(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2007 年9 月27 日 (27.09.2007)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2007/108307 A1

(51) 国際特許分類:
C09K 19/44 (2006.01) *C09K 19/20* (2006.01)
C09K 19/12 (2006.01) *C09K 19/30* (2006.01)
C09K 19/14 (2006.01) *G02F 1/13* (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2007/054196

(22) 国際出願日: 2007 年3 月5 日 (05.03.2007)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願2006-077591 2006 年3 月20 日 (20.03.2006) JP

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): チッソ株式会社 (CHISSO CORPORATION) [JP/JP]; 〒5300005 大阪府大阪市北区中之島三丁目６番３２号 Osaka (JP). チッソ石油化学株式会社 (CHISSO PETROCHEMICAL CORPORATION) [JP/JP]; 〒1008105 東京都千代田区大手町二丁目２番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者; および
(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 藤田 浩章 (FUJITA, Hiroaki) [JP/JP]; 〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ チッソ石油化学株式会社 五井研究所内 Chiba (JP). 服部 憲和 (HATTORI, Norikatsu) [JP/JP]; 〒2908551 千葉県市原市五井海岸５番地の１ チッソ石油化学株式会社 五井研究所内 Chiba (JP).

(74) 代理人: 鈴木 俊一郎 (SUZUKI, Shunichiro); 〒1410031 東京都品川区西五反田七丁目１３番６号 五反田山崎ビル６階 鈴木国際特許事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SV, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MT, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:
— 国際調査報告書

２文字コード及び他の略語については、定期発行される各*PCT*ガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

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

(54) 発明の名称: 液晶組成物および液晶表示素子

(57) **Abstract:** This invention provides a liquid crystal composition, which has a broad nematic phase temperature range, has proper optical anisotropy, has large negative permittivity anisotropy, and has a large specific resistance value, a liquid crystal composition, which can increase optical anisotropy while satisfying the above properties and has a lower limit temperature in its nematic phase, preferably -20ºC or below, and a liquid crystal display element comprising this composition. The liquid crystal composition is a liquid crystal composition having negative permittivity anisotropy, comprising a first component, which is a liquid crystalline compound containing terphenyl in which one or two hydrogen atoms have been substituted by a fluorine atom, and a second component, which is a liquid crystalline compound containing phenylene in which two hydrogen atoms have been substituted by a halogen atom. The liquid crystal display element comprises this liquid crystal composition.

(57) 要約: 本発明はネマチック相温度範囲が広く、適切な光学異方性を有し、負の誘電率異方性が大きく、比抵抗値が大きい液晶組成物、さらにこれら特性を満たしながら、光学異方性を大きくすることが可能で、ネマチック相の下限温度が低い、好ましくは－２０℃以下である液晶組成物を提供し、さらに、この組成物を含む液晶表示素子を提供する。 本発明の液晶組成物は、１つまたは２つの水素がフッ素で置き換えられたターフェニル有する液晶性化合物である第一成分と、２つの水素がハロゲンで置き換えられたフェニレンを有する液晶性化合物である第二成分とを含有する誘電率異方性が負である液晶組成物であり、本発明の液晶表示素子は、この液晶組成物を含有する液晶表示素子である。

WO 2007/108307 A1

明 細 書

液晶組成物および液晶表示素子

技術分野

[0001] 本発明は、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、主としてAM(active matrix)方式で駆動する液晶表示素子に適する液晶組成物、およびこの組成物を含有する液晶表示素子に関する。

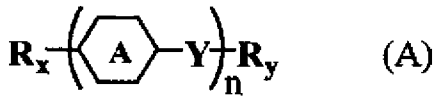
背景技術

[0002] 液晶表示素子(本発明において液晶表示素子とは液晶表示パネル、液晶表示モジュールの総称を意味する。)は、液晶組成物が有する光学異方性、誘電率異方性などを利用しているが、この液晶表示素子の動作モードとしては、PC(phase change)モード、TN(twisted nematic)モード、STN(super twisted nematic)モード、BTN(Bistabletwisted nematic)モード、ECB(electrically controlled birefringence)モード、OCB(optically compensated bend)モード、IPS(in-plane switching)モード、VA(vertical alignment)モードなどの様々なモードが知られている。これら動作モードの中でもECBモード、IPSモード、VAモードなどはTNモード、STNモード等の従来の動作モードの欠点である視野角の狭さを改善できることが知られている。これら動作モードの液晶表示素子には負の誘電率異方性を有する液晶組成物を使用できる。

[0003] 従来からこれら動作モードの液晶表示素子に使用可能な、負の誘電率異方性を有する液晶組成物として、ベンゼン環上の水素がフッ素で置き換えられた2,3−ジフオロフェニレンを有する液晶性化合物を含む組成物が数多く検討されている。例えば、特許文献1および2には、2,3−ジフオロフェニレンを有する液晶性化合物が開示されている。

[0004] なお本明細書中では、「液晶性化合物」とは、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、液晶相を有さないが液晶組成物として有用な化合物の総称を意味する。成分の含有割合は液晶性化合物の全重量に基づいて算出する。この際の液晶性化合物は、下記(A)式で示される化合物である。この化合物は光学活性であってもよい。

[0005] [化1]



(A)

[0006] 上記(A)式中、R_xおよびR_yは、各々独立して、水素、アルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシアルコキシ、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、シアノ、－NCS、フッ素、または塩素である。これら基において炭素数は10以下である。炭素数が1～5の基において任意の水素はフッ素または塩素で置き換えられてもよく、置き換えられたフッ素と塩素との合計は、1～11である。上記(A)式中、環Aは、1，4－シクロヘキシレン、1，4－フェニレン、ピラン－2，5－ジイル、1，3－ジオキサン－2，5－ジイル、ピリジン－2，5－ジイル、ピリミジン－2，5－ジイル、デカヒドロナフタレン－2，6－ジイル、1，2，3，4－テトラヒドロナフタレン－2，6－ジイル、またはナフタレン－2，6－ジイルである。これら環Aにおいて任意の水素は、フッ素または塩素で置き換えられてもよい。環Aにおいて置き換えられたフッ素と塩素との合計は1～4である。1，4－フェニレンにおいて任意の1つまたは2つの水素は、シアノ、メチル、ジフルオロメチル、またはトリフルオロメチルで置き換えられてもよい。

上記(A)式中、Yは、単結合、$－(CH_2)_2－$、－COO－、－OCO－、$－CH_2O－$、$－OCH_2－$、$－CF_2O－$、$－OCF_2－$、－CH＝CH－、－CF＝CF－、$－(CH_2)_4－$、$－(CH_2)_3－O－$、$－O－(CH_2)_3－$、$－CH＝CH－(CH_2)_2－$、$－(CH_2)_2－CH＝CH－$、$－(CH_2)_2CF_2O－$、$－OCF_2(CH_2)_2－$、$－(CH_2)_2COO－$、$－(CH_2)_2OCO－$、$－COO(CH_2)_2－$、$－OCO(CH_2)_2－$、－CH＝CH－COO－、－CH＝CH－OCO－、－COO－CH＝CH－、または、－OCO－CH＝CH－である。上記(A)式中、nは、1、2、3、または4である。

[0007] しかし、特許文献1および2に例示されるベンゼン環上の水素がフッ素で置き換えられた化合物は他の液晶性化合物に対して低い温度領域での相溶性に乏しく、液晶組成物とした場合、低温領域で使用することができない場合があった。

[0008] 特許文献3には、本発明の第一成分である、ターフェニル構造を有する化合物を含

有する液晶組成物が開示されている。特許文献4には、本発明の第一成分を含有する液晶組成物が開示されている。しかし、特許文献3および4の実施例等で具体的に検討されている組成物は正の誘電率異方性を有しており、負の誘電率異方性を有する液晶組成物は全く検討されていない。

[0009] 特許文献5の比較例3には、本発明の第一成分を含有する、誘電率異方性が負の液晶組成物が開示されているが、液晶組成物の誘電率異方性（Δε＝－2．6）は負に大きくなく、また、ネマティック相の下限温度は必ずしも低くない。

特許文献1：特許第2811342号

特許文献2：特許第1761492号

特許文献3：国際公開第2004／035710号パンフレット

特許文献4：国際公開第2005／007775号パンフレット

特許文献5：特開2003－327965号公報

発明の開示

発明が解決しようとする課題

[0010] IPSモードおよびVAモード等の動作モードの液晶表示素子であっても、CRTと比較すれば表示素子としてはいまだ問題があり、物性の向上が望まれている。

[0011] 上述したIPSモード、あるいはVAモードで動作する表示素子は、主として、負の誘電率異方性を有する液晶組成物を含有しているが、上記特性等をさらに向上させるためには、上記液晶組成物が、以下（1）～（5）で示す特性を有することが好ましい。

[0012] すなわち、（1）ネマチック相の温度範囲が広い、（2）粘度が小さい、（3）光学異方性が適切である、（4）誘電率異方性の絶対値が大きい、（5）比抵抗が大きい、ことが好ましい。

[0013] ネマチック相の温度範囲は、液晶表示素子を使用する温度範囲に関連をしており、（1）のようにネマチック相の温度範囲が広い液晶組成物を含有する液晶表示素子は、液晶表示素子として使用する温度範囲を広くできる。

[0014] （2）のように粘度の小さい液晶組成物を含有する液晶表示素子は、応答時間を短くできる。液晶表示素子の応答時間が短い場合には、動画表示に好適に使用できる。また、液晶組成物を液晶表示素子の液晶セルに液晶組成物を注入する際に、注

入時間を短縮し作業性を向上できる。

[0015] (3)のように光学異方性が適切な液晶組成物を含有する液晶表示素子は、コントラスト比を大きくできる。

[0016] (4)のように誘電率異方性の絶対値が大きい液晶組成物を含有する液晶表示素子は、しきい電圧値を下げ、駆動電圧を低くでき、さらに消費電力を小さくできる。

[0017] (5)のように比抵抗が大きい液晶組成物を含有する液晶表示素子は、電圧保持率を大きくでき、コントラスト比を大きくできる。したがって、初期に大きな比抵抗値を有し、さらに長時間使用したあとでも大きな比抵抗値を有する液晶組成物が好ましい。

[0018] 本発明の目的は、ネマチック相の温度範囲が広く、適切な光学異方性を有し、負の誘電率異方性が大きく、比抵抗値が大きい液晶組成物を提供することである。また本発明の他の目的は、上記特性を満たしながら、光学異方性が大きく、ネマチック相の下限温度が低い、好ましくは－20℃以下である液晶組成物を提供することである。さらに本発明の他の目的は、上記組成物を含有し、電圧保持率が大きく、VAモード、IPSモードなどに適したアクティブマトリクス(AM)方式で駆動する液晶表示素子を提供することである。

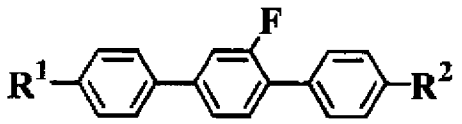
課題を解決するための手段

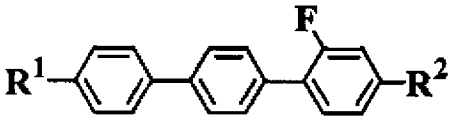
[0019] 本発明者らは、1つまたは2つの水素がフッ素で置き換えられたターフェニルを有する液晶性化合物である第一成分と、2つの水素がハロゲンで置き換えられたフェニレンを有する液晶性化合物である第二成分とを含有する特定の液晶組成物が、ネマチック相の温度範囲が広く、適切な光学異方性を有し、負の誘電率異方性が大きく、比抵抗値が大きいこと、さらに、上記組成物を含有する液晶表示素子が、電圧保持率が大きいことを見い出し、本発明を完成するに到った。

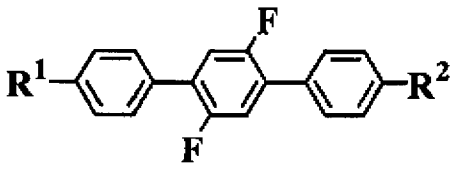
[0020] すなわち本発明は、以下〔1〕～〔15〕に記載された事項を有している。

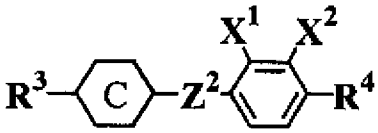
[0021] 〔1〕:下記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、下記式(2－1)～式(2－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

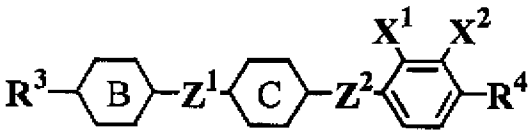
[0022] [化2]

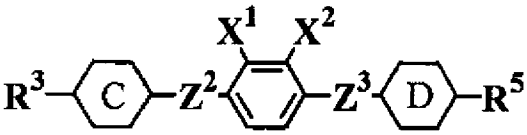

(1-1)


(1-2)


(1-3)


(2-1)


(2-2)


(2-3)

[0023] 式(1－1)～式(1－3)および式(2－1)～式(2－3)において、

R^1およびR^3は独立して、アルキル、またはアルケニルであり;

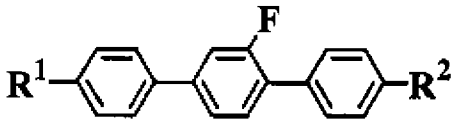
R^2、R^4およびR^5は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシであり;

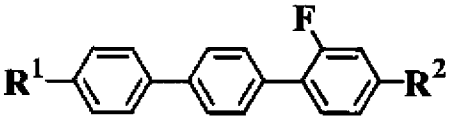
環B、環C、および環Dは独立して、1，4－シクロヘキシレン、1，4－フェニレン、2－フルオロ－1，4－フェニレン、または3－フルオロ－1，4－フェニレンであり;Z^1、Z^2およびZ^3は独立して、単結合、－$(CH_2)_2$－、－CH_2O－、または－OCH_2－であり;

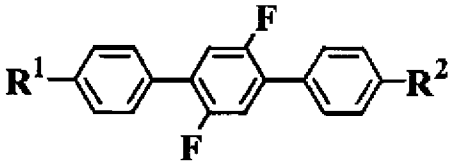
X^1およびX^2は、一方はフッ素であり他方は塩素である。

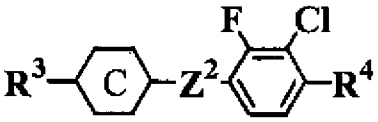
[0024] 〔2〕:下記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、下記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

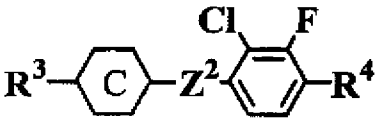
[0025] [化3]

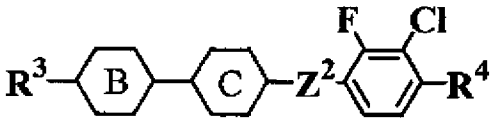

(1-1)

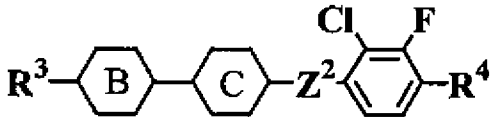

(1-2)

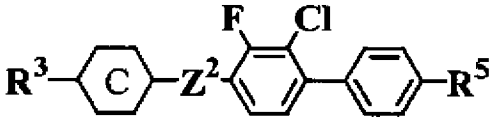

(1-3)

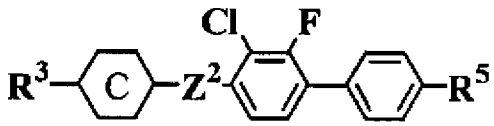

(2-1-1)


(2-1-2)


(2-2-1)


(2-2-2)


(2-3-1)


(2-3-2)

[0026] 式(1－1)～式(1－3)および式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)において、

R^1、およびR^3は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

R^2、R^4、およびR^5は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシであり;

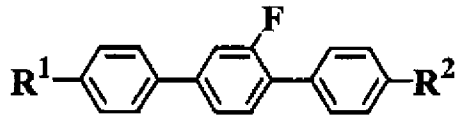
環Bおよび環Cは独立して、1，4－シクロヘキシレンまたは1，4－フェニレンであり；Z^2は独立して、単結合、－$(CH_2)_2$－、－OCH_2－、または－CH_2O－である。）

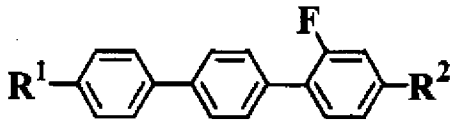
〔3〕：第一成分が上記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第二成分が、上記式（2－1－1）および式（2－1－2）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物と、上記式（2－2－1）、式（2－2－2）、式（2－3－1）、および式（2－3－2）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物との混合物である項〔2〕に記載の液晶組成物。

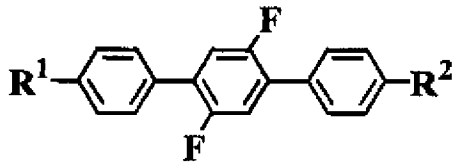
[0027] 〔4〕：上記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式（2－1－1）、式（2－1－2）、式（2－2－1）、式（2－2－2）、式（2－3－1）、および式（2－3－2）で表され、Z^2が単結合で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する、項〔2〕または〔3〕に記載の液晶組成物。

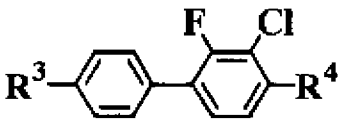
[0028] 〔5〕：下記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、下記式（2－1－1－1）、式（2－1－2－1）、式（2－2－1－1）、式（2－2－2－1）、式（2－3－1－1）、および式（2－3－2－1）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する、負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

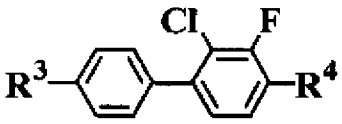
[0029] ［化4］

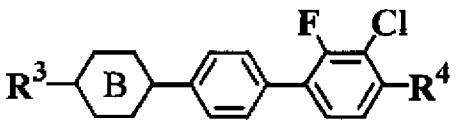

(1-1)

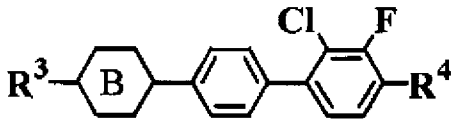

(1-2)

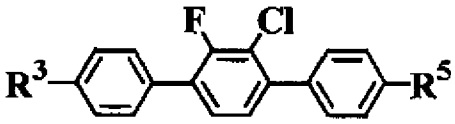

(1-3)

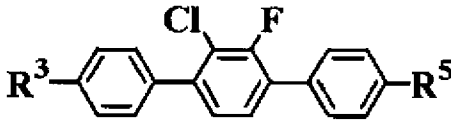

(2-1-1-1)


(2-1-2-1)


(2-2-1-1)


(2-2-2-1)


(2-3-1-1)


(2-3-2-1)

[0030] 式(2－1－1－1)、式(2－1－2－1)、式(2－2－1－1)、式(2－2－2－1)、式(2－3－1－1)、および式(2－3－2－1)において、

R^1およびR^3は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

R^2、R^4、およびR^5は独立して、アルキル、アルケニル、またはアルコキシであり;

環Bは独立して、1，4－シクロヘキシレンまたは1，4－フェニレンである。

[0031] 〔6〕:第一成分が上記式(1－1)および式(1－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である項〔1〕～〔5〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

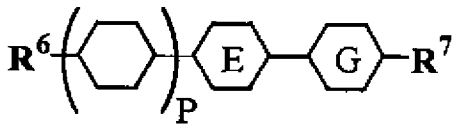
[0032] 〔7〕:第一成分が上記式(1－1)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である項〔1〕～〔5〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0033] 〔8〕:液晶性化合物の全重量に基づいて、上記第一成分の含有割合が5～40重量%の範囲であり、上記第二成分の含有割合が60～95重量%の範囲である項〔1〕～〔7〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0034] 〔9〕:液晶性化合物成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分だけからなる、項〔2〕に記載の液晶組成物。

[0035] 〔10〕:上記第一成分および第二成分に加えて、下記式(3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第三成分を含有する、項〔1〕～〔7〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0036] [化5]



(3)

[0037] 式(3)において、

R^6は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

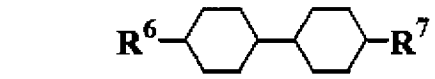
R^7は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシであり;

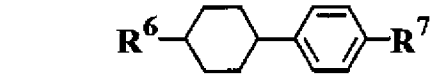
環Eおよび環Gは独立して、1，4－シクロヘキシレン、1，4－フェニレン、2－フルオロ－1，4－フェニレン、または3－フルオロ－1，4－フェニレンであり;

Pは0または1である。

[0038] 〔11〕:上記第三成分が、下記式(3－1)～式(3－13)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である項〔10〕に記載の液晶組成物。

[0039] [化6]

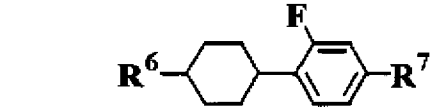

(3-1)

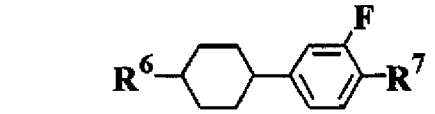

(3-2)

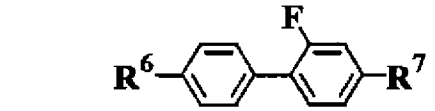

(3-3)

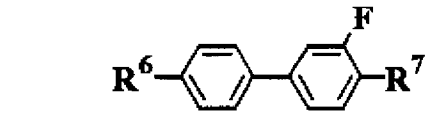

(3-4)

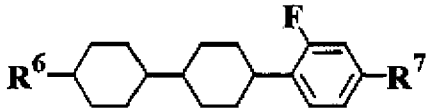

(3-5)

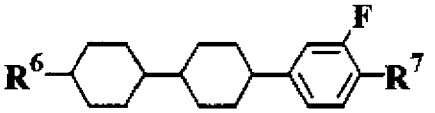

(3-6)

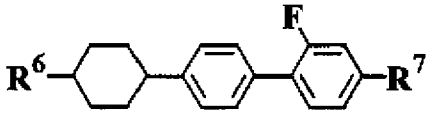

(3-7)

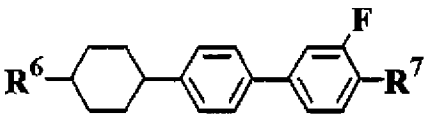

(3-8)


(3-9)


(3-10)


(3-11)


(3-12)


(3-13)

[0040] 式(3－1)～式(3－13)において、

R^6は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

R^7は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシである。

[0041] 〔12〕:液晶性化合物成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分と、上記式(3－1)～式(3－13)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第三成分だけからなる項〔11〕に記載の液晶組成物。

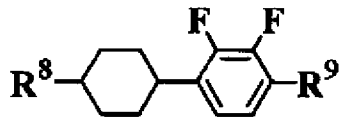
[0042] 〔13〕:上記第三成分が、上記式(3－1)～式(3－5)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である項〔11〕または〔12〕に記載の液晶組成物。

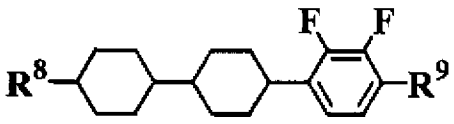
[0043] 〔14〕:上記第三成分が、上記式(3－6)～式(3－13)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である項〔11〕または〔12〕に記載の液晶組成物。

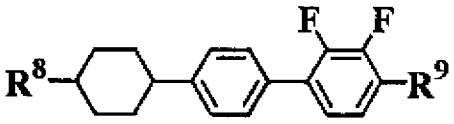
[0044] 〔15〕:液晶性化合物の全重量に基づいて、上記第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲であり、上記第二成分の含有割合が40～90重量%の範囲であり、上記第三成分の含有割合が3～38重量%の範囲である、項〔10〕～〔14〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

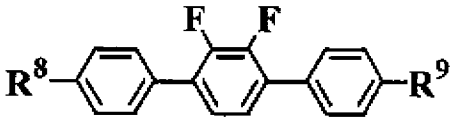
[0045] 〔16〕:上記第一成分、第二成分および第三成分に加えて、
下記式(4－1)～式(4－4)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物かである第四成分を含有する、項〔10〕、〔11〕、〔13〕、および〔14〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0046] [化7]


(4-1)


(4-2)


(4-3)


(4-4)

[0047] 式(4－1)～式(4－4)において、

R^8は独立して、アルキルであり;

R^9は独立して、アルキルまたはアルコキシである。

[0048] 〔17〕:第一成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第二成分が上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第三成分が上記式(3－1)～式(3－5)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第四成分が上記式(4－1)～式(4－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である、項〔16〕に記載の液晶組成物。

[0049] 〔18〕:液晶性化合物の全重量に基づいて、上記第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲であり、上記第二成分の含有割合が10～85重量%の範囲であり、上記第三成分の含有割合が3～38重量%であり、上記第四成分の含有割合が5～50重量%の範囲である、項〔16〕または〔17〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0050] 〔19〕:上記液晶組成物の光学異方性の値が0．10～0．20の範囲である項〔1〕～〔18〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0051] 〔20〕:上記液晶組成物の誘電率異方性の値が－5．0～－2．0の範囲である項〔1〕～〔19〕のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[0052] 〔21〕:項〔1〕～〔20〕のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

[0053] 〔22〕:上記液晶表示素子の動作モードが、VAモードまたはIPSモードであり、上記液晶素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である、項〔21〕に記載の液晶表示素子。

発明の効果

[0054] 本発明の液晶組成物は、ネマチック相の温度範囲が広く、適切な光学異方性を有し、負の誘電率異方性が大きく、比抵抗が大きい。また、これら特性のバランスにも優れる。本発明の液晶組成物は光学異方性を大きくでき、ネマチック相の下限温度を低く、好ましくは－20℃以下にできる。本発明の液晶組成物は、好ましくは光学異方性を0．10～0．20の範囲とし、誘電率異方性を－6．5～－2．0の範囲とすることができる。本発明の液晶表示素子は上記組成物を含有しており、電圧保持率が高い。また、この液晶表示素子は、上記特性を有する組成物を含有するので、VAモード、IPSモードなどの動作モードを有するアクティブマトリクス(AM)方式で駆動する液晶表示素子(以下「AM素子」ともいう)として好適に使用できる。

発明を実施するための最良の形態

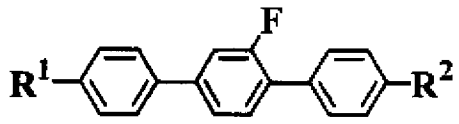
[0055] 本発明の液晶組成物は、1つまたは2つの水素がフッ素で置き換えられたターフェニルを有する液晶性化合物である第一成分と、2つの水素がハロゲンで置き換えられたフェニレンを有する液晶性化合物である第二成分と、必要に応じてさらに、特定構造の液晶性化合物である第三成分、第四成分を含有している。

[0056] 以下、まず各成分につき、成分に用いる化合物の構造、成分の特徴および効果、具体例および好ましい態様について説明をする。

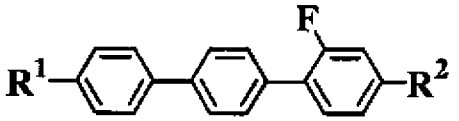
[0057] 〔第一成分〕

本発明の液晶組成物の第一成分は、下記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択された少なくとも1つの液晶性化合物であり、1つまたは2つの水素がフッ素で置き換えられたターフェニルを有する。

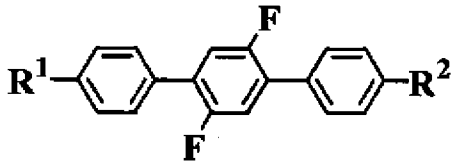
[0058] [化8]



(1-1)



(1-2)



(1-3)

[0059] 上記式(1－1)～式(1－3)において、各々独立して、R^1、およびR^2は以下のように定義される。

[0060] R^1は独立して、アルキル、またはアルケニルであり、R^2は独立して、アルキル、アルケニル、またはアルコキシである。

[0061] 上記アルキルの中でも、炭素数が1～20のアルキルが好ましく、炭素数が1～10のアルキルがより好ましく、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、またはオクチルがさらに好ましく、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、またはヘプチルが特に好ましい。

[0062] 上記アルケニルの中でも、炭素数が2～20のアルケニルが好ましく、炭素数が2～10のアルケニルがより好ましく、ビニル、1－プロペニル、2－プロペニル、1－ブテニル、2－ブテニル、3－ブテニル、1－ペンテニル、2－ペンテニル、3－ペンテニル、4－ペンテニル、1－ヘキセニル、2－ヘキセニル、3－ヘキセニル、4－ヘキセニル、または5－ヘキセニルがさらに好ましく、ビニル、1－プロペニル、3－ブテニル、または3－ペンテニルが特に好ましい。

[0063] なお、R^1またはR^2が上記アルケニルである場合には、これらのアルケニルにおける－CH＝CH－の好ましい立体配置は、二重結合の位置に依存をしている。R^1またはR^2が、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、または3－ヘキセニル等の二重結合が始まる炭素の位置番号が奇数である場合にはトランス配置が好ましい。R^1またはR^2が、2－ブテニル、2－ペンテニル、2－ヘキセニル、4－ヘキセニル等の二重結合が始まる炭素の位置番号が偶数である場合に

はシス配置が好ましい。

[0064] 上記アルコキシの中でも、炭素数が1～20のアルコキシが好ましく、炭素数が1～10のアルコキシがより好ましく、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、またはヘプチルオキシがさらに好ましく、メトキシ、エトキシ、またはブトキシが特に好ましい。

[0065] 上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物は、1つまたは2つの水素がフッ素で置き換えられたターフェニルを有している。第一成分である液晶性化合物がこのような構造を有することにより、本発明に係る液晶組成物では、ネマチック相の上限温度を高くでき、光学異方性を大きくできる。

[0066] 上記式(1－1)～式(1－3)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は高く、粘度が中程度であり、光学異方性が大であり、負の誘電率異方性が極めて小さく、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0067] これら上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物の中でも、R^2が独立してアルキルまたはアルケニルで表される化合物が好ましい。これら化合物の中でも上記式(1－1)および式(1－2)で表される化合物がより好ましく、式(1－1)で表される化合物がさらに好ましい。

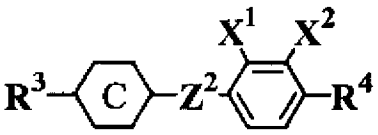
[0068] 第一成分である液晶性化合物が上記式で表される化合物である場合には、液晶組成物のネマチック相の上限温度をより一層高くでき、光学異方性を大きくできる。

[0069] これら液晶性化合物は、第一成分として、単独で用いても、複数組み合わせて用いてもよい。

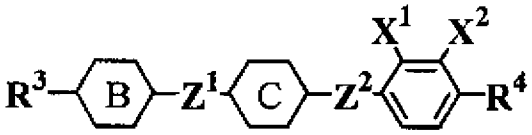
[0070] 〔第二成分〕

本発明の液晶組成物の第二成分は、下記式(2－1)～式(2－3)で表される少なくとも1つの液晶性化合物である。

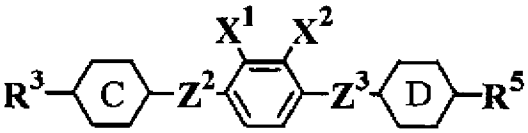
[0071] [化9]



(2-1)



(2-2)



(2-3)

[0072] 上記式(2－1)～式(2－3)において、各々独立して、R^3、R^4、R^5、環B、環C、環D、Z^1、Z^2およびZ^3は以下のように定義される。

[0073] R^3は独立して、アルキルまたはアルケニルであり、R^4およびR^5は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシである。R^3、R^4およびR^5のアルキル、アルケニル、およびアルコキシの好ましい態様については、R^1およびR^2の場合と同様である。

[0074] 環B、環C、および環Dは独立して、1，4－シクロヘキシレン、1，4－フェニレン、2－フルオロ－1，4－フェニレン、または3－フルオロ－1，4－フェニレンである。なお、上記式(2－1)～式(2－3)で表される化合物に含まれる環が1，4－シクロヘキシレンである場合には、その立体配置はトランス配置が好ましい。

[0075] Z^1、Z^2およびZ^3は独立して、単結合、－$(CH_2)_2$－、－CH_2O－、または－OCH_2－である。

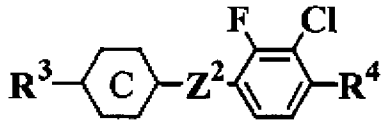
[0076] X^1およびX^2は一方がフッ素であり、他方は塩素である。

[0077] 上記式(2－1)～式(2－3)で表される化合物は2位および3位の一方の水素がフッ素で置き換えられ、他方の水素が塩素で置き換えられた1，4－フェニレンを有する。

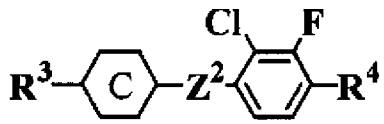
第二成分である液晶性化合物がこのような構造を有することにより、本発明に係る液晶組成物は誘電率異方性を負に大きくできる。

[0078] これら式(2－1)～式(2－3)で表される化合物の中でも、下記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物が好ましい。

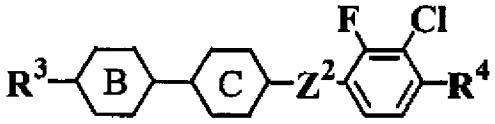
[0079] [化10]



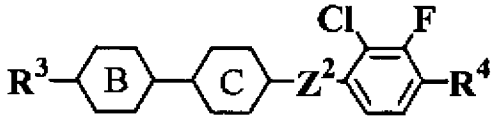
(2-1-1)



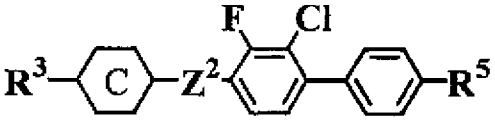
(2-1-2)



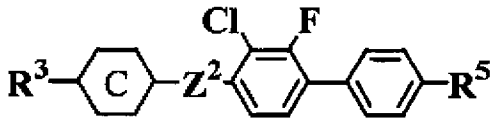
(2-2-1)



(2-2-2)



(2-3-1)



(2-3-2)

[0080] 上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)および式(2－3－2)において、R^2、R^4、R^5、環B、環CおよびZ^2は以下のように定義される。

[0081] R^3、R^4およびR^5は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシであり;
環Bおよび環Cは独立して、1，4－シクロヘキシレンまたは1，4－フェニレンであり;
Z^2は独立して、単結合、－$(CH_2)_2$－、－OCH_2－または－CH_2O－である。

[0082] 上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物は2位および3位の一方の水素がフッ素で置き換えられ、他方の水素が塩素に置き換えられた1，4－フェニレンを有し、特定の結合基を有している。第二成分である液晶性化合物がこのような構造を有することにより、本発明に係る液晶組成物では液晶組成物の誘電率異方性を負に大きくでき、粘度が大きくなることを抑制できる。

[0083] これら化合物の中でも上記式(2－1－1)および式(2－1－2)で表される液晶性化

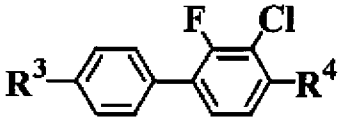
合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は必ずしも高くないが、粘度が中程度～比較的大であり、光学異方性が中程度～比較的大であり、負の誘電率異方性が中程度～比較的大であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

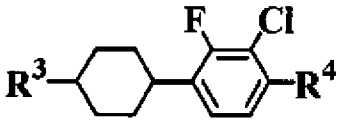
[0084] これら化合物の中でも上記式(2－2－1)および式(2－2－2)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は中程度～高く、粘度が大であり、光学異方性が中程度～大であり、負の誘電率異方性が大であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

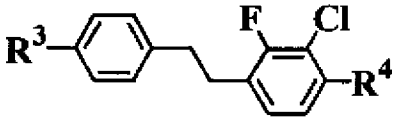
[0085] これら化合物の中でも上記式(2－3－1)および式(2－3－2)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は中程度であり、粘度が大であり、光学異方性が大であり、負の誘電率異方性が大であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

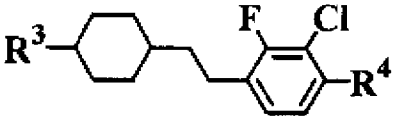
[0086] これら式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)および式(2－3－2)で表される化合物の中でも、下記式(2－1－1－1)～式(2－1－1－6)、式(2－1－2－1)～式(2－1－2－6)、式(2－2－1－1－1)、式(2－2－1－1－2)、式(2－2－1－2－1)、式(2－2－1－2－2)、式(2－2－1－3－1)、式(2－2－1－3－2)、式(2－2－1－4)～式(2－2－1－6)、式(2－2－2－1－1)、式(2－2－2－1－2)、式(2－2－2－2－1)、式(2－2－2－2－2)、式(2－2－2－3－1)、式(2－2－2－3－2)、式(2－2－2－4)～式(2－2－2－6)、式(2－3－1－1)～式(2－3－1－6)、および式(2－3－2－1)～式(2－3－2－6)で表される化合物が好ましい。第二成分が下記化合物である場合には、液晶組成物の誘電率異方性を負に大きくできる。なお、式中におけるR^3、R^4およびR^5は、上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)および式(2－3－2)で表される化合物の場合と同様である。

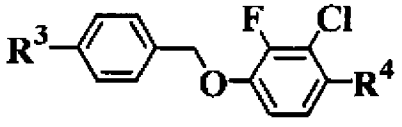
[0087] [化11]

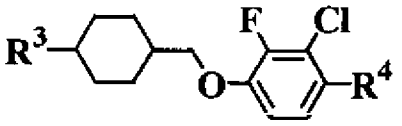

(2-1-1-1)


(2-1-1-2)

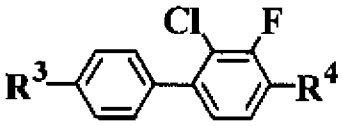

(2-1-1-3)

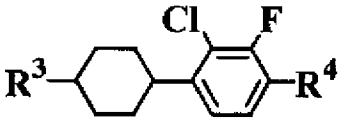

(2-1-1-4)

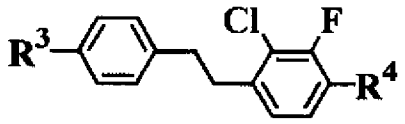

(2-1-1-5)

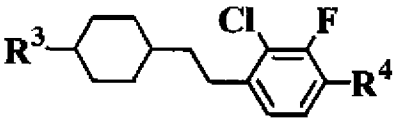

(2-1-1-6)

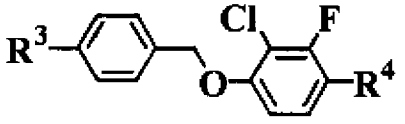
[0088] [化12]

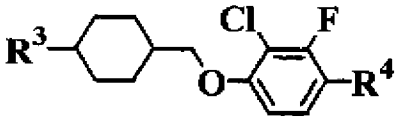

(2-1-2-1)


(2-1-2-2)

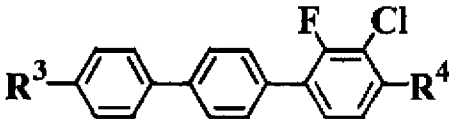

(2-1-2-3)

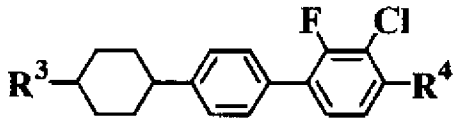

(2-1-2-4)

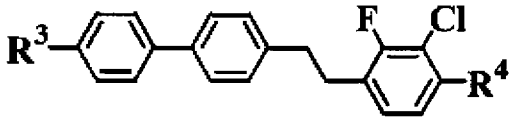

(2-1-2-5)

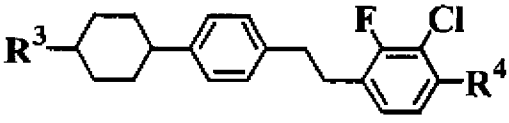

(2-1-2-6)

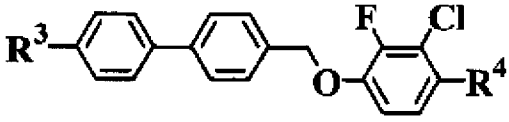
[0089] [化13]

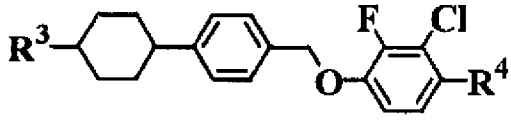

(2-2-1-1-1)

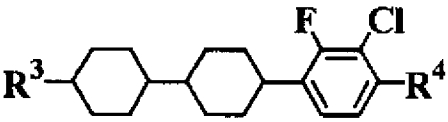

(2-2-1-1-2)

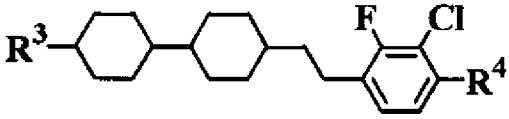

(2-2-1-2-1)

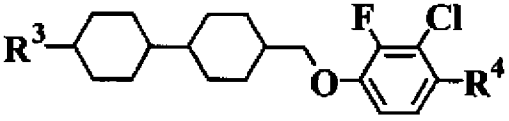

(2-2-1-2-2)


(2-2-1-3-1)

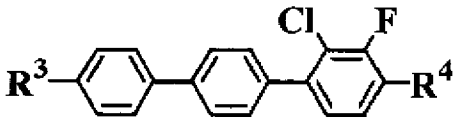

(2-2-1-3-2)

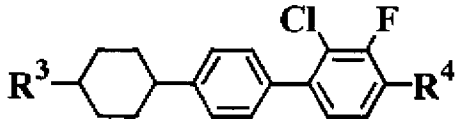

(2-2-1-4)

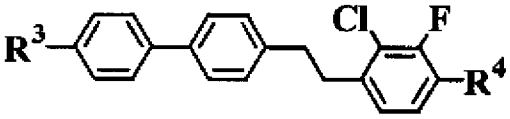

(2-2-1-5)

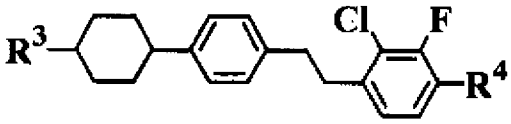

(2-2-1-6)

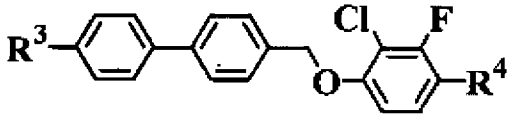
[0090] [化14]

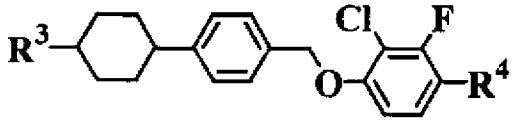

(2-2-2-1-1)

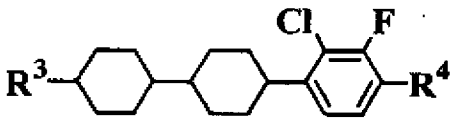

(2-2-2-1-2)

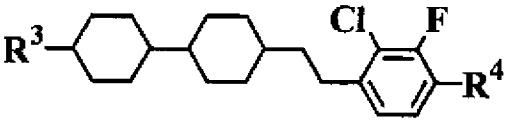

(2-2-2-2-1)

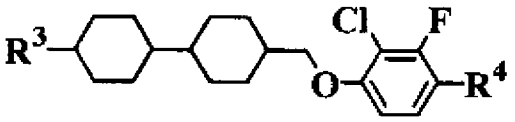

(2-2-2-2-2)


(2-2-2-3-1)

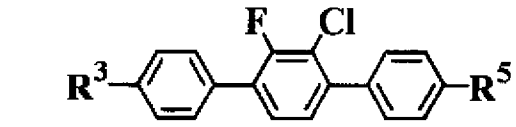

(2-2-2-3-2)

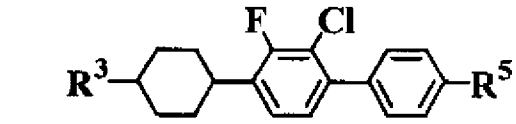

(2-2-2-4)

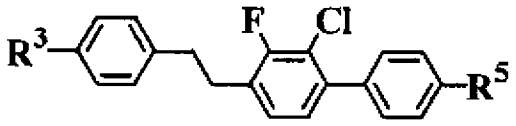

(2-2-2-5)

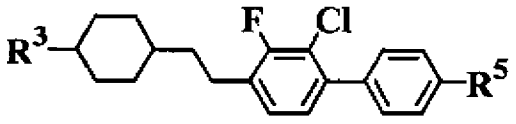

(2-2-2-6)

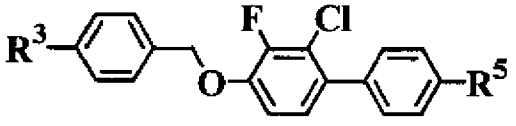
[0091] [化15]

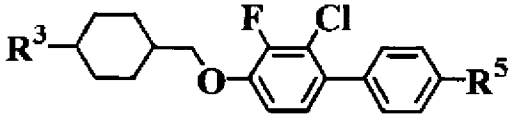

(2-3-1-1)


(2-3-1-2)

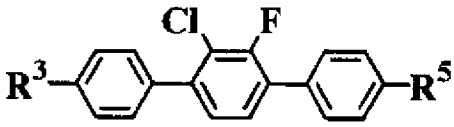

(2-3-1-3)

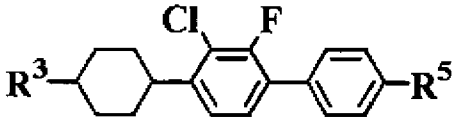

(2-3-1-4)

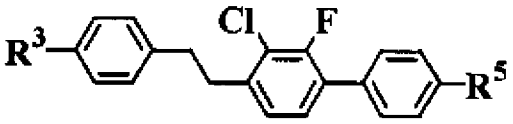

(2-3-1-5)

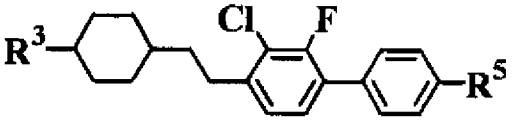

(2-3-1-6)

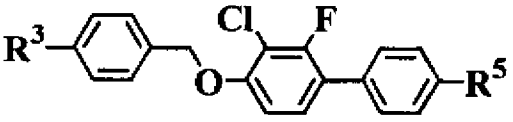
[0092] [化16]

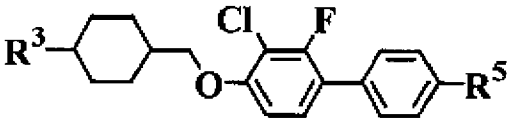

(2-3-2-1)


(2-3-2-2)


(2-3-2-3)


(2-3-2-4)


(2-3-2-5)


(2-3-2-6)

[0093] 上記式で表される化合物の中でも、上記式(2－1－1－1)、式(2－1－1－2)、式(2－1－2－1)、式(2－1－2－2)、式(2－2－1－1－1)、式(2－2－1－1－2)、式(2－2－2－1－1)、式(2－2－2－1－2)、式(2－3－1－1)、式(2－3－1－2)、式(2－3－2－1)、および式(2－3－2－2)で表される化合物が好ましい。第二成分が上記化合物である場合には、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くし、誘電率異方性を負に大きくできる。

[0094] また上記式で表される化合物の中でも上記式(2－1－1－1)、式(2－1－2－1)、式(2－2－1－1－1)、式(2－2－1－1－2)、式(2－2－2－1－1)、式(2－2－2－1－2)、式(2－3－1－1)および式(2－3－2－1)で表される化合物がより好ましい。第二成分が上記化合物である場合には、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くし、誘電率異方性を負に大きくし、光学異方性を大きくできる。

[0095] 本発明の液晶組成物に用いる第二成分は、上記式(2－1)～式(2－3)で表され、X^1が塩素でX^2がフッ素である1つの化合物だけであってもよく、上記式で表され、X^1が塩素でX^2がフッ素である2つ以上の化合物であってもよい。

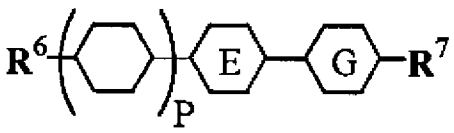
[0096] また上記第二成分は、上記式(2－1)～式(2－3)で表され、X^1がフッ素でX^2が塩素である1つの化合物だけであってもよく、上記式で表され、X^1がフッ素でX^2が塩素である2つ以上の化合物であってもよい。

[0097] さらに上記第ニ成分は、上記式(2－1)～式(2－3)で表され、X^1が塩素でX^2がフッ素である化合物と、X^1がフッ素でX^2が塩素である化合物との混合物であってもよい。この場合には、液晶組成物のネマチック相の下限温度が低くなる場合がある。

[0098] 〔第三成分〕

本発明の液晶組成物は、さらに必要に応じて、下記式(3)で表される少なくとも1つの液晶性化合物である第三成分を含有する。

[0099] [化17]



(3)

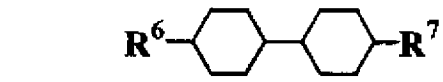
[0100] 上記式(3)において、R^6は独立して、アルキルまたはアルケニルであり、R^7は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシである。R^6の好ましい態様は、上記第一成分の式(1－1)～式(1－3)で表される化合物中のR^1と同様である。またR^7の好ましい態様は、上記第一成分の式(1－1)～式(1－3)で表される化合物中のR^2と同様である。

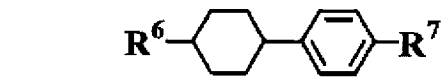
[0101] 環Eおよび環Gは独立して、1，4－シクロヘキシレン、1，4－フェニレン、2－フルオロ－1，4－フェニレン、または3－フルオロ－1，4－フェニレンである。Pは0または1である。

[0102] 第三成分である液晶性化合物が上記式で表される化合物である場合には、液晶性化合物全重量に対する第三成分の含有割合を変化させることで、ネマチック相の上限温度を容易に変化させることができ、光学異方性を容易に変化させることができる。

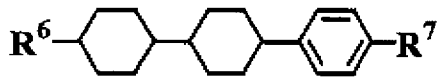
[0103] 上記式(3)で表される化合物の中でも、下記式(3－1)～式(3－13)で表される化合物が好ましい。

[0104] [化18]

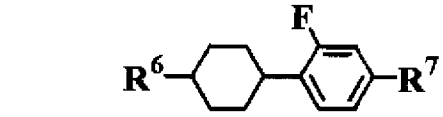

(3-1)

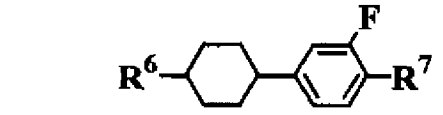

(3-2)

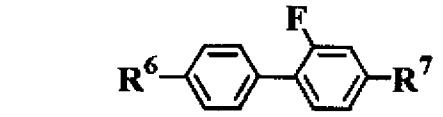

(3-3)

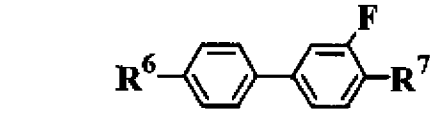

(3-4)

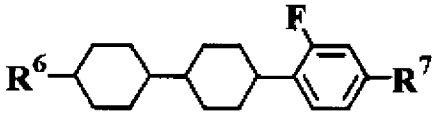

(3-5)

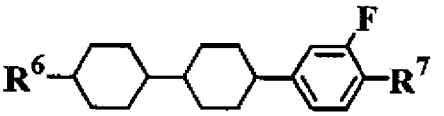

(3-6)

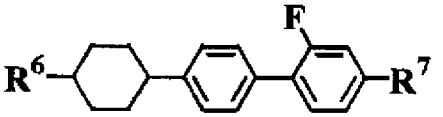

(3-7)

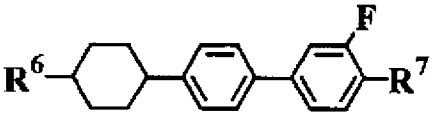

(3-8)


(3-9)


(3-10)


(3-11)


(3-12)


(3-13)

[0105] R^6およびR^7は、上記式(3)で表される化合物の場合と同様である。

[0106] これら化合物の中でも上記式(3－1)～式(3－3)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は高くはないが、粘度が小さく、光学異方性が小～大であり、負の誘電率異方性が極めて小さく、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0107] これら化合物の中でも上記式(3－4)および式(3－5)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は高く、粘度が小さく、光学異方性が中程度～大であり、負の誘電率異方性が極めて小さく、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0108] これら化合物の中でも上記式(3－6)～式(3－9)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度はそれほど高くはないが、粘度が小さく、光学異方性が中程度～大であり、負の誘電率異方性が小さく、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0109] これら化合物の中でも上記式(3－10)～式(3－13)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は高く、粘度が中程度であり、光学異方性が中程度～大であり、負の誘電率異方性が小～中程度であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0110] これら化合物の中でも上記式(3－1)～式(3－5)で表される化合物は、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くできるため好ましい。

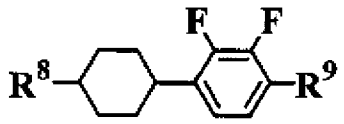
[0111] これら化合物の中でも上記式(3－6)～式(3－13)で表される化合物は、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くし、誘電率異方性を負に大きくできるため好ましい。

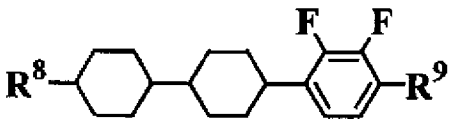
[0112] これら液晶性化合物は、第三成分として、単独で用いても、複数組み合わせて用いてもよい。

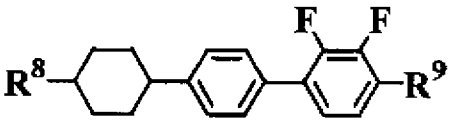
[0113] 〔第四成分〕

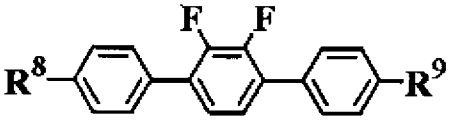
本発明の液晶組成物は、さらに必要に応じて、下記式(4－1)～式(4－4)で表される少なくとも1つの液晶性化合物である第四成分を含有する。

[0114] [化19]


(4-1)


(4-2)


(4-3)


(4-4)

[0115] 上記式(4－1)～式(4－4)において、各々独立して、R^8およびR^9は以下のように定義される。

[0116] R^8は独立して、アルキルである。R^9は独立して、アルキルまたはアルコキシである。R^8の好ましい態様は、上記第一成分の式(1－1)～式(1－3)で表される化合物中のR^1のアルキルと同様である。またR^9の好ましい態様は、上記第一成分の式(1－1)～式(1－3)で表される化合物中のR^2のアルキルおよびアルコキシと同様である。

[0117] 上記式(4－1)～式(4－4)で表される化合物は2，3－ジフルオロ－1，4－フェニレンを有する。第四成分である液晶性化合物がこのような構造を有することにより、本発明に係る液晶組成物の誘電率異方性を負に大きくできる。

[0118] これら化合物の中でも上記式(4－1)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は必ずしも高くはないが、粘度が中程度～比較的大であり、光学異方性が中程度であり、負の誘電率異方性が中程度～比較的大であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0119] これら化合物の中でも上記式(4－2)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は中程度～高く、粘度が大であり、光学異方性が中程度であり、負の誘電率異方性が大であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0120] これら化合物の中でも上記式(4－3)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶

性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は中程度～高く、粘度が大であり、光学異方性が大であり、負の誘電率異方性が大であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0121] これら化合物の中でも上記式(4－4)で表される液晶性化合物は、一般的な液晶性化合物と比較すると、ネマチック相の上限温度は中程度であり、粘度が大であり、光学異方性が大であり、負の誘電率異方性が大であり、比抵抗が大きい点に特徴がある。

[0122] 上記式(4－1)、～式(4－4)で表される化合物の中でも、上記式(4－1)、式(4－2)、および式(4－3)で表される化合物が好ましい。

[0123] 第二成分が上記化合物である場合には、液晶組成物の誘電率異方性を負に大きくできる。

[0124] これら液晶性化合物は、第四成分として、単独で用いても、複数組み合わせて用いてもよい。

[0125] 〔液晶性化合物の合成方法〕

以下、本発明に係る液晶組成物に用いる液晶性化合物の合成法を例示する。

[0126] 上記式(2－2－1)、および式(2－2－2)で表される化合物に代表される式(2)で表される化合物は、特願2005－59154号に記載された方法に基づいて合成できる。

[0127] また、上記式(3－1)等で表される化合物に代表される式(3)で表される化合物は、特開昭59－70624号公報、または特開昭60－16940号公報に記載された方法に基づいて合成できる。

[0128] なお、上記文献のみで合成できない化合物については、さらに、オーガニック・シンセシス(Organic Synthesis, John Wiley & Sons, Inc)、オーガニック・リアクション(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)などに記載された方法に基づいて合成できる。

[0129] 〔液晶組成物(1)〕

以下、組成物の各成分の組合せ、各成分の好ましい割合について説明をする。

[0130] 本発明の液晶組成物は、上記第一成分と第二成分とを組み合わせる(以下「液晶組成物(1)」ともいう。)。

[0131] これら2成分を組み合わせた組成物は、誘電率異方性を負に大きくでき、また光学異方性を大きくできる。

[0132] 特許文献5の比較例3に開示された液晶組成物は、本発明の第一成分である液晶性化合物を含有しているが、末端位のベンゼン環の水素がハロゲンで置き換えられた液晶性化合物、および4つの環を含有する液晶性化合物をさらに含有している。このように、ハロゲンやシアノ等の電子求引性基を末端位に有する液晶性化合物が含まれる液晶組成物は、誘電率異方性が正になる場合、あるいは負に大きくならない場合がある。また、4つの環を有する液晶性化合物を含む液晶組成物は、ネマチック相の下限温度が高くなる場合、あるいは粘度が大きくなる場合がある。

[0133] そのため本発明の第一成分および第二成分だけからなる液晶組成物は、誘電率異方性を負に大きくし、光学異方性を大きくすることができる場合がある。

[0134] 液晶性化合物成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分だけからなる液晶組成物は、ネマチック相の下限温度を低くでき、誘電率異方性を負に大きくできる。

[0135] 液晶性化合物成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式(2－1－1－1)、式(2－1－2－1)、式(2－2－1－1)、式(2－2－2－1)、式(2－3－1－1)、および式(2－3－2－1)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分だけからなる液晶組成物は、ネマチック相の下限温度を低くし、誘電率異方性を負に大きくし、より光学異方性を大きくすることができる。

[0136] 本発明に係る上記液晶組成物(1－1)～式(1－3)の第一成分および第二成分の含有割合は特に制限はされないが、上記液晶組成物(1－1)～式(1－3)中の液晶性化合物の全重量に基づいて、第一成分の含有割合が5～40重量%の範囲、第二成分の含有割合が60～95重量%の範囲であることが好ましく、第一成分の含有割

合が12～30重量%の範囲、第二成分の含有割合が70～88重量%の範囲であることがより好ましい。

[0137] なお第二成分が、式(2－3－1－1)および式(2－3－2－1)で表され、かつR^5がアルキルまたはアルケニルの化合物である場合には、両式で表される化合物は重複する。したがって、式(2－3－1－1)および式(2－3－2－1)で表され、かつR^5がアルキルまたはアルケニルの化合物は、式(2－3－1－1)で表される化合物として、式番号を表記し、第二成分の含有割合を計算する。

[0138] 第一成分と第二成分との含有割合が上記範囲にある場合には、液晶組成物のネマチック相の温度範囲を広くし、光学異方性を大きくしつつ適切な範囲とし、誘電率異方性を適切な範囲とし、比抵抗を大きくすることができる。

[0139] 第一成分および第二成分の含有割合が上記範囲にある場合、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くすることができる。第一成分および第二成分の含有割合が上記範囲にあり、第一成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき10重量%以下、第二成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき15重量%以下、好ましくは式(2－2)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき10重量%以下および式(2－3)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき5重量%以下である場合には、液晶組成物のネマチック相の下限温度を－20℃以下に調整しやすい。

[0140] 〔液晶組成物(2)〕

本発明に係る液晶組成物では、上記第一成分、第二成分に加えて、さらに上記第三成分を組み合わせた組成物も好ましい(以下「液晶組成物(2)」ともいう。)。このように組合せると、液晶組成物のネマチック相の温度範囲を広くし、光学異方性を適切な範囲とし、誘電率異方性を適切な範囲とし、比抵抗を大きくすることができる。

[0141] 本発明の第一成分、第二成分および第三成分だけからなる液晶組成物は、ネマチック相の下限温度を低くできる。

[0142] 液晶性化合物成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合

物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分と、上記式(3－1)～式(3－13)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第三成分とだけからなる液晶組成物は、ネマチック相の下限温度を低くできる。

[0143] 液晶性化合物成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式(2－1－1－1)、式(2－1－2－1)、式(2－2－1－1)、式(2－2－2－1)、式(2－3－1－1)、および式(2－3－2－1)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分と、上記式(3－1)～式(3－13)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第三成分とだけからなる液晶組成物は、ネマチック相の下限温度を低くし、光学異方性をより大きくすることできる。

[0144] 本発明に係る上記液晶組成物(2)の第一成分、第二成分、および第三成分の含有割合は特に制限はされないが、液晶性化合物の全重量に基づいて、第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲、第二成分の含有割合が40～90重量%の範囲、第三成分の含有割合が3～38重量%の範囲であることが好ましく、第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲、第二成分の含有割合が50～90重量%の範囲、第三成分の含有割合が5～38重量%の範囲であることがより好ましく、第一成分の含有割合が10～25重量%の範囲、第二成分の含有割合が60～80重量%の範囲、第三成分の含有割合が10～30重量%の範囲であることが更により好ましい。

[0145] 上記液晶組成物(2)の第一成分、第二成分、および第三成分の含有割合が上記範囲にある場合には、液晶組成物のネマチック相の温度範囲を広げ、光学異方性を適切な範囲とし、さらに誘電率異方性を適切な範囲とし、比抵抗を大きくできる。

[0146] 第一成分、第二成分および第三成分の含有割合が上記範囲にある場合、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くすることができる。第一成分、第二成分および第三成分の含有割合が上記範囲にあり、第一成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき10重量%以下、第二成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき15重量%以下、好ましくは式(2－2)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき10重量%以下および式(2－3)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき5重量%以下、好ましくは第三成分の各化合物の含有割合が1つの化合

物につき15重量%以下である場合には、液晶組成物のネマチック相の下限温度を－20℃以下に調整しやすい。

[0147] 〔液晶組成物(3)〕

本発明に係る液晶組成物では、上記第一成分、第二成分および第三成分に加えて、さらに上記第四成分を組み合わせた組成物も好ましい(以下「液晶組成物(3)」ともいう。)。このように組合せると、液晶組成物のネマチック相の温度範囲を広くし、光学異方性を適切な範囲とし、さらに誘電率異方性を適切な範囲とし、比抵抗を大きくすることができる。

[0148] 本発明の第二成分である2位および3位の一方の水素がフッ素で置き換えられ、他方の水素が塩素に置き換えられた1，4－フェニレンを有する少なくとも1つの化合物と、第四成分である2，3－ジフルオロフェニレンを有する少なくとも1つの化合物とを組み合わせると、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くでき、ネマチック相の温度範囲を広くできる。

[0149] 本発明に係る上記液晶組成物(3)の第一成分、第二成分、第三成分および第四成分の含有割合は特に制限はされないが、液晶性化合物の全重量に基づいて、第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲、第二成分の含有割合が10～85重量%の範囲、第三成分の含有割合が3～38重量%の範囲、第四成分の含有割合が5～50重量%の範囲であることが好ましく、第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲、第二成分の含有割合が10～85重量%の範囲、第三成分の含有割合が5～38重量%の範囲、第四成分の含有割合が5～50重量%の範囲であることがより好ましく、第一成分の含有割合が12～25重量%の範囲、第二成分の含有割合が30～60重量%の範囲、第三成分の含有割合が5～30重量%の範囲、第四成分の含有割合が20～40重量%の範囲であることが更により好ましい。

[0150] 上記液晶組成物(3)の第一成分、第二成分、第三成分および第四成分の含有割合が上記範囲にある場合には、液晶組成物のネマチック相の温度範囲を広げ、適切な光学異方性にし、適切な範囲の誘電率異方性を有し、さらに比抵抗を大きくできる。

[0151] 第一成分、第二成分、第三成分および第四成分の含有割合が上記範囲にある場

合、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くすることができる。第一成分、第二成分、第三成分および第四成分の含有割合が上記範囲にあり、第一成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき10重量%以下、第二成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき15重量%以下、好ましくは式(2－2)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき10重量%以下および式(2－3)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき5重量%以下、好ましくは第三成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき15重量%以下、第四成分の各化合物の含有割合が1つの化合物につき15重量%以下、好ましくは式(4－2)および式(4－3)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき10重量%以下および式(4－4)で表される化合物の含有割合が1つの化合物につき5重量%以下、である場合には、液晶組成物のネマチック相の下限温度を－20℃以下に調整しやすい。

[0152] 〔液晶組成物の態様等〕

本発明に係る液晶組成物では、上記第一成分、第二成分、および必要に応じて添加する第三成分、第四成分である液晶性化合物に加えて、例えば液晶組成物の特性をさらに調整する目的で、さらに他の液晶性化合物を添加して使用する場合がある。また、例えばコストの観点から、本発明の液晶組成物では、上記第一成分、第二成分、および必要に応じて添加する第三成分、第四成分である液晶性化合物以外の液晶性化合物は添加せずに使用する場合もある。

[0153] また本発明に係る液晶組成物には、さらに、光学活性化合物、色素、消泡剤、紫外線吸収剤、酸化防止剤等の添加物を添加してもよい。

[0154] 光学活性化合物を本発明に係る液晶組成物に添加した場合には、液晶にらせん構造を誘起し、ねじれ角を与えることなどができる。

[0155] 色素を本発明に係る液晶組成物に添加した場合には、液晶組成物をGH(Guest host)モードで動作する液晶表示素子に適用できる。

[0156] 消泡剤を本発明に係る液晶組成物に添加した場合には、例えば、液晶組成物を運搬する際、あるいは上記液晶組成物から液晶表示素子を製造する際の発泡を抑制できる。

[0157] 紫外線吸収剤、あるいは酸化防止剤を本発明に係る液晶組成物に添加した場合

には、液晶組成物、あるいは上記液晶組成物を含む液晶表示素子の劣化を防止することなどが可能となる。例えば酸化防止剤は、液晶組成物を加熱した際の比抵抗の低下を抑制できる。

[0158] 上記紫外線吸収剤としては、ベンゾフェノン系紫外線吸収剤、ベンゾエート系紫外線吸収剤、トリアゾール系紫外線吸収剤などを挙げられる。

[0159] ベンゾフェノン系紫外線吸収剤の具体例は、2－ヒドロキシ－4－オクトキシベンゾフェノンである。

[0160] ベンゾエート系紫外線吸収剤の具体例は、2，4－ジ－t－ブチルフェニル－3，5－ジ－t－ブチル－4－ヒドロキシベンゾエートである。

[0161] トリアゾール系紫外線吸収剤の具体例は、2－(2－ヒドロキシ－5－メチルフェニル)ベンゾトリアゾール、2－[2－ヒドロキシ－3－(3，4，5，6－テトラヒドロキシフタルイミドーメチル)－5－メチルフェニル]ベンゾトリアゾール、および2－(3－t－ブチル－2－ヒドロキシ－5－メチルフェニル)－5－クロロベンゾトリアゾールである。

[0162] 上記酸化防止剤としては、フェノール系酸化防止剤、有機硫黄系酸化防止剤などを挙げられる。

[0163] フェノール系酸化防止剤の具体例は、3，5－ジ－t－ブチル－4－ヒドロキシトルエン、2，2'－メチレンビス(6－t－ブチルー4－メチルフェノール)、4，4'－ブチリデンビス(6－t－ブチル－3－メチルフェノール)、2，6－ジ－t－ブチル－4－(2－オクタデシルオキシカルボニル)エチルフェノール、およびペンタエリスリトールテトラキス[3－(3，5－ジ－t－ブチル－4－ヒドロキシフェニル)プロピオネート]である。

[0164] 有機硫黄系酸化防止剤の具体例は、ジラウリル－3，3'－チオプロピオネート、ジミリスチル－3，3'－チオプロピオネート、ジステアリル－3，3'－チオプロピオネート、ペンタエリスリトールテトラキス(3－ラウリルチオプロピオネート)、および2－メルカプトベンズイミダゾールである。

[0165] 紫外線吸収剤、酸化防止剤などに代表される上記添加物は、本発明の目的を損なわず、かつ添加物を添加する目的を達成できる範囲の量で用いることができる。例えば、上記紫外線吸収剤を添加する場合には、その添加割合は、液晶性化合物の全重量に基づいて、通常100ppm～1000000ppmの範囲の量、好ましくは100～10

000ppmの範囲の量、より好ましくは1000～10000ppmの範囲の量である。例えば、上記酸化防止剤を添加する場合には、その添加割合は、液晶性化合物の全重量に基づいて、通常10ppm～500ppmの範囲の量、好ましくは30～300ppmの範囲の量、より好ましくは40～200ppmの範囲の量である。

[0166] なお、本発明に係る液晶組成物は、液晶組成物を構成する各化合物の合成工程、液晶組成物の調製工程等において混入する合成原料、副生成物、反応溶媒、合成触媒等の不純物を含んでいる場合もある。

[0167] 〔液晶組成物の製造方法〕

本発明に係る液晶組成物は、例えば、各成分となる化合物が液体の場合には、それぞれの化合物を混合し振とうさせることにより、また固体を含む場合には、それぞれの化合物を混合し、加熱溶解によってお互い液体にしてから振とうさせることにより調製できる。また、本発明に係る液晶組成物はその他の公知の方法により調製できる。

[0168] 〔液晶組成物の特性〕

本発明に係る液晶組成物では、通常、0．10～0．20の範囲の光学異方性を有する。なお、本発明に係る液晶組成物では、組成等を適宜調整して、光学異方性を0．09～0．22の範囲とすることもできる。

[0169] また、本発明に係る液晶組成物では、通常、－6．5～－2．0の範囲の誘電率異方性、好ましくは、－5．0～－3．0の範囲の誘電率異方性を有する液晶組成物を得ることができる。上記数値範囲にある液晶組成物は、IPSモード、およびVAモードで表示される液晶表示素子として好適に使用できる。

[0170] 本発明に係る液晶組成物は、通常、上記数値範囲の光学異方性、および上記数値範囲の誘電率異方性の両方を有する。

[0171] また、VAモード、IPSモードで表示される液晶表示素子のコントラスト比を最大にするためには、液晶組成物の光学異方性（Δn）と液晶表示素子のセルギャップ（d）との積の値（Δn・d）を一定値とするように設計する。VAモードでは、この値（Δn・d）を例えば0．30～0．35μmの範囲とすることが好ましく、IPSモードでは、例えば0．20～0．30μmの範囲とすることが好ましい。なお、セルギャップ（d）は通常3～6μmであるので、コントラスト比を最大とするためには液晶組成物の光学異方性は、通常0．0

5～0．11の範囲であることが好ましい。

[0172] VAモードにおいて4μmまたはそれ以上のセルギャップ(d)の場合には、液晶表示素子の応答速度が遅くなるためには好ましくない場合がある。動画等を表示するためには迅速な応答速度が必要であり、4μmより小さいセルギャップ(d)の液晶表示素子が用いられる。セルギャップ(d)が3μm以下である場合には、液晶組成物の光学異方性は、0．10～0．11の範囲より大きいことが好ましい。なお、このことはIPSモードにも当てはまる。

[0173] 〔液晶表示素子〕

本発明に係る液晶組成物は液晶表示素子に用いることができる。本発明に係る液晶表示素子は、AM方式、パッシブマトリクス(PM)方式のいずれで駆動をしてもよいし、PCモード、TNモード、STNモード、OCBモード、VAモード、IPSモード等のいずれの動作モードで表示されてもよい。これらAM方式、およびPM方式で駆動する液晶表示素子は、反射型、透過型、半透過型、いずれの液晶ディスプレイ等にも適用ができる。

[0174] また、本発明に係る液晶組成物は、導電剤を添加させた液晶組成物を用いたDS(dynamic scattering)モード素子や、液晶組成物をマイクロカプセル化して作製したNCAP(nematic curvilinear aligned phase)素子や、液晶組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたPD(polymer dispersed)素子、例えばPN(polymer network)素子にも使用できる。

[0175] 本発明に係る液晶組成物は上述のような特性を有するので、中でも負の誘電率異方性を利用した動作モード、例えば、VAモード、IPSモードなどで表示するAM方式の液晶表示素子に好適に用いることができ、特に、VAモードで表示するAM方式の液晶表示素子に好適に用いることができる。

[0176] なお、TNモード、VAモード等で表示する液晶表示素子においては、電場の方向は、液晶層に対して垂直である。一方、IPSモード等で表示する液晶表示素子においては、電場の方向は、液晶層に対して平行である。なお、VAモードで表示する液晶表示素子の構造は、K. Ohmuro, S. Kataoka, T. Sasaki and Y. Koike, SID '97 Digest of Technical Papers, 28, 845 (1997)に報告されており、IPSモードで表示する液

晶表示素子の構造は、国際公開91／10936号パンフレット(ファミリー:US5576867)に報告されている。

[0177] 〔実施例〕

以下、本発明で得られる液晶組成物を実施例により詳細に説明する。本発明は下記の実施例によって限定されない。なお、実施例で用いる液晶性化合物は、下記表1の定義に基づいた記号により表す。なお、表1中、1，4－シクロヘキシレンの立体配置はトランス配置である。各化合物の割合(百分率)は、特に断りのない限り、液晶性化合物の全重量に基づいた重量百分率(重量%)である。以下の実施例は各成分を正確に重量を秤量し調合したものである。各実施例の最後に得られた液晶組成物の特性値を示す。

[0178] なお、各実施例で使用する液晶性化合物の部分に記載した番号は、上述した本発明の第一成分から第四成分に用いる液晶性化合物を示す式番号に対応をしており、式番号を記載せずに、単に「－」と記載をしている場合には、この化合物はこれら成分には対応をしていないその他の液晶性化合物であることを意味している。

[0179] 化合物の記号による表記方法を以下に示す。

[0180] [表1]

【表１】

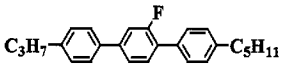
記号を用いた化合物の表記方法

R－（A_1）－Z_1－……－Z_n－（A_n）－X

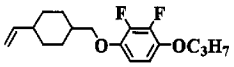
1）左末端基　R－	記号	3）結合基　－Z_n－	記号
C_nH_{2n+1}－	n－	－C_nH_{2n}－	n
$C_nH_{2n+1}O$－	nO－	－CH_2O－	1O
$C_nH_{2n+1}OC_mH_{2m}$－	nOm－	－OCH_2－	O1
CH_2＝CH－	V－	－CH＝CH－	V
CH_2＝CHC_nH_{2n}－	Vn－	－OCF_2－	OCF_2
		－$OCF_2C_nH_{2n}$－	OCF_2n
2）環構造　－A_n－	記号	4）右末端基　－X	記号
	H	－C_nH_{2n+1}	－n
	B(2F)	－OC_nH_{2n+1}	－On
	B(3F)	－CH＝CH_2	－V
	B(2F,3F)	－C_nH_{2n}CH＝CH_2	－nV
	B(2F,3Cl)		
	B(2Cl,3F)		
	B(3F,6F)		

5）表記例

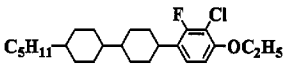
例1　3－BB（3F）B－5



例2　V－H1OB（2F，3F）－O3



例3　5－HHB（2F，3Cl）O2



[0181]　特性値の測定は以下の方法にしたがって行った。これら測定方法の多くは、日本電子機械工業会規格（Standard of Electric Industries Association of Japan）EIAJ・ED－2521Aに記載された方法、またはこれを修飾した方法である。

[0182]　（1）ネマチック相の上限温度（NI；℃）

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℃／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。以下、ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。

[0183]　（2）ネマチック相の下限温度（Tc；℃）

ネマチック相を有する試料を0℃、－10℃、－20℃、－30℃、および－40℃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℃ではネマチック相のままであり、－30℃では結晶またはスメクチック相に変化したとき、Tcを≦－20℃と記載した。以下、ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

[0184] (3)光学異方性(Δn;25℃で測定)

波長が589nmである光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッベ屈折計により測定した。まず、主プリズムの表面を一方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。そして、偏光の方向がラビングの方向と平行であるときの屈折率(n∥)、および偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときの屈折率(n⊥)を測定した。光学異方性の値(Δn)は、

(Δn)＝(n∥)－(n⊥)

の式から算出した。

[0185] (4)粘度(η;20℃で測定;mPa・s)

測定にはE型粘度計を用いた。

[0186] (5)誘電率異方性(Δε;25℃で測定)

よく洗浄したガラス基板にオクタデシルトリエトキシシラン(0.16ml)のエタノール(20ml)溶液を塗布した。ガラス基板をスピンナーで回転させたあと、150℃で1時間加熱した。2枚のガラス基板から、間隔(セルギャップ)が20μmであるVA素子を組み立てた。

[0187] 同様の方法で、ガラス基板にポリイミドの配向膜を調製した。得られたガラス基板の配向膜にラビング処理をした後、2枚のガラス基板の間隔が9μmであり、ツイスト角が80度であるTN素子を組み立てた。

[0188] 得られたVA素子に試料(液晶組成物)を入れ、0.5ボルト(1kHz、サイン波)の電圧を印加して、液晶分子の長軸方向における誘電率(ε∥)を測定した。

[0189] また、得られたTN素子に試料(液晶組成物)を入れ、0.5ボルト(1kHz、サイン波)の電圧を印加して、液晶分子の短軸方向における誘電率(ε⊥)を測定した。

[0190] 誘電率異方性の値は、

(Δε)＝(ε∥)－(ε⊥)

の式から算出した。

[0191] この値が負である組成物が、負の誘電率異方性を有する組成物である。

[0192] (6)電圧保持率(VHR;25℃と100℃で測定;%)

ポリイミド配向膜を有し、2枚のガラス基板の間隔(セルギャップ)が6μmであるセルに試料を入れてTN素子を作製した。25℃において、このTN素子にパルス電圧(5ボルトで60マイクロ秒)を印加して充電した。TN素子に印加した電圧の波形を陰極線オシロスコープで観測し、単位周期(16.7ミリ秒)における電圧曲線と横軸との間の面積を求めた。TN素子を取り除いたあと印加した電圧の波形から同様にして面積を求めた。電圧保持率(%)の値は、

(電圧保持率)=(TN素子がある場合の面積値)/(TN素子がない場合の面積値)×100

の式から算出した。

[0193] このようにして得られた電圧保持率を「VHR-1」として示した。つぎに、このTN素子を100℃、250時間加熱した。このTN素子を25℃に戻したあと、上述した方法と同様の方法により電圧保持率を測定した。この加熱試験をした後に得た電圧保持率を「VHR-2」として示した。なお、この加熱テストは促進試験であり、TN素子の長時間耐久試験に対応する試験である。

[0194] (7)比抵抗(ρ;25℃で測定;Ωcm)

液体セルに液晶1.0mLを注入し、10Vの直流電圧をかけた。電圧印加後10秒後のセルの直流電流を測定し、比抵抗を算出した。

[0195] 比抵抗ρは、

(比抵抗) = {(電圧)×(セル容量)}/{(直流電流)×(真空の誘電率)}

の式から算出した。

[0196] (8)ガスクロ分析

測定装置は、島津製作所製のGC-14B型ガスクロマトグラフ、またはその同等の測定機器を用いた。カラムは、島津製作所製のキャピラリーカラムCBP1-M25-025(長さ25m、内径0.22mm、膜厚0.25μm;固定液相はジメチルポリシロキサン;無極性)を用いた。キャリアーガスとしてはヘリウムを用い、流量は2ml/分に調整し

た。このカラムは、200℃で2分間保持した後、5℃／分の割合で280℃まで昇温した。試料気化室の温度を280℃、検出器(FID)部分の温度を300℃に設定した。

[0197] 試料はアセトンに溶解して、0．1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。

[0198] 記録計としては島津製作所製のC－R5A型Chromatopac、またはその同等品を用いた。得られたガスクロマトグラムには、成分化合物に対応するピークの保持時間およびピークの面積値が示されている。

[0199] なお、試料の希釈溶媒としては、例えば、クロロホルム、ヘキサンを用いてもよい。また、カラムとしては、Agilent Technologies Inc.製のキャピラリーカラムDB－1(長さ30m、内径0．32mm、膜厚0．25μm)、Agilent Technologies Inc.製のHP－1(長さ30m、内径0．32mm、膜厚0．25μm)、Restek Corporation製のRtx－1(長さ30m、内径0．32mm、膜厚0．25μm)、SGE International Pty.Ltd製のBP－1(長さ30m、内径0．32mm、膜厚0．25μm)などを用いてもよい。化合物ピークの重なりを防ぐ目的で島津製作所製のキャピラリーカラムCBP1－M50－025(長さ50m、内径0．25mm、膜厚0．25μm)を用いてもよい。

[0200] ガスクロマトグラムにおけるピークの面積比は成分化合物の割合に相当する。一般には、試料の成分化合物の重量%は、試料の各ピークの面積%とは完全に同一ではないが、本発明において、上述のカラムを用いる場合には、実質的に補正係数は1であるので、試料中の成分化合物の重量%は、試料中の各ピークの面積%とほぼ対応する。各成分の液晶性化合物における補正係数に大きな差異がないからである。ガスクロクロマトグラムにより液晶組成物中の液晶化合物の組成比をより正確に求めるには、ガスクロマトグラムによる内部標準法を用いる。一定量正確に秤量された各液晶化合物成分(被検成分)と基準となる液晶化合物(基準物質)を同時にガスクロ測定して、得られた被検成分のピークと基準物質のピークとの面積比の相対強度をあらかじめ算出する。基準物質に対する各成分のピーク面積の相対強度を用いて補正すると、液晶組成物中の液晶化合物の組成比をガスクロ分析からより正確に求めることができる。

[0201] 〔比較例1〕

以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。この比較例1の組成物は、本発明の第二成分および第三成分を含有する。後述する実施例に記載されるように、本発明の第一成分、第二成分等を含有する液晶組成物は、この比較例1の組成物よりもΔnが大きい。

3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%
5－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%
3－HBB(2Cl, 3F)－O4	(2－2－2－1－2)	6%
3－HH－4	(3－1)	10%
3－HB－O2	(3－2)	6%
V－HHB－1	(3－4)	8%
V2－HHB－1	(3－4)	8%

NI＝81. 9℃; Tc≦－20℃; Δn＝0. 110; Δε＝－3. 2;

VHR－1＝99. 2%.

〔比較例2〕

本発明の第三成分および第四成分を含有する以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。本発明の組成物は、この比較例2の組成物よりも、上限温度が高く、下限温度が低く、ネマチック相の温度範囲が広く、また、より大きなΔnを有する。

3－HH－4	(3－1)	7%
3－HH－5	(3－1)	7%
3－HB－O1	(3－2)	8%
5－HB－3	(3－2)	8%
3－HB(2F, 3F)－O2	(4－1)	14%
5－HB(2F, 3F)－O2	(4－1)	14%

3－HHB(2F, 3F)－O2	(4－2)	11%
5－HHB(2F, 3F)－O2	(4－2)	11%
2－HHB(2F, 3F)－1	(4－2)	10%
3－HHB(2F, 3F)－1	(4－2)	10%

NI＝68.9℃;Tc≦－10℃;Δn＝0.081;Δε＝－3.3;

VHR－1＝99.3%.

〔参考データ〕

特許文献5(特開2003－327965号公報)の比較例3に記載の組成物を以下に例示する。物性値は特許文献5に記載された数値である。なお特許文献5では合計100%と記載されているが、実際の組成物の合計は97%である。この特許文献5の比較例3の組成物は、本発明の第一成分および、第四成分を含有する。しかし、上記組成物の誘電率異方性Δεは－2.6であり、負に大きな値ではない。

3－BB(3F)B－2	(1－1)	11%
3－BB(2F, 3F)－O2	－	15%
3－BB(2F, 3F)－O4	－	18%
2－BB(2F, 3F)B－3	(4－4)	15%
4－HEB(2F, 3F)－O2	－	4%
3－BB(2F)B(2F)－Cl	－	10%
5－BB(2F)B(2F)－Cl	－	15%
3－HB(3F)BH－3	－	3%
5－HB(3F)BH－3	－	3%
5－HB(3F)BH－5	－	3%

NI＝87.6℃;Δn(20℃)＝0.2116;Δε＝－2.6;

この参考データと本発明の実施例とを比較すると、本発明の液晶組成物の方がΔεを負に大きくできることがわかる。また本発明の液晶組成物はいずれもネマチック相の下限温度が低く、実施例で具体的に開示した液晶組成物の多くは、ネマチック相の下限温度Tcは≦－20℃である。

[0202] 〔比較例3〕

本発明の第一成分および第四成分を含有する以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。この比較例3は、上記参考データの特許文献5（特開2003－327965号公報）の比較例3に類似の組成物である。本発明の組成物は、この比較例3の組成物よりも、下限温度が低く、ネマチック相の温度範囲が広く、また、より負に大きなΔεを有する。

3－BB(3F)B－2	(1－1)	11%
3－BB(2F, 3F)－O2	－	17%
3－BB(2F, 3F)－O1	－	16%
2－BB(2F, 3F)B－3	(4－4)	15%
5－HEB(2F, 3F)－O2	－	4%
5－BB(2F)B(2F)－Cl	－	25%
3－HB(3F)BH－3	－	4%
5－HB(3F)BH－3	－	4%
5－HB(3F)BH－5	－	4%

NI＝74.8℃;Tc≦－10℃;Δn＝0.194;Δε＝－2.3;

実施例1

[0203] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	10%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	5%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	15%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	5%
3－H2B(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－4)	10%
3－HH2B(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－5)	5%
5－HH2B(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－5)	5%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HBB(2F, 3Cl)－O4	(2－2－1－1－2)	6%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F, 3Cl)－O4	(2－2－1－1－2)	6%

3－HB－O2	(3－2)	10%
5－HB－O2	(3－2)	5%

NI＝82.5℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.135;Δε＝－3.2;

VHR－1＝99.3%.

比較例1と較べて、この実施例1の組成物はΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、ネマチック相の下限温度が≦－20℃と低く、大きな電圧保持率を有する。

実施例 2

[0204] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	10%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	5%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	5%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
5－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	7%
5－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	7%
5－HH－V	(3－1)	10%

NI＝100.2℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.143;Δε＝－3.3;

VHR－1＝99.2%.

比較例1と較べて、この実施例2の組成物は上限温度が高く、下限温度が≦－20℃であり、ネマチック相の温度範囲を広くすること、そしてΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、大きな電圧保持率を有する。

実施例 3

[0205] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	8%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
3－HB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－2)	5%
5－HB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－2)	5%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
4－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	6%
5－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	6%
5－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	6%

NI＝98. 4℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 137;Δε＝－4. 0;

比較例1と較べて、この実施例3の組成物は上限温度が高く、下限温度が≦－20℃であり、ネマチック相の温度範囲を広くすること、Δεを負に大きくすること、そしてΔnを大きくすることができた。

実施例 4

[0206] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	7%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	4%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	15%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	15%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	9%
5－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	9%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HH－4	(3－1)	10%

3－HH－5	(3－1)	6%
3－HH－V1	(3－1)	7%

NI＝78. 7℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 106;Δε＝－2. 9;

VHR－1＝99. 2%.

この組成物は、下限温度が≦－20℃と低く、また、大きな電圧保持率を有する。

実施例 5

[0207] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	9%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	5%
3－BB(3F)B－4	(1－1)	4%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	5%
5－BB(3F)B－2	(1－1)	4%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
3－HB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－2)	10%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
5－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	7%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%

NI＝93. 1℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 154;Δε＝－3. 3;

比較例1と較べて、この実施例5の組成物は上限温度が高く、下限温度が≦－20℃であり、ネマチック相の温度範囲を広くすること、そしてΔnを大きくすることができた。

実施例 6

[0208] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	10%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	6%

5－BB(3F)B－2	(1－1)	3%
3－BB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－1)	10%
5－BB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－1)	8%
3－HB(2F, 3Cl)－O4	(2－1－1－2)	8%
3－BB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－1)	10%
3－BBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－1)	2%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HBB(2F, 3Cl)－O4	(2－2－1－1－2)	5%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	6%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－BBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－1)	2%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%

NI＝85. 0℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 177;Δε＝－3. 4;

比較例1と較べて、この実施例6の組成物はかなりΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低い。

実施例 7

[0209] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	9%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
3－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
5－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
5－H1OB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
3－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
5－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HH2B(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－5)	5%
5－HH2B(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－5)	5%
3－HBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%
5－HB(2F)－O2	(3－6)	5%

3－HB(3F)－O2	(3－7)	5%
3－HB(2F)－O2	(3－8)	5%
3－HBB(2F)－O2	(3－12)	6%

NI＝78.1℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.137;Δε＝－3.5;

比較例1と較べて、この実施例7の組成物はΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低い。

実施例 8

[0210] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	9%
V－BB(3F)B－5	(1－1)	3%
3－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
5－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
3－HH1OB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－6)	8%
5－HH1OB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－6)	8%
3－HH1OB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－6)	8%
5－HH1OB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－6)	8%
3－HB(2F)－O2	(3－6)	8%
3－HB(3F)－O2	(3－7)	8%
3－HBB(2F)－O2	(3－12)	6%
3－HBB(3F)－O2	(3－13)	6%

NI＝83.7℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.111;Δε＝－4.6;

比較例1と較べて、この実施例8の組成物のΔnはほぼ同等ではあるが、Δεを負に大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低い。

実施例 9

[0211] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	9%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	6%

5－BB(3F)B－2	(1－1)	4%
3－BB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－1)	10%
5－BB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－1)	10%
3－BB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－1)	10%
5－BB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－1)	8%
3－BBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－1)	2%
3－BBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－1)	2%
2－BB(2F, 3Cl)B－3	(2－3－1－1)	3%
3－BB(2F, 3Cl)B－2	(2－3－1－1)	6%
3－BB(2Cl, 3F)B－O2	(2－3－2－1)	3%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	7%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	6%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%

NI＝74. 1℃; Tc≦－20℃; Δn＝0. 188; Δε＝－3. 0;

比較例1と較べて、この実施例9の組成物はかなりΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低い。

実施例 10

[0212] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	8%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%
5－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%
3－HBB(2Cl, 3F)－O4	(2－2－2－1－2)	6%
3－HH－4	(3－1)	10%
3－HB－O2	(3－2)	6%

V－HHB－1 (3－4) 8%

NI＝79. 1℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 123;Δε＝－3. 2;

VHR－1＝99. 2%.

比較例1と較べて、この実施例10の組成物はΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低く、大きな電圧保持率を有する。

実施例 11

[0213] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	9%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HBB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－1－2)	7%
3－HBB(2F)－O2	(3－12)	6%
3－BOCF$_2$B(2F, 3F)－O2	－	7%
3－BOCF$_2$2B(2F, 3F)－O2	－	7%
3－HBOCF$_2$B(2F, 3F)－O2	－	4%
3－HBOCF$_2$2B(2F, 3F)－O2	－	4%

NI＝89. 0℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 153;Δε＝－3. 3;

比較例1と較べて、この実施例11の組成物は上限温度が高く、下限温度が≦－20℃であり、ネマチック相の温度範囲を広くすること、そしてΔnを大きくすることができた。

実施例 12

[0214] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	10%

2－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
3－BB(3F)B－4	(1－1)	4%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	6%
5－BB(3F)B－2	(1－1)	5%
5－BB(3F)B－2V	(1－1)	4%
3－BB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－1)	12%
5－BB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－1)	10%
3－BB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－1)	12%
3－BBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－1)	2%
5－BBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－1)	2%
3－BBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－1)	2%
5－BBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－1)	2%
2－BB(2F,3Cl)B－3	(2－3－1－1)	4%
3－BB(2F,3Cl)B－2	(2－3－1－1)	5%
3－BB(2Cl,3F)B－O2	(2－3－2－1)	3%
3－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	6%
3－HBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－2)	5%

NI＝75. 8℃; Δn＝0. 200; Δε＝－2. 7;

比較例1と較べて、この実施例12の組成物はかなりΔnを大きくすることができた。

実施例 13

[0215] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	2%
3－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
5－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	12%
3－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－2)	9%
5－HBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－2)	9%

3－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
5－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HH－V1	(3－1)	10%
3－HB－O2	(3－2)	6%
V－HHB－1	(3－4)	6%

NI＝87.8℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.115;Δε＝－3.8;

VHR－1＝99.2%.

比較例1と較べて、この実施例13の組成物は上限温度が高く、下限温度が≦－20℃であり、ネマチック相の温度範囲を広くすること、Δεを負に大きくすること、そしてΔnを大きくすることができた。

実施例 14

[0216] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	6%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	4%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	4%
3－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
5－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
3－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
5－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HH－4	(3－1)	4%
3－HHB－O1	(3－4)	4%
3－HB(2F,3F)－O2	(4－1)	10%
3－HHB(2F,3F)－O2	(4－2)	6%
3－HBB(2F,3F)－O2	(4－3)	8%

NI＝101.7℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.137;Δε＝－3.6;

比較例1と較べて、この実施例14の組成物は上限温度が高く、下限温度が≦－20

℃であり、ネマチック相の温度範囲を広くすること、Δεを負に大きくすること、そしてΔnを大きくすることができた。

実施例 15

[0217] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	6%
3－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
5－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
3－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HBB(2F,3Cl)－O4	(2－2－1－1－2)	6%
5－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－2)	9%
5－HBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－2)	9%
3－BB－1	(3－3)	2%
3－HB(3F)－O2	(3－7)	7%
3－BB(3F)－O2	(3－9)	7%
3－HHB(2F)－O2	(3－10)	5%
3－HHB(3F)－O2	(3－11)	5%

NI＝75.1℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.133;Δε＝－3.7;

比較例1と較べて、この実施例15の組成物はΔεを負に大きくすること、そしてΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低い。

実施例 16

[0218] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	6%
5－BB(3F)B－O2	(1－2)	5%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
5－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	14%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
5－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%

3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HH－4	(3－1)	10%
3－HB－O2	(3－2)	6%
3－HBB－O1	(3－5)	3%
3－HBB－2	(3－5)	2%
3－BB(2F, 3F)B－2	(4－4)	3%
3－BB(2F, 3F)B－3	(4－4)	3%

NI＝75. 2℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 125;Δε＝－3. 2;

VHR－1＝99. 2%.

比較例1と較べて、この実施例16の組成物はΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低く、大きな電圧保持率を有する。

実施例 17

[0219] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	8%
2－BBB(2F)－3	(1－2)	4%
2－BBB(2F)－5	(1－2)	3%
2－BB(3F,6F)B－2	(1－3)	3%
3－BB(3F,6F)B－3	(1－3)	3%
3－BB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－1)	10%
3－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
5－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
3－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
5－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	8%
3－HBB(2Cl,3F)－O2	(2－2－2－1－2)	8%
3－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	5%
5－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	5%
3－HH－4	(3－1)	10%

3－HB－O2 (3－2) 5%

NI＝81. 8℃; Tc≦－20℃; Δn＝0. 141; Δε＝－3. 1;

比較例1と較べて、この実施例17の組成物はΔnを大きくすることができた。またこの組成物は、下限温度が≦－20℃と低い。

実施例 18

[0220] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	6%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	4%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	16%
3－HB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－2)	16%
2－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	5%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
5－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	7%
3－HHB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－4)	8%
5－HH－V	(3－1)	20%
3－HH－V1	(3－1)	10%

NI＝76. 1℃; Tc≦－20℃; Δn＝0. 094; Δε＝－2. 6;

VHR－1＝99. 2%.

実施例 19

[0221] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	5%
3－HB(2F, 3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
3－HB(2Cl, 3F)－O2	(2－1－2－2)	10%
3－HBB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	5%
3－HHB(2F, 3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HHB(2Cl, 3F)－O2	(2－2－2－4)	8%
2－HH－5	(3－1)	5%
3－HH－4	(3－1)	10%

3－HH－5	(3－1)	4%
3－HB－O2	(3－2)	5%
3－HHB－1	(3－4)	3%
3－HB(2F, 3F)－O2	(4－1)	7%
5－HB(2F, 3F)－O2	(4－1)	7%
3－HHB(2F, 3F)－O2	(4－2)	5%
5－HHB(2F, 3F)－O2	(4－2)	4%
3－HBB(2F, 3F)－O2	(4－3)	4%

NI＝82. 1℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 096;Δε＝－3. 1;

VHR－1＝99. 3%.

実施例 20

[0222] 以下の組成物を調合し、上述した方法により各特性値を測定した。

2－BB(3F)B－3	(1－1)	6%
2－BB(3F)B－5	(1－1)	4%
3－BB(3F)B－5	(1－1)	4%
V2－BB(3F)B－5	(1－1)	4%
3－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
5－HB(2F,3Cl)－O2	(2－1－1－2)	10%
3－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
5－HHB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－4)	8%
3－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
5－HBB(2F,3Cl)－O2	(2－2－1－1－2)	9%
3－HH－4	(3－1)	4%
3－HB(2F,3F)－O2	(4－1)	10%
3－HHB(2F,3F)－O2	(4－2)	6%
3－HBB(2F,3F)－O2	(4－3)	8%

NI＝98. 9℃;Tc≦－20℃;Δn＝0. 144;Δε＝－3. 7;

比較例1と較べて、この実施例14の組成物は上限温度が高く、下限温度が≦－20

℃であり、ネマチック相の温度範囲を広くすること、Δεを負に大きくすること、そしてΔnを大きくすることができた。

実施例 21

[0223] 実施例1の組成物に酸化防止剤として120ppmの3,5－ジ－t－ブチル－4－ヒドロキシトルエンを添加した。得られた組成物の特性は次のとおりであった。

[0224] NI＝82.5℃;Tc≦－20℃;Δn＝0.135;Δε＝－3.2;

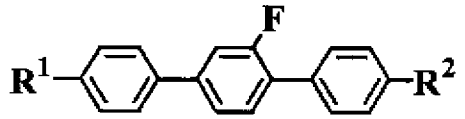
VHR－1＝99.3%.

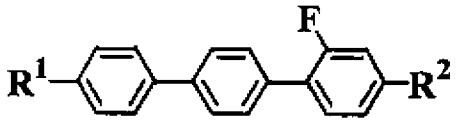
上記実施例で示されるように、本発明の液晶性化合物成分の組合せによって、液晶組成物のネマチック相の下限温度を低くすること、誘電率異方性が負に大きくすること、そして、特に光学異方性を大きくすることができた。

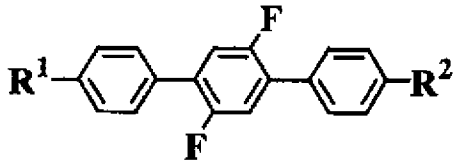
請求の範囲

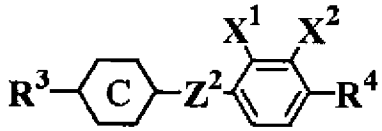
[1] 下記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、下記式(2－1)～式(2－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

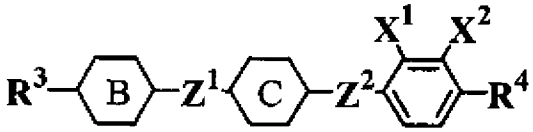
[化1]

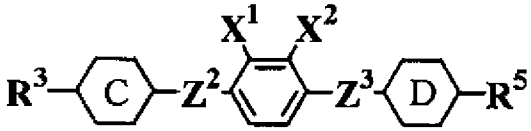

(1-1)


(1-2)


(1-3)


(2-1)


(2-2)


(2-3)

(式(1－1)～式(1－3)および式(2－1)～式(2－3)において、

R^1およびR^3は独立して、アルキル、またはアルケニルであり;

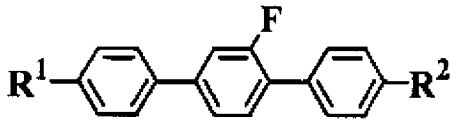
R^2、R^4およびR^5は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシであり;

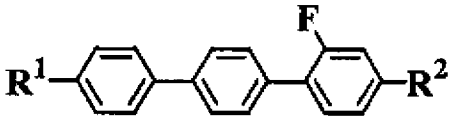
環B、環C、および環Dは独立して、1，4－シクロヘキシレン、1，4－フェニレン、2－フルオロ－1，4－フェニレン、または3－フルオロ－1，4－フェニレンであり;Z^1、Z^2お

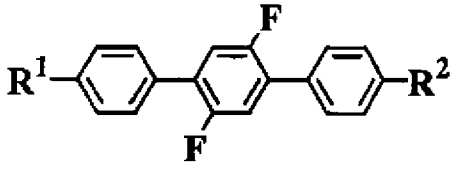
よびZ^3は独立して、単結合、－$(CH_2)_2$－、－CH_2O－、または－OCH_2－であり；X^1およびX^2は、一方がフッ素であり他方は塩素である。）

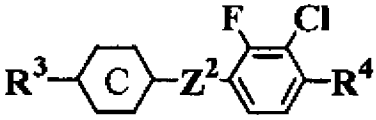
[2] 下記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、下記式（2－1－1）、式（2－1－2）、式（2－2－1）、式（2－2－2）、式（2－3－1）、および式（2－3－2）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

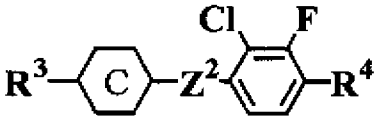
[化2]

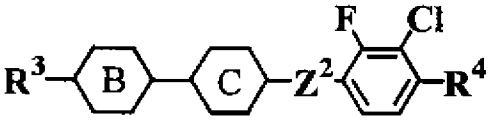

(1-1)

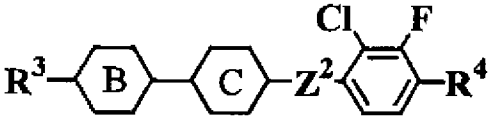

(1-2)

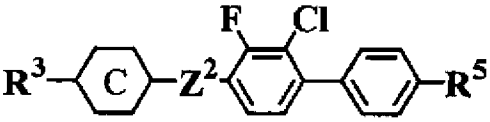

(1-3)

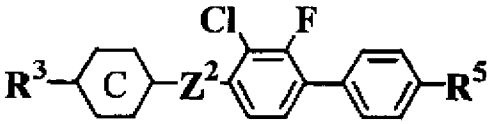

(2-1-1)


(2-1-2)


(2-2-1)


(2-2-2)


(2-3-1)


(2-3-2)

(式(1－1)～式(1－3)および式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)において、

R^1およびR^3は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

R^2、R^4、およびR^5は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシであり;

環Bおよび環Cは独立して、1，4－シクロヘキシレンまたは1，4－フェニレンであり;

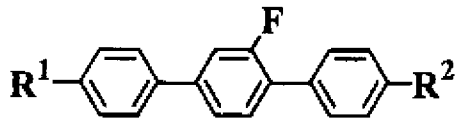
Z^2は独立して、単結合、－$(CH_2)_2$－、－OCH_2－、または－CH_2O－である。）

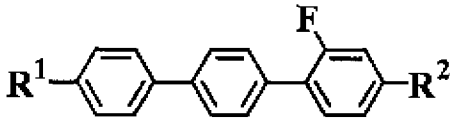
[3] 第一成分が上記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第二成分が、上記式（2－1－1）および式（2－1－2）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物と、上記式（2－2－1）、式（2－2－2）、式（2－3－1）、および式（2－3－2）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物との混合物である請求項2に記載の液晶組成物。

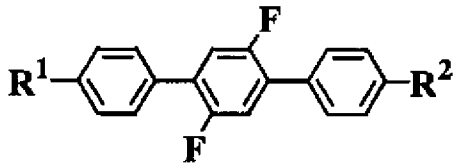
[4] 上記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式（2－1－1）、式（2－1－2）、式（2－2－1）、式（2－2－2）、式（2－3－1）、および式（2－3－2）で表され、Z^2が単結合である化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する、請求項2または3に記載の液晶組成物。

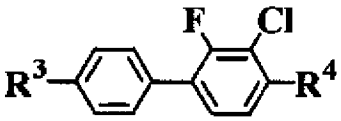
[5] 下記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、下記式（2－1－1－1）、式（2－1－2－1）、式（2－2－1－1）、式（2－2－2－1）、式（2－3－1－1）、および式（2－3－2－1）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分とを含有する、負の誘電率異方性を有する液晶組成物。

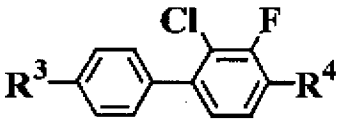
[化3]

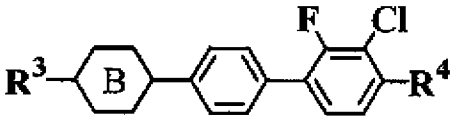

(1-1)

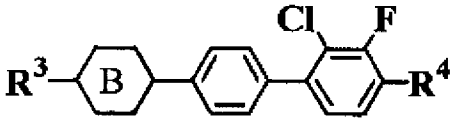

(1-2)

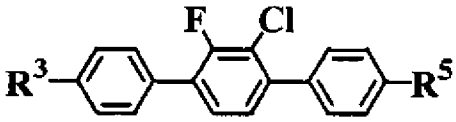

(1-3)

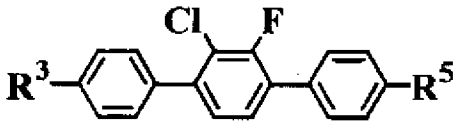

(2-1-1-1)


(2-1-2-1)


(2-2-1-1)


(2-2-2-1)


(2-3-1-1)


(2-3-2-1)

(式(2－1－1－1)、式(2－1－2－1)、式(2－2－1－1)、式(2－2－2－1)、式(2－3－1－1)、および式(2－3－2－1)において、

R^1およびR^3は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

R^2、R^4、およびR^5は独立して、アルキル、アルケニル、またはアルコキシであり;

環Bは独立して、1，4－シクロヘキシレンまたは1，4－フェニレンである。)

[6] 第一成分が上記式(1－1)および式(1－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である請求項1～5のいずれか1項に記載の液晶組成物。

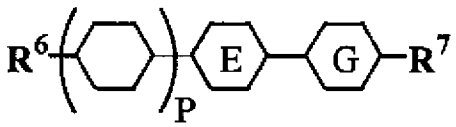
[7] 第一成分が上記式(1－1)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である請求項1～5のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[8] 液晶性化合物の全重量に基づいて、上記第一成分の含有割合が5～40重量%の範囲であり、上記第二成分の含有割合が60～95重量%の範囲である請求項1～7のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[9] 液晶性化合物成分が、上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分だけからなる、請求項2に記載の液晶組成物。

[10] 上記第一成分および第二成分に加えて、下記式(3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第三成分を含有する、請求項1～7のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[化4]



(3)

(式(3)において、

R^6は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

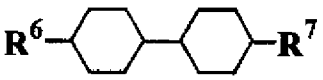
R^7は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシであり;

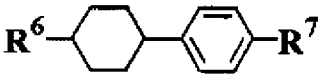
環Eおよび環Gは独立して、1，4－シクロヘキシレン、1，4－フェニレン、2－フルオロ－1，4－フェニレン、または3－フルオロ－1，4－フェニレンであり;

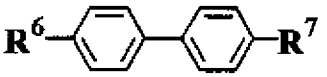
Pは0または1である。)

[11] 上記第三成分が、下記式(3－1)～式(3－13)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である請求項10に記載の液晶組成物。

[化5]

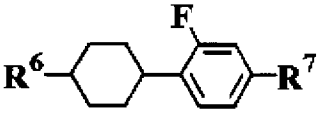

(3-1)

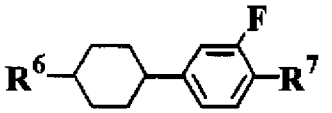

(3-2)

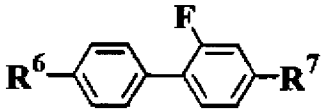

(3-3)

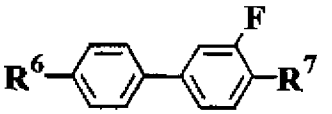

(3-4)

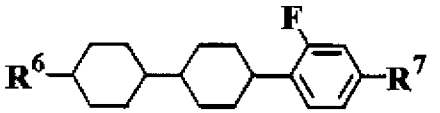

(3-5)

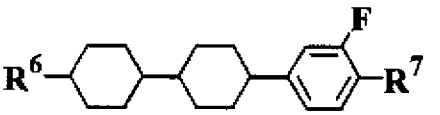

(3-6)

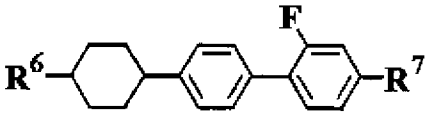

(3-7)

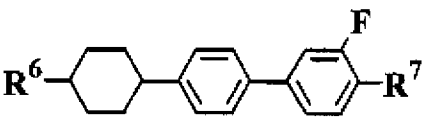

(3-8)


(3-9)


(3-10)


(3-11)


(3-12)


(3-13)

(式(3－1)～式(3－13)において、

R^6は独立して、アルキルまたはアルケニルであり;

R^7は独立して、アルキル、アルケニルまたはアルコキシである。）

[12] 液晶性化合物成分が、上記式（1－1）～式（1－3）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第一成分と、上記式（2－1－1）、式（2－1－2）、式（2－2－1）、式（2－2－2）、式（2－3－1）、および式（2－3－2）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第二成分と、上記式（3－1）～式（3－13）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第三成分だけからなる請求項11に記載の液晶組成物。

[13] 上記第三成分が、上記式（3－1）～式（3－5）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である請求項11または12に記載の液晶組成物。

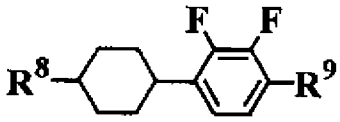
[14] 上記第三成分が、上記式（3－6）～式（3－13）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である請求項11または12に記載の液晶組成物。

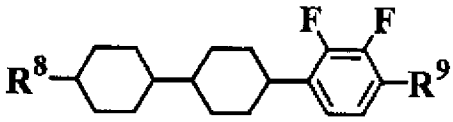
[15] 液晶性化合物の全重量に基づいて、上記第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲であり、上記第二成分の含有割合が40～90重量%での範囲あり、上記第三成分の含有割合が3～38重量%の範囲である、請求項10～14のいずれか1項に記載の液晶組成物。

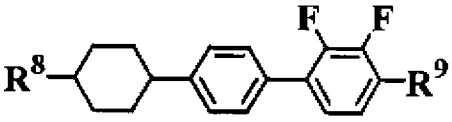
[16] 上記第一成分、第二成分および第三成分に加えて、

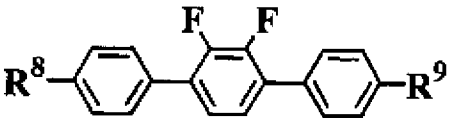
下記式（4－1）～式（4－4）で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である第四成分を含有する、請求項10、11、13、および14のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[化6]


(4-1)


(4-2)


(4-3)


(4-4)

(式(4－1)～式(4－4)において、

R^8は独立して、アルキルであり;

R^9は独立して、アルキルまたはアルコキシである。)

[17] 第一成分が上記式(1－1)～式(1－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第二成分が上記式(2－1－1)、式(2－1－2)、式(2－2－1)、式(2－2－2)、式(2－3－1)、および式(2－3－2)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第三成分が上記式(3－1)～式(3－5)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物であり、第四成分が上記式(4－1)～式(4－3)で表される化合物群から選択される少なくとも1つの化合物である、請求項16に記載の液晶組成物。

[18] 液晶性化合物の全重量に基づいて、上記第一成分の含有割合が2～30重量%の範囲であり、上記第二成分の含有割合が10～85重量%の範囲であり、上記第三成分の含有割合が3～38重量%の範囲であり、上記第四成分の含有割合が5～50重量%の範囲である、請求項16または17のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[19] 上記液晶組成物の光学異方性の値が0．10～0．20の範囲である請求項1～18のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[20] 上記液晶組成物の誘電率異方性の値が－5．0～－2．0の範囲である請求項1～19のいずれか1項に記載の液晶組成物。

[21] 請求項1～20のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

[22] 上記液晶表示素子の動作モードが、VAモードまたはIPSモードであり、上記液晶素子の駆動方式がアクティブマトリックス方式である、請求項21に記載の液晶表示素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2007/054196

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C09K19/44(2006.01)i, *C09K19/12*(2006.01)i, *C09K19/14*(2006.01)i, *C09K19/20*(2006.01)i, *C09K19/30*(2006.01)i, *G02F1/13*(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C09K19/44, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/20, C09K19/30, G02F1/13

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2007
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2007 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2007

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P,A	WO 2006/093189 A1 (Chisso Corp.), 08 September, 2006 (08.09.06), Claims 1 to 22 & US 2006/0198968 A1	1-22
P,A	WO 2006/098289 A1 (Chisso Corp.), 21 September, 2006 (21.09.06), Claims 1 to 19 & US 2006/0210725 A1	1-22
A	WO 1998/023561 A1 (Chisso Corp.), 04 June, 1998 (04.06.98), Composition examples 12 to 14; examples 20 to 22 & EP 0959060 A1 & US 6329027 B1 & JP 10-524525 A	1-22

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

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
13 April, 2007 (13.04.07)	24 April, 2007 (24.04.07)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2007/054196

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	DE 4219819 A1 (Merck Patent GmbH), 23 December, 1993 (23.12.93), Full text (Family: none)	1-22
A	WO 2005/007775 A1 (MERCK PATENT GMBH), 27 January, 2005 (27.01.05), Full text & EP 1646703 A1	1-22
A	JP 2003-327965 A (Merck Patent GmbH), 19 November, 2003 (19.11.03), Full text & EP 1352943 A1 & US 2003/0222245 A1	1-22
A	GB 2258232 A1 (Merck Patent GmbH), 03 February, 1993 (03.02.93), Full text (Family: none)	1-22
A	JP 4-312547 A (Seiko Epson Corp.), 04 November, 1992 (04.11.92), Full text (Family: none)	1-22
A	JP 4-257535 A (Seiko Epson Corp.), 11 September, 1992 (11.09.92), Full text (Family: none)	1-22

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２００７／０５４１９６

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C09K19/44(2006.01)i, C09K19/12(2006.01)i, C09K19/14(2006.01)i, C09K19/20(2006.01)i, C09K19/30(2006.01)i, G02F1/13(2006.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C09K19/44, C09K19/12, C09K19/14, C09K19/20, C09K19/30, G02F1/13

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２００７年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２００７年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２００７年

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

CAplus(STN)
REGISTRY(STN)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求の範囲の番号
P,A	WO 2006/093189 A1（チッソ株式会社）2006.09.08, 請求項１－２２ & US 2006/0198968 A1	1-22
P,A	WO 2006/098289 A1（チッソ株式会社）2006.09.21, 請求項１－１９ & US 2006/0210725 A1	1-22
A	WO 1998/023561 A1（チッソ株式会社）1998.06.04, 組成物例１２－１４、実施例２０－２２ & EP 0959060 A1 & US 6329027 B1 & JP 10-524525 A	1-22

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。　　☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊　引用文献のカテゴリー
「Ａ」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「Ｅ」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「Ｌ」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「Ｏ」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「Ｐ」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
「Ｔ」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「Ｘ」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Ｙ」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「＆」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日 １３．０４．２００７	国際調査報告の発送日 ２４．０４．２００７
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ） 郵便番号１００－８９１５ 東京都千代田区霞が関三丁目４番３号	特許庁審査官（権限のある職員）　４Ｖ　３４４４ 滝口　尚良 電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３４８３

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求の範囲の番号
A	DE 4219819 A1 (Merck Patent GmbH) 1993.12.23, 全文 （ファミリーなし）	1-22
A	WO 2005/007775 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2005.01.27, 全文 & EP 1646703 A1	1-22
A	JP 2003-327965 A（メルク　パテント　ゲゼルシャフト　ミット　ベシュレンクテル　ハフトング）2003.11.19, 全文 & EP 1352943 A1 & US 2003/0222245 A1	1-22
A	GB 2258232 A1 (Merck Patent GmbH) 1993.02.03, 全文 （ファミリーなし）	1-22
A	JP 4-312547 A（セイコーエプソン株式会社）1992.11.04, 全文 （ファミリーなし）	1-22
A	JP 4-257535 A（セイコーエプソン株式会社）1992.09.11, 全文 （ファミリーなし）	1-22