

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2017-19767

(P2017-19767A)

(43) 公開日 平成29年1月26日 (2017.1.26)

|                                       |                  |             |
|---------------------------------------|------------------|-------------|
| (51) Int.Cl.                          | F I              | テーマコード (参考) |
| <b>C07C 22/08 (2006.01)</b>           | C07C 22/08 C S P | 2 H 2 9 0   |
| <b>C07C 43/225 (2006.01)</b>          | C07C 43/225 C    | 4 H 0 0 6   |
| <b>C09K 19/06 (2006.01)</b>           | C09K 19/06       | 4 H 0 2 7   |
| <b>C09K 19/30 (2006.01)</b>           | C09K 19/30       |             |
| <b>C09K 19/12 (2006.01)</b>           | C09K 19/12       |             |
| 審査請求 未請求 請求項の数 13 O L (全 69 頁) 最終頁に続く |                  |             |

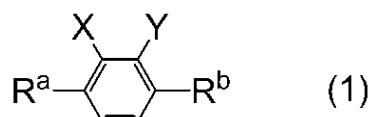
|              |                              |           |                                |
|--------------|------------------------------|-----------|--------------------------------|
| (21) 出願番号    | 特願2016-118985 (P2016-118985) | (71) 出願人  | 311002067                      |
| (22) 出願日     | 平成28年6月15日 (2016. 6. 15)     |           | J N C株式会社                      |
| (31) 優先権主張番号 | 特願2015-135918 (P2015-135918) |           | 東京都千代田区大手町二丁目2番1号              |
| (32) 優先日     | 平成27年7月7日 (2015. 7. 7)       | (71) 出願人  | 596032100                      |
| (33) 優先権主張国  | 日本国 (JP)                     |           | J N C石油化学株式会社                  |
|              |                              |           | 東京都千代田区大手町二丁目2番1号              |
|              |                              | (72) 発明者  | 笹田 康幸                          |
|              |                              |           | 千葉県市原市五井海岸5番地の1 J N C          |
|              |                              |           | 石油化学株式会社 市原研究所内                |
|              |                              | Fターム (参考) | 2H290 AA15 AA18 AA33 AA53 AA72 |
|              |                              |           | BD04 BF52 DA01 DA03            |
|              |                              |           | 4H006 AA01 AA03 AB64 EA21 GP03 |
|              |                              |           | GP20 GP22                      |
|              |                              |           | 最終頁に続く                         |

(54) 【発明の名称】 液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】熱や光に対する高い安定性、高い透明点、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな負の誘電率異方性、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性などの物性の少なくとも1つを充足する液晶性化合物、前記化合物を含有する液晶組成物、及び前記組成物を含む液晶表示素子の提供。

【解決手段】式(1)で表される化合物、前記化合物を含有する液晶組成物、及び前記組成物を含む液晶表示素子。



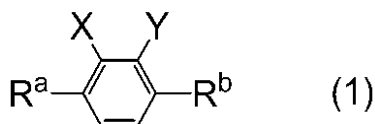
(R<sup>a</sup>及びR<sup>b</sup>は各々独立に、主鎖がO、S、CO又はSiH<sub>2</sub>で置換/非置換及びCH=CH又はC≡Cで置換/非置換のC1~30のアルキル; X及びYは各々独立にC1~5のフルオロアルキル、C1~5のフルオロアルコキシ又はペンタフルオロスルファニルで、但し、X及びYの一方はFであってもよい)

【選択図】 なし

## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

式 (1) で表される化合物。



式 (1) において、

$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数 1 から 30 のアルキルであり、これらの基において、少なくとも 1 つの  $-CH_2-$  は  $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または  $-SiH_2-$  で置き換えられてもよく、少なくとも 1 つの  $-CH_2CH_2-$  は  $-CH=CH-$  または  $-C\equiv C-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも 1 つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

$X$  および  $Y$  は独立して、炭素数 1 から 5 のフルオロアルキル、炭素数 1 から 5 のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニルであり、そして  $X$  および  $Y$  の一方はフッ素であってもよい。

## 【請求項 2】

式 (1) において、

$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数 1 から 20 のアルキルであり、これらの基において、少なくとも 1 つの  $-CH_2-$  は  $-O-$  または  $-S-$  で置き換えられてもよく、1 つまたは 2 つの  $-CH_2CH_2-$  は  $-CH=CH-$  または  $-C\equiv C-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも 1 つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

$X$  および  $Y$  は独立して、炭素数 1 から 3 のフルオロアルキル、炭素数 1 から 3 のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニルであり、そして  $X$  および  $Y$  の一方はフッ素であってもよい、請求項 1 に記載の化合物。

## 【請求項 3】

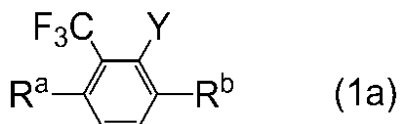
式 (1) において、

$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数 1 から 15 のアルキルであり、これらの基において、少なくとも 1 つまたは 2 つの  $-CH_2-$  は  $-O-$  で置き換えられてもよく、1 つの  $-CH_2CH_2-$  は  $-CH=CH-$  または  $-C\equiv C-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも 1 つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

$X$  は、フッ素、炭素数 1 から 3 のフルオロアルキル、炭素数 1 から 3 のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニルであり、 $Y$  は、炭素数 1 から 3 のフルオロアルキルである、請求項 1 に記載の化合物。

## 【請求項 4】

式 (1a) で表される、請求項 1 に記載の化合物。



式 (1a) において、

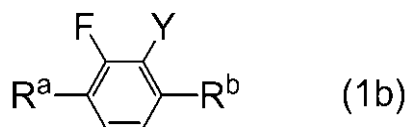
$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数 1 から 10 のアルキルまたは炭素数 1 から 10 のアルコキシであり； $Y$  は  $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、またはフッ素である。

## 【請求項 5】

式 (1a) において、 $R^a$  が炭素数 1 から 10 のアルキルであり、 $R^b$  が炭素数 1 から 10 のアルコキシであり； $Y$  が  $-CF_3$  である、請求項 4 に記載の化合物。

## 【請求項 6】

式(1b)で表される、請求項1に記載の化合物。



式(1b)において、

$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数1から10のアルコキシであり； $Y$  は  $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、または  $-CFH_2$  である。

【請求項7】

10

式(1b)において、

$R^a$  および  $R^b$  が炭素数1から10のアルコキシであり； $Y$  が  $-CF_3$  である、請求項6に記載の化合物。

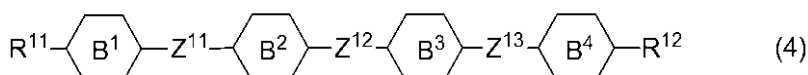
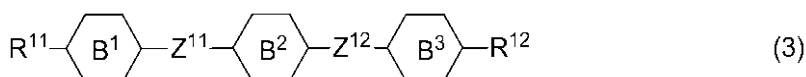
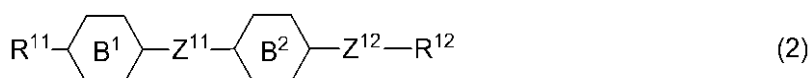
【請求項8】

請求項1から7のいずれか1項に記載の化合物の少なくとも1つを含有する液晶組成物。

【請求項9】

式(2)から(4)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、請求項8に記載の液晶組成物。

20



30

式(2)から(4)において、

$R^{11}$  および  $R^{12}$  は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの  $-CH_2-$  は  $-O-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

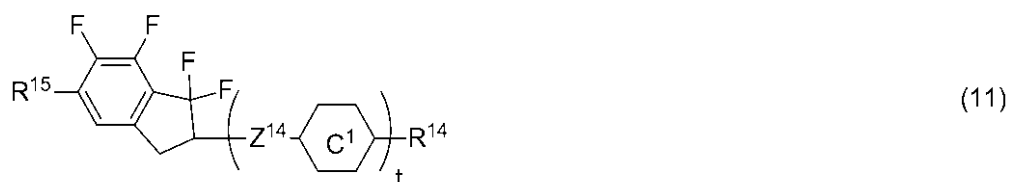
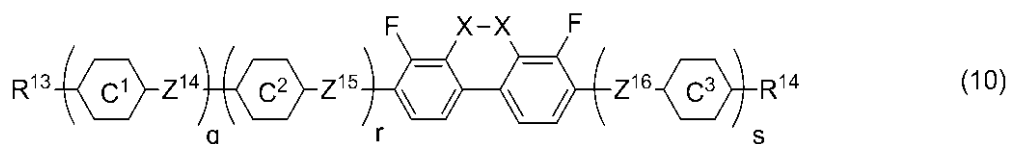
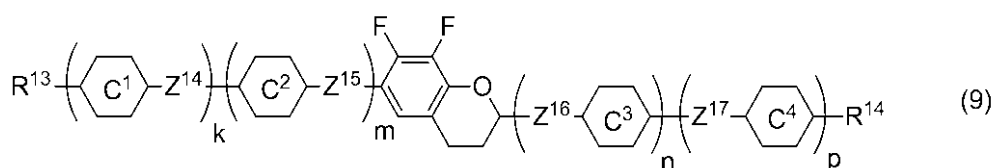
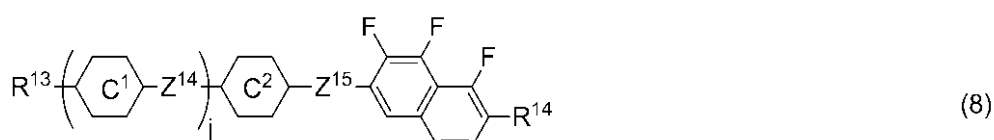
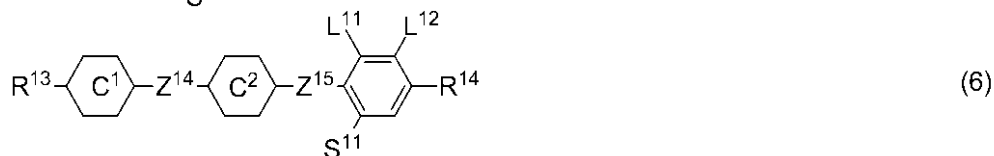
環  $B^1$ 、環  $B^2$ 、環  $B^3$ 、および環  $B^4$  は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

$Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 、および  $Z^{13}$  は独立して、単結合、 $-COO-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、または  $-C\equiv C-$  である。

40

【請求項10】

式(5)から(11)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8または9に記載の液晶組成物。



式(5)から(11)において、

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく、そして $R^{15}$ は、水素またはフッ素であってもよく；

環 $C^1$ 、環 $C^2$ 、環 $C^3$ 、および環 $C^4$ は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2,6-ジイルであり；

環 $C^5$ および環 $C^6$ は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2,6-ジイルであり；

$Z^{14}$ 、 $Z^{15}$ 、 $Z^{16}$ 、および $Z^{17}$ は独立して、単結合、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、または $-OCF_2CH_2CH_2-$ であり；

$L^{11}$ および $L^{12}$ は独立して、フッ素または塩素であり；

$S^{11}$ は、水素またはメチルであり；

$X$ は、 $-CHF-$ または $-CF_2-$ であり；

$j$ 、 $k$ 、 $m$ 、 $n$ 、 $p$ 、 $q$ 、 $r$ 、および $s$ は独立して、0または1であり、 $k$ 、 $m$ 、 $n$ 、および $p$ の和は、1または2であり、 $q$ 、 $r$ 、および $s$ の和は、0、1、2、または3で

10

20

30

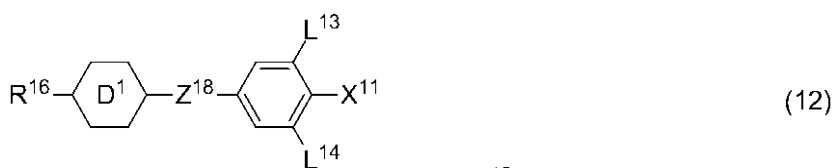
40

50

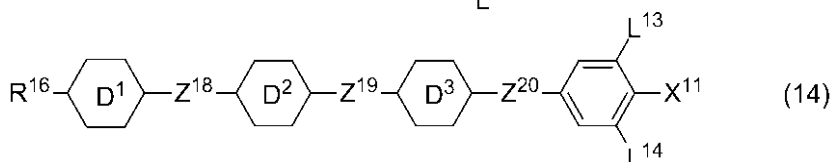
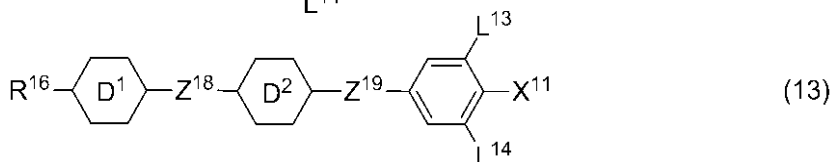
あり、 $t$  は、1、2、または3である。

【請求項11】

式(12)から(14)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8から10のいずれか1項に記載の液晶組成物。



10



式(12)から(14)において、

20

$\text{R}^{16}$  は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

$\text{X}^{11}$  は、フッ素、塩素、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、または $-\text{OCF}_2\text{CHFCF}_3$ であり；

環 $\text{D}^1$ 、環 $\text{D}^2$ 、および環 $\text{D}^3$ は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキササン-2,5-ジイル、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

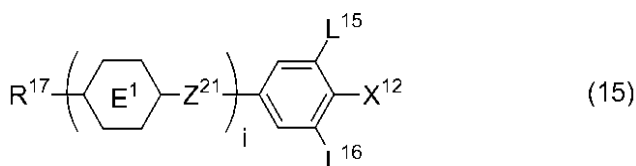
$\text{Z}^{18}$ 、 $\text{Z}^{19}$ 、および $\text{Z}^{20}$ は独立して、単結合、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、または $-(\text{CH}_2)_4-$ であり；

30

$\text{L}^{13}$  および  $\text{L}^{14}$  は独立して、水素またはフッ素である。

【請求項12】

式(15)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8から11のいずれか1項に記載の液晶組成物。



40

式(15)において、

$\text{R}^{17}$  は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

$\text{X}^{12}$  は $-\text{C}\equiv\text{N}$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$ であり；

環 $\text{E}^1$ は、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキササン-2,5-ジイル、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

50

$Z^{21}$  は、単結合、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、または  $-C\equiv C-$  であり；

$L^{15}$  および  $L^{16}$  は独立して、水素またはフッ素であり；

$i$  は、1、2、3、または4である。

【請求項13】

請求項8から12のいずれか1項に記載の液晶組成物を含む液晶表示素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子に関する。さらに詳しくは、1つのフェニレン環を有し、誘電率異方性が負の液晶性化合物、この化合物を含有する液晶組成物、およびこの組成物を含む液晶表示素子に関する。

10

【0002】

液晶表示素子は、パソコン、テレビなどのディスプレイに広く利用されている。この素子は、液晶性化合物の光学異方性、誘電率異方性などの物性を利用したものである。液晶表示素子の動作モードとしては、PC (phase change)、TN (twisted nematic)、STN (super twisted nematic)、BTN (bistable 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) などのモードがある。PSAモードの素子では、重合体を含有する液晶組成物が用いられる。この組成物では、重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になる。

20

【0003】

このような液晶表示素子では、適切な物性を有する液晶組成物が使われている。素子の特性をさらに向上させるには、この組成物に含まれる液晶性化合物が、次の(1)から(8)で示す物性を有するのが好ましい。(1)熱や光に対する高い安定性、(2)高い透明点、(3)液晶相の低い下限温度、(4)小さな粘度( $\eta$ )、(5)適切な光学異方性( $\Delta n$ )、(6)負に大きな誘電率異方性( $\Delta \epsilon$ )、(7)適切な弾性定数、(8)他の液晶性化合物との優れた相溶性。

【0004】

液晶性化合物の物性が素子の特性に及ぼす効果は、次のとおりである。(1)のように、熱や光に対する高い安定性を有する化合物は、素子の電圧保持率を上げる。これによって、素子の寿命が長くなる。(2)のように、高い透明点を有する化合物は、素子の使用可能な温度範囲を広げる。(3)のように、ネマチック相、スメクチック相などのような液晶相の低い下限温度、特にネマチック相の低い下限温度を有する化合物も、素子の使用可能な温度範囲を広げる。(4)のように、粘度の小さな化合物は、素子の応答時間を短くする。

30

【0005】

素子の設計に応じて、(5)のように適切な光学異方性、すなわち大きな光学異方性または小さな光学異方性、を有する化合物が必要である。素子のセルギャップを小さくすることにより応答時間を短くする場合には、大きな光学異方性を有する化合物が適している。(6)のように正または負に大きな誘電率異方性を有する化合物は、素子のしきい値電圧を下げる。これによって、素子の消費電力が小さくなる。一方、小さな誘電率異方性を有する化合物は、組成物の粘度を下げることによって、素子の応答時間を短くする。この化合物は、ネマチック相の上限温度を上げることによって素子の使用可能な温度範囲を広げる。

40

【0006】

(7)に関しては、大きな弾性定数を有する化合物は、素子の応答時間を短くする。小さな弾性定数を有する化合物は、素子のしきい値電圧を下げる。したがって、向上させたい特性に応じて適切な弾性定数が必要になる。(8)のように他の液晶性化合物との優れ

50

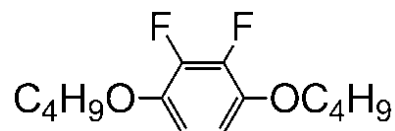
た相溶性を有する化合物が好ましい。これは、異なった物性を有する液晶性化合物を混合して、組成物の物性を調節するからである。

【0007】

これまでに、負に大きな誘電率異方性を有する液晶性化合物が種々合成されてきた。大きな光学異方性を有する液晶性化合物も種々合成されてきた。新規な化合物には、従来の化合物にはない優れた物性が期待されるからである。新規な化合物を液晶組成物に添加することによって、組成物において少なくとも2つの物性の間で適切なバランスが得られると期待されるからである。このような状況から、上記の物性(1)から(8)に関して優れた物性と適切なバランスを有する化合物が望まれている。

【0008】

特許文献1の実施例1には、下記の化合物が記載されている。



【先行技術文献】

【特許文献】

【0009】

【特許文献1】国際公開第2011/098224号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

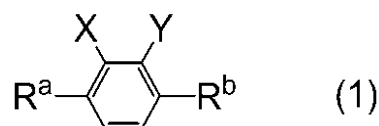
【0010】

第一の課題は、熱や光に対する高い安定性、高い透明点（またはネマチック相の高い上限温度）、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性などの物性の少なくとも1つを充足する液晶性化合物を提供することである。類似の化合物と比較して、大きな誘電率異方性を有する化合物を提供することである。第二の課題は、この化合物を含有し、熱や光に対する高い安定性、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、適切な弾性定数などの物性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を提供することである。この課題は、少なくとも2つの物性に関して適切なバランスを有する液晶組成物を提供することである。第三の課題は、この組成物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、および長い寿命を有する液晶表示素子を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0011】

本発明は、式(1)で表される化合物、この化合物を含有する液晶組成物、この組成物を含む液晶表示素子に関する。



式(1)において、

$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数1から30のアルキルであり、これらの基において、少なくとも1つの  $-CH_2-$  は  $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または  $-SiH_2-$  で置き換えられてもよく、少なくとも1つの  $-CH_2CH_2-$  は  $-CH=CH-$  または  $-C\equiv C-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

XおよびYは独立して、炭素数1から5のフルオロアルキル、炭素数1から5のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニルであり、そしてXおよびYの一方はフッ素であってもよい。

【発明の効果】

【0012】

第一の長所は、熱や光に対する高い安定性、高い透明点（またはネマチック相の高い上限温度）、液晶相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、負に大きな誘電率異方性、適切な弾性定数、他の液晶性化合物との優れた相溶性などの物性の少なくとも1つを充足する液晶性化合物を提供することである。類似の化合物と比較して、大きな誘電率異方性を有する化合物を提供することである（比較例1の表1を参照のこと）。第二の長所は、この化合物を含有し、熱や光に対する高い安定性、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、適切な弾性定数などの物性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を提供することである。この長所は、少なくとも2つの物性に関して適切なバランスを有する液晶組成物を提供することである。第三の長所は、この組成物を含み、素子を使用できる広い温度範囲、短い応答時間、大きな電圧保持率、低いしきい値電圧、大きなコントラスト比、および長い寿命を有する液晶表示素子を提供することである。

【発明を実施するための形態】

【0013】

この明細書における用語の使い方は、次のとおりである。「液晶性化合物」、「液晶組成物」、および「液晶表示素子」の用語をそれぞれ「化合物」、「組成物」、および「素子」と略すことがある。「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、および液晶相を有しないが、上限温度、下限温度、粘度、誘電率異方性のような、組成物の物性を調節する目的で添加する化合物の総称である。この化合物は、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。「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。「重合性化合物」は、組成物中に重合体を生成させる目的で添加する化合物である。

【0014】

液晶組成物は、複数の液晶性化合物を混合することによって調製される。この組成物に、物性をさらに調整する目的で添加物が添加される。光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、色素、消泡剤、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤のような添加物が必要に応じて添加される。液晶性化合物や添加物は、このような手順で混合される。液晶性化合物の割合（含有量）は、添加物を添加した場合であっても、添加物を含まない液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量%）で表される。添加物の割合（添加量）は、添加物を含まない液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量%）で表される。重量百万分率（ppm）が用いられることもある。重合開始剤および重合禁止剤の割合は、例外的に重合性化合物の重量に基づいて表される。

【0015】

「透明点」は、液晶性化合物における液晶相－等方相の転移温度である。「液晶相の下限温度」は、液晶性化合物における固体－液晶相（スメクチック相、ネマチック相など）の転移温度である。「ネマチック相の上限温度」は、液晶性化合物と母液晶との混合物または液晶組成物におけるネマチック相－等方相の転移温度であり、「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。「誘電率異方性を大きくする」の表現は、誘電率異方性が正である組成物のときは、その値が正に増加することを意味し、誘電率異方性が負である組成物のときは、その値が負に増加することを意味する。

【0016】

式（1）で表される化合物を化合物（1）と略すことがある。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、2つの化合物の混合物、または3つ以上の化合物の混合物を意味する。これらのルールは、他の式で表される化合物についても適用される。式(1)から(15)において、六角形で囲んだ $A^1$ 、 $B^1$ 、 $C^1$ などの記号はそれぞれ環 $A^1$ 、環 $B^1$ 、環 $C^1$ などの環に対応する。六角形は、シクロヘキサンやベンゼンのような六員環を表す。六角形がナフタレンのような縮合環や、アダマンタンのような架橋環を表すことがある。

#### 【0017】

化学式において、末端基 $R^{11}$ の記号を複数の化合物に用いた。これらの化合物において、任意の2つの $R^{11}$ が表す2つの基は同一であってもよく、または異なってもよい。例えば、化合物(2)の $R^{11}$ がエチルであり、化合物(3)の $R^{11}$ がエチルであるケースがある。化合物(2)の $R^{11}$ がエチルであり、化合物(3)の $R^{11}$ がプロピルであるケースもある。このルールは、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $Z^{11}$ などの記号にも適用される。化合物(15)において、 $i$ が2のとき、2つの環 $E^1$ が存在する。この化合物において2つの環 $E^1$ が表す2つの基は、同一であってもよく、または異なってもよい。 $i$ が2より大きいとき、任意の2つの環 $E^1$ にも適用される。このルールは、他の記号にも適用される。

10

#### 【0018】

「少なくとも1つの‘A’」の表現は、‘A’の数が任意であることを意味する。「少なくとも1つの‘A’は、‘B’で置き換えられてもよい」の表現は、‘A’の数が1つのとき、‘A’の位置は任意であり、‘A’の数が2つ以上のときも、それらの位置は制限なく選択できることを意味する。このルールは、「少なくとも1つの‘A’が、‘B’で置き換えられた」の表現にも適用される。「少なくとも1つの‘A’が、‘B’、‘C’、または‘D’で置き換えられてもよい」という表現は、任意の‘A’が‘B’で置き換えられた場合、任意の‘A’が‘C’で置き換えられた場合、および任意の‘A’が‘D’で置き換えられた場合、さらに複数の‘A’が‘B’、‘C’、および／または‘D’の少なくとも2つで置き換えられた場合を含むことを意味する。例えば、「少なくとも1つの $-CH_2-$ が $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよいアルキル」には、アルキル、アルコキシ、アルコシアルキル、アルケニル、アルコシアルケニル、アルケニルオシアルキルが含まれる。なお、連続する2つの $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられて、 $-O-O-$ のようになることは好ましくない。アルキルなどにおいて、メチル部分( $-CH_2-H$ )の $-CH_2-$ が $-O-$ で置き換えられて $-O-H$ になることも好ましくない。

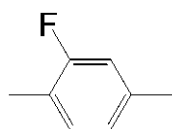
20

30

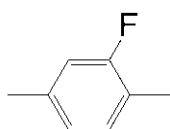
#### 【0019】

「ハロゲン」はフッ素、塩素、臭素、およびヨウ素を意味する。好ましいハロゲンは、フッ素および塩素である。さらに好ましいハロゲンはフッ素である。アルキルは、直鎖状または分岐状であり、環状アルキルを含まない。直鎖状アルキルは、一般的に分岐状アルキルよりも好ましい。これらのことは、アルコキシ、アルケニルなどの末端基についても同様である。「フルオロアルキル」は、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられたアルキルを意味する。このフルオロアルキルは、モノフルオロアルキル、ポリフルオロアルキル、およびペルフルオロアルキルの総称である。このルールは、フルオロアルコキシなどにも適用される。1,4-シクロヘキシレンに関する立体配置は、一般的にシスよりもトランスが好ましい。2-フルオロ-1,4-フェニレンは、下記の2つの二価基を意味する。化学式において、フッ素は左向き(L)であってもよいし、右向き(R)であってもよい。このルールは、テトラヒドロピラン-2,5-ジイルのような、環から水素を2つ除くことによって誘導された非対称な二価基にも適用される。

40



(L)



(R)

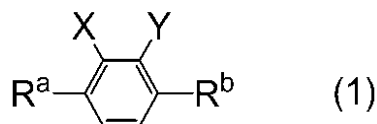
## 【0020】

本発明は、下記の項などである。

## 【0021】

項1. 式(1)で表される化合物。

10



(1)

式(1)において、

$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数1から30のアルキルであり、これらの基において、少なくとも1つの  $-CH_2-$  は  $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または  $-SiH_2-$  で置き換えられてもよく、少なくとも1つの  $-CH_2CH_2-$  は  $-CH=CH-$  または  $-C\equiv C-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

20

$X$  および  $Y$  は独立して、炭素数1から5のフルオロアルキル、炭素数1から5のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニルであり、そして  $X$  および  $Y$  の一方はフッ素であってもよい。

## 【0022】

項2. 式(1)において、

$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数1から20のアルキルであり、これらの基において、少なくとも1つの  $-CH_2-$  は  $-O-$  または  $-S-$  で置き換えられてもよく、1つまたは2つの  $-CH_2CH_2-$  は  $-CH=CH-$  または  $-C\equiv C-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく；

30

$X$  および  $Y$  は独立して、炭素数1から3のフルオロアルキル、炭素数1から3のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニルであり、そして  $X$  および  $Y$  の一方はフッ素であってもよい、項1に記載の化合物。

## 【0023】

項3. 式(1)において、

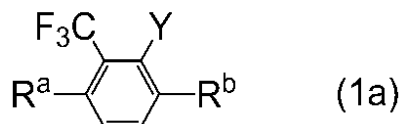
$R^a$  および  $R^b$  は独立して、炭素数1から15のアルキルであり、これらの基において、少なくとも1つまたは2つの  $-CH_2-$  は  $-O-$  で置き換えられてもよく、1つの  $-CH_2CH_2-$  は  $-CH=CH-$  または  $-C\equiv C-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

40

$X$  は、フッ素、炭素数1から3のフルオロアルキル、炭素数1から3のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニルであり、 $Y$  は、炭素数1から3のフルオロアルキルである、項1に記載の化合物。

## 【0024】

項4. 式(1a)で表される、項1に記載の化合物。



(1a)

50

式(1a)において、

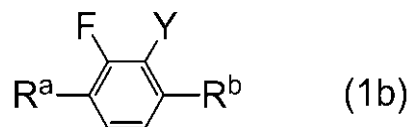
R<sup>a</sup>およびR<sup>b</sup>は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数1から10のアルコキシであり；Yは-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、またはフッ素である。

【0025】

項5. 式(1a)において、R<sup>a</sup>が炭素数1から10のアルキルであり、R<sup>b</sup>が炭素数1から10のアルコキシであり；Yが-CF<sub>3</sub>である、項4に記載の化合物。

【0026】

項6. 式(1b)で表される、項1に記載の化合物。



10

式(1b)において、

R<sup>a</sup>およびR<sup>b</sup>は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数1から10のアルコキシであり；Yは-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、または-CFH<sub>2</sub>である。

【0027】

項7. 式(1b)において、

R<sup>a</sup>およびR<sup>b</sup>が炭素数1から10のアルコキシであり；Yが-CF<sub>3</sub>である、項6に記載の化合物。

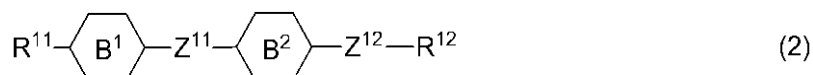
20

【0028】

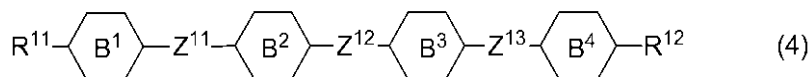
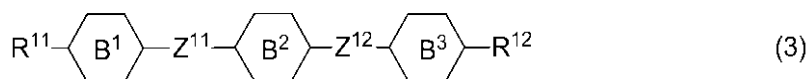
項8. 項1から7のいずれか1項に記載の化合物の少なくとも1つを含有する液晶組成物。

【0029】

項9. 式(2)から(4)で表される化合物の群から選択された少なくとも1つの化合物を含有する、項8に記載の液晶組成物。



30



式(2)から(4)において、

R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの-CH<sub>2</sub>-は-O-で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

40

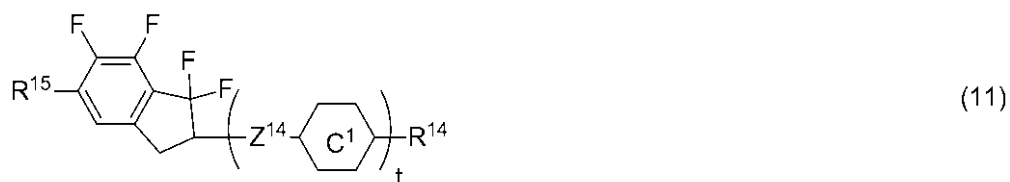
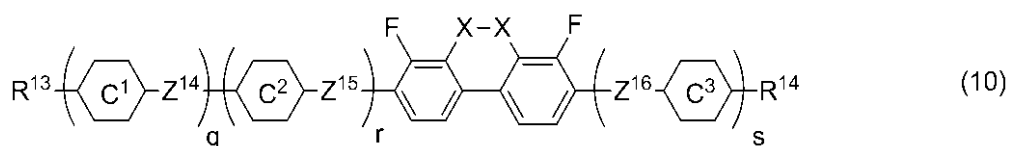
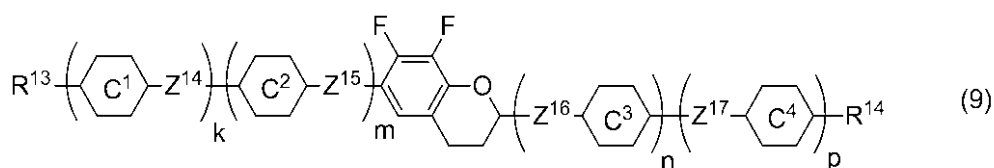
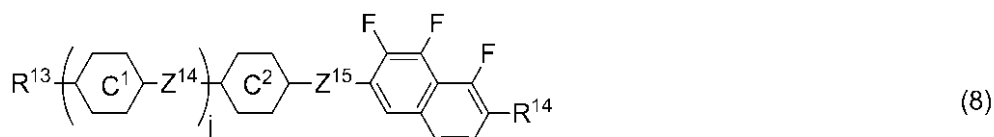
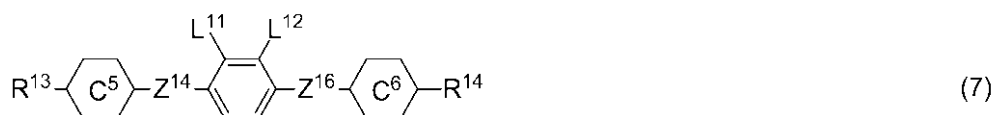
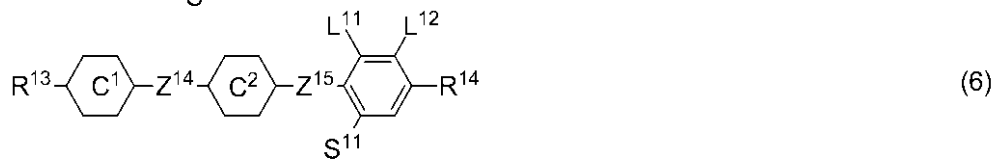
環B<sup>1</sup>、環B<sup>2</sup>、環B<sup>3</sup>、および環B<sup>4</sup>は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、2,5-ジフルオロ-1,4-フェニレン、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

Z<sup>11</sup>、Z<sup>12</sup>、およびZ<sup>13</sup>は独立して、単結合、-COO-、-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-、-CH=CH-、または-C≡C-である。

【0030】

項10. 式(5)から(11)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8または9に記載の液晶組成物。

50



式(5)から(11)において、

$R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく、そして $R^{15}$ は、水素またはフッ素であってもよく；

環 $C^1$ 、環 $C^2$ 、環 $C^3$ 、および環 $C^4$ は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2,6-ジイルであり；

環 $C^5$ および環 $C^6$ は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-シクロヘキセニレン、1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、またはデカヒドロナフタレン-2,6-ジイルであり；

$Z^{14}$ 、 $Z^{15}$ 、 $Z^{16}$ 、および $Z^{17}$ は独立して、単結合、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、または $-OCF_2CH_2CH_2-$ であり；

$L^{11}$ および $L^{12}$ は独立して、フッ素または塩素であり；

$S^{11}$ は、水素またはメチルであり；

Xは、 $-CHF-$ または $-CF_2-$ であり；

j、k、m、n、p、q、r、およびsは独立して、0または1であり、k、m、n、

10

20

30

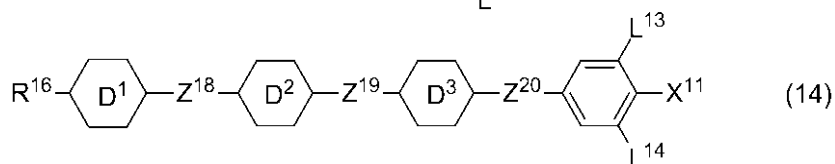
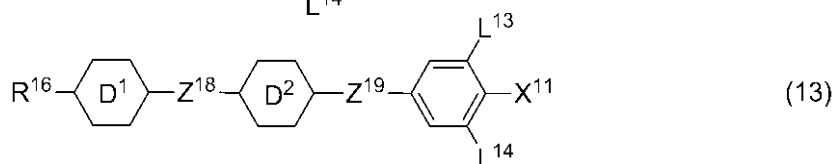
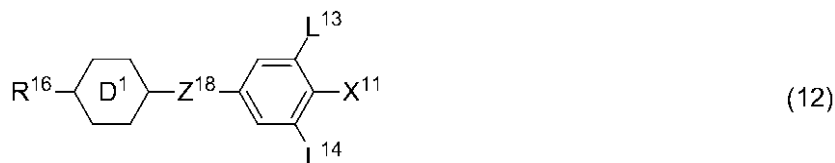
40

50

および  $p$  の和は、1 または 2 であり、 $q$ 、 $r$ 、および  $s$  の和は、0、1、2、または 3 であり、 $t$  は、1、2、または 3 である。

【0031】

項 11. 式 (12) から (14) 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 8 から 10 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



式 (12) から (14) において、

$\text{R}^{16}$  は炭素数 1 から 10 のアルキルまたは炭素数 2 から 10 のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも 1 つの  $-\text{CH}_2-$  は  $-\text{O}-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも 1 つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

$\text{X}^{11}$  は、フッ素、塩素、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CHF}_2$ 、または  $-\text{OCF}_2\text{CHFCF}_3$  であり；

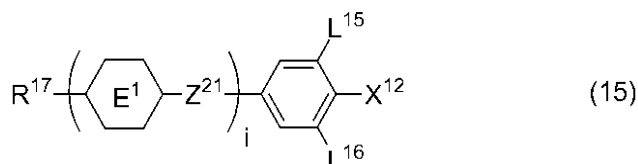
環  $\text{D}^1$ 、環  $\text{D}^2$ 、および環  $\text{D}^3$  は独立して、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1,3-ジオキササン-2,5-ジイル、またはピリミジン-2,5-ジイルであり；

$\text{Z}^{18}$ 、 $\text{Z}^{19}$ 、および  $\text{Z}^{20}$  は独立して、単結合、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{O}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、または  $-(\text{CH}_2)_4-$  であり；

$\text{L}^{13}$  および  $\text{L}^{14}$  は独立して、水素またはフッ素である。

【0032】

項 12. 式 (15) 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 8 から 11 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。



式 (15) において、

$\text{R}^{17}$  は炭素数 1 から 10 のアルキルまたは炭素数 2 から 10 のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも 1 つの  $-\text{CH}_2-$  は  $-\text{O}-$  で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも 1 つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；

$\text{X}^{12}$  は  $-\text{C}\equiv\text{N}$  または  $-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$  であり；

環  $\text{E}^1$  は、1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、少なくとも 1 つの水素がフッ素で置き換えられた 1,4-フェニレン、テトラヒドロピラン-2,5-ジイル、1

10

20

30

40

50

, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、またはピリミジン-2, 5-ジイルであり;

$Z^{2,1}$  は、単結合、 $-COO-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、または $-C\equiv C-$ であり;

$L^{1,5}$  および  $L^{1,6}$  は独立して、水素またはフッ素であり;

$i$  は、1、2、3、または4である。

#### 【0033】

項13. 項8から12のいずれか1項に記載の液晶組成物を含む液晶表示素子。

#### 【0034】

本発明は、次の項をも含む。(a) 重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、色素、および消泡剤の群から選択された、1つ、2つ、または少なくとも3つの添加物をさらに含有する、上記の液晶組成物。(b) 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℃で測定)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℃で測定)が-2以下である、上記の液晶組成物。(c) 液晶表示素子の動作モードが、TNモード、ECBモード、OCBモード、IPSモード、またはFPA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(AM)方式である、上記の液晶表示素子。(d) 重合性化合物をさらに含有する上記の液晶組成物を用いて作製した、PSAモードを有する液晶表示素子。

10

#### 【0035】

化合物(1)の態様、化合物(1)の合成、液晶組成物、および液晶表示素子について順に説明する。

20

#### 【0036】

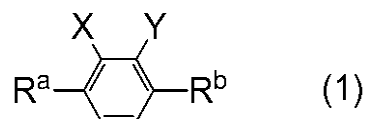
##### 1. 化合物(1)の態様

化合物(1)は、1つのフェニレン環を有することを特徴とする。この化合物は、負の誘電率異方性を有する。この化合物は他の液晶性化合物との相溶性がよく、この化合物を含有する組成物は素子が通常使用される条件下で物理的または化学的に安定である。この組成物は、素子が通常使用される条件下で保管しても、この化合物が結晶(またはスメクチック相)として析出することがない。この化合物は、適切な光学異方性および適切な誘電率異方性を有する。

#### 【0037】

化合物(1)における末端基 $R^a$ および $R^b$ 、および側方基XおよびYの好ましい例は、以下のとおりである。この例は化合物(1)の下位式にも適用される。化合物(1)において、これらの基を適切に組み合わせることによって、物性を任意に調整することが可能である。化合物の物性に大きな差異がないので、化合物(1)は、 $^2H$ (重水素)、 $^{13}C$ などの同位体を天然存在比の量より多く含んでもよい。なお、化合物(1)の記号の定義は、項1に記載したとおりである。

30



40

#### 【0038】

式(1)において、 $R^a$ および $R^b$ は独立して、炭素数1から30のアルキルであり、これらの基において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、少なくとも1つの $-CH_2CH_2-$ は $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよい。

#### 【0039】

好ましい $R^a$ または $R^b$ は、水素、アルキル、アルコキシ、アルコシアルキル、アルコシアルコキシ、アルキルチオ、アルキルチオアルコキシ、アシル、アシルアルキル、

50

アシルオキシ、アシルオキシアルキル、アルコキシカルボニル、アルコキシカルボニルアルキル、アルケニル、アルケニルオキシ、アルケニルオキシアルキル、アルコキシアルケニル、アルキニル、アルキニルオキシ、シラアルキル、およびジシラアルキルである。少なくとも1つの水素がフッ素および／または塩素で置き換えられたこれらの基も好ましい。少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられたこれらの基はさらに好ましい。これらの基においては、分岐鎖よりも直鎖の方が好ましい。R<sup>a</sup>またはR<sup>b</sup>が分岐鎖であっても光学活性であるときは好ましい。さらに好ましいR<sup>a</sup>またはR<sup>b</sup>はアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルケニル、フルオロアルキル、およびフルオロアルコキシである。

#### 【0040】

アルケニルにおける $\text{—CH=CH—}$ の好ましい立体配置は、二重結合の位置に依存する。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配置が好ましい。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配置が好ましい。

#### 【0041】

具体的なR<sup>a</sup>またはR<sup>b</sup>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、オクチル、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、ヘプチルオキシ、メトキシメチル、メトキシエチル、メトキシプロピル、エトキシメチル、エトキシエチル、エトキシプロピル、プロポキシメチル、ブトキシメチル、ペントキシメチル、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、2-プロペニルオキシ、2-ブテニルオキシ、2-ペンテニルオキシ、1-プロピニル、または1-ペンテニルである。

#### 【0042】

具体的なR<sup>a</sup>またはR<sup>b</sup>は、2-フルオロエチル、3-フルオロプロピル、2, 2, 2-トリフルオロエチル、2-フルオロビニル、2, 2-ジフルオロビニル、2-フルオロ-2-ビニル、3-フルオロ-1-プロペニル、3, 3, 3-トリフルオロ-1-プロペニル、4-フルオロ-1-プロペニル、または4, 4-ジフルオロ-3-ブテニルでもある。

#### 【0043】

さらに好ましいR<sup>a</sup>またはR<sup>b</sup>は、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、メトキシメチル、エトキシメチル、プロポキシメチル、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、2-プロペニルオキシ、2-ブテニルオキシ、または2-ペンテニルオキシである。最も好ましいR<sup>a</sup>またはR<sup>b</sup>は、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、またはメトキシメチルである。

#### 【0044】

式(1)において、XおよびYは独立して、炭素数1から5のフルオロアルキル、炭素数1から5のフルオロアルコキシ、またはペンタフルオロスルファニル( $\text{—SF}_5$ )であり、そしてXおよびYの一方はフッ素であってもよい。フルオロアルキルは、モノフルオロアルキル、ポリフルオロアルキル、およびペルフルオロアルキルを意味する。フルオロアルコキシは、モノフルオロアルコキシ、ポリフルオロアルコキシ、およびペルフルオロアルコキシを意味する。

#### 【0045】

好ましいXまたはYは、フルオロアルキル、フルオロアルコキシ、またはフッ素である。さらに好ましいXまたはYは、フルオロアルコキシまたはフッ素である。好ましいフルオロアルキルは、ポリフルオロアルキルまたはペルフルオロアルキルである。さらに好ましいフルオロアルキルは、ペルフルオロアルキルである。好ましいフルオロアルコキシは、ポリフルオロアルコキシまたはペルフルオロアルコキシである。さらに好ましいフルオ

10

20

30

40

50

ロアルコキシは、ペルフルオロアルコキシである。好ましい炭素数は、1 から 3 である。さらに好ましい炭素数は、1 または 2 である。最も好ましい炭素数は 1 である。

#### 【0046】

好ましい X または Y は、フッ素、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CHF_2$ 、 $-CF_2CH_2F$ 、 $-CHF_2CF_3$ 、 $-CH_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CHF_2CF_3$ 、 $-CHF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、 $-OCF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 $-OCF_2CH_2F$ 、 $-OCHF_2CF_3$ 、 $-OCH_2CF_3$ 、 $-OCF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 、または  $-OCHF_2CF_2CF_3$  である。

#### 【0047】

さらに好ましい X または Y は、フッ素、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CHF_2$ 、 $-CHF_2CF_3$ 、 $-CH_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CHF_2CF_3$ 、 $-CHF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、または  $-OCH_2F$  である。特に好ましい X または Y は、フッ素、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、または  $-CH_2F$  である。最も好ましい X または Y は、フッ素または  $-CF_3$  である。

#### 【0048】

化合物 (1) の末端基、および側方基 X および Y を適切に選択することによって、光学異方性、誘電率異方性などの物性を任意に調整することが可能である。これらの基が化合物 (1) の物性に及ぼす効果を以下に説明する。

#### 【0049】

化合物 (1) において、 $R^a$  または  $R^b$  が直鎖であるときは液晶相の温度範囲が広く、そして粘度が小さい。 $R^a$  または  $R^b$  が分岐鎖であるとき、他の液晶性化合物との相溶性がよい。 $R^a$  または  $R^b$  が光学活性基である化合物は、キラルドーパントとして有用である。この化合物を組成物に添加することによって、素子に発生するリバース・ツイスト・ドメイン (Reverse twisted domain) を防止することができる。 $R^a$  または  $R^b$  が光学活性基でない化合物は、組成物の成分として有用である。 $R^a$  または  $R^b$  がアルケニルであるとき、好ましい立体配置は二重結合の位置に依存する。好ましい立体配置を有するアルケニル化合物は、高い上限温度または液晶相の広い温度範囲を有する。Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 109 および Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 327 に詳細な説明がある。

#### 【0050】

式 (1) において、X または Y がフッ素、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、または  $-CH_2F$  であるとき、この化合物は好ましい。大きな誘電率異方性の観点からは、 $-CF_3$  が好ましい。小さな粘度の観点からは、フッ素が好ましい。

#### 【0051】

化合物 (1) の好ましい例は、化合物 (1a) または化合物 (1b) である。これらの化合物において、記号の定義は、上記の項に記載したとおりである。

#### 【0052】

### 2. 化合物 (1) の合成

化合物 (1) の合成法を説明する。化合物 (1) は、有機合成化学の方法を適切に組み合わせることにより合成することができる。出発物質に目的の末端基、環、または結合基を導入する方法は、「フーベン・ヴァイル」(Houben-Wyle, Methoden der Organische Chemie, Georg-Thieme Verlag, Stuttgart)、「オーガニック・シンセシズ」(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ている。

#### 【0053】

2, 3-二置換-1, 4-フェニレンの生成法を説明する。2-フルオロ-3-トリフルオロメチル-1, 4-フェニレンなどの環に関しては出発物が市販されているか、また

10

20

30

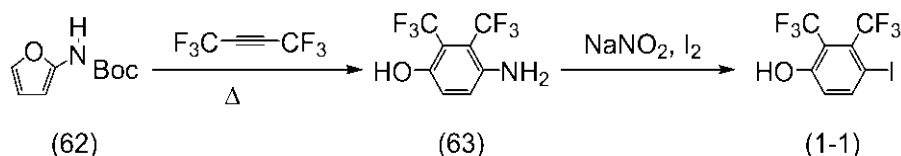
40

50

は合成法がよく知られている。そこで下に示した化合物(1-1)、化合物(1-1')、および化合物(1-2)から(1-6)について説明する。これら化合物は、通常の方法で化合物(1)に変換できる。

【0054】

(1) 化合物(1-1)の合成



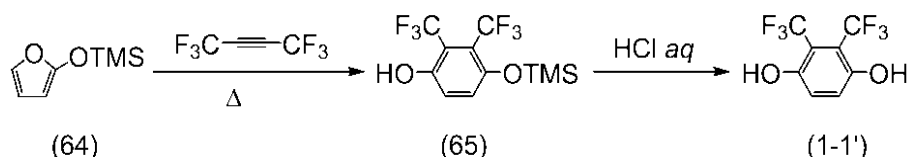
10

【0055】

2, 3-(ビストリフルオロメチル)フェニレンは、Org. Lett., 2000, 2 (21), 3345に記載された方法で生成させる。フラン(62)と1, 1, 1, 4, 4, 4-ヘキサフルオロ-2-ブチンとを高温でディールズ・アルダー型の反応をさせることによってアニリン(63)を合成する。この化合物に、Org. Synth. Coll., Vol. 2, 1943, 355に記載された方法にしたがい、サンド・マイヤー型反応を行ってヨウ化物(1-1)を得る。

【0056】

(2) 化合物(1-1')の合成



20

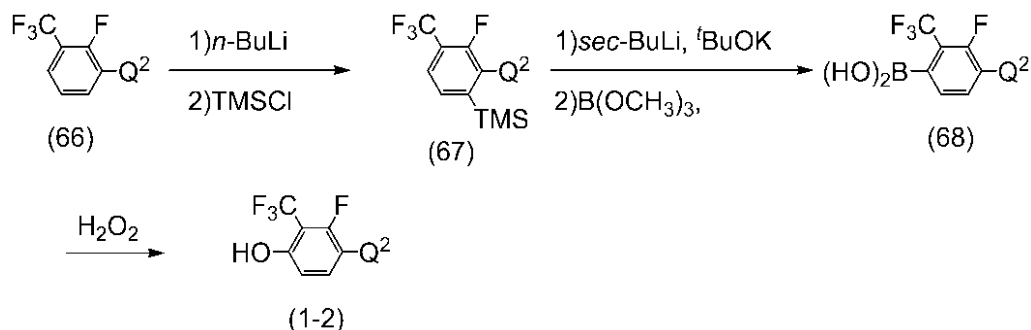
【0057】

同様な方法で、フラン(64)と1, 1, 1, 4, 4, 4-ヘキサフルオロ-2-ブチンとを高温でディールズ・アルダー型の反応をさせることによってフェノール(65)を合成する。この化合物に、塩酸を反応させて脱保護することによってヒドロキノン(1-1')を得る。

30

【0058】

(3) 化合物(1-2)の合成



40

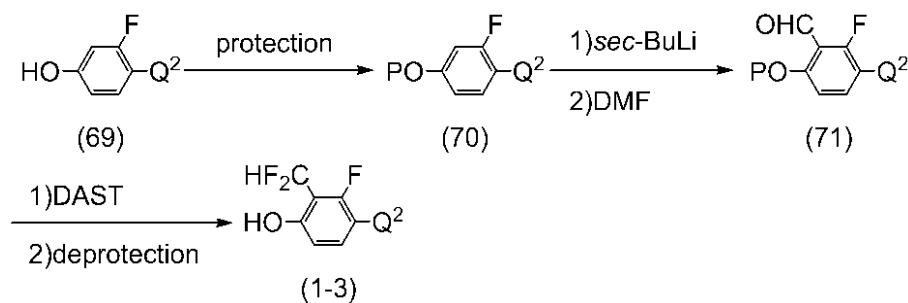
【0059】

化合物(66)のQ<sup>2</sup>は一価基を意味する。この化合物の水酸基を適切な保護基P(例えば、トリメチルシリル基)で保護して化合物(67)を得る。化合物(67)にt-BuOK存在下でs-ブチルリチウムを作用させ、続いてホウ酸トリメチルを反応させてホウ酸(68)を得る。この化合物を30%過酸化水素水で酸化してフェノール(1-2)を得る。

【0060】

(4) 化合物(1-3)の合成

50

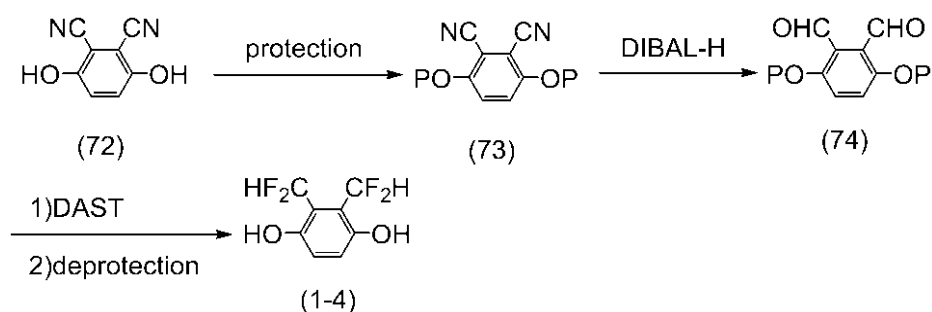


## 【0061】

化合物(69)の $Q^2$ は一価基を意味する。この化合物の水酸基を適切な保護基Pで保護して化合物(70)を得る。化合物(70)にs-ブチルリチウムを作用させ、続いてN,N-ジメチルホルムアミド(DMF)を反応させてアルデヒド(71)を得る。この化合物をジエチルアミノサルファートリフルオリド(DAST)でフッ素化し、続いて脱保護してフェノール(1-3)を得る。

## 【0062】

(5) 化合物(1-4)の合成

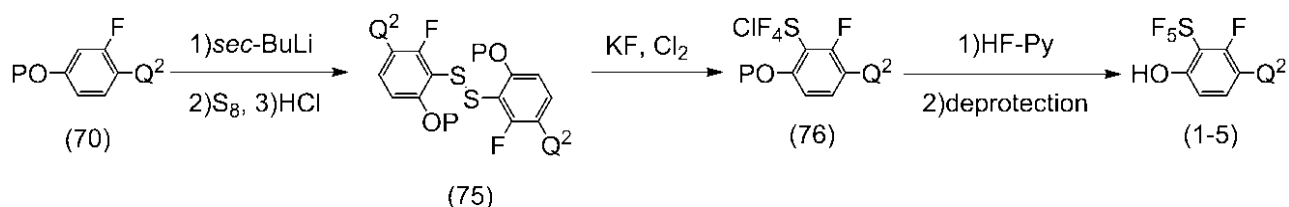


## 【0063】

化合物(72)の $Q^2$ は一価基を意味する。この化合物の水酸基を適切な保護基Pで保護して化合物(73)を得る。化合物(73)を水素化ジイソブチルアルミニウム(DIBAL-H)で還元してアルデヒド(74)を得る。この化合物をジエチルアミノサルファートリフルオリド(DAST)でフッ素化し、続いて脱保護してフェノール(1-4)を得る。

## 【0064】

(6) 化合物(1-5)の合成



## 【0065】

化合物(70)の $Q^2$ は一価基であり、Pは水酸基の保護基である。この化合物に、s-ブチルリチウムを作用させ、その後硫黄を反応させジスルフィドである化合物(75)を得る。この化合物は、フッ化カリウム存在下で塩素ガスを反応させることにより、化合物(76)へと導く。この化合物にフッ化水素ピリジン錯体を用いてフッ素化し、続いて脱保護してフェノール(1-5)を得る。

## 【0066】

(7) 化合物(1-6)の合成

10

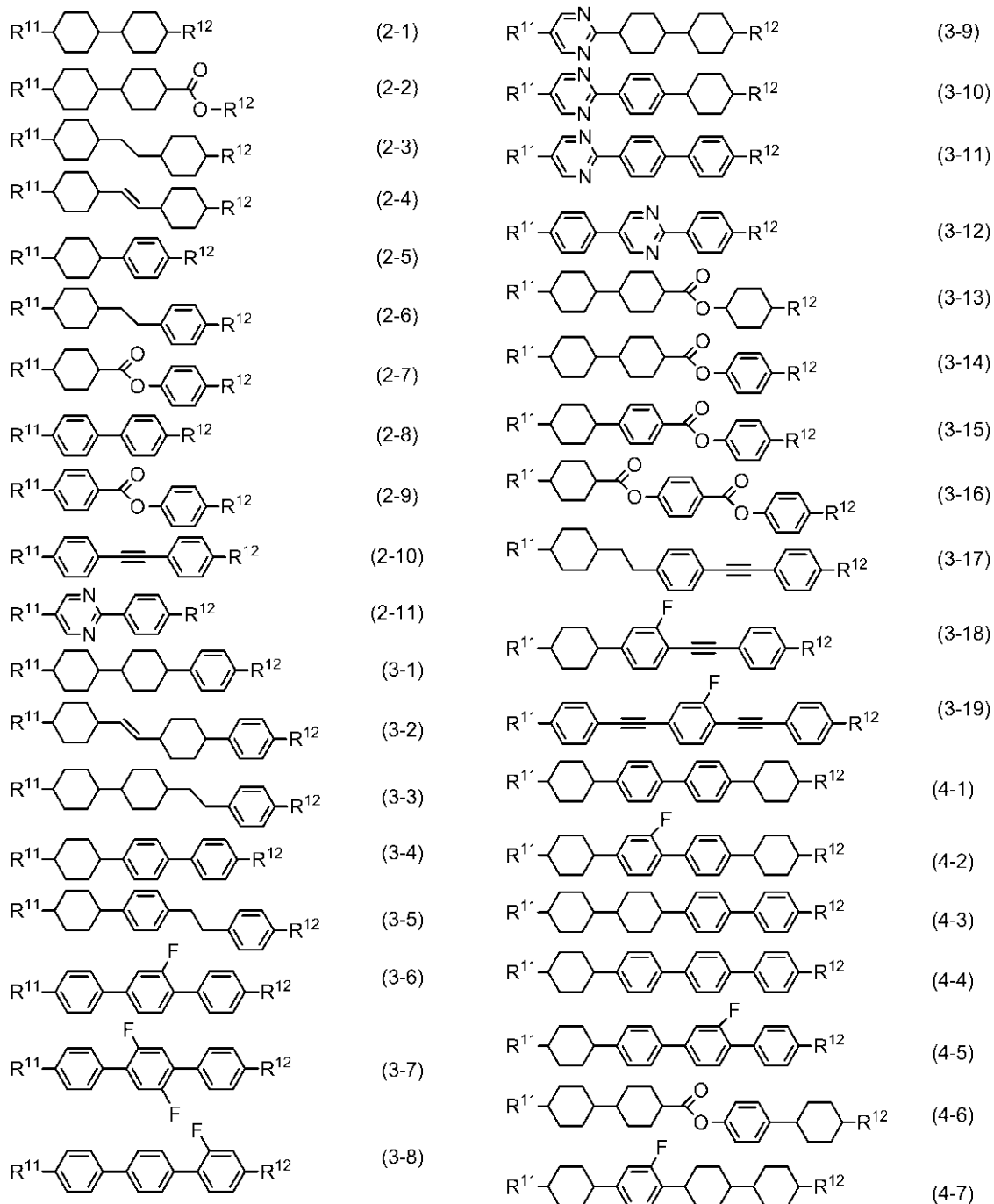
20

30

40

50





## 【0072】

成分 (b) は、小さな誘電率異方性を有する。成分 (b) は中性に近い。化合物 (2) は、粘度の減少または光学異方性の調整に効果がある。化合物 (3) および (4) は、上限温度を高くすることによってネマチック相の温度範囲を広げる効果、または光学異方性の調整に効果がある。

## 【0073】

成分 (b) の含有量を増加させるにつれて組成物の粘度は小さくなるが誘電率異方性が小さくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量が多いほうが好ましい。IPS、VAなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分 (b) の含有量は、液晶組成物の重量に基づいて、好ましくは30重量%以上、さらに好ましくは40重量%以上である。

## 【0074】

成分 (c) は、化合物 (5) から (11) である。これらの化合物は、2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレンのように、ラテラル位が2つのハロゲンで置換されたフェニレ

10

20

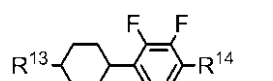
30

40

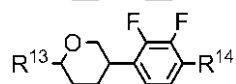
50

ンを有する。成分(c)の好ましい例として、化合物(5-1)から(5-8)、化合物(6-1)から(6-17)、化合物(7-1)、化合物(8-1)から(8-3)、化合物(9-1)から(9-11)、化合物(10-1)から(10-3)、および化合物(11-1)から(11-3)を挙げることができる。これらの化合物において、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、および $R^{15}$ は独立して、炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく、そして $R^{15}$ は、水素またはフッ素であってもよい。

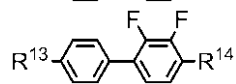
【0075】



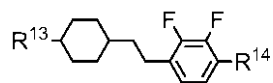
(5-1)



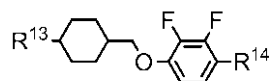
(5-2)



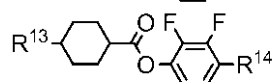
(5-3)



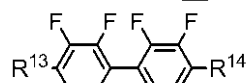
(5-4)



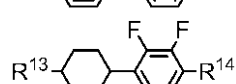
(5-5)



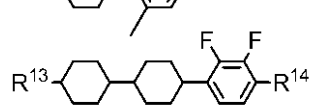
(5-6)



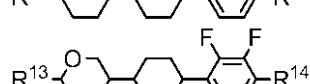
(5-7)



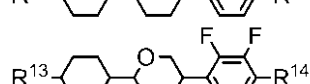
(5-8)



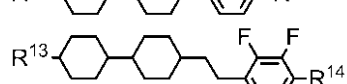
(6-1)



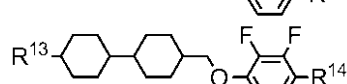
(6-2)



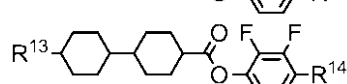
(6-3)



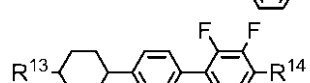
(6-4)



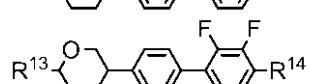
(6-5)



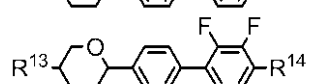
(6-6)



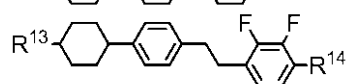
(6-7)



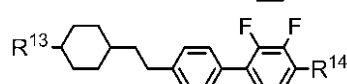
(6-8)



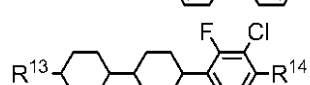
(6-9)



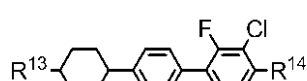
(6-10)



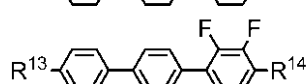
(6-11)



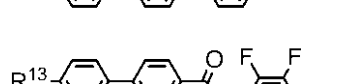
(6-12)



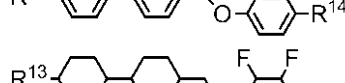
(6-13)



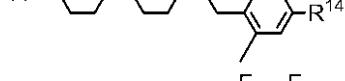
(6-14)



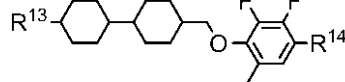
(6-15)



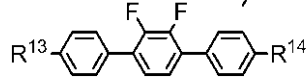
(6-16)



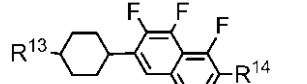
(6-17)



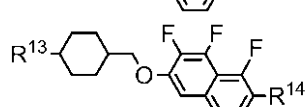
(7-1)



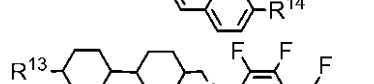
(8-1)



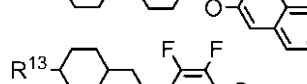
(8-2)



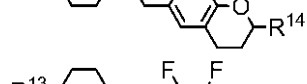
(8-3)



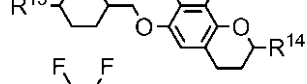
(9-1)



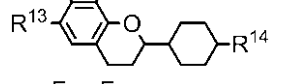
(9-2)



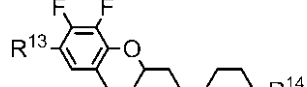
(9-3)



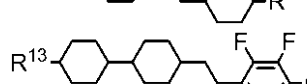
(9-4)



(9-5)



(9-6)



(9-7)



(9-8)

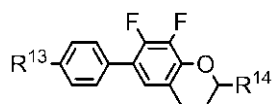
10

20

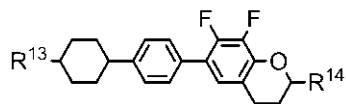
30

40

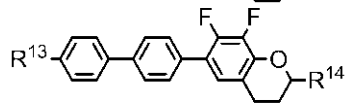
【 0 0 7 6 】



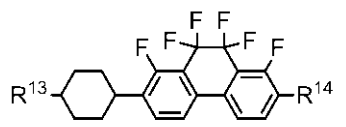
(9-9)



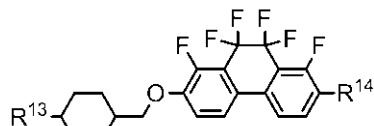
(9-10)



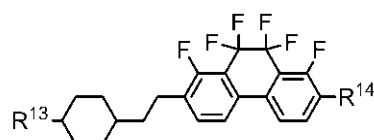
(9-11)



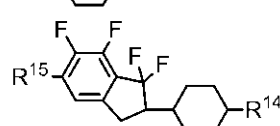
(10-1)



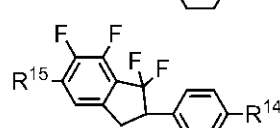
(10-2)



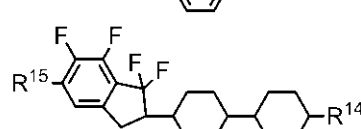
(10-3)



(11-1)



(11-2)



(11-3)

10

20

30

40

## 【0077】

成分(c)は、誘電率異方性が負に大きい。成分(c)は、IPS、VA、PSAなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分(c)の含有量を増加させるにつれて組成物の誘電率異方性が負に大きくなるが、粘度が大きくなる。そこで、素子のしきい値電圧の要求値を満たす限り、含有量は少ないほうが好ましい。誘電率異方性が－5程度であることを考慮すると、十分な電圧駆動をさせるには、含有量が40重量%以上であることが好ましい。

## 【0078】

成分(c)のうち、化合物(5)は二環化合物であるので、粘度の減少、光学異方性の調整、または誘電率異方性の増加に効果がある。化合物(6)および(7)は三環化合物であるので、上限温度を高くする、光学異方性を大きくする、または誘電率異方性を大きくするという効果がある。化合物(8)から(11)は、誘電率異方性を大きくするという効果がある。

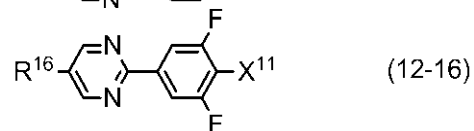
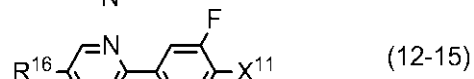
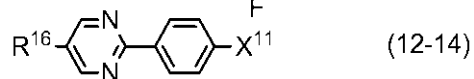
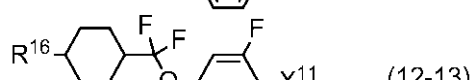
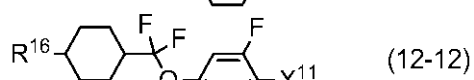
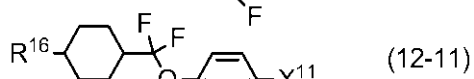
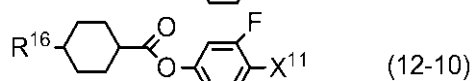
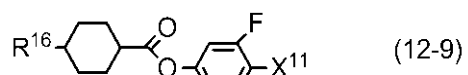
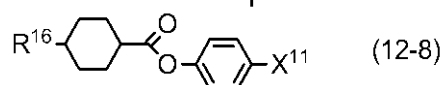
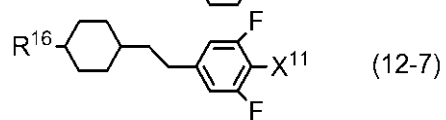
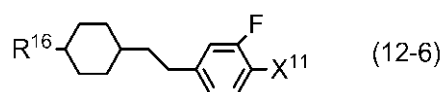
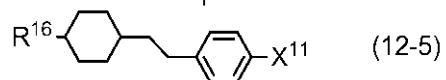
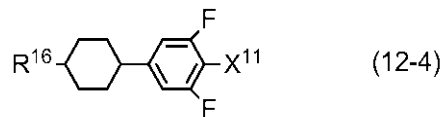
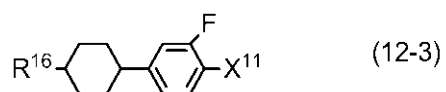
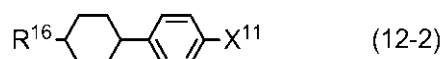
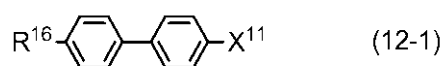
## 【0079】

IPS、VA、PSAなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分(c)の含有量は、液晶組成物の重量に基づいて、好ましくは40重量%以上であり、さらに好ましくは50重量%から95重量%の範囲である。成分(c)を誘電率異方性が正である組成物に添加する場合は、成分(c)の含有量は30重量%以下が好ましい。成分(c)を添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧－透過率曲線を調整することが可能となる。

## 【0080】

成分(d)は、右末端にハロゲンまたはフッ素含有基を有する化合物である。成分(d)の好ましい例として、化合物(12-1)から(12-16)、化合物(13-1)から(13-113)、化合物(14-1)から(14-57)を挙げることができる。これらの化合物において、R<sup>16</sup>は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの－CH<sub>2</sub>－は－O－で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく；X<sup>11</sup>は、フッ素、塩素、－OCF<sub>3</sub>、－OCHF<sub>2</sub>、－CF<sub>3</sub>、－CHF<sub>2</sub>、－CH<sub>2</sub>F、－OCF<sub>2</sub>CHF<sub>2</sub>、または－OCF<sub>2</sub>CHFCF<sub>3</sub>である。

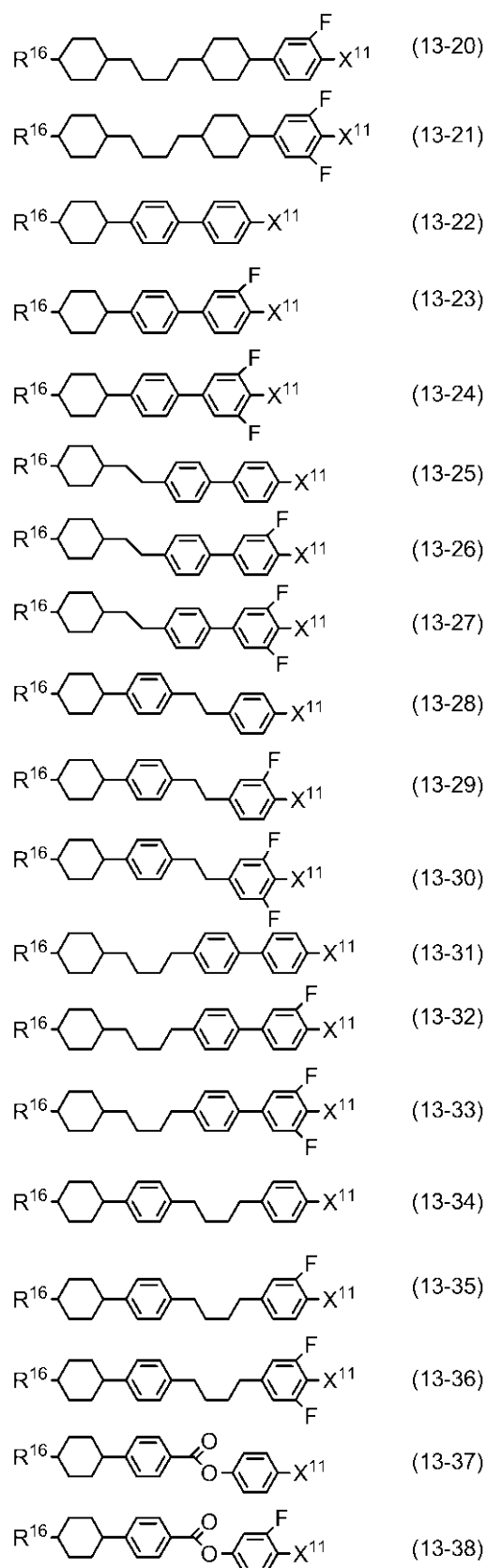
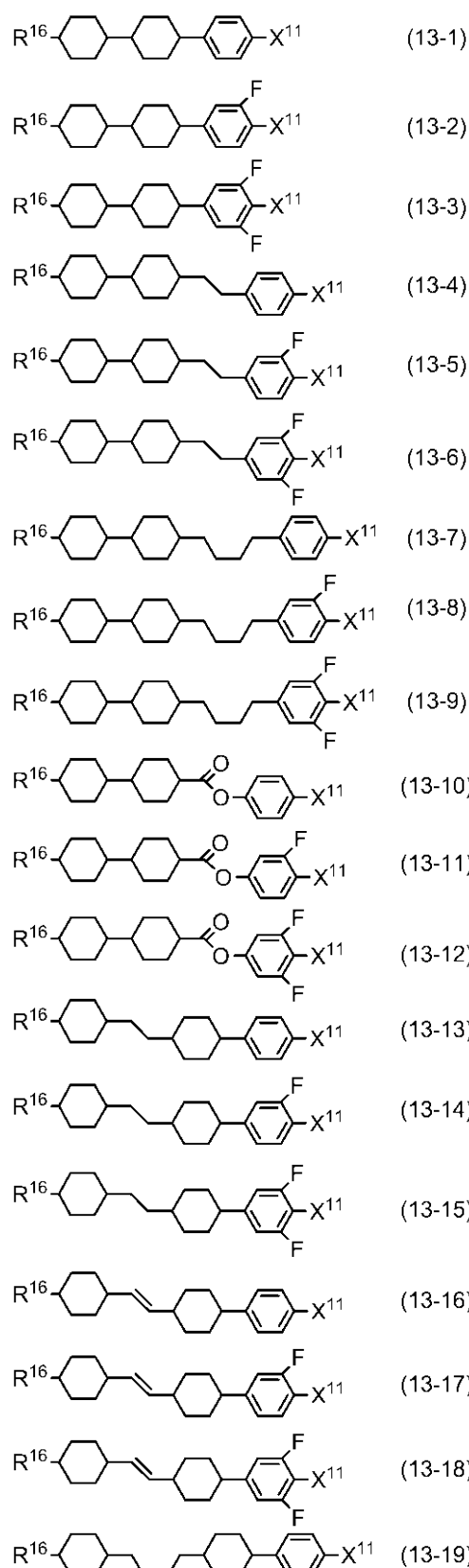
## 【0081】



10

20

【 0 0 8 2 】



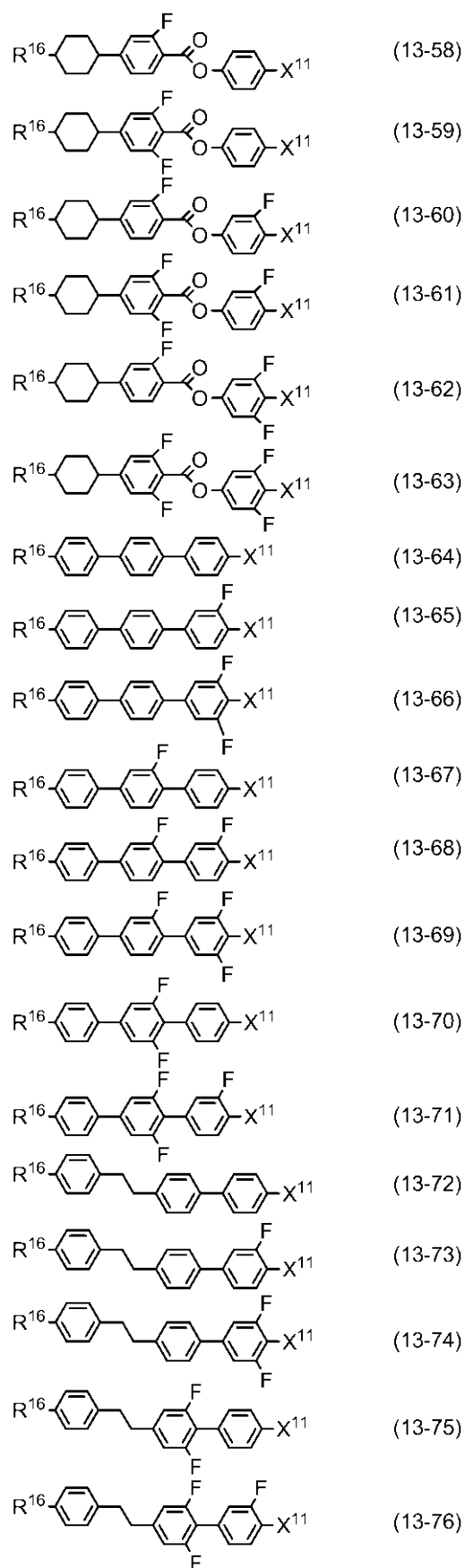
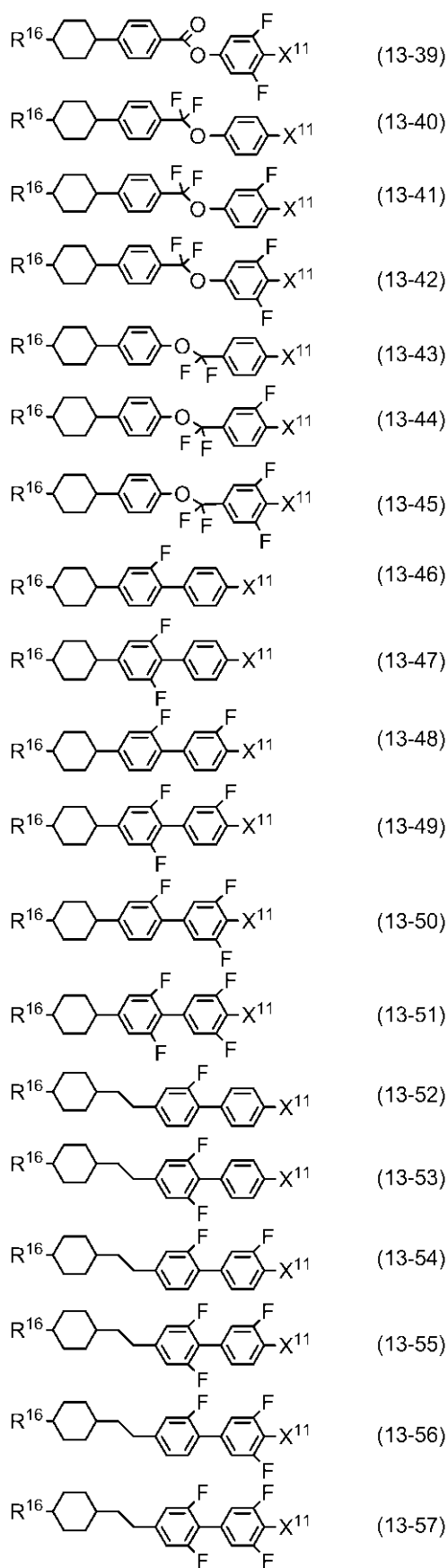
10

20

30

40

【 0 0 8 3 】

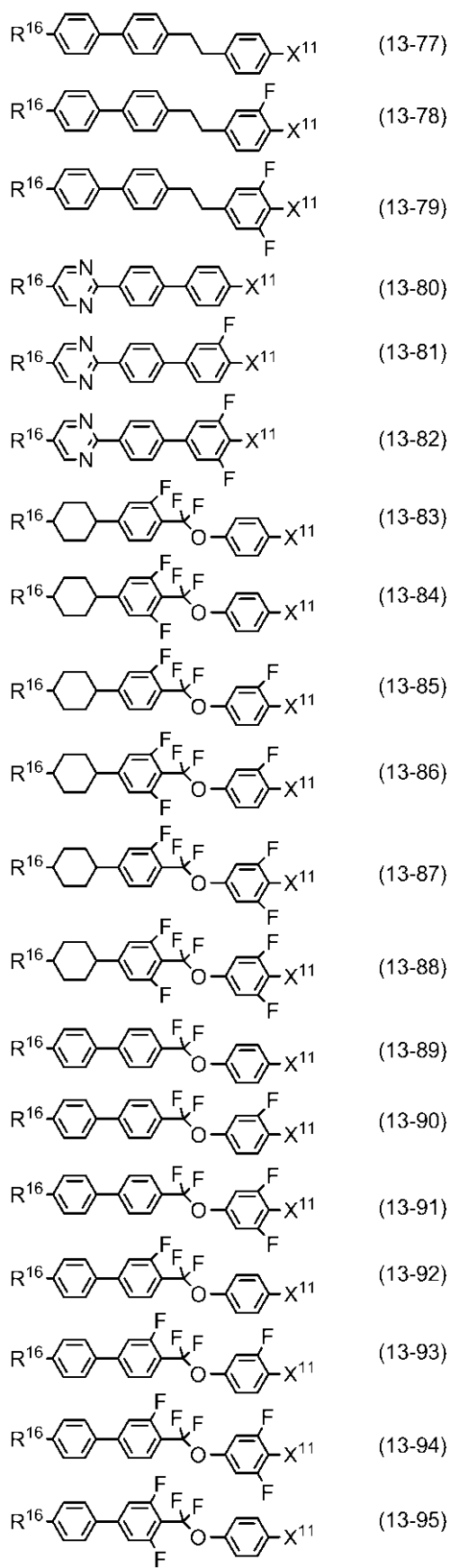


10

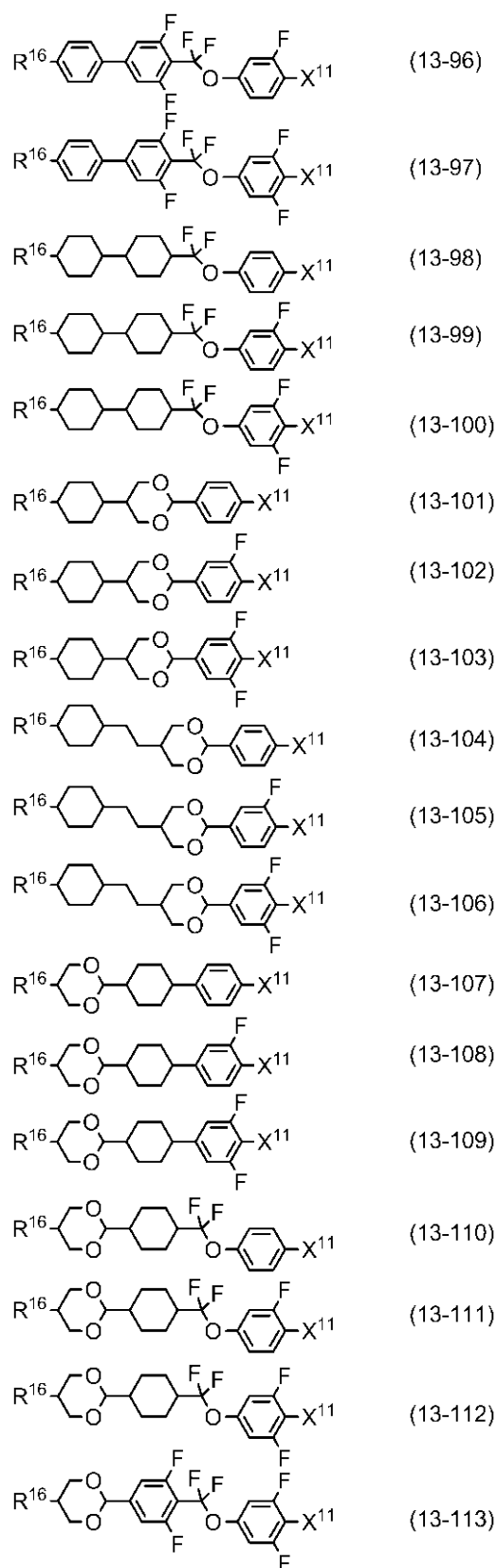
20

30

40



【 0 0 8 5 】

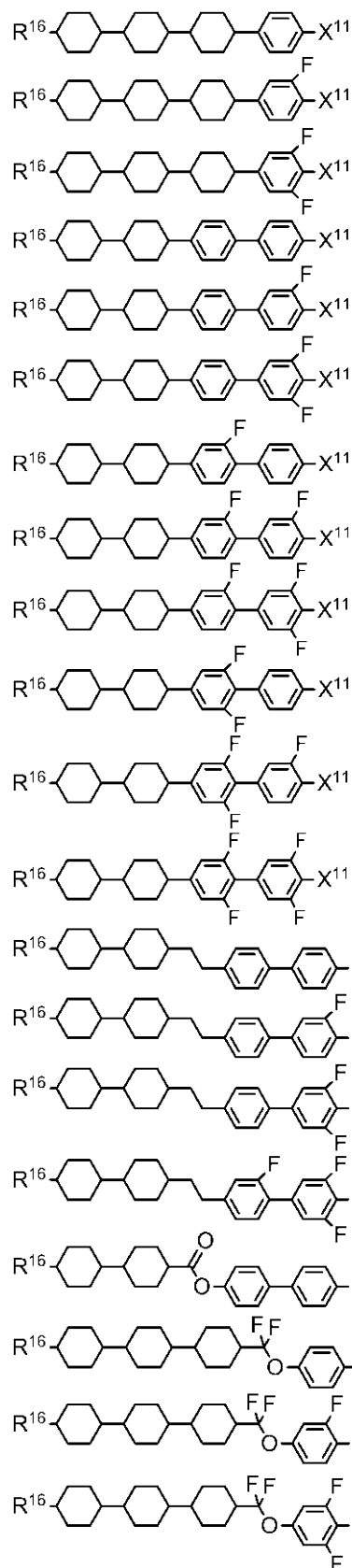


10

20

30

40



(14-1)

(14-2)

(14-3)

(14-4)

(14-5)

(14-6)

(14-7)

(14-8)

(14-9)

(14-10)

(14-11)

(14-12)

(14-13)

(14-14)

(14-15)

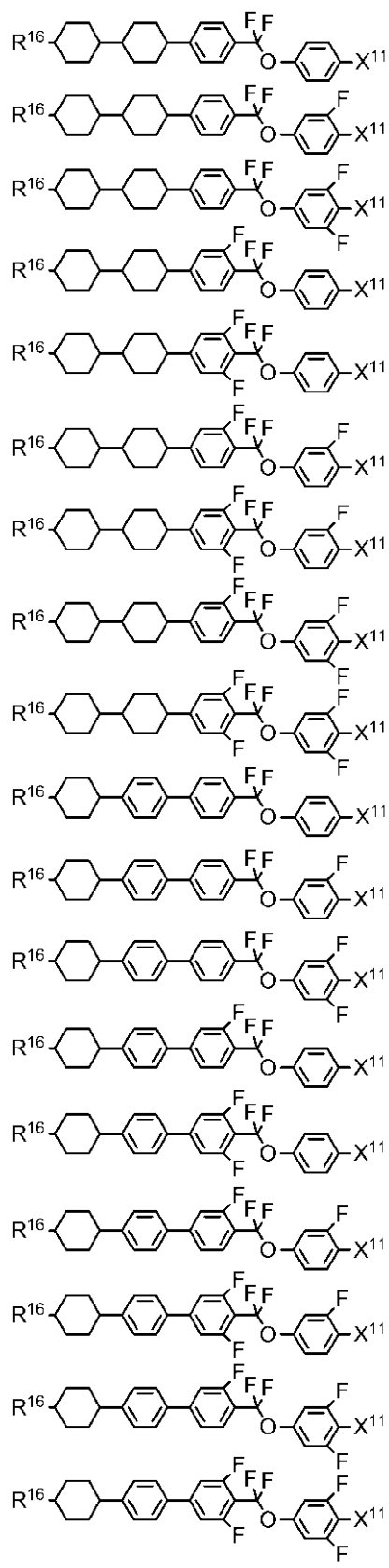
(14-16)

(14-17)

(14-18)

(14-19)

(14-20)



(14-21)

(14-22)

(14-23)

(14-24)

(14-25)

(14-26)

(14-27)

(14-28)

(14-29)

(14-30)

(14-31)

(14-32)

(14-33)

(14-34)

(14-35)

(14-36)

(14-37)

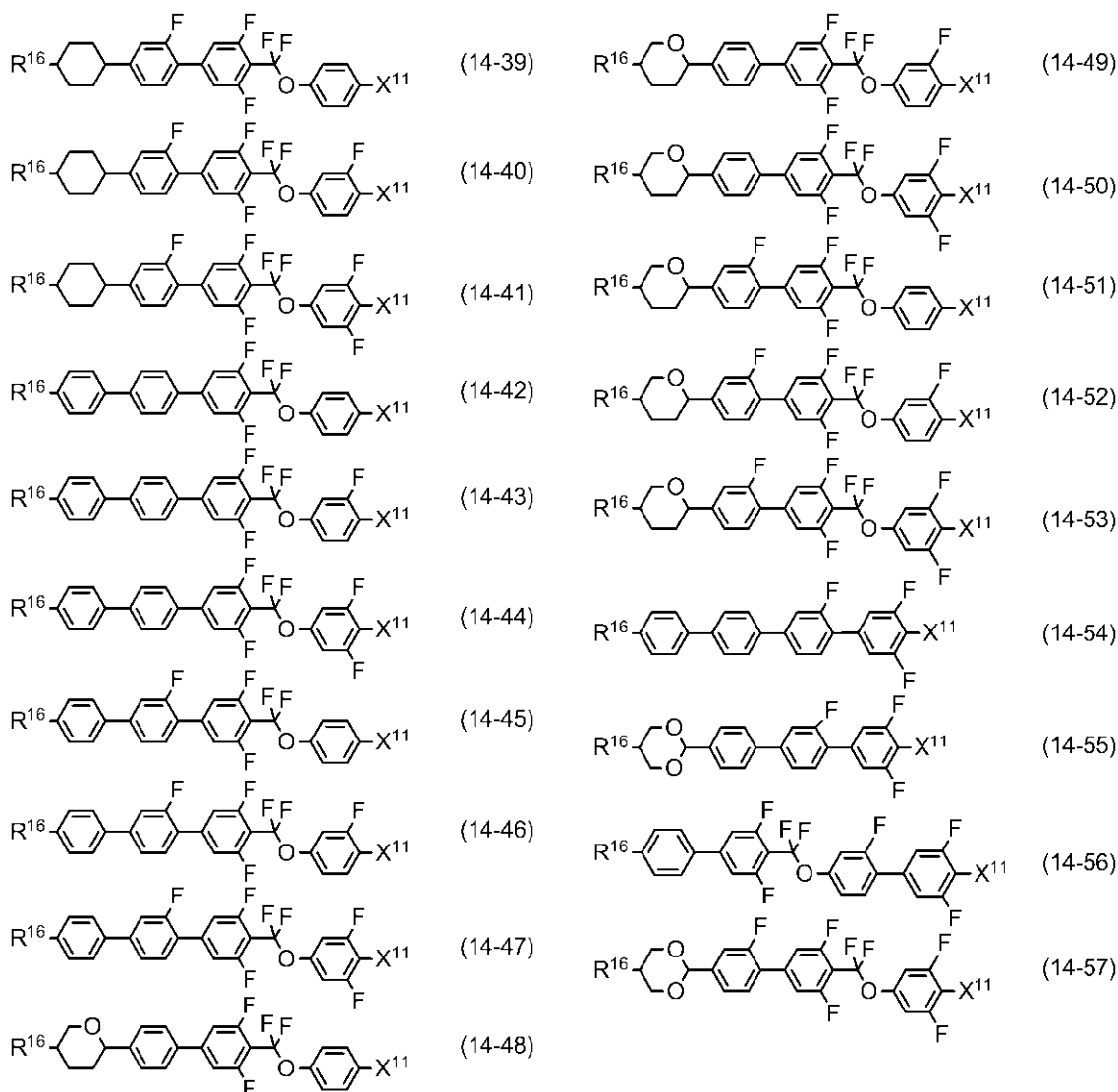
(14-38)

10

20

30

40



10

20

30

## 【0087】

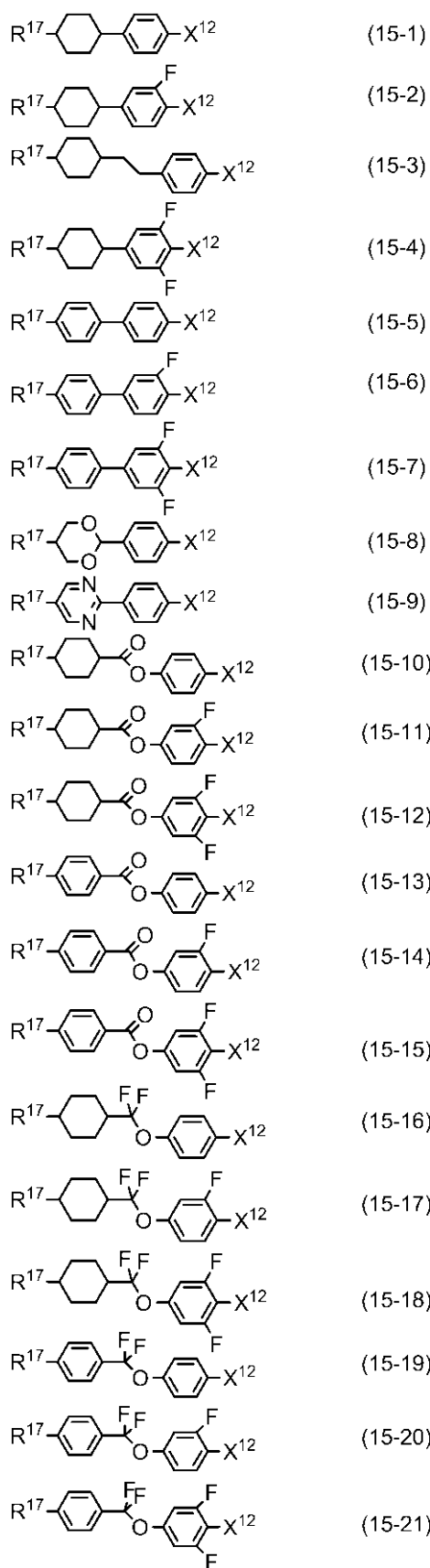
成分(d)は、誘電率異方性が正であり、熱や光に対する安定性が非常に優れているので、IPS、FFS、OCBなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。成分(d)の含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1重量%から99重量%の範囲が適しており、好ましくは10重量%から97重量%の範囲、さらに好ましくは40重量%から95重量%の範囲である。成分(d)を誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分(d)の含有量は30重量%以下が好ましい。成分(d)を添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧-透過率曲線を調整することが可能となる。

## 【0088】

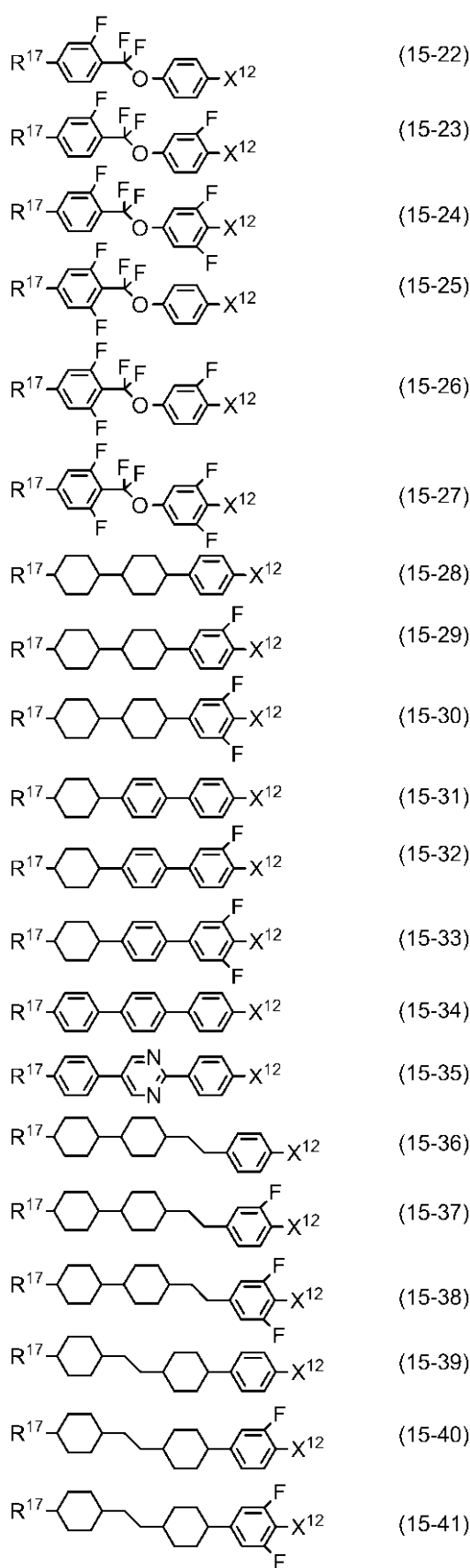
成分(e)は、右末端基が $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ である化合物(15)である。成分(e)の好ましい例として、化合物(15-1)から(15-64)を挙げることができる。これらの化合物において、 $R^{17}$ は炭素数1から10のアルキルまたは炭素数2から10のアルケニルであり、これらの基において、少なくとも1つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置き換えられてもよく、これらの一価基において、少なくとも1つの水素はフッ素で置き換えられてもよく； $X^{12}$ は $-C\equiv N$ または $-C\equiv C-C\equiv N$ である。

40

## 【0089】



【 0 0 9 0 】

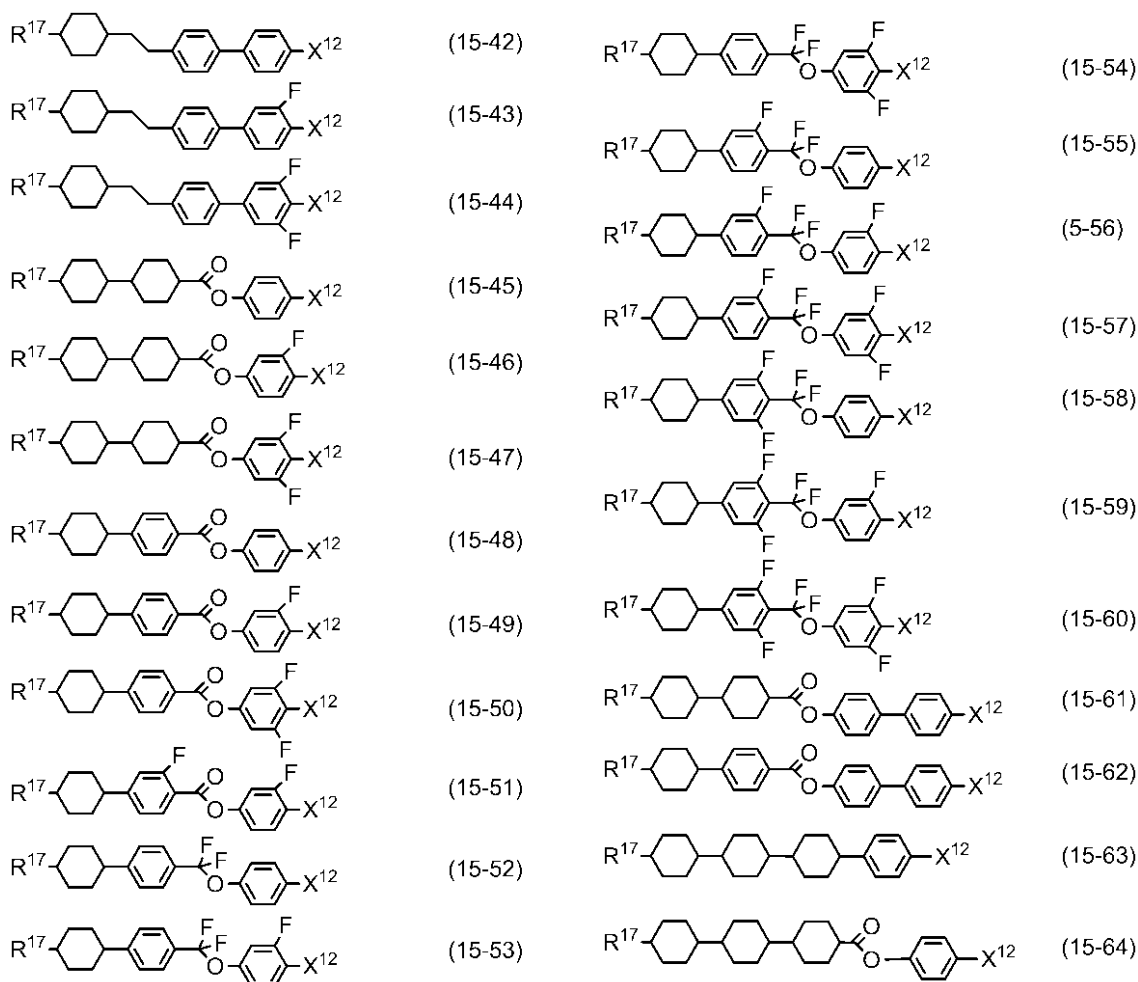


10

20

30

40



10

20

## 【0091】

成分(e)は、誘電率異方性が正であり、その値が大きいので、TNなどのモード用の組成物を調製する場合に用いられる。この成分(e)を添加することにより、組成物の誘電率異方性を大きくすることができる。成分(e)は、液晶相の温度範囲を広げる、粘度を調整する、または光学異方性を調整する、という効果がある。成分(e)は、素子の電圧-透過率曲線の調整にも有用である。

30

## 【0092】

TNなどのモード用の組成物を調製する場合には、成分(e)の含有量は、液晶組成物の重量に基づいて1重量%から99重量%の範囲が適しており、好ましくは10重量%から97重量%の範囲、さらに好ましくは40重量%から95重量%の範囲である。成分(e)を誘電率異方性が負である組成物に添加する場合、成分(e)の含有量は30重量%以下が好ましい。成分(e)を添加することにより、組成物の弾性定数を調整し、素子の電圧-透過率曲線を調整することが可能となる。

## 【0093】

化合物(1)と上記の成分(b)から(e)を適切に組み合わせることによって熱や光に対する高い安定性、高い上限温度、低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、大きな誘電率異方性、大きな比抵抗、大きな比抵抗、適切な弾性定数などの物性の少なくとも1つを充足する液晶組成物を調製することができる。必要に応じて、成分(b)から(e)とは異なる液晶性化合物を添加してもよい。

40

## 【0094】

## 3-2. 添加物

液晶組成物は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。用途に応じて、この組成物に添加物を添加してよい。添加物の例は、重合性化合物、重合開始剤、重合禁止剤、光学活性化合物、酸化防止剤、紫外

50

線吸収剤、光安定剤、熱安定剤、色素、消泡剤などである。このような添加物は当業者によく知られており、文献に記載されている。

【0095】

P S A (polymer sustained alignment; 高分子支持配向型) モードを有する液晶表示素子では、組成物が重合体を含有する。重合性化合物は、組成物中に重合体を生成させる目的で添加される。まず、少量の重合性化合物を添加した組成物を素子に注入する。次に、この素子の基板のあいだに電圧を印加しながら、組成物に紫外線を照射する。重合性化合物は重合して、組成物中に重合体の網目構造を生成する。この組成物では、重合体によって液晶分子の配向を制御することが可能になるので、素子の応答時間が短縮され、画像の焼き付きが改善される。

10

【0096】

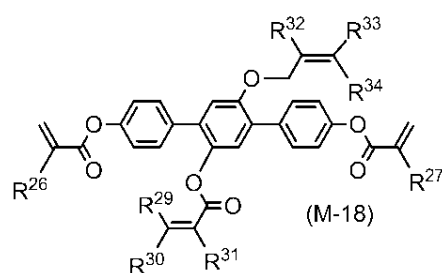
重合性化合物の好ましい例は、アクリレート、メタクリレート、ビニル化合物、ビニルオキシ化合物、プロペニルエーテル、エポキシ化合物（オキシラン、オキセタン）、およびビニルケトンである。さらに好ましい例は、少なくとも1つのアクリロイルオキシを有する化合物および少なくとも1つのメタクリロイルオキシを有する化合物である。さらに好ましい例には、アクリロイルオキシとメタクリロイルオキシの両方を有する化合物も含まれる。

【0097】

さらに好ましい例は、化合物(M-1)から(M-18)である。これらの化合物において、 $R^{25}$  から  $R^{31}$  は独立して、水素またはメチルであり； $R^{32}$ 、 $R^{33}$ 、および  $R^{34}$  は独立して、水素または炭素数1から5のアルキルであり、 $R^{32}$ 、 $R^{33}$ 、および  $R^{34}$  の少なくとも1つは炭素数1から5のアルキルであり；s、v、およびxは独立して、0または1であり；tおよびuは独立して、1から10の整数である。 $L^{21}$  から  $L^{26}$  は独立して、水素またはフッ素であり； $L^{27}$  および  $L^{28}$  は独立して、水素、フッ素、またはメチルである。

20

【0098】



重合性化合物は、重合開始剤を添加することによって、速やかに重合させることができる。反応温度を最適化することによって、残存する重合性化合物の量を減少させることができる。光ラジカル重合開始剤の例は、BASF社のダロキュアシリーズからTPO、1173、および4265であり、イルガキュアシリーズから184、369、500、651、784、819、907、1300、1700、1800、1850、および2959である。

#### 【0100】

光ラジカル重合開始剤の追加例は、4-メトキシフェニル-2,4-ビス(トリクロロメチル)トリアジン、2-(4-ブトキシスチリル)-5-トリクロロメチル-1,3,4-オキサジアゾール、9-フェニルアクリジン、9,10-ベンズフェナジン、ベンゾフェノン/ミヒラーズケトン混合物、ヘキサアリールビイミダゾール/メルカプトベンズイミダゾール混合物、1-(4-イソプロピルフェニル)-2-ヒドロキシ-2-メチルプロパン-1-オン、ベンジルジメチルケタール、2-メチル-1-[4-(メチルチオ)フェニル]-2-モルホリノプロパン-1-オン、2,4-ジエチルキサントン/p-ジメチルアミノ安息香酸メチル混合物、ベンゾフェノン/メチルトリエタノールアミン混合物である。

#### 【0101】

液晶組成物に光ラジカル重合開始剤を添加したあと、電場を印加した状態で紫外線を照射することによって重合を行うことができる。しかし、未反応の重合開始剤または重合開始剤の分解生成物は、素子に画像の焼き付きなどの表示不良を引き起こすかもしれない。これを防ぐために重合開始剤を添加しないまま光重合を行ってもよい。照射する光の好ましい波長は150nmから500nmの範囲である。さらに好ましい波長は250nmから450nmの範囲であり、最も好ましい波長は300nmから400nmの範囲である。

#### 【0102】

重合性化合物を保管するとき、重合を防止するために重合禁止剤を添加してもよい。重合性化合物は、通常は重合禁止剤を除去しないまま組成物に添加される。重合禁止剤の例は、ヒドロキノン、メチルヒドロキノンのようなヒドロキノン誘導体、4-tert-ブチルカテコール、4-メトキシフェノール、フェノチアジンなどである。

#### 【0103】

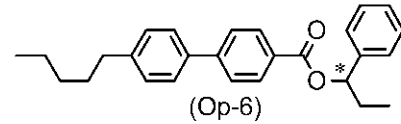
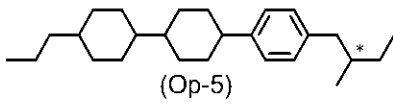
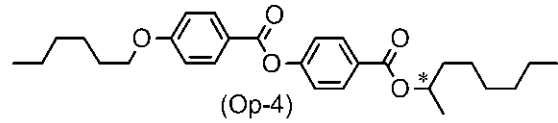
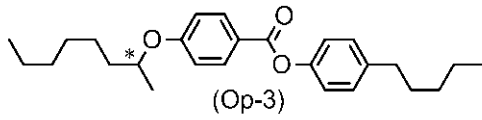
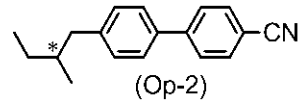
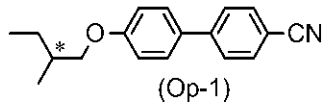
光学活性化合物は、液晶分子にらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与えることによって逆ねじれを防ぐ、という効果を有する。光学活性化合物を添加することによって、らせんピッチを調整することができる。らせんピッチの温度依存性を調整する目的で2つ以上の光学活性化合物を添加してもよい。光学活性化合物の好ましい例として、下記の化合物(Op-1)から(Op-18)を挙げることができる。化合物(Op-18)において、環Jは1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、R<sup>28</sup>は炭素数1から10のアルキルである。

#### 【0104】

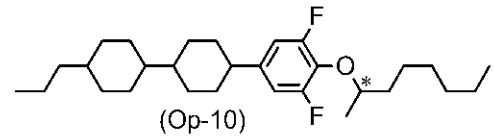
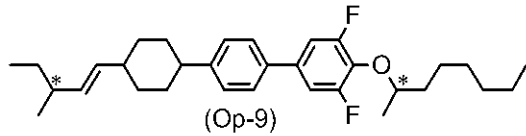
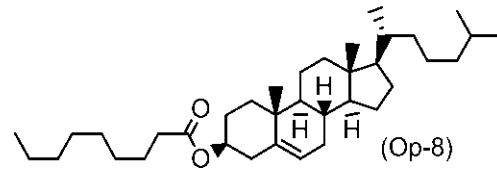
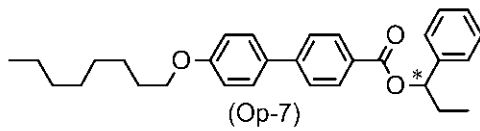
10

20

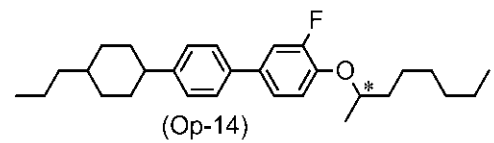
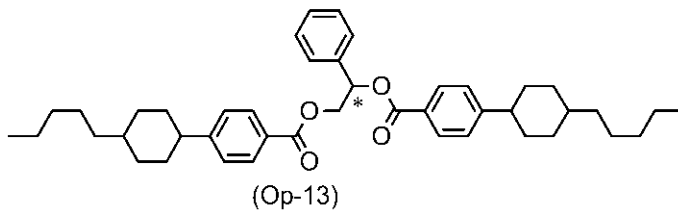
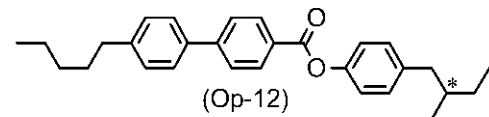
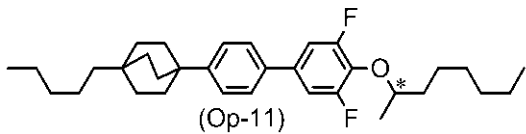
30



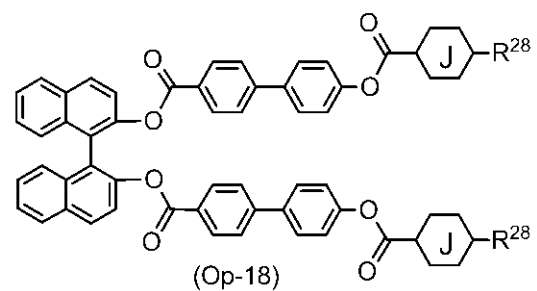
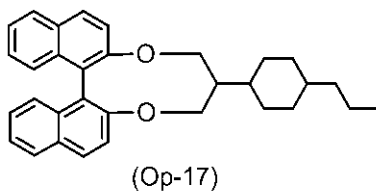
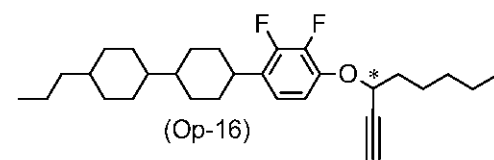
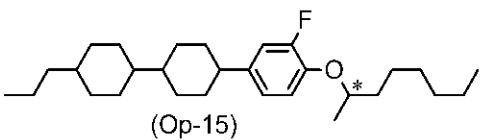
10



20



30



40

## 【0105】

酸化防止剤は、大きな電圧保持率を維持するために有効である。酸化防止剤の好ましい例として、下記の化合物（AO-1）および（AO-2）；Irganox 415、Irganox 50

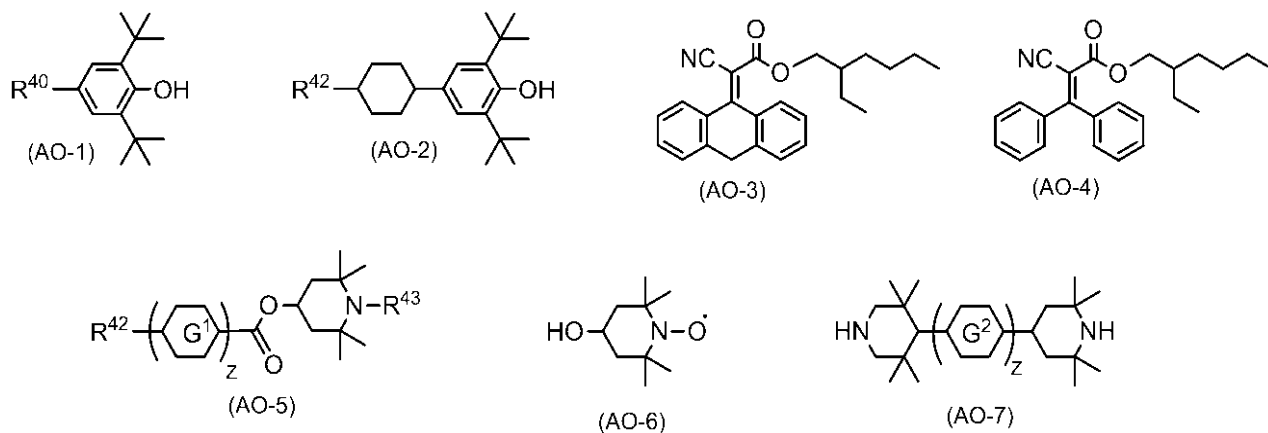
50

ganox 565、Irganox 1010、Irganox 1035、Irganox 3114、および Irganox 1098（商品名；BASF社）を挙げることができる。紫外線吸収剤は、上限温度の低下を防ぐために有効である。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り、具体例として下記の化合物（AO-3）および（AO-4）；Tinuvin 329、Tinuvin P、Tinuvin 326、Tinuvin 234、Tinuvin 213、Tinuvin 400、Tinuvin 328、および Tinuvin 99-2（商品名；BASF社）；および 1, 4-ジアザビシクロ[2. 2. 2]オクタン（DABCO）を挙げることができる。

#### 【0106】

立体障害のあるアミンのような光安定剤は、大きな電圧保持率を維持するために好ましい。光安定剤の好ましい例として、下記の化合物（AO-5）、（AO-6）、および（AO-7）；Tinuvin 144、Tinuvin 765、および Tinuvin 770df（商品名；BASF社）；LA-77Yおよび LA-77G（商品名；ADEKA社）を挙げることができる。熱安定剤も大きな電圧保持率を維持するために有効であり、好ましい例として Irgafos 168（商品名；BASF社）を挙げることができる。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）が組成物に添加される。消泡剤は、泡立ちを防ぐために有効である。消泡剤の好ましい例は、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である。

#### 【0107】



#### 【0108】

化合物（AO-1）において、R<sup>40</sup>は炭素数1から20のアルキル、炭素数1から20のアルコキシ、-COOR<sup>41</sup>、または-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COOR<sup>41</sup>であり、ここでR<sup>41</sup>は炭素数1から20のアルキルである。化合物（AO-2）および（AO-5）において、R<sup>42</sup>は炭素数1から20のアルキルである。化合物（AO-5）において、R<sup>43</sup>は水素、メチルまたはO<sup>•</sup>（酸素ラジカル）であり；環G<sup>1</sup>は1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンであり；化合物（AO-7）において、環G<sup>2</sup>は1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、または少なくとも1つの水素がフッ素で置き換えられた1, 4-フェニレンであり；化合物（AO-5）および（AO-7）において、zは、1、2、または3である。

#### 【0109】

#### 4. 液晶表示素子

液晶組成物は、PC、TN、STN、OCB、PSAなどの動作モードを有し、アクティブマトリックスで駆動する液晶表示素子に使用できる。この組成物は、PC、TN、STN、OCB、VA、IPSなどの動作モードを有し、パッシブマトリックス方式で駆動する液晶表示素子にも使用することができる。これらの素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。

## 【0110】

この組成物は、N C A P (nematic curvilinear aligned phase) 素子にも適しており、ここでは組成物がマイクロカプセル化されている。この組成物は、ポリマー分散型液晶表示素子 (P D L C D) や、ポリマーネットワーク液晶表示素子 (P N L C D) にも使用できる。これらの組成物においては、多量の重合性化合物が添加される。一方、重合性化合物の添加量が液晶組成物の重量に基づいて10重量%以下であるとき、P S A モードの液晶表示素子が作製される。重合性化合物の好ましい割合は0.1重量%から2重量%の範囲である。さらに好ましい割合は、0.2重量%から1.0重量%の範囲である。P S A モードの素子は、アクティブマトリックス、パッシブマトリックスのような駆動方式で駆動させることができる。このような素子は、反射型、透過型、半透過型のいずれのタイプにも適用ができる。

10

## 【実施例】

## 【0111】

実施例（合成例、使用例を含む）により本発明をさらに詳しく説明する。本発明はこれらの実施例によっては制限されない。本発明は、使用例1の組成物と使用例2の組成物との混合物を含む。本発明は、使用例の組成物の少なくとも2つを混合することによって調製した組成物をも含む。

## 【0112】

## 1. 化合物(1)の実施例

化合物(1)は、下記の手順により合成した。合成した化合物は、NMR分析などの方法により同定した。化合物や組成物の物性、および素子の特性は、下記の方法により測定した。

20

## 【0113】

NMR分析：測定には、ブルカーバイオスピン社製のD R X - 5 0 0を用いた。<sup>1</sup>H-NMRの測定では、試料をC D C l<sub>3</sub>などの重水素化溶媒に溶解させ、室温、500MHz、積算回数16回の条件で測定した。テトラメチルシランを内部標準として用いた。<sup>19</sup>F-NMRの測定では、C F C l<sub>3</sub>を内部標準として用い、積算回数24回で行った。核磁気共鳴スペクトルの説明において、sはシングレット、dはダブルット、tはトリプレット、qはカルテット、q u i nはクインテット、s e xはセクステット、mはマルチプレット、b rはブロードであることを意味する。

30

## 【0114】

ガスクロマト分析：測定には、島津製作所製のG C - 2 0 1 0型ガスクロマトグラフを用いた。カラムは、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリカラムD B - 1（長さ60m、内径0.25mm、膜厚0.25μm）を用いた。キャリアーガスとしてはヘリウム（1ml/分）を用いた。試料気化室の温度を300℃、検出器（F I D）部分の温度を300℃に設定した。試料はアセトンに溶解して、1重量%の溶液となるように調製し、得られた溶液1μlを試料気化室に注入した。記録計には島津製作所製のG C S o l u t i o nシステムなどを用いた。

## 【0115】

H P L C分析：測定には、島津製作所製のP r o m i n e n c e（L C - 2 0 A D ; S P D - 2 0 A）を用いた。カラムはワイエムシー製のY M C - P a c k O D S - A（長さ150mm、内径4.6mm、粒子径5μm）を用いた。溶出液はアセトニトリルと水を適宜混合して用いた。検出器としてはU V検出器、R I検出器、C O R O N A検出器などを適宜用いた。U V検出器を用いた場合、検出波長は254nmとした。試料はアセトニトリルに溶解して、0.1重量%の溶液となるように調製し、この溶液1μLを試料室に導入した。記録計としては島津製作所製のC - R 7 A p l u sを用いた。

40

## 【0116】

紫外可視分光分析：測定には、島津製作所製のP h a r m a S p e c U V - 1 7 0 0を用いた。検出波長は190nmから700nmとした。試料はアセトニトリルに溶解して、0.01mmol/Lの溶液となるように調製し、石英セル（光路長1cm）に入れて

50

測定した。

#### 【0117】

測定試料：相構造および転移温度（透明点、融点、重合開始温度など）を測定するときには、化合物そのものを試料として用いた。ネマチック相の上限温度、粘度、光学異方性、誘電率異方性などの物性を測定するときには、化合物と母液晶との混合物を試料として用いた。

#### 【0118】

化合物を母液晶と混合した試料を用いた場合は、次のように測定した。化合物 15 重量%と母液晶 85 重量%とを混合して試料を調製した。この試料の測定値から、次の式で表される外挿法にしたがって、外挿値を計算し、この値を記載した。〈外挿値〉＝（100 × 〈試料の測定値〉－〈母液晶の重量%〉×〈母液晶の測定値〉）／〈化合物の重量%〉

10

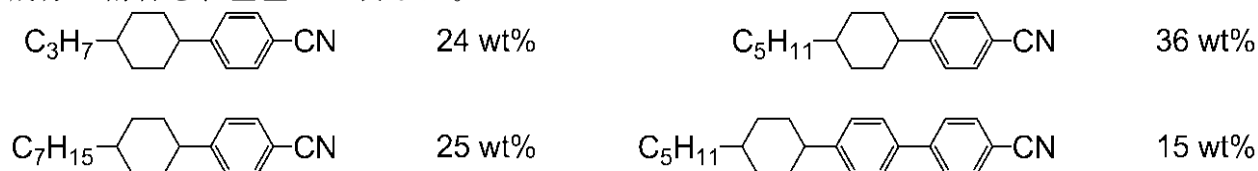
#### 【0119】

化合物と母液晶との割合がこの割合であっても、結晶（または、スメクチック相）が 25℃で析出する場合には、化合物と母液晶との割合を 10 重量%：90 重量%、5 重量%：95 重量%、1 重量%：99 重量%の順に変更をしていき、結晶（または、スメクチック相）が 25℃で析出しなくなった割合で試料の物性を測定した。なお、特に断りのない限り、化合物と母液晶との割合は、15 重量%：85 重量%である。

#### 【0120】

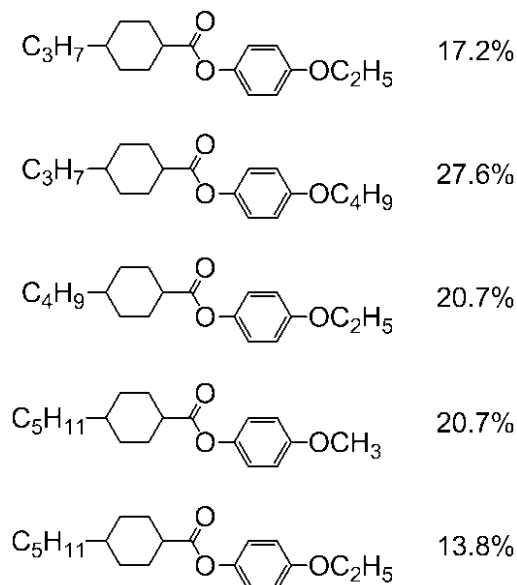
化合物の誘電率異方性がゼロまたは正であるときは、下記の母液晶（A）を用いた。各成分の割合を、重量%で表した。

20



#### 【0121】

化合物の誘電率異方性がゼロまたは負であるときは、下記の母液晶（B）を用いた。各成分の割合を重量%で表した。



30

40

#### 【0122】

測定方法：特性の測定は下記の方法で行った。これらの多くは、社団法人電子情報技術産業協会（JEITA；Japan Electronics and Information Technology Industries Association）で審議制定される JEITA 規格（JEITA・ED-2521B）に記載されている。これを修飾した方法も用いた。測定に用いた TN 素子には、薄膜トランジスター（TFT）を取り付けなかった。

50

## 【0123】

(1) 相構造：偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレート（メトラ社FP-52型ホットステージ）に試料を置いた。この試料を、 $3^{\circ}\text{C}/\text{分}$ の速度で加熱しながら相状態とその変化を偏光顕微鏡で観察し、相の種類を特定した。

## 【0124】

(2) 転移温度（ $^{\circ}\text{C}$ ）：測定には、パーキンエルマー社製の走査熱量計、Diamond DSCシステムまたはエスアイアイ・ナノテクノロジー社製の高感度示差走査熱量計、X-DSC7000を用いた。試料は、 $3^{\circ}\text{C}/\text{分}$ の速度で昇降温し、試料の相変化に伴う吸熱ピークまたは発熱ピークの開始点を外挿により求め、転移温度を決定した。化合物の融点、重合開始温度もこの装置を使って測定した。化合物が固体からスメクチック相、ネマチック相などの液晶相に転移する温度を「液晶相の下限温度」と略すことがある。化合物が液晶相から液体に転移する温度を「透明点」と略すことがある。

10

## 【0125】

結晶はCと表した。結晶の種類の区別がつく場合は、それぞれを $C_1$ または $C_2$ と表した。スメクチック相はS、ネマチック相はNと表した。スメクチック相の中で、スメクチックA相、スメクチックB相、スメクチックC相、またはスメクチックF相の区別がつく場合は、それぞれ $S_A$ 、 $S_B$ 、 $S_C$ 、または $S_F$ と表した。液体（アイソトロピック）はIと表した。転移温度は、例えば、「 $C_{50.0}N_{100.0}I$ 」のように表記した。これは、結晶からネマチック相への転移温度が $50.0^{\circ}\text{C}$ であり、ネマチック相から液体への転移温度が $100.0^{\circ}\text{C}$ であることを示す。

20

## 【0126】

(3) 化合物の相溶性：類似の構造を有する幾つかの化合物を混合してネマチック相を有する母液晶を調製した。この母液晶に測定する化合物を添加した。混合する割合の一例は、15%の化合物と85%の母液晶である。この組成物を $-20^{\circ}\text{C}$ 、 $-30^{\circ}\text{C}$ のような低い温度で30日間保管した。この組成物の一部が結晶（またはスメクチック相）に変化したか否かを観察した。必要に応じて混合する割合と保管温度とを変更した。このようにして測定した結果から、結晶（またはスメクチック相）が析出する条件および結晶（またはスメクチック相）が析出しない条件を求めた。これらの条件が相溶性の尺度である。

## 【0127】

(4) ネマチック相の上限温度（ $T_{NI}$ または $NI$ ； $^{\circ}\text{C}$ ）：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。試料が化合物(1)と母液晶との混合物であるときは、 $T_{NI}$ の記号で示した。試料が化合物(1)と成分(b)、(c)、(d)のような化合物との混合物であるときは、 $NI$ の記号で示した。ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。

30

## 【0128】

(5) 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、 $0^{\circ}\text{C}$ 、 $-10^{\circ}\text{C}$ 、 $-20^{\circ}\text{C}$ 、 $-30^{\circ}\text{C}$ 、および $-40^{\circ}\text{C}$ 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 $-20^{\circ}\text{C}$ ではネマチック相のままであり、 $-30^{\circ}\text{C}$ では結晶またはスメクチック相に変化したとき、 $T_C$ を $<-20^{\circ}\text{C}$ 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。

40

## 【0129】

(6) 粘度（バルク粘度； $\eta$ ； $20^{\circ}\text{C}$ で測定； $\text{mPa}\cdot\text{s}$ ）：測定には、東京計器株式会社製のE型回転粘度計を用いた。

## 【0130】

(7) 光学異方性（屈折率異方性； $25^{\circ}\text{C}$ で測定； $\Delta n$ ）：測定は、波長 $589\text{nm}$ の光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアップ屈折計により行なった。主プリズムの表面を一方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（ $\Delta n$ ）の値は、 $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$ 、の

50

式から計算した。

【0131】

(8) 比抵抗 ( $\rho$ ; 25℃で測定;  $\Omega \cdot \text{cm}$ ): 電極を備えた容器に試料 1.0 mL を注入した。この容器に直流電圧 (10 V) 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)  $\times$  (容器の電気容量) } / { (直流電流)  $\times$  (真空の誘電率) }。

【0132】

(9) 電圧保持率 (VHR-1; 25℃で測定; %): 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  $\mu\text{m}$  であった。この素子は試料を入れたあと紫外線で硬化する接着剤で密閉した。この素子にパルス電圧 (5 V 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った。電圧保持率は面積 B に対する面積 A の百分率で表した。

【0133】

(10) 電圧保持率 (VHR-2; 80℃で測定; %): 25℃の代わりに、80℃で測定した以外は、上記の方法で電圧保持率を測定した。得られた結果を VHR-2 の記号で示した。

【0134】

誘電率異方性が正の試料と負の試料とでは、特性の測定法が異なることがある。誘電率異方性が正であるときの測定法は、測定 (11a) から測定 (15a) に記載した。誘電率異方性が負の場合は、測定 (11b) から測定 (15b) に記載した。

【0135】

(11a) 粘度 (回転粘度;  $\gamma_1$ ; 25℃で測定;  $\text{mPa} \cdot \text{s}$ )

正の誘電率異方性: 測定は、M. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。ツイスト角が 0 度であり、そして 2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 5  $\mu\text{m}$  である TN 素子に試料を入れた。この素子に 16 V から 19.5 V の範囲で 0.5 V 毎に段階的に印加した。0.2 秒の無印加のあと、ただ 1 つの矩形波 (矩形パルス; 0.2 秒) と無印加 (2 秒) の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流 (transient current) のピーク電流 (peak current) とピーク時間 (peak time) を測定した。これらの測定値と M. Imai らの論文、40 頁の計算式 (8) とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性の値は、この回転粘度を測定した素子を用い、下に記載した方法で求めた。

【0136】

(11b) 粘度 (回転粘度;  $\gamma_1$ ; 25℃で測定;  $\text{mPa} \cdot \text{s}$ )

負の誘電率異方性: 測定は、M. Imai et al., Molecular Crystals and Liquid Crystals, Vol. 259, 37 (1995) に記載された方法に従った。2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 20  $\mu\text{m}$  の VA 素子に試料を入れた。この素子に 39 ボルトから 50 ボルトの範囲で 1 ボルト毎に段階的に印加した。0.2 秒の無印加のあと、ただ 1 つの矩形波 (矩形パルス; 0.2 秒) と無印加 (2 秒) の条件で印加を繰り返した。この印加によって発生した過渡電流 (transient current) のピーク電流 (peak current) とピーク時間 (peak time) を測定した。これらの測定値と M. Imai らの論文、40 頁の計算式 (8) とから回転粘度の値を得た。この計算に必要な誘電率異方性は、下記の誘電率異方性の項で測定した値を用いた。

【0137】

(12a) 誘電率異方性 ( $\Delta \epsilon$ ; 25℃で測定)

正の誘電率異方性: 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、そしてツイスト角が 80 度である TN 素子に試料を入れた。この素子にサイン波 (10 V、1 kHz) を印加し、2 秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率 ( $\epsilon_{\parallel}$ ) を測定した。この素子にサイン波 (0.5 V、1 kHz) を印加し、2 秒後に液晶分子の短軸方向における

誘電率 ( $\epsilon \perp$ ) を測定した。誘電率異方性の値は、 $\Delta \epsilon = \epsilon \parallel - \epsilon \perp$ 、の式から計算した。

### 【0138】

(12b) 誘電率異方性 ( $\Delta \epsilon$  ; 25℃で測定)

負の誘電率異方性：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 ( $\epsilon \parallel$  および  $\epsilon \perp$ ) は次のように測定した。

1) 誘電率 ( $\epsilon \parallel$ ) 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 (0.16 mL) のエタノール (20 mL) 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℃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 (0.5 V、1 kHz) を印加し、2秒後に液晶分子の長軸方向における誘電率 ( $\epsilon \parallel$ ) を測定した。

2) 誘電率 ( $\epsilon \perp$ ) 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度であるTN素子に試料を入れた。この素子にサイン波 (0.5 V、1 kHz) を印加し、2秒後に液晶分子の短軸方向における誘電率 ( $\epsilon \perp$ ) を測定した。

### 【0139】

(13a) 弾性定数 (K ; 25℃で測定 ; pN)

正の誘電率異方性：測定には横河・ヒューレットパッカード株式会社製のHP4284 A型LCRメータを用いた。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が20  $\mu\text{m}$  である水平配向素子に試料を入れた。この素子に0ボルトから20ボルト電荷を印加し、静電容量 (C) および印加電圧 (V) を測定した。これらの値を「液晶デバイスハンドブック」 (日刊工業新聞社)、75頁にある式 (2.98)、式 (2.101) を用いてフィッティングし、式 (2.99) から  $K_{11}$  および  $K_{33}$  の値を得た。次に171頁にある式 (3.18) に、先ほど求めた  $K_{11}$  および  $K_{33}$  の値を用いて  $K_{22}$  を算出した。弾性定数 K は、このようにして求めた  $K_{11}$ 、 $K_{22}$ 、および  $K_{33}$  の平均値で表した。

### 【0140】

(13b) 弾性定数 ( $K_{11}$  および  $K_{33}$  ; 25℃で測定 ; pN)

負の誘電率異方性：測定には株式会社東陽テクニカ製のEC-1型弾性定数測定器を用いた。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が20  $\mu\text{m}$  である垂直配向素子に試料を入れた。この素子に20ボルトから0ボルト電荷を印加し、静電容量および印加電圧を測定した。静電容量 (C) と印加電圧 (V) の値を、「液晶デバイスハンドブック」 (日刊工業新聞社)、75頁にある式 (2.98)、式 (2.101) を用いてフィッティングし、式 (2.100) から弾性定数の値を得た。

### 【0141】

(14a) しきい値電圧 ( $V_{th}$  ; 25℃で測定 ; V)

正の誘電率異方性：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った。2枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が0.45 /  $\Delta n$  ( $\mu\text{m}$ ) であり、ツイスト角が80度であるノーマリーホワイトモード (normally white mode) のTN素子に試料を入れた。この素子に印加する電圧 (32 Hz、矩形波) は0 V から10 V まで0.02 V 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90%になったときの電圧で表した。

### 【0142】

(14b) しきい値電圧 ( $V_{th}$  ; 25℃で測定 ; V)

負の誘電率異方性：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った。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 m

ode) の V A 素子に試料を入れ、この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子に印加する電圧 (60 Hz、矩形波) は 0 V から 20 V まで 0.02 V 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表した。

#### 【0143】

(15a) 応答時間 ( $\tau$ ; 25°C で測定; ms)

正の誘電率異方性: 測定には大塚電子株式会社製の LCD 5100 型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。ローパス・フィルタ (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 5.0  $\mu\text{m}$  であり、ツイスト角が 80 度であるノーマリーホワイトモード (normally white mode) の TN 素子に試料を入れた。この素子に矩形波 (60 Hz、5 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% であるとみなした。立ち上がり時間 ( $\tau_r$ : rise time; ミリ秒) は、透過率が 90% から 10% に変化するのに要した時間である。立ち下がり時間 ( $\tau_f$ : fall time; ミリ秒) は透過率 10% から 90% に変化するのに要した時間である。応答時間は、このようにして求めた立ち上がり時間と立ち下がり時間との和で表した。

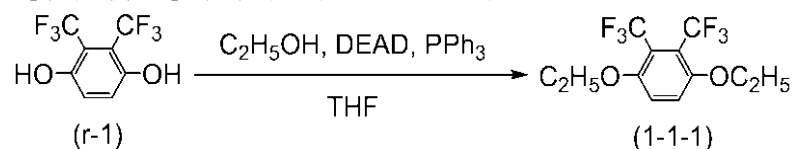
#### 【0144】

(15b) 応答時間 ( $\tau$ ; 25°C で測定; ms)

負の誘電率異方性: 測定には大塚電子株式会社製の LCD 5100 型輝度計を用いた。光源はハロゲンランプであった。ローパス・フィルタ (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 3.2  $\mu\text{m}$  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 PVA 素子に試料を入れた。この素子を紫外線で硬化する接着剤を用いて密閉した。この素子にしきい値電圧を若干超える程度の電圧を 1 分間印加し、次に 5.6 V の電圧を印加しながら 23.5 mW/cm<sup>2</sup> の紫外線を 8 分間照射した。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% であるとみなした。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) で表した。

#### 【0145】

[合成例 1] 化合物 (1-1-1)



#### 【0146】

化合物 (r-1) (10.0 g, 26.9 mmol)、エタノール (3.9 g、85.3 mmol)、トリフェニルホスフィン (25.6 g、97.5 mmol) をテトラヒドロフラン (THF; 100 mL) に溶解させ、氷浴上で冷却した。そこへ、アゾジカルボン酸エチル (DEAD; 2.2 mol/L のトルエン溶液; 44.3 mL、97.5 mmol) を滴下し、室温で終夜攪拌した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘキサン) で精製し、さらにヘプタン/エタノール = 1/3 (体積比) から再結晶して 1.2 g の化合物 (1-1-1) を得た。

#### 【0147】

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>;  $\delta$  ppm): 7.16 (s, 2H), 4.07 (q, 4H), 1.41 (t, 6H).

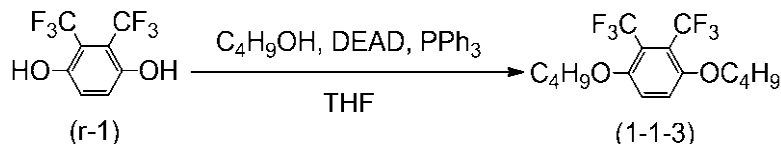
#### 【0148】

転移温度の測定には、化合物(1-1-1)をそのまま試料として用いた。上限温度( $T_{NI}$ )、誘電率異方性( $\Delta\epsilon$ )および光学異方性の測定には、化合物(1-1-1)と母液晶Bの混合物を試料として用いた。この測定法は、以下で合成した化合物にも採用した。

転移温度： $C_1$  49.9  $C_2$  68.8 I.  $T_{NI} = -116.1^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\epsilon = -9.11$ ,  $\Delta n = -0.017$ .

【0149】

[合成例2] 化合物(1-1-3)



10

【0150】

化合物(r-1) (10.0 g, 26.9 mmol)、1-ブタノール(6.3 g、85.3 mmol)、トリフェニルホスフィン(25.6 g、97.5 mmol)をTHF(100 mL)に溶解させ、氷浴上で冷却した。そこへ、DEAD(2.2 mol/Lのトルエン溶液; 44.3 mL、97.5 mmol)を滴下し、室温で終夜攪拌した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(ヘキサン)で精製し、さらにエタノールから再結晶して2.38 gの化合物(1-1-3)を得た。

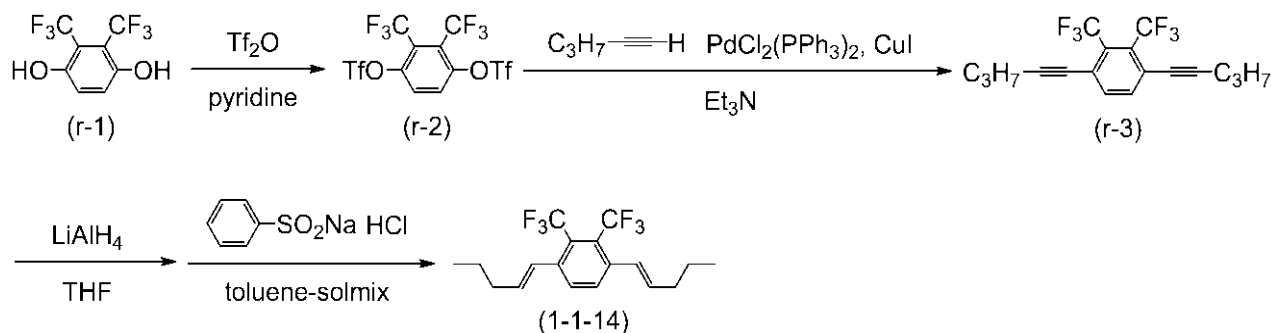
【0151】

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 7.15 (s, 2H), 3.99 (t, 4H), 1.78 (quin, 4H), 1.50 (sex, 4H), 0.97 (t, 6H).  
 転移温度： $C_1$  17.7 I.  $T_{NI} = -101.4^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\epsilon = -10.1$ ,  $\Delta n = -0.003$ .

20

【0152】

[合成例3] 化合物(1-1-14)



30

【0153】

〈第1工程〉化合物(r-2)の合成

化合物(r-1) (18.0 g, 73.1 mmol)をピリジン(100 mL)に溶解させ、氷浴上で冷却した。そこへトリフルオロメタンスルホン酸無水物(29.7 mL、175.5 mmol)を滴下し、室温で終夜攪拌した。溶媒を留去し、残渣をジエチルエーテルへ溶解させ、このエーテル溶液を2 M塩酸、飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(ヘキサン/酢酸エチル=9/1、体積比)で精製して34.9 gの化合物(r-2)を得た。

40

【0154】

〈第2工程〉化合物(r-3)の合成

化合物(r-2) (15.1 g, 29.5 mmol)、ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II) (0.202 g、0.29 mmol)、ヨウ化銅(I) (0.067 g、0.35 mmol)をトリエチルアミン(60 mL)に溶解させ、そこへ、ペント-1-イン(4.31 g、63.3 mmol)を滴下し、室温で7日間終夜攪拌した

50

。溶媒を留去し、残渣をトルエンに溶解させ、このトルエン溶液を飽和塩化アンモニウム水溶液、水、飽和食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（ヘプタン）で精製して7.80 gの化合物（r-3）を得た。

# 【0155】

〈第3工程〉化合物（1-1-14）の合成

化合物（r-3）（3.80 g, 11.0 mmol）をTHF（50 mL）へ溶解させ、そこへ水素化アルミニウムリチウム（1.25 g, 32.9 mmol）を加え、21時間加熱還流した。反応混合物を室温まで冷却した後水へ注ぎ込み、酢酸エチルで抽出した。抽出液を1 M塩酸、水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（ヘプタン）で精製した。これをアセトニトリル（8 mL）に溶解させ、ベンゼンスルフィン酸ナトリウム二水和物（0.46 g, 2.28 mmol）、6 M塩酸（0.38 mL）を加え、6時間加熱還流した。室温まで冷却した後、反応混合物をヘプタンにかけた。有機層を水、食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（ヘプタン）で精製し、さらにメタノールから再結晶して、化合物（1-1-14）を得た。

10

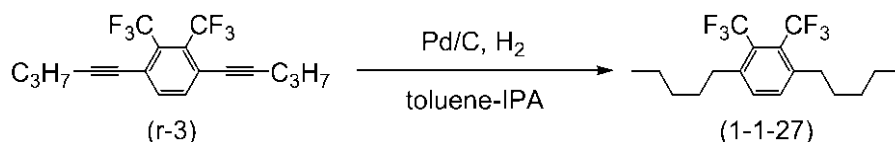
# 【0156】

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 7.56 (s, 2H)、6.68 (d, 2H)、6.09 (tt, 2H)、2.22 (q, 4H)、1.52 (sex, 4H)、0.95 (t, 6H)。転移温度:  $C_{17.8}$  I.  $T_{NI} = -116.4^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\varepsilon = -4.37$ ,  $\Delta n = 0.014$ 。

20

# 【0157】

[合成例4] 化合物（1-1-27）



# 【0158】

化合物（r-3）（3.00 g, 8.66 mmol）をトルエン（25 mL）と2-プロパノール（25 mL）に溶解させ、そこへPd/C（0.17 g）を加え、水素雰囲気下、水素を吸収しなくなるまで攪拌した。Pd/Cをろ別した後、溶媒を留去し残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（ヘプタン）で精製し、さらにメタノールから再結晶して化合物（1-1-27）を得た。

30

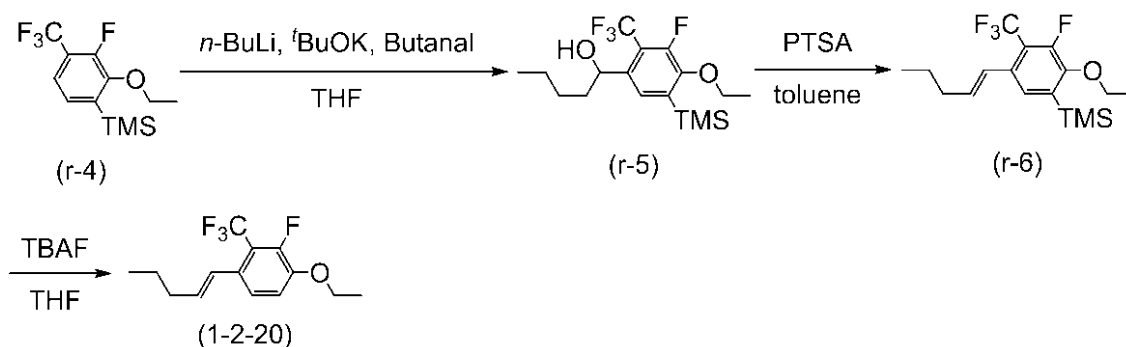
# 【0159】

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 7.36 (s, 2H)、2.75 (t, 4H)、1.62 (quin, 4H)、2.22 (q, 4H)、1.40–1.31 (m, 8H)、0.91 (t, 6H)。転移温度:  $C_{21.0}$  I.  $T_{NI} = -154.1^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\varepsilon = -2.36$ ,  $\Delta n = -0.053$ 。

# 【0160】

[合成例5] 化合物（1-2-20）

40



【 0 1 6 1 】

〈第 1 工程〉化合物 (r-5) の合成

化合物 (r-4) (10.0 g, 35.7 mmol)、t-BuOK (4.50 g, 40.1 mmol) を THF (10 mL) へ溶解させ、-78℃に冷却した後、n-BuLi (1.6 M/L のヘキサン溶液; 25.0 mL, 38.8 mmol) を滴下し、同温で 2 時間攪拌した。そこへ THF (5 mL) に溶解させた 1-ブタナール (3.37 g, 40.1 mmol) を滴下し、-78℃で 3 時間攪拌した。反応混合物を室温まで戻した後、水へ注ぎ込んだ。塩化アンモニウム水溶液で中和し、酢酸エチルで抽出した。抽出液を水、飽和食塩水で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘプタン/酢酸エチル = 9/1、体積比) で精製して 8.62 g の化合物 (r-5) を得た。

【 0 1 6 2 】

〈第 2 工程〉化合物 (r-6) の合成

化合物 (r-5) (8.62 g, 23.5 mmol) をトルエン (80 mL) に溶解させ、そこへ p-トルエンスルホン酸一水和物 (0.23 g, 1.21 mmol) を加え、発生する水を留去しながら 5 時間加熱還流をした。冷却後反応混合物を飽和重曹水へ注ぎ込んだ。有機層を水、飽和食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘプタン) で精製して 6.37 g の化合物 (r-6) を得た。

【 0 1 6 3 】

〈第 3 工程〉化合物 (1-2-20) の合成

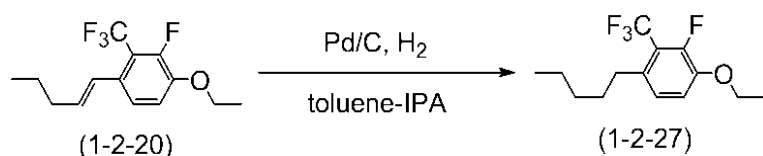
化合物 (r-6) (6.37 g, 18.2 mmol) を THF (50 mL) へ溶解させ、そこへテトラブチルアンモニウムフルオリド (1.0 M/L の THF 溶液; 19 mL, 19.0 mmol) を 10℃ 以下の温度で滴下し、室温にて 1 時間攪拌した。反応混合物を水へ注ぎ込み、トルエンで抽出した。抽出液を水、飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘプタン) で精製し、さらにメタノールから再結晶して、4.78 g の化合物 (1-2-20) を得た。

【 0 1 6 4 】

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 7.17 (d, 1H), 7.03 (t, 1H), 6.63 (d, 1H), 5.97 (tt, 1H), 4.11 (q, 2H), 2.18 (q, 2H), 1.49 (sex, 2H), 1.45 (t, 3H), 0.95 (t, 3H). 転移温度:  $C_{11.7}$ .  $T_{NI} = -144.1^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\varepsilon = -4.05$ ,  $\Delta n = -0.013$ .

【 0 1 6 5 】

[合成例 6] 化合物 (1-2-27)



## 【0166】

化合物(1-2-20)(3.61g, 13.1mmol)をトルエン(25mL)、2-プロパノール(25mL)に溶解させ、そこへPd/C(0.14g)を加え、水素雰囲気下、水素を吸収しなくなるまで攪拌した。Pd/Cをろ別した後、溶媒を留去した。残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(ヘプタン/トルエン=9/1、体積比)で精製し、さらにメタノールから再結晶して2.47gの化合物(1-2-27)を得た。

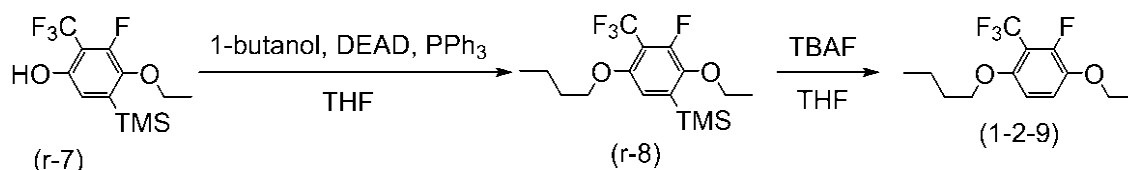
10

## 【0167】

$^1\text{H-NMR}$ ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 7.02(t, 1H), 6.94(d, 1H), 4.08(q, 2H), 2.69(td, 2H), 1.55(quin, 2H), 1.44(t, 3H), 1.35-1.29(m, 4H), 0.89(t, 3H).  
転移温度:  $C_{8.9}$ .  $T_{NI} = -166.1^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\epsilon = -2.78$ ,  $\Delta n = -0.066$ .

## 【0168】

[合成例7] 化合物(1-2-9)



20

## 【0169】

<第1工程> 化合物(r-8)の合成

化合物(r-7)(6.64g, 22.4mmol)、1-ブタノール(1.84g, 24.8mmol)、トリフェニルホスフィン(6.52g, 24.9mmol)をTHF(70mL)へ溶解させ、氷冷下でDEAD(2.2M/Lのヘキサン溶液; 11.2mL, 24.6mmol)を滴下し、さらに室温で2時間攪拌した。溶媒を留去した後、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(ヘプタン/トルエン=4/1、体積比)で精製して6.27gの化合物(r-8)を得た。

30

## 【0170】

<第3工程> 化合物(1-2-9)の合成

化合物(r-8)(6.27g, 17.8mmol)をTHF(50mL)へ溶解させ、そこへテトラブチルアンモニウムフルオリド(1.0M/LのTHF溶液; 18mL, 18.0mmol)を10°C以下の温度で滴下し、室温にて1時間攪拌した。反応混合物を水へ注ぎ込み、トルエンで抽出した。抽出液を水、飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。溶媒を留去し、残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(ヘプタン/トルエン=2/1、体積比)で精製し、さらにメタノールから再結晶して2.17gの化合物(1-2-9)を得た。

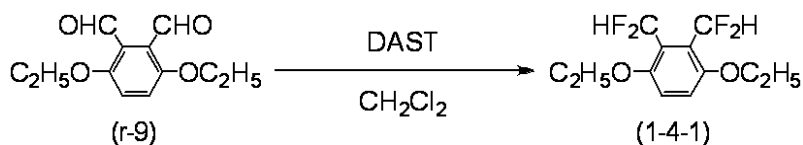
40

## 【0171】

$^1\text{H-NMR}$ ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 7.04(t, 1H), 6.64(d, 1H), 4.05(q, 2H), 3.96(t, 2H), 1.77(q, 2H), 1.49(sex, 2H), 1.42(t, 3H), 0.96(t, 3H). 転移温度:  $C_{9.2}$ .  $T_{NI} = -137.4^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\epsilon = -6.58$ ,  $\Delta n = -0.026$ .

## 【0172】

[合成例8] 化合物(1-4-1)



【0173】

化合物 (r-9) (5.00 g, 22.5 mmol) をジクロロメタン (20 mL) に溶解させ、そこへ氷冷下ジエチルアミノサルファトリフルオリド (DAST) (6.2 mL; 7.6 g) を加え、室温で終夜攪拌した。飽和炭酸ナトリウム水溶液へ反応溶液を注ぎ込みジクロロメタンで抽出後、油層を飽和炭酸ナトリウム水溶液で洗浄後無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒を留去し残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘプタン) で精製し、さらにメタノールから再結晶して化合物 (1-4-1) を得た。

10

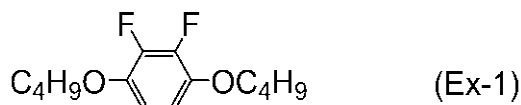
【0174】

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 7.02 (s, 2H), 6.44 (t, 2H), 4.07 (q, 4H), 1.41 (t, 6H).  $\Delta\epsilon = -8.55$ .

【0175】

[比較例1]

比較のために、国際公開第2011/098224号の実施例1に開示された化合物 (Ex-1) を選んで合成した。



20

【0176】

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ;  $\delta$  ppm): 6.62 (dd, 2H), 3.98 (t, 4H), 1.77 (quin, 4H), 1.49 (sex, 4H), 0.97 (t, 6H). 転移温度: C -8.2 I.  $T_{NI} = -124.1^\circ\text{C}$ ,  $\Delta\epsilon = -5.88$ ,  $\Delta n = -0.014$ .

【0177】

ベンゼン環上における2位と3位の置換基以外同一構造を有する比較化合物 (Ex-1) と化合物 (1-1-3) の物性を、「測定方法」の項で記載したように、同一の条件下で測定した。結果を下の表1にまとめた。2つの化合物は融点を有したが、ネマチック相を示さなかった。化合物 (1-1-3) の誘電率異方性は、比較化合物 (Ex-1) の約1.7倍であり、上限温度は23度高いことが分かった。したがって、化合物 (1-1-3) は、比較化合物 (Ex-1) に比べ、上限温度や誘電率異方性の観点から有用であると結論できる。

30

【0178】

表1. 物性の比較

|                            | 合成例2の化合物(1-1-3) | 比較例1の化合物(Ex-1) |
|----------------------------|-----------------|----------------|
| 構造式                        |                 |                |
| 転移温度                       | C 17.7 I        | C -8.2 I       |
| 上限温度( $T_{NI}$ )           | -101.4°C        | -124.1°C       |
| 誘電率異方性( $\Delta\epsilon$ ) | -10.1           | -5.9           |
| 光学異方性( $\Delta n$ )        | -0.003          | -0.014         |

40

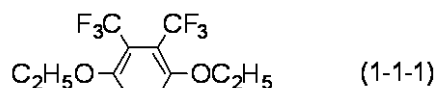
注) 光学異方性は、マイナスの値であった。これは、外挿法に起因する。

【0179】

50

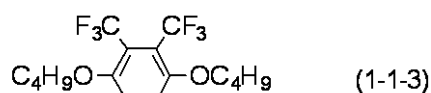
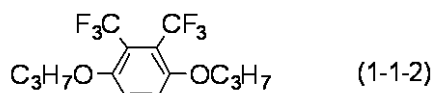
合成例 1 などに記載された方法や、「2. 化合物 (1) の合成」の項を参考にしながら、以下に示す化合物を合成することが可能である。

【0180】



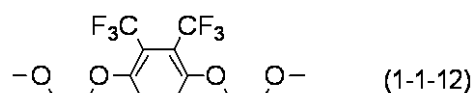
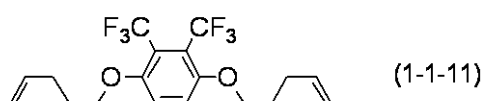
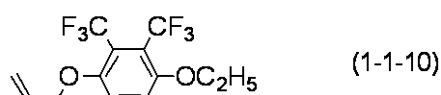
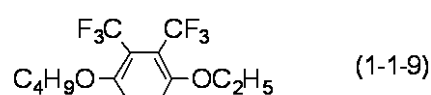
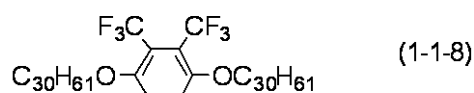
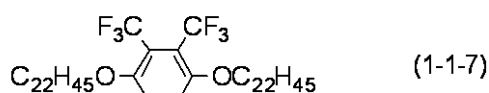
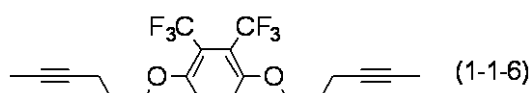
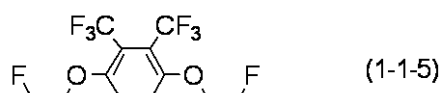
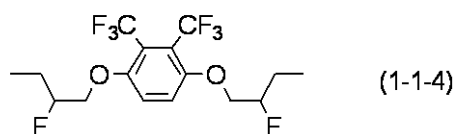
**C<sub>1</sub> 49.9 C<sub>2</sub> 68.8 I (°C)**

**T<sub>NI</sub>: -116.1°C Δε: -9.11 Δn: -0.017**

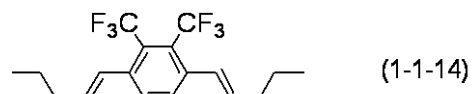
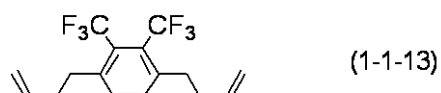


**C 17.7 I (°C)**

**T<sub>NI</sub>: -101.4°C Δε: -10.1 Δn: -0.003**

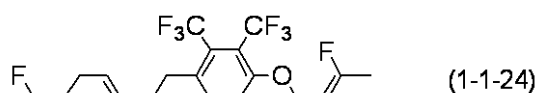
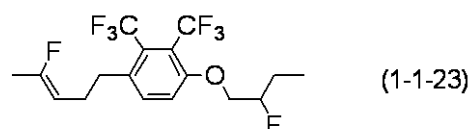
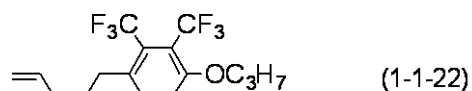
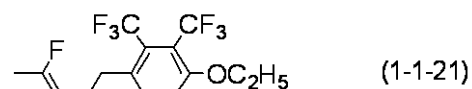
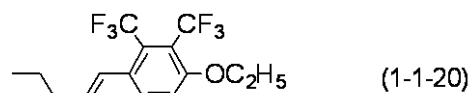
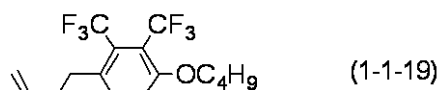
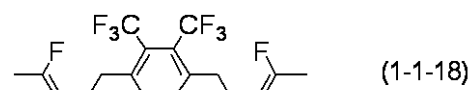
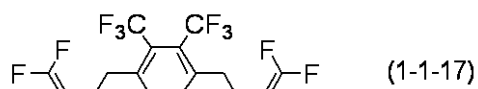
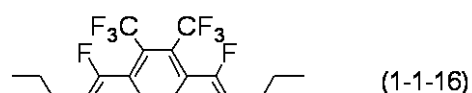
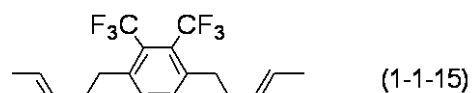


【0181】



**C 17.8 I (°C)**

**T<sub>NI</sub>: -116.4°C Δε: -4.37 Δn: 0.014**

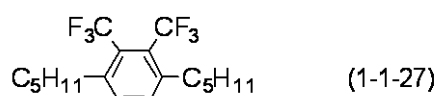
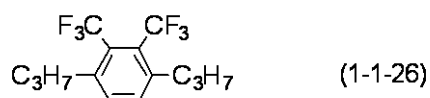
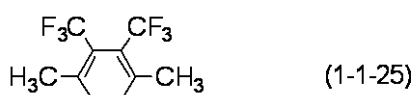


10

20

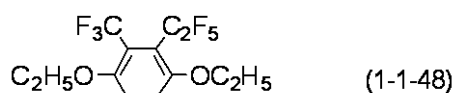
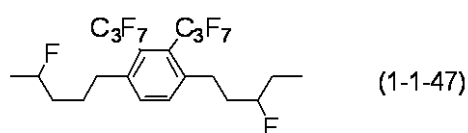
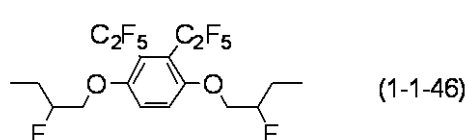
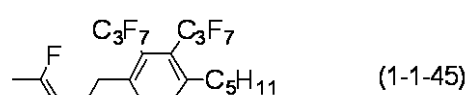
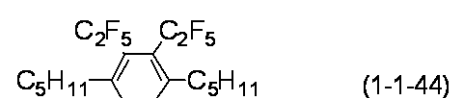
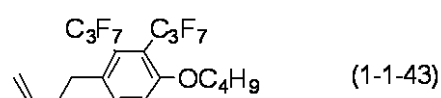
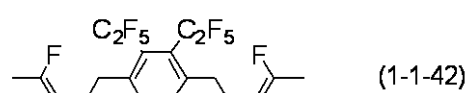
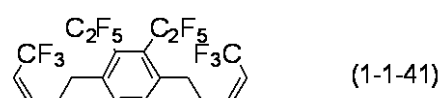
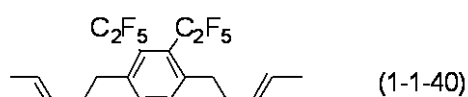
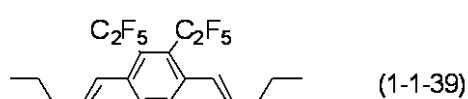
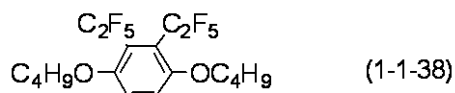
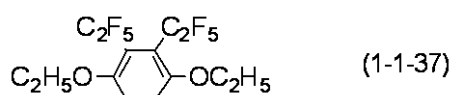
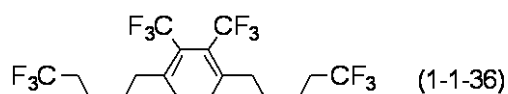
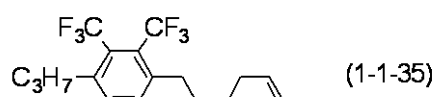
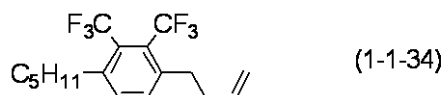
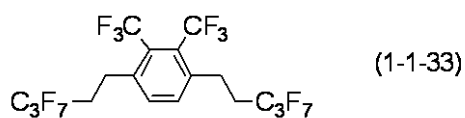
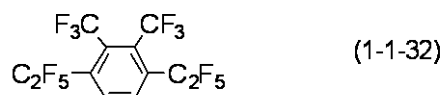
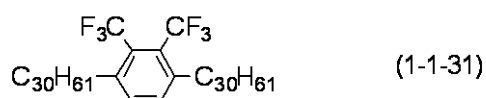
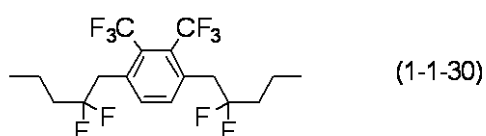
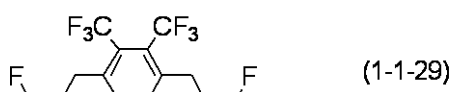
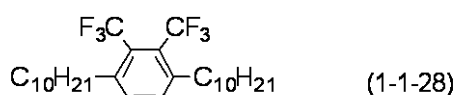
30

40



**C 21.01 (°C)**

**T<sub>NI</sub> : -154.1°C Δε : -2.36 Δn : -0.053**



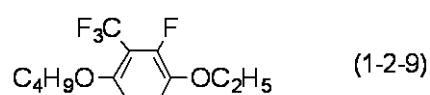
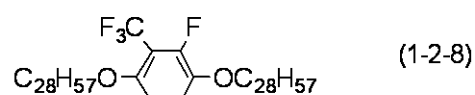
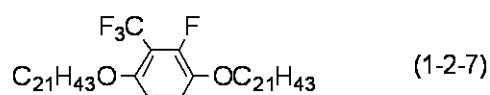
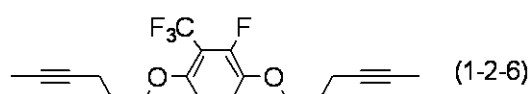
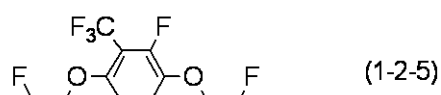
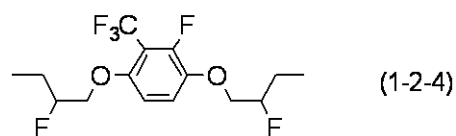
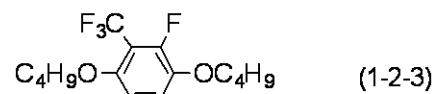
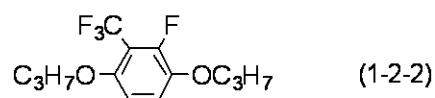
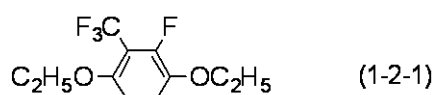
10

20

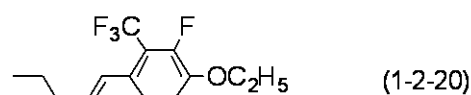
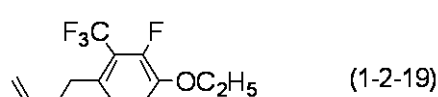
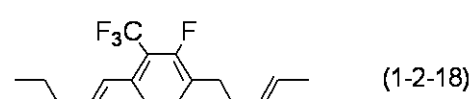
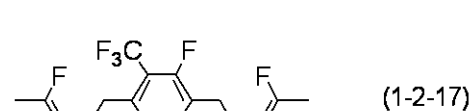
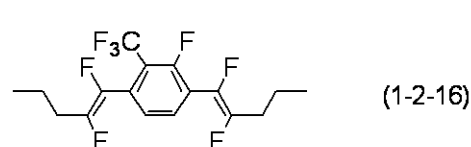
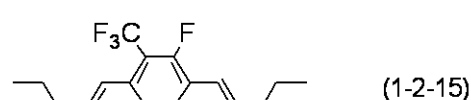
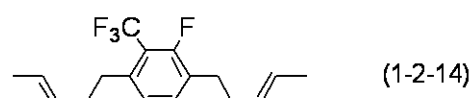
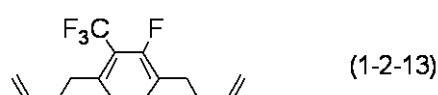
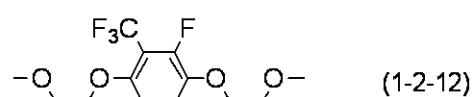
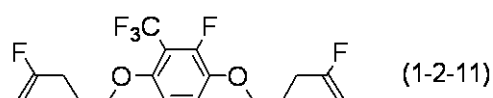
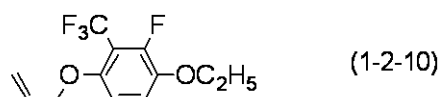
30

40

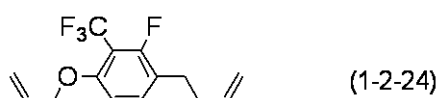
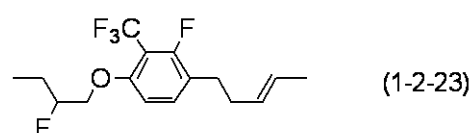
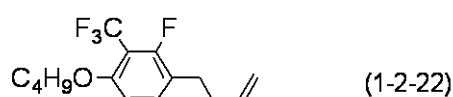
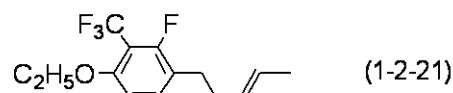
【 0 1 8 2 】

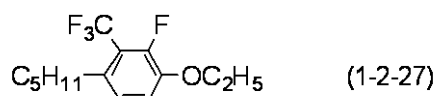
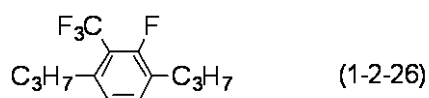
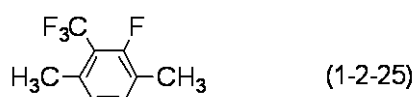


**C 9.21 (°C)**  
 $T_{NI} : -137.4^{\circ}\text{C} \Delta\epsilon : -6.58 \Delta n : -0.026$



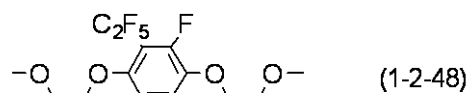
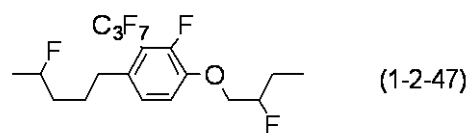
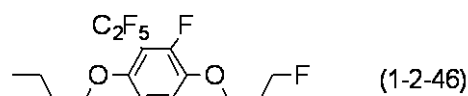
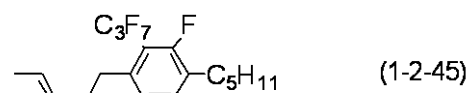
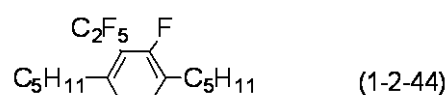
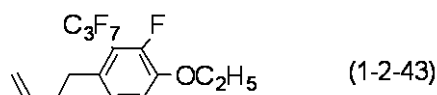
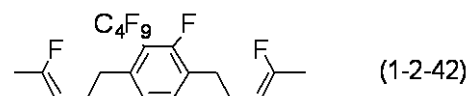
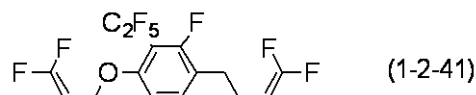
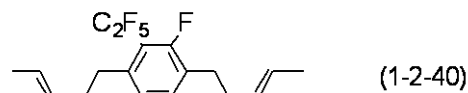
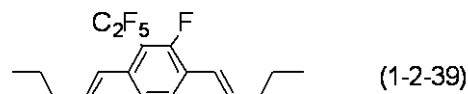
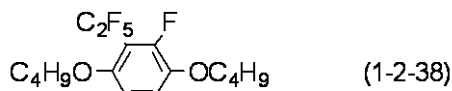
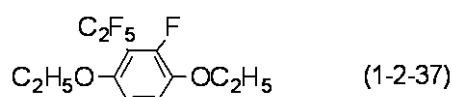
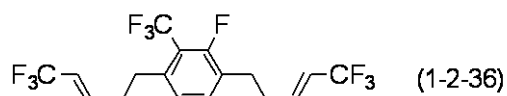
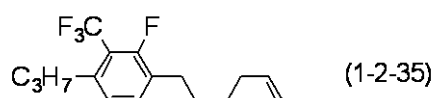
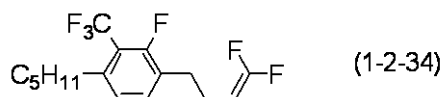
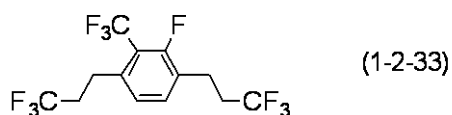
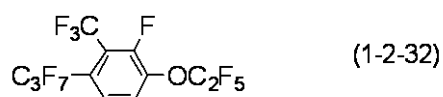
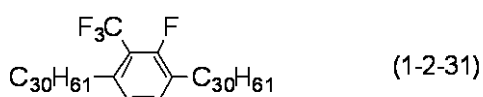
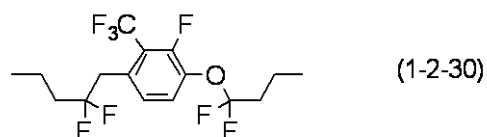
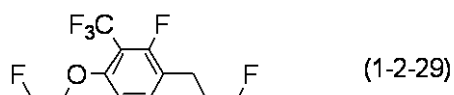
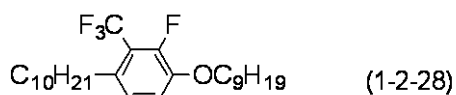
**C 11.71 (°C)**  
 $T_{NI} : -144.1^{\circ}\text{C} \Delta\epsilon : -4.05 \Delta n : -0.013$





**C 8.9 I (°C)**

**T<sub>NI</sub> : -166.1°C Δε : -2.78 Δn : -0.066**

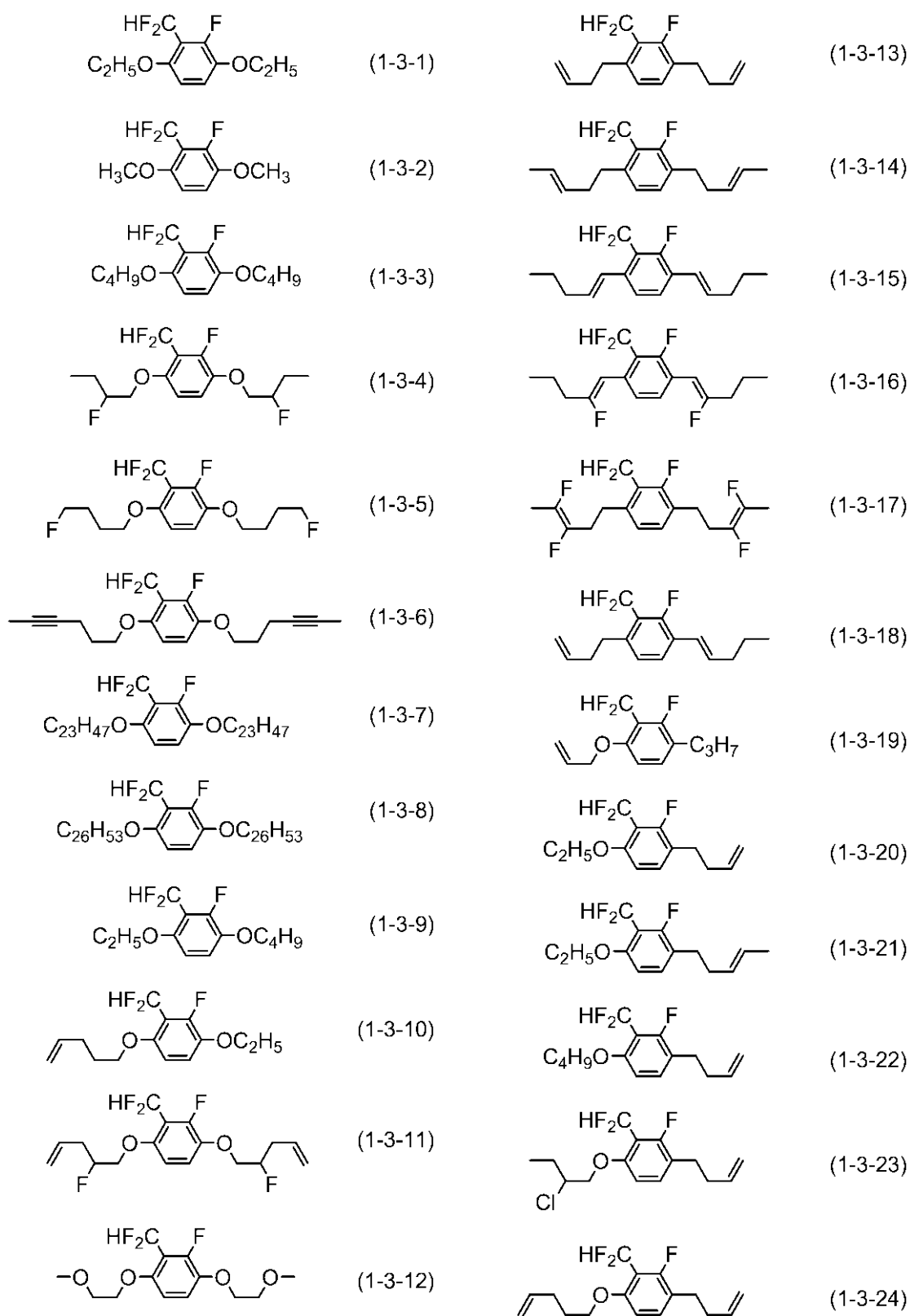


10

20

30

40

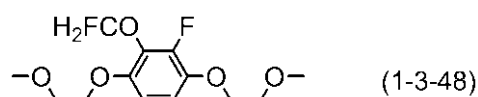
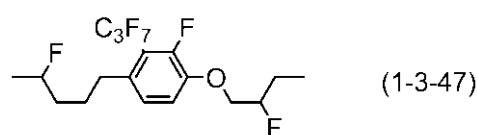
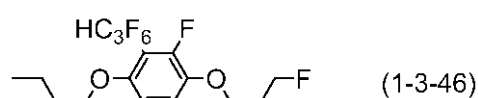
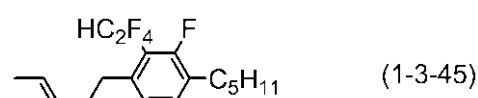
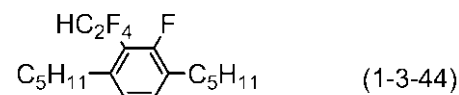
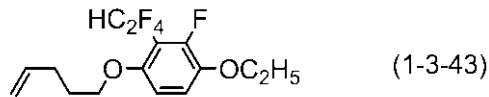
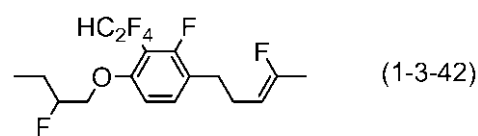
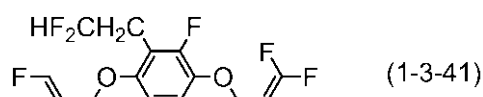
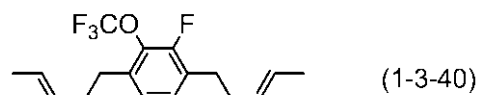
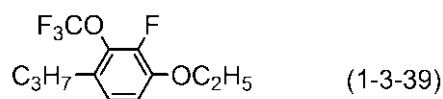
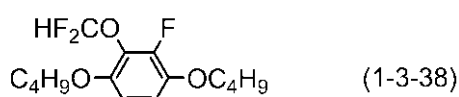
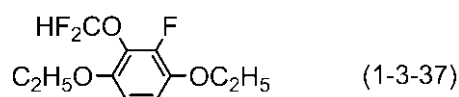
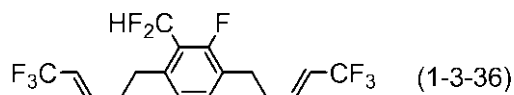
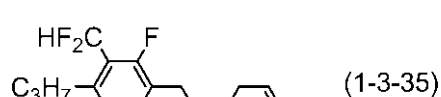
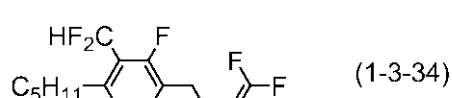
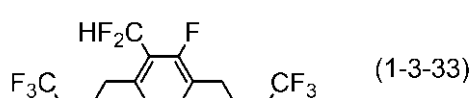
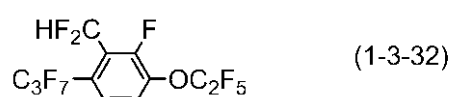
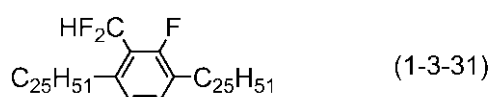
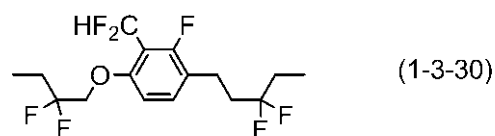
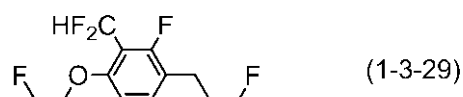
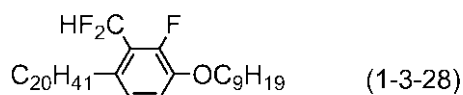
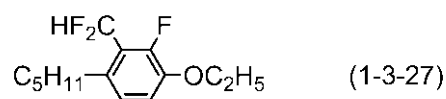
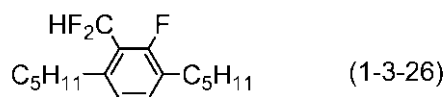
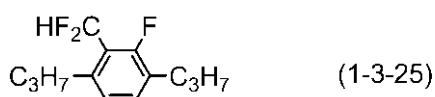


10

20

30

40



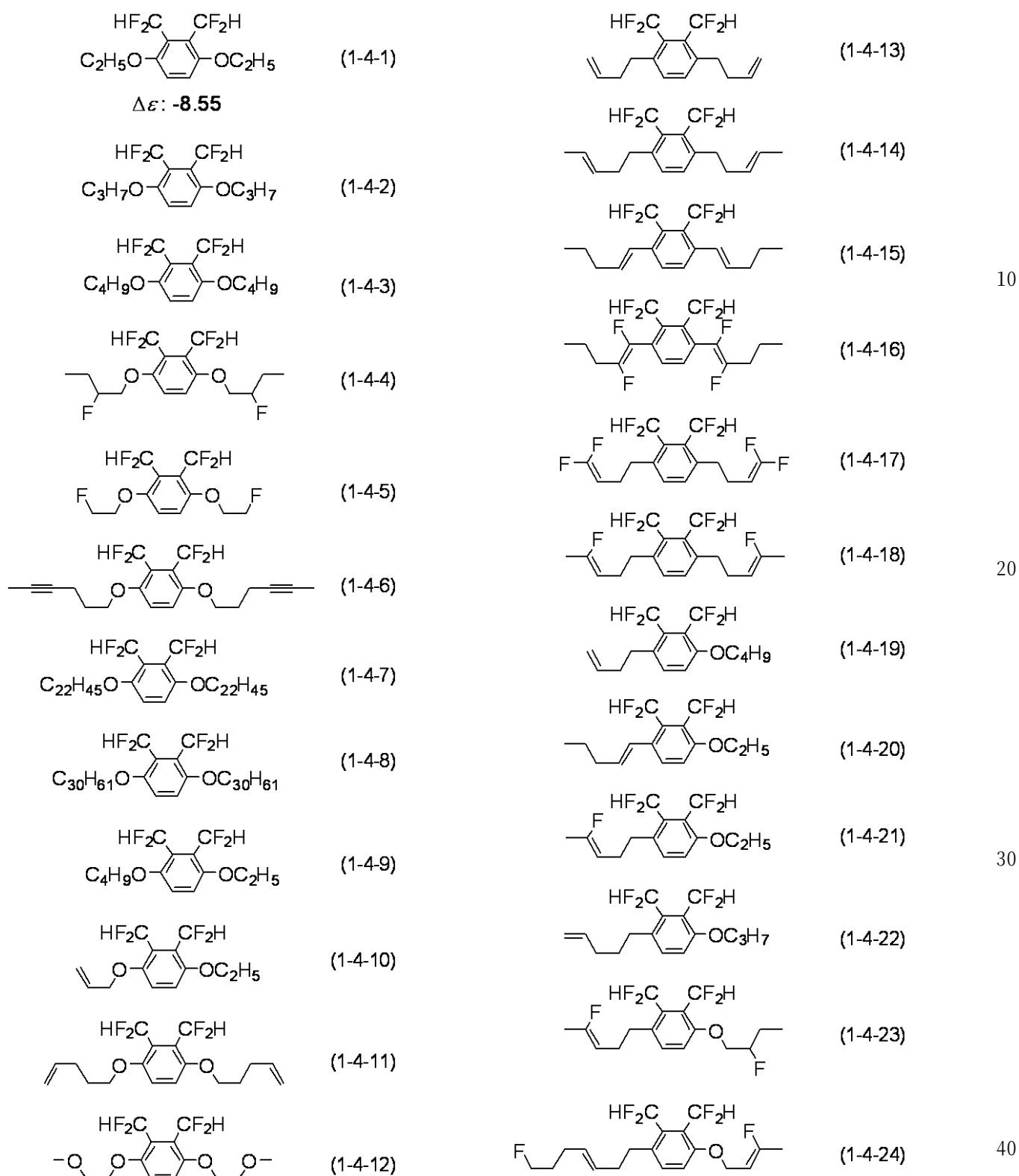
10

20

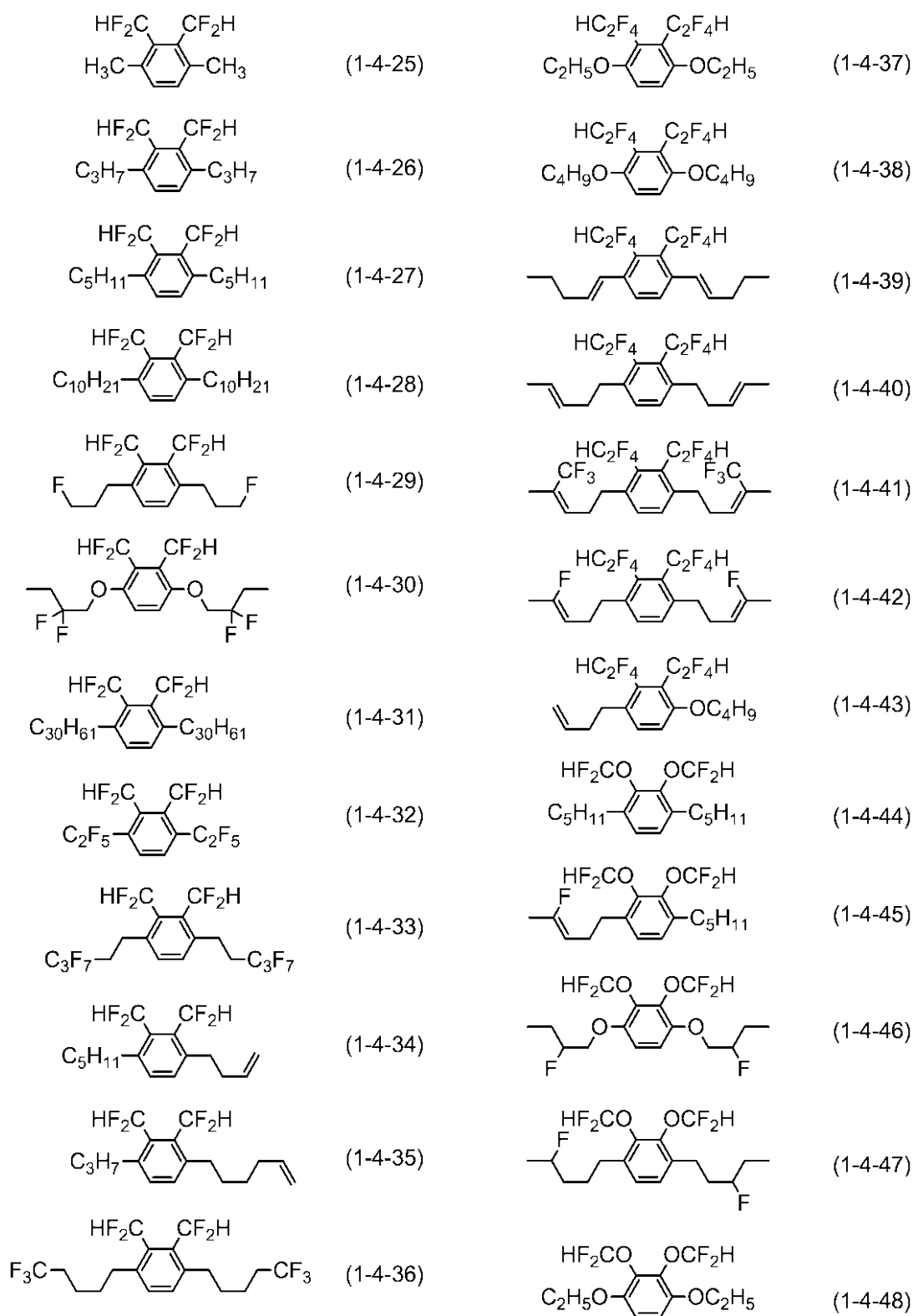
30

40

【 0 1 8 6 】



【 0 1 8 7 】



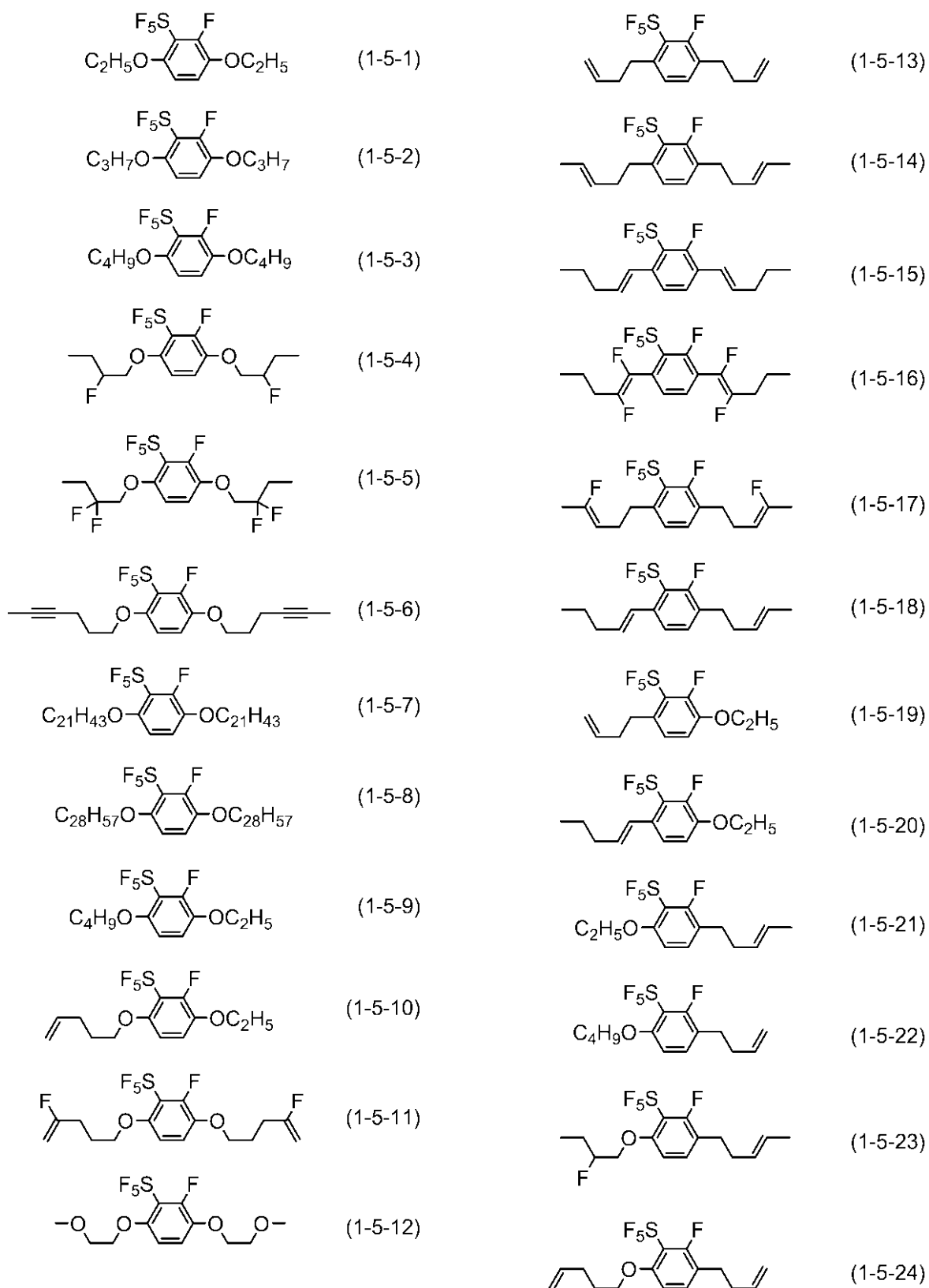
10

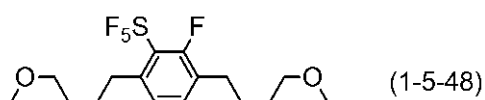
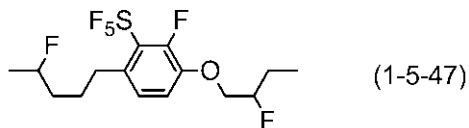
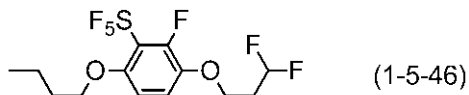
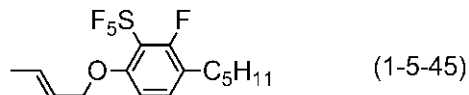
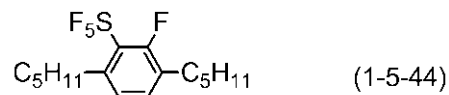
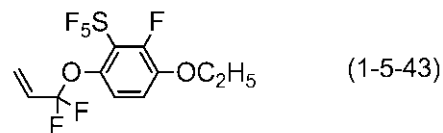
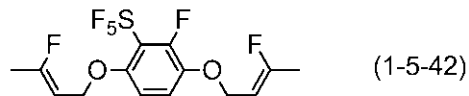
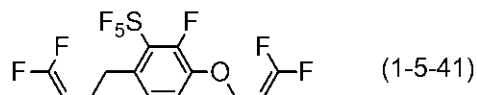
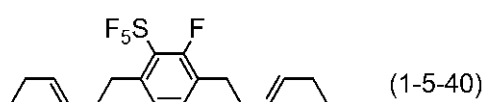
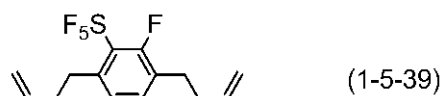
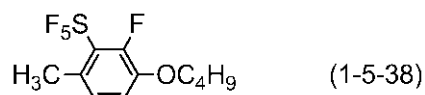
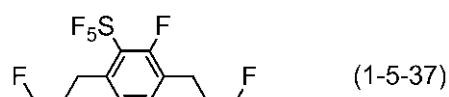
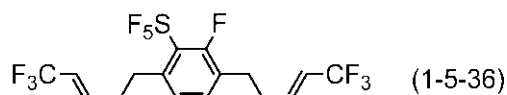
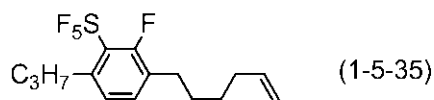
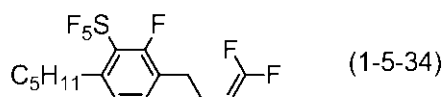
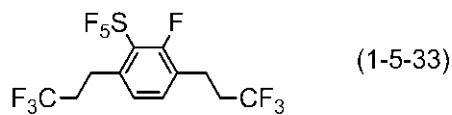
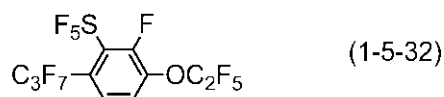
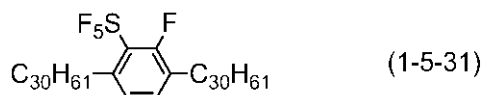
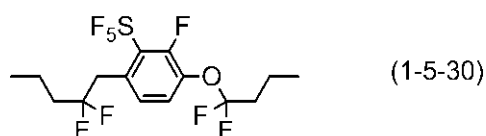
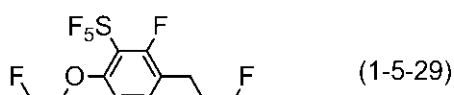
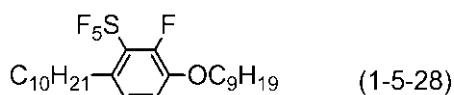
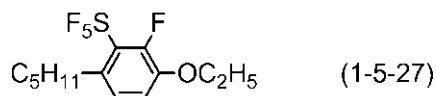
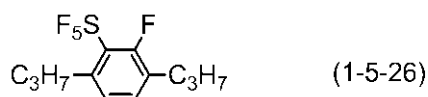
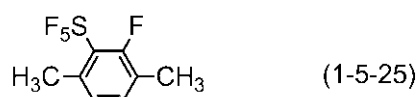
20

30

40

【 0 1 8 8 】





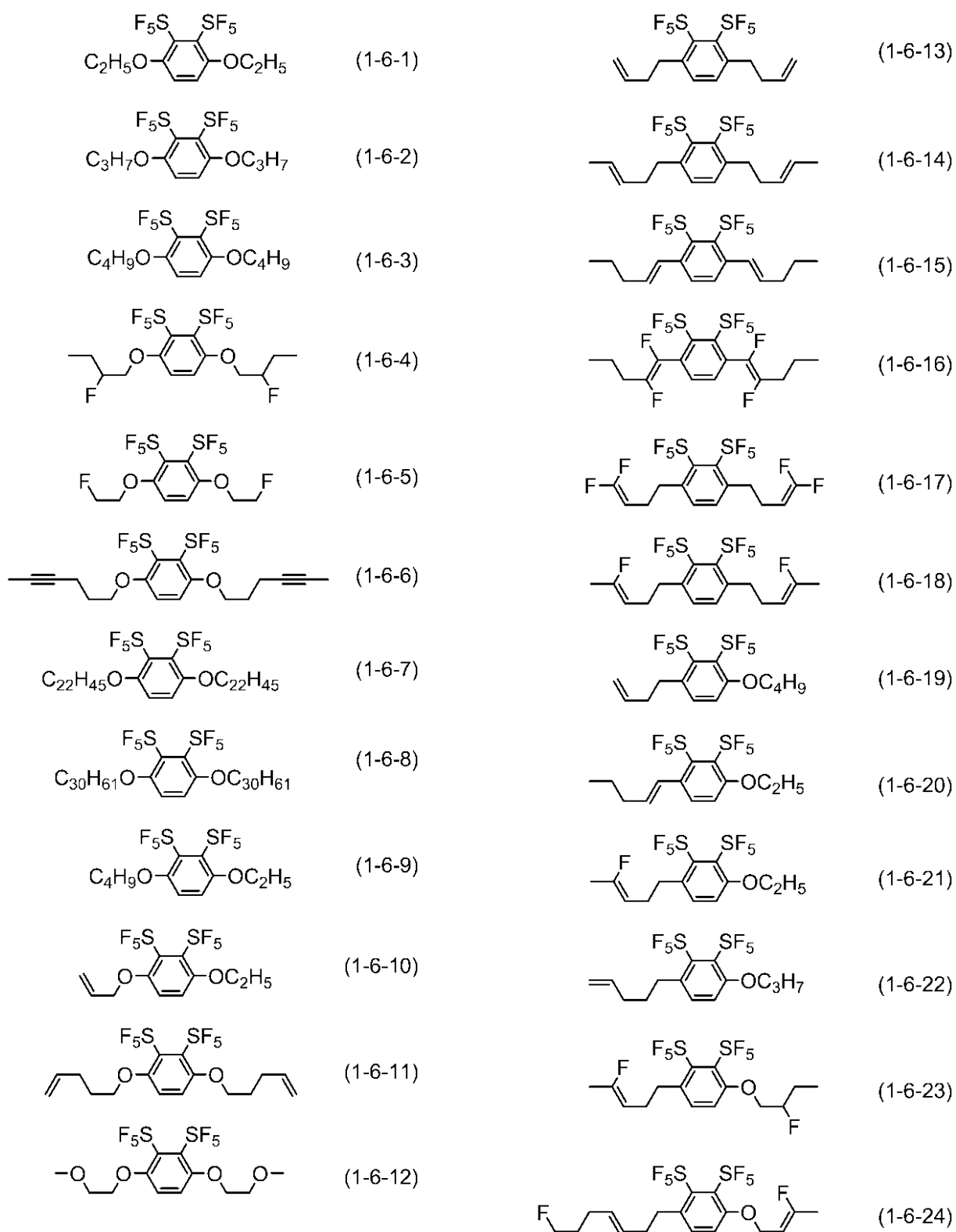
10

20

30

40

【 0 1 9 0 】

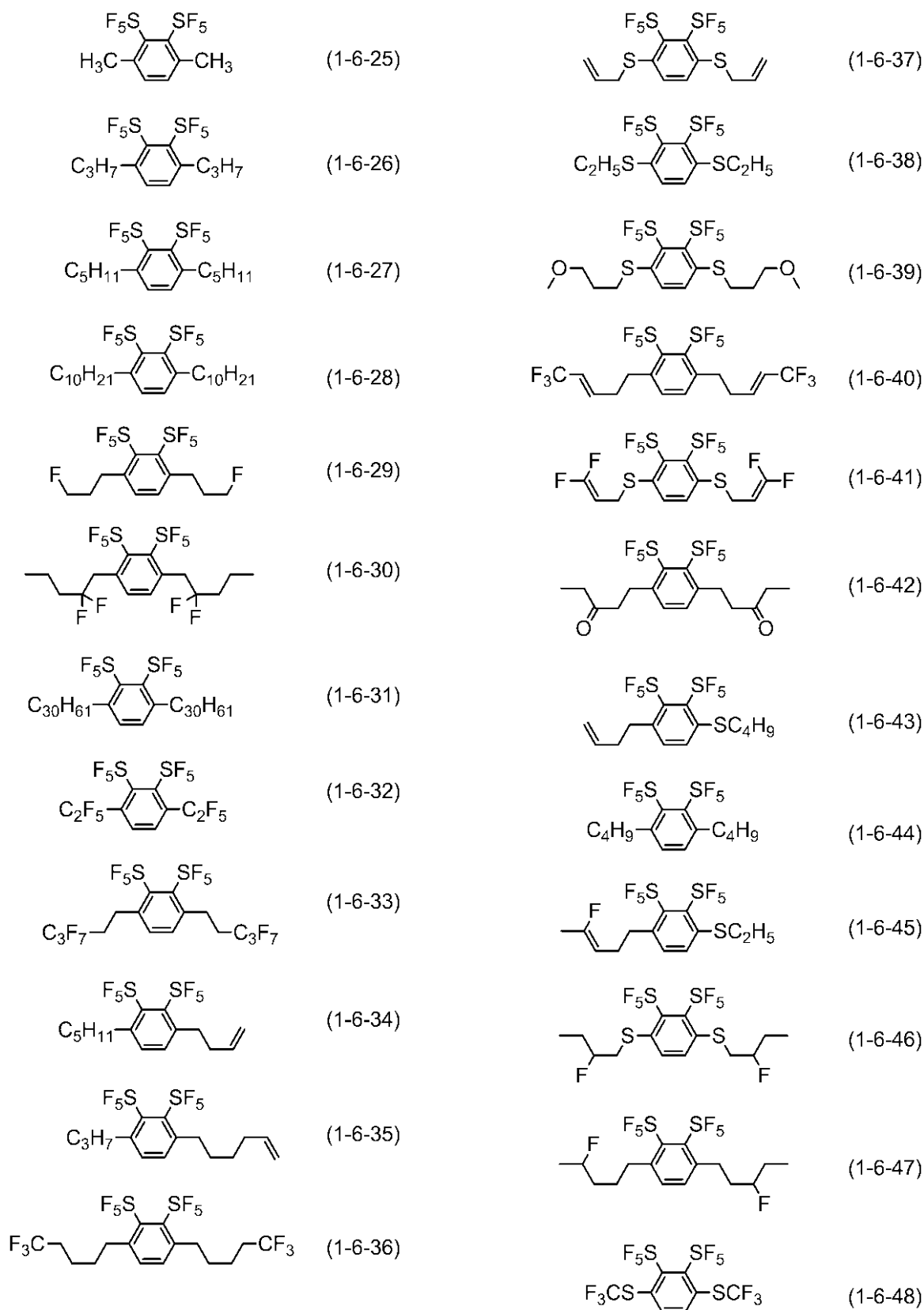


10

20

30

40



10

20

30

40

50

## 【 0 1 9 2 】

## 2. 液晶組成物の実施例

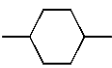
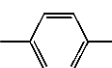
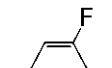
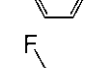
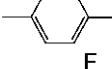
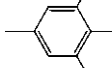
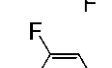
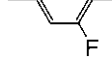
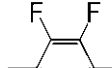
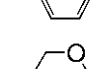
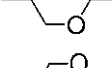
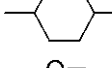
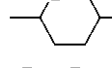
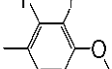
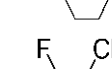
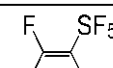
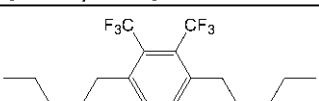
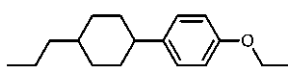
本発明は、使用例 1 の組成物と使用例 2 の組成物との混合物を含む。本発明は、使用例の組成物の少なくとも 2 つを混合した混合物をも含む。使用例における化合物は、下記の表 2 の定義に基づいて記号により表した。表 2 において、1, 4-シクロヘキシレンに関する立体配置はトランスである。使用例において記号の後にあるカッコ内の番号は、化合物が属する化学式を表す。(一)の記号は化合物(2)から(15)とは異なる、その他

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、液晶組成物の重量に基づいた重量百分率（重量％）である。最後に、組成物の物性値をまとめた。物性は、先に記載した方法にしたがって測定し、測定値を（外挿することなく）そのまま記載した。

【 0 1 9 3 】

表2. 記号を用いた化合物の表記法

R-(A<sub>1</sub>)-Z<sub>1</sub>-.....-Z<sub>n</sub>-(A<sub>n</sub>)-R'

| 1) 左末端基 R-                                                                          | 記号                                     | 4) 環構造 -A <sub>n</sub> -                                                             | 記号                                       |
|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|
| C <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub> -                                                  | n-                                     |    | H                                        |
| C <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub> O-                                                 | nO-                                    |    | B                                        |
| C <sub>m</sub> H <sub>2m+1</sub> OC <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> -                  | mOn-                                   |    | B(F)                                     |
| CH <sub>2</sub> =CH-                                                                | V-                                     |    | B(2F)                                    |
| C <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub> -CH=CH-                                            | nV-                                    |    | B(F,F)                                   |
| CH <sub>2</sub> =CH-C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> -                                | Vn-                                    |    | B(2F,5F)                                 |
| C <sub>m</sub> H <sub>2m+1</sub> -CH=CH-C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> -            | mVn-                                   |    | B(2F,3F)                                 |
| CF <sub>2</sub> =CH-                                                                | VFF-                                   |    | G                                        |
| CF <sub>2</sub> =CH-C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> -                                | VFFn-                                  |    | dh                                       |
|                                                                                     |                                        |   | Dh                                       |
| 2) 右末端基 -R'                                                                         | 記号                                     |  | Cro                                      |
| -C <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub>                                                   | -n                                     |  | B(2F,3CL)                                |
| -OC <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub>                                                  | -On                                    |  | B(2CF <sub>3</sub> ,3CF <sub>3</sub> )   |
| -CH=CH <sub>2</sub>                                                                 | -V                                     |  | B(2CF <sub>2</sub> H,3CF <sub>2</sub> H) |
| -CH=CH-C <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub>                                             | -Vn                                    |  | B(2CF <sub>3</sub> ,3F)                  |
| -C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> -CH=CH <sub>2</sub>                                 | -nV                                    |                                                                                      |                                          |
| -C <sub>m</sub> H <sub>2m</sub> -CH=CH-C <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub>             | -mVn                                   |                                                                                      |                                          |
| -CH=CF <sub>2</sub>                                                                 | -VFF                                   |                                                                                      |                                          |
| -F                                                                                  | -F                                     |                                                                                      |                                          |
| -Cl                                                                                 | -CL                                    |                                                                                      |                                          |
| -OCF <sub>3</sub>                                                                   | -OCF <sub>3</sub>                      |                                                                                      |                                          |
| -OCF <sub>2</sub> H                                                                 | -OCF <sub>2</sub> H                    |                                                                                      |                                          |
| -CF <sub>3</sub>                                                                    | -CF <sub>3</sub>                       |                                                                                      |                                          |
| -C≡N                                                                                | -C                                     |                                                                                      |                                          |
| 3) 結合基 -Z <sub>n</sub> -                                                            | 記号                                     |                                                                                      |                                          |
| -C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> -                                                   | n                                      |                                                                                      |                                          |
| -COO-                                                                               | E                                      |                                                                                      |                                          |
| -CH=CH-                                                                             | V                                      |                                                                                      |                                          |
| -CH <sub>2</sub> O-                                                                 | 1O                                     |                                                                                      |                                          |
| -OCH <sub>2</sub> -                                                                 | O1                                     |                                                                                      |                                          |
| -CF <sub>2</sub> O-                                                                 | X                                      |                                                                                      |                                          |
| -C≡C-                                                                               | T                                      |                                                                                      |                                          |
|  | B(2F,3SF <sub>5</sub> )                |                                                                                      |                                          |
|  | B(2SF <sub>5</sub> ,3SF <sub>5</sub> ) |                                                                                      |                                          |
| 5) 表記例                                                                              |                                        |                                                                                      |                                          |
| 例1 5-B(2CF <sub>3</sub> ,3CF <sub>3</sub> )-5                                       |                                        | 例2 3-HB-O2                                                                           |                                          |
|  |                                        |  |                                          |

10

20

30

40

50

## 【0194】

[使用例1]

|                                   |             |       |    |
|-----------------------------------|-------------|-------|----|
| 4 O-B (2 C F 3, 3 C F 3) - O 4    | (1-1-3)     | 3 %   |    |
| 3-G B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-5 7)   | 5 %   |    |
| 3-B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-4 7)   | 3 %   |    |
| 4-B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-4 7)   | 7 %   |    |
| 5-B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-4 7)   | 3 %   |    |
| 3-HH-V                            | (2-1)       | 4 0 % |    |
| 3-HH-V 1                          | (2-1)       | 7 %   |    |
| 3-HHEH-5                          | (3-1 3)     | 3 %   | 10 |
| 3-HHB-1                           | (3-1)       | 4 %   |    |
| V-HHB-1                           | (3-1)       | 5 %   |    |
| V 2-B B (F) B-1                   | (3-6)       | 5 %   |    |
| 1 V 2-B B-F                       | (1 2-1)     | 3 %   |    |
| 3-B B (F, F) X B (F, F) - F       | (1 3-9 7)   | 5 %   |    |
| 3-G B (F, F) X B (F, F) - F       | (1 3-1 1 3) | 4 %   |    |
| 3-HHB B (F, F) - F                | (1 4-6)     | 3 %   |    |

NI = 77. 9 °C ;  $\eta = 14.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}$  ;  $\Delta n = 0.101$  ;  $\Delta \varepsilon = 6.8$ .

## 【0195】

[使用例2]

|                                   |           |       |    |
|-----------------------------------|-----------|-------|----|
| 2 O-B (2 C F 3, 3 C F 3) - O 2    | (1-1-1)   | 3 %   |    |
| 5-H B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-4 1) | 5 %   |    |
| 3-B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-4 7) | 3 %   |    |
| 4-B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-4 7) | 6 %   |    |
| 5-B B (F) B (F, F) X B (F, F) - F | (1 4-4 7) | 3 %   |    |
| 3-HH-V                            | (2-1)     | 4 0 % |    |
| 3-HH-V 1                          | (2-1)     | 7 %   |    |
| 3-HHEH-5                          | (3-1 3)   | 3 %   |    |
| 3-HHB-1                           | (3-1)     | 4 %   |    |
| V-HHB-1                           | (3-1)     | 5 %   | 30 |
| V 2-B B (F) B-1                   | (3-6)     | 5 %   |    |
| 1 V 2-B B-F                       | (1 2-1)   | 3 %   |    |
| 3-B B (F, F) X B (F, F) - F       | (1 3-9 7) | 1 0 % |    |
| 3-HHB B (F, F) - F                | (1 4-6)   | 3 %   |    |

NI = 77. 1 °C ;  $\eta = 12.7 \text{ mPa} \cdot \text{s}$  ;  $\Delta n = 0.101$  ;  $\Delta \varepsilon = 5.7$ .

## 【0196】

[使用例3]

|                                |           |       |    |
|--------------------------------|-----------|-------|----|
| 3 V-B (2 C F 3, 3 C F 3) - V 3 | (1-1-1 4) | 5 %   |    |
| 1 V 2-B E B (F, F) - C         | (1 5-1 5) | 5 %   |    |
| 3-H B-C                        | (1 5-1)   | 1 7 % | 40 |
| 2-B T B-1                      | (2-1 0)   | 1 0 % |    |
| 5-HH-V F F                     | (2-1)     | 2 9 % |    |
| 3-HHB-1                        | (3-1)     | 4 %   |    |
| V F F-HHB-1                    | (3-1)     | 8 %   |    |
| V F F 2-HHB-1                  | (3-1)     | 1 0 % |    |
| 3-H 2 B T B-2                  | (3-1 7)   | 5 %   |    |
| 3-H 2 B T B-3                  | (3-1 7)   | 4 %   |    |
| 3-H 2 B T B-4                  | (3-1 7)   | 3 %   |    |

NI = 71. 5 °C ;  $\Delta n = 0.124$  ;  $\Delta \varepsilon = 5.6$ .

## 【0197】

## 〔使用例 4〕

|                                                                                                               |          |      |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|------|----|
| 5-B (2 C F 3, 3 C F 3) - 5                                                                                    | (1-1-27) | 4 %  |    |
| 2-HH-3                                                                                                        | (2-1)    | 5 %  |    |
| 3-HH-V 1                                                                                                      | (2-1)    | 10 % |    |
| 1 V 2-HH-1                                                                                                    | (2-1)    | 8 %  |    |
| 1 V 2-HH-3                                                                                                    | (2-1)    | 7 %  |    |
| 3-BB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                         | (5-3)    | 7 %  |    |
| 5-BB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                         | (5-3)    | 3 %  |    |
| 3-H1OB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                       | (5-5)    | 6 %  |    |
| 2-HH1OB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                      | (6-5)    | 8 %  | 10 |
| 3-HH1OB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                      | (6-5)    | 19 % |    |
| 3-HDhB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                       | (-)      | 7 %  |    |
| 3-HHB-1                                                                                                       | (3-1)    | 3 %  |    |
| 3-HHB-3                                                                                                       | (3-1)    | 2 %  |    |
| 2-BB (2 F, 3 F) B-3                                                                                           | (5-3)    | 11 % |    |
| NI = 78. 3 °C ; $\eta = 22.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ ; $\Delta n = 0.102$ ; $\Delta \varepsilon = -4.3$ . |          |      |    |

## 【0198】

## 〔使用例 5〕

|                                                                                                               |         |      |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------|----|
| 4O-B (2 C F 3, 3 F) - O 2                                                                                     | (1-2-9) | 3 %  |    |
| 1-BB-3                                                                                                        | (2-6)   | 9 %  | 20 |
| 3-HH-V                                                                                                        | (2-1)   | 29 % |    |
| 3-BB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                         | (5-3)   | 11 % |    |
| 2-HH1OB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                      | (6-5)   | 20 % |    |
| 3-HH1OB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                      | (6-5)   | 14 % |    |
| 3-HHB-1                                                                                                       | (3-1)   | 8 %  |    |
| 5-B (F) BB-2                                                                                                  | (3-8)   | 6 %  |    |
| NI = 70. 5 °C ; $\eta = 15.4 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ ; $\Delta n = 0.100$ ; $\Delta \varepsilon = -3.1$ . |         |      |    |

## 【0199】

## 〔使用例 6〕

|                                                                                                               |          |      |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|------|----|
| 3V-B (2 C F 3, 3 F) - O 2                                                                                     | (1-2-20) | 4 %  | 30 |
| 2-HH-3                                                                                                        | (2-1)    | 16 % |    |
| 7-HB-1                                                                                                        | (2-5)    | 9 %  |    |
| 5-HB-O 2                                                                                                      | (2-5)    | 8 %  |    |
| 3-HB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                         | (5-1)    | 15 % |    |
| 5-HB (2 F, 3 F) - O 2                                                                                         | (5-1)    | 15 % |    |
| 3-HHB (2 F, 3 CL) - O 2                                                                                       | (6-12)   | 3 %  |    |
| 4-HHB (2 F, 3 CL) - O 2                                                                                       | (6-12)   | 3 %  |    |
| 5-HHB (2 F, 3 CL) - O 2                                                                                       | (6-12)   | 2 %  |    |
| 3-HH1OCro (7 F, 8 F) - 5                                                                                      | (9-6)    | 5 %  |    |
| 5-HBB (F) B-2                                                                                                 | (4-5)    | 10 % | 40 |
| 5-HBB (F) B-3                                                                                                 | (4-5)    | 10 % |    |
| NI = 70. 2 °C ; $\eta = 23.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ ; $\Delta n = 0.101$ ; $\Delta \varepsilon = -2.5$ . |          |      |    |

## 【0200】

## 〔使用例 7〕

|                          |          |      |    |
|--------------------------|----------|------|----|
| 5-B (2 C F 3, 3 F) - O 2 | (1-2-27) | 3 %  |    |
| 2-HH-3                   | (2-1)    | 20 % |    |
| 3-HH-4                   | (2-1)    | 9 %  |    |
| 1-BB-3                   | (2-8)    | 8 %  |    |
| 3-HB-O 2                 | (2-5)    | 2 %  |    |
| 3-BB (2 F, 3 F) - O 2    | (5-3)    | 8 %  | 50 |

|                                                                                                           |       |       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|-------|
| 5-B B (2 F, 3 F) - O 2                                                                                    | (5-3) | 5 %   |
| 2-HH 1 O B (2 F, 3 F) - O 2                                                                               | (6-5) | 1 3 % |
| 3-HH 1 O B (2 F, 3 F) - O 2                                                                               | (6-5) | 2 1 % |
| 3-HH B - 1                                                                                                | (3-1) | 5 %   |
| 3-HH B - O 1                                                                                              | (3-1) | 3 %   |
| 5-B (F) B B - 2                                                                                           | (3-8) | 3 %   |
| N I = 7 0 . 3 °C ; $\eta$ = 1 6 . 2 m P a · s ; $\Delta n$ = 0 . 0 9 3 ; $\Delta \varepsilon$ = - 3 . 2 . |       |       |

## 【0 2 0 1】

[使用例 8]

|                              |         |       |    |
|------------------------------|---------|-------|----|
| 2 O - B (2 F, 3 S F 5) - O 2 | (1-5-1) | 3 %   | 10 |
| 2-HH-5                       | (2-1)   | 3 %   |    |
| 3-HH-4                       | (2-1)   | 1 5 % |    |
| 3-HH-5                       | (2-1)   | 4 %   |    |
| 3-H B - O 2                  | (2-5)   | 1 2 % |    |
| 3-H 2 B (2 F, 3 F) - O 2     | (5-4)   | 1 2 % |    |
| 5-H 2 B (2 F, 3 F) - O 2     | (5-4)   | 1 5 % |    |
| 3-HH B (2 F, 3 C L) - O 2    | (6-1 2) | 5 %   |    |
| 2-H B B (2 F, 3 F) - O 2     | (6-7)   | 3 %   |    |
| 3-H B B (2 F, 3 F) - O 2     | (6-7)   | 9 %   |    |
| 5-H B B (2 F, 3 F) - O 2     | (6-7)   | 9 %   | 20 |
| 3-HH B - 1                   | (3-1)   | 3 %   |    |
| 3-HH B - 3                   | (3-1)   | 4 %   |    |
| 3-HH B - O 1                 | (3-1)   | 3 %   |    |

## 【0 2 0 2】

[使用例 9]

|                                  |         |       |    |
|----------------------------------|---------|-------|----|
| 2 O - B (2 S F 5, 3 S F 5) - O 2 | (1-6-1) | 3 %   |    |
| 3-H B - O 1                      | (2-5)   | 1 5 % |    |
| 3-HH-4                           | (2-1)   | 5 %   |    |
| 3-H B (2 F, 3 F) - O 2           | (5-1)   | 1 2 % |    |
| 5-H B (2 F, 3 F) - O 2           | (5-1)   | 1 2 % | 30 |
| 2-HH B (2 F, 3 F) - 1            | (6-1)   | 1 1 % |    |
| 3-HH B (2 F, 3 F) - 1            | (6-1)   | 1 2 % |    |
| 3-HH B (2 F, 3 F) - O 2          | (6-1)   | 1 1 % |    |
| 5-HH B (2 F, 3 F) - O 2          | (6-1)   | 1 3 % |    |
| 3-HH B - 1                       | (3-1)   | 6 %   |    |

## 【0 2 0 3】

[使用例 1 0]

|                            |             |       |    |
|----------------------------|-------------|-------|----|
| 5-B (2 S F 5, 3 S F 5) - 5 | (1-6-2 7)   | 3 %   |    |
| 5-H B - C L                | (1 2-2)     | 3 %   |    |
| 7-H B (F) - F              | (1 2-3)     | 7 %   | 40 |
| 3-HH-4                     | (2-1)       | 9 %   |    |
| 3-HH-5                     | (2-1)       | 1 0 % |    |
| 3-H B - O 2                | (2-5)       | 1 3 % |    |
| 3-HH E B - F               | (1 3-1 0)   | 8 %   |    |
| 5-HH E B - F               | (1 3-1 0)   | 8 %   |    |
| 3-HH E B (F, F) - F        | (1 3-1 2)   | 9 %   |    |
| 4-HH E B (F, F) - F        | (1 3-1 2)   | 5 %   |    |
| 3-GH B (F, F) - F          | (1 3-1 0 9) | 4 %   |    |
| 4-GH B (F, F) - F          | (1 3-1 0 9) | 5 %   |    |
| 5-GH B (F, F) - F          | (1 3-1 0 9) | 7 %   | 50 |

|                                                                                                                             |               |       |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|-------|----|
| 2-HHB (F, F) - F                                                                                                            | (1 3 - 3)     | 4 %   |    |
| 3-HHB (F, F) - F                                                                                                            | (1 3 - 3)     | 5 %   |    |
| 【0 2 0 4】                                                                                                                   |               |       |    |
| [使用例 1 1]                                                                                                                   |               |       |    |
| 2 O - B (2 C F 2 H, 3 C F 2 H) - O 2                                                                                        | (1 - 4 - 1)   | 3 %   |    |
| 5 - HB - C L                                                                                                                | (1 2 - 2)     | 1 4 % |    |
| 7 - HB (F, F) - F                                                                                                           | (1 2 - 4)     | 3 %   |    |
| 3 - HH - 4                                                                                                                  | (2 - 1)       | 1 0 % |    |
| 3 - HH - 5                                                                                                                  | (2 - 1)       | 5 %   |    |
| 3 - HB - O 2                                                                                                                | (2 - 5)       | 1 5 % | 10 |
| 3 - HHB - 1                                                                                                                 | (3 - 1)       | 8 %   |    |
| 3 - HHB - O 1                                                                                                               | (3 - 1)       | 5 %   |    |
| 2 - HHB (F) - F                                                                                                             | (1 3 - 2)     | 7 %   |    |
| 3 - HHB (F) - F                                                                                                             | (1 3 - 2)     | 7 %   |    |
| 5 - HHB (F) - F                                                                                                             | (1 3 - 2)     | 7 %   |    |
| 3 - HHB (F, F) - F                                                                                                          | (1 3 - 3)     | 6 %   |    |
| 3 - H 2 HB (F, F) - F                                                                                                       | (1 3 - 1 5)   | 5 %   |    |
| 4 - H 2 HB (F, F) - F                                                                                                       | (1 3 - 1 5)   | 5 %   |    |
| 【0 2 0 5】                                                                                                                   |               |       |    |
| [使用例 1 2]                                                                                                                   |               |       |    |
| 2 O - B (2 C F 3, 3 C F 3) - O 2                                                                                            | (1 - 1 - 1)   | 2 %   | 20 |
| 4 O - B (2 C F 3, 3 C F 3) - O 4                                                                                            | (1 - 1 - 3)   | 2 %   |    |
| 3 - HB - C L                                                                                                                | (1 2 - 2)     | 5 %   |    |
| 5 - HB - C L                                                                                                                | (1 2 - 2)     | 3 %   |    |
| 3 - HHB - O C F 3                                                                                                           | (1 3 - 1)     | 5 %   |    |
| 3 - H 2 HB - O C F 3                                                                                                        | (1 3 - 1 3)   | 5 %   |    |
| 5 - H 4 HB - O C F 3                                                                                                        | (1 3 - 1 9)   | 1 5 % |    |
| V - HHB (F) - F                                                                                                             | (1 3 - 2)     | 4 %   |    |
| 3 - HHB (F) - F                                                                                                             | (1 3 - 2)     | 4 %   |    |
| 5 - HHB (F) - F                                                                                                             | (1 3 - 2)     | 7 %   | 30 |
| 3 - H 4 HB (F, F) - C F 3                                                                                                   | (1 3 - 2 1)   | 8 %   |    |
| 5 - H 4 HB (F, F) - C F 3                                                                                                   | (1 3 - 2 1)   | 1 0 % |    |
| 5 - H 2 HB (F, F) - F                                                                                                       | (1 3 - 1 5)   | 5 %   |    |
| 5 - H 4 HB (F, F) - F                                                                                                       | (1 3 - 2 1)   | 7 %   |    |
| 2 - H 2 BB (F) - F                                                                                                          | (1 3 - 2 6)   | 5 %   |    |
| 3 - H 2 BB (F) - F                                                                                                          | (1 3 - 2 6)   | 8 %   |    |
| 3 - H B E B (F, F) - F                                                                                                      | (1 3 - 3 9)   | 5 %   |    |
| N I = 6 4 . 3 °C ; $\eta = 2 7 . 1 \text{ m P a } \cdot \text{s}$ ; $\Delta n = 0 . 0 9 2$ ; $\Delta \varepsilon = 8 . 0$ . |               |       |    |
| 【0 2 0 6】                                                                                                                   |               |       |    |
| [使用例 1 3]                                                                                                                   |               |       |    |
| 3 V - B (2 C F 3, 3 C F 3) - V 3                                                                                            | (1 - 1 - 1 4) | 3 %   | 40 |
| 5 - B (2 C F 3, 3 C F 3) - 5                                                                                                | (1 - 1 - 2 7) | 3 %   |    |
| 5 - HB - C L                                                                                                                | (1 2 - 2)     | 1 0 % |    |
| 3 - HH - 4                                                                                                                  | (2 - 1)       | 7 %   |    |
| 3 - HHB - 1                                                                                                                 | (3 - 1)       | 5 %   |    |
| 3 - HHB (F, F) - F                                                                                                          | (1 3 - 3)     | 7 %   |    |
| 3 - H B B (F, F) - F                                                                                                        | (1 3 - 2 4)   | 1 8 % |    |
| 5 - H B B (F, F) - F                                                                                                        | (1 3 - 2 4)   | 1 5 % |    |
| 3 - H H E B (F, F) - F                                                                                                      | (1 3 - 1 2)   | 1 0 % |    |
| 4 - H H E B (F, F) - F                                                                                                      | (1 3 - 1 2)   | 3 %   | 50 |

|                      |             |     |  |
|----------------------|-------------|-----|--|
| 5-H H E B (F, F) - F | (1 3 - 1 2) | 3 % |  |
| 2-H B E B (F, F) - F | (1 3 - 3 9) | 3 % |  |
| 3-H B E B (F, F) - F | (1 3 - 3 9) | 5 % |  |
| 5-H B E B (F, F) - F | (1 3 - 3 9) | 3 % |  |
| 3-H H B B (F, F) - F | (1 4 - 6)   | 5 % |  |

N I = 67. 8 °C ;  $\Delta n = 0.096$  ;  $\Delta \varepsilon = 8.2$ .

【0207】

[使用例14]

|                              |             |      |    |
|------------------------------|-------------|------|----|
| 4 O - B (2 C F 3, 3 F) - O 2 | (1 - 2 - 9) | 5 %  |    |
| 5 - H B - F                  | (1 2 - 2)   | 12 % | 10 |
| 6 - H B - F                  | (1 2 - 2)   | 9 %  |    |
| 7 - H B - F                  | (1 2 - 2)   | 7 %  |    |
| 2 - H H B - O C F 3          | (1 3 - 1)   | 6 %  |    |
| 3 - H H B - O C F 3          | (1 3 - 1)   | 7 %  |    |
| 4 - H H B - O C F 3          | (1 3 - 1)   | 7 %  |    |
| 5 - H H B - O C F 3          | (1 3 - 1)   | 5 %  |    |
| 3 - H H 2 B - O C F 3        | (1 3 - 4)   | 4 %  |    |
| 5 - H H 2 B - O C F 3        | (1 3 - 4)   | 4 %  |    |
| 3 - H H B (F, F) - O C F 2 H | (1 3 - 3)   | 3 %  |    |
| 3 - H H B (F, F) - O C F 3   | (1 3 - 3)   | 4 %  | 20 |
| 3 - H H 2 B (F) - F          | (1 3 - 5)   | 3 %  |    |
| 3 - H B B (F) - F            | (1 3 - 2 3) | 8 %  |    |
| 5 - H B B (F) - F            | (1 3 - 2 3) | 10 % |    |
| 5 - H B B H - 3              | (4 - 1)     | 3 %  |    |
| 3 - H B (F) B H - 3          | (4 - 2)     | 3 %  |    |

N I = 74. 2 °C ;  $\eta = 15.2 \text{ mPa} \cdot \text{s}$  ;  $\Delta n = 0.085$  ;  $\Delta \varepsilon = 4.0$ .

【0208】

[使用例15]

|                              |               |      |    |
|------------------------------|---------------|------|----|
| 3 V - B (2 C F 3, 3 F) - O 2 | (1 - 2 - 2 0) | 6 %  |    |
| 3 - H H B (F, F) - F         | (1 3 - 3)     | 9 %  | 30 |
| 3 - H 2 H B (F, F) - F       | (1 3 - 1 5)   | 7 %  |    |
| 4 - H 2 H B (F, F) - F       | (1 3 - 1 5)   | 8 %  |    |
| 5 - H 2 H B (F, F) - F       | (1 3 - 1 5)   | 7 %  |    |
| 3 - H B B (F, F) - F         | (1 3 - 2 4)   | 20 % |    |
| 5 - H B B (F, F) - F         | (1 3 - 2 4)   | 18 % |    |
| 3 - H 2 B B (F, F) - F       | (1 3 - 2 7)   | 8 %  |    |
| 5 - H H B B (F, F) - F       | (1 4 - 6)     | 3 %  |    |
| 5 - H H E B B - F            | (1 4 - 1 7)   | 2 %  |    |
| 3 - H H 2 B B (F, F) - F     | (1 4 - 1 5)   | 4 %  |    |
| 1 O 1 - H B B H - 4          | (4 - 1)       | 4 %  | 40 |
| 1 O 1 - H B B H - 5          | (4 - 1)       | 4 %  |    |

N I = 86. 7 °C ;  $\eta = 35.7 \text{ mPa} \cdot \text{s}$  ;  $\Delta n = 0.110$  ;  $\Delta \varepsilon = 8.4$ .

上記の組成物に化合物 (O p - 0 5) を 0. 25 重量% の割合で添加したときのピッチは 65. 3  $\mu\text{m}$  であった。

【0209】

[使用例16]

|                            |               |      |    |
|----------------------------|---------------|------|----|
| 5 - B (2 C F 3, 3 F) - O 2 | (1 - 2 - 2 7) | 5 %  |    |
| 5 - H B - C L              | (1 2 - 2)     | 15 % |    |
| 3 - H H - 4                | (2 - 1)       | 11 % |    |
| 3 - H H - 5                | (2 - 1)       | 4 %  | 50 |

|                                            |          |     |    |
|--------------------------------------------|----------|-----|----|
| 3-HHB-F                                    | (13-1)   | 4%  |    |
| 3-HHB-CL                                   | (13-1)   | 3%  |    |
| 4-HHB-CL                                   | (13-1)   | 4%  |    |
| 3-HHB(F)-F                                 | (13-2)   | 9%  |    |
| 4-HHB(F)-F                                 | (13-2)   | 8%  |    |
| 5-HHB(F)-F                                 | (13-2)   | 8%  |    |
| 7-HHB(F)-F                                 | (13-2)   | 7%  |    |
| 5-HBB(F)-F                                 | (13-23)  | 3%  |    |
| 1O1-HBBH-5                                 | (4-1)    | 3%  |    |
| 3-HHBB(F, F)-F                             | (14-6)   | 3%  | 10 |
| 4-HHBB(F, F)-F                             | (14-6)   | 3%  |    |
| 5-HHBB(F, F)-F                             | (14-6)   | 4%  |    |
| 3-HH2BB(F, F)-F                            | (14-15)  | 3%  |    |
| 4-HH2BB(F, F)-F                            | (14-15)  | 3%  |    |
| NI=103.7°C; η=21.0mPa·s; Δn=0.085; Δε=3.6. |          |     |    |
| 【0210】                                     |          |     |    |
| [使用例17]                                    |          |     |    |
| 2O-B(2F, 3SF5)-O2                          | (1-5-1)  | 3%  |    |
| 7-HB(F, F)-F                               | (12-4)   | 3%  |    |
| 3-HB-O2                                    | (2-5)    | 7%  | 20 |
| 2-HHB(F)-F                                 | (13-2)   | 10% |    |
| 3-HHB(F)-F                                 | (13-2)   | 10% |    |
| 5-HHB(F)-F                                 | (13-2)   | 8%  |    |
| 2-HBB(F)-F                                 | (13-23)  | 9%  |    |
| 3-HBB(F)-F                                 | (13-23)  | 9%  |    |
| 5-HBB(F)-F                                 | (13-23)  | 15% |    |
| 2-HBB-F                                    | (13-22)  | 4%  |    |
| 3-HBB-F                                    | (13-22)  | 4%  |    |
| 5-HBB-F                                    | (13-22)  | 3%  |    |
| 3-HBB(F, F)-F                              | (13-24)  | 5%  | 30 |
| 5-HBB(F, F)-F                              | (13-24)  | 10% |    |
| 【0211】                                     |          |     |    |
| [使用例18]                                    |          |     |    |
| 2O-B(2SF5, 3SF5)-O2                        | (1-6-1)  | 3%  |    |
| 3-HB-CL                                    | (12-2)   | 12% |    |
| 3-HH-4                                     | (2-1)    | 12% |    |
| 3-HB-O2                                    | (2-5)    | 8%  |    |
| 3-HHB(F, F)-F                              | (13-3)   | 3%  |    |
| 3-HBB(F, F)-F                              | (13-3)   | 28% |    |
| 5-HBB(F, F)-F                              | (13-3)   | 24% | 40 |
| 5-HBB(F)B-2                                | (4-5)    | 5%  |    |
| 5-HBB(F)B-3                                | (4-5)    | 5%  |    |
| 【0212】                                     |          |     |    |
| [使用例19]                                    |          |     |    |
| 5-B(2SF5, 3SF5)-5                          | (1-6-27) | 3%  |    |
| 2-HB-C                                     | (15-1)   | 5%  |    |
| 3-HB-C                                     | (15-1)   | 12% |    |
| 3-HB-O2                                    | (2-5)    | 15% |    |
| 2-BTB-1                                    | (2-10)   | 3%  |    |
| 3-HHB-F                                    | (13-1)   | 3%  | 50 |

|               |         |     |
|---------------|---------|-----|
| 3-HHB-1       | (3-1)   | 7%  |
| 3-HHB-O1      | (3-1)   | 5%  |
| 3-HHB-3       | (3-1)   | 13% |
| 3-HHEB-F      | (13-10) | 4%  |
| 5-HHEB-F      | (13-10) | 4%  |
| 2-HHB(F)-F    | (13-2)  | 7%  |
| 3-HHB(F)-F    | (13-2)  | 7%  |
| 5-HHB(F)-F    | (13-2)  | 7%  |
| 3-HHB(F, F)-F | (13-3)  | 5%  |

【産業上の利用可能性】

10

【0213】

本発明の液晶性化合物は、優れた物性を有する。この化合物を含有する液晶組成物は、パソコン、テレビなどに用いる液晶表示素子に広く利用できる。

フロントページの続き

| (51)Int.Cl.                     | F I     |        | テーマコード (参考) |  |
|---------------------------------|---------|--------|-------------|--|
| <b>C 0 9 K</b> 19/20 (2006.01)  | C 0 9 K | 19/20  |             |  |
| <b>C 0 9 K</b> 19/18 (2006.01)  | C 0 9 K | 19/18  |             |  |
| <b>C 0 9 K</b> 19/34 (2006.01)  | C 0 9 K | 19/34  |             |  |
| <b>C 0 9 K</b> 19/32 (2006.01)  | C 0 9 K | 19/32  |             |  |
| <b>G 0 2 F</b> 1/13 (2006.01)   | G 0 2 F | 1/13   | 5 0 0       |  |
| <b>G 0 2 F</b> 1/1337 (2006.01) | G 0 2 F | 1/1337 | 5 2 0       |  |

|                |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|----------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| Fターム(参考) 4H027 | BA01 | BD01 | BD02 | BD03 | BD04 | BD05 | BD07 | BD11 | BD20 | CA05 |
|                | CB01 | CB04 | CB05 | CC01 | CC04 | CC05 | CD01 | CD04 | CD05 | CE04 |
|                | CE05 | CF05 | CG04 | CG05 | CH05 | CK01 | CK04 | CK05 | CL01 | CL04 |
|                | CL05 | CM01 | CM04 | CM05 | CN01 | CN04 | CN05 | CP01 | CP04 | CP05 |
|                | CQ01 | CQ04 | CQ05 | CR01 | CR04 | CR05 | CS04 | CS05 | CT01 | CT04 |
|                | CT05 | CU01 | CU04 | CU05 | CW01 | CW03 | CX01 | DE01 | DE04 | DE05 |
|                | DF01 | DF04 | DF05 | DH05 | DK05 | DM05 |      |      |      |      |