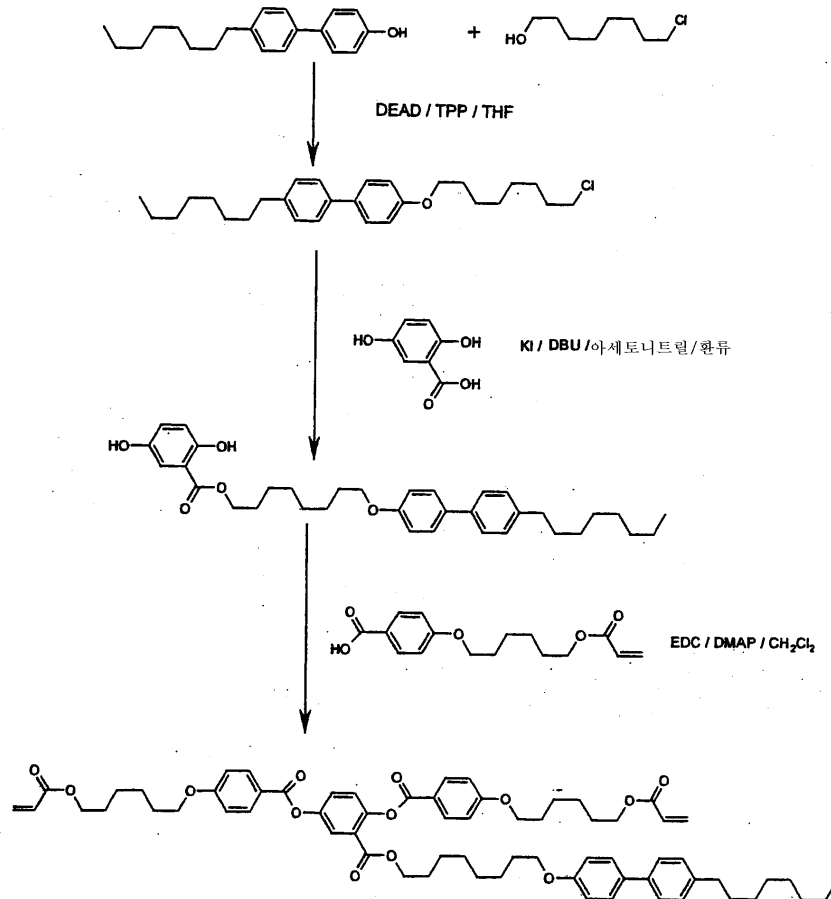
Z⁶은 하나 이상의 할로젠 원자, 바람직하게는 하나 이상의 불소원자로 임의로 치환될 수 있다. p는 1 내지 11인 것이 바람직하다. Z⁶은 치환체를 함유하지 않는 것이 또한 바람직하다. 그룹 Z⁶에 있어서, X는 -CH₂-, -O-, -COO- 및 -OOC-, 특히 -CH₂- 및 -O-로부터 선택된다.

그룹 R²는 CH₂=CW-COO- 및 CH₂=CH-O-로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

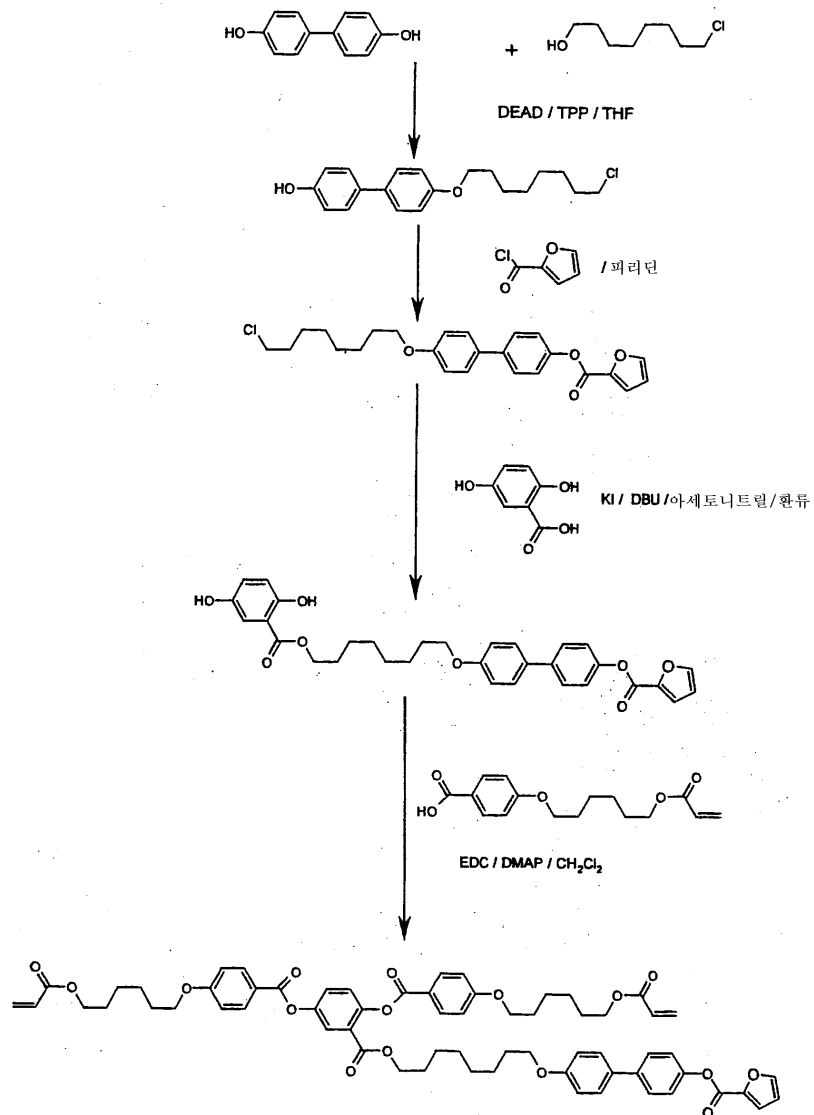
그룹 G^1 과 G^2 각각에 대한 2개의 정수 m 의 합은 0 또는 1인 것이 바람직하다. G^1 과 G^2 둘 다에 대한 m 은 0인 것이 특히 바람직하다.

본 발명의 화합물은 다음 반응식 1과 반응식 2에 제시된 공정들 중의 어느 하나에 따라서 당해 기술분야의 숙련인들에게 익히 공지되어 있는 공정을 사용하여 용이하게 제조할 수 있다.

반응식 1



반응식 2



위의 반응식 1과 반응식 2에서,

DEAD는 디에틸 아조디카복실레이트이고,

TPP는 트리페닐포스핀이고,

THF는 테트라하이드로푸란이고,

KI는 요오드화칼륨이고,

DBU는 1,8-디아자비사이클로[5.4.0]운데크-7-엔이고,

EDC는 N-(3-디메틸아미노프로필)-N'-에틸카보디이미드 하이드로클로라이드이고,

DMAP는 4-디메틸아미노피리딘이다.

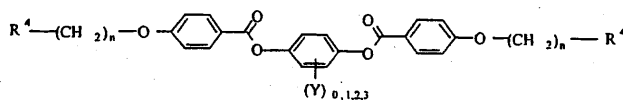
본 발명의 화합물의 제조에 사용되는 적합한 출발 물질은 다른 것들 중에서 페닐 및 비페닐 알콜 및 카복실산 화합물 뿐만 아니라 1,4-사이클로헥산디온을 포함한다. 당해 출발물질들은 시판되고 있거나 용이하게 제조할 수 있으며 당해 기술분야의 숙련인들에게 익히 공지되어 있다.

본 발명의 화합물은 바람직하게는 메소겐 잔기를 결합시키기 전에 측면 그룹을 포함하는 환을 형성시킴으로써 제조한다. 또는, 당해 화합물은 측면 그룹을 결합시키기 전에 중합성 메소겐 잔기를 포함하는 환을 형성시킴으로써 제조할 수 있다. 따라서, 본 발명의 제2 양태는 측면 그룹을 포함하는 환을 형성시킨 후, 메소겐 잔기를 이에 결합시킴을 포함하는, 화학식 I의 화합물의 제조방법을 제공한다. 메소겐 잔기 G^1 과 G^2 는 바람직하게는 중심환에 동시에 결합된다. 위에서 언급한 바와 같이, 메소겐 잔기 G^1 과 G^2 는 동일한 것이 특히 바람직하다.

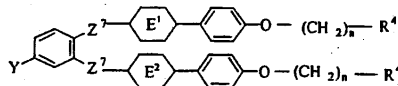
본 발명의 화합물은 액정 혼합물의 제조에 사용할 수 있는 것으로 평가된다. 당해 혼합물은 화학식 I의 화합물과 하나 이상의 추가 성분을 혼합하여 제조할 수 있다. 유기 용매를 또한 당해 혼합물의 제조에 사용할 수 있다. 따라서, 본 발명의 제3 양태는 화학식 I의 화합물과 하나 이상의 추가 성분을 포함하는 액정 혼합물을 제공한다. 액정 혼합물에 존재하는 하나 이상의 추가 성분은 또 다른 화학식 I의 화합물, 기타 메소겐 화합물, 메소겐 분자 구조와 상용성인 화합물 또는 나선형 피치 도입용 키랄 도판트일 수 있다. LCP 혼합물은 또한 적합한 유기 용매를 포함할 수 있다. 이러한 액정 혼합물의 제조에 사용될 수 있는 용매의 예는 아니솔, N-메틸모르폴린, 카프롤락톤, 사이클로헥산온, 메틸 에틸 케톤 등이다.

본 발명의 제3 양태에 따르는 액정 LCP 혼합물의 제조에 사용될 수 있는 추가 성분의 예에는 화학식 IIIb 내지 화학식 X의 화합물이 포함된다.

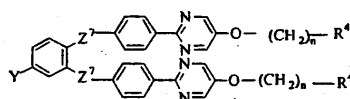
화학식 IIIb



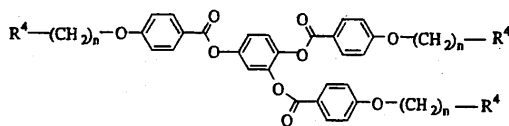
화학식 IV



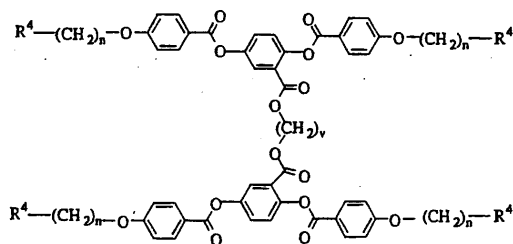
화학식 V



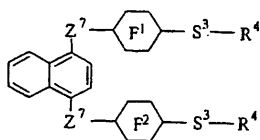
화학식 VI



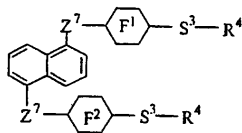
화학식 VII



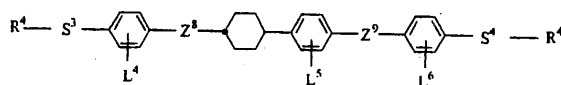
화학식 VIII



화학식 IX

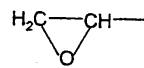


화학식 X



위의 화학식 IIIb 내지 화학식 X에서,

R^4 는 $CH_2=CH-O-$, $CH_2=CH-COO-$, $CH_2=C(CH_3)-COO-$, $CH_2=C(Cl)-COO-$ 및



로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

S^3 과 S^4 는 독립적으로 $-(CH_2)_n-$ 또는 $-O(CH_2)_n-$ 이고,

E^1 과 E^2 는 독립적으로 1,4-페닐렌, 트랜스-1,4-사이클로헥실렌, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일 및 트랜스-1,4-사이클로헥실렌-1,4-페닐렌으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

F^1 과 F^2 는 독립적으로 1,4-페닐렌 및 2- 또는 3-플루오로-1,4-페닐렌으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

L^4 , L^5 및 L^6 은 독립적으로 OH, C_1-C_{20} 알킬, C_1-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_1-C_{20} 알콕시-카보닐, 포르밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시, 할로젠, 시아노 및 니트로로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^7 은 $-COO-$, $-OOC-$, $-OCH_2-$, $-CH_2O-$, $-O(CH_2)_3-$, $-OOC(CH_2)_2-$ 및 $-COO(CH_2)_3-$ 으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^8 은 단일 결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-COO-$, $-OOC-$, $-(CH_2)_4-$, $-O(CH_2)_3-$, $(CH_2)_3O-$ 및 $-C\equiv C-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Z^9 은 단일 결합, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2O-$, $-OCH_2-$, $-COO-$, $-OOC-$ 및 $-C\equiv C-$ 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

Y 는 독립적으로 하이드록시, C_1-C_{20} 알킬, C_1-C_{20} 알케닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_1-C_{20} 알콕시카보닐, 포르밀, C_1-C_{20} 알킬카보닐, C_1-C_{20} 알킬카보닐옥시, 플루오로, 클로로, 브로모, 시아노 및 니트로로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

n 은 2 내지 20의 정수이고,

v 는 2 내지 12의 정수이다.

본 발명의 화합물은 또한 본 발명의 제1 양태에 따르는 LCP 화합물 또는 본 발명의 제3 양태에 따르는 혼합물을 기관 위에 캐스팅함으로써 LCP 층의 형성에도 사용할 수 있다. 따라서, 본 발명의 제4 양태는 화학식 I의 화합물을 포함하는 LCP 층을 형성시키고 당해 층을 가교결합시킴을 포함하는 LCP 네트워크의 형성방법을 제공한다. 본 발명의 제3 양태에 따르는 액정 혼합물도 이와 유사한 방식으로 LCP 네트워크의 제조에 사용할 수 있다.

본 발명은 또한 제5 양태로서 가교결합된 형태의 화학식 I의 화합물을 포함하는 가교결합된 LCP 네트워크를 포함한다. 본 발명의 제3 양태에 따르는 혼합물을 가교결합된 형태로 포함하는 가교결합된 LCP 네트워크도 또한 본 발명의 제5 양태에 포함될 수 있다.

본 발명의 제6 양태는 광학 장치 또는 전자광학 장치의 제조에 있어서의 화학식 I의 화합물의 용도를 제공한다. 광학 장치 또는 전자광학 장치의 제조에 있어서의 본 발명의 제3 양태에 따르는 액정 혼합물의 용도도 또한 본 발명의 제6 양태에 포함된다.

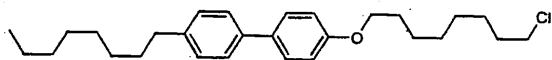
본 발명의 제7 양태는 화학식 I의 화합물을 가교결합된 상태로 포함하는 광학 장치 또는 전자광학 장치를 제공한다. 본 발명의 제3 양태에 따르는 LCP 액정 혼합물을 가교결합된 상태로 포함하는 광학 장치 또는 전자광학 장치도 본 발명의 제7 양태에 포함된다.

본 발명은 이제 다음 비제한적 실시예를 참고로 하여 기재하고자 한다. 당해 실시예는 단지 예시용으로 제공된 것일 뿐이다. 본 발명의 범주 내에 속하는 이들 실시예의 변형은 당해 기술분야의 숙련인들에게는 자명하다.

실시예

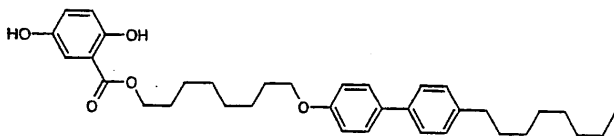
실시예 1

8-클로로옥틸-4-(4'-옥틸비페닐)에테르의 합성



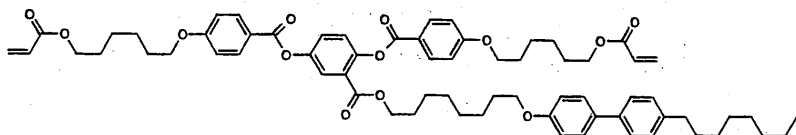
테트라하이드로푸란(10ml) 중의 디에틸 아조디카복실레이트(2.1g, 12mmol)의 용액을 0℃에서 4-옥틸-4'-하이드록시비페닐(3.2g, 11.3mmol), 8-클로로옥탄올(1.9g, 12mmol), 트리페닐포스핀(3.2g, 12mmol) 및 테트라하이드로푸란(80ml)의 용액에 적가하고, 실온에서 밤새 교반한다. 반응 혼합물을 물(200ml)에 가하고, 각각 에틸 아세테이트(100ml)로 3회 추출한다. 합한 유기 층을 각각 물(100ml)로 2회 세척하고, 황산마그네슘 상에서 건조시킨 후, 여과한다. 용매를 진공하에서 제거한다. 잔류물(11.1g)을, 톨루엔/에틸 아세테이트 혼합물(95:5)을 용출제로서 사용하여 실리카 겔 칼럼으로 섬광 크로마토그래피하여 정제함으로써 8-클로로옥틸-4-(4'-옥틸비페닐)에테르를 4.4g(93%) 수득한다.

8-[(4'-옥틸-4-비페닐)옥시]옥틸 2,5-디하이드록시벤조에이트의 합성



2,5-디하이드록시벤조산(1.7g, 11.0mmol), 1,8-디아자비사이클로-[5.4.0]운데크-7-엔(1.7g, 11.0mmol), 8-클로로옥틸-4'-옥틸-4-비페닐 에테르(4.4g, 10.2mmol), 요오드화칼륨(6.6g, 40.0mmol) 및 아세토니트릴(150ml)의 혼합물을 환류하에 72시간 동안 가열한다. 반응 혼합물을 냉각시키고, 물(600ml)에 부어넣은 후, 각각 에틸 아세테이트(150ml)로 3회 추출한다. 합한 유기 층을 1N 염산(150ml)으로 세척하고, 각각 물(150ml)로 2회 세척한 후, 황산마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한다. 용매를 진공하에서 제거한다. 잔류물(4.9g)을 에틸 아세테이트/톨루엔으로부터 재결정화로 정제하여 8-[(4'-옥틸-4-비페닐)옥시]옥틸 2,5-디하이드록시벤조에이트를 4.5g(80%) 수득한다.

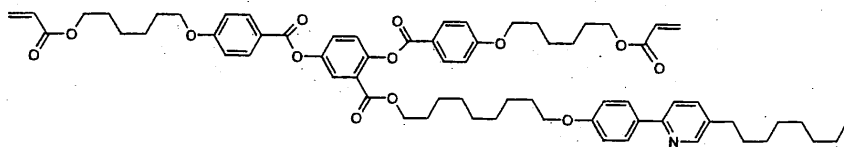
[[[8-[(4'-옥틸-4-비페닐)옥시]옥틸]옥시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[6-(아크릴로일옥시)헥실]옥시]벤조에이트의 합성



디클로로메탄(50ml) 중의 N-(3-디메틸아미노프로필)-N'-에틸-카보다이미드 하이드로클로라이드(2.6g, 13.7mmol)의 용액을 디클로로메탄(100ml) 중의 8-[(4'-옥틸-4-비페닐릴)옥시]옥틸-2,5-디하이드록시벤조에이트(3.0g, 5.5mmol), 4-(6-아크릴로일-헥실옥시)벤조산(4.1g, 13.7mmol) 및 4-디메틸아미노피리딘(1.3g, 10.9mmol)의 용액에 서서히 가한다. 혼합물을 실온에서 밤새 교반하고, 물(200ml)에 가한 후, 각각 디클로로메탄(100ml)으로 3회 추출한다. 합한 유기 층을 각각 물(100ml)로 2회 세척하고, 황산마그네슘 상에서 건조시킨 후, 여과한다. 용매를 진공하에서 제거한다. 잔류물(8.4g)을, 톨루엔/에틸 아세테이트 혼합물(95:5)을 용출제로서 사용하여 실리카 겔 칼럼 상에서 섬광 크로마토그래피하여 정제한다. 에틸 아세테이트/헥산으로부터 재결정화하여 [[8-[(4'-옥틸-4-비페닐)옥시]옥틸]옥시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[[6-(아크릴로일옥시)헥실]옥시]벤조에이트]를 2.2g(38%) 수득한다. Mp(C-N) = 89.5℃; Clp(N-I) = 103℃

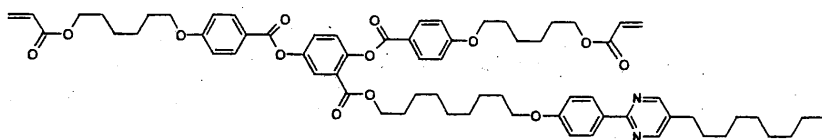
다음 화합물을 유사한 방법으로 합성한다.

2,5-비스-[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]벤조산 8-[4-(5-옥틸피리딘-2-일)페녹시]노닐 에스테르



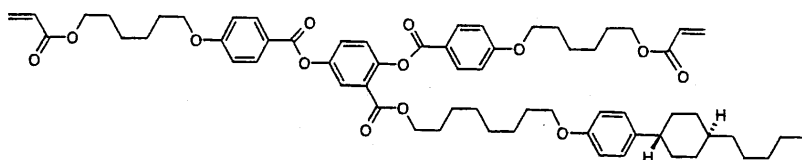
Mp(C-N) = 61℃; Clp(N-I) = 89℃

[[[9-[p-(5-노닐-2-피리미디닐)페녹시]노닐]옥시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[[6-(아크릴로일옥시)헥실]옥시]벤조에이트]

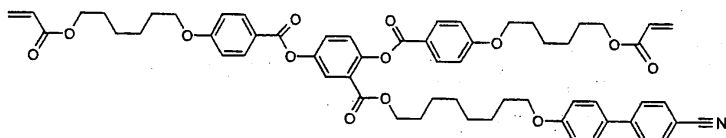


Mp(C-N) = 55.5℃; Clp(N-I) = 90.2℃

[[[8-[p-(트랜스-4-펜틸사이클로헥실)페녹시]옥틸]옥시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[[6-(아크릴로일옥시)헥실]옥시]벤조에이트]



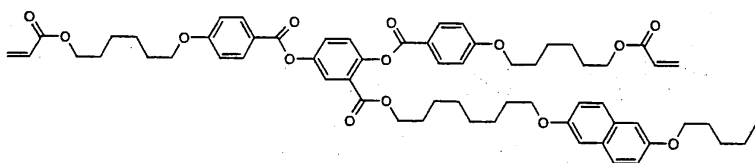
[[[8-[(4'-시아노-4-비페닐릴)옥시]옥틸]옥시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[[6-(아크릴로일옥시)헥실]옥시]벤조에이트]



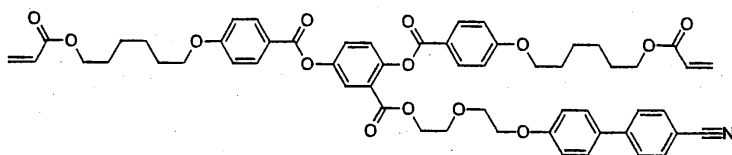
$M_p(C-N) = 72^{\circ}C$; $Cl_p(N-I) = 114.7^{\circ}C$

MPK에서의 용해도: 7.2%

2,5-비스[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]벤조산 8-(6-펜틸옥시-2-나프틸옥시)옥틸 에스테르



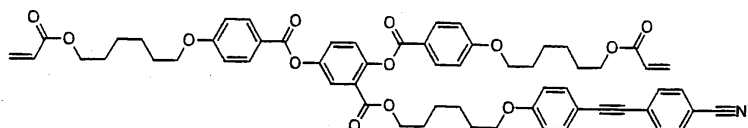
[[2-[2-[(4'-시아노-4-비페닐릴)옥시]에톡시]에톡시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[6-(아크릴로일옥시)헥실옥시]벤조에이트



$M_p(C-N) = 54^{\circ}C$; $Cl_p(N-I) = 86^{\circ}C$

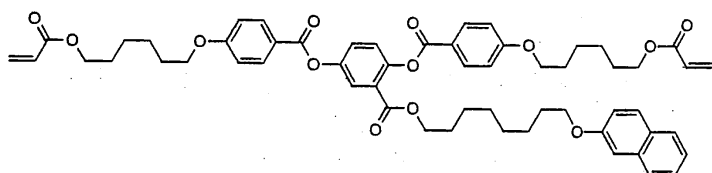
MPK에서의 용해도: 33.2%

2,5-비스[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]벤조산 6-[4-[(4-시아노페닐)에틸닐]페닐옥시]헥실 에스테르



$M_p(C-N) = 71.4^{\circ}C$; $Cl_p(N-I) = 130.6^{\circ}C$

2,5-비스[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]벤조산 8-(2-나프틸옥시)옥틸 에스테르

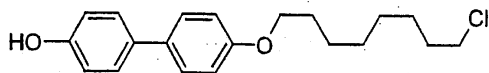


$M_p(C-N) = 63^{\circ}C$; $Cl_p(N-I) = 74^{\circ}C$

당해 화합물은 과냉각될 수 있다.

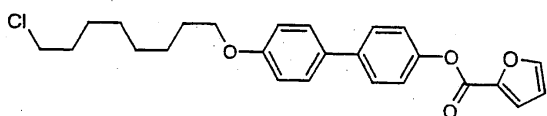
실시예 2

4'-[(8-클로로옥틸)옥시]-4-비페닐롤의 합성



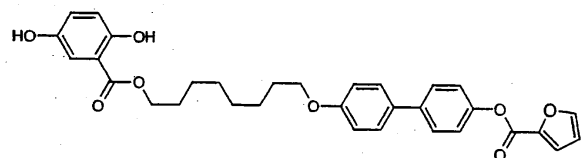
디에틸 아조디카복실레이트(3.5g, 20mmol)와 테트라하이드로푸란(10ml)의 용액을 0℃에서 4,4'-디하이드록시비페닐(7.4g, 40mmol), 8-클로로-1-옥탄올(3.3g, 20mmol), 트리페닐포스핀(5.2g, 20mmol) 및 테트라하이드로푸란(120ml)의 용액에 적가하고, 실온에서 72시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 물(400ml)에 가하고, 각각 에틸 아세테이트(150ml)로 3회 추출한다. 합한 유기 층을 각각 물(150ml)로 2회 세척하고, 황산마그네슘 상에서 건조시킨 후, 여과한다. 용매를 진공하에서 제거한다. 잔류물(19.2g)을, 톨루엔/에틸 아세테이트 혼합물(95:5)을 용출제로서 사용하여 실리카 겔 칼럼 상에서 섬광 크로마토그래피하여 정제함으로써 4'-[(8-클로로옥틸)옥시]-4-비페닐롤을 2.6g(40%) 수득한다.

4'-[(8-클로로옥틸)옥시]-4-비페닐릴 2-푸로에이트의 합성



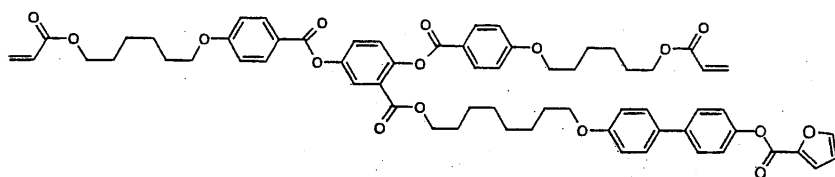
2-푸로일 클로라이드(1.3g, 9.8mmol)의 용액을 0℃에서 4'-[(8-클로로옥틸)옥시]-4-비페닐롤(2.6g, 7.8mmol)과 피리딘(20g, 253mmol)의 용액에 적가하고, 실온에서 밤새 교반한다. 생성된 혼합물을 1N 염산(200ml)에 가하고, 각각 에틸 아세테이트(100ml)로 3회 추출한다. 합한 유기 층을 각각 염화나트륨 포화 용액(80ml)으로 2회 세척하고, 황산마그네슘 상에서 건조시킨 후, 여과한다. 용매를 진공하에서 제거한다. 잔류물(3.3g)을 에틸 아세테이트/헥산을 사용하여 재결정화하여 정제함으로써 4'-[(8-클로로옥틸)옥시]-4-비페닐릴-2-푸로에이트를 2.9g(88%) 수득한다.

{[8-[(2,5-디하이드록시벤조일)옥시]옥틸]옥시}-4-비페닐릴 2-푸로에이트의 합성



2,5-디하이드록시벤조산(1.1g, 7.0mmol), 1,8-디아자비사이클로-[5.4.0]운데크-7-엔(1.1g, 7.0mmol), 4'-[(8-클로로옥틸)옥시]-4-비페닐-2-푸로에이트(2.9g, 6.8mmol), 요오드화칼륨(5.2g, 35mmol) 및 아세토니트릴(100ml)의 혼합물을 환류하에 48시간 동안 가열한다. 냉각된 반응 혼합물을 물(500ml)에 붓고, 각각 에틸 아세테이트(150ml)로 3회 추출한다. 합한 유기 층을 1N 염산(100ml)으로 세척하고, 각각 물(100ml)로 2회 세척한 후, 황산마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한다. 용매를 진공하에서 제거한다. 잔류물(2.8g)을, 톨루엔/에틸 아세테이트 혼합물(93:7)을 용출제로서 사용하여 실리카 겔 칼럼 상에서 섬광 크로마토그래피하여 정제함으로써 {[8-[(2,5-디하이드록시벤조일)옥시]옥틸]옥시}-4-비페닐릴-2-푸로에이트를 1.1g(30%) 수득한다.

푸란-2-카복실산 4'-(8-{2,5-비스-[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)-벤조일옥시]벤조일옥시}옥틸옥시)비페닐-4-일 에스테르의 합성

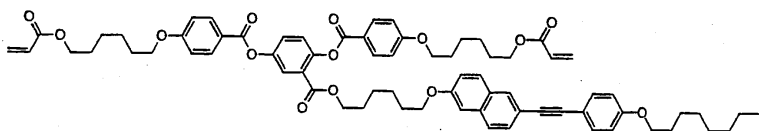


디클로로메탄(20ml) 중의 N-(3-디메틸아미노프로필)-N'-에틸-카보디이미드 하이드로클로라이드(1.0g, 5.1mmol)의 용액을 0℃에서 디클로로메탄(30ml) 중의 4'-{[8-[(2,5-디하이드록시벤조일)옥시]옥틸}옥시}-4-비페닐릴-2-푸로에이트(1.1g, 2.0mmol), 4-(6-아크릴로일헥실옥시)벤조산(1.5g, 5.0mmol) 및 4-디메틸아미노피리딘(0.5g, 3.9mmol)의 용액에 서서히 가한다. 혼합물을 실온에서 밤새 교반하고, 물(200ml)에 가한 후, 각각 디클로로메탄(100ml)으로 3회 추출한다. 유기 층을 각각 물(80ml)로 2회 세척하고, 황산마그네슘 상에서 건조시킨 후, 여과한다. 용매를 진공하에서 제거한다. 잔류물(2.6g)을, 톨루엔/에틸 아세테이트 혼합물(90:10)을 용출제로서 사용하여 실리카 겔 칼럼 상에서 섬광 크로마토그래피하여 정제한다. 에틸 아세테이트/이소프로판올로부터 재결정화하여 푸란-2-카복실산 4'-8-{2,5-비스[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]-벤조일옥시}옥틸옥시}비페닐-4-일 에스테르를 0.4g(19%) 수득한다.

Mp(C-N) = 89.5℃; Clp = 103℃.

당해 화합물은 실온 미만의 온도에서 과냉각될 수 있다.

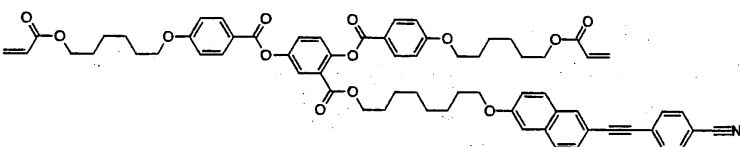
2,5-비스[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]벤조산 8-[6-[(4-옥틸옥시페닐)에티닐]-2-나프틸옥시]헥실 에스테르



Mp(C-N) = 67℃; Clp(N-I) = 145℃

당해 화합물은 과냉각될 수 있다.

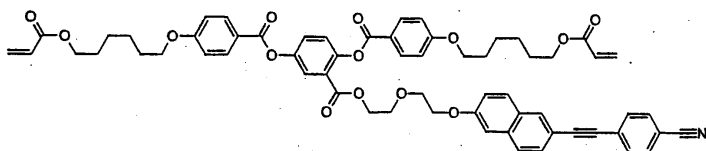
2,5-비스[4-(6-아크릴로일옥시헥실옥시)벤조일옥시]벤조산 8-[6-[(4-시아노페닐)에티닐]-2-나프틸옥시]옥틸 에스테르



Mp(C-N) = 103℃; Clp(N-I) = 142℃

당해 화합물은 과냉각될 수 있다.

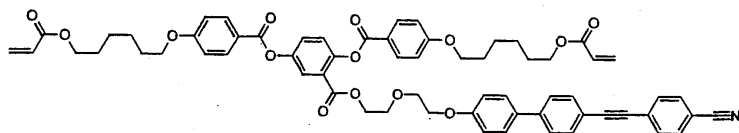
[[2-[2-[2-[(4-시아노페닐)에티닐]-6-나프틸옥시]에톡시]에톡시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[6-(아크릴로일옥시)헥실옥시]벤조에이트]



Mp(C-N) = 90℃; Clp(N-I) = 133℃

당해 화합물은 과냉각될 수 있다.

[[2-[2-[4'-[(4-시아노페닐)에티닐]-4-비페닐릴옥시]에톡시]에톡시]카보닐]-p-페닐렌 비스[p-[6-(아크릴로일옥시)헥실옥시]벤조에이트]



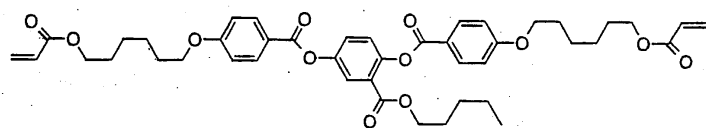
Mp(C-N) = 93°C; Clp(N-I) = 177°C

당해 화합물은 과냉각될 수 있다.

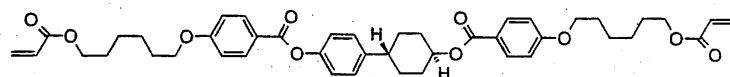
실시예 3

네마틱 LCP 필름의 제조

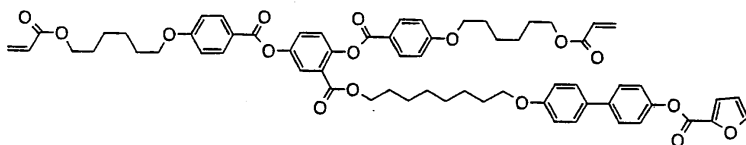
(i) 아니솔 중의



60중량%,



20중량%,

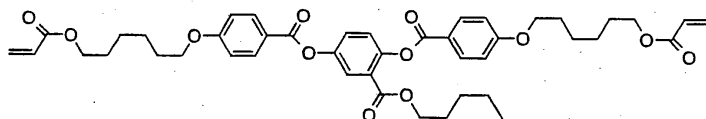


10중량%

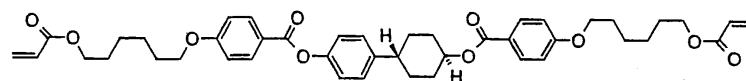
및 중합체 네트워크 형성 촉진제로서의 1,4-부탄디올 디아크릴레이트 10중량%의 혼합물을 제조한다. 조기 중합을 방지하기 위해서, 2,6-디-(3급-부틸)-4-하이드록시톨루엔(BHT) 억제제 500ppm을 추가로 당해 혼합물에 가한다. 이르가큐어(Irgacure) 369[시판원: 스위스 바젤에 소재하는 시바 가이거(Ciba Geigy)]와 같은 개시제 500ppm을 사용하여 중합을 개시시킨다. 혼합물을 실온에서 교반하고, 배향층을 갖는 유리판에 스핀코팅시켜 두께가 약 800nm인 LCP 필름을 형성시킨다. 당해 필름을 50°C에서 1분 또는 2분 동안 건조시키고, 실온하에 N₂ 대기 속에서 약 5분 동안 수은 램프를 사용하여 UV광을 조사하여 광중합시킨다.

잘 배향된 필름은 실온에서 네마틱 중간상을 나타낸다.

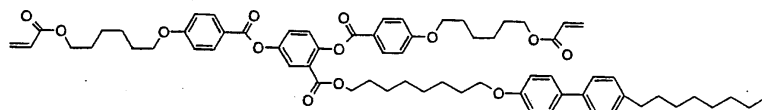
(ii) 아니솔 중의



60중량%,



20중량%,



10중량%

및 1,4-부탄디올 디아크릴레이트[시판원: 알드리히(Aldrich)] 10중량%의 혼합물을 실시예 1의 공정에 따라 제조한다.

당해 네마틱 필름도 또한 투명점이 약 85℃인, 실온에서 잘 배향된 네마틱 중간상을 나타낸다. 또한, 당해 필름은 타원편광 측정 결과, 기판면에 대해 약 1°의 경사각을 나타낸다.