

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016년 11월 24일 (24.11.2016)

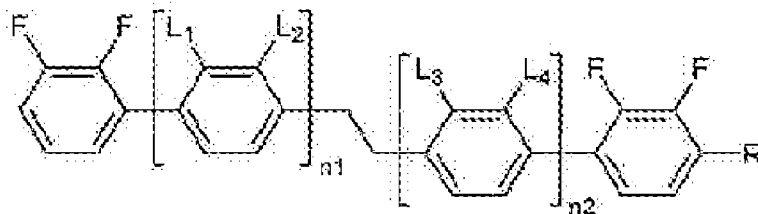


(10) 국제공개번호
WO 2016/186465 A1

- (51) 국제특허분류: C09K 19/14 (2006.01) C09K 19/30 (2006.01)
C09K 19/42 (2006.01)
 - (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/005326
 - (22) 국제출원일: 2016년 5월 19일 (19.05.2016)
 - (25) 출원언어: 한국어
 - (26) 공개언어: 한국어
 - (30) 우선권정보: 10-2015-0069873 2015년 5월 19일 (19.05.2015) KR
 - (71) 출원인: 주식회사 동진세미켐 (DONGJIN SEMI-CHEM CO., LTD.) [KR/KR]; 22824 인천시 서구 백범로 644, Incheon (KR).
 - (72) 발명자: 최진욱 (CHOI, Jin Wook); 18635 경기도 화성시 양감면 작은돌래길 35, Gyeonggi-do (KR). 송정인 (SONG, Jeong In); 18635 경기도 화성시 양감면 작은돌래길 35, Gyeonggi-do (KR). 강소희 (KANG, So Hee); 18635 경기도 화성시 양감면 작은돌래길 35, Gyeonggi-do (KR).
 - (74) 대리인: 유미특허법인 (YOU ME PATENT AND LAW FIRM); 06134 서울시 강남구 테헤란로 115, Seoul (KR).
 - (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
 - (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- 공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

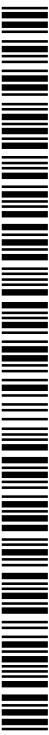
(54) Title: LIQUID CRYSTAL COMPOUND AND LIQUID CRYSTAL COMPOSITION COMPRISING SAME

(54) 발명의 명칭: 액정 화합물 및 이를 포함하는 액정 조성물



(57) Abstract: The liquid crystal compound represented by chemical formula 1 according to the present invention has high dielectric anisotropy, high refractive index anisotropy and low viscosity, and thus can provide a liquid crystal composition optimized for various liquid crystal display devices, particularly, liquid crystal display devices of VA, MVA, PVA, PS-VA, PALC, FFS, PS-FFS, IPS or PS-IPS modes which require fast response times (wherein L1, L2, L3 and L4 are each independently hydrogen or halogen, R is hydrogen, C1-10 alkyl, C2-10 alkenyl or C1-10 alkoxy, and n1 and n2 are each independently an integer ranging from 0 to 2, and the sum of n1 and n2 is from 0 to 2).

(57) 요약서: 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 액정 화합물은 고유전율 이방성, 고굴절률 이방성 및 낮은 점도를 가지며, 따라서 다양한 액정 표시 소자, 특히 신속한 응답 시간을 요구하는 VA, MVA, PVA, PS-VA, PALC, FFS, PS-FFS, IPS 또는 PS-IPS 모드의 액정 표시 소자에 최적화된 액정 조성물을 제공할 수 있다. (상기 식에서, L1, L2, L3 및 L4는 각각 독립적으로 수소 또는 할로젠이고, R은 수소, C1-10 알킬, C2-10 알케닐 또는 C1-10 알콕시이고, 및 n1 및 n2는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이고, n1 및 n2의 합은 0 이상 2 이하이다.)



WO 2016/186465 A1

【명세서】

【발명의 명칭】

액정 화합물 및 이를 포함하는 액정 조성물

【기술분야】

- 5 본 발명은 고유전율 이방성, 고굴절률 이방성 및 낮은 점도를 가지는 액정 화합물 및 이를 포함하는 액정 조성물에 관한 것이다.

【배경기술】

- 액정 표시 소자(LCD)는 시계, 전자 계산기를 비롯하여 각종 전기 기기, 측정 기기, 자동차용 패널, 워드 프로세서, 전자 수첩, 프린터, 컴퓨터, 텔레비전 등에 사용되고 있다. 액정 표시 방식에는 대표적으로 10 TN(Twist nematic), STN(Super-twisted nematic), IPS(In-plane switching), FFS(Fringe field switching) 및 VA(Virtical alignment) 등이 있다.

- 이러한 액정 표시 소자에 사용되는 액정 재료는 저전압 구동 및 고속 15 응답이 가능하며, 넓은 온도 범위에서 동작 가능할 것이 요구된다. 구체적으로, 넓은 온도 범위에서 안정적으로 구동하기 위하여 액정 재료는 약 -20°C 이하에서 안정적인 제반 물성을 나타내며(저온 안정성), 약 70°C 이상의 투명점을 가질 것이 요구된다. 그리고, 저전압 구동 및 고속 응답을 위하여, 액정 재료는 유전율 이방성의 절대값이 크고, 회전 점도가 작으며, 20 적절한 탄성 계수(K_{11} , K_{22} , K_{33} 평균값)를 가질 것이 요구된다.

- 이와 같은 액정 재료의 요구 물성은 1 내지 2 종류의 액정 화합물을 사용하여 만족시키는 것은 불가능하며, 통상적으로 7 내지 20 종류의 액정 화합물을 배합하여 충족시키고 있다.

25

- 한편, 상기 액정 표시 방식 중 IPS 혹은 VA 등은 현재 범용의 TN이나 STN과 달리 유전율 이방성이 음(-)인 액정 재료를 사용한다는 특징을 갖는다. 그러나, 유전율 이방성이 음인 네가티브 액정 재료는 분자 측면에 극성 치환기가 존재하여 포지티브 액정 재료에 비하여 유전율 이방성을 30 조금만 변화시켜도 회전 점도가 크게 상승하는 문제가 있다. 이에 따라,

고속 응답이 가능한 IPS 혹은 VA형 액정 표시 소자를 제공하기 위하여 유전율 이방성이 음이며, 절대값이 크고, 점성이 낮은 액정 화합물의 개발이 요구되고 있다.

【발명의 내용】

5 【해결하려는 과제】

본 발명은 고유전율 이방성, 고굴절률 이방성 및 낮은 점도를 가지는 액정 화합물 및 이의 제조 방법을 제공하기 위한 것이다.

또한, 본 발명은 상기 액정 화합물을 1종 이상 포함하는 액정 조성물을 제공하기 위한 것이다.

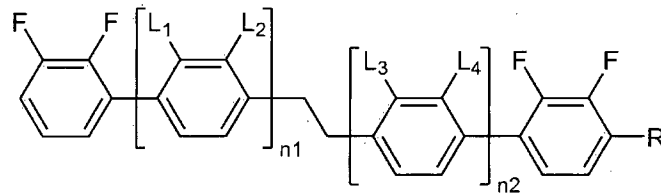
10 또한, 본 발명은 상기 액정 조성물을 포함하는 액정 표시 소자를 제공하기 위한 것이다.

【과제의 해결 수단】

상기 과제를 해결하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 액정 화합물을 제공한다:

15

[화학식 1]



상기 식에서,

L₁, L₂, L₃ 및 L₄는 각각 독립적으로 수소 또는 할로젠이고,

R은 수소, C₁₋₁₀ 알킬, C₂₋₁₀ 알케닐 또는 C₁₋₁₀ 알콕시이고, 및

20 n₁ 및 n₂는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이고, n₁ 및 n₂의 합은 0 이상 2 이하이다.

상기 화학식 1로 표시되는 액정 화합물은, 음의 유전율 이방성을 가지는 액정 화합물로서, 상기 페닐기를 에틸렌(-CH₂-CH₂-)으로 연결함에 따라 액정의 점도를 낮출 수 있으며, 이에 따라 액정상을 최적화할 수 있다.

또한, 상기 화학식 1의 양말단은 2,3-디플루오로페닐기를 가지고, 적어도 하나의 말단에는 치환기로 알킬기를 가지지 않으며, 이러한 구조에

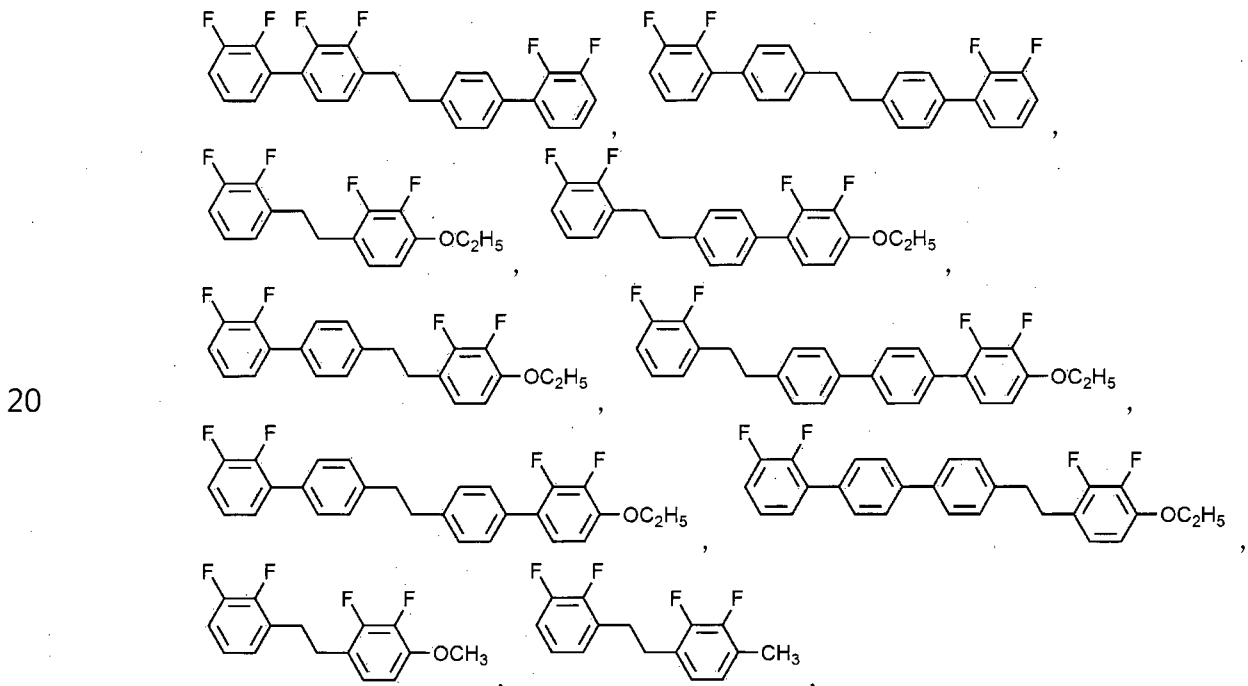
의하여 음의 유전율 이방성을 가질 수 있으며, 높은 유전율 값을 나타낼 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 액정 화합물은 벤젠 고리 만으로 구성되어 있고, n1 및 n2에 따라 벤젠 고리의 개수를 조절하여 높은 굴절률 이방성 값을 가질 수 있으며, 따라서 액정 표시 소자의 빠른 응답 속도를 구현할 수 있다.

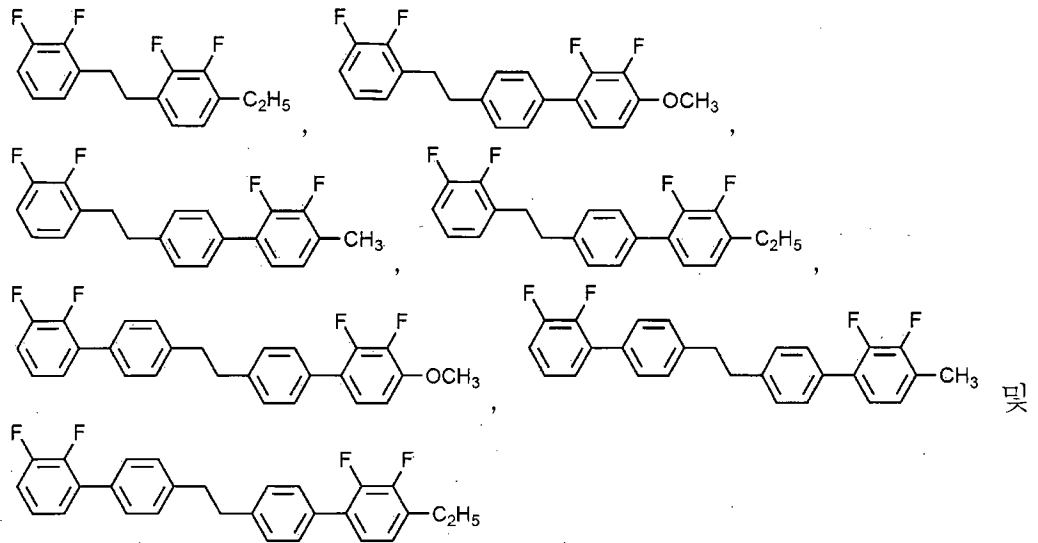
바람직하게는, 상기 L₁, L₂, L₃ 및 L₄는 각각 독립적으로 수소 또는 플루오로이다. 또한 바람직하게는, 상기 L₁ 및 L₂가 동일하다. 또한 바람직하게는, 상기 L₃ 및 L₄가 동일하다. 예컨대, L₁ 및 L₂는 모두 수소이거나 모두 플루오로일 수 있다.

또한 바람직하게는, R은 수소, 메틸, 에틸, 메톡시 또는 에톡시이다.

또한, n1 및 n2의 합이 0 이상 2 이하이므로, 상기 액정 화합물은 벤젠 고리를 2개, 3개 또는 4개를 가질 수 있다.

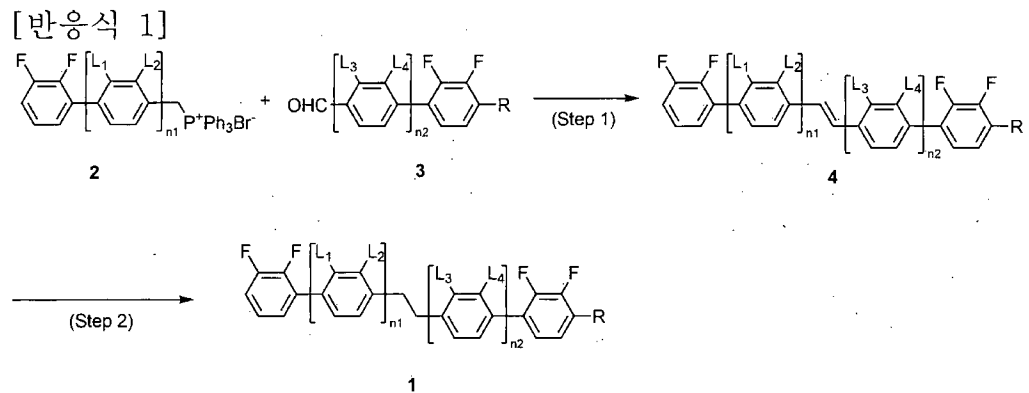
상기 화학식 1로 표시되는 액정 화합물의 대표적인 예를 다음과 같다:





5

또한, 본 발명은 하기 반응식 1과 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 액정 화합물의 제조 방법을 제공한다.



10 (상기 반응식 1에서, L₁, L₂, L₃, L₄, R, n₁ 및 n₂는 앞서 정의한 바와 같다)

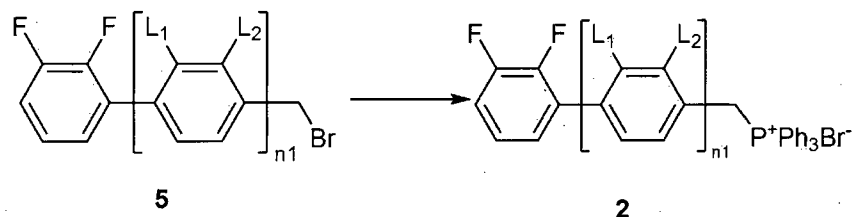
상기 단계 1은, 화학식 2로 표시되는 화합물과 화학식 3으로 표시되는 화합물을 반응시켜 화학식 4로 표시되는 화합물을 제조하는 단계로서, 에텐(-CH=CH-) 결합으로 두 화합물을 결합하는 단계이다. 용매로는 THF를 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 포타슘 터셔리-부톡사이드의 존재하에 반응시키는 것이 바람직하다. 반응 온도는 0°C 이하가 바람직하다.

20 상기 단계 2는 화학식 4로 표시되는 화합물을 수소와 반응시켜 목적

화합물은 화학식 1로 표시되는 화합물을 제조하는 단계이다. 상기 반응을 위하여 수소화 촉매를 사용할 수 있으며, 예컨대 팔라듐/활성탄을 사용할 수 있다.

5 또한, 일례로, 상기 출발 물질인 화학식 2로 표시되는 화합물은 하기 반응식 2와 같은 방법으로 제조할 수 있다.

[반응식 2]



(상기 반응식 2에서, L1, L2, n1 및 n2는 앞서 정의한 바와 같다)

10

상기 반응은, 화학식 5로 표시되는 화합물을 PPh₃와 반응시켜 화학식 5로 표시되는 화합물의 브로모를 P⁺Ph₃Br⁻로 치환시키는 반응이다.

15 또한, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 액정 화합물을 1종 이상 포함하는 액정 조성물을 제공한다.

상기 액정 조성물은 액정 조성물 전체 중량에 대하여 3 중량% 이상 또는 4 중량% 이상으로 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 액정 화합물을 포함할 수 있다. 만일 화학식 1로 표시되는 액정 화합물의 함량이
 20 상기 범위 미만이면, 이로 인한 응답 속도의 향상 효과가 미미할 수 있다. 또한, 상기 액정 조성물은 액정 조성물 전체 중량에 대하여 60 중량% 이하, 40 중량% 이하, 30 중량% 이하 또는 20 중량% 이하로 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 액정 화합물을 포함할 수 있다. 만일 화학식 1로 표시되는 액정 화합물의 함량이 상기 범위를 초과하면, 액정 조성물의
 25 상전이 온도가 크게 증가되어 저온 영역에서 액정상을 확보할 수 없다는 문제가 초래될 수 있다.

상기 액정 조성물은 화학식 1의 액정 화합물 외에도 액정 표시 소자의 제반 성능을 위하여 다양한 액정 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 일례로, 상기 액정 조성물은 후술할 하기 화학식 2 내지 5로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 액정 화합물을 추가로 포함할 수 있다.

5

상기 액정 조성물은 기존에 알려진 저점도의 액정 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 이러한 저점도의 액정 화합물로는 하기 화학식 2로 표시되는 액정 화합물 등을 사용할 수 있다.

[화학식 2]



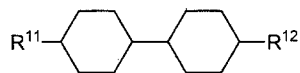
상기 화학식 2에서,

R^{11} 및 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 $-CH_2-$ 가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 $-C\equiv C-$,
 15 $-CH=CH-$, $-CF_2O-$, $-O-$, $-COO-$ 또는 $-OCO-$ 로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로젠으로 대체된 라디칼이고,

A^3 및 A^4 는 각각 독립적으로 사이클로헥실렌 또는 페닐렌이다.

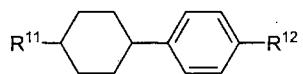
상기 화학식 2로 표시되는 액정 화합물로 하기 화학식 2-1 및 화학식
 20 2-2로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 액정 화합물을 사용하여 높은 비저항을 유지하면서 액정 조성물의 투명점, 회전 점도, 굴절률 이방성 및 유전율 이방성 등을 용이하게 조절할 수 있다.

[화학식 2-1]



25

[화학식 2-2]



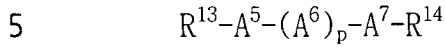
상기 화학식 2-1 및 2-2에서, R^{11} 및 R^{12} 는 화학식 2의 R^{11} 및 R^{12} 와 같이 정의될 수 있다.

30

다른 예로, 상기 액정 조성물은 기존에 알려진 액정 화합물로 상전이

온도가 높거나 고굴절률을 나타내는 액정 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 이러한 액정 화합물로는 하기 화학식 3으로 표시되는 액정 화합물 등을 사용할 수 있다.

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

R^{13} 및 R^{14} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 $-CH_2-$ 가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 $-C\equiv C-$, $-CH=CH-$, $-CF_2O-$, $-O-$, $-COO-$ 또는 $-OCO-$ 로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로젠으로 대체된 라디칼이고,

A^5 및 A^7 은 각각 독립적으로 사이클로헥실렌 또는 페닐렌이며,

A^6 은 사이클로헥실렌, 페닐렌 또는 할로젠으로 치환된 페닐렌이고,

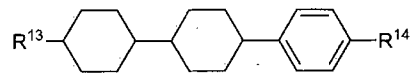
p 는 1 또는 2의 정수이다.

15

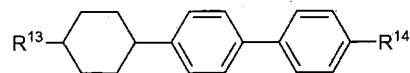
상기 화학식 3으로 표시되는 액정 화합물로 하기 화학식 3-1 내지 3-5로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 액정 화합물을 사용하여 높은 비저항을 유지하면서 액정 조성물의 투명점, 회전 점도, 굴절률 이방성 및 유전율 이방성 등을 용이하게 조절할 수 있다.

20

[화학식 3-1]

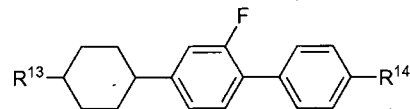


[화학식 3-2]

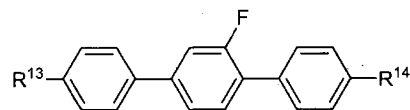


[화학식 3-3]

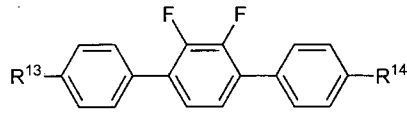
25



[화학식 3-4]



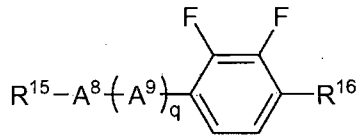
[화학식 3-5]



상기 화학식 3-1 내지 3-5에서, R¹³ 및 R¹⁴는 화학식 3의 R¹³ 및 R¹⁴와 같이 정의될 수 있다.

- 5 또 다른 예로, 상기 액정 조성물은 기존에 알려진 중유전을 액정 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 이러한 중유전을 액정 화합물로는 하기 화학식 4로 표시되는 액정 화합물 등을 사용할 수 있다.

[화학식 4]



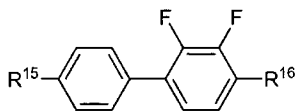
- 10 상기 화학식 4에서,

R¹⁵ 및 R¹⁶은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 -CH₂-가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 -C≡C-, -CH=CH-, -CF₂O-, -O-, -COO- 또는 -OCO-로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로젠으로 대체된 라디칼이고,

- 15 A⁸ 및 A⁹는 각각 독립적으로 사이클로헥실렌, 테트라하이드로피라닐렌, 페닐렌 또는 할로젠으로 치환된 페닐렌이며, q는 0 내지 2 사이의 정수이다.

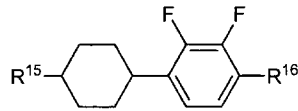
- 20 상기 화학식 4로 표시되는 액정 화합물로 하기 화학식 4-1 내지 화학식 4-4로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 액정 화합물을 사용하여 높은 비저항을 유지하면서 액정 조성물의 투명점, 회전 점도, 굴절률 이방성 및 유전을 이방성 등을 용이하게 조절할 수 있다.

[화학식 4-1]

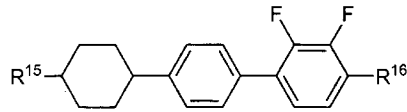


- 25

[화학식 4-2]

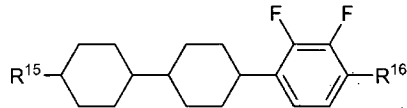


[화학식 4-3]



[화학식 4-4]

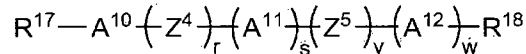
5



상기 화학식 4-1 내지 4-4에서, R¹⁵ 및 R¹⁶는 화학식 4의 R¹⁵ 및 R¹⁶과 같이 정의될 수 있다.

또 다른 예로, 상기 액정 조성물은 기존에 알려진 고유전율 액정 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 이러한 액정 화합물로는 하기 화학식 5로 표시되는 액정 화합물 등을 사용할 수 있다.

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

15 R¹⁷ 및 R¹⁸은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 -CH₂-가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 -C≡C-, -CH=CH-, -CF₂O-, -O-, -COO- 또는 -OCO-로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로겐으로 대체된 라디칼이며,

20 A¹⁰, A¹¹ 및 A¹²는 각각 독립적으로 사이클로헥실렌, 테트라하이드로피라닐렌, 페닐렌 및 할로겐으로 치환된 페닐렌 중 어느 하나이고,

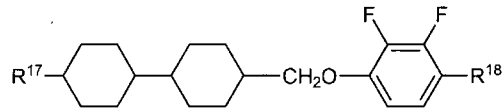
Z⁴ 및 Z⁵는 각각 독립적으로 -CH₂CH₂-, -CH=CH-, -C≡C-, -CH₂O-, -OCH₂-, -CH₂CF₂-, -CHFCHF-, -CF₂CH₂-, -CH₂CHF-, -CHFCH₂-, -C₂F₄-, -COO-, -OCO-, -CF₂O-, -OCF₂- 또는 -O-이며,

25 r 및 v는 0 또는 1이고, r + v는 1 또는 2이며,

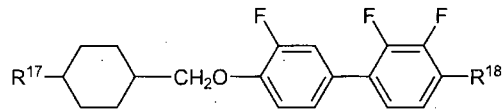
s 및 w는 0 내지 2 사이의 정수이다.

상기 화학식 5로 표시되는 액정 화합물로 하기 화학식 5-1 내지 5-4로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 액정 화합물을 사용하여 높은 비저항을 유지하면서 액정 조성물의 투명점, 회전 점도, 굴절률 이방성 및 유전을 이방성 등을 용이하게 조절할 수 있다.

[화학식 5-1]

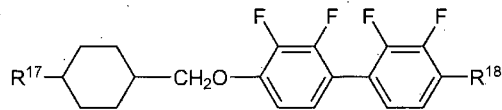


[화학식 5-2]

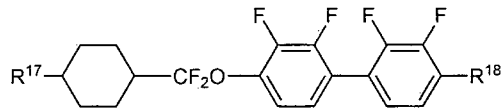


10

[화학식 5-3]



[화학식 5-4]



상기 화학식 5-1 내지 5-4에서, R¹⁷ 및 R¹⁸은 화학식 5의 R¹⁷ 및 R¹⁸과 같이 정의될 수 있다.

15

상기 액정 조성물은 액정 조성물의 목적하는 용도 및 효과를 고려하여 상기 화학식 2 내지 화학식 5로 표시되는 액정 화합물 중 1 이상의 액정 화합물을 적절히 포함할 수 있다. 특히, 상기 액정 조성물은 액정 조성물의 다양한 제반 물성을 균형 있게 향상시키기 위하여 화학식 2, 화학식 3 및 화학식 4로 표시되는 액정 화합물을 포함할 수 있다. 이때, 화학식 2 내지 화학식 4로 표시되는 액정 화합물로 각각 1종 이상의 액정 화합물을 사용할 수 있다.

20

상기 액정 조성물은 액정 화합물 외에도 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상적으로 사용하는 다양한 첨가제를 추가로 포함할 수 있다.

25

일례로, 상기 액정 조성물은 산화 방지제를 추가로 포함할 수 있다. 또한, 상기 액정 조성물은 반응성 메소젠을 추가로 포함할 수 있다. 이러한 반응성 메소젠은 액정상 거동을 나타내는 메소젠기와, 적어도 일측 말단에 광중합, 광가교 또는 광경화 가능한 불포화 작용기, 예를 들어, 비닐기, (메트)아크릴기 또는 에폭시기 등을 갖는 화합물로 정의될 수 있고, 이러한 정의를 충족하는 임의의 화합물을 반응성 메소젠으로서 포함할 수 있다. 일례로, 상기 반응성 메소젠으로, 액정 골격을 갖는 디아크릴레이트 단량체 또는 액정 골격을 갖는 디메타크릴레이트 단량체를 포함할 수 있다.

10 또한, 상기 액정 조성물은 UV 안정제를 추가로 포함할 수 있다. 이러한 UV 안정제로는 Hals (Hindered amine light stabilizer) 계열을 사용할 수 있다.

또한, 본 발명은 상기 액정 조성물을 포함하는 액정 표시 소자를 15 제공한다. 본 발명에 따른 액정 조성물은 낮은 회전 점도 하에서도 높은 음의 유전율을 이방성 및 고굴절률 이방성을 나타내어, 특히 네가티브 액정 재료를 사용하는 VA(Virtical Alignment), MVA(Multidomain Virtical Alignment), PVA(Patterned Virtical Alignment), PS-VA(Polymer Stabilized Virtical Alignment) 또는 IPS(In-Plane Switching) 모드 등의 20 액정 표시 소자의 우수한 제반 성능을 유지하면서 고속 응답을 실현할 수 있을 것으로 기대된다.

【발명의 효과】

본 발명에 따른 액정 화합물은 고유전율 이방성, 고굴절률 이방성 및 낮은 점도를 가지며, 따라서 다양한 액정 표시 소자, 특히 신속한 응답 25 시간을 요구하는 VA, MVA, PVA, PS-VA, PALC, FFS, PS-FFS, IPS 또는 PS-IPS 모드의 액정 표시 소자에 최적화된 액정 조성물을 제공할 수 있다.

【발명을 실시하기 위한 구체적인 내용】

이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예를 제시한다. 그러나 하기의 실시예는 본 발명을 보다 쉽게 이해하기 위하여 제공되는 30 것일 뿐, 이에 의해 본 발명의 내용이 한정되는 것은 아니다.

이하의 실시예, 비교예 및 실험예에 있어서, 액정 화합물의 표기는 하기 표 1과 같다.

【표 1】

중심 그룹 (Core)				연결 그룹 (Linkage)		말단 그룹 (Terminal)			
구조	기호	구조	기호	구조	기호	구조	기호	구조	기호
	A		E	$\text{--CF}_2\text{O--}$	X	$\text{--C}_n\text{H}_{2n-1}$	n (숫자)		OK
	B		F	$\text{--CH}_2\text{CH}_2\text{--}$	N	$\text{--O--C}_n\text{H}_{2n+1}$	On	--OCF_3	OCF3
	C		I	--COO--	L		V	--F	F
	D		Ia				U1	--CF_3	CF3
	Z		P				3=2	--CN	CN
	E1						W	--H	H

- 중심 그룹과 연결 그룹 사이는 별도의 표시 없음
 - 중심/연결 그룹과 말단 그룹은 “-” 로 구분.
 - 말단과 말단은 “.” 으로 구분, 말단은 마지막에 작성
 [예시]

BAE-3.F: C_3H_7 -

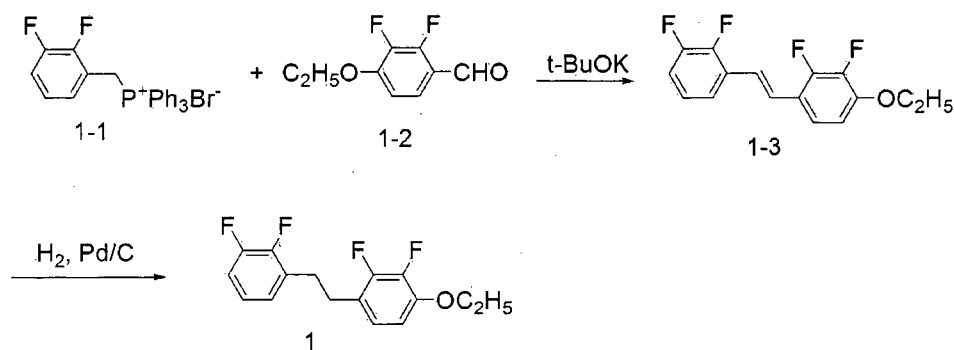
ACEXE1-3.F: C_3H_7 -

BB-3.V: C_3H_7 -

BB-3.U1: C_3H_7 -

5

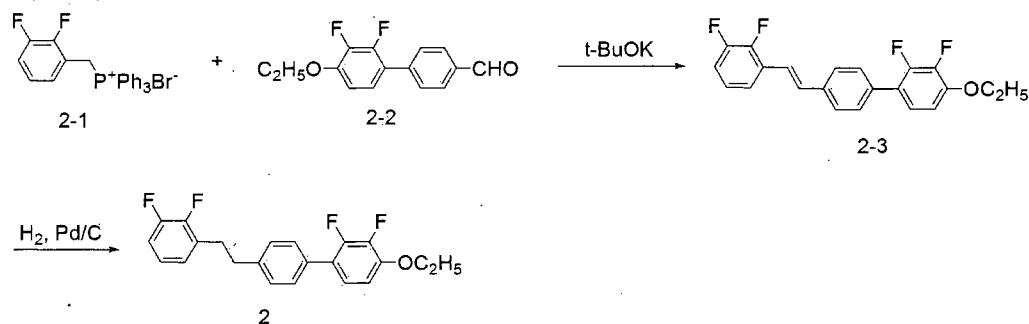
제조예 1(FNF-H.02)



브롬 염 화합물(화학식 1-1, 40 mmol, 18.8g)을 무수 THF에 녹인 후
 -30℃에서 교반하면서 포타슘 터셔리-부톡사이드(48.1 mmol, 5.4 g)를
 서서히 가하고 30분 동안 교반하였다. -30℃에서 알데하이드 화합물(화학식
 5 1-2, 43.7 mmol, 8.13 g)을 THF에 녹여 적가하였다. -10℃로 온도를 올린
 뒤 1시간 동안 교반한 후 반응 용기에 물과 톨루엔 1:1 용매를 넣어 반응을
 종결시켰다. 유기 용매층을 추출하고 감압증류하여 생긴 고체를 컬럼
 크로마토그래피를 통해 분리하여 에텐화합물(화학식 1-3, 60 %, 7.1 g)을
 10 수득하였다. 수득한 에텐화합물(화학식 1-3, 24 mmol, 7.1 g)과
 팔라듐/활성탄(10 wt.%, 1.5 g)을 THF와 메탄올 1:1 용매에 녹인 후
 수소반응기에서 3시간 동안 반응시키고 여과하였다. 여과액을 농축한 후,
 컬럼 크로마토 그래피를 통해 목적 화합물(화학식 1, 94 %, 6.7 g)을
 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.01 (m, 2H), 6.87 (t, 1H), 6.75 (t,
 15 1H), 6.63 (t, 1H), 4.11 (q, 2H), 2.95 (m, 4H), 1.45 (t, 3H); MS m/z
 298 (M⁺); mp 55.9℃

제조예 2(FNAF-H.02)

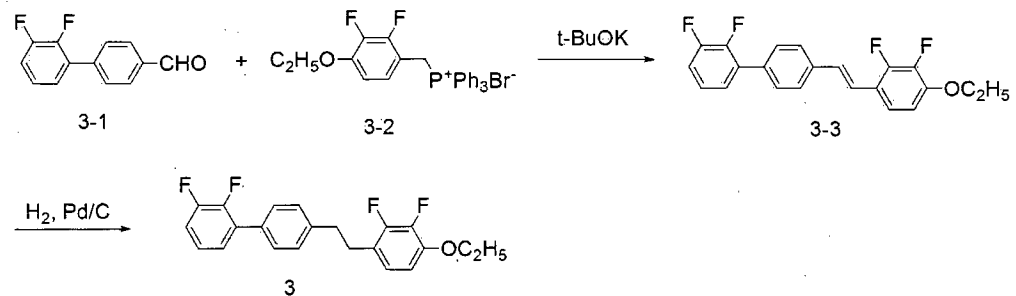


브롬 염 화합물(화학식 2-1, 40 mmol, 18.8 g)을 무수 THF에 녹인 후
 -30℃에서 교반하면서 포타슘 터셔리-부톡사이드(48.1 mmol, 5.4 g)를

서서히 가하고 30분 동안 교반하였다. -30℃에서 알데하이드 화합물(화학식 2-2, 43.7 mmol, 11.45 g)을 THF에 녹여 적가 하였다. -10℃로 온도를 올린 뒤 1시간 동안 교반한 다음, 반응 용기에 물과 톨루엔 1:1 용매를 넣어 반응을 종결시켰다. 유기 용매층을 추출하고 감압증류하여 생긴 고체를 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하여 에텐화합물(화학식 2-3, 57 %, 8.5 g)을 5
수득하였다. 수득한 에텐화합물(화학식 2-3, 22.83 mmol, 8.5 g)과 팔라듐/활성탄(10 wt.%, 2.1 g)을 THF와 메탄올 1:1 용매에 녹인 후 수소 반응기에서 3시간 동안 반응시키고 여과하였다. 여과액을 농축시킨 뒤 컬럼 크로마토그래피를 통해 목적 화합물(화학식 2, 91 %, 7.8 g)을 수득하였다.

10 ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.44 (d, 2H), 7.27 (d, 2H), 7.11 (m, 4H), 6.81 (t, 1H), 4.19 (q, 2H), 3.00 (m, 4H), 1.55 (t, 3H); MS m/z 374 (M⁺); mp 64.9℃

제조예 3(FANF-H.02)

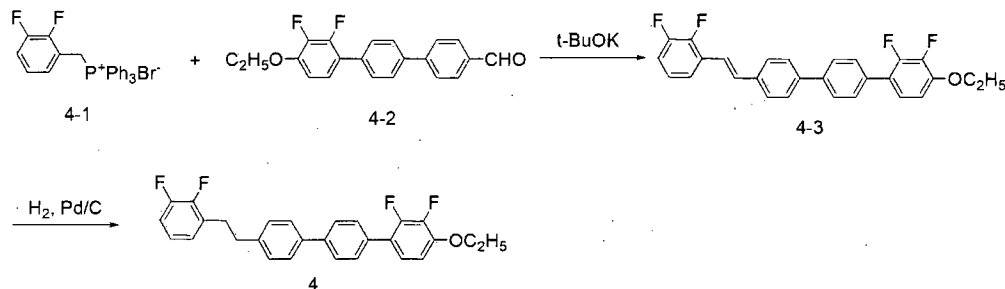


15 브롬 염 화합물(화학식 3-2, 27.3 mmol, 14 g)을 무수 THF에 녹인 후 -30℃에서 교반하면서 포타슘 터셔리-부톡사이드(32.7 mmol, 3.7 g)를 서서히 가하고 30분 동안 교반하였다. -30℃에서 알데하이드 화합물(화학식 3-1, 29.7 mmol, 6.49 g)을 THF에 녹여 적가하였다. -10℃로 온도를 올린 뒤 1시간 동안 교반한 후 반응 용기에 물과 톨루엔 1:1 용매를 넣어 반응을 종결시켰다. 유기 용매층을 추출하고 감압증류하여 생긴 고체를 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하여 에텐화합물(화학식 3-3, 65 %, 6.6 g)을 20
수득하였다. 수득한 에텐화합물(화학식 3-3, 17.7 mmol, 6.6 g)과 팔라듐/활성탄(10 wt.%, 1.65 g)을 THF와 메탄올 1:1 용매에 녹인 후 수소 25
반응기에서 3시간 동안 반응시키고 여과하였다. 여과액을 농축시킨 뒤 컬럼 크로마토그래피를 통해 목적 화합물(화학식 3, 94 %, 6.24 g)을 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.47 (d, 2H), 7.27 (d, 2H), 7.20 (m, 3H), 6.79 (t, 1H), 6.65 (t, 1H), 4.12 (q, 2H), 2.93 (m, 4H), 1.55 (t, 3H); MS m/z 374 (M⁺); mp 88°C

5

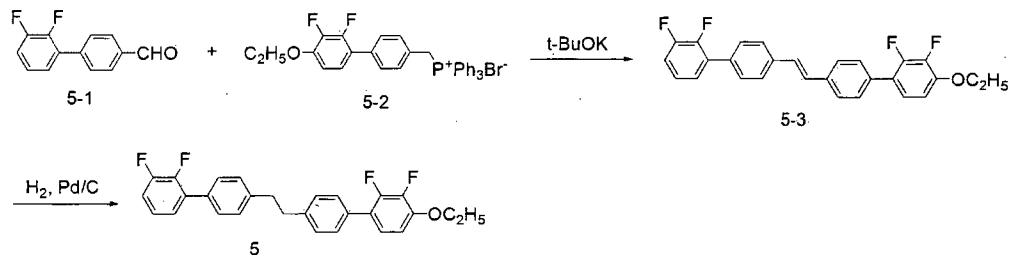
제조예 4(FNAAF-H.02)



브롬 염 화합물(화학식 4-1, 21.3 mmol, 10 g)을 무수 THF에 녹인 후 -30°C에서 교반하면서 포타슘 터셔리-부톡사이드(25.6 mmol, 2.9 g)를 서서히 가하고 30분 동안 교반하였다. -30°C에서 알데하이드 화합물(화학식 4-2, 23.2 mmol, 7.86 g)을 THF에 녹여 적가하였다. -10°C로 온도를 올린 뒤 1시간 동안 교반한 후 반응 용기에 물과 톨루엔 1:1 용매를 넣어 반응을 종결시켰다. 유기 용매층을 추출하고 감압증류하여 생긴 고체를 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하여 에텐화합물(화학식 4-3, 59 %, 5.64 g)을 10
15
수득하였다. 수득한 에텐화합물(화학식 4-3, 12.6 mmol, 5.64 g)과 팔라듐/활성탄(10 wt.%, 1.4 g)을 THF와 메탄올 1:1 용매에 녹인 후 수소 반응기에서 3시간 동안 반응시키고 여과하였다. 여과액을 농축시킨 뒤 컬럼 크로마토그래피를 통해 목적 화합물(화학식 4, 97 %, 3.9 g)을 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.67 (d, 2H), 7.59 (t, 4H), 7.29 (d, 2H), 7.17 (t, 1H), 7.05 (m, 3H), 6.84 (t, 1H), 4.20 (q, 2H), 3.03 (m, 20
4H), 1.51 (t, 3H); MS m/z 450 (M⁺); mp 209°C

제조예 5(FANAF-H.02)

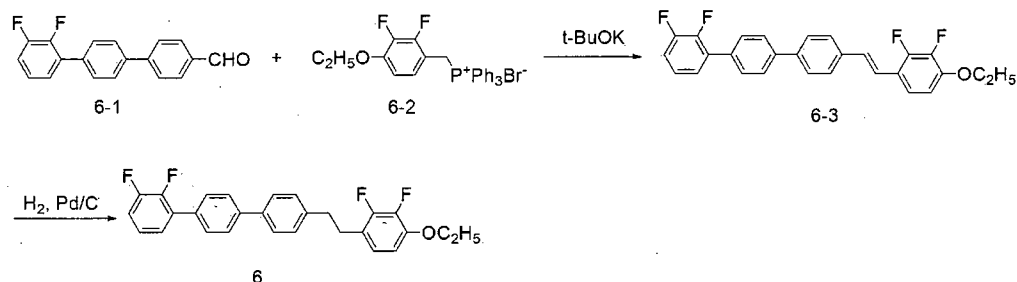


브롬 염 화합물(화학식 5-2, 20.2 mmol, 12.5 g)을 무수 THF에 녹인 후 -30℃에서 교반하면서 포타슘 터셔리-부톡사이드(25.4 mmol, 2.86 g)를 서서히 가하고 30분 동안 교반하였다. -30℃에서 알데하이드 화합물(화학식 5-1, 23.1 mmol, 5.04 g)을 THF에 녹여 적가하였다. -10℃로 온도를 올린 뒤 1시간 동안 교반한 후 반응 용기에 물과 톨루엔 1:1 용매를 넣어 반응을 종결시켰다. 유기 용매층을 추출하고 감압증류하여 생긴 고체를 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하여 에텐화합물(화학식 5-3, 74 %, 7 g)을 수득하였다. 수득한 에텐화합물(화학식 5-3, 15.6 mmol, 7 g)과 팔라듐/활성탄(10 wt.%, 1.75 g)을 THF와 메탄올 1:1 용매에 녹인 후 수소 반응기에서 3시간 동안 반응시키고 여과하였다. 여과액을 농축시킨 뒤 컬럼 크로마토그래피를 통해 목적 화합물(화학식 5, 81 %, 5.69 g)을 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.49 (d, 2H), 7.45 (d, 2H), 7.32 (t, 4H), 7.21 (m, 4H), 6.82 (t, 1H), 4.19 (q, 2H), 3.01 (m, 4H), 1.50 (t, 3H); MS m/z 450 (M⁺); mp 150℃

15

제조예 6(FAANF-H.02)

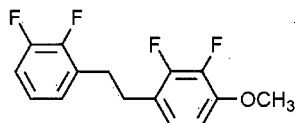


브롬 염 화합물(화학식 6-2, 15.6 mmol, 8 g)을 무수 THF에 녹인 후 -30℃에서 교반하면서 포타슘 터셔리-부톡사이드(18.7 mmol, 2.1 g)를 서서히 가하고 30분 동안 교반하였다. -30℃에서 알데하이드 화합물(화학식 6-1, 16.99 mmol, 5 g)을 THF에 녹여 적가하였다. -10℃로 온도를 올린 뒤 1시간 동안 교반한 후 반응 용기에 물과 톨루엔 1:1 용매를 넣어 반응을 종결시켰다. 유기 용매층을 추출하고 감압증류하여 생긴 고체를 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하여 에텐화합물(화학식 6-3, 90 %, 6.29 g)을 수득하였다. 수득한 에텐화합물(화학식 6-3, 14 mmol, 6.29 g)과 팔라듐/활성탄(10 wt.%, 1.6 g)을 THF와 메탄올 1:1 용매에 녹인 후 수소

반응기에서 3시간 동안 반응시키고 여과하였다. 여과액을 농축시킨 뒤 컬럼 크로마토그래피를 통해 목적 화합물(화학식 6, 79 %, 5 g)을 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 7.69 (d, 2H), 7.63 (d, 2H), 7.58 (d, 2H), 7.28 (m, 5H), 6.79 (t, 1H), 6.65 (t, 1H), 4.12 (q, 2H), 2.94 (m, 4H), 1.46 (t, 3H); MS m/z 450 (M^+); mp 174°C

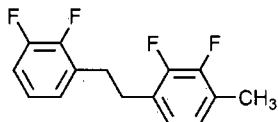
제조예 7(FNF-H.01)



제조예 1과 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 1-2로 표시되는 화합물로 에톡시 대신 메톡시를 치환기로 가지는 화합물을 사용하여, 목적 화합물을 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 7.01 (m, 2H), 6.87 (t, 1H), 6.75 (t, 1H), 6.63 (t, 1H), 3.87 (s, 3H), 2.95 (m, 4H); MS m/z 284 (M^+)

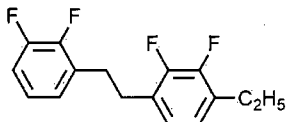
15 제조예 8(FNF-H.1)



제조예 1과 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 1-2로 표시되는 화합물로 에톡시 대신 메틸을 치환기로 가지는 화합물을 사용하여, 목적 화합물을 수득하였다.

20 $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 7.01 (m, 2H), 6.88 (t, 1H), 6.79 (t, 1H), 6.72 (t, 1H), 2.96 (m, 4H), 2.25 (s, 3H); MS m/z 268 (M^+)

제조예 9(FNF-H.2)

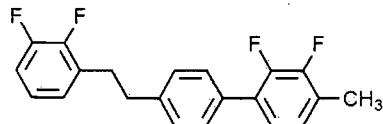


25 제조예 1과 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 1-2로 표시되는 화합물로 에톡시 대신 에틸을 치환기로 가지는 화합물을 사용하여, 목적

화합물을 수득하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.24 (m, 2H), 6.87 (m, 2H), 6.82 (m, 1H), 2.97 (m, 4H), 2.68 (q, 2H), 1.23 (t, 3H); MS m/z 282 (M^+)

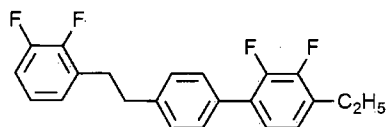
5 **제조예 10(FNAF-H.1)**



제조예 2와 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 2-2로 표시되는 화합물로 에톡시 대신 메틸을 치환기로 가지는 화합물을 사용하여, 목적 화합물을 수득하였다.

10 ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.45 (d, 2H), 7.24 (m, 3H), 7.11 (m, 4H), 3.01 (m, 4H), 2.33 (s, 3H); MS m/z 344 (M^+)

제조예 11(FNAF-H.2)

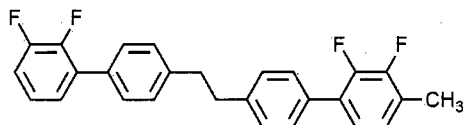


15 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 2-2로 표시되는 화합물로 에톡시 대신 에틸을 치환기로 가지는 화합물을 사용하여, 목적 화합물을 수득하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.46 (d, 2H), 7.26 (d, 2H), 7.11-6.89 (m, 5H), 3.02 (m, 4H), 2.74 (q, 2H), 1.53 (t, 3H); MS m/z 358 (M^+)

20

제조예 12(FANAF-H.1)



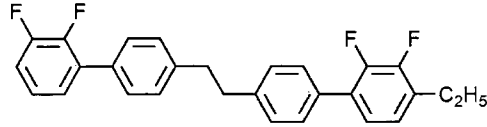
제조예 5와 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 5-2로 표시되는 화합물로 에톡시 대신 메틸을 치환기로 가지는 화합물을 사용하여, 목적

25 화합물을 수득하였다.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.46 (m, 4H), 7.28 (m, 4H), 7.08-6.92

(m, 5H), 2.98 (m, 4H), 2.30 (s, 3H); MS m/z 420 (M⁺)

제조예 13(FANAF-H.2)

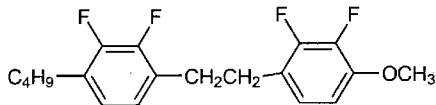


5 제조예 5와 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 5-2로 표시되는 화합물로 에톡시 대신 에틸을 치환기로 가지는 화합물을 사용하여, 목적 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.48 (m, 4H), 7.31 (m, 4H), 7.19-6.98 (m, 5H), 3.01 (m, 4H), 2.74 (q, 2H), 1.28 (t, 3H); MS m/z 434 (M⁺)

10

비교 제조예 1(FNF-4.01)

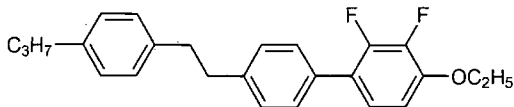


상기 제조예 1과 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 1-1의 브롬염 화합물 및 화학식 1-2의 알데하이드 화합물 대신 각각 (4-부틸-2,3-
15 디플루오로벤질)트리페닐포스포니움 브로마이드 및 2,3-디플루오로-4-메톡시벤즈알데하이드를 사용하여 상기 구조의 화합물을 제조하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 6.98 (m, 3H), 6.73 (t, 1H), 3.98 (m, 3H), 2.91 (m, 4H), 2.63 (t, 2H) 1.45 (m, 4H), 0.91 (t, 3H) ; MS m/z 340 (M⁺)

20

비교 제조예 2(ANAF-3.02)

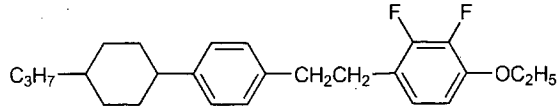


상기 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 2-1의 브롬염 화합물 대신 트리페닐(4-프로필벤질)포스포니움 브로마이드를 사용하여,
25 상기 구조의 화합물을 제조하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.89 (m, 1H), 7.36 (m, 4H), 7.09 (m, 5H), 4.09 (m, 2H), 2.82 (m, 4H), 2.61 (t, 2H) 1.65 (m, 2H), 1.35 (t,

3H), 0.91 (t, 3H) ; MS m/z 380 (M⁺)

비교 제조예 3(BANF-3.02)



5 상기 제조예 5와 동일한 방법으로 제조하되, 화학식 5-1의 알데하이드 화합물 대신 4-(4-프로필사이클로헥실)벤즈알데하이드를 사용하여, 상기 구조의 화합물을 제조하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.85 (m, 1H), 7.40 (m, 4H), 7.07 (m, 5H), 4.09 (m, 2H), 2.82 (m, 4H), 2.71 (t, 1H) 1.81-1.70 (m, 14H), 1.19
10 (m, 2H), 0.92 (t, 3H) ; MS m/z 462 (M⁺)

실험예 1: 액정 화합물의 물성 평가

상기 제조예 및 비교 제조예에서 제조한 액정 화합물의 물성을 평가하였다.

15

구체적으로 액정 화합물의 물성은, 물성을 측정하고자 하는 액정 화합물 10 중량%와 모액정 90 중량%를 혼합하여 제조한 시료의 측정값을 하기 식 1에 대입하여 얻은 외삽값으로 규정하였다. 이때, 상기 모액정으로는 투명점(Tni)이 78℃이고, 굴절률 이방성[Δn]이 0.10인 것을
20 사용하였다.

[식 1]

$$\text{외삽값} = [\text{모액정의 측정값}] + \{[(\text{시료의 측정값}) - (\text{모액정의 측정값})] / (\text{액정 화합물의 중량\%}) \times 100\}$$

25

1) 상전이 온도(DSC)

TA사의 TA-series 시차주사열량계(DSC)를 사용하여 질소 하에서 1℃/min의 속도로 상온에서 액정 화합물의 Tni + 50℃까지 1 cycle 가열 및 냉각하여 상전이 온도를 관찰하였다. 하기 표 2에서, Cry, Sm, N, ISO는 각각 결정상, 스멕틱상, 네마틱상, 이소트로픽상을 의미하며, 각 부호

사이의 온도가 이에 해당하는 상전이 온도를 의미한다.

2) ΔT_{ni}

액정 화합물의 T_{ni} 은 편광 현미경을 장치한 용점 측정 장치의 핫
5 플레이트에 액정 화합물을 놓고, 3°C/분의 속도로 가열하여 액정 화합물의
일부가 액정상에서 등방성 액체로 변화했을 때의 온도를 관찰하여
측정하였다.

3) 액정 화합물의 굴절률 이방성(Δn)

10 20°C에서 589 nm 파장의 광을 사용하여 접안경에 편광판을 장착한
아베 굴절계로 측정하였다. 주프리즘의 표면을 한 방향으로 러빙한 후,
시료를 주프리즘에 적하하였다. 이후, 편광의 방향이 러빙의 방향과 평행할
때의 굴절률(n_{\parallel})과 편광의 방향이 러빙의 방향과 수직일 때의
굴절률(n_{\perp})을 측정하였다. 그리고, 상기 굴절률 값을 식 2에 대입하여
15 굴절률 이방성(Δn)을 측정하였다.

[식 2]

$$\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$$

4) 액정 화합물의 유전율 이방성($\Delta \epsilon$)

20 하기와 같이 측정된 ϵ_{\parallel} 및 ϵ_{\perp} 를 식 3에 대입하여 계산하였다.

[식 3]

$$\Delta \epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$$

① 유전율 ϵ_{\parallel} 의 측정: 2장의 유리 기판의 ITO 패턴이 형성된 면에
25 수직 배향제를 도포하여 수직 배향막을 형성하였다. 이어서, 수직 배향막이
서로 마주보며 2장의 유리 기판 사이의 간격(셀 갭)이 4 μm 가 되도록 2장의
유리 기판 중 어느 하나의 기판에 스페이서를 도포한 후 2장의 유리 기판을
합착시켰다. 그리고, 이 소자에 시료를 주입하고, 자외선으로 경화시키는
접착제로 밀폐하였다. 이후, Agilent에서 제조한 4294A 장비에 사용하여,
30 이 소자의 20°C에서 유전율 ϵ_{\parallel} 을 측정하였다.

② 유전율 ϵ_{\perp} 의 측정: 2장의 유리 기판의 ITO 패턴이 형성된 면에 수평 배향제를 도포하여 수평 배향막을 형성하였다. 이어서, 수평 배향막이 서로 마주보며 2장의 유리 기판 사이의 간격(셀 갭)이 4 μm 가 되도록 2장의 유리 기판 중 어느 하나의 기판에 스페이서를 도포한 후 2 장의 유리 기판을 합착시켰다. 그리고, 이 소자에 시료를 주입하고, 자외선으로 경화시키는 접착제로 밀폐하였다. 이후, Agilent에서 제조한 4294A 장비에 사용하여, 이 소자의 20°C에서 유전율 ϵ_{\perp} 을 측정하였다.

10 5) 점도

점도 측정을 위해 SCHOTT 사의 CT52 장비를 이용하였으며, 이에 2mL의 부피에 대해 점도 측정이 가능한 capillary viscometer를 장착 후 측정하고자 하는 액정 조성물 2 mL를 주입하였다. 이후, 액정 조성물을 20°C에서 30 분간 안정화시킨 후 스포이드 루버를 사용하여 측정 부위까지 액정 조성물을 끌어 올렸다. 이어서, 액정 조성물이 흘러내리는 속도를 타이머를 통해 측정하고, 이를 통해 점도(mm^2/s)를 구하였다.

상기 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

【표 2】

	상전이 온도 (DSC)	ΔT_{ni}	Δn	$\Delta \epsilon$	점도
비교 제조예 1	Heating Cry 49.3 Iso	-89	0.01	-3.5	43.53
비교 제조예 2	Heating Cry 79.81 N 103.52 Iso	103.1	0.21	-3.5	-
비교 제조예 3	Heating Cry 36.96 N 97.35 Iso	105	0.13	-2.7	-
제조예 1	Heating Cry 69.1 Iso	-63.2	0.02	-3.1	43.09
	Cooling Cry 55.92 Iso				
제조예 2	Heating Cry 76.4 Iso	14	0.16	-6.3	-
	Cooling Cry 64.95 Iso				
제조예 3	Heating Cry 89 Iso	25	0.15	-5.1	-
	Cooling Cry 48.5 Iso				
제조예 4	Heating Cry 130.9 Sm 169.1 N 205.5 Iso	238	0.25	-5.1	-
	Cooling Cry 108.6 Sm 166.2 N 203.3 Iso				
제조예 5	Heating Cry 115.6 N 155 Iso	109	0.24	-5.1	-
	Cooling Cry 72.0 N 149.9 Iso				

제조예 6	Heating Cry 116.8 Sm 136.4 N 174.1 Iso	126	0.24	-5.7	-
	Cooling Cry 85.2 Sm 129.2 N 171.3 Iso				
제조예 7	Heating Cry 62.6 Iso	-134.5	0.0221	-	38.45
	Cooling Cry 48.1 Iso				
제조예 8	Heating Cry 23.7 Iso	-117.9	-	-	23.18
	Cooling Cry -16.7 Iso				
제조예 9	상온액체	-47.3	-	-	19.87
	상온액체				
제조예 10	Heating Cry 62.6 Iso	16.1	0.1331	-	30.65
	Cooling Cry 40.1 Iso				
제조예 11	Heating Cry 44.1 Iso	-21.9	0.1120	-	46.83
	Cooling Cry -12.2 Iso				
제조예 12	Heating Cry 117.82 Iso	125.4	0.2324	-	69.75
	Cooling Cry 93.9 Iso				
제조예 13	Heating Cry 87.0 Iso	86.0	0.2318	-	55.83
	Cooling Cry 32.8 Sm 43.0 N 82.7 Iso				

실험예 2: 액정 조성물의 제조 및 물성 평가

하기 표 3과 같은 조성을 이용하여 액정 조성물을 제조하였다. 하기 표 3에서 액정 화합물은 코드로 표시하였으며, 코드의 의미는 상기 표 1에 기재되어 있다. 하기 표 3에서 각 수치는 중량%를 의미한다.

【표 3】

Code	비교예 1	비교예 2	실시에 1	실시에 2	실시에 3
BA-5.3	11.9	11.9	11.4	11.9	11.9
BA-3.02	11.9	11.9	11.4	11.9	11.9
BAA-3.2	11.9	11.9	11.4	11.9	11.9
소계 1	35.7	35.7	34.2	35.7	35.7
BF-3.02	14.3	14.3	13.6	14.3	14.3
BF-5.02	9.5	9.5	9.1	9.5	9.5
BBF-2.1	6.0	6.0	5.7	6.0	6.0
BBF-3.1	6.0	6.0	5.7	6.0	6.0
BBF-3.02	14.3	14.3	13.6	14.3	14.3
BBF-5.02	9.4	9.4	9.0	9.4	9.4
소계 2	59.5	59.5	56.8	59.5	59.5
ANAF-3.02	4.8	-	-	-	-
BANF-3.02	-	4.8	-	-	-
FNAF-H.02	-	-	9.0	-	-
FANF-H.02	-	-	-	-	-
FANAF-H.02	-	-	-	4.8	-
FAANF-H.02	-	-	-	-	4.8
합계	100	100	100	100	100

상기 실시예 및 비교예에서 제조한 액정 조성물을 다음과 같은 방법으로 평가하여 그 결과를 하기 표 4에 나타내었다.

5 1) T_{N-I}

액정 화합물의 T_{N-I} 은 편광 현미경을 장치한 용점 측정 장치의 핫 플레이트에 액정 화합물을 놓고, 3°C/분의 속도로 가열하여 액정 화합물의 일부가 액정상에서 등방성 액체로 변화했을 때의 온도를 관찰하여 측정하였다.

10

2) 액정 조성물의 굴절률 이방성(Δn), $n_{||}$ 및 n_{\perp} 의 측정 방법은 앞서 실험예 1과 동일하였다.

3) 액정 조성물의 유전율 이방성($\Delta \epsilon$)의 측정 방법은 앞서 실험예 15 1과 동일하였다.

【표 4】

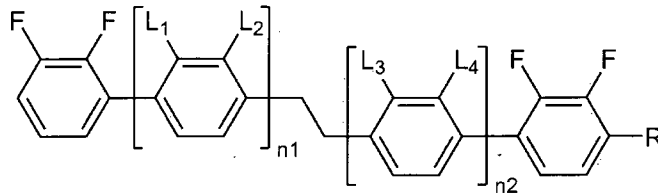
항목	비교예 1	비교예 2	실시예 1	실시예 2	실시예 3
T_{N-I}	77.5	78.0	72.0	82.0	80.4
Δn	0.1070	0.1039	0.1078	0.1083	0.1087
n_e	1.5930	1.5990	1.5958	1.5959	1.5965
n_o	1.4870	1.4861	1.4880	1.4876	1.4878
$\Delta \epsilon$	-3.4	-3.0	-3.5	-3.5	-3.6

【특허청구범위】

【청구항 1】

하기 화학식 1로 표시되는 액정 화합물:

[화학식 1]



5

상기 식에서,

L₁, L₂, L₃ 및 L₄는 각각 독립적으로 수소 또는 할로젠이고,

R은 수소, C₁₋₁₀ 알킬, C₂₋₁₀ 알케닐 또는 C₁₋₁₀ 알콕시이고, 및

n₁ 및 n₂는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이고, n₁ 및 n₂의 합은

10 0 이상 2 이하이다.

【청구항 2】

제1항에 있어서,

L₁, L₂, L₃ 및 L₄는 각각 독립적으로 수소 또는 플루오로인,

15 액정 화합물.

【청구항 3】

제2항에 있어서,

L₁ 및 L₂가 동일한,

20 액정 화합물.

【청구항 4】

제2항에 있어서,

L₃ 및 L₄가 동일한,

25 액정 화합물.

【청구항 5】

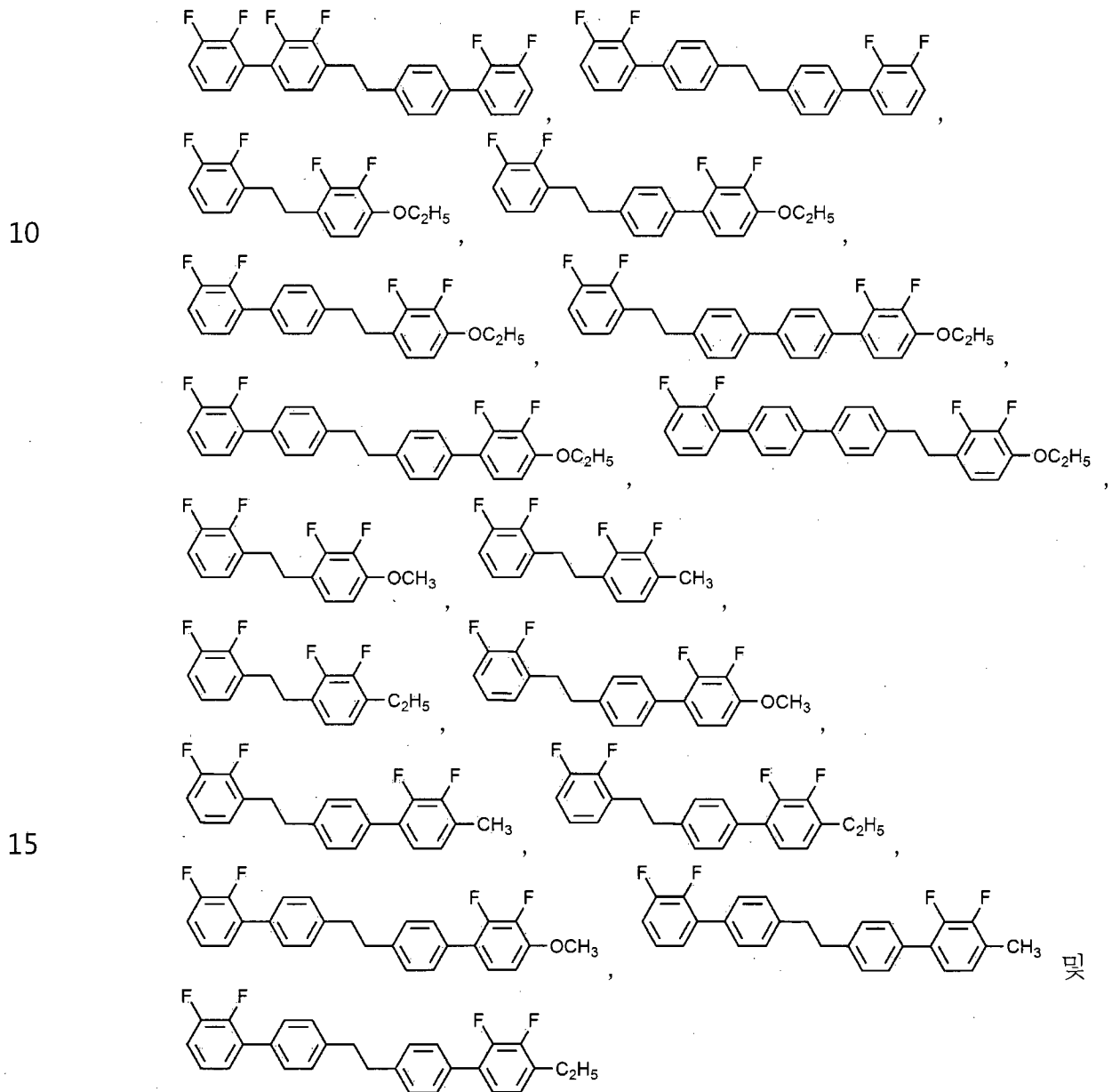
제1항에 있어서,

R은 수소, 메틸, 에틸, 메톡시 또는 에톡시인,
액정 화합물.

【청구항 6】

5 제1항에 있어서,
상기 액정 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터 선택되는
어느 하나인,

액정 화합물:



【청구항 7】

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 액정 화합물을 1종 이상 포함하는, 액정 조성물.

5 【청구항 8】

제7항에 있어서,
 상기 액정 화합물은 상기 액정 조성물 전체 중량 대비 3 내지 60 중량%로 포함되는,
 액정 조성물.

10

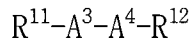
【청구항 9】

제7항에 있어서,
 하기 화학식 2 내지 5로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 액정 화합물을 추가로 포함하는,

15

액정 조성물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

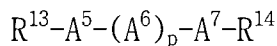
20

R^{11} 및 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 $-CH_2-$ 가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 $-C\equiv C-$, $-CH=CH-$, $-CF_2O-$, $-O-$, $-COO-$ 또는 $-OCO-$ 로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로젠으로 대체된 라디칼이고,

A^3 및 A^4 는 각각 독립적으로 사이클로헥실렌 또는 페닐렌이고,

25

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

30

R^{13} 및 R^{14} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 $-CH_2-$ 가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 $-C\equiv C-$,

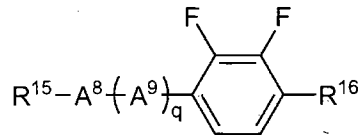
-CH=CH-, -CF₂O-, -O-, -COO- 또는 -OCO-로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로젠으로 대체된 라디칼이고,

A⁵ 및 A⁷은 각각 독립적으로 사이클로헥실렌 또는 페닐렌이며,

A⁶은 사이클로헥실렌, 페닐렌 또는 할로젠으로 치환된 페닐렌이고,

5 p는 1 또는 2의 정수이고,

[화학식 4]



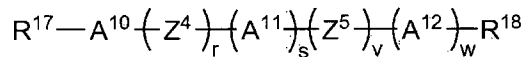
상기 화학식 4에서,

10 R¹⁵ 및 R¹⁶은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 -CH₂-가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 -C≡C-, -CH=CH-, -CF₂O-, -O-, -COO- 또는 -OCO-로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로젠으로 대체된 라디칼이고,

15 A⁸ 및 A⁹는 각각 독립적으로 사이클로헥실렌, 테트라하이드로피라닐렌, 페닐렌 또는 할로젠으로 치환된 페닐렌이며,

q는 0 내지 2 사이의 정수이고,

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

20 R¹⁷ 및 R¹⁸은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 15의 알킬 및 탄소수 1 내지 15의 알콕시 중 어느 하나의 라디칼이거나, 혹은 상기 라디칼 중 하나 이상의 -CH₂-가 산소 원자들이 직접 연결되지 않도록 -C≡C-, -CH=CH-, -CF₂O-, -O-, -COO- 또는 -OCO-로 치환되거나 또는 상기 라디칼 중 하나 이상의 H가 할로젠으로 대체된 라디칼이며,

25 A¹⁰, A¹¹ 및 A¹²는 각각 독립적으로 사이클로헥실렌, 테트라하이드로피라닐렌, 페닐렌 및 할로젠으로 치환된 페닐렌 중 어느 하나이고,

Z⁴ 및 Z⁵는 각각 독립적으로 -CH₂CH₂-, -CH=CH-, -C≡C-, -CH₂O-, -OCH₂-, -CH₂CF₂-, -CHFCHF-, -CF₂CH₂-, -CH₂CHF-, -CHFCH₂-, -C₂F₄-, -COO-, -

OCO-, -CF₂O-, -OCF₂- 또는 -O-이며,

r 및 v는 0 또는 1이고, r + v는 1 또는 2이며,

s 및 w는 0 내지 2 사이의 정수이다.

5 【청구항 10】

제7항에 있어서,

상기 액정 조성물은 산화 방지제 또는 UV 안정화제를 추가로 포함하는,

액정 조성물.

10

【청구항 11】

제7항의 액정 조성물을 포함하는, 액정 표시 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2016/005326

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C09K 19/14(2006.01)i, C09K 19/42(2006.01)i, C09K 19/30(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C09K 19/14; C07C 69/74; C09K 3/34; C09K 19/30; C07C 19/08; C07C 41/00; C07C 61/40; C09K 19/12; C07C 69/75; C09K 19/20; C09K 19/42

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above
Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal), SureChEMBL & Keywords: liquid crystal compound, liquid crystal display device, fluor, ethoxy, benzene, cyclohexylene

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2012-0168677 A1 (KOBAYASHI, M. et al.) 05 July 2012 See paragraphs [0099], [0105], [0240], [0241]; comparative example 4.	1-11
A	US 6210603 B1 (KONDO, T. et al.) 03 April 2001 See the entire document.	1-11
A	US 5637257 A (COATES, D. et al.) 10 June 1997 See the entire document.	1-11
A	US 4473487 A (ROEMER, M. et al.) 25 September 1984 See the entire document..	1-11
A	US 5264152 A (SHIOMI, M. et al.) 23 November 1993 See the entire document.	1-11

 Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"I" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family


Date of the actual completion of the international search

24 AUGUST 2016 (24.08.2016)

Date of mailing of the international search report

24 AUGUST 2016 (24.08.2016)

Name and mailing address of the ISA/KR


 Korean Intellectual Property Office
 Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
 Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2016/005326

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
US 2012-0168677 A1	05/07/2012	EP 2479162 A1	25/07/2012
		EP 2479162 A4	12/11/2014
		JP 5637137 B2	10/12/2014
		TW 201113354 A	16/04/2011
		TW 1458813 B	01/11/2014
		US 8580147 B2	12/11/2013
		WO 2011-033937 A1	24/03/2011
US 6210603 B1	03/04/2001	AU 5191798 A	22/06/1998
		DE 69737690 D1	14/06/2007
		DE 69737690 T2	31/01/2008
		EP 0949231 A1	13/10/1999
		EP 0949231 A4	04/02/2004
		EP 0949231 B1	02/05/2007
		JP 4044618 B2	06/02/2008
		WO 98-23564 A1	04/06/1998
		US 5637257 A	10/06/1997
EP 0426815 B1	14/12/1994		
EP 0428666 A1	29/05/1991		
EP 0428666 B1	15/03/1995		
JP 04-500217 A	16/01/1992		
JP 2756868 B2	25/05/1998		
KR 10-1992-0701380 A	11/08/1992		
KR 10-1992-0701382 A	11/08/1992		
US 5482653 A	09/01/1996		
WO 90-15113 A1	13/12/1990		
WO 90-15115 A1	13/12/1990		
US 4473487 A	25/09/1984	JP 58-121248 A	19/07/1983
US 5264152 A	23/11/1993	EP 0381149 A2	08/08/1990
		EP 0381149 A3	22/01/1992
		EP 0381149 B1	27/03/1996
		JP 02-202851 A	10/08/1990
		JP 03-062885 A	18/03/1991
		JP 03-109357 A	09/05/1991
		JP 7068176 B2	26/07/1995
		JP 7116109 B2	13/12/1995
		KR 10-1993-0004586 B1	01/06/1993

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))
C09K 19/14(2006.01)I, C09K 19/42(2006.01)I, C09K 19/30(2006.01)I

B. 조사된 분야
조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C09K 19/14; C07C 69/74; C09K 3/34; C09K 19/30; C07C 19/08; C07C 41/00; C07C 61/40; C09K 19/12; C07C 69/75; C09K 19/20; C09K 19/42

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), SureChEMBL 구조검색 & 키워드: 액정 화합물, 액정 표시 소자, 플루오르, 에톡시, 벤젠, 사이클로헥실렌

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	US 2012-0168677 A1 (KOBAYASHI, M. 등) 2012.07.05 단락 [0099], [0105], [0240], [0241]; 비교예 4 참조.	1-11
A	US 6210603 B1 (KONDO, T. 등) 2001.04.03 전문 참조.	1-11
A	US 5637257 A (COATES, D. 등) 1997.06.10 전문 참조.	1-11
A	US 4473487 A (ROEMER, M. 등) 1984.09.25 전문 참조.	1-11
A	US 5264152 A (SHIOMI, M. 등) 1993.11.23 전문 참조.	1-11

추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:
 “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌
 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌
 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌
 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌
 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌
 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.
 “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
 “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일 2016년 08월 24일 (24.08.2016)	국제조사보고서 발송일 2016년 08월 24일 (24.08.2016)
--	---

ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 김동석 전화번호 +82-42-481-5405
---	------------------------------------



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
US 2012-0168677 A1	2012/07/05	EP 2479162 A1 EP 2479162 A4 JP 5637137 B2 TW 201113354 A TW I458813 B US 8580147 B2 WO 2011-033937 A1	2012/07/25 2014/11/12 2014/12/10 2011/04/16 2014/11/01 2013/11/12 2011/03/24
US 6210603 B1	2001/04/03	AU 5191798 A DE 69737690 D1 DE 69737690 T2 EP 0949231 A1 EP 0949231 A4 EP 0949231 B1 JP 4044618 B2 WO 98-23564 A1	1998/06/22 2007/06/14 2008/01/31 1999/10/13 2004/02/04 2007/05/02 2008/02/06 1998/06/04
US 5637257 A	1997/06/10	EP 0426815 A1 EP 0426815 B1 EP 0428666 A1 EP 0428666 B1 JP 04-500217 A JP 2756868 B2 KR 10-1992-0701380 A KR 10-1992-0701382 A US 5482653 A WO 90-15113 A1 WO 90-15115 A1	1991/05/15 1994/12/14 1991/05/29 1995/03/15 1992/01/16 1998/05/25 1992/08/11 1992/08/11 1996/01/09 1990/12/13 1990/12/13
US 4473487 A	1984/09/25	JP 58-121248 A	1983/07/19
US 5264152 A	1993/11/23	EP 0381149 A2 EP 0381149 A3 EP 0381149 B1 JP 02-202851 A JP 03-062885 A JP 03-109357 A JP 7068176 B2 JP 7116109 B2 KR 10-1993-0004586 B1	1990/08/08 1992/01/22 1996/03/27 1990/08/10 1991/03/18 1991/05/09 1995/07/26 1995/12/13 1993/06/01