

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局



(43) 国際公開日
2012年4月26日(26.04.2012)

PCT

(10) 国際公開番号

WO 2012/053323 A1

- (51) 国際特許分類:
C09K 19/42 (2006.01) C09K 19/30 (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01) C09K 19/34 (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01) G02F 1/13 (2006.01)
C09K 19/20 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2011/071972
- (22) 国際出願日: 2011年9月27日(27.09.2011)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2010-235758 2010年10月20日(20.10.2010) JP
- (71) 出願人(米国を除く全ての指定国について): JNC株式会社(JNC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1008105 東京都千代田区大手町二丁目2番1号 Tokyo (JP). JNC石油化学株式会社(JNC PETROCHEMICAL CORPORATION) [JP/JP]; 〒1000004 東京都千代田区大手町二丁目2番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者; および
- (75) 発明者/出願人(米国についてのみ): 服部 憲和(HATTORI Norikatsu) [JP/JP]; 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 チッソ石油化学株式会社 五井研究所内 Chiba (JP). 松村 良成(MATSUMURA Yoshinari) [JP/JP]; 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 チッソ石油化

学株式会社 五井研究所内 Chiba (JP). 藤田 浩章(FUJITA Hiroaki) [JP/JP]; 〒2908551 千葉県市原市五井海岸5番地の1 チッソ石油化学株式会社 五井研究所内 Chiba (JP).

- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, 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, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, 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) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (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, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 国際調査報告(条約第21条(3))

(54) Title: LIQUID CRYSTAL COMPOSITION AND LIQUID CRYSTAL DISPLAY ELEMENT

(54) 発明の名称: 液晶組成物および液晶表示素子

(57) Abstract: Provided are: a liquid crystal composition having at least one property selected from properties including a high upper limit temperature of a nematic phase, a low lower limit temperature of the nematic phase, a low viscosity, proper optical anisotropy, negatively large dielectric constant anisotropy, a large specific resistance and high stability to ultraviolet ray or heat or having a proper valance between at least two properties selected from the above-mentioned properties; and an AM element having a short response time, a high voltage retention rate, a large contrast ratio, a long service life and the like. Specifically provided are: a liquid crystal composition which may comprise a specific bicyclic compound having large optical anisotropy and a low viscosity as a first component, a specific compound having a high upper limit temperature and large dielectric constant anisotropy as a second component, a specific compound having a low viscosity as a third component, a specific compound having large dielectric constant anisotropy as a fourth component, and a specific compound having large dielectric constant anisotropy as a fifth component, and which has negative dielectric constant anisotropy; and a liquid crystal display element comprising the composition.

(57) 要約: ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線や熱に対する高い安定性などの特性において、少なくとも1つまたは少なくとも2つの適切なバランスを有する液晶組成物を提供し、短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などを有するAM素子を提供する。第一成分として大きな光学異方性および粘度の小さな特定の二環化合物、および第二成分として大きな上限温度および大きな誘電率異方性を有する特定の化合物を含有し、第三成分として小さな粘度を有する特定の化合物、第四成分として大きな誘電率異方性を有する特定の化合物、および第五成分として大きな誘電率異方性を有する特定の化合物を含有してもよい、負の誘電率異方性を有する液晶組成物とする。また、この組成物を含有する液晶表示素子とする。

WO 2012/053323 A1

明 細 書

発明の名称：液晶組成物および液晶表示素子

技術分野

[0001] 本発明は、主としてAM (active matrix) 素子などに適する液晶組成物およびこの組成物を含有するAM素子などに関する。特に、誘電率異方性が負の液晶組成物に関し、この組成物を含有するIPS (in-plane switching) モード、VA (vertical alignment) モード、FFS (fringe field switching)、またはPSA (polymer sustained alignment) モードの素子などに関する。

背景技術

[0002] 液晶表示素子において、液晶の動作モードに基づいた分類は、PC (phase change)、TN (twisted nematic)、STN (super twisted nematic)、ECB (electrically controlled birefringence)、OCB (optically compensated bend)、IPS (in-plane switching)、VA (vertical alignment)、FFS (fringe field switching)、PSA (Polymer sustained alignment) モードなどである。素子の駆動方式に基づいた分類は、PM (passive matrix) とAM (active matrix) である。PMはスタティック (static) とマルチプレックス (multiplex) などに分類され、AMはTFT (thin film transistor)、MIM (metal insulator metal) などに分類される。TFTの分類は非晶質シリコン (amorphous silicon) および多結晶シリコン (polycrystal silicon) である。後者は製造工程によって高温型と低温型とに分類される。光源に基づいた分類は、自然光を利用する反射型、バックライトを利用する透過型、そして自然光とバックライトの両方を利用する半透過型である。

[0003] これらの素子は適切な特性を有する液晶組成物を含有する。この液晶組成物はネマチック相を有する。良好な一般的特性を有するAM素子を得るには組成物の一般的特性を向上させる。2つの一般的特性における関連を下記の

表1にまとめる。組成物の一般的特性を市販されているAM素子に基づいてさらに説明する。ネマチック相の温度範囲は、素子の使用できる温度範囲に関連する。ネマチック相の好ましい上限温度は約70℃以上であり、そしてネマチック相の好ましい下限温度は約-10℃以下である。組成物の粘度は素子の応答時間に関連する。素子で動画を表示するためには短い応答時間が好ましい。したがって、組成物における小さな粘度が好ましい。低い温度における小さな粘度はより好ましい。

[0004]

No	組成物の一般的特性	AM素子の一般的特性
1	ネマチック相の温度範囲が広い	使用できる温度範囲が広い
2	粘度が小さい ¹⁾	応答時間が短い
3	光学異方性が適切である	コントラスト比が大きい
4	正または負に誘電率異方性が大きい	しきい値電圧が低く、消費電力が小さい コントラスト比が大きい
5	比抵抗が大きい	電圧保持率が大きく、コントラスト比が大きい
6	紫外線および熱に安定である	寿命が長い

1)液晶セルに組成物を注入する時間が短縮できる

[0005]

組成物の光学異方性は、素子のコントラスト比に関連する。組成物の光学異方性 (Δn) と素子のセルギャップ (d) との積 ($\Delta n \times d$) は、コントラスト比を最大にするように設計される。適切な積の値は動作モードの種類に依存する。VAモードの素子では約0.30 μm から約0.40 μm の範囲、IPSモードまたはFFSモードの素子では約0.20 μm から約0.30 μm の範囲である。この場合、小さなセルギャップの素子には大きな光学異方性を有する組成物が好ましい。組成物における絶対値の大きな誘電率異方性は素子における低いしきい値電圧、小さな消費電力と大きなコントラスト比に寄与する。したがって、絶対値の大きな誘電率異方性が好ましい。組成物における大きな比抵抗は、素子における大きな電圧保持率と大きなコントラスト比に寄与する。したがって、初期段階において室温だけでなく高い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。長時間使用したあと、

室温だけでなく高い温度でも大きな比抵抗を有する組成物が好ましい。紫外線および熱に対する組成物の安定性は、液晶表示素子の寿命に関連する。これらの安定性が高いとき、この素子の寿命は長い。このような特性は、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いるAM素子に好ましい。

[0006] TNモードを有するAM素子においては正の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。一方、VAモードを有するAM素子においては負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。IPSモードまたはFFSモードを有するAM素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。PSAモードを有するAM素子においては正または負の誘電率異方性を有する組成物が用いられる。負の誘電率異方性を有する液晶組成物の例は次に述べる特許文献1から4に開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0007] 特許文献1：特開2009-270026号公報

特許文献2：国際公開2007-108307号パンフレット

特許文献3：特開2008-19425号公報

特許文献4：特表2008-505235号公報

[0008] 望ましいAM素子は、使用できる温度範囲が広い、応答時間が短い、コントラスト比が大きい、しきい値電圧が低い、電圧保持率が大きい、寿命が長い、などの特性を有する。1ミリ秒でもより短い応答時間が望ましい。したがって、組成物の望ましい特性は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、正または負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性などである。

発明の開示

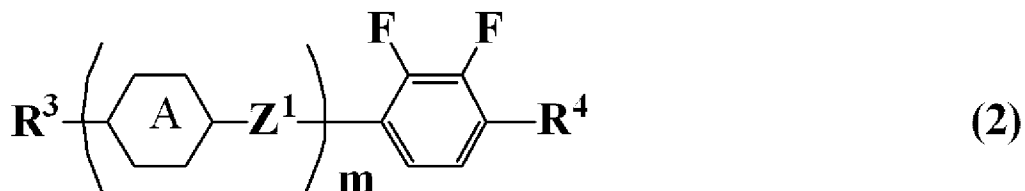
発明が解決しようとする課題

[0009] 本発明の1つの目的は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低

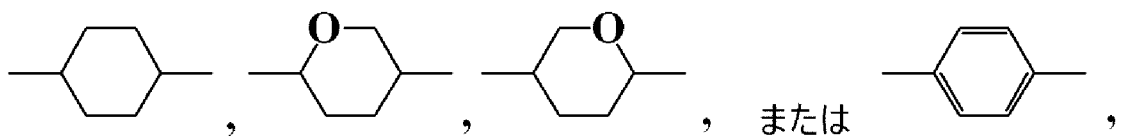
い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性などの特性において、少なくとも1つの特性を充足する液晶組成物である。他の目的は、少なくとも2つの特性に関して適切なバランスを有する液晶組成物であり、特に高い上限温度、負に大きな誘電率異方性、および小さな粘度を充足する液晶組成物である。別の目的は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。別の目的は、小さな光学異方性、または大きな光学異方性である適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、紫外線に対する高い安定性などの特性を有する組成物であり、そして短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などの特性を有するAM素子である。

課題を解決するための手段

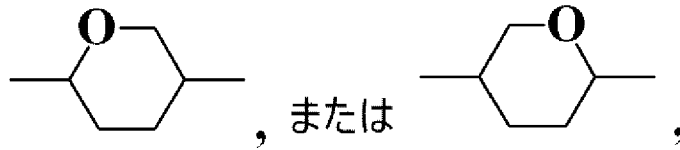
[0010] 第一成分として式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物、および第二成分として式(2)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物、およびこの組成物を含有する液晶表示素子である。



ここで、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数1から12のアルキルであり； R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；環Aは独立して、



であり、ここで少なくとも一つの環Aは、



であり；Z¹は独立して、単結合、エチレン、またはメチレンオキシであり；mは、1または2である。

発明の効果

[0011] 本発明の長所は、ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性などの特性において、少なくとも1つの特性を充足する液晶組成物である。本発明の1つの側面は、少なくとも2つの特性に関して適切なバランスを有する液晶組成物である。別の側面は、このような組成物を含有する液晶表示素子である。他の側面は、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、紫外線に対する高い安定性などを有する組成物であり、そして短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などを有するAM素子である。

発明を実施するための最良の形態

[0012] この明細書における用語の使い方は次のとおりである。本発明の液晶組成物または本発明の液晶表示素子をそれぞれ「組成物」または「素子」と略すことがある。液晶表示素子は液晶表示パネルおよび液晶表示モジュールの総称である。「液晶性化合物」は、ネマチック相、スメクチック相などの液晶相を有する化合物または液晶相を有さないが組成物の成分として有用な化合物を意味する。この有用な化合物は例えば1,4-シクロヘキシレンや1,4-フェニレンのような六員環を有し、その分子構造は棒状 (rod like) である。光学活性な化合物および重合可能な化合物は組成物に添加されることがある。これらの化合物が液晶性化合物であったとしても、ここでは添加物として分類される。式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を「化合物(1)」と略すことがある。「化合物(1)」は

、式（１）で表される１つの化合物または２つ以上の化合物を意味する。他の式で表される化合物についても同様である。「任意の」は、位置だけでなく個数についても自由に選択できることを示すが、個数が０である場合を含まない。

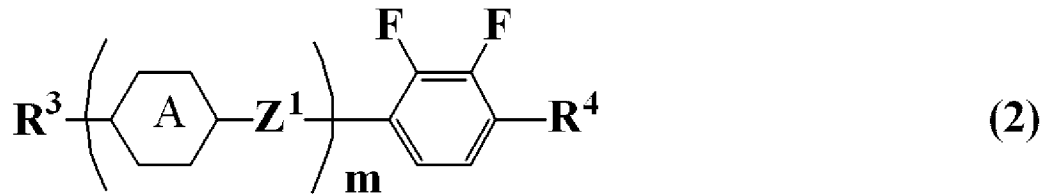
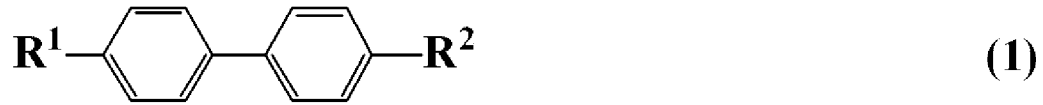
[0013] ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。「比抵抗が大きい」は、組成物が初期段階において室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有し、そして長時間使用したあと室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな比抵抗を有することを意味する。「電圧保持率が大きい」は、素子が初期段階において室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有し、そして長時間使用したあと室温だけでなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を有することを意味する。光学異方性などの特性を説明するときは、実施例に記載した測定方法で得られた値を用いる。第一成分は、１つの化合物または２つ以上の化合物である。「第一成分の割合」は、液晶組成物の全重量に基づいた第一成分の重量百分率（重量％）で表す。第二成分の割合などにおいても同様である。組成物に混合される添加物の割合は、液晶組成物の全重量に基づいた重量百分率（重量％）または重量百万分率（ppm）で表す。

[0014] 成分化合物の化学式において、 R^3 の記号を複数の化合物に用いた。これらのうちの任意の２つの化合物において、 R^3 で選択されるものは同じであっても、異なってもよい。例えば、化合物（２）の R^3 がエチルであり、化合物（２－１）の R^3 がエチルであるケースがある。化合物（２）の R^3 がエチルであり、化合物（２－１）の R^3 がプロピルであるケースもある。このルールは、 R^4 、 R^5 などにも適用される。

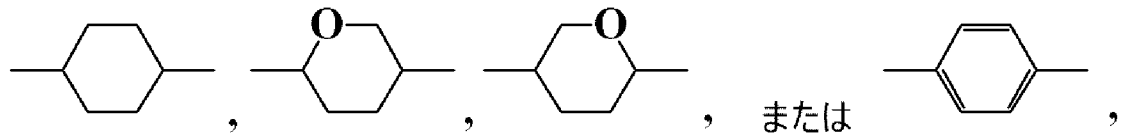
[0015] 本発明は、下記の項などである。

[0016] １． 第一成分として式（１）で表される化合物の群から選択された少なくとも１つの化合物、および第二成分として式（２）で表される化合物の群か

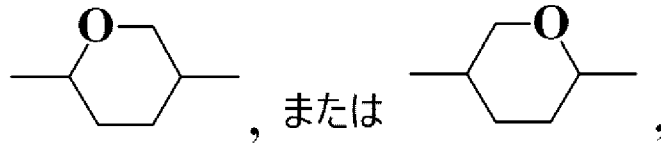
ら選択された少なくとも1つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



ここで、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数1から12のアルキルであり； R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；環Aは独立して、

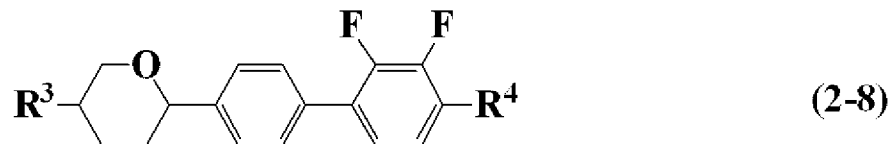
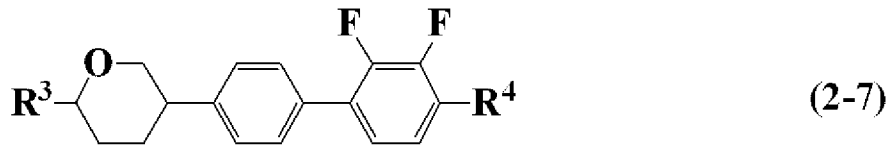
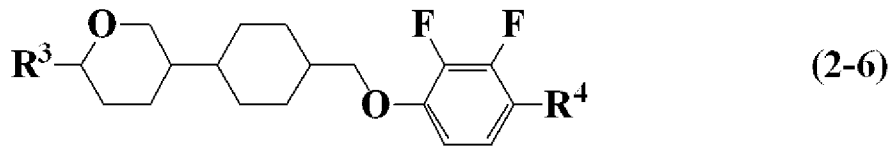
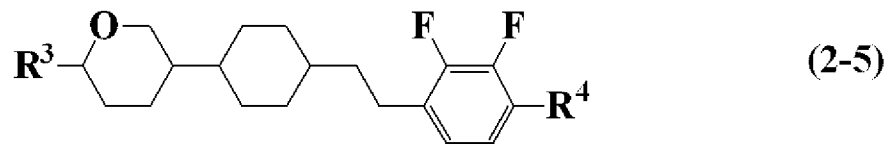
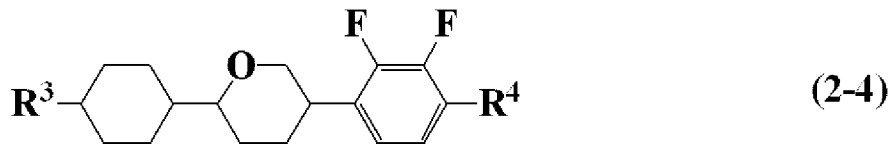
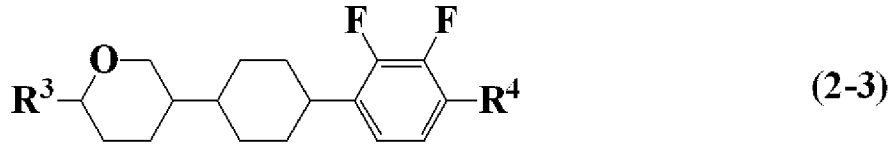
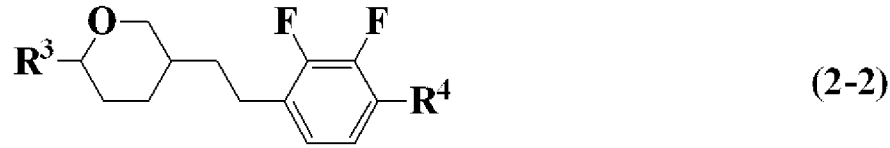


であり、ここで少なくとも一つの環Aは、



であり； Z^1 は独立して、単結合、エチレン、またはメチレンオキシであり； m は、1または2である。

[0017] 2. 第二成分が式(2-1)から式(2-8)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項1に記載の液晶組成物。



ここで、 R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

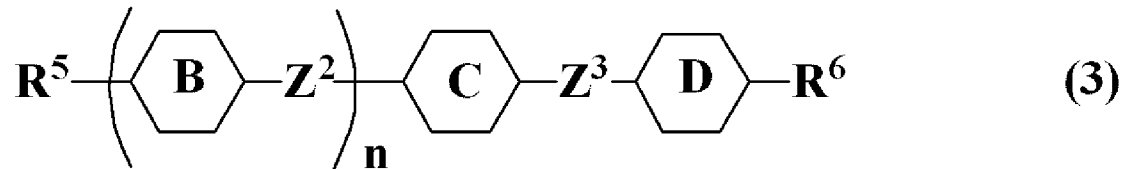
[0018] 3. 第二成分が式(2-4)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項2に記載の液晶組成物。

[0019] 4. 第二成分が式(2-8)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項2に記載の液晶組成物。

[0020] 5. 液晶組成物の全重量に基づいて、第一成分の割合が5重量%から40

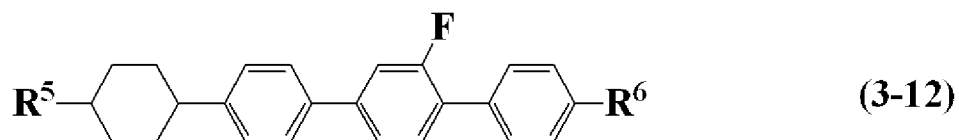
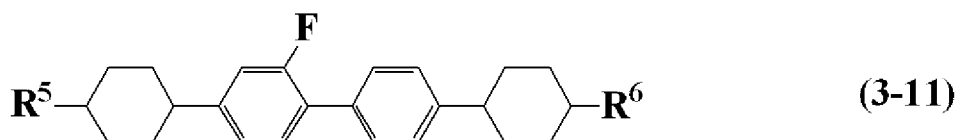
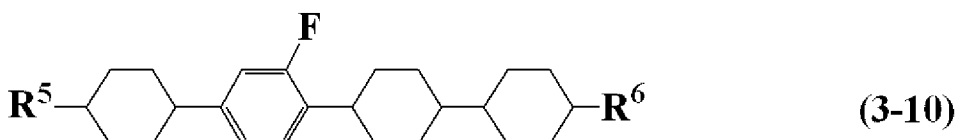
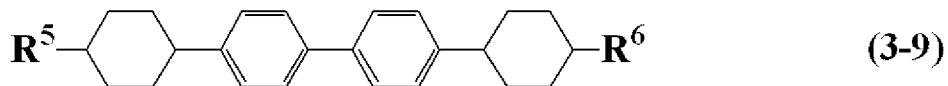
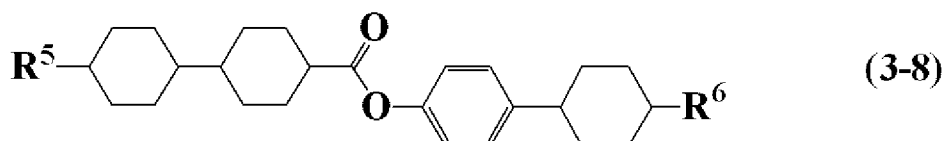
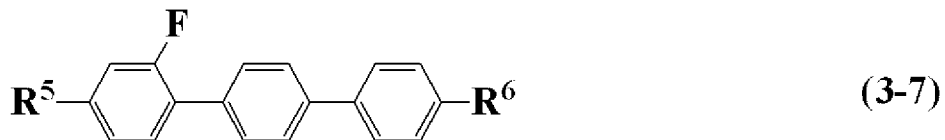
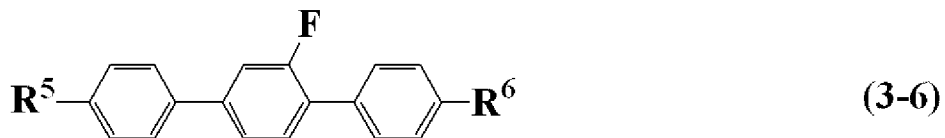
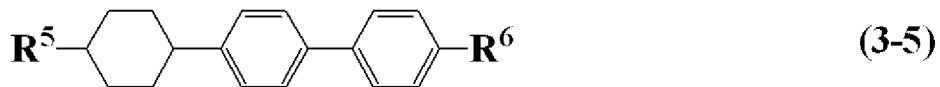
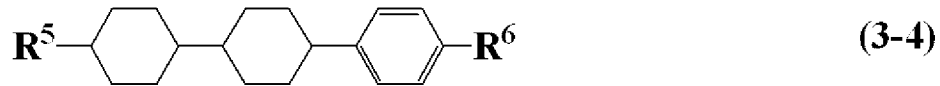
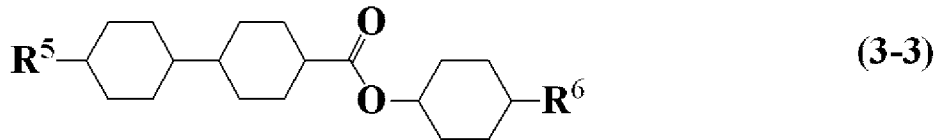
重量%の範囲であり、そして第二成分の割合が5重量%から95重量%の範囲である項1から4のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0021] 6. 第三成分として式(3)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物をさらに含有する、項1から5のいずれか1項に記載の液晶組成物。



ここで、 R^5 および R^6 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または任意の水素がフッ素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり；環B、環C、および環Dは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または3-フルオロ-1,4-フェニレンであり； Z^2 および Z^3 は独立して、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり； n は、0、1、または2であり、そして、 n が0であるとき、環Cおよび環Dのうち少なくとも一方は1,4-シクロヘキシレンである。

[0022] 7. 第三成分が式(3-1)から式(3-12)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項6に記載の液晶組成物。



ここで、 R^5 および R^6 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数

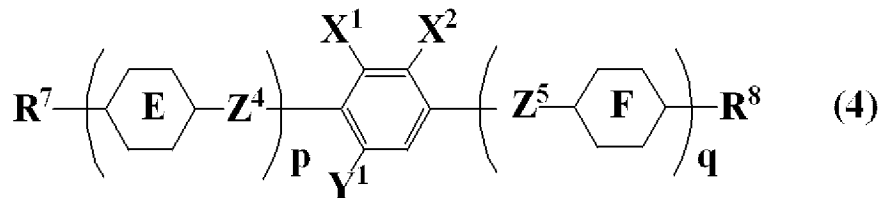
1 から 1 2 のアルコキシ、炭素数 2 から 1 2 のアルケニル、または任意の水素がフッ素で置き換えられた炭素数 2 から 1 2 のアルケニルである。

[0023] 8. 第三成分が式 (3-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である項 7 に記載の液晶組成物。

[0024] 9. 第三成分が式 (3-7) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である項 7 に記載の液晶組成物。

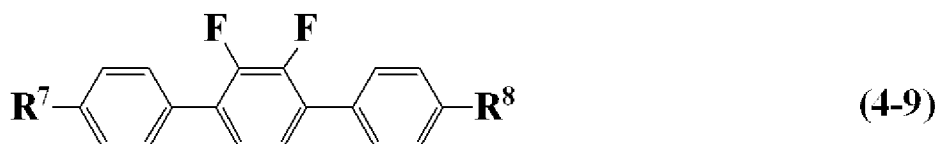
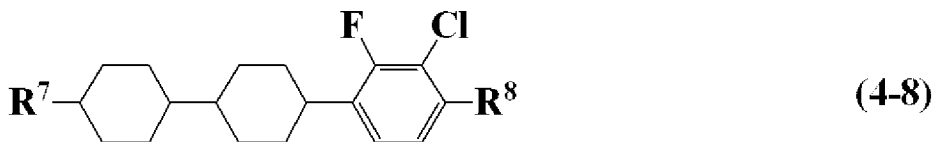
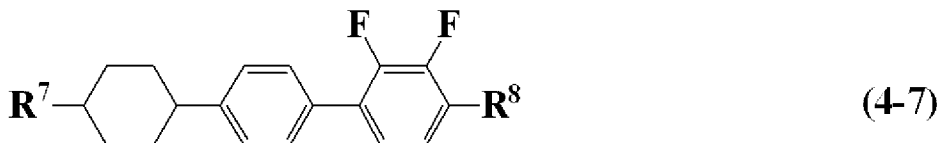
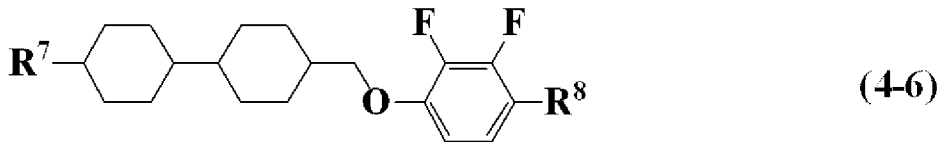
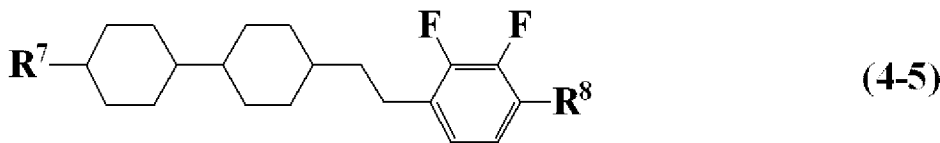
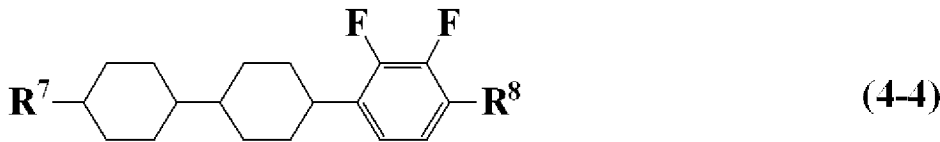
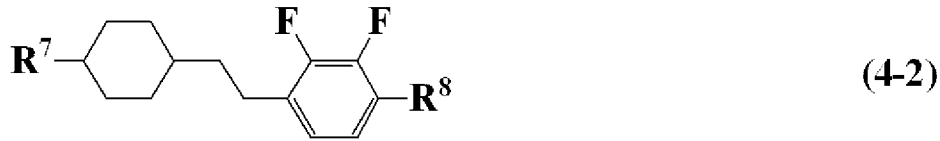
[0025] 10. 液晶組成物の全重量に基づいて、第三成分の割合が 10 重量% から 90 重量% の範囲である項 6 から 9 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

[0026] 11. 第四成分として式 (4) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物をさらに含有する、項 1 から 10 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



ここで、 R^7 および R^8 は独立して、炭素数 1 から 12 のアルキル、炭素数 1 から 12 のアルコキシ、または炭素数 2 から 12 のアルケニルであり；環 E および環 F は独立して、1, 4-シクロヘキシレンまたは 1, 4-フェニレンであり； Z^4 および Z^5 は独立して、単結合、エチレン、またはメチレンオキシであり； X^1 および X^2 は独立して、フッ素または塩素であり； Y^1 は、水素またはメチルであり； p は、1、2、または 3 であり、 q は 0 または 1 であり、そして、 p と q との和が、1、2、または 3 である。

[0027] 12. 第四成分が式 (4-1) から式 (4-9) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である項 11 に記載の液晶組成物。



R⁷およびR⁸は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

[0028] 13. 第四成分が式(4-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項12に記載の液晶組成物。

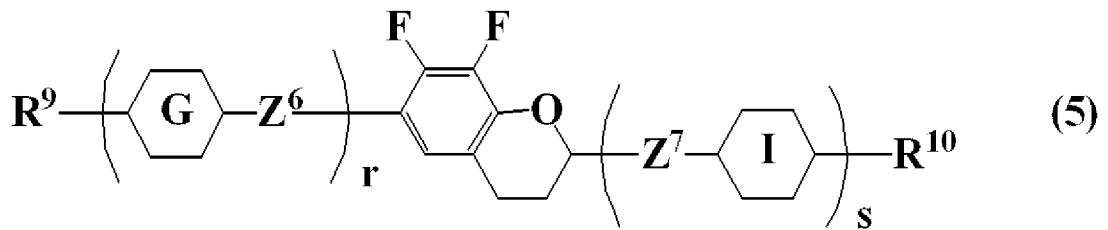
[0029] 14. 第四成分が式(4-4)で表される化合物の群から選択された少な

くとも1つの化合物である項12に記載の液晶組成物。

[0030] 15. 第四成分が式(4-6)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項12に記載の液晶組成物。

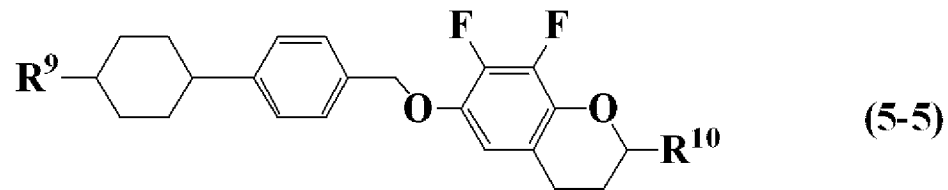
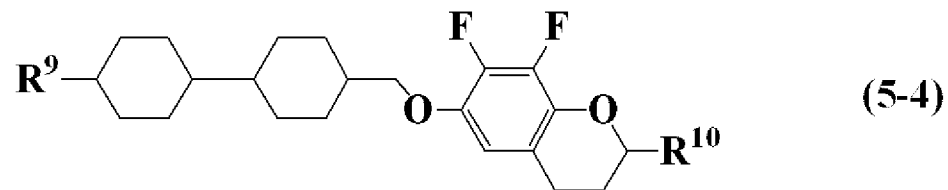
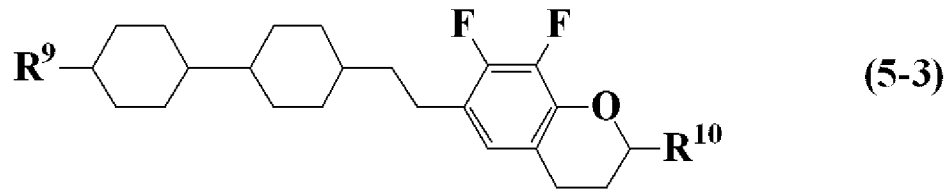
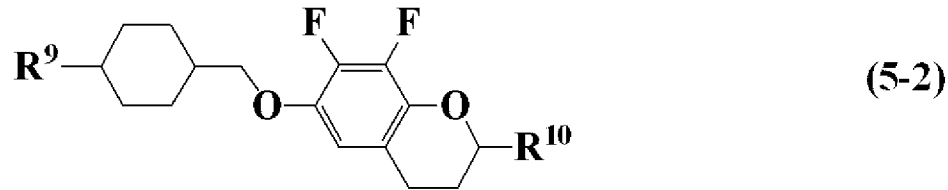
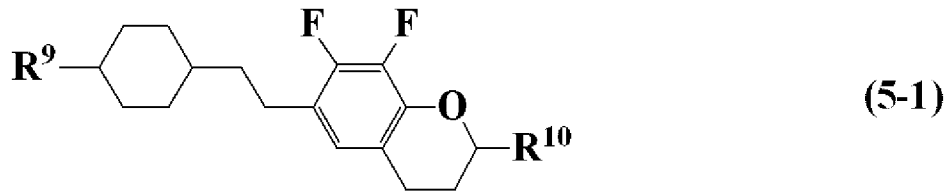
[0031] 16. 液晶組成物の全重量に基づいて、第四成分の割合が5重量%から80重量%の範囲である項11から15のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0032] 17. 第五成分として式(5)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物をさらに含有する項1から16のいずれか1項に記載の液晶組成物。



ここで、 R^9 および R^{10} は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；環Gおよび環Iは独立して、1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり； Z^6 および Z^7 は独立して、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり； r は、0、1、または2であり、 s は0または1であり、そして、 r と s との和が1または2である。

[0033] 18. 第五成分が式(5-1)から式(5-5)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項17に記載の液晶組成物。



ここで、 R^9 および R^{10} は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

[0034] 19. 第五成分が式(5-4)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である項18に記載の液晶組成物。

[0035] 20. 液晶組成物の全重量に基づいて、第五成分の割合が5重量%から40重量%の範囲である項17から19のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0036] 21. ネマチック相の上限温度が70℃以上であり、波長589nmにおける光学異方性(25℃)が0.08以上であり、そして周波数1kHzにおける誘電率異方性(25℃)が-2以下である項1から20のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0037] 22. 項1から21のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

- [0038] 23. 液晶表示素子の動作モードが、VAモード、IPSモード、FFSモード、またはPSAモードであり、液晶表示素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である項22に記載の液晶表示素子。
- [0039] 24. 項22または23のいずれかに記載の液晶表示素子における液晶組成物の使用。
- [0040] 本発明は、次の項も含む。1) 光学活性な化合物をさらに含有する上記の組成物、2) 酸化防止剤、紫外線吸収剤、消泡剤などの添加物をさらに含有する上記の組成物、3) 上記の組成物を含有するAM素子、4) 上記の組成物を含有し、そしてTN、ECB、OCB、IPS、FFS、VA、またはPSAのモードを有する素子、5) 上記の組成物を含有する透過型の素子、6) 上記の組成物を、ネマチック相を有する組成物としての使用、7) 上記の組成物に光学活性な化合物を添加することによって光学活性な組成物としての使用。
- [0041] 本発明の組成物を次の順で説明する。第一に、組成物における成分化合物の構成を説明する。第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物に及ぼす主要な効果を説明する。第三に、組成物における成分の組み合わせ、成分化合物の好ましい割合およびその根拠を説明する。第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。第五に、成分化合物の具体的な例を示す。第六に、組成物に混合してもよい添加物を説明する。第七に、成分化合物の合成法を説明する。最後に、組成物の用途を説明する。
- [0042] 第一に、組成物における成分化合物の構成を説明する。本発明の組成物は組成物Aと組成物Bに分類される。組成物Aは、化合物(1)、化合物(2)、化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)から選択された化合物の他に、その他の液晶性化合物、添加物、不純物などをさらに含有してもよい。「その他の液晶性化合物」は、化合物(1)、化合物(2)、化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)とは異なる液晶性化合物である。このような化合物は、特性をさらに調整する目的で組成物に混合される。その他の液晶性化合物の中で、シアノ化合物は熱または紫外線に対する安定

性の観点から少ない方が好ましい。シアノ化合物のさらに好ましい割合は0重量%である。添加物は、光学活性な化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合可能な化合物、重合開始剤などである。不純物は成分化合物の合成などの工程において混入した化合物などである。この化合物が液晶性化合物であったとしても、ここでは不純物として分類される。

[0043] 組成物Bは、実質的に化合物(1)、化合物(2)、化合物(3)、化合物(4)、および化合物(5)から選択された化合物のみからなる。「実質的に」は、添加物および不純物を除いて、これらの化合物と異なる液晶性化合物を組成物が含有しないことを意味する。組成物Bは組成物Aに比較して成分の数が少ない。コストを下げるという観点から、組成物Bは組成物Aよりも好ましい。その他の液晶性化合物を混合することによって物性をさらに調整できるという観点から、組成物Aは組成物Bよりも好ましい。

[0044] 第二に、成分化合物の主要な特性、およびこの化合物が組成物の特性に及ぼす主要な効果を説明する。成分化合物の主要な特性を本発明の効果に基づいて表2にまとめる。表2の記号において、Lは大きいまたは高い、Mは中程度の、Sは小さいまたは低い、を意味する。記号L、M、Sは、成分化合物のあいだの定性的な比較に基づいた分類であり、0(ゼロ)は、値がほぼゼロであることを意味する。

[0045]

表2. 化合物の特性					
化合物	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
上限温度	M	M~L	S~L	M~L	M
粘度	S	M~L	S~M	M~L	L
光学異方性	M~L	M	S~L	M~L	M~L
誘電率異方性	0	L	0	L	L
比抵抗	L	L	L	L	L

[0046] 成分化合物を組成物に混合したとき、成分化合物が組成物の特性に及ぼす主要な効果は次のとおりである。化合物(1)は、下限温度を下げ、光学異

方性を上げ、粘度を下げる。化合物（２）は、誘電率異方性の絶対値を上げ、下限温度を下げ、粘度を下げる。化合物（３）は、粘度を下げ、適切な光学異方性を調節し、下限温度を下げる。化合物（４）は、誘電率異方性の絶対値を上げ、下限温度を下げ、粘度を下げる。化合物（５）は、誘電率異方性の絶対値を上げ、下限温度を下げる。

[0047] 第三に、組成物における成分の組み合わせ、各成分の好ましい割合およびその根拠を説明する。組成物における成分の組み合わせは、第一成分＋第二成分、第一成分＋第二成分＋第三成分、第一成分＋第二成分＋第四成分、第一成分＋第二成分＋第五成分、第一成分＋第二成分＋第三成分＋第四成分、第一成分＋第二成分＋第三成分＋第五成分、第一成分＋第二成分＋第四成分＋第五成分、第一成分＋第二成分＋第三成分＋第四成分＋第五成分である。

[0048] 組成物における成分の好ましい組み合わせは、上限温度を上げるために、または粘度を下げるために、第一成分＋第二成分＋第三成分＋第四成分であり、誘電率異方性の絶対値を上げるため、粘度を下げるため、または下限温度を下げるために、第一成分＋第二成分＋第三成分＋第四成分＋第五成分である。

[0049] 第一成分の好ましい割合は、光学異方性を上げるため、および粘度を下げるために約５重量%以上であり、下限温度を下げるために約４０重量%以下である。さらに好ましい割合は約１０重量%から約３５重量%の範囲である。特に好ましい割合は約１５重量%から約３０重量%の範囲である。

[0050] 第二成分の好ましい割合は、誘電率異方性の絶対値を上げるために約５重量%以上であり、下限温度を下げるために約９５重量%以下である。さらに好ましい割合は粘度を下げるために約１０重量%から約７０重量%の範囲である。特に好ましい割合は約２０重量%から約５０重量%の範囲である。

[0051] 第三成分の好ましい割合は、粘度を下げるために約１０重量%以上であり、下限温度を下げるために約９０重量%以下である。さらに好ましい割合は約２０重量%から約８０重量%の範囲である。特に好ましい割合は約３０重量%から約７０重量%の範囲である。

[0052] 第四成分の好ましい割合は、誘電率異方性の絶対値を上げるために約5重量%以上であり、下限温度を下げるために約80重量%以下である。さらに好ましい割合は約15重量%から約70重量%の範囲である。特に好ましい割合は約30重量%から約60重量%の範囲である。

[0053] 第五成分の好ましい割合は、誘電率異方性の絶対値を上げるために約5重量%以上であり、下限温度を下げるために約40重量%以下である。さらに好ましい割合は約7重量%から約30重量%の範囲である。特に好ましい割合は約10重量%から約20重量%の範囲である。

[0054] 第四に、成分化合物の好ましい形態を説明する。

R¹およびR²は独立して、炭素数1から12のアルキルであり、R³、R⁴、R⁷、R⁸、R⁹、およびR¹⁰は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり、R⁵およびR⁶は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または任意の水素がフッ素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルである。

[0055] 好ましいR¹またはR²は、下限温度を下げるために炭素数1から5のアルキルである。さらに好ましいR¹またはR²は、粘度を下げるために炭素数1から3のアルキルである。好ましいR³、R⁴、R⁷、R⁸、R⁹、またはR¹⁰は、下限温度を下げるために、または粘度を下げるために、炭素数1から12のアルキルまたは炭素数2から12のアルケニルである。さらに好ましいR⁴、R⁸、またはR¹⁰は、誘電率異方性の絶対値を上げるために、炭素数1から12のアルコキシである。好ましいR⁵またはR⁶は、下限温度を下げるために、または粘度を下げるために、炭素数2から12のアルケニルであり、紫外線または熱に対する安定性を上げるために、炭素数1から12のアルキルである。

[0056] 好ましいアルキルは、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、またはオクチルである。さらに好ましいアルキルは、粘度を下げるためにエチル、プロピル、ブチル、ペンチル、またはヘプチルで

ある。

[0057] 好ましいアルコキシは、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、またはヘプチルオキシである。粘度を下げるために、さらに好ましいアルコキシは、メトキシまたはエトキシである。

[0058] 好ましいアルケニルは、ビニル、1-プロペニル、2-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、1-ヘキセニル、2-ヘキセニル、3-ヘキセニル、4-ヘキセニル、または5-ヘキセニルである。さらに好ましいアルケニルは、粘度を下げるためにビニル、1-プロペニル、3-ブテニル、または3-ペンテニルである。これらのアルケニルにおける -CH=CH- の好ましい立体配置は、二重結合の位置に依存する。粘度を下げるためなどから1-プロペニル、1-ブテニル、1-ペンテニル、1-ヘキセニル、3-ペンテニル、3-ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはトランスが好ましい。2-ブテニル、2-ペンテニル、2-ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはシスが好ましい。これらのアルケニルにおいては、分岐よりも直鎖のアルケニルが好ましい。

[0059] 任意の水素がフッ素で置き換えられたアルケニルの好ましい例は、2, 2-ジフルオロビニル、3, 3-ジフルオロ-2-プロペニル、4, 4-ジフルオロ-3-ブテニル、5, 5-ジフルオロ-4-ペンテニル、および6, 6-ジフルオロ-5-ヘキセニルである。さらに好ましい例は、粘度を下げるために2, 2-ジフルオロビニル、および4, 4-ジフルオロ-3-ブテニルである。

[0060] アルキルは環状アルキルを含まない。アルコキシは環状アルコキシを含まない。アルケニルは環状アルケニルを含まない。

[0061] m は1または2である。好ましい m は、上限温度を上げるために2であり、粘度を下げるために1である。

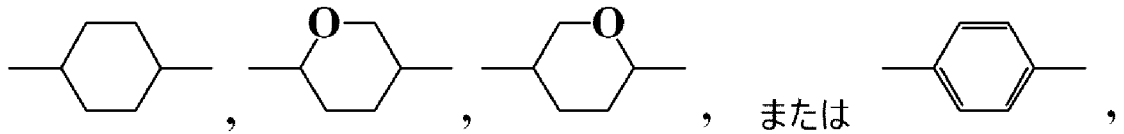
n は、0、1、または2である。好ましい n は、上限温度を上げるために2であり、粘度を下げるために0である。さらに好ましい n は、粘度を下げ

るために0である。

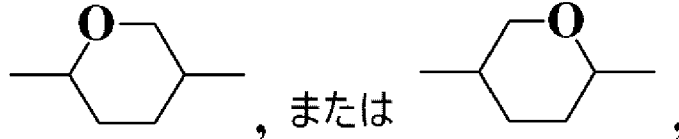
pは1、2、または3であり、qは0または1であり、そしてpとqの和が1、2、または3である。好ましいpは、粘度を下げるために1または2である。好ましいqは、光学異方性を上げるために1であり、粘度を下げるために0である。

rは、0、1、または2であり、sは0または1であり、そして、rとsとの和が1または2である。好ましいrは、上限温度を上げるために2であり、粘度を下げるために1である。好ましいsは上限温度を上げるために1であり、下限温度を下げるために0である。

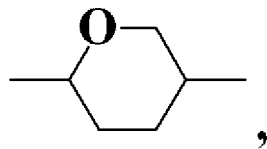
[0062] 環Aは独立して、



であり、ここで少なくとも一つの環Aは、



であり、mが2であるときの2つの環Aは同じであっても、異なってもよい。好ましい環Aは誘電率異方性の絶対値を上げるために、



であり、光学異方性を上げるために1、4-フェニレンである。

環B、環C、および環Dは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または3-フルオロ-1,4-フェニレンであり、ここでnが0であるとき、環Cおよび環Dのうち少なくとも一方は1,4-シクロヘキシレンであり、nが2であるときの任意の2つの環Bは同じであっても、異なってもよい。好ましい環B、環C

、または環Dは、上限温度を上げるために、4-シクロヘキシレンであり、光学異方性を上げるために、4-フェニレンである。

環Eおよび環Fは独立して、1, 4-シクロヘキシレン、または1, 4-フェニレンであり、pが2または3であるときの任意の2つの環Eは同じであっても、異なってもよい。好ましい環Eまたは環Fは上限温度を上げるために、1, 4-シクロヘキシレンであり、光学異方性を上げるために、4-フェニレンである。

環Gおよび環Iは独立して、1, 4-シクロヘキシレン、または1, 4-フェニレンであり、rが2であるときの2つの環Gは同じであっても、異なってもよい。好ましい環Gまたは環Iは上限温度を上げるために、1, 4-シクロヘキシレンであり、下限温度を下げるために、1, 4-フェニレンである。

1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置は、上限温度を上げるためにシスよりもトランスが好ましい。

[0063] X¹およびX²は独立して、フッ素または塩素である。好ましいX¹またはX²は粘度を下げるためにフッ素である。

[0064] Y¹は、水素またはメチルである。好ましいY¹は粘度を下げるために水素であり、紫外線または熱に対する安定性を上げるためにメチルである。

[0065] Z¹は独立して、単結合、エチレン、またはメチレンオキシであり、mが2であるときの任意の2つのZ¹は同じであっても、異なってもよい。好ましいZ¹は粘度を下げるために単結合またはエチレンであり、誘電率異方性の絶対値を上げるためにメチレンオキシである。

Z²およびZ³は独立して、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり、nが2であるときの2つのZ²は同じであっても、異なってもよい。好ましいZ²またはZ³は、粘度を下げるために単結合であり、誘電率異方性を上げるために、メチレンオキシまたはカルボニルオキシである。

Z⁴およびZ⁵は独立して、単結合、エチレン、またはメチレンオキシであ

り、 p が2または3であるときの任意の2つの Z^4 は同じであっても、異なってもよい。好ましい Z^4 または Z^5 は、粘度を下げるために単結合またはエチレンであり、誘電率異方性を上げるために、メチレンオキシである。

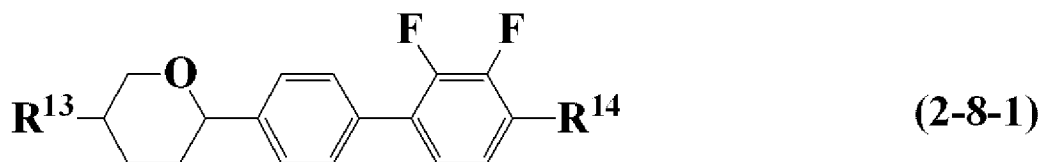
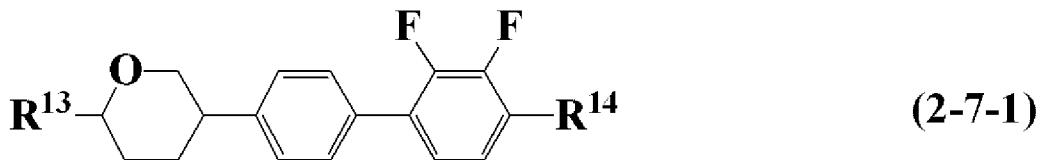
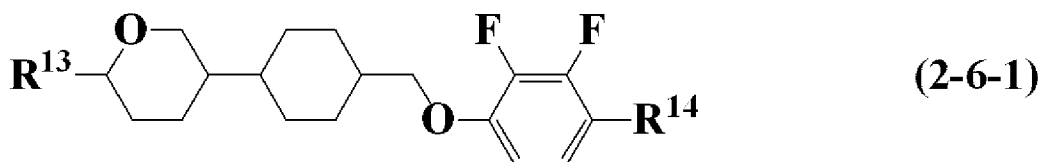
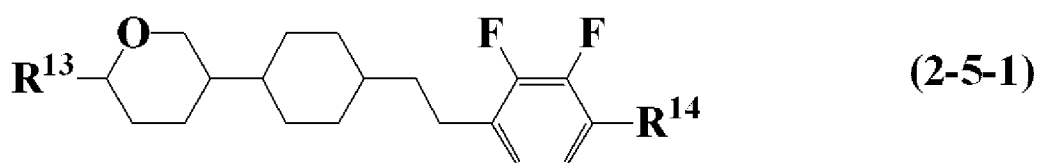
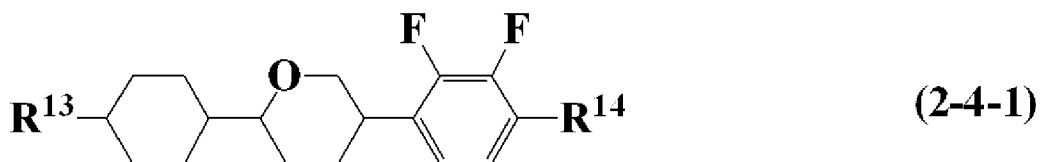
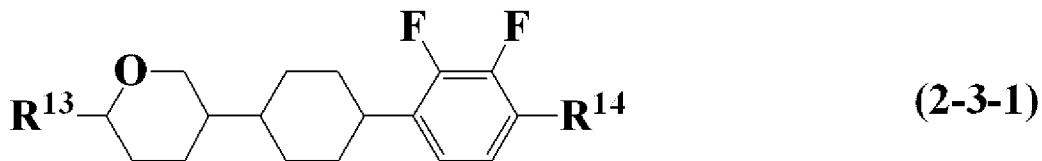
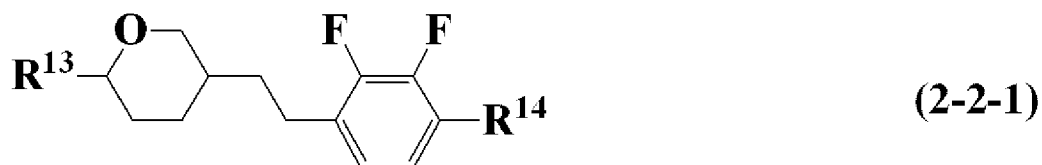
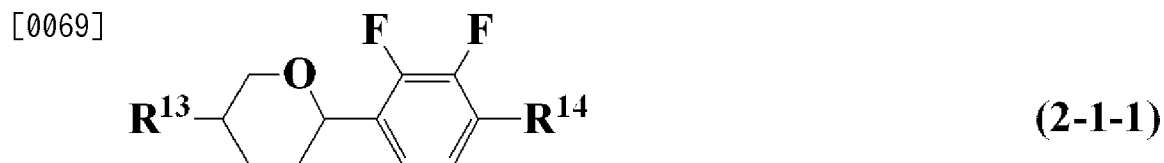
Z^6 および Z^7 は独立して、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり、 r が2であるときの2つの Z^6 は同じであっても、異なってもよい。好ましい Z^6 または Z^7 は、粘度を下げるために単結合であり、誘電率異方性を上げるために、メチレンオキシまたはカルボニルオキシである。

[0066] 第五に、成分化合物の具体的な例を示す。

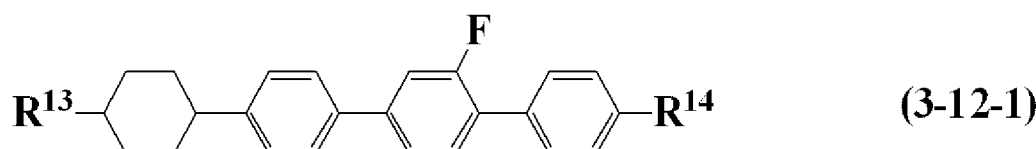
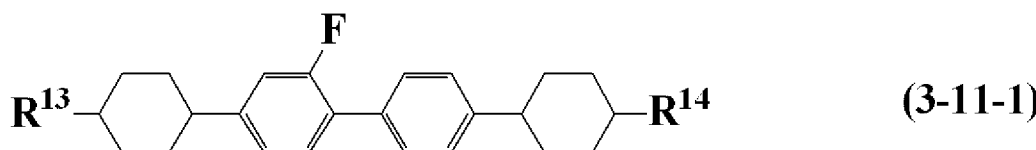
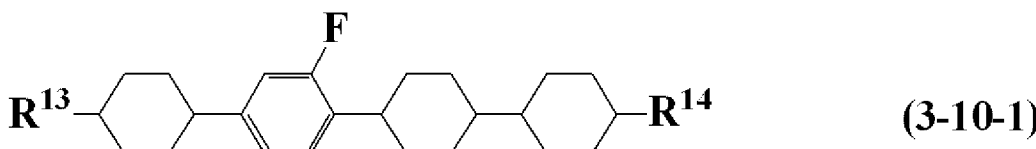
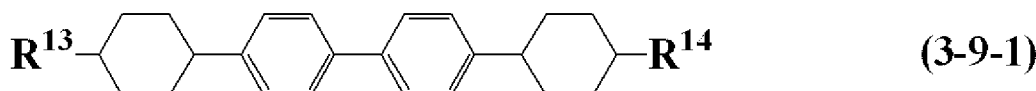
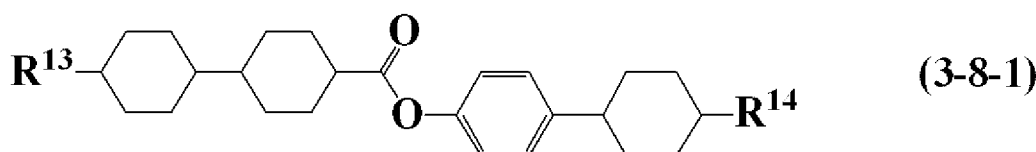
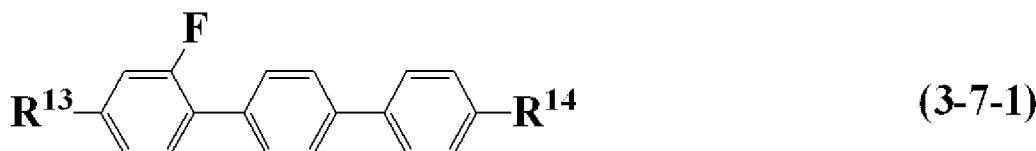
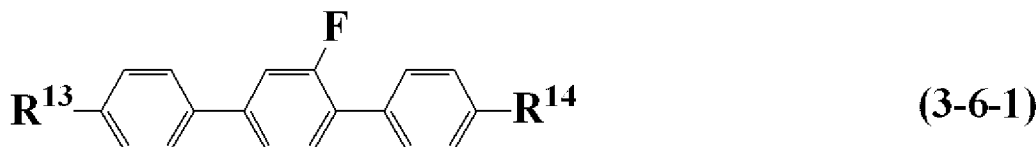
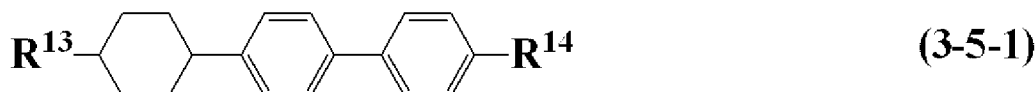
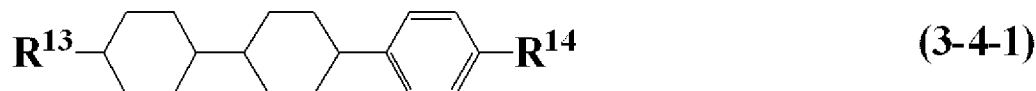
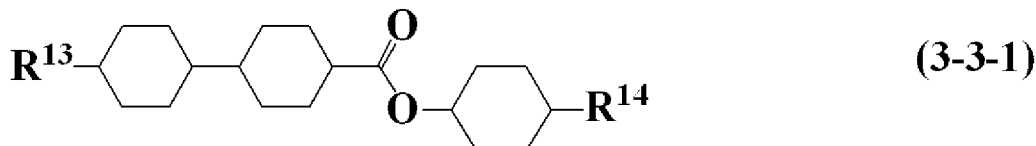
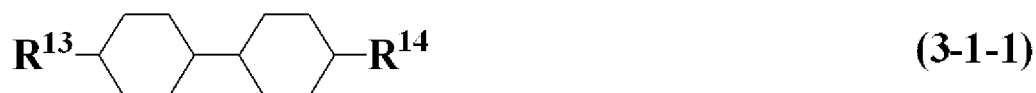
下記の好ましい化合物において、 R^{11} および R^{12} は独立して、炭素数1から7を有する直鎖のアルキルであり、 R^{13} は、炭素数1から12の直鎖のアルキルまたは炭素数2から12の直鎖のアルケニルであり、 R^{14} は、炭素数1から12の直鎖のアルキル、炭素数1から12の直鎖のアルコキシ、または炭素数2から12の直鎖のアルケニルである。

[0067] 好ましい化合物(1)は化合物(1-1)である。好ましい化合物(2)は化合物(2-1-1)から化合物(2-8-1)である。さらに好ましい化合物(2)は化合物(2-3-1)から化合物(2-8-1)である。特に好ましい化合物(2)は化合物(2-3-1)、化合物(2-4-1)、および化合物(2-8-1)である。好ましい化合物(3)は化合物(3-1-1)から化合物(3-12-1)である。さらに好ましい化合物(3)は化合物(3-1-1)、および化合物(3-4-1)から化合物(3-12-1)である。特に好ましい化合物(3)は、化合物(3-1-1)、化合物(3-6-1)、化合物(3-7-1)、および化合物(3-12-1)である。好ましい化合物(4)は化合物(4-1-1)から化合物(4-9-1)である。さらに好ましい化合物(4)は化合物(4-1-1)から化合物(4-7-1)である。特に好ましい化合物(4)は化合物(4-1-1)、化合物(4-3-1)、化合物(4-4-1)、化合物(4-6-1)、および化合物(4-7-1)である。好ましい化合物(5)は化合物

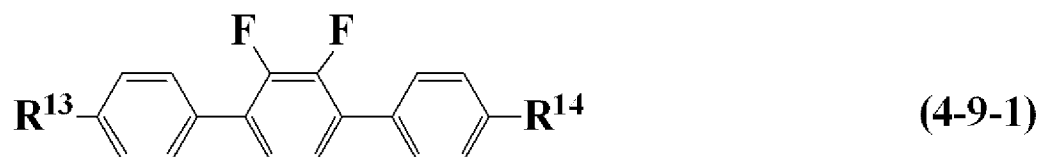
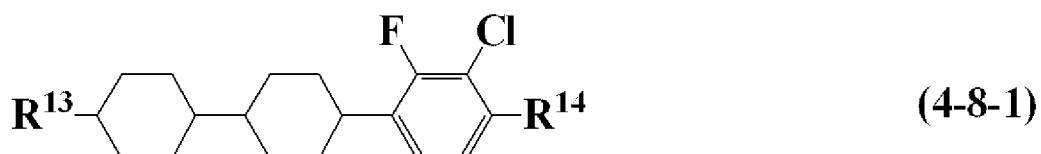
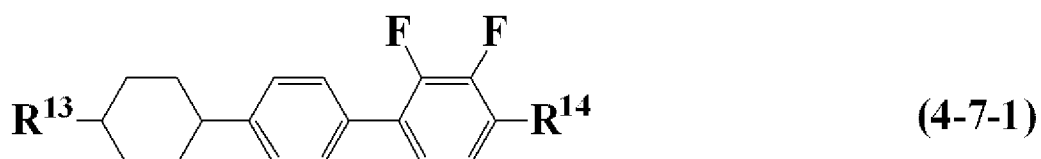
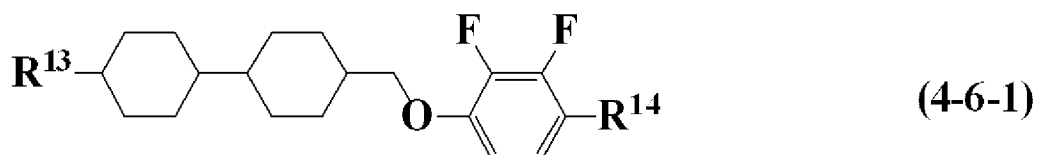
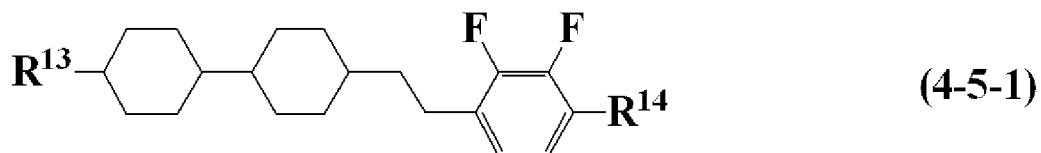
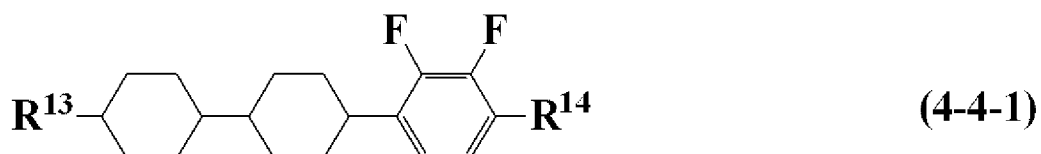
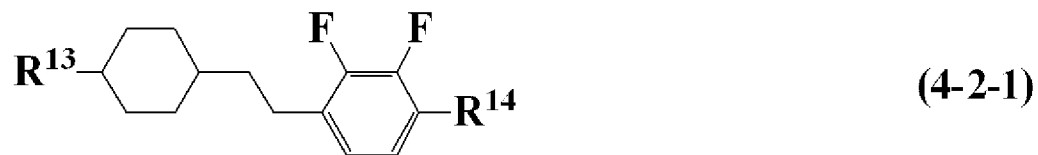
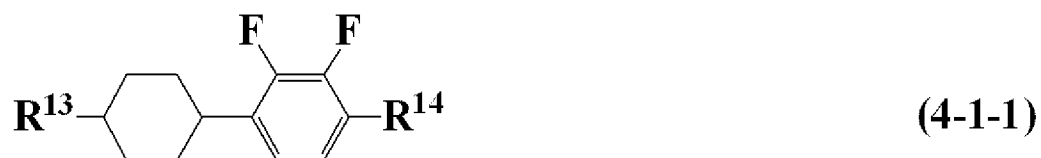
(5-1-1) から化合物 (5-5-1) である。さらに好ましい化合物 (5) は化合物 (5-4-1) である。



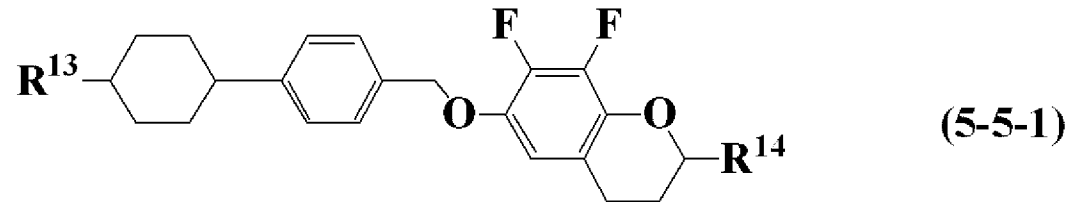
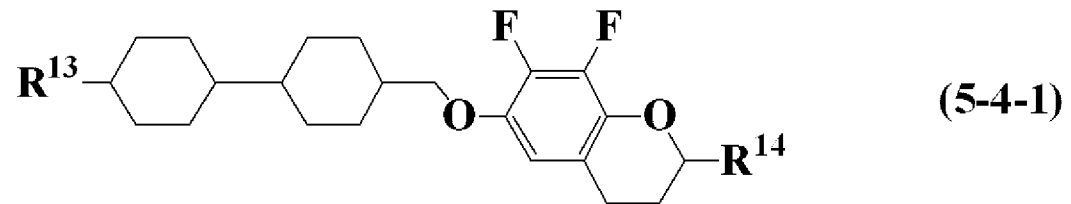
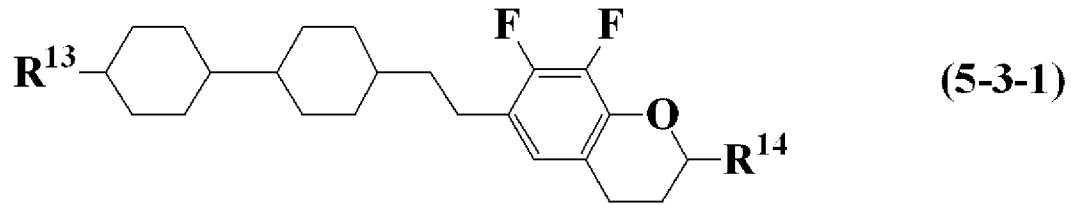
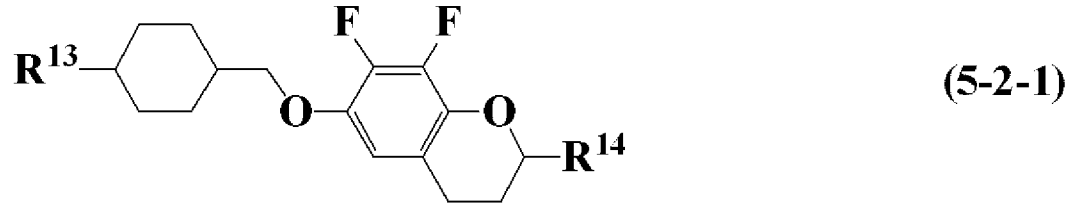
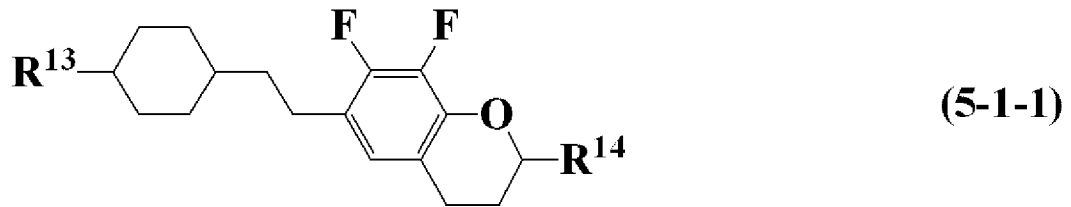
[0070]



[0071]

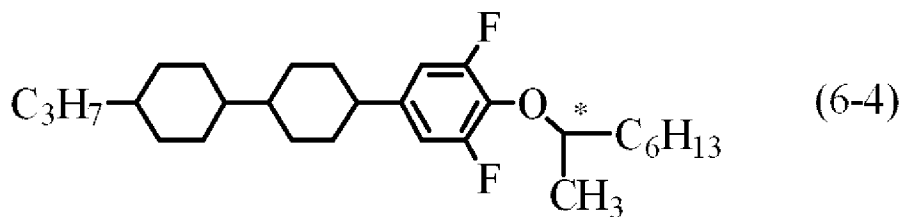
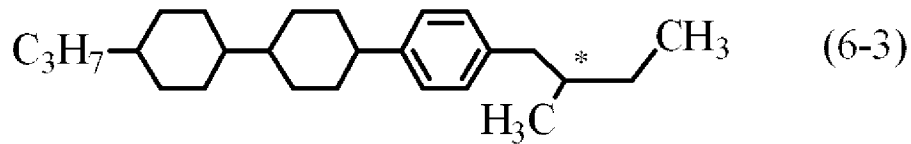
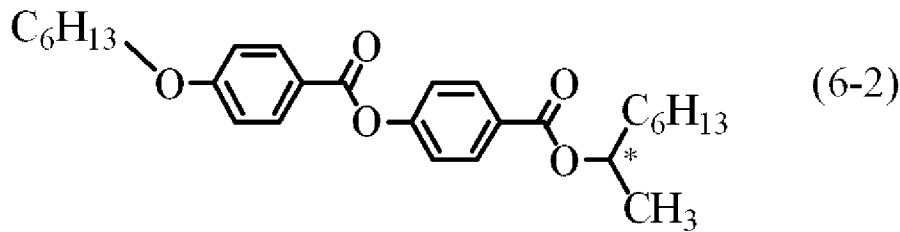
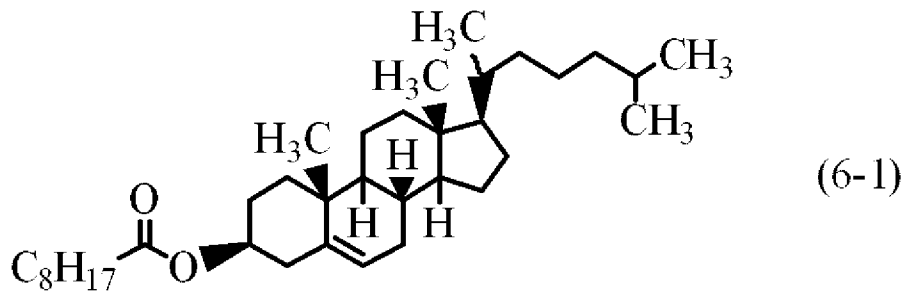


[0072]

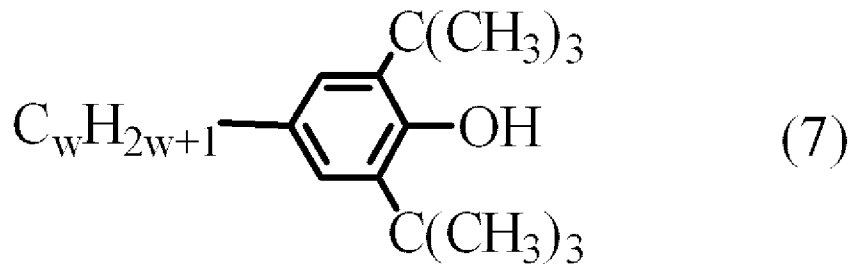


[0073] 第六に、組成物に混合してもよい添加物を説明する。このような添加物は、光学活性な化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、色素、消泡剤、重合可能な化合物、重合開始剤などである。液晶のらせん構造を誘起してねじれ角を与える目的で光学活性な化合物が組成物に混合される。このような化合物の例は、化合物（6-1）から化合物（6-4）である。光学活性な化合物の好ましい割合は約5重量%以下である。さらに好ましい割合は約0.01重量%から約2重量%の範囲である。

[0074]



[0075] 大気中での加熱による比抵抗の低下を防止するために、または素子を長時間使用したあと、室温だけではなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を維持するために、酸化防止剤が組成物に混合される。



[0076] 酸化防止剤の好ましい例は、 w が1から9の整数である化合物(7)などである。化合物(7)において、好ましい w は、1、3、5、7、または9

である。さらに好ましい w は1または7である。 w が1である化合物(7)は、揮発性が大きいので、大気中での加熱による比抵抗の低下を防止するとき有効である。 w が7である化合物(7)は、揮発性が小さいので、素子を長時間使用したあと、室温だけではなくネマチック相の上限温度に近い温度でも大きな電圧保持率を維持するのに有効である。酸化防止剤の好ましい割合は、その効果を得るために約50 ppm以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないように約600 ppm以下である。さらに好ましい割合は、約100 ppmから約300 ppmの範囲である。

[0077] 紫外線吸収剤の好ましい例は、ベンゾフェノン誘導体、ベンゾエート誘導体、トリアゾール誘導体などである。立体障害のあるアミンのような光安定剤もまた好ましい。これらの吸収剤や安定剤における好ましい割合は、その効果を得るために約50 ppm以上であり、上限温度を下げないように、または下限温度を上げないように約10000 ppm以下である。さらに好ましい割合は約100 ppmから約10000 ppmの範囲である。

[0078] GH (guest host) モードの素子に適合させるためにアゾ系色素、アントラキノン系色素などのような二色性色素 (dichroic dye) が組成物に混合される。色素の好ましい割合は、約0.01重量%から約10重量%の範囲である。泡立ちを防ぐために、ジメチルシリコンオイル、メチルフェニルシリコンオイルなどの消泡剤が組成物に混合される。消泡剤の好ましい割合は、その効果を得るために約1 ppm以上であり、表示の不良を防ぐために約1000 ppm以下である。さらに好ましい割合は、約1 ppmから約500 ppmの範囲である。

[0079] PSA (polymer sustained alignment) モードの素子に適合させるために重合可能な化合物が組成物に混合される。重合可能な化合物の好ましい例はアクリレート、メタクリレート、ビニル化合物、ビニルオキシ化合物、プロペニルエーテル、エポキシ化合物 (オキシラン、オキセタン)、ビニルケトンなどの重合可能な基を有する化合物である。特に好ましい例は、アクリレート、またはメタクリレートの誘導体である。重合可能な化合物の好ましい

割合は、その効果を得るために、約0.05重量%以上であり、表示不良を防ぐために約10重量%以下である。さらに好ましい割合は、約0.1重量%から約2重量%の範囲である。重合可能な化合物は、好ましくは光重合開始剤などの適切な開始剤存在下でUV照射などにより重合する。重合のための適切な条件、開始剤の適切なタイプ、および適切な量は、当業者には既知であり、文献に記載されている。例えば光重合開始剤であるIrgacure 651（登録商標）、Irgacure 184（登録商標）、またはDarocure 1173（登録商標）（BASF）がラジカル重合に対して適切である。好ましい光重合開始剤の割合は、重合可能な化合物の約0.1重量%から約5重量%の範囲であり、さらに好ましくは約1重量%から約3重量%の範囲である。

[0080] 第七に、成分化合物の合成法を説明する。これらの化合物は既知の方法によって合成できる。合成法を例示する。化合物（1-1）は、特開昭52-53783号公報に記載された方法で合成する。化合物（2-4-1）は、特開2000-008040号公報に記載された方法で合成する。化合物（3-1-1）は、特開昭59-70624号公報に記載された方法で合成する。化合物（4-1-1）および化合物（4-4-1）は、特表平2-503441号公報に記載された方法で合成する。化合物（4-7-1）は、特開昭57-114532号公報に記載された方法で合成する。化合物（5-4-1）は、特開2005-290349号公報に記載された方法で合成する。酸化防止剤は市販されている。式（7）のwが1である化合物は、アルドリッチ（Sigma-Aldrich Corporation）から入手できる。wが7である化合物（7）などは、米国特許3660505号明細書に記載された方法によって合成する。

[0081] 合成法を記載しなかった化合物は、オーガニック・シンセシス（Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc）、オーガニック・リアクションズ（Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc）、コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス（Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press）、

新実験化学講座（丸善）などの成書に記載された方法によって合成できる。組成物は、このようにして得た化合物から公知の方法によって調製される。例えば、成分化合物を混合し、そして加熱によって互いに溶解させる。

[0082] 最後に、組成物の用途を説明する。大部分の組成物は主として、約 -10°C 以下の下限温度、約 70°C 以上の上限温度、そして約 0.07 から約 0.20 の範囲の光学異方性を有する。この組成物を含有する素子は大きな電圧保持率を有する。この組成物はAM素子に適する。この組成物は透過型のAM素子に特に適する。成分化合物の割合を制御することによって、またはその他の液晶性化合物を混合することによって、約 0.08 から約 0.25 の範囲の光学異方性を有する組成物を調製してもよい。この組成物は、ネマチック相を有する組成物としての使用、光学活性な化合物を添加することによって光学活性な組成物としての使用が可能である。

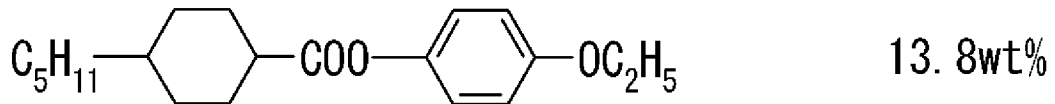
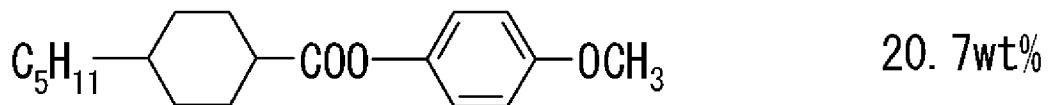
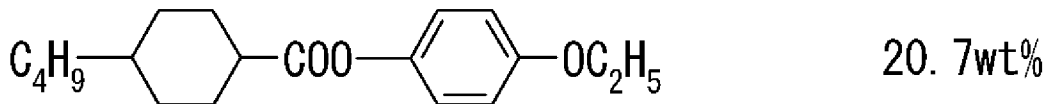
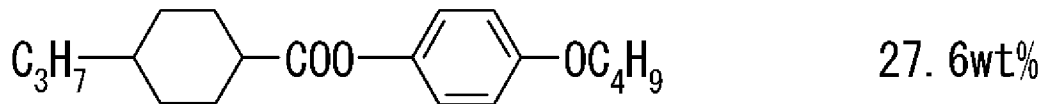
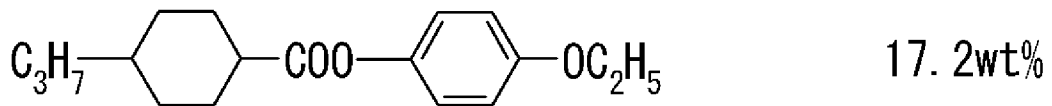
[0083] この組成物はAM素子への使用が可能である。さらにPM素子への使用も可能である。この組成物は、PC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、FFS、VA、PSAなどのモードを有するAM素子およびPM素子への使用が可能である。IPS、FFSまたはVAモードを有するAM素子への使用は特に好ましい。これらの素子が反射型、透過型または半透過型であってもよい。透過型の素子への使用は好ましい。非結晶シリコン-TFT素子または多結晶シリコン-TFT素子への使用も可能である。この組成物をマイクロカプセル化して作製したNCAP (nematic curvilinear aligned phase) 型の素子や、組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたPD (polymer dispersed) 型の素子にも使用できる。

実施例

[0084] 組成物および組成物に含有させる化合物の評価をするために、組成物およびこの化合物を測定目的物とする。測定目的物が組成物のときはそのまま測定し、得られた値を記載した。測定目的物が化合物のときは、この化合物（ 15 重量％）を母液晶（ 85 重量％）に混合することによって測定用試料を調製した。測定によって得られた値から外挿法によって化合物の特性値を算

出した。(外挿値) = { (測定用試料の測定値) - 0.85 × (母液晶の測定値) } / 0.15。この割合でスメクチック相 (または結晶) が 25℃ で析出するときは、化合物と母液晶の割合を 10 重量% : 90 重量%、5 重量% : 95 重量%、1 重量% : 99 重量% の順に変更した。この外挿法によって化合物に関する上限温度、光学異方性、粘度および誘電率異方性の値を求めた。

[0085] 母液晶の成分とその割合は下記のとおりである。



[0086] 特性値の測定は下記の方法にしたがった。それらの多くは、社団法人電子情報技術産業協会 (Japan Electronics and Information Technology Industries Association 以下 JEITA という) で審議制定される JEITA 規格 (JEITA ED-2521B) に記載された方法、またはこれを修飾した方法である。

[0087] ネマチック相の上限温度 (NI ; °C) : 偏光顕微鏡を備えた融点測定装置

のホットプレートに試料を置き、 $1^{\circ}\text{C}/\text{分}$ の速度で加熱した。試料の一部がネマチック相から等方性液体に変化したときの温度を測定した。ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。

[0088] ネマチック相の下限温度 (T_c ; $^{\circ}\text{C}$) : ネマチック相を有する試料をガラス瓶に入れ、 0°C 、 -10°C 、 -20°C 、 -30°C 、および -40°C のフリーザー中に10日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が -20°C ではネマチック相のままであり、 -30°C では結晶またはスメクチック相に変化したとき、 T_c を $\leq -20^{\circ}\text{C}$ と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

[0089] 粘度 (バルク粘度; η ; 20°C で測定; $\text{mPa}\cdot\text{s}$) : 測定にはE型回転粘度計を用いた。

[0090] 光学異方性 (屈折率異方性; Δn ; 25°C で測定) : 測定は、波長 589nm の光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッペ屈折計により行なった。主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率 n_{\parallel} は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率 n_{\perp} は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学異方性の値は、 $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$ 、の式から計算した。

[0091] 誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$; 25°C で測定) : 誘電率異方性の値は、 $\Delta \epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ 、の式から計算した。誘電率 (ϵ_{\parallel} および ϵ_{\perp}) は次のように測定した。

1) 誘電率 (ϵ_{\parallel}) の測定 : よく洗浄したガラス基板にオクタデシルトリエトキシシラン (0.16mL) のエタノール (20mL) 溶液を塗布した。ガラス基板をスピナーで回転させたあと、 150°C で1時間加熱した。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が $4\mu\text{m}$ であるVA素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子にサイン波 (0.5V 、 1kHz) を印加し、2秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率 (ϵ_{\parallel}) を測定した。

2) 誘電率 (ϵ_{\perp}) の測定 : よく洗浄したガラス基板にポリイミド溶液を塗

布した。このガラス基板を焼成した後、得られた配向膜にラビング処理をした。2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $9\mu\text{m}$ であり、ツイスト角が 80° であるTN素子に試料を入れた。この素子にサイン波（ 0.5V 、 1kHz ）を印加し、2秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率（ ϵ_{\perp} ）を測定した。

[0092] しきい値電圧（ V_{th} ； 25°C で測定； V ）：測定には大塚電子株式会社製のLCD5100型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）が $4\mu\text{m}$ であり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード（normally black mode）のVA素子に試料を入れ、この素子をUV硬化の接着剤を用いて密閉した。この素子に印加する電圧（ 60Hz 、矩形波）は 0V から 20V まで 0.02V ずつ段階的に増加させた。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときに透過率 100% であり、この光量が最小であったときに透過率 0% である電圧－透過率曲線を作成した。しきい値電圧は透過率が 10% になったときの電圧である。

[0093] 電圧保持率（ $VHR-1$ ； 25°C ； $\%$ ）：測定に用いたTN素子はポリイミド配向膜を有し、そして2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）は $5\mu\text{m}$ である。この素子は試料を入れたあと紫外線によって重合する接着剤で密閉した。このTN素子にパルス電圧（ 5V で 60 マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で 16.7 ミリ秒のあいだ測定し、単位周期における電圧曲線と横軸との間の面積Aを求めた。面積Bは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Bに対する面積Aの百分率である。

[0094] 電圧保持率（ $VHR-2$ ； 80°C ； $\%$ ）：測定に用いたTN素子はポリイミド配向膜を有し、そして2枚のガラス基板の間隔（セルギャップ）は $5\mu\text{m}$ である。この素子は試料を入れたあと紫外線によって重合する接着剤で密閉した。このTN素子にパルス電圧（ 5V で 60 マイクロ秒）を印加して充電した。減衰する電圧を高速電圧計で 16.7 ミリ秒のあいだ測定し、単位

周期における電圧曲線と横軸との間の面積Aを求めた。面積Bは減衰しなかったときの面積である。電圧保持率は面積Bに対する面積Aの百分率である。

- [0095] 電圧保持率 (VHR-3 ; 25°C ; %) : 紫外線を照射したあと、電圧保持率を測定し、紫外線に対する安定性を評価した。測定に用いたTN素子はポリイミド配向膜を有し、そしてセルギャップは5 μm である。この素子に試料を注入し、光を20分間照射した。光源は超高压水銀ランプUSH-500D (ウシオ電機製) であり、素子と光源の間隔は20 cmである。VHR-3の測定では、減衰する電圧を16.7ミリ秒のあいだ測定した。大きなVHR-3を有する組成物は紫外線に対して大きな安定性を有する。VHR-3は90%以上が好ましく、95%以上がより好ましい。
- [0096] 電圧保持率 (VHR-4 ; 25°C ; %) : 試料を注入したTN素子を80°Cの恒温槽内で500時間加熱したあと、電圧保持率を測定し、熱に対する安定性を評価した。VHR-4の測定では、減衰する電圧を16.7ミリ秒のあいだ測定した。大きなVHR-4を有する組成物は熱に対して大きな安定性を有する。
- [0097] 応答時間 (τ ; 25°Cで測定 ; ms) : 測定には大塚電子株式会社製のLCD5100型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプである。ローパス・フィルター (Low-pass filter) は5 kHzに設定した。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が4 μm であり、ラビング方向がアンチパラレルであるノーマリーブラックモード (normally black mode) のVA素子に試料を入れ、この素子をUV硬化の接着剤を用いて密閉した。この素子に矩形波 (60 Hz、10 V、0.5秒) を印加した。この際に、素子に垂直方向から光を照射し、素子を透過した光量を測定した。この光量が最大になったときが透過率100%であり、この光量が最小であったときが透過率0%である。応答時間は透過率90%から10%に変化するのに要した時間 (立ち下がり時間 ; fall time ; ミリ秒) である。
- [0098] 比抵抗 (ρ ; 25°Cで測定 ; Ωcm) : 電極を備えた容器に試料1.0 m

Lを注入した。この容器に直流電圧（10V）を印加し、10秒後の直流電流を測定した。比抵抗は次の式から算出した。（比抵抗）＝{（電圧）×（容器の電気容量）} / {（直流電流）×（真空の誘電率）}。

[0099] ガスクロマト分析：測定には島津製作所製のGC-14B型ガスクロマトグラフを用いた。キャリアーガスはヘリウム（2 mL/分）である。試料気化室を280℃に、検出器（FID）を300℃に設定した。成分化合物の分離には、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムDB-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm；固定液相はジメチルポリシロキサン；無極性）を用いた。このカラムは、200℃で2分間保持したあと、5℃/分の割合で280℃まで昇温した。試料はアセトン溶液（0.1重量%）に調製したあと、その1 μLを試料気化室に注入した。記録計は島津製作所製のC-R5A型Chromatopac、またはその同等品である。得られたガスクロマトグラムは、成分化合物に対応するピークの保持時間およびピークの面積を示した。

[0100] 試料を希釈するための溶媒は、クロロホルム、ヘキサンなどを用いてもよい。成分化合物を分離するために、次のキャピラリカラムを用いてもよい。Agilent Technologies Inc.製のHP-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm）、Restek Corporation製のRtx-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm）、SGE International Pty. Ltd製のBP-1（長さ30 m、内径0.32 mm、膜厚0.25 μm）。化合物ピークの重なりを防ぐ目的で島津製作所製のキャピラリカラムCBP1-M50-025（長さ50 m、内径0.25 mm、膜厚0.25 μm）を用いてもよい。

[0101] 組成物に含有される液晶性化合物の割合は、次のような方法で算出してよい。液晶性化合物はガスクロマトグラフで検出することができる。ガスクロマトグラムにおけるピークの面積比は液晶性化合物の割合（モル数）に相当する。上に記載したキャピラリカラムを用いたときは、各々の液晶性化合物の補正係数を1とみなしてよい。したがって、液晶性化合物の割合（重量%

)は、ピークの面積比から算出する。

[0102] 実施例により本発明を詳細に説明する。本発明は下記の実施例によって限定されない。比較例および実施例における化合物は、下記の表3の定義に基づいて記号により表した。

表3において、1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。記号の後にあるかっこ内の番号は化合物の番号に対応する。(一)の記号はその他の液晶性化合物を意味する。液晶性化合物の割合(百分率)は、液晶組成物の全重量に基づいた重量百分率(重量%)であり、液晶組成物には不純物が含まれている。最後に、組成物の特性値をまとめた。

[0103]

表3. 記号を用いた化合物の表記法



1) 左末端基 R-	記号	4) 環構造 -A _n -	記号
$C_nH_{2n+1}-$	n-		H
$C_nH_{2n+1}O-$	nO-		Ch
$C_mH_{2m+1}OC_nH_{2n}-$	mOn-		B
$CH_2=CH-$	V-		B(2F)
$C_nH_{2n+1}-CH=CH-$	nV-		B(2CL)
$CH_2=CH-C_nH_{2n}-$	Vn-		B(F)
$C_mH_{2m+1}-CH=CH-C_nH_{2n}-$	mVn-		B(2F,3F)
$CF_2=CH-$	VFF-		B(2F,3CL)
$CF_2=CH-C_nH_{2n}-$	VFFn-		B(2CL,3F)
2) 右末端基 -R'			
$-C_nH_{2n+1}$	-n		B(3F,6F)
$-OC_nH_{2n+1}$	-On		B(2F,3CL)
$-CH=CH_2$	-V		B(2F,3F,6Me)
$-CH=CH-C_nH_{2n+1}$	-Vn		dh
$-C_nH_{2n}-CH=CH_2$	-nV		Dh
$-CH=CF_2$	-VFF		
$-OC_nH_{2n}-CH=CH_2$	-OnV		
3) 結合基 -Z _n -			
$-OC_nH_{2n}O-$	OnO		
$-C_nH_{2n}-$	n		
$-COO-$	E		
$-CH=CH-$	V		
$-CH_2O-$	1O		
$-OCH_2-$	O1		
$-SiH_2-$	Si		
	Cro(7F,8F)		
5) 表記例			
例1 1-BB-3	例2 3-HHB(2F,3F)-O2		
例3 5-HBB(F)B-3	例4 3-HBB(2F,3F)-O2		

[0104] [比較例 1]

特開 2009-270026 号公報に公開された実施例の中から実施例 7 を選んだ。根拠はこの組成物が、化合物 (1)、化合物 (3)、および化合物 (4) からなる組成物だからである。この組成物の成分および特性は下記のとおりである。

1-BB-5	(1-1)	3%
3-HH-V	(3-1-1)	25%
3-HH-V1	(3-1-1)	7%
V2-BB(F)B-3	(3-6-1)	3%
3-HBBH-5	(3-9-1)	3%
5-HBB(F)B-3	(3-12-1)	6%
V-HB(2F, 3F)-O2	(4-1-1)	10%
V-HB(2F, 3F)-O4	(4-1-1)	10%
5-BB(2F, 3F)-O2	(4-3-1)	5%
3-HBB(2F, 3F)-O2	(4-7-1)	10%
5-HBB(2F, 3F)-O2	(4-7-1)	9%
3-H1OB(2F, 3F)B(2F, 3F)-O4	(-)	3%
5-H1OB(2F, 3F)B(2F, 3F)-O4	(-)	3%
5-HH1OB(2F, 3F)B(2F, 3F)-O4	(-)	3%

$N I = 82.2^{\circ}C$; $T_c \leq -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.113$; $\eta = 25.7 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -2.9$; $V_{th} = 2.31 \text{ V}$.

[0105] [実施例 1]

比較例 1 の組成物において、本願の第一成分から第五成分までに該当しない成分化合物を、化合物 (2-4-1) と置き換えた。本組成物を調合し、上述した方法により測定した。この組成物の成分および特性は下記のとおり

である。実施例 1 は比較例 1 に比べて、粘度が小さく、誘電率異方性の絶対値が大きくなっている。

1-BB-5	(1-1)	3%
3-HH-V	(3-1-1)	25%
3-HH-V1	(3-1-1)	7%
V2-BB(F)B-3	(3-6-1)	3%
3-HBBH-5	(3-9-1)	3%
5-HBB(F)B-3	(3-12-1)	6%
V-HB(2F, 3F)-O2	(4-1-1)	10%
V-HB(2F, 3F)-O4	(4-1-1)	10%
5-BB(2F, 3F)-O2	(4-3-1)	5%
3-HBB(2F, 3F)-O2	(4-7-1)	10%
5-HBB(2F, 3F)-O2	(4-7-1)	9%
3-HDhB(2F, 3F)-O2	(2-4-1)	9%

$n_l = 82.3^\circ\text{C}$; $T_c \leq -20^\circ\text{C}$; $\Delta n = 0.109$; $\eta = 18.8 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \epsilon = -3.1$; $VHR-1 = 98.9\%$; $VHR-2 = 97.8\%$; $VHR-3 = 97.9\%$.

[0106] [比較例 2]

特開 2008-19425 号公報に公開された実施例の中から実施例 5 を選んだ。根拠はこの組成物が、化合物 (1) 類似の化合物、化合物 (3)、および化合物 (4) からなる組成物だからである。この組成物の成分および特性は下記のとおりである。

3-BB-O2	(1) 類似	13%
5-BB-O2	(1) 類似	5%
2-BB(F)B-3	(3-6-1)	5%
5-HBB(F)B-2	(3-12-1)	4%
5-HBB(F)B-3	(3-12-1)	4%
3-H2B(2F, 3F)-O2	(4-2-1)	14%

3-H2B (2F, 3F) -O4	(4-2-1)	7%
5-H2B (2F, 3F) -O2	(4-2-1)	14%
3-HH2B (2F, 3F) -O2	(4-5-1)	10%
4-HH2B (2F, 3F) -O2	(4-5-1)	6%
5-HH2B (2F, 3F) -O2	(4-5-1)	6%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(4-7-1)	8%
5-HBB (2F, 3F) -O2	(4-7-1)	4%

$NI = 83.0^{\circ}\text{C}$; $T_c \leq -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.127$; $\eta = 28.3 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -2.8$; $V_{th} = 2.57 \text{ V}$.

[0107] [比較例3]

特表2008-505235号公報に開示された組成物の中から例M8を選んだ。根拠はこの組成物が、化合物(1)、化合物(3)、および化合物(4)からなる組成物だからである。本組成物を調合し、上述した方法により測定した。この組成物の成分および特性は下記のとおりである。

1-BB-4	(1-1)	7%
3-HH-V1	(3-1-1)	12%
V-HHB-1	(3-4-1)	10%
3-HBB-2	(3-5-1)	10%
3-BB (2F, 3F) -O2	(4-3-1)	19%
5-BB (2F, 3F) -O2	(4-3-1)	17%
2-HBB (2F, 3F) -O2	(4-7-1)	12%
3-HBB (2F, 3F) -O2	(4-7-1)	13%

$NI = 72.3^{\circ}\text{C}$; $T_c \leq -10^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.147$; $\eta = 20.3 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -3.4$.

[0108] [実施例2]

1-BB-1	(1-1)	5%
1-BB-3	(1-1)	5%
3-BB-5	(1-1)	5%

3-DhHB (2F, 3F) -O2	(2-3-1)	3%
V-DhHB (2F, 3F) -O2	(2-3-1)	3%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	7%
V2-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	3%
1V2-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	3%
V-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	4%
3-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	6%
5-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	5%
3-dhBB (2F, 3F) -O2	(2-8-1)	5%
5-DhB (2F, 3F) -O2	(2)	5%
3-HH-V	(3-1-1)	23%
3-HH-V1	(3-1-1)	8%
2-HH-2V1	(3-1-1)	3%
3-HHEBH-3	(3-8-1)	3%
3-HHEBH-5	(3-8-1)	4%

$Nl = 83.8^{\circ}\text{C}$; $T_c \leq -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.096$; $\eta = 19.1 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -3.4$; $VHR-1 = 99.6\%$; $VHR-2 = 98.1\%$; $VHR-3 = 97.9\%$.

[0109] [実施例3]

1-BB-1	(1-1)	3%
1-BB-3	(1-1)	7%
3-DhHB (2F, 3F) -O2	(2-3-1)	5%
2-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	6%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	7%
V-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	3%
3-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	7%
5-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	6%
3-DhB (2F, 3F) -O2	(2)	6%

3-HH-5	(3-1-1)	5%
3-HH-V	(3-1-1)	30%
3-HH-V1	(3-1-1)	6%
3-HHEBH-3	(3-8-1)	6%
3-HHEBH-5	(3-8-1)	3%

$NI = 84.3^{\circ}\text{C}$; $T_c \leq -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.084$; $\eta = 18.4 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -3.4$; $VHR-1 = 99.5\%$; $VHR-2 = 98.3\%$; $VHR-3 = 98.1\%$.

[0110] [実施例4]

1-BB-3	(1-1)	5%
2-BB-3	(1-1)	5%
3-DhHB (2F, 3F) -O2	(2-3-1)	5%
2-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	3%
3-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	7%
V-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	3%
3-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	7%
5-DhH1OB (2F, 3F) -O2	(2-6-1)	6%
5-DhB (2F, 3F) -O2	(2)	9%
3-HH-V	(3-1-1)	30%
3-HH-V1	(3-1-1)	8%
3-HHEH-5	(3-3-1)	3%
3-HHEBH-3	(3-8-1)	6%
3-HHEBH-5	(3-8-1)	3%

$NI = 83.2^{\circ}\text{C}$; $T_c \leq -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.082$; $\eta = 18.9 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -3.5$; $VHR-1 = 99.4\%$; $VHR-2 = 97.8\%$; $VHR-3 = 98.1\%$.

[0111] [実施例5]

1-BB-5	(1-1)	5%
--------	-------	----

3-d h B (2 F, 3 F) - O 2	(2-1-1)	3%
5-D h 2 B (2 F, 3 F) - O 2	(2-2-1)	3%
5-D h H 2 B (2 F, 3 F) - O 2	(2-5-1)	5%
3-HH-5	(3-1-1)	3%
3-HH-O 1	(3-1-1)	3%
3-HH-V 1	(3-1-1)	8%
3-HH-V F F	(3-1)	10%
3-HB-O 1	(3-2-1)	7%
5-HB (F) HH-V	(3-10-1)	3%
5-HB (F) HH-V 1	(3-10-1)	3%
5-HB (F) BH-5	(3-11-1)	5%
3-HB (2 F, 3 F) - O 2	(4-1-1)	8%
3-H 2 B (2 F, 3 F) - O 4	(4-2-1)	8%
3-HHB (2 F, 3 F) - 1	(4-4-1)	5%
3-HH 2 B (2 F, 3 F) - O 2	(4-5-1)	8%
3-HH 1 O B (2 F, 3 F) - O 2	(4-6-1)	5%
5-HH 1 O B (2 F, 3 F) - O 2	(4-6-1)	8%

$N I = 85.3^{\circ}C$; $T_c \leq -20^{\circ}C$; $\Delta n = 0.093$; $\eta = 18.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; $\Delta \varepsilon = -3.4$; $VHR-1 = 99.6\%$; $VHR-2 = 98.1\%$; $VHR-3 = 98.1\%$.

[0112] [実施例6]

1-BB-1	(1-1)	5%
1-BB-5	(1-1)	5%
2-BB-3	(1-1)	5%
3-BB-5	(1-1)	5%
5-D h BB (2 F, 3 F) - O 2	(2-7-1)	3%
5-D h B (2 F, 3 F) - O 2	(2)	3%
3-HH-V	(3-1-1)	6%

3-HH-V1	(3-1-1)	5%
3-HH-VFF	(3-1)	5%
3-HHB-O1	(3-4-1)	3%
3-HBB-2	(3-5-1)	5%
5-B(F)BB-3	(3-7-1)	3%
5-HBB(F)B-3	(3-12-1)	3%
5-BB(2F, 3F)-O2	(4-3-1)	5%
V2-BB(2F, 3F)-O2	(4-3-1)	5%
1V2-BB(2F, 3F)-O2	(4-3-1)	3%
5-HH2B(2F, 3F)-O2	(4-5-1)	5%
3-HH1OB(2F, 3F)-O2	(4-6-1)	7%
5-HH1OB(2F, 3F)-O2	(4-6-1)	8%
5-HBB(2F, 3F)-O2	(4-7-1)	5%
3-HHB(2F, 3CL)-O2	(4-8-1)	3%
2-BB(2F, 3F)B-4	(4-9-1)	3%

$Nl = 83.9^{\circ}\text{C}$; $T_c \leq -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.135$; $\eta = 18.7 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -3.5$; $VHR-1 = 99.1\%$; $VHR-2 = 98.1\%$; $VHR-3 = 98.2\%$.

[0113] [実施例7]

1-BB-3	(1-1)	5%
3-BB-5	(1-1)	5%
3-HDhB(2F, 3F)-O2	(2-4-1)	5%
3-HH-V	(3-1-1)	20%
3-HH-V1	(3-1-1)	7%
1-HH-2V1	(3-1-1)	5%
3-HH-2V1	(3-1-1)	5%
2-BB(F)B-3	(3-6-1)	3%
3-HHEBH-3	(3-8-1)	5%

5-H2B (2F, 3F) -O2	(4-2-1)	10%
5-HHB (2F, 3F) -O2	(4-4-1)	5%
4-HH2B (2F, 3F) -O2	(4-5-1)	5%
5-HH1OB (2F, 3F) -O2	(4-6-1)	8%
5-H2Cro (7F, 8F) -5	(5-1-1)	3%
5-H1OCro (7F, 8F) -5	(5-2-1)	3%
3-HH2Cro (7F, 8F) -5	(5-3-1)	3%
5-HH1OCro (7F, 8F) -5	(5-4-1)	3%

$Nl = 84.0^{\circ}\text{C}$; $T_c \leq -20^{\circ}\text{C}$; $\Delta n = 0.091$; $\eta = 18.5 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; $\Delta \varepsilon = -3.4$; $VHR-1 = 98.8\%$; $VHR-2 = 97.6\%$; $VHR-3 = 97.8\%$.

[0114] [実施例8]

1-BB-1	(1-1)	5%
1-BB-5	(1-1)	5%
3-BB-5	(1-1)	3%
2-HDhB (2F, 3F) -O2	(2-4-1)	5%
3-HH-5	(3-1-1)	5%
3-HH-V	(3-1-1)	11%
3-HH-V1	(3-1-1)	6%
1-HH-2V1	(3-1-1)	5%
3-HHEH-5	(3-3-1)	5%
V-HHB-1	(3-4-1)	6%
3-H2B (2F, 3F) -O4	(4-2-1)	9%
5-H2B (2F, 3F) -O2	(4-2-1)	5%
3-HH2B (2F, 3F) -O2	(4-5-1)	5%
3-HH1OB (2F, 3F) -O2	(4-6-1)	3%
5-HH1OB (2F, 3F) -O2	(4-6-1)	5%
3-HHB (2CL, 3F) -O2	(4)	3%

5-HB10Cro (7F, 8F) -5	(5-5-1)	3%
40-Cro (7F, 8F) H-3	(5)	3%
3-HH10B (2F, 3F, 6Me) -02	(4)	3%
101-HBBH-4	(-)	5%

NI = 83.4°C; T_c ≤ -20°C; Δn = 0.099; η = 18.7 mPa·s; Δε = -3.3; VHR-1 = 98.9%; VHR-2 = 97.7%; VHR-3 = 97.8%.

[0115] [実施例9]

1-BB-3	(1-1)	6%
1-BB-7	(1-1)	3%
2-BB-3	(1-1)	4%
3-BB-5	(1-1)	5%
3-dhBB (2F, 3F) -02	(2-8-1)	4%
5-DhB (2F, 3F) -02	(2)	6%
3-HH-V	(3-1-1)	5%
3-HH-V1	(3-1-1)	5%
3-HH-VFF	(3-1)	5%
V2-BB (F) B-3	(3-6-1)	3%
5-B (F) BB-2	(3-7-1)	5%
3-HHEBH-3	(3-8-1)	3%
5-HBB (F) B-2	(3-12-1)	3%
8-BB (2F, 3F) -02	(4-3-1)	5%
1V2-BB (2F, 3F) -02	(4-3-1)	5%
3-HH2B (2F, 3F) -02	(4-5-1)	5%
3-HH10B (2F, 3F) -02	(4-6-1)	8%
4-HH10B (2F, 3F) -02	(4-6-1)	4%
5-HH10B (2F, 3F) -02	(4-6-1)	8%
V2-HBB (2F, 3F) -02	(4-7-1)	4%

1 V 2 - H B B (2 F , 3 F) - O 2 (4 - 7 - 1) 4 %
N I = 8 6 . 3 ° C ; T c ≤ - 2 0 ° C ; Δ n = 0 . 1 3 1 ; η = 1 8 . 8 m
P a · s ; Δ ε = - 3 . 4 ; V H R - 1 = 9 9 . 1 % ; V H R - 2 = 9 8 .
2 % ; V H R - 3 = 9 7 . 6 % .

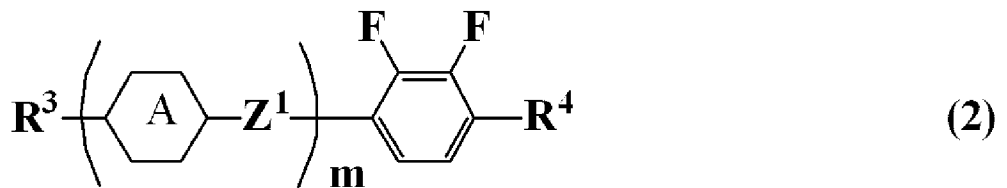
[0116] 実施例 1 から 9 の組成物は、比較例 1 および 2 の組成物に比べて小さな粘度および大きな誘電率異方性の絶対値を有し、比較例 3 の組成物に比べて高い上限温度および小さな粘度を有する。よって、本発明による液晶組成物は、特許文献 1 から 4 に示された液晶組成物よりも、さらに優れた特性を有する。

産業上の利用可能性

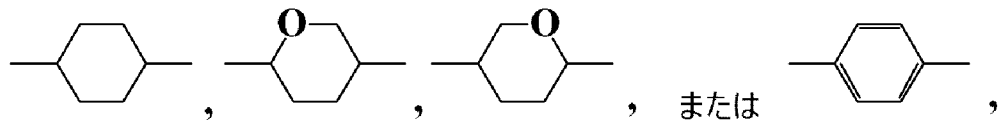
[0117] ネマチック相の高い上限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、紫外線に対する高い安定性、熱に対する高い安定性などの特性において、少なくとも 1 つの特性を充足する、または少なくとも 2 つの特性に関して適切なバランスを有する液晶組成物である。このような組成物を含有する液晶表示素子は、短い応答時間、大きな電圧保持率、大きなコントラスト比、長い寿命などを有する AM 素子となるので、液晶プロジェクター、液晶テレビなどに用いることができる。

請求の範囲

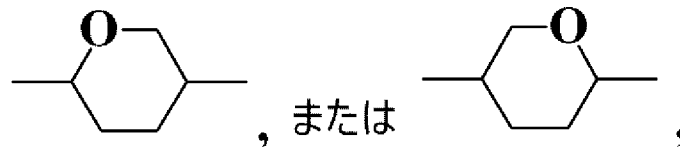
[請求項1] 第一成分として式(1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物、および第二成分として式(2)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有し、そして負の誘電率異方性を有する液晶組成物。



ここで、 R^1 および R^2 は独立して、炭素数1から12のアルキルであり； R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；環Aは独立して、

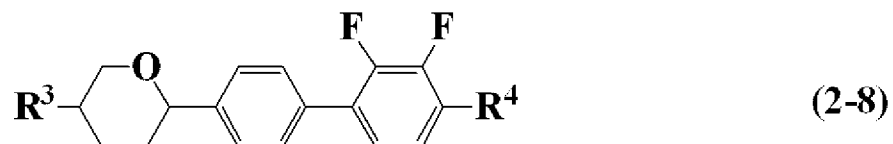
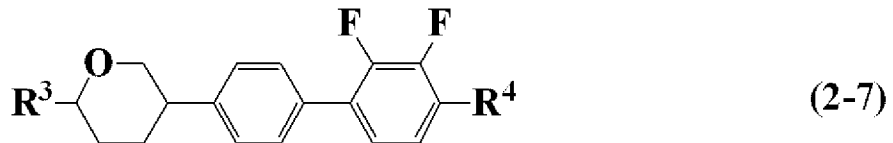
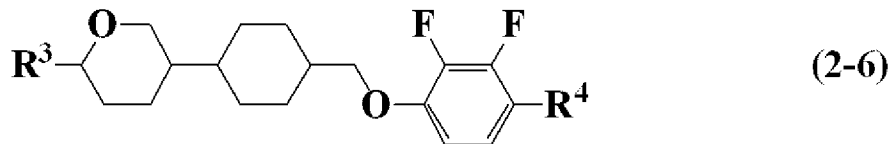
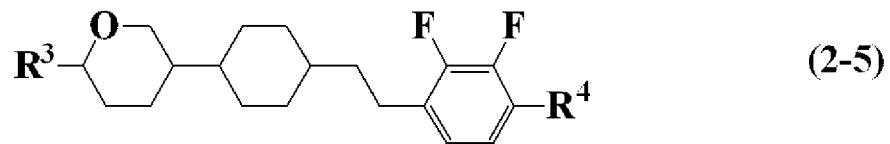
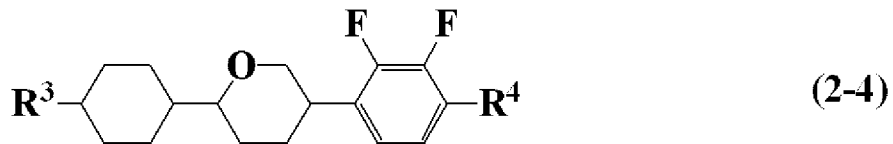
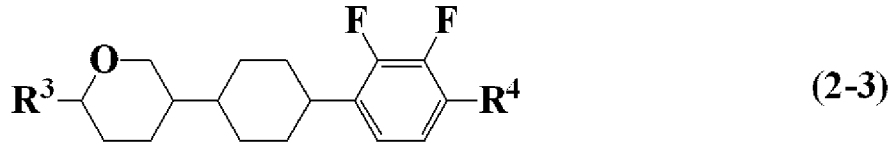
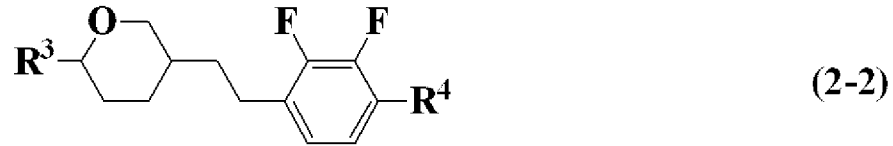


であり、ここで少なくとも一つの環Aは



であり； Z^1 は独立して、単結合、エチレン、またはメチレンオキシであり； m は、1または2である。

[請求項2] 第二成分が式(2-1)から式(2-8)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項1に記載の液晶組成物。



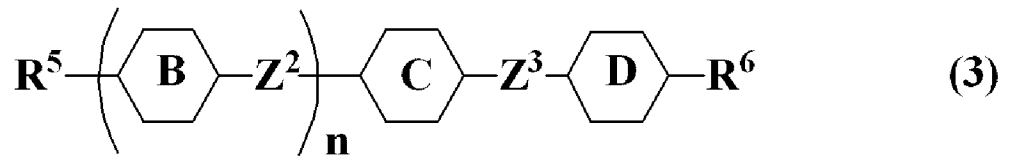
ここで、 R^3 および R^4 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

[請求項3] 第二成分が式(2-4)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項2に記載の液晶組成物。

[請求項4] 第二成分が式(2-8)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項2に記載の液晶組成物。

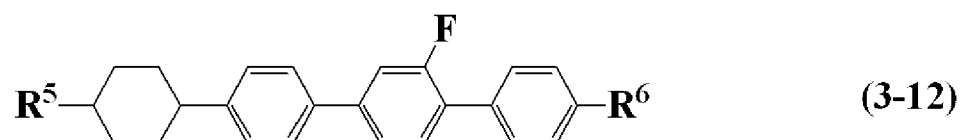
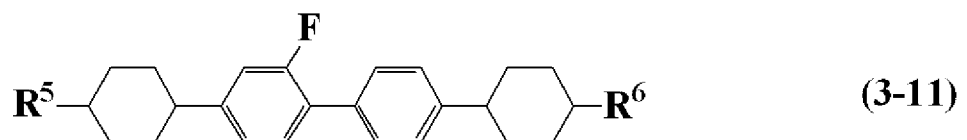
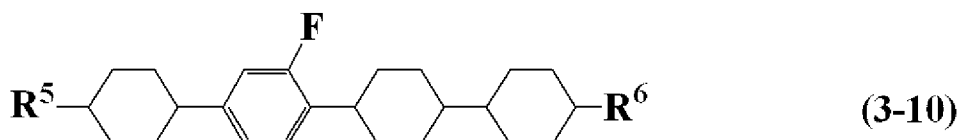
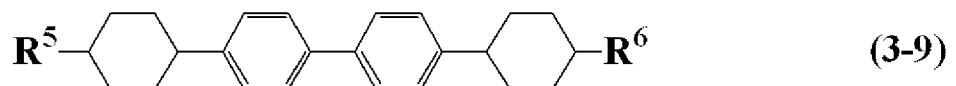
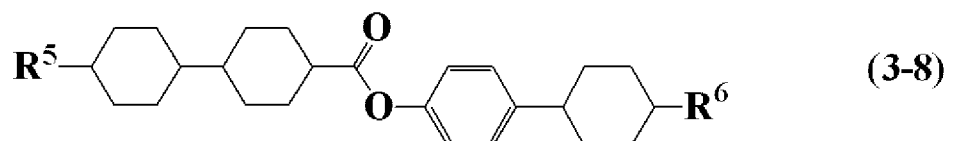
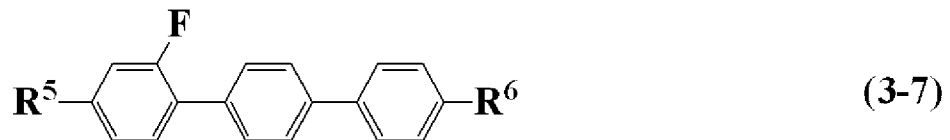
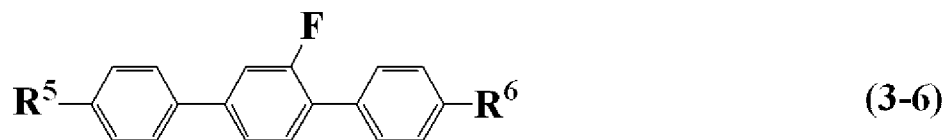
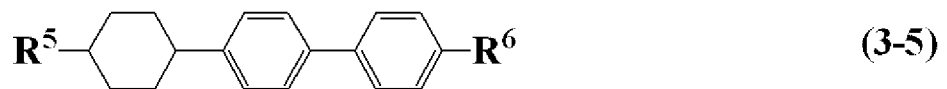
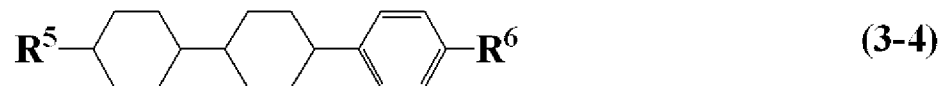
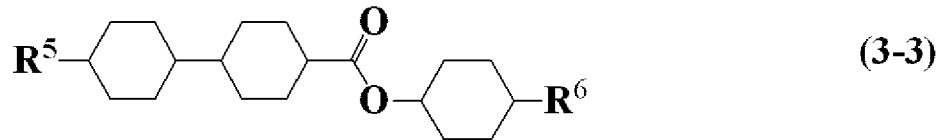
[請求項5] 液晶組成物の全重量に基づいて、第一成分の割合が5重量%から40重量%の範囲であり、そして第二成分の割合が5重量%から95重量%の範囲である請求項1から4のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項6] 第三成分として式(3)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物をさらに含有する、請求項1から5のいずれか1項に記載の液晶組成物。



ここで、 R^5 および R^6 は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、炭素数2から12のアルケニル、または任意の水素がフッ素で置き換えられた炭素数2から12のアルケニルであり；環B、環C、および環Dは独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または3-フルオロ-1,4-フェニレンであり； Z^2 および Z^3 は独立して、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり； n は、0、1、または2であり、そして、 n が0であるとき、環Cおよび環Dのうち少なくとも一方は1,4-シクロヘキシレンである。

[請求項7] 第三成分が式(3-1)から式(3-12)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項6に記載の液晶組成物。



ここで、 R^5 および R^6 は独立して、炭素数1から12のアルキル

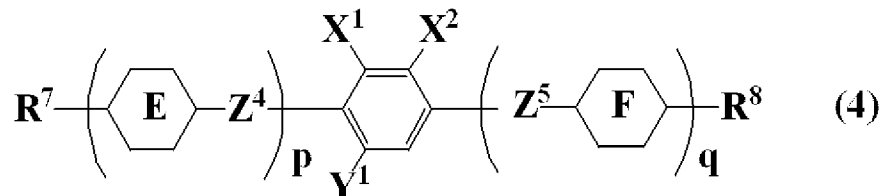
、炭素数 1 から 12 のアルコキシ、炭素数 2 から 12 のアルケニル、または任意の水素がフッ素で置き換えられた炭素数 2 から 12 のアルケニルである。

[請求項8] 第三成分が式 (3-1) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である請求項 7 に記載の液晶組成物。

[請求項9] 第三成分が式 (3-7) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である請求項 7 に記載の液晶組成物。

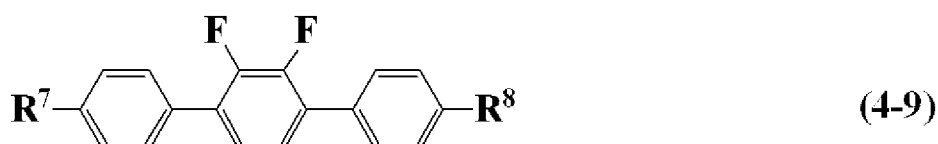
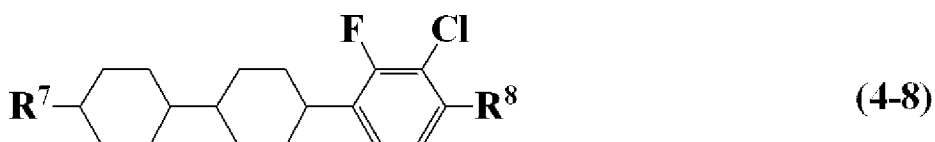
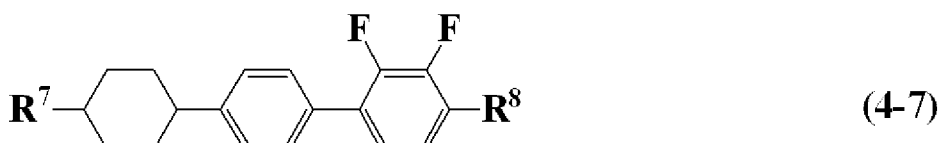
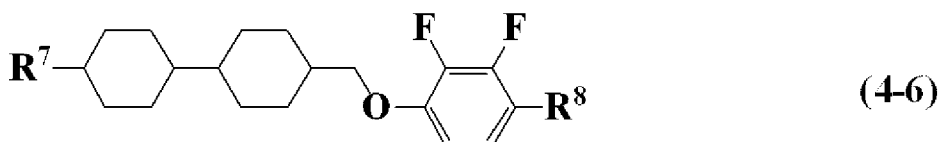
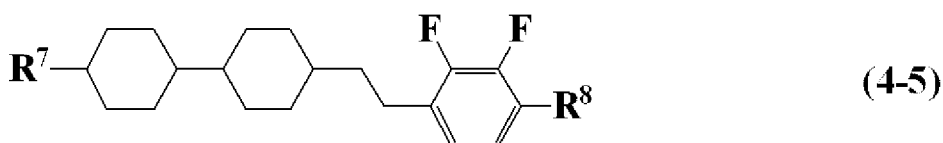
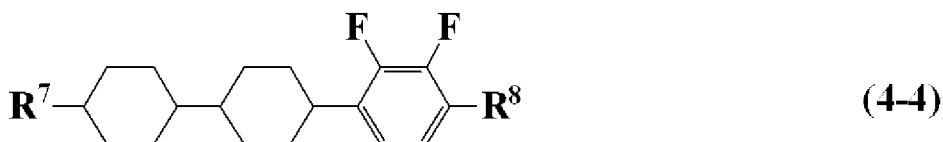
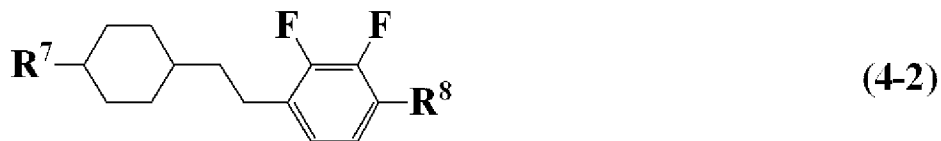
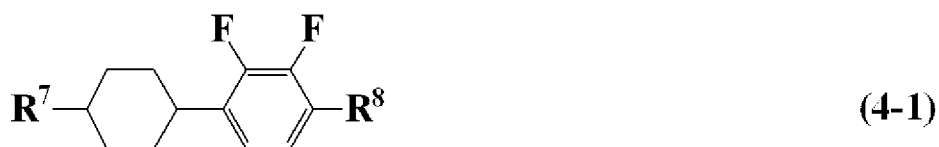
[請求項10] 液晶組成物の全重量に基づいて、第三成分の割合が 10 重量% から 90 重量% の範囲である請求項 6 から 9 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

[請求項11] 第四成分として式 (4) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物をさらに含有する、請求項 1 から 10 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



ここで、 R^7 および R^8 は独立して、炭素数 1 から 12 のアルキル、炭素数 1 から 12 のアルコキシ、または炭素数 2 から 12 のアルケニルであり；環 E および環 F は独立して、1, 4-シクロヘキシレンまたは 1, 4-フェニレンであり； Z^4 および Z^5 は独立して、単結合、エチレン、またはメチレンオキシであり； X^1 および X^2 は独立して、フッ素または塩素であり； Y^1 は、水素またはメチルであり； p は、1、2、または 3 であり、 q は 0 または 1 であり、そして、 p と q との和が、1、2、または 3 である。

[請求項12] 第四成分が式 (4-1) から式 (4-9) で表される化合物の群から選択された少なくとも 1 つの化合物である請求項 11 に記載の液晶組成物。



R⁷およびR⁸は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

[請求項13]

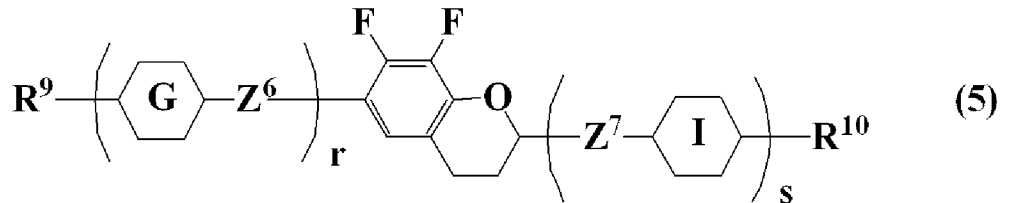
第四成分が式(4-1)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項12に記載の液晶組成物。

[請求項14] 第四成分が式(4-4)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項12に記載の液晶組成物。

[請求項15] 第四成分が式(4-6)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項12に記載の液晶組成物。

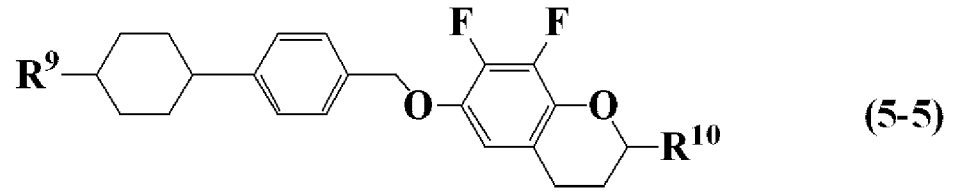
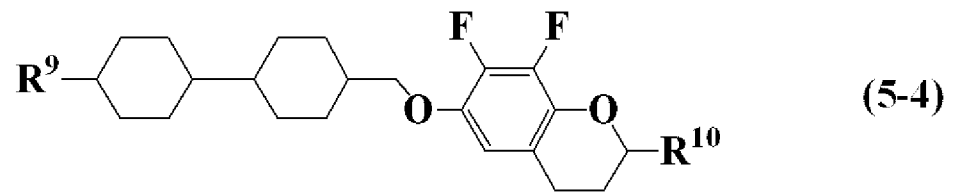
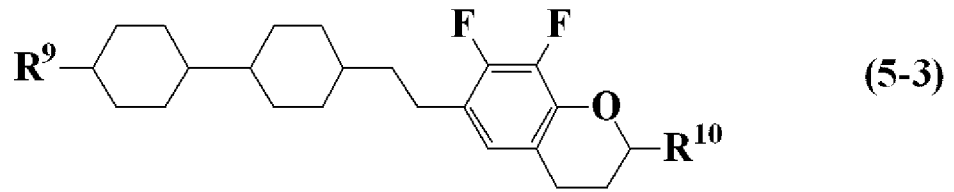
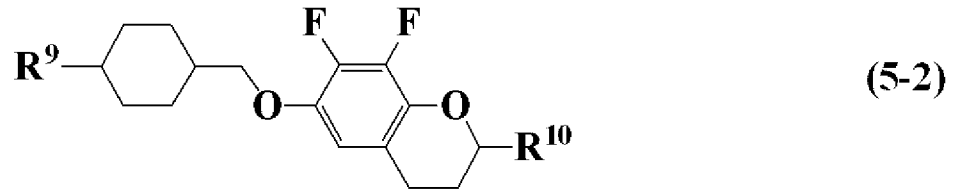
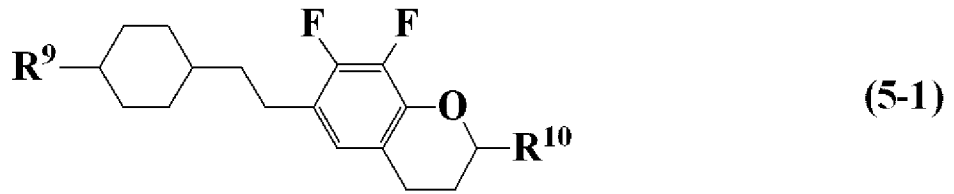
[請求項16] 液晶組成物の全重量に基づいて、第四成分の割合が5重量%から80重量%の範囲である請求項11から15のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項17] 第五成分として式(5)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物をさらに含有する請求項1から16のいずれか1項に記載の液晶組成物。



ここで、 R^9 および R^{10} は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルであり；環Gおよび環Iは独立して、1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり； Z^6 および Z^7 は独立して、単結合、エチレン、メチレンオキシ、またはカルボニルオキシであり； r は、0、1、または2であり、 s は0または1であり、そして、 r と s との和が1または2である。

[請求項18] 第五成分が式(5-1)から式(5-5)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項17に記載の液晶組成物。



ここで、 R^9 および R^{10} は独立して、炭素数1から12のアルキル、炭素数1から12のアルコキシ、または炭素数2から12のアルケニルである。

[請求項19] 第五成分が式(5-4)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物である請求項18に記載の液晶組成物。

[請求項20] 液晶組成物の全重量に基づいて、第五成分の割合が5重量%から40重量%の範囲である請求項17から19のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[請求項21] ネマチック相の上限温度が70℃以上であり、波長589nmにおける光学異方性(25℃)が0.08以上であり、そして周波数1kHzにおける誘電率異方性(25℃)が-2以下である請求項1から20のいずれか1項に記載の液晶組成物。

- [請求項22] 請求項1から21のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。
- [請求項23] 液晶表示素子の動作モードが、VAモード、IPSモード、FFSモード、またはPSAモードであり、液晶表示素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である請求項22に記載の液晶表示素子。
- [請求項24] 請求項22または23のいずれかに記載の液晶表示素子における液晶組成物の使用。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2011/071972

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C09K19/42(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i, G02F1/13(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)

C09K19/42, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/34, G02F1/13

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

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2011
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2011	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2011

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	WO 2008/114821 A1 (Chisso Corp. et al.), 25 September 2008 (25.09.2008), claims; example 12 & CN 101679867 A & EP 2128225 A1 & KR 10-2010-0014471 A & US 2008/0303001 A1	1-24 17-24
X Y	WO 2010/084810 A1 (Chisso Corp. et al.), 29 July 2010 (29.07.2010), claims; examples 5, 8, 9 (Family: none)	1-24 17-24
X Y	WO 2010/029843 A1 (Chisso Corp. et al.), 18 March 2010 (18.03.2010), claims; examples 5, 7, 14, 17 & EP 2325280 A1	1-24 17-24

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

“T” 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
06 December, 2011 (06.12.11)

Date of mailing of the international search report
20 December, 2011 (20.12.11)

Name and mailing address of the ISA/
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2011/071972

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	WO 2008/114779 A1 (Chisso Corp. et al.), 25 September 2008 (25.09.2008), claims; paragraph [0001]; example 11 & CN 101679866 A & EP 2128224 A1 & KR 10-2010-0014430 A & US 2008/0230746 A1	1-16, 21-24 17-24
X Y	WO 2010/016387 A1 (Chisso Corp. et al.), 11 February 2010 (11.02.2010), claims; examples 7, 9, 10 & CN 102105558 A & EP 2308950 A1 & JP 2010-37406 A & JP 2010-37428 A & KR 10-2011-0039440 A & US 2011/0109867 A	1-16, 21-24 17-24
P, X	WO 2011/040170 A1 (Chisso Corp. et al.), 07 April 2011 (07.04.2011), claims; examples 7, 9 (Family: none)	1-24
P, X	JP 2011-89013 A (Chisso Corp. et al.), 06 May 2011 (06.05.2011), claims; example 5 & US 2011/0096285 A1	1-24
P, X	JP 2011-89082 A (Chisso Corp. et al.), 06 May 2011 (06.05.2011), claims; example 6 & US 2011/0097519 A1	1-24
P, X	JP 2011-105927 A (JNC Kabushiki Kaisha et al.), 02 June 2011 (02.06.2011), claims; examples 5, 8 & US 2011/0089373 A1	1-24
E, X	WO 2011/142302 A1 (JNC Kabushiki Kaisha et al.), 17 November 2011 (17.11.2011), claims; paragraph [0001]; example 6 (Family: none)	1-24

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. C09K19/42(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, C09K19/34(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. C09K19/42, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/20, C09K19/30, C09K19/34, G02F1/13

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2011年
日本国実用新案登録公報	1996-2011年
日本国登録実用新案公報	1994-2011年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X Y	WO 2008/114821 A1 (チッソ株式会社 et al.) 2008.09.25, 請求の範囲、実施例 12 & CN 101679867 A & EP 2128225 A1 & KR 10-2010-0014471 A & US 2008/0303001 A1	1-24 17-24
X Y	WO 2010/084810 A1 (チッソ株式会社 et al.) 2010.07.29, 請求の範囲、実施例 5、8、9 (ファミリーなし)	1-24 17-24

C欄の続きにも文献が列挙されている。

パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの
 「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
 「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)
 「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
 「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献
 「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
 「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
 「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
 「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

06.12.2011

国際調査報告の発送日

20.12.2011

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)
 郵便番号 100-8915
 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

江間 正起

電話番号 03-3581-1101 内線 3483

4V

4048

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X Y	WO 2010/029843 A1 (チッソ株式会社 et al.) 2010.03.18, 請求の範囲、実施例 5、7、14、17 & EP 2325280 A1	1-24 17-24
X Y	WO 2008/114779 A1 (チッソ株式会社 et al.) 2008.09.25, 請求の範囲、段落[0001]、実施例 11 & CN 101679866 A & EP 2128224 A1 & KR 10-2010-0014430 A & US 2008/0230746 A1	1-16, 21-24 17-24
X Y	WO 2010/016387 A1 (チッソ株式会社 et al.) 2010.02.11, 請求の範囲、実施例 7、9、10 & CN 102105558 A & EP 2308950 A1 & JP 2010-37406 A & JP 2010-37428 A & KR 10-2011-0039440 A & US 2011/0109867 A	1-16, 21-24 17-24
P, X	WO 2011/040170 A1 (チッソ株式会社 et al.) 2011.04.07, 請求の範囲、実施例 7、9 (ファミリーなし)	1-24
P, X	JP 2011-89013 A (チッソ株式会社 et al.) 2011.05.06, 特許請求の範囲、実施例 5 & US 2011/0096285 A1	1-24
P, X	JP 2011-89082 A (チッソ株式会社 et al.) 2011.05.06, 特許請求の範囲、実施例 6 & US 2011/0097519 A1	1-24
P, X	JP 2011-105927 A (JNC株式会社 et al.) 2011.06.02, 特許請求の範囲、実施例 5、8 & US 2011/0089373 A1	1-24
E, X	WO 2011/142302 A1 (JNC株式会社 et al.) 2011.11.17, 請求の範囲、段落[0001]、実施例 6 (ファミリーなし)	1-24